



(19)대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(51) 。 Int. Cl. (11) 공개번호 10-2006-0121243
C09K 11/06 (2006.01) (43) 공개일자 2006년11월28일

(21) 출원번호	10-2006-7012626	(87) 국제공개번호	WO 2005/063920
(22) 출원일자	2006년06월23일	(43) 공개일자	2006년11월28일
심사청구일자	없음		
번역문 제출일자	2006년06월23일		
(86) 국제출원번호	PCT/JP2004/019727	(87) 국제공개번호	WO 2005/063920
국제출원일자	2004년12월24일	국제공개일자	2005년07월14일

(30) 우선권주장 JP-P-2003-00432759 2003년12월26일 일본(JP)

(71) 출원인 이데미쓰 고산 가부시키가이샤
일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 3초메 1반 1고

(72) 발명자 이와쿠마 도시히로
일본 299-0205 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치
가와무라 히사유키
일본 299-0205 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치
이케다 히데즈구
일본 299-0205 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치
호소카와 지시오
일본 299-0205 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치
아라카네 다카시
일본 299-0205 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치
나카무라 히로아키
일본 299-0205 지바켄 소데가우라시 가미이즈미 1280반치

(74) 대리인 김창세

전체 청구항 수 : 총 11 항

(54) 유기 전기 발광 소자용 재료 및 이를 이용한 유기 전기발광 소자

(57) 요약

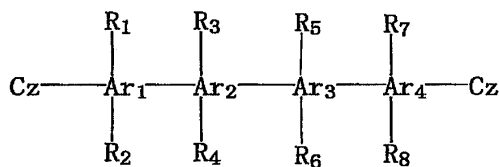
본 발명은 특정 구조의 화합물로 이루어지는 유기 전기 발광 소자용 재료, 및 음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 갖는 일층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층이 형성되어 있는 유기 전기 발광 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 한 층이 상기 유기 전기 발광 소자용 재료를 함유하는 유기 전기 발광 소자에 관한 것으로, 발광 효율이 높고 화소 결함이 없고 내열성이 우수하며 수명이 긴 유기 전기 발광 소자를 제공할 수 있는 유기 전기 발광 소자용 재료 및 이를 이용한 유기 전기 발광 소자를 제공한다.

특허청구의 범위

청구항 1.

하기 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 전기 발광 소자용 재료.

화학식 1

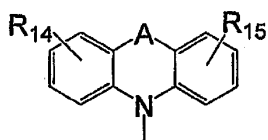


상기 식에서,

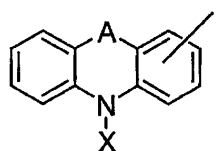
Ar₁ 내지 Ar₄는 각각 벤젠 잔기를 나타내고,

Cz는 하기 화학식 2a 또는 2b로 표시되는 기이고,

화학식 2a



화학식 2b



[상기 식에서,

A는 단일 결합, $-(\text{CR}_9\text{R}_{10})_n-$, $-(\text{SiR}_{11}\text{R}_{12})_n-$, $-\text{NR}_{13}-$, $-\text{O}-$ 또는 $-\text{S}-$ 를 나타내고,

n은 1 내지 3의 정수를 나타내고,

R₉ 내지 R₁₅는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬아미노기를 나타내며, R₉와 R₁₀, 또는 R₁₁과 R₁₂는 서로 결합하여 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성할 수 있고,

X는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 방향족 헤테로환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬아미노기를 나타낸다]

R_1 내지 R_8 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 방향족 헤테로환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬아미노기, 또는 Cz기이며, 인접한 탄소원자에 결합한 경우는 서로 결합하여 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성할 수 있고,

단, Ar_1 내지 Ar_4 중 적어도 하나는 m-페닐렌 또는 o-페닐렌이거나, Ar_1 내지 Ar_4 모두가 p-페닐렌인 경우 R_1 내지 R_8 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 또는 상기 Cz기이다.

청구항 2.

제 1 항에 있어서,

화학식 1에서 Ar_2 및 Ar_3 은 각각 독립적으로 m-페닐렌 또는 o-페닐렌이고, Ar_1 및 Ar_4 는 p-페닐렌인 유기 전기 발광 소자용 재료.

청구항 3.

제 1 항에 있어서,

화학식 1에서 Ar_1 및 Ar_4 는 각각 독립적으로 m-페닐렌 또는 o-페닐렌이고, Ar_2 및 Ar_3 은 p-페닐렌인 유기 전기 발광 소자용 재료.

청구항 4.

제 1 항에 있어서,

화학식 1에서 Ar_1 및 Ar_4 는 각각 독립적으로 m-페닐렌이고, R_1 또는 R_7 은 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 또는 Cz기인 유기 전기 발광 소자용 재료.

청구항 5.

제 1 항에 있어서,

화학식 1에서 Cz기가 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 또는 치환 또는 비치환된 9-페닐카바졸릴기인 유기 전기 발광 소자용 재료.

청구항 6.

제 1 항에 있어서,

화학식 1의 화합물이 유기 전기 발광 소자의 호스트 재료인 유기 전기 발광 소자용 재료.

청구항 7.

음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 갖는 일층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층이 헐지되어 있는 유기 전기 발광 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 한 층이 제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 기재된 유기 전기 발광 소자용 재료를 함유하는 유기 전기 발광 소자.

청구항 8.

제 7 항에 있어서,

상기 발광층이 상기 유기 전기 발광 소자용 재료를 호스트 재료로서 함유하는 유기 전기 발광 소자.

청구항 9.

제 8 항에 있어서,

상기 발광층이 호스트 재료와 인광 발광성의 금속 착체로 이루어지는 유기 전기 발광 소자.

청구항 10.

제 7 항에 있어서,

음극과 유기 박막층의 계면 영역에 환원성 도펀트가 첨가되어 있는 유기 전기 발광 소자.

청구항 11.

제 7 항에 있어서,

상기 발광층과 음극 사이에 전자 주입층을 갖고, 상기 전자 주입층이 질소함유 유도체를 주성분으로서 함유하는 유기 전기 발광 소자.

명세서

기술분야

본 발명은 유기 전기 발광 소자용 재료 및 이를 이용한 유기 전기 발광 소자(유기 EL 소자)에 관한 것이며, 특히 발광 효율이 높고 화소 결함이 없고 내열성이 우수하며 수명이 긴 유기 EL 소자용 재료 및 유기 EL 소자에 관한 것이다.

배경기술

유기 EL 소자는 전계를 인가함으로써 양극으로부터 주입된 정공과 음극으로부터 주입된 전자의 재결합에너지에 의해 형광성 물질이 발광하는 원리를 이용한 자발광 소자이다.

이스트만 코닥사의 탕(C.W. Tang) 등에 의해 적층형 소자에 의한 저전압 구동 유기 EL 소자(C.W. Tang, S.A. Vanslyke, Applied Physics Letters, 51권, 913페이지, 1987년 등)가 보고된 이래, 유기 재료를 구성 재료로 하는 유기 EL 소자에 관한 연구가 활발히 실시되고 있다.

탕 등은 트리스(8-하이드록시퀴놀린올알루미늄)을 발광층에 이용하고, 트라이페닐다이아민 유도체를 정공 수송층에 이용하고 있다.

적층 구조의 이점으로서, 발광층으로의 정공의 주입 효율을 높이는 것, 음극으로부터 주입된 전자를 블로킹하여 재결합에 의해 생성되는 여기자의 생성 효율을 높이는 것, 발광층내에서 생성된 여기자를 가두는 것 등을 들 수 있다.

이러한 예의 유기 EL 소자의 소자 구조로서는 정공 수송(주입)층 및 전자 수송 발광층의 2층형, 또는 정공 수송(주입)층, 발광층 및 전자 수송(주입)층의 3층형 등이 잘 알려져 있다.

이러한 적층형 구조 소자에는 주입된 정공과 전자의 재결합 효율을 높이기 위해 소자 구조나 형성 방법의 연구가 이루어지고 있다.

유기 EL 소자의 발광 재료로서는 트리스(8-퀴놀리놀레이토)알루미늄 착체 등의 킬레이트 착체, 쿠마린 유도체, 테트라페닐뷰타다이엔 유도체, 다이스타이릴아릴렌 유도체, 옥사디아아졸 유도체 등의 발광 재료가 알려져 있고, 이들로부터는 청색으로부터 적색까지의 가시 영역의 발광이 수득되는 것이 보고되며, 컬러 표시 소자의 실현이 기대되고 있다(예컨대, 특허문헌 1 및 특허문헌 2 참조).

또한, 최근 유기 EL 소자의 발광층에 형광 재료 이외에 인광 재료를 이용하는 것도 제안되고 있다(예컨대, 비특허문헌 1 및 비특허문헌 2 참조).

이와 같이 유기 EL 소자의 발광층에 있어서, 유기 인광 재료의 여기 상태의 1중항 상태와 3중항 상태를 이용함으로써 높은 발광 효율이 달성되고 있다.

유기 EL 소자 내에서 전자와 정공이 재결합할 때에는 스핀 다중도의 차이로 인해 1중항 여기자와 3중항 여기자가 1:3의 비율로 생성된다고 생각되므로, 인광성의 발광 재료를 이용하면 형광만을 사용한 소자의 3 내지 4배의 발광 효율이 달성된다고 생각된다.

이러한 유기 EL 소자에 있어서는, 3중항의 여기 상태 또는 3중항의 여기자가 소광되지 않도록 순차적으로 양극, 정공 수송층, 유기 발광층, 전자 수송층(정공 저지층), 전자 주입층 및 음극과 같이 층을 적층하는 구성이 사용되며, 유기 발광층에 호스트 화합물과 인광 발광성 화합물이 사용되어 왔다(예컨대, 특허문헌 3 및 특허문헌 4 참조).

이들 특허문헌에서는, 호스트 화합물로서 4,4-N,N-다이카바졸바이페닐이 사용되어 왔지만, 이 화합물은 유리전이온도가 110℃ 이하이고, 또한 대칭성이 지나치게 좋기 때문에 결정화되기 쉽고, 또 소자의 내열시험을 행한 경우 단락이나 화소 결함이 발생한다는 문제가 있었다.

또한, 증착시에는 이물질이나 전극의 돌기가 존재하는 개소 등에서 결정 성장이 일어나 내열 시험 전의 초기 상태보다 결함이 생겨, 경시적으로 증가하는 것도 발견되었다.

[특허문헌 1] 일본 특허공개 제1996-239655호 공보

[특허문헌 2] 일본 특허공개 제1995-138561호 공보

[특허문헌 3] 미국특허 제6,097,147호 명세서

[특허문헌 4] 국제공개 WO 01/41512호 공보

[비특허문헌 1] 오브라이언(D.F. O'Brien) 및 발도(M.A. Baldo) 등의 문헌 "Improved energy transfer in electrophosphorescent devices", Applied Physics letters, Vol. 74 No.3, pp442-444, January 18, 1999

[비특허문헌 2] 발도(M.A. Baldo) 등의 문헌 "Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence", Applied Physics letters, Vol.75 No.1, pp4-6, July 5, 1999

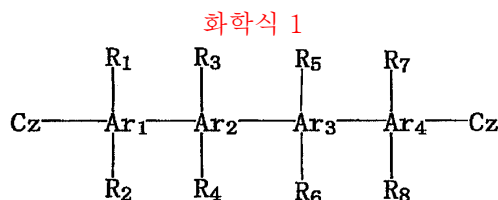
발명의 개시

본 발명은 상기 과제를 해결하기 위해 이루어진 것으로, 발광 효율이 높고 화소 결함이 없고 내열성이 우수하며 수명이 긴 유기 EL 소자용 재료 및 이를 이용한 유기 EL 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

본 발명자들은 상기 과제를 해결하기 위해 예의 검토한 결과, 분자량이 크고 대칭성이 낮은 화합물을 호스트 재료로서 이용함으로써 상기 목적을 달성하는 것을 발견하여, 본 발명을 해결하는데 이르렀다.

즉, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료를 제공하는 것이다.

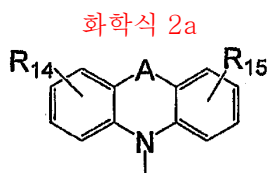
1. 하기 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료,



상기 식에서,

Ar₁ 내지 Ar₄는 각각 벤젠 잔기를 나타내고,

Cz는 하기 화학식 2a 또는 2b로 표시되는 기이고,



[상기 식에서,

A는 단일 결합, $-(CR_9R_{10})_n-$, $-(SiR_{11}R_{12})_n-$, $-NR_{13}-$, $-O-$ 또는 $-S-$ 를 나타내고,

n은 1 내지 3의 정수를 나타내고,

R₉ 내지 R₁₅는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬아미노기를 나타내며, R₉와 R₁₀, 또는 R₁₁과 R₁₂는 서로 결합하여 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성할 수 있고,

X는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 방향족 헤테로환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬아미노기를 나타낸다]

R_1 내지 R_8 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환 또는 비치환된 헥원자수 5 내지 40의 방향족 헤테로환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 헥탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬아미노기, 또는 Cz기이며, 인접한 탄소원자에 결합한 경우는 서로 결합하여 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성할 수 있고,

단, Ar_1 내지 Ar_4 중 적어도 하나는 m-페닐렌 또는 o-페닐렌이거나, Ar_1 내지 Ar_4 모두가 p-페닐렌인 경우 R_1 내지 R_8 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 헥탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 또는 상기 Cz기이다.

2. 화학식 1에 있어서, Ar_2 및 Ar_3 은 각각 독립적으로 m-페닐렌 또는 o-페닐렌이고, Ar_1 및 Ar_4 는 p-페닐렌인 상기 1에 기재된 유기 EL 소자용 재료,

3. 화학식 1에 있어서, Ar_1 및 Ar_4 는 각각 독립적으로 m-페닐렌 또는 o-페닐렌이고, Ar_2 및 Ar_3 은 p-페닐렌인 상기 1에 기재된 유기 EL 소자용 재료,

4. 화학식 1에 있어서, Ar_1 및 Ar_4 는 각각 독립적으로 m-페닐렌이고, R_1 또는 R_7 은 치환 또는 비치환된 헥탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 또는 Cz기인 상기 1에 기재된 유기 EL 소자용 재료,

5. 화학식 1에 있어서, Cz기가 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 또는 치환 또는 비치환된 9-페닐카바졸릴기인 상기 1에 기재된 유기 EL 소자용 재료,

6. 화학식 1의 화합물이 유기 EL 소자의 호스트 재료인 상기 1에 기재된 유기 EL 소자용 재료,

7. 음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 갖는 일층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층이 형성되어 있는 유기 EL 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 한 층이 상기 1 내지 6 중 어느 하나에 기재된 유기 EL 소자용 재료를 함유하는 유기 EL 소자,

8. 상기 발광층이 상기 유기 EL 소자용 재료를 호스트 재료로서 함유하는 상기 7에 기재된 유기 EL 소자,

9. 상기 발광층이 호스트 재료와 인광 발광성의 금속 착체로 이루어지는 상기 8에 기재된 유기 EL 소자,

10. 음극과 유기 박막층의 계면 영역에 환원성 도펀트가 첨가되어 있는 상기 7에 기재된 유기 EL 소자, 및

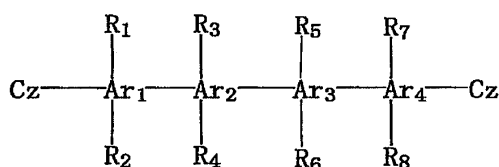
11. 상기 발광층과 음극 사이에 전자 주입층을 갖고, 상기 전자 주입층이 질소함유 유도체를 주성분으로서 함유하는 상기 7에 기재된 유기 EL 소자

를 제공하는 것이다.

발명의 상세한 설명

본 발명의 유기 EL 소자용 재료는 하기 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어진다.

화학식 1

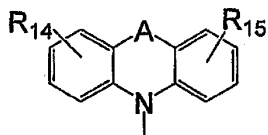


상기 식에서,

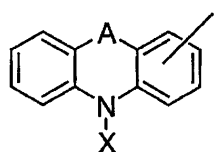
Ar₁ 내지 Ar₄는 각각 벤젠 잔기를 나타내고,

Cz는 하기 화학식 2a 또는 2b로 표시되는 기이고,

화학식 2a



화학식 2b



[상기 식에서,

A는 단일 결합, $-(CR_9R_{10})_n-$, $-(SiR_{11}R_{12})_n-$, $-NR_{13}-$, $-O-$ 또는 $-S-$ 를 나타내고,

n은 1 내지 3의 정수를 나타내고,

R₉ 내지 R₁₅는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬아미노기를 나타내며, R₉와 R₁₀, 또는 R₁₁과 R₁₂는 서로 결합하여 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성할 수 있고,

X는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 방향족 헤테로환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬아미노기를 나타낸다]

R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 방향족 헤테로환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 알켄일기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬아미노기, 또는 Cz기이며, 인접한 탄소원자에 결합한 경우는 서로 결합하여 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성할 수 있고,

단, Ar₁ 내지 Ar₄ 중 적어도 하나는 m-페닐렌 또는 o-페닐렌이거나, Ar₁ 내지 Ar₄ 모두가 p-페닐렌인 경우 R₁ 내지 R₈ 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 또는 상기 Cz기이다.

화학식 1에서의 R₁ 내지 R₈, 화학식 2a 및 2b에서의 R₉ 내지 R₁₅ 및 X의 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬기로서는, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기이다.

이 알킬기로서는, 예컨대 메틸기, 에틸기, 프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, n-노닐기, n-데실기, n-운데실기, n-도데실기, n-트라이데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, 네오펜틸기, 1-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 1-펜틸헥실기, 1-뷰틸펜틸기, 1-헵틸옥틸기, 3-메틸펜틸기, 하이드록시메틸기, 1-하이드록시에틸기, 2-하이드록시에틸기, 2-하이드록시아이소뷰틸기, 1,2-다이하이드록시에틸기, 1,3-다이하이드록시아이소프로필기, 2,3-다이하이드록시-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이하이드록시프로필기, 클로로메틸기, 1-클로로에틸기, 2-클로로에틸기, 2-클로로아이소뷰틸기, 1,2-다이클로로에틸기, 1,3-다이클로로아이소프로필기, 2,3-다이클로로-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모아이소뷰틸기, 1,2-다이브로모에틸기, 1,3-다이브로모아이소프로필기, 2,3-다이브로모-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이브로모프로필기, 아이오도메틸기, 1-아이오도에틸기, 2-아이오도에틸기, 2-아이오도아이소뷰틸기, 1,2-다이아이오도에틸기, 1,3-다이아이오도아이소프로필기, 2,3-다이아이오도-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이아이오도프로필기, 아미노메틸기, 1-아미노에틸기, 2-아미노에틸기, 2-아미노아이소뷰틸기, 1,2-다이아미노에틸기, 1,3-다이아미노아이소프로필기, 2,3-다이아미노-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이아미노프로필기, 사이아노메틸기, 1-사이아노에틸기, 2-사이아노에틸기, 2-사이아노아이소뷰틸기, 1,2-다이사이아노에틸기, 1,3-다이사이아노아이소프로필기, 2,3-다이사이아노-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이사이아노프로필기, 나이트로메틸기, 1-나이트로에틸기, 2-나이트로에틸기, 1,2-다이나이트로에틸기, 2,3-다이나이트로-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이나이트로프로필기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 사이클로옥틸기 및 3,5-테트라메틸사이클로헥실기 등을 들 수 있다.

그 중에서도, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, n-노닐기, n-데실기, n-운데실기, n-도데실기, n-트라이데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, 네오펜틸기, 1-메틸펜틸기, 1-펜틸헥실기, 1-뷰틸펜틸기, 1-헵틸옥틸기, 사이클로헥실기, 사이클로옥틸기 및 3,5-테트라메틸사이클로헥실기 등이 바람직하다.

화학식 1에 있어서의 R_1 내지 R_8 , 화학식 2a 및 2b에 있어서의 R_9 내지 R_{15} 및 X의 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로환기로서는, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 20의 헤테로환기이다.

이 헤테로환기로서는, 예컨대 1-피롤릴기, 2-피롤릴기, 3-피롤릴기, 피라진일기, 2-피리딘일, 1-이미다졸릴기, 2-이미다졸릴기, 1-피라졸릴기, 1-인돌리진일기, 2-인돌리진일기, 3-인돌리진일기, 5-인돌리진일기, 6-인돌리진일기, 7-인돌리진일기, 8-인돌리진일기, 2-이미다조피리딘일기, 3-이미다조피리딘일기, 5-이미다조피리딘일기, 6-이미다조피리딘일기, 7-이미다조피리딘일기, 8-이미다조피리딘일기, 3-피리딘일기, 4-피리딘일기, 1-인돌릴기, 2-인돌릴기, 3-인돌릴기, 4-인돌릴기, 5-인돌릴기, 6-인돌릴기, 7-인돌릴기, 1-아이소인돌릴기, 2-아이소인돌릴기, 3-아이소인돌릴기, 4-아이소인돌릴기, 5-아이소인돌릴기, 6-아이소인돌릴기, 7-아이소인돌릴기, 2-퓨릴기, 3-퓨릴기, 2-벤조퓨란일기, 3-벤조퓨란일기, 4-벤조퓨란일기, 5-벤조퓨란일기, 6-벤조퓨란일기, 7-벤조퓨란일기, 1-아이소벤조퓨란일기, 3-아이소벤조퓨란일기, 4-아이소벤조퓨란일기, 5-아이소벤조퓨란일기, 6-아이소벤조퓨란일기, 7-아이소벤조퓨란일기, 2-퀴놀릴기, 3-퀴놀릴기, 4-퀴놀릴기, 5-퀴놀릴기, 6-퀴놀릴기, 7-퀴놀릴기, 8-퀴놀릴기, 1-아이소퀴놀릴기, 3-아이소퀴놀릴기, 4-아이소퀴놀릴기, 5-아이소퀴놀릴기, 6-아이소퀴놀릴기, 7-아이소퀴놀릴기, 8-아이소퀴놀릴기, 2-퀴녹살린일기, 5-퀴녹살린일기, 6-퀴녹살린일기, 1-카바졸릴기, 2-카바졸릴기, 3-카바졸릴기, 4-카바졸릴기, 9-카바졸릴기, β -카보린-1-일, β -카보린-3-일, β -카보린-4-일, β -카보린-5-일, β -카보린-6-일, β -카보린-7-일, β -카보린-8-일, β -카보린-9-일, 1-페난트리딘일기, 2-페난트리딘일기, 3-페난트리딘일기, 4-페난트리딘일기, 6-페난트리딘일기, 7-페난트리딘일기, 8-페난트리딘일기, 9-페난트리딘일기, 10-페난트리딘일기, 1-아크리딘일기, 2-아크리딘일기, 3-아크리딘일기, 4-아크리딘일기, 9-아크리딘일기, 1,7-페난트롤린-2-일기, 1,7-페난트롤린-3-일기, 1,7-페난트롤린-4-일기, 1,7-페난트롤린-5-일기, 1,7-페난트롤린-6-일기, 1,7-페난트롤린-8-일기, 1,7-페난트롤린-9-일기, 1,7-페난트롤린-10-일기, 1,8-페난트롤린-2-일기, 1,8-페난트롤린-3-일기, 1,8-페난트롤린-4-일기, 1,8-페난트롤린-5-일기, 1,8-페난트롤린-6-일기, 1,8-페난트롤린-7-일기, 1,8-페난트롤린-9-일기, 1,8-페난트롤린-10-일기, 1,9-페난트롤린-2-일기, 1,9-페난트롤린-3-일기, 1,9-페난트롤린-4-일기, 1,9-페난트롤린-5-일기, 1,9-페난트롤린-6-일기, 1,9-페난트롤린-7-일기, 1,9-페난트롤린-8-일기, 1,9-페난트롤린-10-일기, 1,10-페난트롤린-2-일기, 1,10-페난트롤린-3-일기, 1,10-페난트롤린-4-일기, 1,10-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-1-일기, 2,9-페난트롤린-3-일기, 2,9-페난트롤린-4-일기, 2,9-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-6-일기, 2,9-페난트롤린-7-일기, 2,9-페난트롤린-8-일기, 2,9-페난트롤린-10-일기, 2,8-페난트롤린-1-일기, 2,8-페난트롤린-3-일기, 2,8-페난트롤린-4-일기, 2,8-페난트롤린-5-일기, 2,8-페난트롤린-6-일기, 2,8-페난트롤린-7-일기, 2,8-페난트롤린-9-일기, 2,8-페난트롤린-10-일기, 2,7-페난트롤린-1-일기, 2,7-페난트롤린-3-일기, 2,7-페난트롤린-4-일기, 2,7-페난트롤린-5-일기, 2,7-페난트롤린-6-일기, 2,7-페난트롤린-8-일기, 2,7-페난트롤린-9-일기, 2,7-페난트롤린-10-일기, 1-페나진일기, 2-페나진일기, 1-페노싸이아진일기, 2-페노싸이아진일기, 3-페노싸이아진일기, 4-페노싸이아진일기, 10-페노싸이아진일기, 1-페녹사진일기,

2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 10-페녹사진일기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사다이하졸릴기, 5-옥사다이하졸릴기, 3-퓨라잔일기, 2-싸이엔일기, 3-싸이엔일기, 2-메틸피롤-1-일기, 2-메틸피롤-3-일기, 2-메틸피롤-4-일기, 2-메틸피롤-5-일기, 3-메틸피롤-1-일기, 3-메틸피롤-2-일기, 3-메틸피롤-4-일기, 3-메틸피롤-5-일기, 2-t-뷰틸피롤-4-일기, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일기, 2-메틸-1-인돌릴기, 4-메틸-1-인돌릴기, 2-메틸-3-인돌릴기, 4-메틸-3-인돌릴기, 2-t-뷰틸-1-인돌릴기, 4-t-뷰틸-1-인돌릴기, 2-t-뷰틸-3-인돌릴기 및 4-t-뷰틸-3-인돌릴기 등을 들 수 있다.

이들 중에서도, 2-피리딘일기, 1-인돌리진일기, 2-인돌리진일기, 3-인돌리진일기, 5-인돌리진일기, 6-인돌리진일기, 7-인돌리진일기, 8-인돌리진일기, 2-이미다조피리딘일기, 3-이미다조피리딘일기, 5-이미다조피리딘일기, 6-이미다조피리딘일기, 7-이미다조피리딘일기, 8-이미다조피리딘일기, 3-피리딘일기, 4-피리딘일기, 1-인돌릴기, 2-인돌릴기, 3-인돌릴기, 4-인돌릴기, 5-인돌릴기, 6-인돌릴기, 7-인돌릴기, 1-아이소인돌릴기, 2-아이소인돌릴기, 3-아이소인돌릴기, 4-아이소인돌릴기, 5-아이소인돌릴기, 6-아이소인돌릴기, 7-아이소인돌릴기, 1-카바졸릴기, 2-카바졸릴기, 3-카바졸릴기, 4-카바졸릴기, 9-카바졸릴기 등을 들 수 있다.

화학식 1에 있어서의 R_1 내지 R_8 , 화학식 2a 및 2b에 있어서의 R_9 내지 R_{15} 및 X의 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알콕시기는, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기이며, -OY로 표시된다.

이 Y로서는 상기 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬기에서 든 구체예를 들 수 있다.

화학식 1에 있어서의 R_1 내지 R_8 , 화학식 2a 및 2b에 있어서의 R_9 내지 R_{15} 및 X의 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기로서는, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 18의 방향족 탄화수소기이다.

이 방향족 탄화수소기로서는, 예컨대 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 1-페난트릴기, 2-페난트릴기, 3-페난트릴기, 4-페난트릴기, 9-페난트릴기, 1-나프타센일기, 2-나프타센일기, 9-나프타센일기, 1-피렌일기, 2-피렌일기, 4-피렌일기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, p-t-뷰틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐일기, 4"-t-뷰틸-p-터페닐-4-일기, o-큐멘일기, m-큐멘일기, p-큐멘일기, 2,3-자일릴기, 3,4-자일릴기, 2,5-자일릴기 및 메시틸기 등을 들 수 있다.

그 중에서도, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 9-페난트릴기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, p-톨릴기 및 3,4-자일릴기 등이 바람직하다.

화학식 1에 있어서의 R_1 내지 R_8 , 화학식 2a 및 2b에 있어서의 R_9 내지 R_{15} 및 X의 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴옥시기는, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 아릴옥시기이며, -OAr로 표시된다.

이 Ar로서는 상기 치환 또는 비치환된 핵원자수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기에서 든 구체예를 들 수 있다.

화학식 1에 있어서의 R_1 내지 R_8 , 화학식 2a 및 2b에 있어서의 R_9 내지 R_{15} 및 X는 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬기이다.

이 아르알킬기로서는, 예컨대 벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐아이소프로필기, 2-페닐아이소프로필기, 페닐-t-뷰틸기, α -나프틸메틸기, 1- α -나프틸에틸기, 2- α -나프틸에틸기, 1- α -나프틸아이소프로필기, 2- α -나프틸아이소프로필기, β -나프틸메틸기, 1- β -나프틸에틸기, 2- β -나프틸에틸기, 1- β -나프틸아이소프로필기, 2- β -나프틸아이소프로필기, 1-피롤릴메틸기, 2-(1-피롤릴)에틸기, p-메틸벤질기, m-메틸벤질기, o-메틸벤질기, p-클로로벤질기, m-클로로벤질기, o-클로로벤질기, p-브로모벤질기, m-브로모벤질기, o-브로모벤질기, p-아이오도벤질기, m-아이오도벤질기, o-아이오도벤질기, p-하이드록시벤질기, m-하이드록시벤질기, o-하이드록시벤질기, p-아미노벤질기, m-아미노벤질기, o-아미노벤질기, p-나이트로벤질기, m-나이트로벤질기, o-나이트로벤질기, p-사이아노벤질기, m-사이아노벤질기, o-사이아노벤질기, 1-하이드록시-2-페닐아이소프로필기 및 1-클로로-2-페닐아이소프로필기 등을 들 수 있다.

그 중에서도, 벤질기, p-사이아노벤질기, m-사이아노벤질기, o-사이아노벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐아이소프로필기, 2-페닐아이소프로필기 등이 바람직하다.

화학식 1에 있어서의 R_1 내지 R_8 , 화학식 2a 및 2b에 있어서의 R_9 내지 R_{15} 및 X의 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 알켄일기는, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알켄일기이다.

이 알켄일기로서는, 예컨대 바이닐기, 알릴기, 1-뷰텐일기, 2-뷰텐일기, 3-뷰텐일기, 1,3-뷰테인다이엔일기, 1-메틸바이닐기, 스타이릴기, 2,2-다이페닐바이닐기, 1,2-다이페닐바이닐기, 1-메틸알릴기, 1,1-다이메틸알릴기, 2-메틸알릴기, 1-페닐알릴기, 2-페닐알릴기, 3-페닐알릴기, 3,3-다이페닐알릴기, 1,2-다이메틸알릴기, 1-페닐-1-뷰텐일기 및 3-페닐-1-뷰텐일기 등을 들 수 있다.

그 중에서도, 스타이릴기, 2,2-다이페닐바이닐기 및 1,2-다이페닐바이닐기 등이 바람직하다.

화학식 1에 있어서의 R_1 내지 R_8 , 화학식 2a 및 2b에 있어서의 R_9 내지 R_{15} 및 X의 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 40의 아르알킬아미노기는, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 아르알킬아미노기이다.

상기 알킬아미노기, 아릴아미노기 및 아르알킬아미노기는 $-NQ_1Q_2$ 로 나타낼 수 있고, Q_1 및 Q_2 로서는, 예컨대 각각 독립적으로 메틸기, 에틸기, 프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, 하이드록시메틸기, 1-하이드록시에틸기, 2-하이드록시에틸기, 2-하이드록시아이소뷰틸기, 1,2-다이하이드록시에틸기, 1,3-다이하이드록시아이소프로필기, 2,3-다이하이드록시-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이하이드록시프로필기, 클로로메틸기, 1-클로로에틸기, 2-클로로에틸기, 2-클로로아이소뷰틸기, 1,2-다이클로로에틸기, 1,3-다이클로로아이소프로필기, 2,3-다이클로로-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모아이소뷰틸기, 1,2-다이브로모에틸기, 1,3-다이브로모아이소프로필기, 2,3-다이브로모-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이브로모프로필기, 아이오도메틸기, 1-아이오도에틸기, 2-아이오도에틸기, 2-아이오도뷰틸기, 1,2-다이아이오도에틸기, 1,3-다이아이오도아이소프로필기, 2,3-다이아이오도-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이아이오도프로필기, 아미노메틸기, 1-아미노에틸기, 2-아미노에틸기, 2-아미노아이소뷰틸기, 1,2-다이아미노에틸기, 1,3-다이아미노아이소프로필기, 2,3-다이아미노-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이아미노프로필기, 사이아노메틸기, 1-사이아노에틸기, 2-사이아노에틸기, 2-사이아노아이소뷰틸기, 1,2-다이사이아노에틸기, 1,3-다이사이아노아이소프로필기, 2,3-다이사이아노-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이사이아노프로필기, 나이트로메틸기, 1-나이트로에틸기, 2-나이트로에틸기, 2-나이트로아이소뷰틸기, 1,2-다이나이트로에틸기, 1,3-다이나이트로아이소프로필기, 2,3-다이나이트로-t-뷰틸기, 1,2,3-트라이나이트로프로필기, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 1-페난트릴기, 2-페난트릴기, 3-페난트릴기, 4-페난트릴기, 9-페난트릴기, 1-나프타센일기, 2-나프타센일기, 9-나프타센일기, 4-스타이릴페닐기, 1-피렌일기, 2-피렌일기, 4-피렌일기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, p-t-뷰틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4'-메틸바이페닐일기, 4"-t-뷰틸-p-터페닐-4-일기, 2-피롤릴기, 3-피롤릴기, 피라진일기, 2-피리딘일기, 3-피리딘일기, 4-피리딘일기, 2-인돌릴기, 3-인돌릴기, 4-인돌릴기, 5-인돌릴기, 6-인돌릴기, 7-인돌릴기, 1-아이소인돌릴기, 3-아이소인돌릴기, 4-아이소인돌릴기, 5-아이소인돌릴기, 6-아이소인돌릴기, 7-아이소인돌릴기, 2-퓨릴기, 3-퓨릴기, 2-벤조퓨란일기, 3-벤조퓨란일기, 4-벤조퓨란일기, 5-벤조퓨란일기, 6-벤조퓨란일기, 7-벤조퓨란일기, 1-아이소벤조퓨란일기, 3-아이소벤조퓨란일기, 4-아이소벤조퓨란일기, 5-아이소벤조퓨란일기, 6-아이소벤조퓨란일기, 7-아이소벤조퓨란일기, 2-퀴놀릴기, 3-퀴놀릴기, 4-퀴놀릴기, 5-퀴놀릴기, 6-퀴놀릴기, 7-퀴놀릴기, 8-퀴놀릴기, 1-아이소퀴놀릴기, 3-아이소퀴놀릴기, 4-아이소퀴놀릴기, 5-아이소퀴놀릴기, 6-아이소퀴놀릴기, 7-아이소퀴놀릴기, 8-아이소퀴놀릴기, 2-퀴녹살린일기, 5-퀴녹살린일기, 6-퀴녹살린일기, 1-카바졸릴기, 2-카바졸릴기, 3-카바졸릴기, 4-카바졸릴기, 1-페난트리딘일기, 2-페난트리딘일기, 3-페난트리딘일기, 4-페난트리딘일기, 6-페난트리딘일기, 7-페난트리딘일기, 8-페난트리딘일기, 9-페난트리딘일기, 10-페난트리딘일기, 1-아크리딘일기, 2-아크리딘일기, 3-아크리딘일기, 4-아크리딘일기, 9-아크리딘일기, 1,7-페난트롤린-2-일기, 1,7-페난트롤린-3-일기, 1,7-페난트롤린-4-일기, 1,7-페난트롤린-5-일기, 1,7-페난트롤린-6-일기, 1,7-페난트롤린-8-일기, 1,7-페난트롤린-9-일기, 1,7-페난트롤린-10-일기, 1,8-페난트롤린-2-일기, 1,8-페난트롤린-3-일기, 1,8-페난트롤린-4-일기, 1,8-페난트롤린-5-일기, 1,8-페난트롤린-6-일기, 1,8-페난트롤린-7-일기, 1,8-페난트롤린-9-일기, 1,8-페난트롤린-10-일기, 1,9-페난트롤린-2-일기, 1,9-페난트롤린-3-일기, 1,9-페난트롤린-4-일기, 1,9-페난트롤린-5-일기, 1,9-페난트롤린-6-일기, 1,9-페난트롤린-7-일기, 1,9-페난트롤린-8-일기, 1,9-페난트롤린-10-일기, 1,10-페난트롤린-2-일기, 1,10-페난트롤린-3-일기, 1,10-페난트롤린-4-일기, 1,10-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-1-일기, 2,9-페난트롤린-3-일기, 2,9-페난트롤린-4-일기, 2,9-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-6-일기, 2,9-페난트롤린-7-일기, 2,9-페난트롤린-8-일기, 2,9-페난트롤린-10-일기, 2,8-페난트롤린-1-

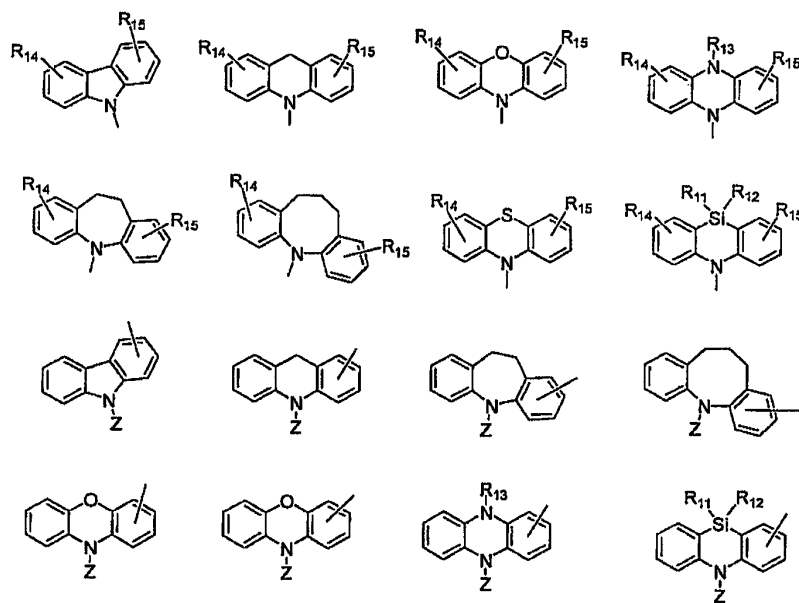
일기, 2,8-페난트롤린-3-일기, 2,8-페난트롤린-4-일기, 2,8-페난트롤린-5-일기, 2,8-페난트롤린-6-일기, 2,8-페난트롤린-7-일기, 2,8-페난트롤린-9-일기, 2,8-페난트롤린-10-일기, 2,7-페난트롤린-1-일기, 2,7-페난트롤린-3-일기, 2,7-페난트롤린-4-일기, 2,7-페난트롤린-5-일기, 2,7-페난트롤린-6-일기, 2,7-페난트롤린-8-일기, 2,7-페난트롤린-9-일기, 2,7-페난트롤린-10-일기, 1-페나진일기, 2-페나진일기, 1-페노싸이아진일기, 2-페노싸이아진일기, 3-페노싸이아진일기, 4-페노싸이아진일기, 1-페녹사진일기, 2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사다이아졸릴기, 5-옥사다이아졸릴기, 3-퓨라잔일기, 2-싸이엔일기, 3-싸이엔일기, 2-메틸피롤-1-일기, 2-메틸피롤-3-일기, 2-메틸피롤-4-일기, 2-메틸피롤-5-일기, 3-메틸피롤-1-일기, 3-메틸피롤-2-일기, 3-메틸피롤-4-일기, 3-메틸피롤-5-일기, 2-t-뷰틸피롤-4-일기, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일기, 2-메틸-1-인돌릴기, 4-메틸-1-인돌릴기, 2-메틸-3-인돌릴기, 4-메틸-3-인돌릴기, 2-t-뷰틸-1-인돌릴기, 4-t-뷰틸-1-인돌릴기, 2-t-뷰틸-3-인돌릴기 및 4-t-뷰틸-3-인돌릴기 등을 들 수 있다.

그 중에서도, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, p-톨릴기, 4-바이페닐일기 등이 바람직하다.

또한, 화학식 1, 2a 또는 2b에 있어서, R_1 내지 R_8 이 인접한 탄소원자에 결합하고, 서로 결합하여 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하는 경우, R_9 와 R_{10} 또는 R_{11} 과 R_{12} 는 서로 결합하여 포화 또는 불포화의 환상 구조를 형성하는 경우, R_1 내지 R_8 , R_9 , R_{10} , R_{11} 및 R_{12} 로서는 $-R_1-R_2-$, $-R_3-R_4-$, $-R_5-R_6-$, $-R_7-R_8-$, $-R_9-R_{10}-$, $-R_{11}-R_{12}-$, 더욱 구체적인 구조로서는 $-(CH_2)_4-$, $-(CH_2)_5-$, $-CH=CH-CH=CH-$, $-CH_2-CH=CH-CH_2-$ 등을 들 수 있다.

화학식 1에 있어서, Cz기는 상기 화학식 2a 또는 2b로 표시되는 기이다.

Cz기로서는, 예컨대 이하의 기를 들 수 있다.



상기 식에서, R_{14} 및 R_{15} 는 상기 치환기를 나타낸다.

또한, Z는 치환 또는 비치환된 핵탄소수 6 내지 18의 방향족 탄화수소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 20의 아르알킬기이다.

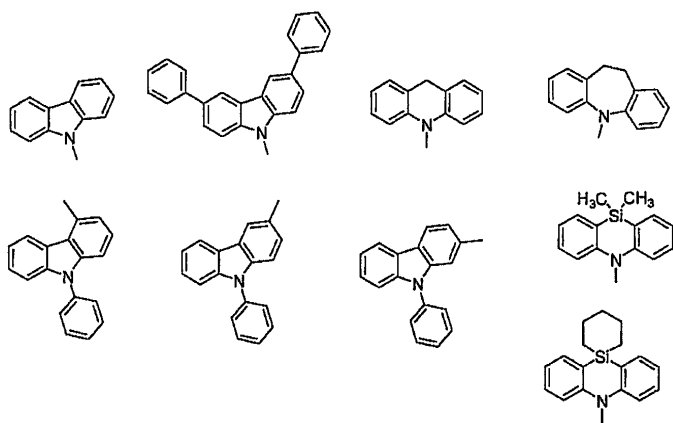
상기 방향족 탄화수소기로서는, 예컨대 페닐기, 나프틸기, 톨릴기, 바이페닐기 및 터페닐기 등이 바람직하고, 페닐기, 바이페닐기 및 톨릴기 등이 더욱 바람직하다.

또한, 상기 알킬기로서는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 아이소프로필기, n-뷰틸기, s-뷰틸기, 아이소뷰틸기, t-뷰틸기, n-펜틸기, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, n-노닐기, n-데실기, n-운데실기, n-도데실기, n-트라이데실기, n-테트라데실기,

n-펜타데실기, n-헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, 네오펜틸기, 1-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 1-펜틸헥실기, 1-뷰틸펜틸기, 1-헵틸옥틸기, 3-메틸펜틸기 등이 바람직하고, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-헥실기, n-헵틸기 등이 더욱 바람직하다.

상기 아르알킬기로서는, α -나프틸메틸기, 1- α -나프틸에틸기, 2- α -나프틸에틸기, 1- α -나프틸아이소프로필기, 2- α -나프틸아이소프로필기, β -나프틸메틸기, 1- β -나프틸에틸기, 2- β -나프틸에틸기, 1- β -나프틸아이소프로필기, 2- β -나프틸아이소프로필기, 벤질기, p-사이아노벤질기, m-사이아노벤질기, o-사이아노벤질기, 1-페닐에틸기, 2-페닐에틸기, 1-페닐아이소프로필기 및 2-페닐아이소프로필기 등이 바람직하고, 벤질기 및 p-사이아노벤질기 등이 더욱 바람직하다.

또한, 바람직한 Cz기로서는 이하의 기를 들 수 있다.



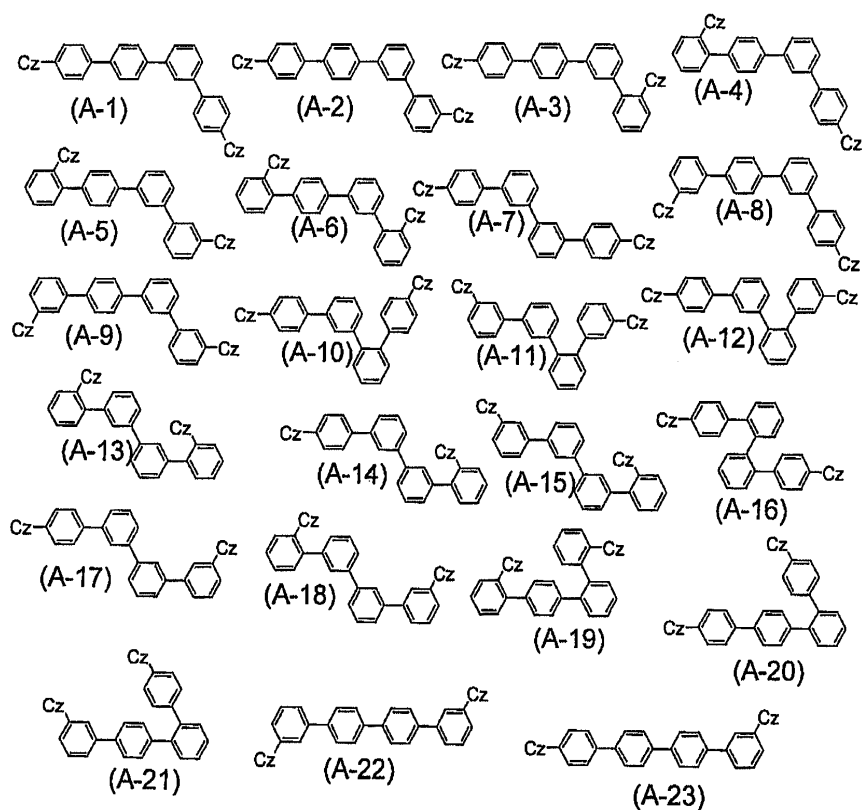
Cz기로서는, 특히 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 9-페닐카바졸릴기가 바람직하다.

본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료의 구체적인 구조로서는 하기와 같은 구조를 들 수 있지만, 이들에 한정되는 것이 아니다.

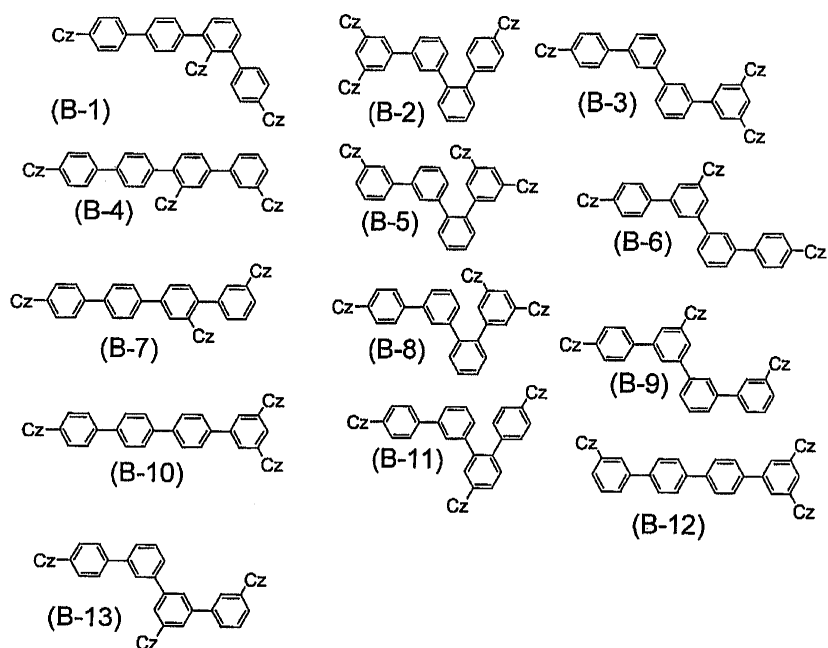
하기 구조식 중 적어도 하나의 벤젠 잔기는 R_1 내지 R_8 로부터 선택되며, 4개의 벤젠 잔기는 각각 최대 2개의 치환기를 가질 수 있다.

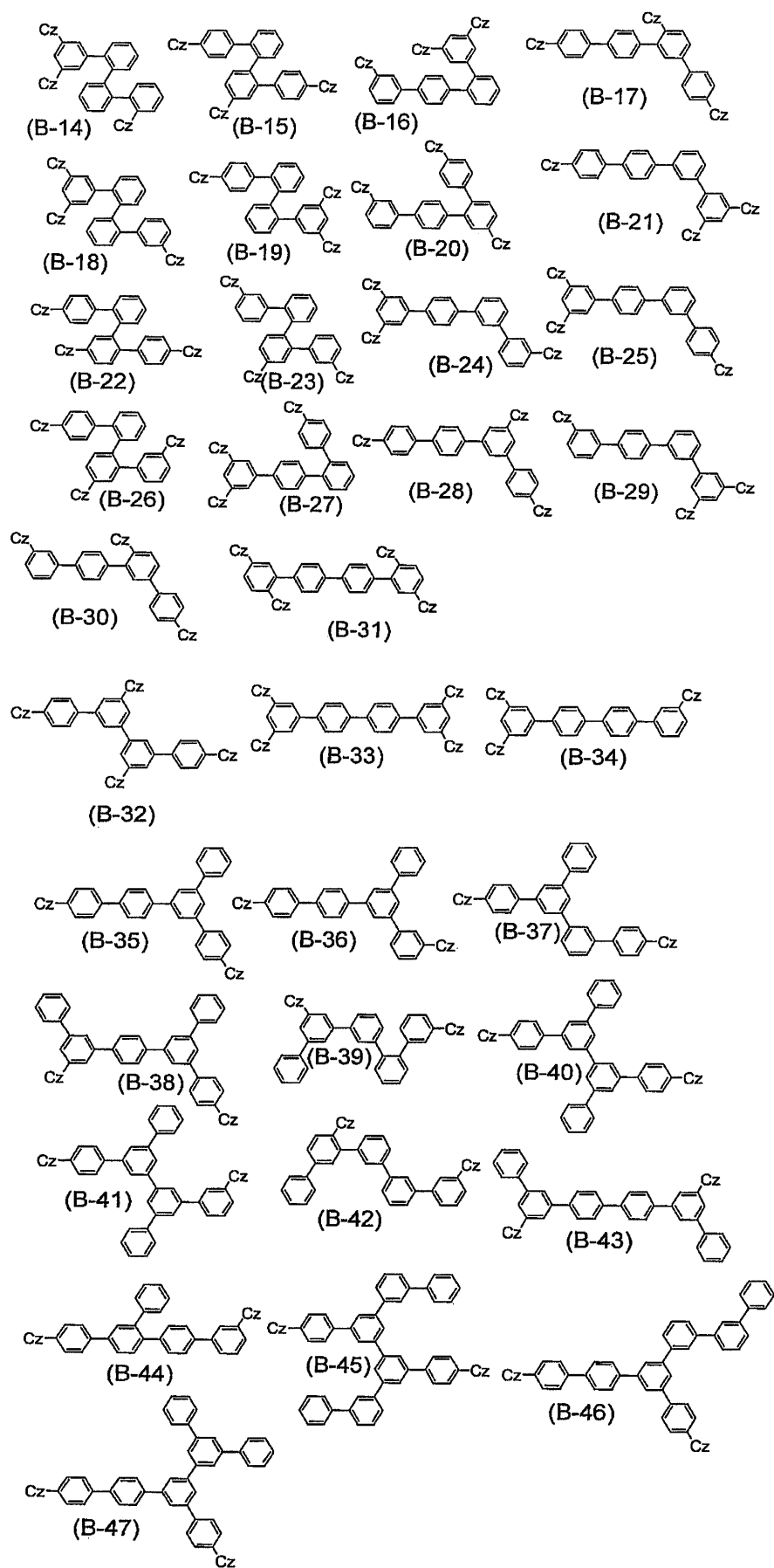
화학식 1에 있어서, Ar_1 내지 Ar_4 중 적어도 하나가 m-페닐렌 또는 o-페닐렌인 경우의 대표예로서는 이하의 화합물을 들 수 있다.

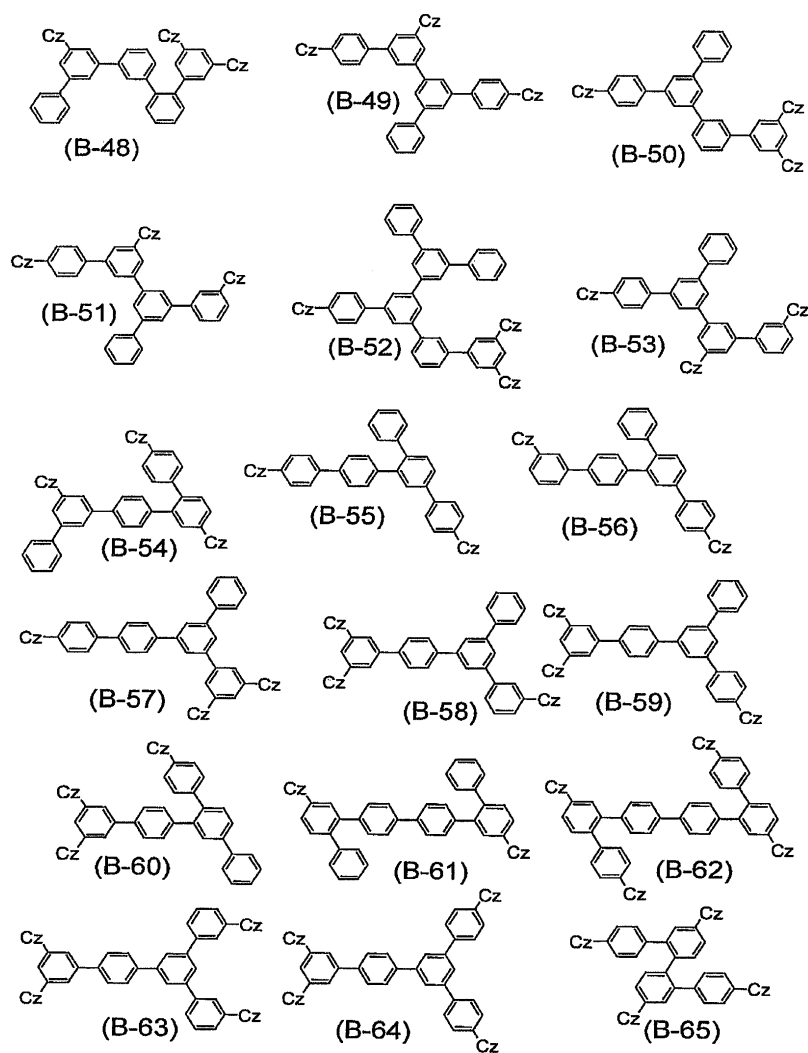
비치환된 경우의 대표예로서는 화합물 (A-1) 내지 (A-23) 등을 들 수 있다.



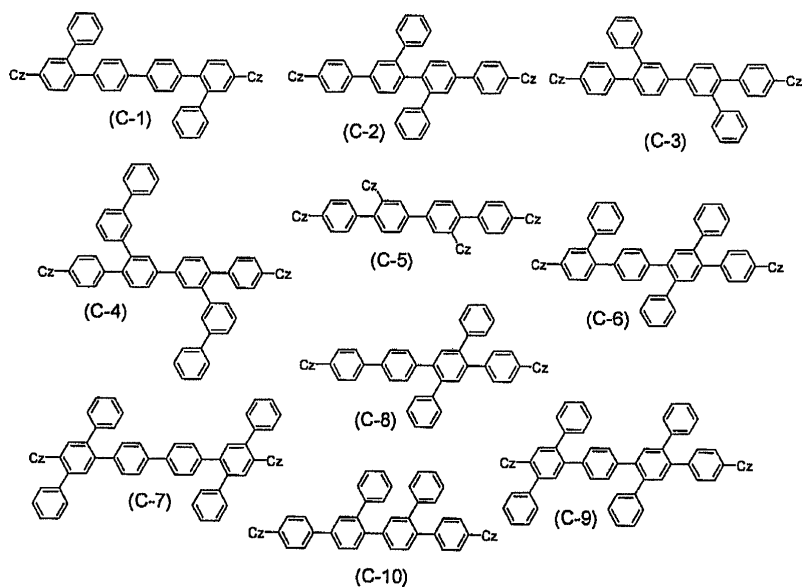
치환기를 갖는 경우의 대표예로서는 화합물 (B-1) 내지 (B-65) 등 들 수 있다.







또한, 화학식 1에 있어서, Ar₁ 내지 Ar₄ 모두가 p-페닐렌인 경우의 구체예로서는 (C-1) 내지 (C-9) 등을 들 수 있다.



이상의 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료에 있어서, Ar_2 및 Ar_3 이 각각 독립적으로 m-페닐렌 또는 o-페닐렌이며, Ar_1 및 Ar_4 가 p-페닐렌인 경우 Ar_1 및 Ar_4 가 각각 독립적으로 m-페닐렌 또는 o-페닐렌이고, Ar_2 및 Ar_3 이 p-페닐렌인 경우 Ar_1 및 Ar_4 가 각각 독립적으로 m-페닐렌이고, 또한 R_1 또는 R_7 이 치환 또는 비치환된 핵탄소 수 6 내지 40의 방향족 탄화수소기, 또는 Cz기인 경우가 바람직하다.

다음으로, 본 발명의 유기 EL 소자에 대하여 설명한다.

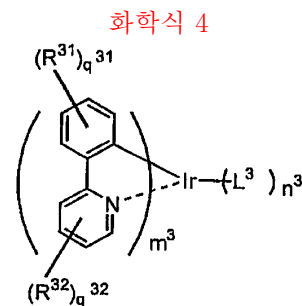
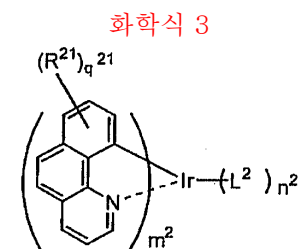
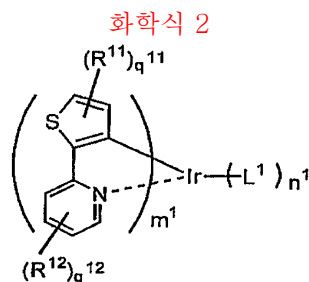
본 발명의 유기 EL 소자는, 음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 갖는 일층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층이 형성되어 있는 유기 EL 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 한 층이 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 함유한다.

다층형 유기 EL 소자의 구조로서는, 예컨대 양극/정공 수송층(정공 주입층)/발광층/음극, 양극/발광층/전자 수송층(전자 주입층)/음극, 양극/정공 수송층(정공 주입층)/발광층/전자 수송층(전자 주입층)/음극, 양극/정공 수송층(정공 주입층)/발광층/정공 장벽층/전자 수송층(전자 주입층)/음극 등의 다층 구성으로 적층한 것을 들 수 있다.

상기 발광층은 호스트 재료와 인광성 발광 재료로 이루어지며, 상기 호스트 재료가 상기 유기 EL 소자용 재료로 이루어지면 바람직하다.

인광성 발광 재료로서는 인광 양자 수율이 높고 발광 소자의 외부 양자 효율을 더욱 향상시킬 수 있다는 점에서, 이리듐 착체, 오스뮴 착체, 백금 착체 등의 금속 착체가 바람직하고, 이리듐 착체 및 백금 착체가 더욱 바람직하고, 오르쏘메탈화 이리듐 착체가 가장 바람직하다.

오르쏘메탈화 금속 착체의 더욱 바람직한 형태로서는, 하기 화학식 2 내지 4로 표시되는 화합물이며, 화학식 2 또는 3으로 표시되는 화합물이 특히 바람직하다.



화학식 2에 있어서, R^{11} 및 R^{12} 는 알킬기, 아릴기, 불소화 알킬기, 불소화 아릴기이며, 알킬기, 불소화 알킬기, 아릴기가 바람직하고, 알킬기, 불소화 알킬기가 더욱 바람직하다.

q^{11} 은 0 내지 2의 정수를 나타내고, 0, 1이 바람직하고, 0이 더욱 바람직하다.

q^{12} 은 0 내지 4의 정수를 나타내고, 0, 1이 바람직하고, 0이 더욱 바람직하다.

q^{11} 및 q^{12} 가 2 이상인 경우, 복수개의 R^{11} 및 R^{12} 는 각각 동일하거나 서로 상이할 수 있고, 또한 연결되어 축합환을 형성할 수 있다.

L^1 은 리간드를 나타내며, 리간드로서는 상기 오르쏘메탈화 이리듐 착체를 형성하는데 필요한 리간드 등을 들 수 있고, 오르쏘메탈화 이리듐 착체를 형성하는데 필요한 리간드 및 질소함유 헤테로환 리간드, 다이케톤 리간드, 할로젠 리간드, 바이피리딜 리간드가 바람직하고, 더욱 바람직하게는 오르쏘메탈화 이리듐 착체를 형성하는데 필요한 리간드, 바이피리딜 리간드이다.

n^1 은 0 내지 5의 정수를 나타내고, 0이 바람직하다.

m^1 은 1, 2 또는 3을 나타내고, 바람직하게는 3이다.

n^1 및 m^1 의 수의 조합은 화학식 2로 표시되는 금속 착체가 중성 착체로 되는 수의 조합이 바람직하다.

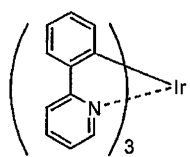
화학식 3에 있어서, R^{21} , n^2 , m^2 및 L^2 는 각각 상기 R^1 , n^1 , m^1 및 L^1 과 같다. q^{21} 은 0 내지 8의 정수를 나타내고, 0이 바람직하다.

q^{21} 이 2 이상인 경우는 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 또한 연결되어 축합환을 형성할 수 있다.

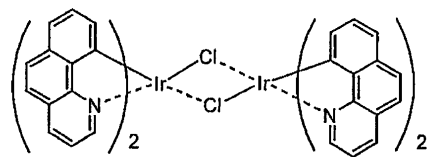
화학식 4에 있어서, R^{31} , R^{32} , q^{31} , q^{32} , n^3 , m^3 및 L^3 은 각각 상기 R^{11} , R^{12} , q^{11} , q^{12} , n^1 , m^1 및 L^1 과 같다.

상기 인광성 발광 재료로서는 이하에 나타내는 이리듐 착체가 바람직하다.

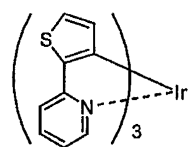
(I-1)



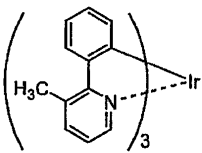
(I-2)



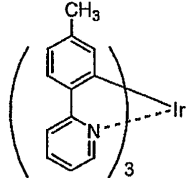
(I-3)



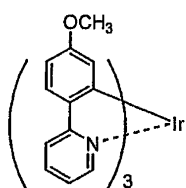
(I-4)



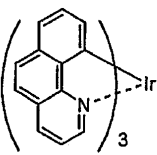
(I-5)



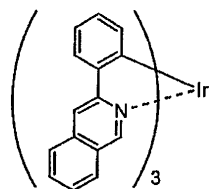
(I-6)



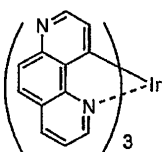
(I-7)



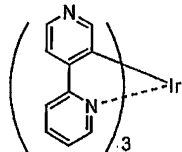
(I-8)



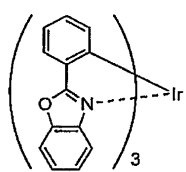
(I-9)



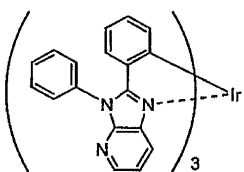
(I-10)



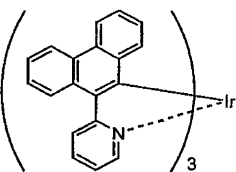
(I -11)



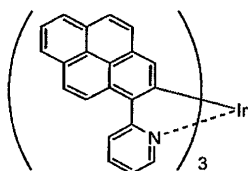
(I -12)



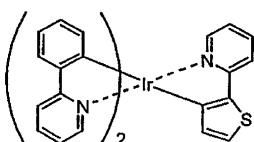
(I -13)



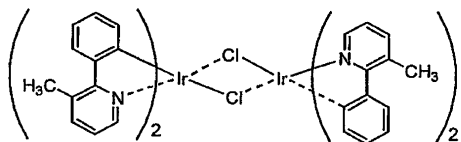
(I -14)



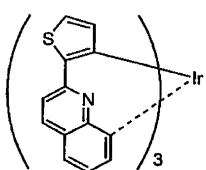
(I -15)



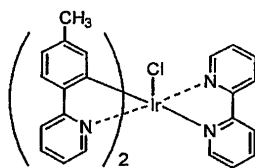
(I -16)



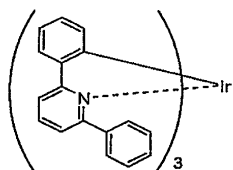
(I -17)



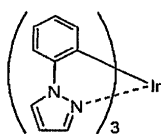
(I -18)



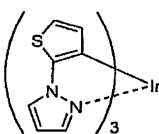
(I -19)



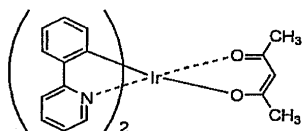
(I -20)



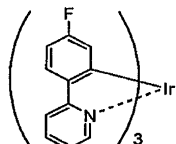
(I -21)



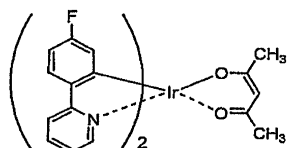
(I -22)



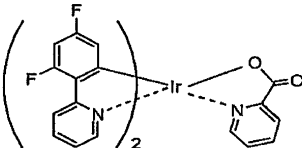
(I -23)



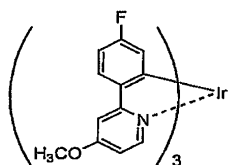
(I -24)



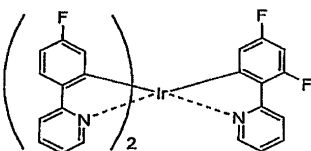
(I -25)



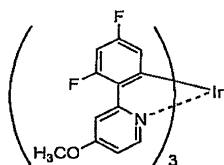
(I -26)



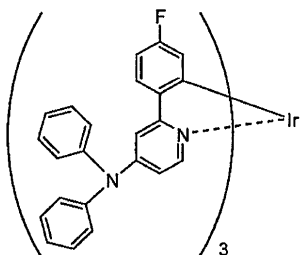
(I -27)



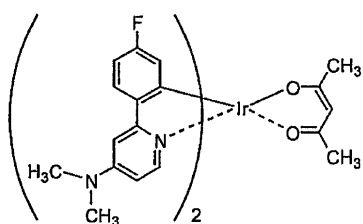
(I -28)



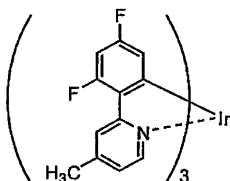
(I -29)



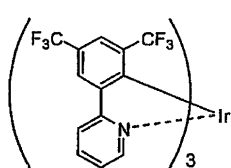
(I -30)



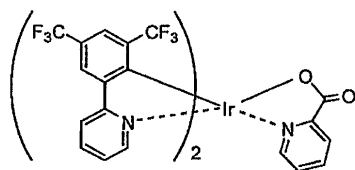
(I -31)



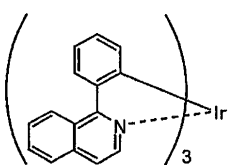
(I -32)



(I -33)



(I -34)



본 발명의 유기 EL 소자는 음극과 유기 박막층의 계면 영역에 환원성 도펀트가 첨가되어 이루어지면 바람직하다.

환원성 도펀트로서는 알칼리 금속, 알칼리 금속 착체, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속, 알칼리 토금속 착체, 알칼리 토금속 화합물, 희토류 금속, 희토류 금속 착체 및 희토류 금속 화합물 등으로부터 선택된 1종 이상을 들 수 있다.

상기 알칼리 금속으로서는 Na(일함수: 2.36eV), K(일함수: 2.28eV), Rb(일함수: 2.16eV), Cs(일함수: 1.95eV) 등을 들 수 있고, 일함수가 2.9eV 이하인 것이 특히 바람직하다.

이들 중 바람직하게는 K, Rb 또는 Cs이고, 또한 바람직하게는 Rb 또는 Cs이며, 가장 바람직하게는 Cs이다.

상기 알칼리 토금속으로서는 Ca(일함수: 2.9eV), Sr(일함수: 2.0 내지 2.5eV), Ba(일함수: 2.52eV) 등을 들 수 있고, 일함수가 2.9eV 이하인 것이 특히 바람직하다.

상기, 희토류 금속으로서는 Sc, Y, Ce, Tb, Yb 등을 들 수 있고, 일함수가 2.9eV 이하인 것이 특히 바람직하다.

이상의 금속 중 바람직한 금속은 특히 환원 능력이 높고, 전자 주입 영역으로의 비교적 소량의 첨가에 의해 유기 EL 소자에 있어서의 발광휘도의 향상이나 장수명화가 가능하다.

상기 알칼리 금속 화합물로서는 Li_2O , Cs_2O , K_2O 등의 알칼리 산화물, LiF, NaF, CsF, KF 등의 알칼리 할로젠화물 등을 들 수 있고, LiF, Li_2O , NaF의 알칼리산화물 또는 알칼리 불화물이 바람직하다.

상기 알칼리 토금속 화합물로서는 BaO, SrO, CaO 및 이들을 혼합한 $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$)나 $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$) 등을 들 수 있고, BaO, SrO, CaO가 바람직하다.

상기 희토류 금속 화합물로서는 YbF_3 , ScF_3 , ScO_3 , Y_2O_3 , Ce_2O_3 , GdF_3 , TbF_3 등을 들 수 있고, YbF_3 , ScF_3 , TbF_3 가 바람직하다.

상기 알칼리 금속 착체, 알칼리 토금속 착체, 희토류 금속 착체로서는 각각 금속 이온으로서 알칼리 금속 이온, 알칼리 토금속 이온, 희토류 금속 이온 중 적어도 하나를 함유하는 것이면 특별히 한정되지 않는다.

또한, 리간드에는 퀴놀린올, 벤조퀴놀린올, 아크리딘올, 페난트리딘올, 하이드록시페닐옥사졸, 하이드록시페닐싸이아졸, 하이드록시다이아릴옥사다이아졸, 하이드록시다이아릴싸이아다이아졸, 하이드록시페닐피리딘, 하이드록시페닐벤조이미다졸, 하이드록시벤조트라이아졸, 하이드록시폴보레인, 바이피리딜, 페난트롤린, 프탈로사이아닌, 포르피린, 사이클로펜타다이엔, β -다이케톤류, 아조메틴류 및 이들의 유도체 등이 바람직하지만, 이들에 한정되는 것은 아니다.

환원성 도펀트의 첨가 형태로서는 상기 계면 영역에 층상 또는 섬(島) 형상으로 형성하면 바람직하다.

형성 방법으로서, 저항 가열 증착법에 의해 환원성 도펀트를 증착시키면서, 계면 영역을 형성하는 발광 재료나 전자 주입 재료를 동시에 증착시켜 유기물 중에 환원 도펀트를 분산시키는 방법이 바람직하다.

분산 농도로서는 몰비로 유기물:환원성 도펀트=0:1 내지 1:100, 바람직하게는 5:1 내지 1:5이다.

환원성 도펀트를 층상으로 형성하는 경우, 계면의 유기층인 발광 재료나 전자 주입 재료를 층상으로 형성한 후에 환원 도펀트를 단독으로 저항 가열 증착법에 의해 증착하고, 바람직하게는 층 두께 0.1 내지 15nm로 형성한다.

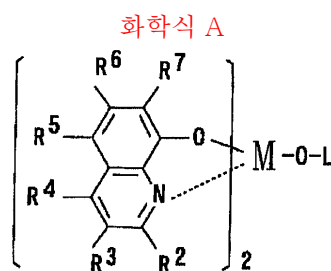
환원성 도펀트를 섬 형상으로 형성하는 경우는, 계면의 유기층인 발광 재료나 전자 주입 재료를 섬 형상으로 형성한 후에, 환원 도펀트를 단독으로 저항 가열 증착법에 의해 증착하고, 바람직하게는 섬 두께 0.05 내지 1nm로 형성한다.

또한, 본 발명의 유기 EL 소자에 있어서의 주성분과 환원성 도펀트의 비율로서는, 몰비로 주성분:환원성 도펀트=5:1 내지 1:5이면 바람직하고, 2:1 내지 1:2이면 더욱 바람직하다.

본 발명의 유기 EL 소자는 상기 발광층과 음극 사이에 전자 주입층을 갖고, 상기 전자 주입층이 질소함유 환 유도체를 주성분으로서 함유하면 바람직하다.

상기 전자 주입층에 이용하는 전자 수송 재료로서는 분자내에 헤테로 원자를 1개 이상 함유하는 방향족 헤테로환 화합물이 바람직하게 사용되고, 특히 질소함유 환 유도체가 바람직하다.

이 질소함유 환 유도체로서는, 예컨대 화학식 A로 표시되는 것이 바람직하다.



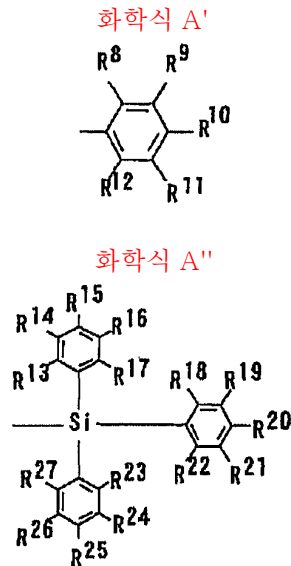
상기 식에서, R^2 내지 R^7 은 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠원자, 옥시기, 아미노기 또는 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기이며, 이들은 치환될 수 있다.

이 할로젠원자의 예로서는 상기와 같은 것을 들 수 있다. 또한, 치환될 수 있는 아미노기의 예로서는, 상기 알킬아미노기, 아릴아미노기, 아르알킬아미노기와 같은 것을 들 수 있다.

탄소수 1 내지 40의 탄화수소기로서는, 치환 또는 비치환된 알킬기, 알켄일기, 사이클로알킬기, 알콕시기, 아릴기, 헤테로환기, 아르알킬기, 아릴옥시기, 알콕시카보닐기 등을 들 수 있다. 이 알킬기, 알켄일기, 사이클로알킬기, 알콕시기, 아릴기, 헤테로환기, 아르알킬기 및 아릴옥시기의 예로서는 상기와 같은 것을 들 수 있고, 알콕시카보닐기는 -COOY'로 표시되며, Y'의 예로서는 상기 알킬기와 같은 것을 들 수 있다.

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

화학식 A의 L은 하기 화학식 A' 또는 A''로 표시되는 기이다.



상기 식에서,

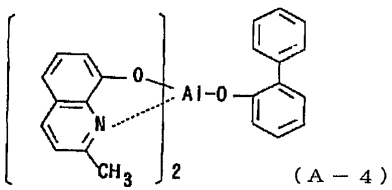
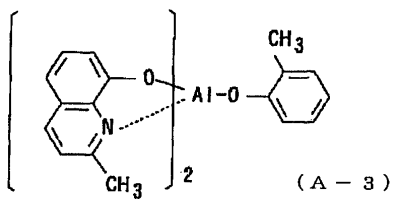
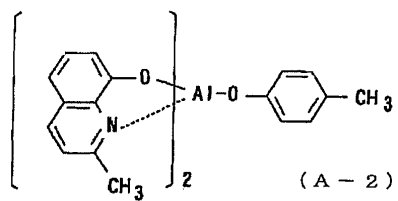
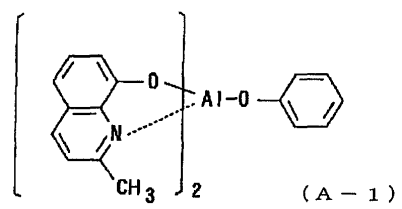
R⁸ 내지 R¹²는 각각 독립적으로 수소원자 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기이며, 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성할 수 있고,

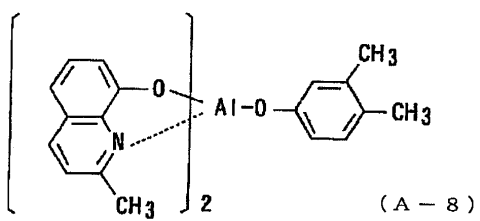
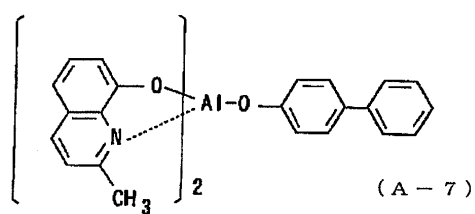
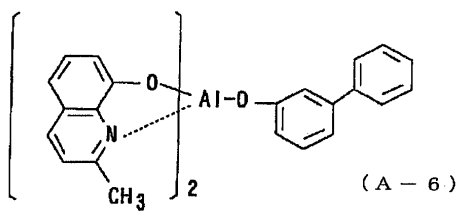
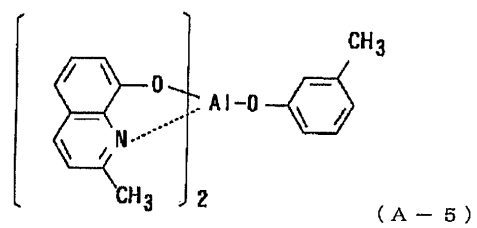
R¹³ 내지 R²⁷은 각각 독립적으로 수소원자 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기이며, 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성할 수 있다.

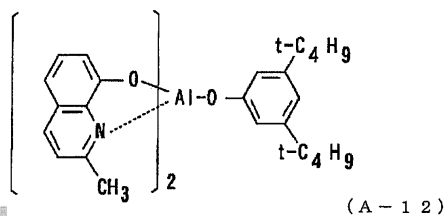
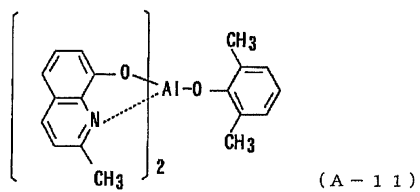
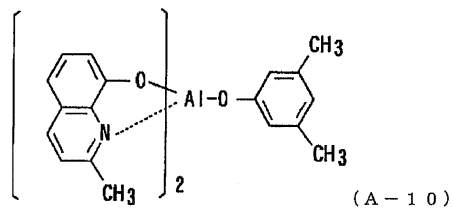
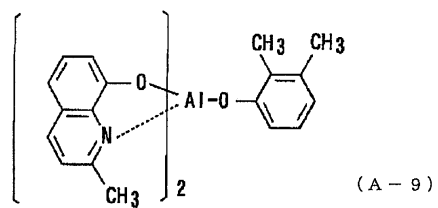
화학식 A' 및 A''의 R⁸ 내지 R¹² 및 R¹³ 내지 R²⁷이 나타내는 탄소수 1 내지 40의 탄화수소기로서는 상기 R² 내지 R⁷의 구체예와 같은 것을 들 수 있다.

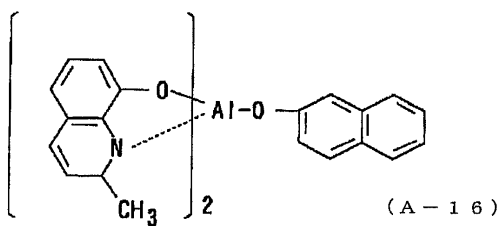
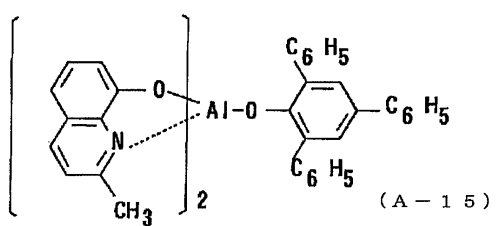
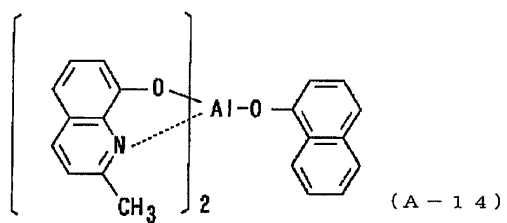
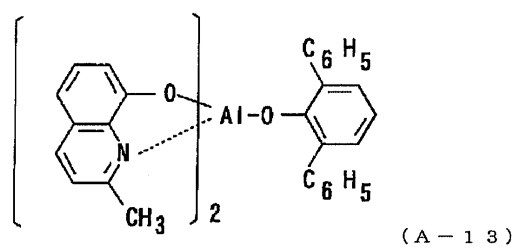
또한, 상기 R⁸ 내지 R¹² 및 R¹³ 내지 R²⁷의 서로 인접하는 기가 환상 구조를 형성한 경우의 2가의 기로서는, 테트라메틸렌기, 펜타메틸렌기, 헥사메틸렌기, 다이페닐메테인-2,2'-다이일기, 다이페닐에테인-3,3'-다이일기, 다이페닐프로페인-4,4'-다이일기 등을 들 수 있다.

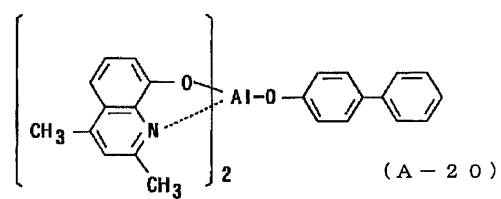
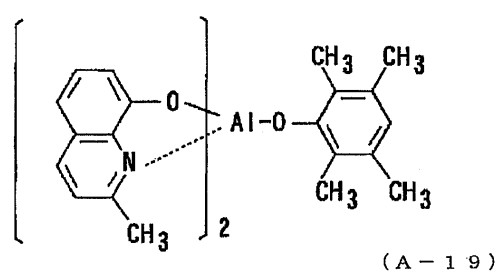
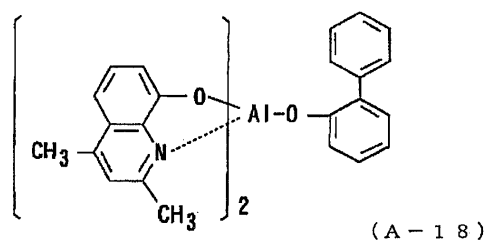
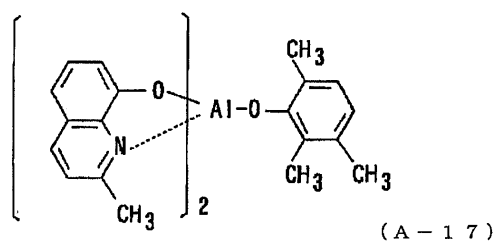
화학식 A로 표시되는 질소함유 환의 금속 킬레이트 착체의 구체예를 이하에 나타내지만, 이들 예시 화합물에 한정되는 것은 아니다.

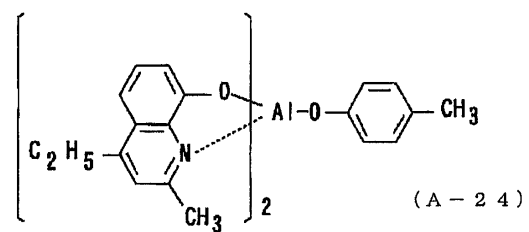
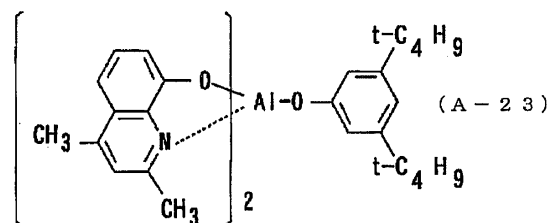
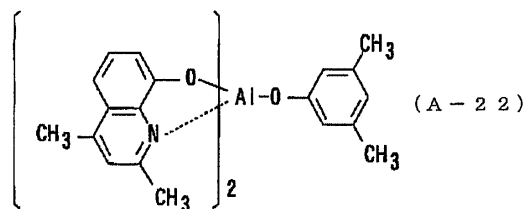
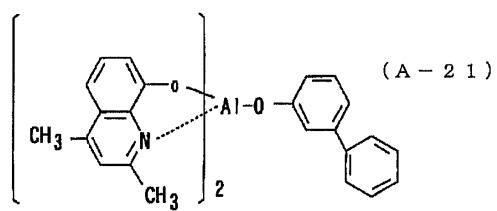


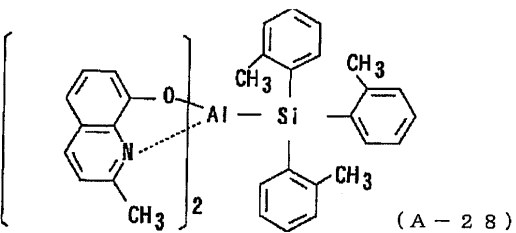
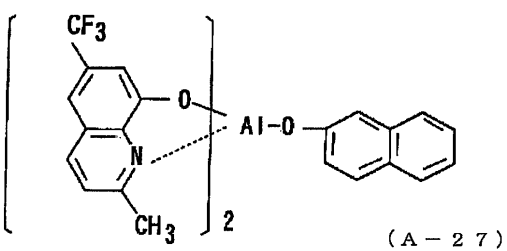
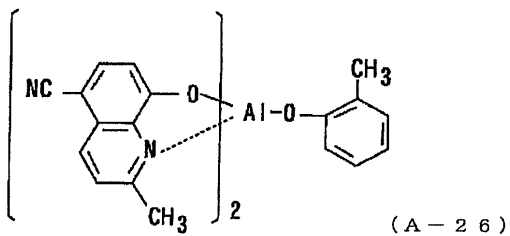
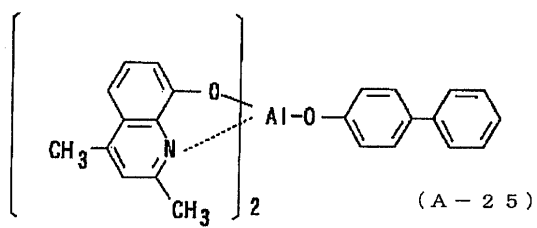


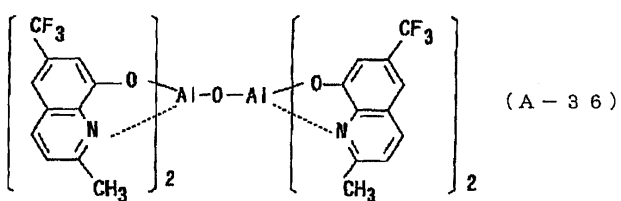
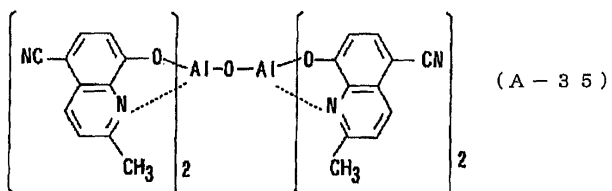
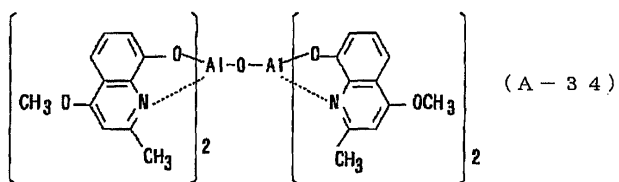
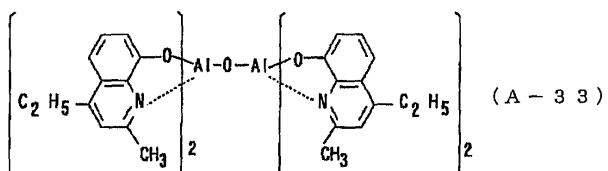
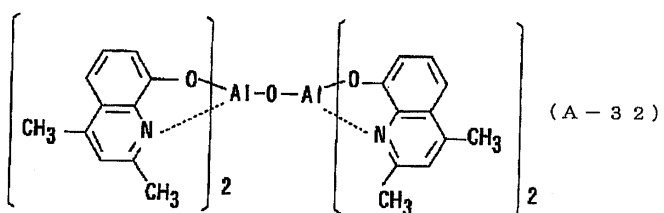
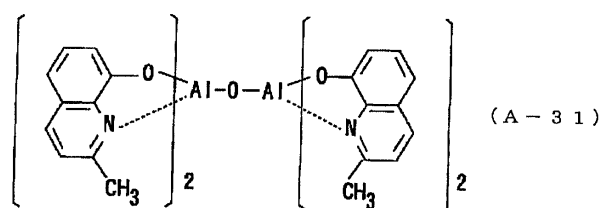
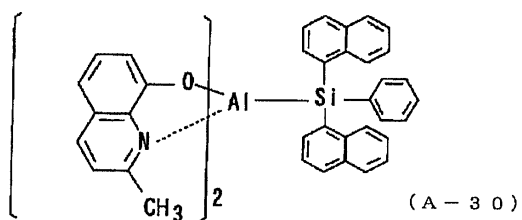
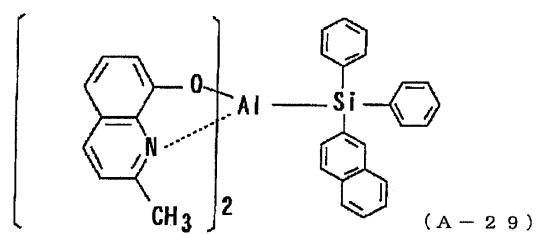




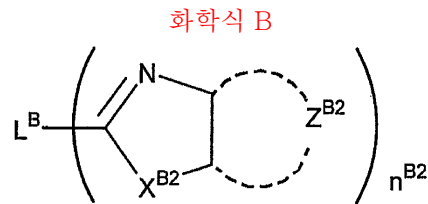








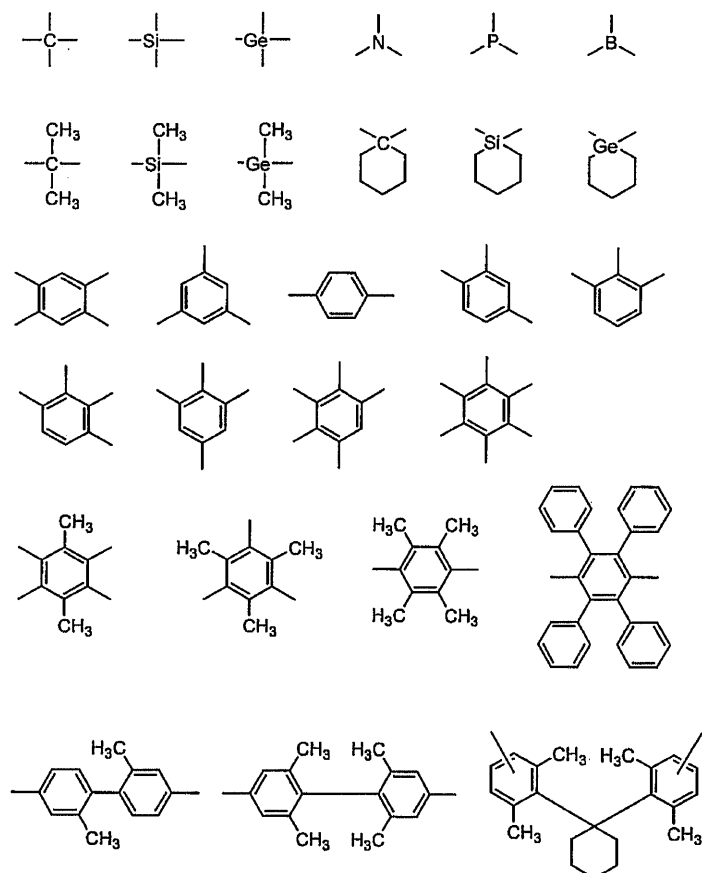
상기 전자 주입층의 주성분인 질소함유 환 유도체로서는 질소함유 5원환 유도체도 바람직하고, 질소함유 5원환으로서는 이미다졸환, 트리아졸환, 테트라졸환, 옥사다리아졸환, 싸이아다리아졸환, 옥사트리아졸환, 싸이아트리아졸환 등을 들 수 있고, 질소함유 5원환 유도체로서는 벤조이미다졸환, 벤조트리아졸환, 피리디노이미다졸환, 피리미디노이미다졸환 및 피리다지노이미다졸환을 들 수 있으며, 특히 바람직하게는 하기 화학식 B로 표시되는 것이다.



화학식 B에서, L^B 는 2가 이상의 연결기를 나타내며, 예컨대 탄소, 규소, 질소, 붕소, 산소, 황, 금속(예컨대, 바륨, 베릴륨), 방향족 탄화수소환, 방향족 헤테로환 등을 들 수 있고, 이들 중 탄소원자, 질소원자, 규소원자, 붕소원자, 산소원자, 황원자, 아릴기 및 방향족 헤테로환기가 바람직하고, 탄소원자, 규소원자, 아릴기 및 방향족 헤테로환기가 더욱 바람직하다.

L^B 의 아릴기 및 방향족 헤테로환기는 치환기를 가질 수 있고, 치환기로서 바람직하게는 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 아릴기, 아미노기, 알콕시기, 아릴옥시기, 아실기, 알콕시카보닐기, 아릴옥시카보닐기, 아실옥시기, 아실아미노기, 알콕시카보닐아미노기, 아릴옥시카보닐아미노기, 설포닐아미노기, 설파오일기, 카밤오일기, 알킬싸이오기, 아릴싸이오기, 설포닐기, 할로젠원자, 사이아노기, 방향족 헤테로환기이며, 더욱 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 아릴옥시기, 할로젠원자, 사이아노기 및 방향족 헤테로환기이며, 더욱더 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 아릴옥시기 및 방향족 헤테로환기이며, 특히 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기 및 방향족 헤테로환기이다.

L^B 의 구체예로서는 이하에 나타내는 것을 들 수 있다.



화학식 B에 있어서의 X^{B2} 는 $-O-$, $-S-$ 또는 $=N-R^{B2}$ 를 나타낸다. R^{B2} 는 수소원자, 지방족 탄화수소기, 아릴기 또는 헤테로환기를 나타낸다.

R^{B2} 의 지방족 탄화수소기는, 직쇄, 분지쇄 또는 환상의 알킬기(바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 12, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 8의 알킬기이며, 예컨대 메틸, 에틸, 아이소프로필, tert-뷰틸, n-옥틸, n-데실, n-헥사데실, 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실 등을 들 수 있다), 알켄일기(바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 12, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 8의 알켄일기이며, 예컨대 바이닐, 알릴, 2-뷰텐일, 3-펜텐일 등을 들 수 있다), 알킨일기(바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 12, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 8의 알킨일기이며, 예컨대 프로파길, 3-펜틴일 등을 들 수 있다)이며, 알킬기이면 바람직하다.

R^{B2} 의 아릴기는 단환 또는 축합환이며, 바람직하게는 탄소수 6 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 6 내지 20, 더욱더 바람직하게는 탄소수 6 내지 12의 아릴기이며, 예컨대 페닐, 2-메틸페닐, 3-메틸페닐, 4-메틸페닐, 2-메톡시페닐, 3-트라이플루오로메틸페닐, 펜타플루오로페닐, 1-나프틸, 2-나프틸 등을 들 수 있다.

R^{B2} 의 헤테로환기는 단환 또는 축합환이며, 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 12, 더욱더 바람직하게는 탄소수 2 내지 10의 헤테로환기이며, 바람직하게는 질소원자, 산소원자, 황원자 및 셀레늄원자 중 적어도 하나를 포함하는 방향족 헤테로환기이다. 이 헤테로환기의 예로서는, 예컨대 피롤리딘, 피페리딘, 피페라진, 모폴린, 싸이오펜, 셀레노펜, 퓨란, 피롤, 이미다졸, 피라졸, 피리딘, 피라진, 피리다진, 피리미딘, 트리아졸, 트리아진, 인돌, 인다졸, 퓨린, 싸이아졸린, 싸이아졸, 싸이아다리아졸, 옥사졸린, 옥사졸, 옥사다리아졸, 퀴놀린, 아이소퀴놀린, 프탈라진, 나프틸리딘, 퀴녹살린, 퀴나졸린, 신놀린, 프테리딘, 아크리딘, 페난트롤린, 페나진, 테트라졸, 벤조이미다졸, 벤즈옥사졸, 벤조싸이아졸, 벤조트리아졸, 테트라자린텐, 카바졸, 아제핀 등을 들 수 있고, 바람직하게는 퓨란, 싸이오펜, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 트리아진, 퀴놀린, 프탈라진, 나프틸리딘, 퀴녹살린 및 퀴나졸린이며, 더욱 바람직하게는 퀴놀린이다.

R^{B2} 로 표시되는 지방족 탄화수소기, 아릴기 및 헤테로환기는 치환기를 가질 수 있으며, 치환기로서는 상기 L^B 로 표시되는 기의 치환기로서 든 것과 같고, 또한 바람직한 치환기도 같다.

R^{B2} 로서 바람직하게는 지방족 탄화수소기, 아릴기 또는 헤테로환기이며, 더욱 바람직하게는 지방족 탄화수소기(바람직하게는 탄소수 6 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 6 내지 20, 더욱더 바람직하게는 탄소수 6 내지 12의 것) 또는 아릴기이며, 더욱더 바람직하게는 지방족 탄화수소기(바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 12, 더욱더 바람직하게는 탄소수 2 내지 10의 것)이다.

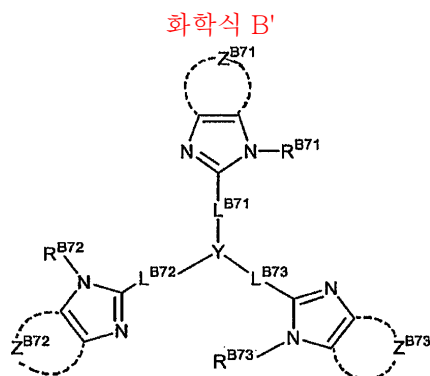
X^{B2} 로서 바람직하게는 $-O-$ 또는 $=N-R^{B2}$ 이며, 더욱 바람직하게는 $=N-R^{B2}$ 이며, 특히 바람직하게는 $=N-R^{B2}$ 이다.

Z^{B2} 는 방향족환을 형성하기 위해 필요한 원자군을 나타낸다. Z^{B2} 로 형성되는 방향족환은 방향족 탄화수소환 및 방향족 헤테로환 중 임의의 것일 수 있고, 구체예로서는, 예컨대 벤젠환, 피리딘환, 피라진환, 피리미딘환, 피리다진환, 트리아진환, 피롤환, 퓨란환, 싸이오펜환, 셀레노펜환, 텔로펜환, 이미다졸환, 싸이아졸환, 셀레나졸환, 텔라졸환, 싸이아다리아졸환, 옥사다리아졸환, 피라졸환 등을 들 수 있고, 바람직하게는 벤젠환, 피리딘환, 피라진환, 피리미딘환 및 피리다진환이며, 더욱 바람직하게는 벤젠환, 피리딘환 및 피라진환이며, 더욱더 바람직하게는 벤젠환 및 피리딘환이며, 특히 바람직하게는 피리딘환이다.

Z^{B2} 로 형성되는 방향족환은, 추가로 다른 환과 축합환을 형성할 수 있고, 치환기를 가질 수 있다. 치환기로서는 상기 L^B 로 표시되는 기의 치환기로서 든 것과 같고, 바람직하게는 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 아릴기, 아미노기, 알콕시기, 아릴옥시기, 아실기, 알콕시카보닐기, 아릴옥시카보닐기, 아실옥시기, 아실아미노기, 알콕시카보닐아미노기, 아릴옥시카보닐아미노기, 설폰일아미노기, 설파오일기, 카바오일기, 알킬싸이오기, 아릴싸이오기, 설폰일기, 할로젠원자, 사이아노기 및 헤테로환기이며, 더욱 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 아릴옥시기, 할로젠원자, 사이아노기 및 헤테로환기이며, 더욱더 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 아릴옥시기 및 방향족 헤테로환기이며, 특히 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 알콕시기 및 방향족 헤테로환기이다.

n^{B2} 는 1 내지 4의 정수이며, 2 내지 3이면 바람직하다.

상기 화학식 B로 표시되는 질소함유 5원환 유도체 중, 더욱 바람직한 것은 하기 화학식 B'로 표시되는 것이다.



화학식 B' 중, R^{B71} , R^{B72} 및 R^{B73} 은 각각 화학식 B에 있어서의 R^{B2} 와 같고, 또한 바람직한 범위도 같다.

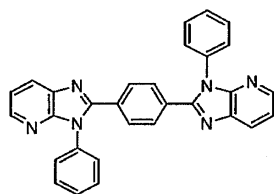
Z^{B71} , Z^{B72} 및 Z^{B73} 은 각각 화학식 B에 있어서의 Z^{B2} 와 같고, 또한 바람직한 범위도 같다.

L^{B71} , L^{B72} 및 L^{B73} 은 각각 연결기를 나타내며, 화학식 B에 있어서의 L^B 의 예를 2가로 한 것을 들 수 있으며, 바람직하게는 단일 결합, 2가 방향족 탄화수소환기, 2가 방향족 헤테로환기 및 이들의 조합으로 이루어지는 연결기이며, 더욱 바람직하게는 단일 결합이다. L^{B71} , L^{B72} 및 L^{B73} 은 치환기를 가질 수 있고, 치환기로서는 상기 화학식 B에 있어서의 L^B 로 표시되는 기의 치환기로서 든 것과 같고, 또한 바람직한 치환기도 같다.

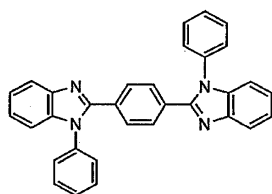
Y는 질소원자, 1,3,5-벤젠트라이일기 또는 2,4,6-트리아진트라이일기를 나타낸다. 1,3,5-벤젠트라이일기는 2,4,6-위에 치환기를 가질 수 있고, 치환기로서는, 예컨대 알킬기, 방향족 탄화수소환기, 할로젠원자 등을 들 수 있다.

화학식 B 또는 B'로 표시되는 질소함유 5원환 유도체의 구체예를 이하에 나타내지만, 이들 예시 화합물에 한정되는 것은 아니다.

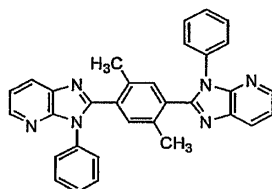
(B-1)



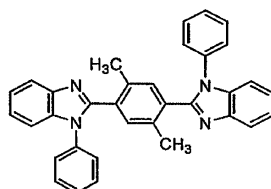
(B-5)



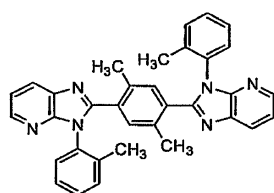
(B-2)



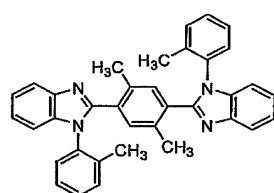
(B-6)



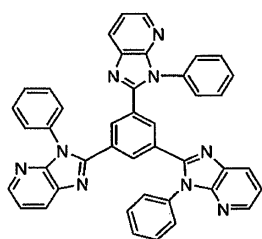
(B-3)



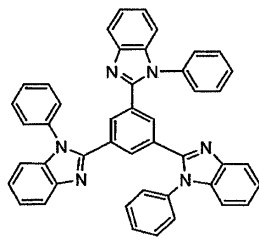
(B-7)



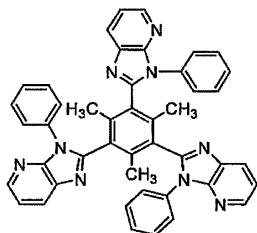
(B-4)



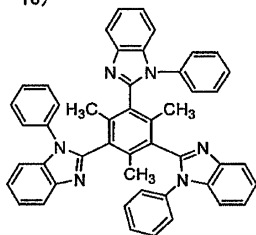
(B-8)



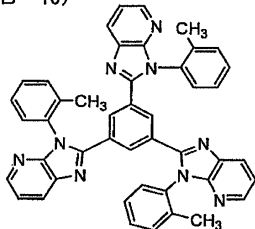
(B-9)



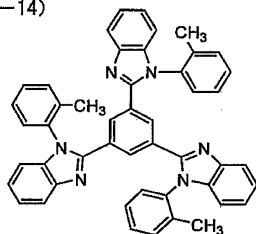
(B-13)



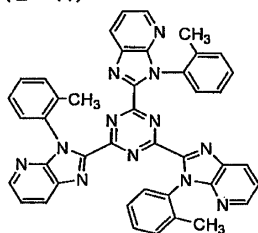
(B-10)



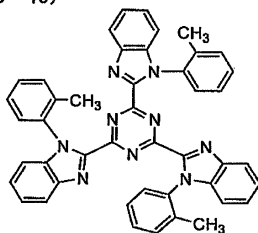
(B-14)



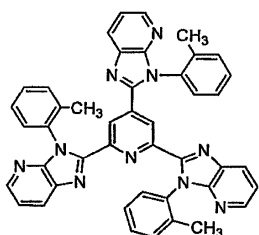
(B-11)



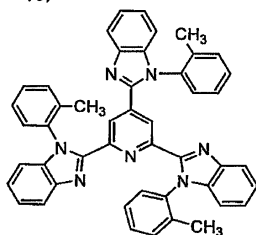
(B-15)



(B-12)



(B-16)



또한, 상기 전자 주입층의 구성성분으로서 상기 질소함유 환 유도체 외에 무기 화합물로서 절연체 또는 반도체를 사용하는 것이 바람직하다.

전자 주입층이 절연체나 반도체로 구성되어 있으면 전류의 누출을 효과적으로 방지하여 전자 주입성을 향상시킬 수 있다.

이러한 절연체로서는, 알칼리 금속 칼코게나이드, 알칼리 토금속 칼코게나이드, 알칼리 금속의 할로젠화물 및 알칼리 토금속의 할로젠화물로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 하나의 금속 화합물을 사용하는 것이 바람직하다.

전자 주입층이 이들 알칼리 금속 칼코게나이드 등으로 구성되어 있으면 전자 주입성을 더욱 향상시킬 수 있다는 점에서 바람직하다.

구체적으로, 바람직한 알칼리 금속 칼코게나이드로서는, 예컨대 Li_2O , LiO , Na_2S , Na_2Se 및 NaO 를 들 수 있고, 바람직한 알칼리 토금속 칼코게나이드로서는, 예컨대 CaO , BaO , SrO , BeO , BaS 및 CaSe 를 들 수 있다. 또한, 바람직한 알칼리 금속의 할로젠화물로서는, 예컨대 LiF , NaF , KF , LiCl , KCl 및 NaCl 등을 들 수 있다. 또한, 바람직한 알칼리 토금속의 할로젠화물로서는, 예컨대 CaF_2 , BaF_2 , SrF_2 , MgF_2 및 BeF_2 등의 불화물이나 불화물 이외의 할로젠화물을 들 수 있다.

또한, 반도체로서는 Ba , Ca , Sr , Yb , Al , Ga , In , Li , Na , Cd , Mg , Si , Ta , Sb 및 Zn 중 적어도 하나의 원소를 포함하는 산화물, 질화물 또는 산화질화물 등의 1종 단독 또는 2종 이상의 조합을 들 수 있다.

또한, 전자 주입층을 구성하는 무기 화합물이 미결정 또는 비정질의 절연성 박막인 것이 바람직하다.

전자 주입층이 이들 절연성 박막으로 구성되어 있으면, 보다 균질한 박막이 형성되기 때문에 다크 스팟 등의 화소 결함을 감소시킬 수 있다.

한편, 이러한 무기 화합물로서는, 상기 알칼리 금속 칼코게나이드, 알칼리 토금속 칼코게나이드, 알칼리 금속의 할로젠화물 및 알칼리 토금속의 할로젠화물 등을 들 수 있다.

또한, 본 발명에 있어서의 전자 주입층은 전술한 환원성 도펀트를 함유하고 있어도 바람직하다.

본 발명의 유기 EL 소자는 상기 발광층과 양극 사이에 정공 수송층을 갖고, 상기 정공 수송층이 아릴아민 유도체를 주성분으로서 함유하면 바람직하다.

또한, 정공 수송층에 함유되는 정공 수송 재료로서는, 3중항 에너지가 2.52 내지 3.7eV이면 바람직하고, 2.8 내지 3.7eV이면 더욱 바람직하다.

이러한 범위의 정공 수송 재료를 이용함으로써 발광층의 여기 에너지가 활성을 잃는 것을 막을 수 있다.

상기 정공 수송 재료로서는 하기 화학식 6 및 7로 표시되는 것이 바람직하다.



상기 식에서,

Ar⁷은 탄소수가 6 내지 40인 방향족기이고,

Ar⁸ 및 Ar⁹는 각각 수소원자 또는 탄소수가 6 내지 40인 방향족기이고,

m은 1 내지 6의 정수이다.



상기 식에서,

Ar¹⁰ 및 Ar¹⁶은 탄소수가 6 내지 40인 방향족기이고,

Ar¹¹ 내지 Ar¹⁵는 각각 수소원자 또는 탄소수가 6 내지 40인 방향족기이고,

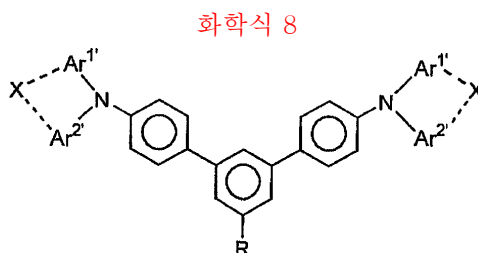
축합수 p, q, r 및 s는 각각 0 또는 1이다.

상기 화학식 6 및 7에 있어서, 탄소수가 6 내지 40인 방향족기 중, 바람직한 핵원자수 5 내지 40의 아릴기로서는, 페닐, 나프틸, 안트라닐, 페난트릴, 피렌일, 코로닐, 바이페닐, 터페닐, 피롤릴, 퓨란일, 싸이오페닐, 벤조싸이오페닐, 옥사다이하졸릴, 다이페닐안트라닐, 인돌릴, 카바졸릴, 피리딜, 벤조퀴놀릴, 플루오란텐일, 아세나프토플루오란텐일 등을 들 수 있다.

또한, 바람직한 핵원자수 5 내지 40의 아릴렌기로서는, 페닐렌, 나프틸렌, 안트라닐렌, 페난트릴렌, 피렌일렌, 코로닐렌, 바이페닐렌, 터페닐렌, 피롤릴렌, 퓨란일렌, 싸이오페닐렌, 벤조싸이오페닐렌, 옥사다이하졸릴렌, 다이페닐안트라닐렌, 인돌릴렌, 카바졸릴렌, 피리딜렌, 벤조퀴놀릴렌, 플루오란텐일렌, 아세나프토플루오란텐일렌 등을 들 수 있다.

한편, 탄소수가 6 내지 40인 방향족기는 추가로 치환기에 의해 치환될 수 있으며, 바람직한 치환기로서는 탄소수 1 내지 6의 알킬기(에틸기, 메틸기, i-프로필기, n-프로필기, s-뷰틸기, t-뷰틸기, 펜틸기, 헥실기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기 등), 탄소수 1 내지 6의 알콕시기(에톡시기, 메톡시기, i-프로폭시기, n-프로폭시기, s-뷰톡시기, t-뷰톡시기, 펜톡시기, 헥실옥시기, 사이클로펜톡시기, 사이클로헥실옥시기 등), 핵원자수 5 내지 40의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 아릴기로 치환된 아미노기, 핵원자수 5 내지 40의 아릴기를 갖는 에스테르기, 탄소수 1 내지 6의 알킬기를 갖는 에스테르기, 사이아노기, 나이트로기, 할로젠원자를 들 수 있다.

또한, 3중항 에너지가 2.8eV 이상인 정공 수송 재료로서는 하기 화학식 8 내지 10으로 표시되는 것이 바람직하다.



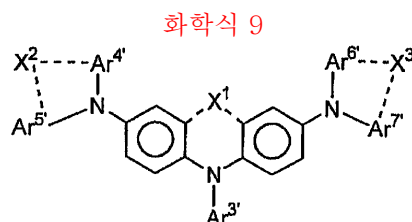
상기 식에서,

Ar^{1'}, Ar^{2'}는 탄소수 1 내지 6의 알킬기, 알콕시기 또는 페닐기에 의해 치환될 수 있는 핵탄소수 6 내지 18의 아릴기이고,

R은 탄소수 4 내지 6의 알킬기 또는 알콕시기, 또는 핵탄소수 6 내지 18의 아릴기이고,

X는 단일 결합, -O- 또는 -S-로 표시되는 연결기를 나타내고,

X는 존재하거나 존재하지 않을 수 있다.



상기 식에서,

Ar^{3'}는 치환기를 갖거나 갖지 않는 핵탄소수 6 내지 18의 아릴기를 나타내고,

Ar^{4'} 내지 Ar^{7'}는 각각 치환기를 갖거나 갖지 않는 핵탄소수 6 내지 18의 아릴렌기를 나타내고,

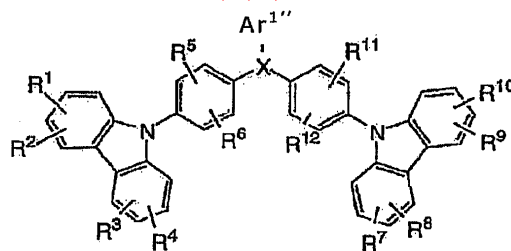
X¹은 단일 결합, -O-, -S-, -(CH₂)_n-(n은 1 내지 6의 정수) 또는 -C(CH₃)₂-인 연결기를 나타내며, 이들 연결기는 존재하거나 존재하지 않을 수 있고,

X² 및 X³은 각각 단일 결합, -O-, -S-, -(CH₂)_n-(n은 1 내지 6의 정수) 또는 -C(CH₃)₂-인 연결기를 나타내며, 이들은 동일하거나 상이할 수 있다.

화학식 8 및 9에 있어서의 Ar^{1'} 내지 Ar^{7'}, R, X 및 X¹ 내지 X³이 나타내는 각 기 및 치환기의 구체예로서는, 카바졸릴기, 탄소수 18 내지 60의 아릴카바졸릴기, 아자카바졸릴기, 탄소수 18 내지 60의 아릴아자카바졸릴기, 아크리딘일기, 페녹사진일기 또는 다이벤조아제핀일기이며 치환될 수 있다. 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 헤테로환기이다. 2가 또는 3가의 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소기

또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 헤테로환기이다. 치환 또는 비치환된 벤젠 잔기, 치환 또는 비치환된 싸이오렌 잔기, 치환 또는 비치환된 트라이아졸 잔기, 치환 또는 비치환된 플루오렌 잔기, 또는 치환 또는 비치환된 스파이로바이플루오렌 잔기이다.

화학식 10

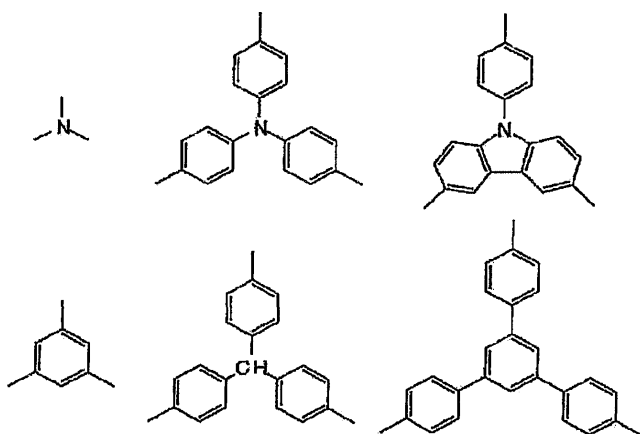


상기 식에서,

R^1 내지 R^{12} 는 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠원자, 알킬기, 아르알킬기, 알켄일기, 사이아노기, 아미노기, 아실기, 알콕시카보닐기, 카복실기, 알콕시기, 알킬아미노기, 아르알킬아미노기, 할로알킬기, 하이드록실기, 아릴옥시기, 치환기를 가질 수 있는 방향족 탄화수소환기 또는 방향족 헤테로환기를 나타내고,

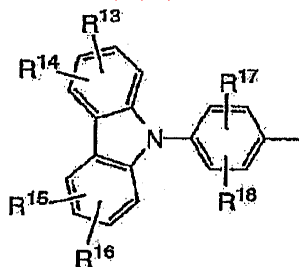
R^1 과 R^2 , R^3 과 R^4 , R^5 와 R^6 , R^7 과 R^8 , R^9 와 R^{10} , R^{11} 과 R^{12} 는 각각 인접하는 치환기끼리 환을 형성할 수도 있고,

X는 이하에 나타내는 3가의 연결기를 나타내고,



$Ar^{1''}$ 는 치환기를 가질 수 있는 방향족 탄화수소환기, 방향족 헤테로환기 또는 이하에 나타내는 화학식 11 중 어느 하나로 표시된다.

화학식 11



[상기 식에서,

R¹³ 내지 R¹⁸은 각각 독립적으로 수소원자, 할로젠원자, 알킬기, 아르알킬기, 알켄일기, 사이아노기, 치환기를 가질 수 있는 아미노기, 아실기, 알콕시카보닐기, 카복실기, 알콕시기, 알킬아미노기, 아르알킬아미노기, 할로알킬기, 하이드록실기, 아릴옥시기, 치환기를 가질 수 있는 방향족 탄화수소기 또는 방향족 헤테로환기를 나타내고,

R¹³과 R¹⁴, R¹⁵와 R¹⁶, R¹⁷과 R¹⁸은 각각 인접하는 치환기끼리 환을 형성할 수 있다]

화학식 10에 있어서의 Ar¹, R¹ 내지 R¹⁸이 나타내는 각 기 및 치환기의 구체예로서는, 카바졸릴기, 탄소수 18 내지 60의 아릴카바졸릴기, 아자카바졸릴기, 탄소수 18 내지 60의 아릴아자카바졸릴기, 아크리딘일기, 페녹사진일기 또는 다이벤조아제핀일기이며 치환될 수 있다. 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 헤테로환기이다. 2가 또는 3가의 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 헤테로환기이다. 치환 또는 비치환된 벤젠 잔기, 치환 또는 비치환된 싸이오펜 잔기, 치환 또는 비치환된 트라이아졸 잔기, 치환 또는 비치환된 플루오렌잔기 또는 치환 또는 비치환된 스파이로바이플루오렌 잔기이다.

본 발명에 있어서, 유기 EL 소자의 양극은 정공을 정공 수송층 또는 발광층에 주입하는 역할을 맡은 것으로, 4.5eV 이상의 일함수를 갖는 것이 효과적이다.

본 발명에 사용되는 양극 재료의 구체예로서는 산화인듐주석합금(ITO), 산화 주석(NESA), 금, 은, 백금, 구리 등을 적용할 수 있다.

또한, 음극으로서의 전자 주입층 또는 발광층에 전자를 주입할 목적으로 일함수가 작은 재료가 바람직하다.

음극 재료는 특별히 한정되지 않지만, 구체적으로는 인듐, 알루미늄, 마그네슘, 마그네슘-인듐 합금, 마그네슘-알루미늄 합금, 알루미늄-리튬 합금, 알루미늄-스칸듐-리튬 합금, 마그네슘-은 합금 등을 사용할 수 있다.

본 발명의 유기 EL 소자의 각 층의 형성 방법은 특별히 한정되지 않는다.

종래 공지된 진공 증착법, 스핀 코팅법 등에 의한 형성 방법을 이용할 수 있다.

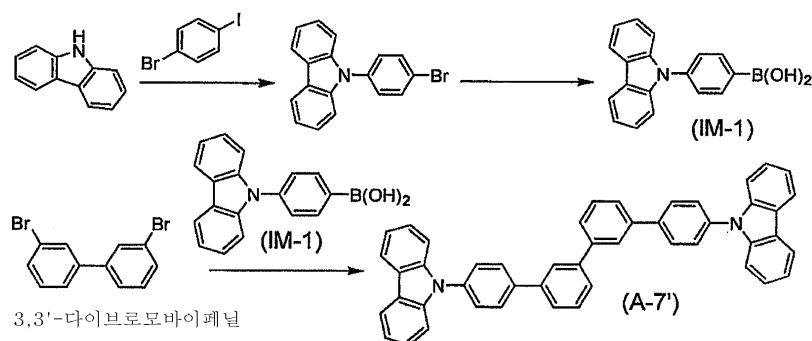
본 발명의 유기 EL 소자에 이용하는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 함유하는 유기 박막층은 진공 증착법, 분자선 증착법(MBE법) 또는 용매에 녹인 용액의 디핑법, 스핀 코팅법, 캐스팅법, 바 코팅법, 롤 코팅법 등의 도포법에 의한 공지된 방법으로 형성할 수 있다.

본 발명의 유기 EL 소자의 각 유기층의 막 두께는 특별히 제한되지 않지만, 일반적으로 막 두께가 지나치게 얇으면 편광 등의 결함이 생기기 쉽고, 반대로 지나치게 두꺼우면 높은 인가 전압이 요구되어 효율이 나빠지기 때문에, 보통은 수 nm내지 1μm의 범위가 바람직하다.

실시예

다음으로, 합성에 및 실시예를 이용하여 본 발명을 더욱 구체적으로 설명하지만, 본 발명은 이들에 한정되는 것이 아니다.

합성에 1 [화합물 (A-7')의 합성]



(1) 중간체 (IM-1)의 합성

4-브로모아이오도벤젠 25.4g(90mmol), 카바졸 10.0g(60mmol), 요오드화구리 0.1g(0.5mmol) 및 인산칼륨 26.7g (126mmol)을 1,4-다이옥세인 70ml에 현탁시키고, 트랜스-1,2-사이클로헥세인디아민 0.7ml(6mmol)를 가하여, 아르곤 분위기하 14시간 가열 환류시켰다.

반응 용액을 실온까지 냉각하고, 염화메틸렌 및 물을 가하여 2층으로 분리한 후, 유기층을 5% 염산 수용액 및 물로 순차적으로 세정하고, 무수 황산나트륨으로 건조했다.

유기 용매를 감압 증류 제거한 후, 에탄올 50ml를 가하여 석출된 결정을 여과하고, 에탄올 및 n-헥세인으로 순차적으로 세정하고, p-브로모페닐카바졸 17.8g(수율 92%)을 수득했다.

p-브로모페닐카바졸 8.0g(25mmol)을 톨루엔 50ml와 에터 50ml의 혼합 용액에 용해하고, 아르곤 분위기하 -40℃에서 n-뷰틸리튬헥세인 용액(1.6M) 21ml(32mmol)를 가하여 -40℃부터 0℃에서 1시간 교반했다.

다음으로, 반응 용액을 -70℃까지 냉각하고, 붕산트라이아이소프로필 17ml(74mmol)를 에터 25ml에 희석한 용액을 적하하고, -70℃에서 1시간 교반한 후, 실온까지 승온시켜 6시간 교반했다.

밤샘 방치 후, 추가로 반응 용액에 5% 염산 70ml를 적하하고, 실온에서 45분간 교반했다.

반응 용액이 2층으로 분리된 후, 유기층을 포화 식염수로 세정하고, 무수 황산나트륨으로 건조했다.

유기 용매를 감압 증류 제거한 후, 석출된 결정을 여과하고, 톨루엔-n-헥세인 혼합 용매로 세정하여 중간체 (IM-1) 4.0g (수율 56%)을 수득했다.

(2) 화합물 (A-7')의 합성

3,3'-다이브로모바이페닐 2.0g(6.4mmol), 중간체 (IM-1) 3.7g(12.8mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 300mg(0.25mmol), DME(다이메톡시에테인) 60ml 및 탄산나트륨 수용액 [탄산나트륨 4.0g(38mmol)을 물 35ml에 용해] 을 아르곤 분위기하 200ml의 플라스크에 넣고, 78℃에서 18시간 교반했다.

이 후, 실온까지 냉각하고, 석출된 결정을 여과하고, 물, 메탄올 및 헥세인으로 세정하여 4.0g의 조결정을 수득했다.

이를 실리카겔 컬럼으로 정제한 후, 톨루엔으로써 재결정화하여 1.2g의 담황색 결정을 수득했다.

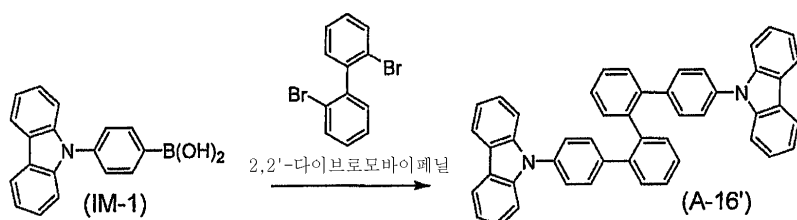
다음으로, 이를 400℃ 및 3.0×10^{-4} Pa에서 승화 정제하고, 정제 결정 (A-7') 820mg(1.3mmol, 수율 20%)을 수득했다. FD-MS(Field Desorption Mass Spectrum)의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{48}H_{32}N_2$ 에 대한 산출치=636, 측정치, $m/z=636(100)$

또한, HPLC(컬럼: ODS-3V, 이동상: 아세트나이트릴/테트라하이드로퓨란=85/15, 검출 UV 파장: 254nm, 온도: 40℃) 분석 결과, 이의 순도는 99.5%이었다.

이상으로부터, 수득된 결정은 목적물인 것을 확인했다.

합성예 2 [화합물 (A-16')의 합성]



500ml의 플라스크에 아르곤 분위기하에서, 2,2'-다이브로모바이페닐 5.0g(16.3mmol), 중간체 (IM-1) 10.1g(35.3mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 740mg(0.64mmol), DME(다이메톡시에테인) 150ml 및 탄산나트륨 수용액 [탄산나트륨 10.2g(96mmol)]을 물 120ml에 용해] 을 넣고, 78℃에서 15시간 교반했다.

이 후 실온까지 냉각하고, 석출된 결정을 여과했다.

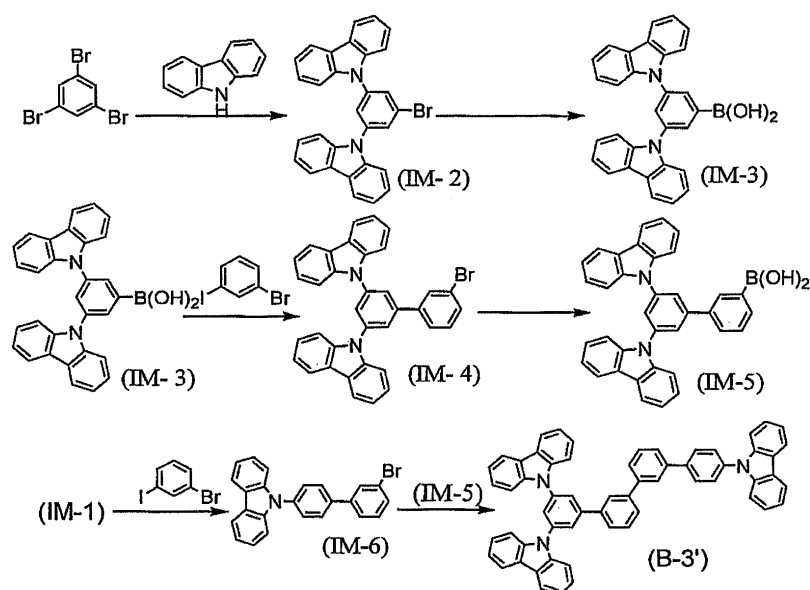
물, 메탄올 및 헥세인으로 순차적으로 세정하고, 이 후 톨루엔을 이용한 3회의 재결정을 거쳐 화합물 (A-16') 6.9g (10.8mmol, 수율 68%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: C₄₈H₃₂N₂에 대한 산출치=636, 측정치, m/z=636(100)

또한, HPLC(컬럼: ODS-3V, 이동상: 아세트나이트릴/테트라하이드로퓨란=85/15, 검출 UV 파장: 254nm, 온도: 40℃) 분석 결과, 이의 순도는 99.9%이었다.

이상으로부터, 수득된 결정은 목적물인 것을 확인했다.

합성예 3 [화합물 (B-3')의 합성]



(1) 중간체 (IM-2)의 합성

2ℓ 3구 플라스크에 아르곤 분위기하에서, 1,3,5-트라이브로모벤젠 70g(0.22mol), 카바졸 73.6g(0.44mol), 요오드화구리 4.2g(22mmol), 인산칼륨 187g(0.88mol), 트랜스-1,2-사이클로헥세인다이아민 25g(0.22mol) 및 1,4-다이옥세인 700 ml를 넣고, 104℃에서 16시간 교반했다.

이 후, 실온까지 냉각하고, 물 600ml 가하여 염화메틸렌으로 추출한 후, 유기층을 물로 세정하고, 이어서 무수 황산마그네슘으로 건조한 후, 여과하고, 슬러리 상태로 될 때까지 감압 농축했다.

수득된 고체를 여과하고, 여액을 추가로 감압 농축했다.

잔사를 톨루엔 300ml에 용해시키고, 실리카겔 컬럼으로써 정제하여 22g의 중간체 (IM-2)(45mmol, 수율 20%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{30}H_{19}BrN_2$ 에 대한 산출치=487, 측정치, $m/z=488(100)$, 486(95)

(2) 중간체 (IM-3)의 합성

300ml 3구 플라스크에 아르곤 분위기하에서, 상기 (IM-2) 9.0g(18mmol), 탈수 톨루엔 100ml 및 탈수 디에틸에터 100ml를 넣고, 교반하면서 $-10^{\circ}C$ 로 냉각했다.

여기에, n-부틸리튬(1.6M 헥세인 용액) 1.48ml(23mmol)를 10분에 걸쳐 적하했다.

또한, 2시간 교반 후, 붕산트라이아이소프로필 10.4g(56mmol)을 에터 25ml에 희석한 용액을 20분에 걸쳐 적하하고, 실온에서 8시간 교반했다.

이 후, $0^{\circ}C$ 로 냉각하고, 진한 염산 4ml를 물 100ml에 희석한 묽은 염산을 첨가하여 산성으로 했다.

다음으로, 100ml의 물 및 포화 식염수로 순차적으로 세정하고, 유기층을 무수 황산마그네슘으로써 건조했다.

이 용액을 여과한 후, 감압 농축하고, 수득된 점성 고체를 THF(테트라하이드로퓨란) 30ml에 용해하고, 헥세인 100ml를 가하여 감압하에 석출된 결정을 여과했다.

또한, 여액을 농축하고, 수득된 점성물을 THF에 용해하고, 헥세인을 가하여 동일 조작을 실시하여 합계 5.9g의 중간체 (IM-3)(13mmol, 수율 71%)를 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{30}H_{21}BN_2O_2$ 에 대한 산출치=452, 측정치, $m/z=452(100)$

(3) 중간체 (IM-4)의 합성

300ml 3구 플라스크에 아르곤 분위기하에서, 1-브로모-3-아이오도벤젠 5.0g(18mmol), 중간체 (IM-3) 8.1g(18mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) $[Pd(PPh_3)_4]$ 414mg(0.36mmol), 다이메톡시에테인 100ml 및 탄산나트륨 10중량% 수용액 58g(54mmol)을 넣고, $80^{\circ}C$ 에서 10시간 교반했다. 반응 종료 후, 실온까지 냉각하고, 톨루엔 100ml를 가하고, 물 및 포화 식염수로 순차적으로 유기층을 세정하고, 무수 황산마그네슘으로 건조한 후, 여과하고, 유기층을 감압 농축하여 황갈색의 고체를 수득했다.

이를 실리카겔 컬럼으로 정제하여 중간체 (IM-4) 9.2g(16mmol, 수율 88%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{37}H_{27}BrN_2$ 에 대한 산출치=579, 측정치, $m/z=580(100)$, 578(90)

(4) 중간체 (IM-5)의 합성

300ml 3구 플라스크에 아르곤 분위기하에서, 중간체 (IM-4) 6.0g(10mmol), 탈수 톨루엔 70ml 및 탈수 디에틸에터 70ml를 넣고, 교반하면서 $-10^{\circ}C$ 로 냉각했다.

여기에, n-부틸리튬(1.6M 헥세인 용액) 7.5ml(12mmol)를 10분에 걸쳐 적하했다.

또한, 2시간 교반 후, 붕산트라이아이소프로필 5.6g(30mmol)을 에터 20ml에 희석한 용액을 10분에 걸쳐 적하하고, 실온에서 6시간 교반했다.

이 후, $0^{\circ}C$ 로 냉각하고, 진한 염산 4ml를 물 100ml에 희석한 묽은 염산을 첨가하여 산성으로 했다.

다음으로, 70ml의 물 및 포화 식염수로 순차적으로 세정하고, 유기층을 무수 황산마그네슘으로써 건조했다.

이 용액을 여과한 후, 감압 농축하고, 수득된 점성 고체를 THF 20ml에 용해하고, 헥세인 70ml를 가하고, 감압하에 석출된 결정을 여과했다.

추가로, 여액을 농축하고, 수득된 점성물을 THF에 용해하고, 헥세인을 가하여 동일 조작을 실시하여 합계 4.1g의 중간체 (IM-5)(7.5mmol, 수율 75%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{37}H_{29}BN_2O_2$ 에 대한 산출치=544, 측정치, $m/z=544(100)$

(5) 중간체 (IM-6)의 합성

300ml의 3구 플라스크에 아르곤 분위기하에서, 1-브로모-3-아이오도벤젠 5.0g(18mmol), 중간체 (IM-1) 5.2g (18mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) $[Pd(PPh_3)_4]$ 414mg(0.36mmol), 다이메톡시에테인 100ml 및 탄산나트륨 10중량% 수용액 58g(54mmol)을 넣고, 80℃에서 12시간 교반했다.

반응 종료 후, 실온까지 냉각하고, 톨루엔 100ml를 가하고, 물 및 포화 식염수로 순차적으로 유기층을 세정하고, 무수 황산마그네슘으로 건조한 후, 여과하고, 유기층을 감압 농축하여 황갈색의 고체를 수득했다.

이를 실리카겔 컬럼으로 정제하여 중간체 (IM-6) 5.1g(13mmol, 수율 72%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{24}H_{16}BrN$ 에 대한 산출치=398, 측정치, $m/z=399(100)$, 397(93)

(6) 화합물 (B-3')의 합성

100ml 플라스크에 아르곤 분위기하에서, 실온에서 상기 (IM-6) 2.5g(6.3mmol), 중간체 (IM-5) 3.7g(6.9mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) $[Pd(PPh_3)_4]$ 145mg(0.13mmol), 다이메톡시에테인 50ml 및 탄산나트륨 수용액 [탄산나트륨 2g(19mmol)을 물 10ml에 용해] 을 넣고, 78℃에서 15시간 교반했다.

반응 종료 후, 실온으로 냉각하고, 석출된 결정을 여과했다.

수득된 석출 결정을 물, 메탄올 및 헥세인으로 세정하여 결정 3.7g을 수득했다.

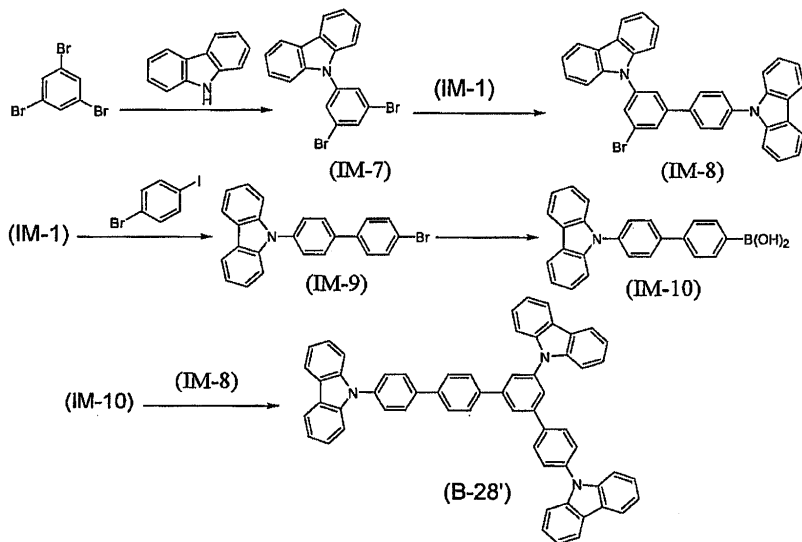
다음으로, 톨루엔을 이용하여 3회 재결정화를 실시하여 화합물 (B-3') 2.8g(3.5mmol, 수율 5.5%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{60}H_{39}N_3$ 에 대한 산출치=801, 측정치, $m/z=801(100)$

또한, HPLC(컬럼: ODS-3V, 이동상: 아세토나이트릴/테트라하이드로퓨란=85/15, 검출 UV 파장: 254nm, 온도: 40℃) 분석 결과, 이의 순도는 99.5%이었다.

이상으로부터, 수득된 결정은 목적물인 것을 확인했다.

합성에 4 [화합물 (B-28')의 합성]



(1) 중간체 (IM-7)의 합성

500ml 3구 플라스크에 아르곤 분위기하에서, 1,3,5-트라이브로모벤젠 30g(94mmol), 카바졸 18.8g(60mmol), 요오드화구리 0.6g(3mmol), 인산칼륨 25.5g (120mmol), 트랜스-1,2-사이클로헥세디아민 3.4g(30mmol) 및 1,4-다이옥세인 200ml를 넣고, 105℃에서 교반하면서 16시간 가열 환류했다.

이 후, 실온까지 냉각하고, 얼음 1.50ml를 가하여 염화메틸렌으로 추출한 후, 유기층을 물로 세정하고, 무수 황산마그네슘으로 건조한 후, 여과하고, 슬러리 상태로 될 때까지 감압 농축했다.

수득된 고체를 여과하고, 여액을 추가로 감압 농축했다.

잔사를 톨루엔에 용해하고, 실리카겔 컬럼으로써 정제하여 중간체 (IM-7) 17g(42mmol, 수율 71%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{18}H_{11}Br_2N$ 에 대한 산출치=401, 측정치, $m/z=401(M^+, 100)$

(2) 중간체 (IM-8)의 합성

300ml 플라스크에 아르곤 기류하에서, 상기 (IM-7) 5.0g(12.5mmol), 중간체 (IM-1) 3.9g(13.7mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 300mg(0.25mmol), DME(다이메톡시에테인) 60ml 및 탄산나트륨 수용액 [탄산나트륨 4.0g (38mmol)을 물 35ml에 용해] 을 넣고, 78℃에서 14시간 교반했다.

이 후, 실온까지 냉각하고, 석출된 결정을 여과하고, 물, 메탄올 및 헥세인으로 세정하여 조결정 6.1g을 수득했다.

이를 실리카겔 컬럼으로 정제한 후, 톨루엔을 이용하여 재결정화하여 중간체 (IM-8) 5.2g(9.2mmol, 수율 74%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{36}H_{23}BrN_2$ 에 대한 산출치=562, 측정치, $m/z=562(M^+, 100)$

(3) 중간체 (IM-9)의 합성

300ml 플라스크에 아르곤 기류하에서, 4-아이오도브로모벤젠 5.5g(19mmol), 중간체 (IM-1) 5.6g(19mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 450mg(0.39mmol), DME(다이메톡시에테인) 120ml, 탄산나트륨 수용액 [탄산나트륨 6.2g (58mmol)을 물 30ml에 용해] 을 넣고, 78℃에서 16시간 교반했다.

이 후, 실온까지 냉각하고, 석출된 결정을 여과하고, 물, 메탄올 및 헥세인으로 세정하여 조결정 6.8g을 수득했다.

이를 톨루엔을 이용하여 재결정화하여 중간체 (IM-9) 6.7g(17mmol, 수율 89%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{24}H_{16}BrN$ 에 대한 산출치=397, 측정치, $m/z=397(M^+, 100)$

(4) 중간체 (IM-10)의 합성

500ml 플라스크에 아르곤 기류하에서, 중간체 (IM-9) 6.2g(16mmol) 및 탈수 THF 200ml를 넣고, $-70^{\circ}C$ 로 냉각하고, n-부틸리튬(1.6M 헥세인 용액) 12ml를 적하하고, $-65^{\circ}C$ 에서 1.5시간 교반했다.

이 후, 보론산트라이아이소프로필에터 8.7g(46mmol)을 적하하고, 서서히 실온으로 되돌려 8시간 교반했다.

플라스크를 $0^{\circ}C$ 로 냉각하고, 진한 염산 50ml 및 브롬화테트라부틸암모늄 125mg을 첨가하고, 추가로 실온에서 5시간 교반했다.

석출된 결정을 여과하고, 물 및 헥세인으로 세정하고, 톨루엔으로 재결정화하여 중간체 (IM-10) 3.4g(9.4mmol)을 수득했다.

(5) 화합물 (B-28')의 합성

300ml 플라스크에 아르곤 기류하에서, 중간체 (IM-10) 3.2g(8.8mmol), (IM-8) 4.9g(8.8mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 203mg(0.18mmol), DME(다이메톡시에테인) 80ml 및 탄산나트륨 수용액 [탄산나트륨 2.9g(27mmol)을 물 15ml에 용해] 을 넣고, $78^{\circ}C$ 에서 15시간 교반했다.

이 후, 실온까지 냉각하고, 석출된 결정을 여과하고, 물, 메탄올 및 헥세인으로 세정하여 조결정 4.8g을 수득했다.

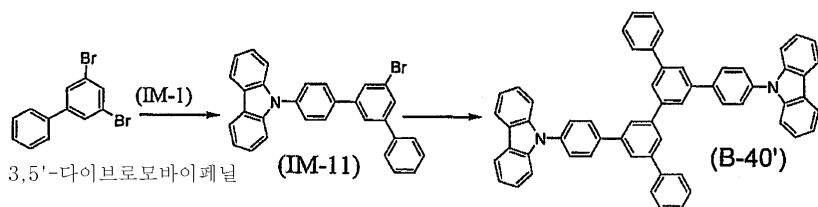
이를 톨루엔을 이용하여 재결정화하여 화합물 (B-28') 2.5g(3.1mmol, 수율 35%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{60}H_{39}N_3$ 에 대한 산출치=801, 측정치, $m/z=801(100)$

또한, HPLC(컬럼: ODS-3V, 이동상: 아세트나이트릴/테트라하이드로퓨란=85/15, 검출 UV 파장: 254nm, 온도: $40^{\circ}C$) 분석 결과, 이의 순도는 99.3%이었다.

이상으로부터, 수득된 결정은 목적물인 것을 확인했다.

합성예 5 [화합물 (B-40')]의 합성



(1) 중간체 (IM-11)의 합성

200ml 플라스크에 아르곤 기류하에서, 3,5-다이브로모바이페닐 3.5g(11.2mmol), 중간체 (IM-1) 3.2g(11.2mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 260mg (0.22mmol), DME(다이메톡시에테인) 60ml 및 탄산나트륨 수용액 [탄산나트륨 3.6g(34mmol)을 물 40ml에 용해] 을 넣고, $78^{\circ}C$ 에서 15시간 교반했다.

이 후, 실온까지 냉각하고, 석출된 결정을 여과하고, 아세트산에틸로 세정한 후, 톨루엔에 용해하고, 물 및 포화 식염수로 세정하고, 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조하고, 용매를 증류 제거하고, 실리카겔 컬럼으로 정제하여 점성물 (IM-11) 2.9g(6.1mmol, 수율 54%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{30}H_{20}BrN$ 에 대한 산출치=475, 측정치, $m/z=475(100)$

(2) 화합물 (B-40')의 합성

300ml 플라스크에 아르곤 기류하에서, 중간체 (IM-11) 2.4g(5.0mmol), 2,2-바이피리딜 580mg(0.37mmol), 1,5-사이클로옥타다이엔 1.1g(10mmol), 다이사이클로옥타다이엔일 니켈 1.0g(0.37mmol) 및 탈수 DMF 120ml를 넣고, 60℃에서 14시간 교반했다.

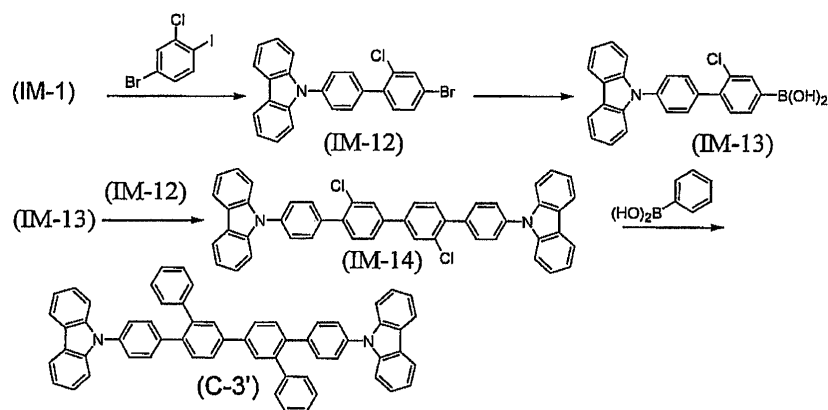
반응 종료 후, 물 120ml를 넣고, 석출된 결정을 여과하고, 물, 메탄올 및 헥세인으로 세정한 후, 톨루엔으로 재결정화하여 화합물 (B-40') 1.8g(2.3mmol, 수율 46%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{60}H_{40}N_2$ 에 대한 산출치=788, 측정치, $m/z=788(100)$

또한, HPLC(컬럼: ODS-3V, 이동상: 아세트나이트릴/테트라하이드로퓨란=85/15, 검출 UV 파장: 254nm, 온도: 40℃) 분석 결과, 이의 순도는 99.8%이었다.

이상으로부터, 수득된 결정은 목적물인 것을 확인했다.

합성에 6 「화합물 (C-3')의 합성」



(1) 중간체 (IM-12)의 합성

1ℓ 플라스크에 아르곤 기류하에서, 실온에서 3-클로로-4-아이오도벤젠 19.4g(61mmol), 중간체 (IM-1) 17.6g(61mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 1.4g(1.2mmol), DME(다이메톡시에테인) 444ml 및 탄산나트륨 수용액 [탄산나트륨 19.4g(183mmol)을 물 92ml에 용해] 을 넣고, 78℃에서 15시간 교반했다.

이 후, 실온까지 냉각하고, 석출된 결정을 여과하고, 물, 메탄올 및 헥세인으로 세정한 후, 활성탄 처리 후, 톨루엔으로부터 재결정화하여 중간체 (IM-12) 12.2g(28mmol, 수율 46%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{24}H_{15}BrClN$ 에 대한 산출치=431, 측정치, $m/z=431(100)$

(2) 중간체 (IM-13)의 합성

300ml 플라스크에 아르곤 분위기하에서, 중간체 (IM-12) 6g(14mmol), 탈수 톨루엔 60ml 및 탈수 에터 60ml를 넣고, -40℃로 냉각하고, 교반하면서 n-부틸리튬(1.6M 헥세인 용액) 9.4ml(15mmol)를 10분에 걸쳐 적하했다.

또한, 2시간 교반 후, 붕산트라이아이소프로필 8g(42mmol)을 에터 20ml에 희석한 용액을 10분에 걸쳐 적하하고, 실온에서 6시간 교반했다.

이 후 0℃로 냉각하고, 진한 염산 45ml를 20ml의 물로 희석한 염산을 가하여 추가로 4시간 교반했다.

톨루엔으로 추출하고, 분액 깔대기로써 용액을 70ml의 물 및 포화 식염수로 순차적으로 세정하고, 유기층을 무수 황산마그네슘으로써 건조했다.

이 용액을 여과한 후, 감압 농축하고, 수득된 점성 고체를 THF 20ml에 용해하고, 헥세인 70ml를 가하고, 감압하에 석출된 결정을 여과하고, 중간체 (IM-13) 4.1g(10mmol, 수율 71%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{24}H_{17}BClNO_2$ 에 대한 산출치=397, 측정치, $m/z=397(100)$

(3) 중간체 (IM-14)의 합성

300ml 플라스크에 아르곤 분위기하에서, 중간체 (IM-13) 4.0g(10mmol), 중간체 (IM-12) 4.3g(10mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 230mg(0.2mmol), DME(다이메톡시에테인) 120ml 및 탄산나트륨 수용액 [탄산나트륨 3.18g(30mmol)을 물 18ml에 용해] 을 넣고, 78℃에서 15시간 교반했다.

이 후, 실온까지 냉각하고, 석출된 결정을 여과하고, 물, 메탄올 및 헥세인으로 세정한 후, 톨루엔으로부터 재결정화하여 중간체 (IM-14) 4.9g(7.0mmol, 수율 70%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{48}H_{30}Cl_2N_2$ 에 대한 산출치=704, 측정치, $m/z=704(100)$

(4) 화합물 (C-3')의 합성

300ml 플라스크에 아르곤 분위기하에서, 중간체 (IM-14) 4.8g(6.8mmol), 페닐보론산(41mmol), $Ni(PPh_3)_2Cl_2$ 650mg(1.0mmol), 트라이페닐포스핀 580mg(2.0mmol), $K_3PO_4 \cdot nH_2O$ 21.6g(102mmol) 및 탈수 톨루엔 100ml를 넣고, 100℃에서 24시간 교반했다.

반응액을 여과하고, 여액을 컬럼에 걸어 농축물을 아세트산에틸 및 톨루엔으로부터 재결정화하여 화합물 (C-3') 2.2g(2.8mmol, 수율 41%)을 수득했다. FD-MS의 측정 결과를 이하에 나타낸다.

FD-MS: $C_{60}H_{40}N_2$ 에 대한 산출치=788, 측정치, $m/z=788(100)$

또한, HPLC(컬럼: ODS-3V, 이동상: 아세트나이트릴/테트라하이드로퓨란=85/15, 검출 UV 파장: 254nm, 온도: 40℃) 분석 결과, 이의 순도는 99.5%이었다.

이상으로부터, 수득된 결정은 목적물인 것을 확인했다.

실시예 1

25mm×75mm×0.7mm 두께의 ITO 투명 전극 부착 유리 기판을 아이소프로필 알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 실시한 후, UV 오존 세정을 30분간 실시했다.

세정 후의 투명 전극 부착 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극이 형성되어 있는 측면 상에 상기 투명 전극을 도포하도록 막 두께 10nm의 구리프탈로시아닌막(이하, 「CuPc막」으로 약기함)을 성막했다. 이 CuPc막은 정공 주입층으로서 기능한다. CuPc막의 성막에 이어서, 이 막 상에 막 두께 30nm의 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]바이페닐막(이하, 「 α -NPD막」으로 약기함)을 성막했다. 이 α -NPD막은 정공 수송층으로서 기능한다. 또한, 이 α -NPD막 상에 막 두께 30nm의 상기 화합물 (A-7')을 호스트 재료로서 증착하여 발광층을 성막했다. 동시에, 인광 발광성의 Ir 금속 착체 도펀트로서 트리스(2-페닐피리딘)Ir (이하, 「Ir(ppy)₃」으로 약기함)을 첨가했다.

발광층 중에 있어서의 Ir(ppy)_3 의 농도는 5중량%로 했다.

이 막은 발광층으로서 기능한다.

이 막 상에 막 두께 10nm의 (1,1'-비스페닐)-4-올레이트비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이트)알루미늄(이하, 「BAIq막」으로 약기함)을 성막했다.

이 BAIq막은 정공 장벽층으로서 기능한다.

또한, 이 막 상에 막 두께 40nm의 8-하이드록시퀴놀린의 알루미늄 착체(이하, 「Alq막」으로 약기함)를 성막했다.

이 Alq막은 전자 주입층으로서 기능한다.

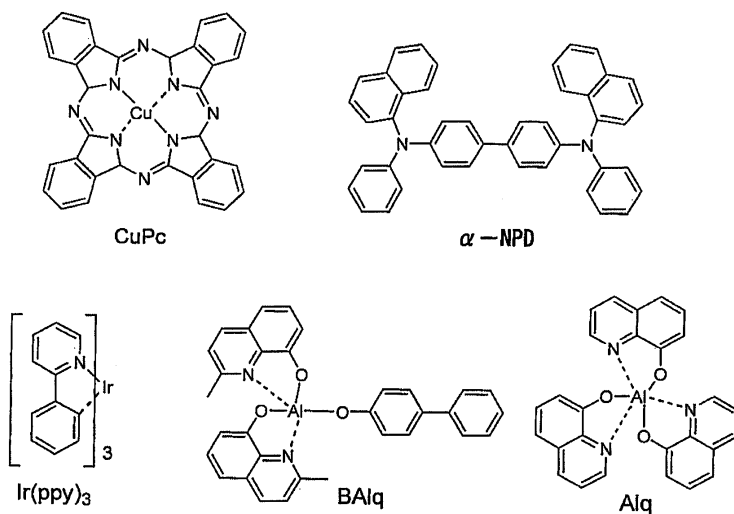
이 후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm의 두께로 증착하고, 이어서 알루미늄을 150nm의 두께로 증착했다.

이 Al/LiF는 음극으로서 작용한다.

이렇게 하여 유기 EL 소자를 제작했다.

이 소자에 대하여, 통전 시험을 실시한 바, 전압 5.8V, 전류밀도 0.23mA/cm^2 로써, 휘도 101cd/m^2 의 녹색 발광이 얻어지고, 색도 좌표는 (0.29, 0.64)이고, 발광 효율은 43.2cd/A 이었다.

또한, 이 소자를 초기 휘도 5000cd/m^2 로써 정전류 구동시켜 휘도 2500cd/m^2 까지 반감하는 시간(반감수명)은 1126시간이었다.



실시예 2 내지 6

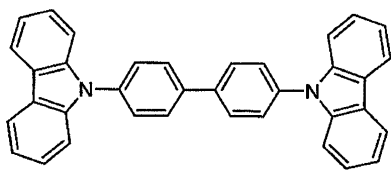
발광층의 호스트 재료 화합물 (A-7') 대신에 표 1에 기재된 화합물을 사용하는 것 외에는 실시예 1과 같은 방법으로 유기 EL 소자를 제작했다.

실시예 1과 같이 하여, 전압, 전류밀도, 휘도, 발광 효율, 색도 및 반감수명을 측정하였다. 결과를 표 1에 나타낸다.

비교예 1

발광층의 호스트 재료 화합물 (A-7') 대신에 공지된 하기 화합물 (CBP)을 사용하는 것 외에는 실시예 1과 같은 방법으로 유기 EL 소자를 제작했다.

실시예 1과 같이 하여, 전압, 전류밀도, 휘도, 발광 효율, 색도 및 반감수명을 측정했다. 결과를 표 1에 나타낸다.

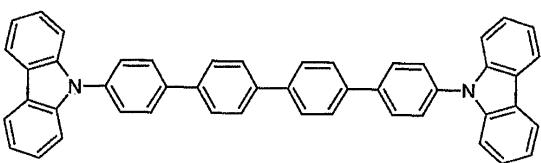


화합물 (CBP)

비교예 2

발광층의 호스트 재료 화합물 (A-7') 대신에 공지된 하기 화합물 (CTP)을 사용하는 것 외에는 실시예 1과 같은 방법으로 유기 EL 소자를 제작했다.

실시예 1과 같이 하여, 전압, 전류밀도, 휘도, 발광 효율, 색도 및 반감수명을 측정했다. 결과를 표 1에 나타낸다.



화합물 (CTP)

[표 1]

	발광층의 호스트 재료	전압 (V)	전류 밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/ m ²)	발광 효율 (cd/A)	색도좌표 (x,y)	반감수명 (시간)
실시예 1	A-7'	5.8	0.23	101	43.2	(0.29, 0.64)	1126
실시예 2	A-16'	5.6	0.25	99	39.7	(0.32, 0.61)	657
실시예 3	B-3'	5.5	0.23	104	46.3	(0.32, 0.61)	1073
실시예 4	B-28'	5.4	0.24	105	43.5	(0.29, 0.64)	912
실시예 5	B-40'	5.5	0.23	101	44.7	(0.30, 0.64)	1086
실시예 6	C-3'	5.8	0.26	100	38.9	(0.31, 0.61)	719
비교예 1	CBT	5.4	0.31	101	32.6	(0.32, 0.61)	305
비교예 2	CTP	6.1	0.78	104	13.4	(0.33, 0.61)	62

표 1의 결과로부터, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 이용한 유기 EL 소자는 고효율이고 장수명인 녹색 발광이 얻어지는 것으로 밝혀졌다.

실시예 7

25mm×75mm×0.7mm 두께의 ITO 투명 전극 부착 유리 기판을 아이소프로필 알코올 중에서 초음파 세정을 5분간 실시한 후, UV 오존 세정을 30분간 실시했다.

세정 후의 투명 전극 부착 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 우선 투명 전극이 형성되어 있는 측면 상에 상기 투명 전극을 도포하도록 막 두께 10nm의 상기 CuPc막을 성막했다. 이 CuPc막은 정공 주입층으로서 기능한다. CuPc막의 성막에 이어서, 이 막 상에 막 두께 30nm의 1,1'-비스[4-N,N-다이(파라톨릴)아미노페닐]사이클로헥세인막(이하, 「TPAC 막」으로 약기함)을 성막했다.

이 TPAC막은 정공 수송층으로서 기능한다.

또한, 이 TPAC막 상에 막 두께 30nm의 화합물 (B-3')을 증착하여 발광층을 성막했다.

동시에, 인광성의 Ir 금속 착체로서, Ir 비스[(4,6-다이플루오로페닐)-피리디네이토-N,C^{2'}]피콜리네이트(이하, 「FIrpic」로 약기함)를 첨가했다.

발광층 중에 있어서의 FIrpic의 농도는 7중량%로 했다. 이 막은 발광층으로서 기능한다.

이 막 상에 막 두께 30nm의 상기 Alq막을 성막했다.

이 Alq막은 전자 주입층으로서 기능한다.

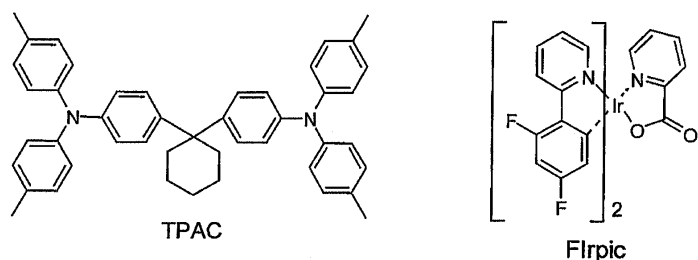
이 후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm의 두께로 증착하고, 이어서 알루미늄을 150nm의 두께로 증착했다.

이 Al/LiF는 음극으로서 작용한다.

이렇게 하여 유기 EL 소자를 제작했다.

이 소자에 대하여, 통전 시험을 실시한 바, 전압 7.8V, 전류밀도 0.47mA/cm²로써, 휘도 101cd/m²의 청색 발광이 얻어지고, 색도 좌표는 (0.17, 0.37)이고, 발광 효율은 21.6cd/A이었다.

또한, 이 소자를 초기 휘도 500cd/m²로써 정전류 구동시켜 휘도 250cd/m²까지 반감하는 시간(반감수명)은 71시간이었다.



실시예 8

실시예 1에 있어서, 발광층 중의 화합물 (B-3') 대신에 화합물 (B-40')을 사용하는 것 외에는 실시예 1과 같은 방법으로 유기 EL 소자를 제작했다.

실시예 1과 같이 하여, 전압, 전류밀도, 휘도, 발광 효율, 색도 및 반감수명을 측정했다. 결과를 표 2에 나타낸다.

비교예 3

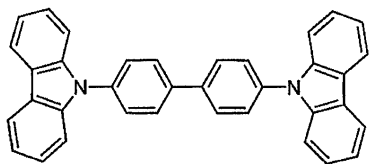
발광층의 호스트 재료 화합물 (A-7') 대신에 공지된 상기 화합물 (CBP)을 사용하는 것 외에는 실시예 1과 같은 방법으로 유기 EL 소자를 제작했다.

실시예 1과 같이 하여, 전압, 전류밀도, 휘도, 발광 효율, 색도 및 반감수명을 측정했다. 결과를 표 2에 나타낸다.

비교예 4

발광층의 호스트 재료 화합물 (A-7') 대신에 공지된 하기 화합물 (CzTT)을 사용하는 것 외에는 실시예 1과 같은 방법으로 유기 EL 소자를 제작했다.

실시예 1과 같이 하여, 전압, 전류밀도, 휘도, 발광 효율, 색도 및 반감수명을 측정했다. 결과를 표 2에 나타낸다.



화합물 (CBP)

비교예 5

발광층의 호스트 재료 화합물 (A-7') 대신에 공지된 상기 화합물(CTP)을 사용하는 것 외에는 실시예 1과 같은 방법으로 유기 EL 소자를 제작했다.

실시예 1과 같이 하여, 전압, 전류밀도, 휘도, 발광 효율, 색도 및 반감수명을 측정했다. 결과를 표 2에 나타낸다.

[표 2]

	발광층의 호스트 재료	전압 (V)	전류 밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/ m ²)	발광 효율 (cd/A)	색도좌표 (x,y)	반감수명 (시간)
실시예 7	B-3'	7.8	0.47	101	21.6	(0.17, 0.37)	71
실시예 8	B-40'	7.5	0.44	103	23.6	(0.16, 0.37)	63
비교예 3	CBP	7.8	1.70	98	5.8	(0.16, 0.37)	19
비교예 4	CzTT	8.3	0.86	101	11.8	(0.16, 0.37)	9
비교예 5	CTP	12.4	10.9	87	0.8	(0.16, 0.37)	2

표 2의 결과로부터, 본 발명의 유기 EL 소자용 재료를 이용한 유기 EL 소자는 고효율이고 장수명인 청색 발광이 수득되는 것으로 밝혀졌다.

산업상 이용 가능성

본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물로 이루어지는 유기 EL 소자용 재료를 이용하면, 발광 효율이 높고 화소 결함이 없고 내열성이 우수하며 수명이 긴 유기 EL 소자가 수득된다. 이 때문에, 본 발명의 유기 EL 소자는 각종 전자 기기의 광원 등으로서 매우 유용하다.

专利名称(译)	有机电致发光器件材料和使用其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020060121243A	公开(公告)日	2006-11-28
申请号	KR1020067012626	申请日	2004-12-24
申请(专利权)人(译)	高山出光株式会社		
[标]发明人	IWAKUMA TOSHIHIRO 이와쿠마도시히로 KAWAMURA HISAYUKI 가와무라히사유키 IKEDA HIDETSUGU 이케다히데츠구 HOSOKAWA CHISHIO 호소카와지시오 ARAKANE TAKASHI 아라카네다카시 NAKAMURA HIROAKI 나카무라히로아키		
发明人	이와쿠마도시히로 가와무라히사유키 이케다히데츠구 호소카와지시오 아라카네다카시 나카무라히로아키		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/00 H01L51/50 H05B33/14		
CPC分类号	H05B33/14 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1044 C09K2211/1059 H01L51/0059 H01L51/0072 H01L51/0078 H01L51/0081 H01L51/0085 H01L51/5016 H01L51/5092 H01L2251/308 Y10S428/917		
优先权	2003432759 2003-12-26 JP		
其他公开文献	KR101153063B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

公开了一种用于有机电致发光器件的材料，其由具有特定结构的化合物组成。还公开了一种有机电致发光器件，其包括由一层或多层组成的有机薄膜层，所述一层或多层包括至少一个发光层并插入在阴极和阳极之间，其中至少一层有机薄膜层含有用于有机电致发光器件的材料。用于有机电致发光器件的材料能够提供具有高发光效率，优异的耐热性和长寿命同时没有像素缺陷的有机电致发光器件。还公开了一种使用这种材料用于有机电致发光器件的有机电致发光器件。©KIPO和WIPO 2007

