



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2011-0018378  
 (43) 공개일자 2011년02월23일

(51) Int. Cl.  
*C09K 11/06* (2006.01) *C07F 15/00* (2006.01)  
*H05B 33/10* (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2010-7028558  
 (22) 출원일자(국제출원일자) 2009년06월23일  
 심사청구일자 없음  
 (85) 번역문제출일자 2010년12월20일  
 (86) 국제출원번호 PCT/JP2009/061367  
 (87) 국제공개번호 WO 2009/157430  
 국제공개일자 2009년12월30일  
 (30) 우선권주장  
 JP-P-2008-163037 2008년06월23일 일본(JP)

(71) 출원인  
 스미토모 가가꾸 가부시키키가이샤  
 일본국 도쿄도 주오구 신카와 2쵸메 27반 1고  
 수메이션 컴퍼니 리미티드  
 일본 도쿄도 104-8260 추오쿠 신카와 2-쵸메 27-1  
 (72) 발명자  
 아사다, 고헤이  
 일본 이바라끼켄 츠쿠바시 가스가 2-40-1-501  
 고토, 오사무  
 일본 이바라끼켄 츠쿠바시 가스가 2-40-1-404  
 세끼네, 치즈  
 일본 도쿄도 추오쿠 니혼마시호리도메쵸  
 2-2-4-801  
 (74) 대리인  
 이석재, 장수길

전체 청구항 수 : 총 23 항

**(54) 금속 착체 및 유기 화합물을 함유하는 조성물, 및 상기 조성물을 사용하여 이루어지는 발광 소자**

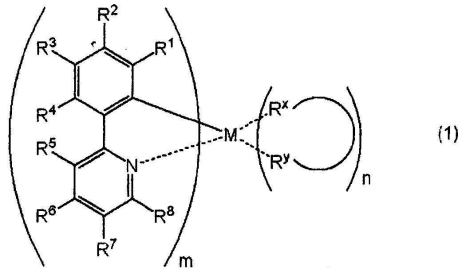
**(57) 요약**

본 발명은 금속 착체 및 유기 화합물을 함유하는 조성물이며, 계산 과학적 수법에 의해 산출한 상기 금속 착체의 최저 비점유 분자 궤도의 에너지 레벨의 절대값과 상기 유기 화합물의 최저 비점유 분자 궤도의 에너지 레벨의 절대값의 차가 0.40 eV 미만인 조성물을 제공한다.

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 (1)로 표시되는 금속 착체 및 유기 화합물을 함유하는 조성물이며, 계산 과학적 수법에 의해 산출한 상기 금속 착체의 최저 비점유 분자 궤도의 에너지 레벨의 절대값과 상기 유기 화합물의 최저 비점유 분자 궤도의 에너지 레벨의 절대값의 차가 0.40 eV 미만인 조성물.



(식 중, M은 루테튬, 로튬, 팔라듐, 오스뮴, 이리듐 또는 백금의 금속 원자이고, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup> 및 R<sup>8</sup>은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아실기, 아실옥시기, 아미드기, 산 이미드기, 이민 잔기, 치환 아미노기, 치환 실릴기, 치환 실릴옥시기, 치환 실릴티오기, 치환 실릴아미노기, 1가의 복소환기, 헤테로아릴옥시기, 헤테로아릴티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 치환 카르복실기 또는 시아노기를 나타내거나, 또는 R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup> 또는 R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>이 결합하여 환을 형성하고 있을 수도 있되, 단 R<sup>2</sup> 및 R<sup>7</sup> 중 적어도 하나는 하기 화학식 (2)



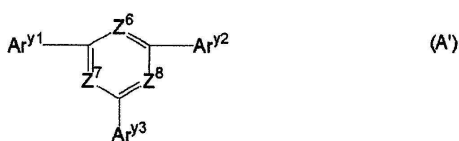
로 표시되는 기이고, m은 1 내지 3의 정수이고, n은 0 내지 2의 정수이고, Z<sup>1</sup>, Z<sup>2</sup>, Z<sup>3</sup>, Z<sup>4</sup> 및 Z<sup>5</sup>는 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내되, 단 Z<sup>1</sup>, Z<sup>2</sup>, Z<sup>3</sup>, Z<sup>4</sup> 및 Z<sup>5</sup> 중 적어도 2개는 질소 원자이고, Z<sup>1</sup>, Z<sup>2</sup>, Z<sup>3</sup>, Z<sup>4</sup> 및 Z<sup>5</sup> 중 어느 하나가 탄소 원자인 경우에는 상기 탄소 원자에 결합하는 수소 원자는 치환기에 의해 치환되어 있을 수도 있고, 하기 화학식 (3)



으로 표시되는 부분은 모노 음이온성의 2좌 배위자를 나타내고, R<sup>x</sup> 및 R<sup>y</sup>는 금속 원자 M에 결합하는 원자이고, 각각 독립적으로 탄소 원자, 산소 원자 또는 질소 원자를 나타냄)

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 유기 화합물이 하기 화학식 (A')로 표시되는 화합물 또는 그의 잔기를 갖는 화합물인 조성물.

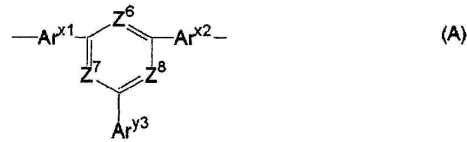


(식 중, Ar<sup>y1</sup>, Ar<sup>y2</sup> 및 Ar<sup>y3</sup>은 각각 독립적으로 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내고, Z<sup>6</sup> 내지 Z<sup>8</sup>은 각각 독립

적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내되, 단  $Z^6$  내지  $Z^8$  중 적어도 2개는 질소 원자이고,  $Z^6$  내지  $Z^8$  중 어느 하나가 탄소 원자인 경우에는 상기 탄소 원자에 결합하는 수소 원자는 치환기에 의해 치환되어 있을 수도 있음)

**청구항 3**

제2항에 있어서, 상기 화학식 (A')으로 표시되는 화합물의 잔기를 갖는 화합물이 하기 화학식 (A)로 표시되는 2개의 기를 갖는 화합물인 조성물.



(식 중,  $Ar^{x1}$  및  $Ar^{x2}$ 는 아릴렌기 또는 2개의 복소환기를 나타내고,  $Ar^{y3}$  및  $Z^6$  내지  $Z^8$ 은 상기과 동일한 의미를 가짐)

**청구항 4**

제2항 또는 제3항에 있어서, 상기  $Z^6$  내지  $Z^8$ 이 질소 원자인 조성물.

**청구항 5**

제3항 또는 제4항에 있어서, 상기 화학식 (A)로 표시되는 2개의 기를 갖는 화합물이 상기 화학식 (A)로 표시되는 2개의 기를 반복 단위로서 갖는 고분자 화합물인 조성물.

**청구항 6**

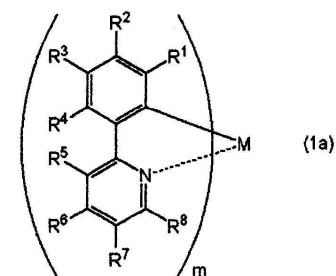
제5항에 있어서, 상기 화학식 (A)로 표시되는 2개의 기를 반복 단위로서 갖는 고분자 화합물이 추가로 하기 화학식 (B)로 표시되는 반복 단위를 갖는 조성물.



(식 중,  $Ar^2$ 는 치환기를 가질 수도 있는 아릴렌기 또는 치환기를 가질 수도 있는 2개의 복소환기를 나타냄)

**청구항 7**

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 화학식 (1)로 표시되는 금속 착체가 하기 화학식 (1a)로 표시되는 금속 착체인 조성물.



(식 중, M,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$ ,  $R^8$  및 m은 상기과 동일한 의미를 가짐)

**청구항 8**

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서, 상기  $R^7$ 이 상기 화학식 (2)로 표시되는 기인 조성물.

**청구항 9**

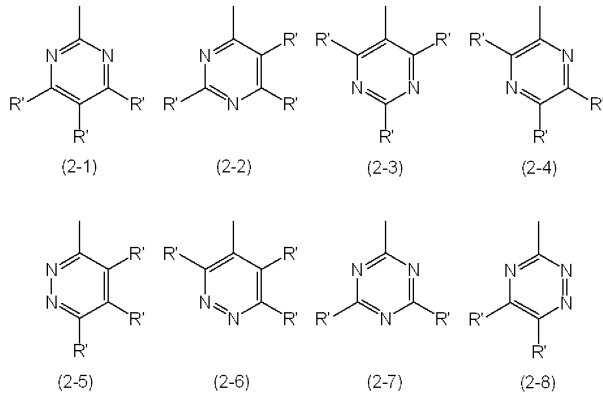
제8항에 있어서, 상기 R<sup>2</sup> 및 R<sup>7</sup>이 상기 화학식 (2)로 표시되는 기인 조성물.

**청구항 10**

제1항 내지 제9항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 Z<sup>1</sup>, Z<sup>2</sup>, Z<sup>3</sup>, Z<sup>4</sup> 및 Z<sup>5</sup>에서 복수개 존재하는 질소 원자가 인접하지 않는 조합인 조성물.

**청구항 11**

제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 화학식 (2)로 표시되는 기가 하기 화학식 (2-1) 내지 (2-8)로 표시되는 것인 조성물.



(식 중, R'은 수소 원자, 할로겐 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아실기, 아실옥시기, 아미드기, 산 이미드기, 이민 잔기, 치환 아미노기, 치환 실릴기, 치환 실릴옥시기, 치환 실릴티오기, 치환 실릴아미노기, 1가의 복소환기, 헤테로아릴옥시기, 헤테로아릴티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 치환 카르복실기 또는 시아노기이고, 복수개 존재하는 R'은 동일하거나 상이할 수 있음)

**청구항 12**

제11항에 있어서, 상기 R<sup>2</sup> 및 R<sup>7</sup>이 각각 독립적으로 상기 화학식 (2-1) 또는 (2-7)로 표시되는 기인 조성물.

**청구항 13**

제11항에 있어서, 상기 R<sup>2</sup>가 수소 원자이고, 상기 R<sup>7</sup>이 상기 화학식 (2-1)로 표시되는 기인 조성물.

**청구항 14**

제11항에 있어서, 상기 R<sup>2</sup>가 수소 원자이고, 상기 R<sup>7</sup>이 상기 화학식 (2-7)로 표시되는 기인 조성물.

**청구항 15**

제1항 내지 제14항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 M이 백금 원자 또는 이리듐 원자인 조성물.

**청구항 16**

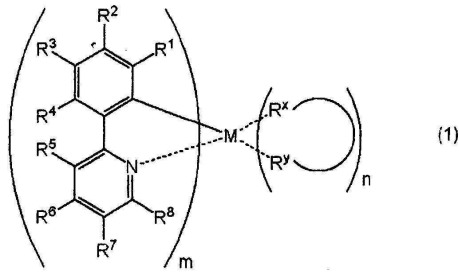
제1항 내지 제15항 중 어느 한 항에 있어서, PL(photoluminescence) 발광 스펙트럼의 피크 파장 중 적어도 하나가 550 nm 내지 800 nm인 인광 발광을 나타내는 조성물.

**청구항 17**

제1항 내지 제16항 중 어느 한 항에 있어서, 용매 또는 분산매를 포함하는 조성물.

**청구항 18**

하기 화학식 (1)로 표시되는 금속 착체의 잔기 및 유기 화합물의 잔기를 갖는 화합물이며, 계산 과학적 수법에 의해 산출한 상기 금속 착체의 최저 비점유 분자 궤도의 에너지 레벨의 절대값과 상기 유기 화합물의 최저 비점유 분자 궤도의 에너지 레벨의 절대값의 차가 0.40 eV 미만인 화합물.



(식 중, M은 루테튬, 로듐, 팔라듐, 오스뮴, 이리듐 또는 백금의 금속 원자이고,  $R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7$  및  $R^8$ 은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아실기, 아실옥시기, 아미드기, 산 이미드기, 이민 잔기, 치환 아미노기, 치환 실릴기, 치환 실릴옥시기, 치환 실릴티오기, 치환 실릴아미노기, 1가의 복소환기, 헤테로아릴옥시기, 헤테로아릴티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 치환 카르복실기 또는 시아노기를 나타내거나, 또는  $R^3$  및  $R^4$  또는  $R^5$  및  $R^6$ 이 결합하여 환을 형성하고 있을 수도 있되, 단  $R^2$  및  $R^7$  중 적어도 하나는 하기 화학식 (2)



로 표시되는 기이고, m은 1 내지 3의 정수이고, n은 0 내지 2의 정수이고,  $Z^1, Z^2, Z^3, Z^4$  및  $Z^5$ 는 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내되, 단  $Z^1, Z^2, Z^3, Z^4$  및  $Z^5$  중 적어도 2개는 질소 원자이고,  $Z^1, Z^2, Z^3, Z^4$  및  $Z^5$  중 어느 하나가 탄소 원자인 경우에는 상기 탄소 원자에 결합하는 수소 원자는 치환기에 의해 치환되어 있을 수도 있고, 하기 화학식 (3)



으로 표시되는 부분은 모노 음이온성의 2좌 배위자를 나타내고,  $R^x$  및  $R^y$ 는 금속 원자 M에 결합하는 원자이고, 각각 독립적으로 탄소 원자, 산소 원자 또는 질소 원자를 나타냄)

**청구항 19**

제1항 내지 제18항 중 어느 한 항에 기재된 조성물을 사용하여 이루어지는 막.

**청구항 20**

제1항 내지 제18항 중 어느 한 항에 기재된 조성물을 사용하여 이루어지는 소자.

**청구항 21**

제20항에 있어서, 상기 소자가 발광 소자인 소자.

**청구항 22**

제21항에 기재된 소자를 사용한 면상 광원.

**청구항 23**

제21항에 기재된 소자를 사용한 조명.

**명세서**

**기술분야**

[0001] 본 발명은, 금속 착체 및 유기 화합물을 함유하는 조성물, 및 이들을 포함하는 소자에 관한 것이다.

**배경기술**

[0002] 유기 전계 발광 소자의 제작에 유용한 유기 재료로서, 예를 들면 플루오렌디일기 및 트리페닐아민디일기를 반복 단위로서 포함하는 공중합체와 금속 착체의 조성물이 제안되어 있다(특허문헌 1).

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0003] (특허문헌 0001) W02005-13386호 공보

**발명의 내용**

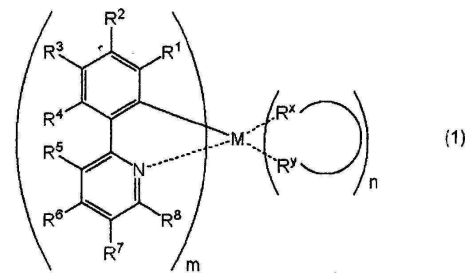
**해결하려는 과제**

[0004] 그러나, 상기 유기 재료는, 유기 전계 발광 소자 등의 제작에 사용한 경우 구동 전압이 충분히 낮은 소자가 얻어지지 않는다.

[0005] 따라서, 본 발명은, 전계 발광 소자 등의 제작에 사용한 경우 구동 전압이 낮은 소자가 얻어지는 유기 재료를 제공하는 것을 목적으로 한다.

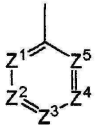
**과제의 해결 수단**

[0006] 본 발명은 첫째로, 하기 화학식 (1)로 표시되는 금속 착체 및 유기 화합물을 함유하는 조성물이며, 계산 과학적 수법에 의해 산출한 상기 금속 착체의 최저 비점유 분자 궤도 준위(이하, "LUMO"라고 함)의 에너지 레벨의 절대값과 상기 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차가 0.40 eV 미만인 조성물을 제공한다.



[0007]

[0008] (식 중, M은 루테튬, 로듐, 팔라듐, 오스뮴, 이리듐 또는 백금의 금속 원자이고, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup> 및 R<sup>8</sup>은 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아실기, 아실옥시기, 아미드기, 산 이미드기, 이민 잔기, 치환 아미노기, 치환 실릴기, 치환 실릴옥시기, 치환 실릴티오기, 치환 실릴아미노기, 1가의 복소환기, 헤테로아릴옥시기, 헤테로아릴티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 치환 카르복실기 또는 시아노기를 나타내거나, 또는 R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup> 또는 R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>이 결합하여 환을 형성하고 있을 수도 있되, 단 R<sup>2</sup> 및 R<sup>7</sup> 중 적어도 하나는 하기 화학식 (2)

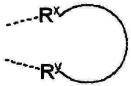


(2)

[0009]

[0010]

로 표시되는 기이고, m은 1 내지 3의 정수이고, n은 0 내지 2의 정수이고,  $Z^1$ ,  $Z^2$ ,  $Z^3$ ,  $Z^4$  및  $Z^5$ 는 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내되, 단  $Z^1$ ,  $Z^2$ ,  $Z^3$ ,  $Z^4$  및  $Z^5$  중 적어도 2개는 질소 원자이고,  $Z^1$ ,  $Z^2$ ,  $Z^3$ ,  $Z^4$  및  $Z^5$  중 어느 하나가 탄소 원자인 경우에는 상기 탄소 원자에 결합하는 수소 원자는 치환기에 의해 치환되어 있을 수도 있고, 하기 화학식 (3)



(3)

[0011]

[0012]

으로 표시되는 부분은 모노 음이온성의 2좌 배위자를 나타내고,  $R^x$  및  $R^y$ 는 금속 원자 M에 결합하는 원자이고, 각각 독립적으로 탄소 원자, 산소 원자 또는 질소 원자를 나타냄)

[0013]

본 발명은 둘째로, 상기 화학식 (1)로 표시되는 금속 착체의 잔기 및 유기 화합물의 잔기를 갖는 화합물이며, 계산 과학적 수법에 의해 산출한 상기 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값과 상기 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차가 0.40 eV 미만인 화합물을 제공한다.

[0014]

본 발명은 셋째로, 상기 조성물을 사용하여 이루어지는 막 및 소자, 및 상기 소자를 사용한 면상 광원 및 조명을 제공한다.

**발명의 효과**

[0015]

본 발명의 조성물 및 화합물(이하, "본 발명의 조성물 등"이라고 함)은, 유기 전계 발광 소자 등의 제작에 사용한 경우 구동 전압이 낮은 소자가 얻어지는 것이며, 바람직한 실시 형태에서는 발광 효율도 우수함(즉, 양자 수율이 높은) 소자가 얻어지는 것이다. 따라서, 본 발명의 조성물 등은, 유기 전계 발광 소자 등의 발광 소자의 제조에 특히 유용하다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0016]

이하, 본 발명을 상세히 설명한다.

[0017]

<조성물>

[0018]

-금속 착체-

[0019]

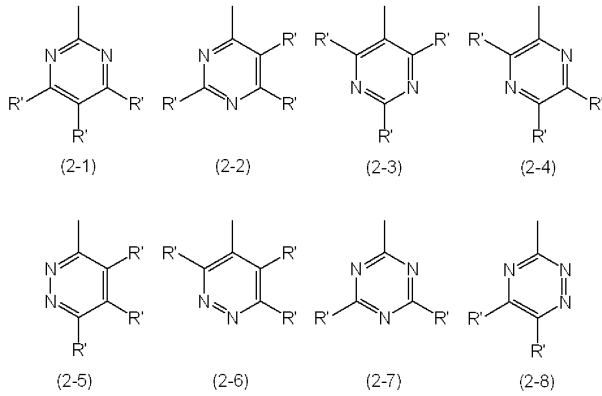
본 발명의 조성물에 함유되는 금속 착체는, 상기 화학식 (1)로 표시되는 것이다.

[0020]

상기 화학식 (2)로 표시되는 기는  $Z^1$ ,  $Z^2$ ,  $Z^3$ ,  $Z^4$  및  $Z^5$  중 적어도 2개가 질소 원자인 것이며, 바람직하게는 2개 또는 3개가 질소 원자인 것이다. 특히, 이들 복수개 존재하는 질소 원자가 인접하지 않는(즉, 인접 위치에 존재하지 않는) 조합인 것이 바람직하다. 구체적으로는,  $Z^1$ ,  $Z^2$ ,  $Z^3$ ,  $Z^4$  및  $Z^5$  중 2개 또는 3개가 질소 원자이고, 질소 원자가 인접하지 않는 것이다. 상기 치환기는  $Z^1$ ,  $Z^2$ ,  $Z^3$ ,  $Z^4$  및  $Z^5$  중 어느 하나가 탄소 원자인 경우에는 상기 탄소 원자에 결합하는 수소 원자가 치환기로 치환되어 있을 수도 있다.

[0021]

상기 화학식 (2)로 표시되는 기로서는 이하의 식으로 표시되는 기를 들 수 있으며, 이들 중에서도 화학식 (2-1)로 표시되는 기, 화학식 (2-7)로 표시되는 기가 바람직하다.



[0022]

[0023]

(식 중, R'은 수소 원자, 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아실기, 아실옥시기, 아미드기, 산 이미드기, 이민 잔기, 치환 아미노기, 치환 실릴기, 치환 실릴옥시기, 치환 실릴티오기, 치환 실릴아미노기, 1가의 복소환기, 헤테로아릴옥시기, 헤테로아릴티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 치환 카르복실기 또는 시아노기이고, 복수개 존재하는 R'은 동일하거나 상이할 수 있음)

[0024]

상기 화학식 중, R'으로 표시되는 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아실기, 아실옥시기, 아미드기, 산 이미드기, 이민 잔기, 치환 아미노기, 치환 실릴기, 치환 실릴옥시기, 치환 실릴티오기, 치환 실릴아미노기, 1가의 복소환기, 헤테로아릴옥시기, 헤테로아릴티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 치환 카르복실기 및 시아노기는, 후술하는 R로 표시되는 것과 동일한 정의, 구체예이다.

[0025]

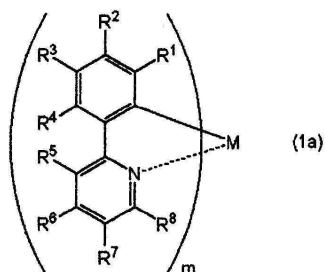
상기 화학식 (1)로 표시되는 금속 착체는, M으로 표시되는 금속 원자, 첨자 m으로 그 수가 정의되어 있는 배위자(이하, "2좌 킬레이트 배위자"라고도 함)와, 첨자 n으로 그 수가 정의되어 있는 상기 화학식 (3)으로 표시되는 모노 음이온성의 2좌 배위자(이하, "모노 음이온성의 2좌 배위자"라고도 함)로 구성되어 있다. 또한, 이하에서 단순히 "배위자"라고 하는 경우에는, 상기 2좌 킬레이트 배위자와 상기 모노 음이온성의 2좌 배위자의 둘 다를 의미한다.

[0026]

상기 화학식 (1) 중, m은 1 내지 3의 정수이다. n은 0 내지 2의 정수이고, 바람직하게는 0 또는 1이고, 보다 바람직하게는 0이다. 단, m+n은 금속 원자 M에 결합할 수 있는 배위자의 합계수이다. 예를 들면, 중심 금속이 이리듐인 경우 m=1, n=2, 또는 m=2, n=1, 또는 m=3, n=0이고, 바람직하게는 m=3, n=0, 또는 m=2, n=1이고, 보다 바람직하게는 m=3, n=0이다. 중심 금속이 로듐, 루테튬, 오스뮴인 경우에는 이리듐과 동일하고, m=3, n=0이 바람직하다. 중심 금속이 팔라듐, 백금인 경우에는 m=1, n=1 또는 m=2, n=0이고, 바람직하게는 m=2, n=0이다.

[0027]

상기 화학식 (1)로 표시되는 금속 착체는, 바람직하게는 하기 화학식 (1a)로 표시되는 것(즉, n=0)이다. R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup> 및 R<sup>8</sup>로 표시되는 원자 및 기는, 구체적으로는 후술하는 R로서 설명하여 예시하는 원자 및 기와 동일하다. 단, 화합물의 안정성의 관점에서, 상기 화학식 (1a) 중 m은 2 또는 3인 것이 바람직하다.



[0028]

[0029]

(식 중, M, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup> 및 R<sup>8</sup> 및 m은 상기와 동일한 의미를 가짐)

[0030]

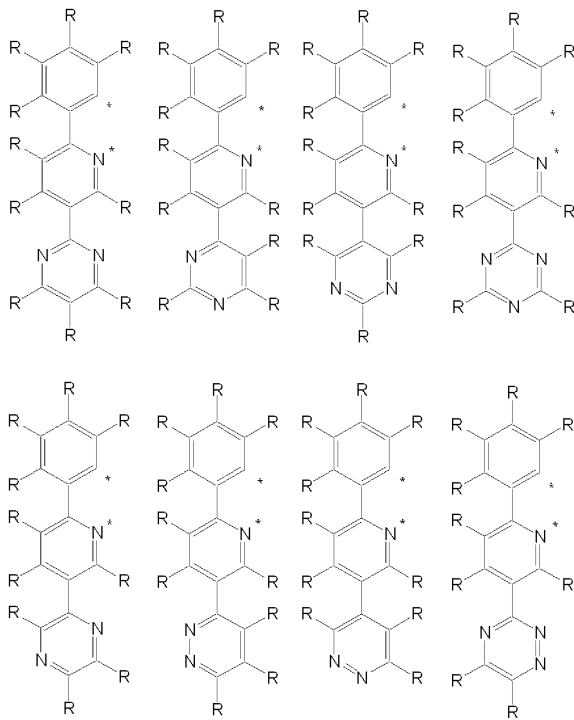
금속 착체를 구성하는 배위자는, 금속 착체의 발광색, 발광 강도, 발광 효율 등에 영향을 준다. 따라서, 금속 착체로서는, 배위자 내에서의 에너지 실활 과정을 최소로 하는 구조로 이루어지는 배위자로 구성되는 것이 바람직하다. 또한, 배위자가 갖는 치환기의 종류 및/또는 치환 위치는 배위자의 전자적 특성에 영향을 미치기 때문

에, 금속 착체의 특성에 영향을 준다. 이상의 관점에서 상기 금속 착체는 상기 화학식 (1)로 표시되는 구조를 취함으로써, 금속 착체의 발광 효율, 안정성 등을 향상시킬 수 있는 것으로 생각된다.

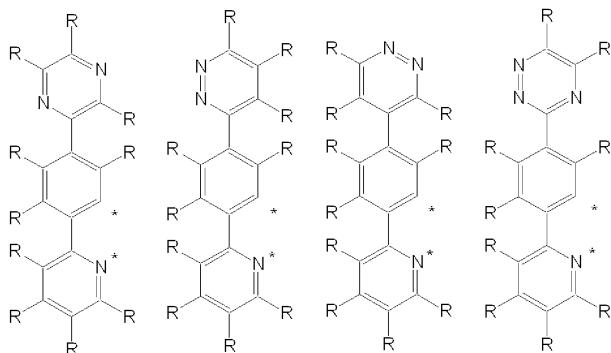
[0031] 상기 금속 착체에서, 상기 화학식 (1) 또는 상기 화학식 (1a)에서의  $R^2$  및  $R^7$  중 적어도 하나는 상기 화학식 (2)로 표시되는 기이고,  $R^7$ 이 상기 화학식 (2)로 표시되는 기인 것이 바람직하다. 또한, 상기 금속 착체에서  $R^2$  및  $R^7$ 이 각각 독립적으로 상기 화학식 (2)로 표시되는 기인 구조도 바람직하다.  $R^7$ 이 상기 화학식 (2-1)로 표시되는 것이며 상기  $R^2$ 가 수소 원자인 것,  $R^7$ 이 상기 화학식 (2-7)로 표시되는 것이며 상기  $R^2$ 가 수소 원자인 것, 상기  $R^2$  및  $R^7$ 이 각각 독립적으로 상기 화학식 (2-1) 또는 (2-7)로 표시되는 기인 것이 보다 바람직하다. 본 발명의 조성물의 PL(photoluminescence) 발광 스펙트럼의 피크 파장 중 적어도 하나는 바람직하게는 550 nm 내지 800 nm이고, 보다 바람직하게는 570 nm 내지 750 nm이고, 더욱 바람직하게는 570 nm 내지 700 nm이고, 특히 바람직하게는 600 nm 내지 700 nm이다.

[0032] 상기 금속 착체의 중심 금속이 되는 금속 원자 M은, 루테튬, 로튬, 팔라듐, 오스뮴, 이리듐 또는 백금의 금속 원자이다. 이들 금속 원자는 금속 착체에 스핀-궤도 상호 작용을 미치고, 일중항 상태와 삼중항 상태간의 계간 교차를 일으킬 수 있는 것이다. 상기 금속 원자 M은 바람직하게는 오스뮴, 이리듐, 백금이고, 더욱 바람직하게는 이리듐, 백금이고, 특히 바람직하게는 이리듐이다.

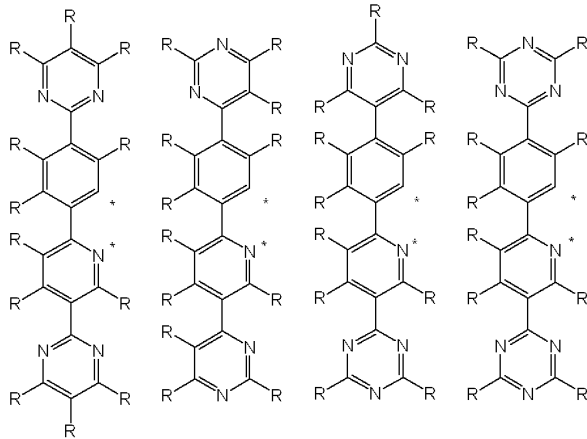
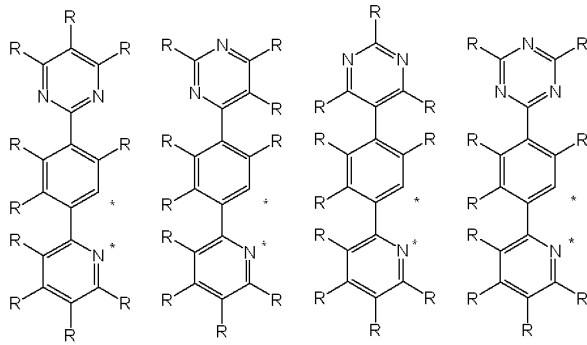
[0033] 상기 화학식 (1) 또는 상기 화학식 (1a)로 표시되는 금속 착체에서 상기 2좌 킬레이트 배위자로서는, 하기 화학식으로 표시되는 바와 같은 구조를 들 수 있다.



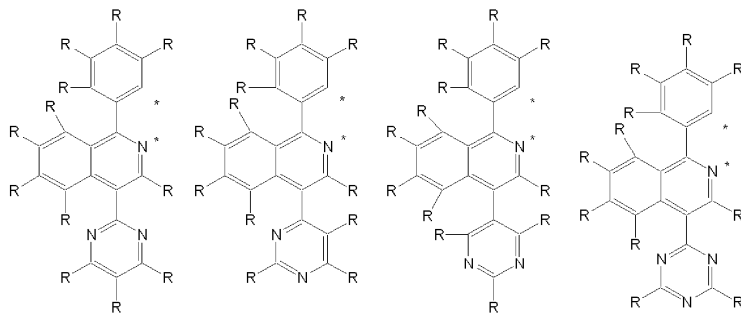
[0034]



[0035]



[0036]



[0037]

[0038]

(식 중, R은 수소 원자, 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아틸기, 아틸옥시기, 아틸티오기, 아틸알킬기, 아틸알콕시기, 아틸알킬티오기, 아실기, 아실옥시기, 아마이드기, 산 이미드기, 이민 잔기, 치환 아미노기, 치환 실릴기, 치환 실릴옥시기, 치환 실릴티오기, 치환 실릴아미노기, 1가의 복소환기, 헤테로아틸옥시기, 헤테로아틸티오기, 아틸알케닐기, 아틸알키닐기, 치환 카르복실기 또는 시아노기이고, \*는 금속 원자 M과 결합하는 부위를 나타내고, 복수개 존재하는 R은 동일하거나 상이할 수 있음)

[0039]

상기 R로 표시되는 할로젠 원자로서는, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자 등을 들 수 있다.

[0040]

상기 R로 표시되는 알킬기는, 직쇄, 분지 또는 환상 중 어느 하나일 수도 있다. 이 알킬기의 탄소수는 통상적으로 1 내지 10 정도이다. 알킬기로서는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, s-부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 시클로헥실기, 헵틸기, 옥틸기, 2-에틸헥실기, 노닐기, 데실기, 3,7-디메틸옥틸기, 라우릴기, 트리플루오로메틸기, 펜타플루오로에틸기, 퍼플루오로부틸기, 퍼플루오로헥실기, 퍼플루오로옥틸기 등을 들 수 있으며, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 옥틸기, 2-에틸헥실기, 데실기, 3,7-디메틸옥틸기가 바람직하다.

[0041]

상기 R로 표시되는 알콕시기는, 직쇄, 분지 또는 환상 중 어느 하나일 수도 있다. 이 알콕시기의 탄소수는 통상적으로 1 내지 10 정도이다. 알콕시기로서는 메톡시기, 에톡시기, 프로필옥시기, 이소프로필옥시기, 부톡시기, 이소부톡시기, s-부톡시기, t-부톡시기, 펜틸옥시기, 헥실옥시기, 시클로헥실옥시기, 헵틸옥시기, 옥틸옥시기, 2-에틸헥실옥시기, 노닐옥시기, 데실옥시기, 3,7-디메틸옥틸옥시기, 라우릴옥시기, 트리플루오로메톡시기,

펜타플루오로에톡시기, 퍼플루오로부톡시기, 퍼플루오로헥실기, 퍼플루오로옥틸기, 메톡시메틸옥시기, 2-메톡시 에틸옥시기 등을 들 수 있으며, 펜틸옥시기, 헥실옥시기, 옥틸옥시기, 2-에틸헥실옥시기, 데실옥시기, 3,7-디메틸옥틸옥시기가 바람직하다.

[0042] 상기 R로 표시되는 알킬티오기는, 직쇄, 분지 또는 환상 중 어느 하나일 수도 있다. 이 알킬티오기의 탄소수는 통상적으로 1 내지 10 정도이다. 알킬티오기로서는 메틸티오기, 에틸티오기, 프로필티오기, 이소프로필티오기, 부틸티오기, 이소부틸티오기, s-부틸티오기, t-부틸티오기, 펜틸티오기, 헥실티오기, 시클로헥실티오기, 헵틸티오기, 옥틸티오기, 2-에틸헥실티오기, 노닐티오기, 데실티오기, 3,7-디메틸옥틸티오기, 라우릴티오기, 트리플루오로메틸티오기 등을 들 수 있으며, 펜틸티오기, 헥실티오기, 옥틸티오기, 2-에틸헥실티오기, 데실티오기, 3,7-디메틸옥틸티오기가 바람직하다.

[0043] 상기 R로 표시되는 아릴기는 탄소수가 통상적으로 6 내지 60 정도인 것이며, 바람직하게는 7 내지 48인 것이다. 아릴기로서는 페닐기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐기("C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시"는 알콕시 부분의 탄소수가 1 내지 12인 것을 의미하고, 이하 동일함), C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐기("C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬"은 알킬 부분의 탄소수가 1 내지 12인 것을 의미하고, 이하 동일함), 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트라세닐기, 2-안트라세닐기, 9-안트라세닐기, 펜타플루오로페닐기 등을 들 수 있으며, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐기가 바람직하다. 여기서, 아릴기란 방향족 탄화수소로부터 수소 원자 1개를 제거한 원자단이다. 이 방향족 탄화수소로서는 축합환을 갖는 것, 독립된 벤젠환 또는 축합환 2개 이상이 직접 또는 비닐렌 등의 기를 통해 결합한 것이 포함된다. 또한, 상기 아릴기는 치환기를 갖고 있을 수도 있고, 상기 치환기로서는 C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐기 등을 들 수 있다.

[0044] 상기 C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐기로서는, 메톡시페닐기, 에톡시페닐기, 프로필옥시페닐기, 이소프로필옥시페닐기, 부톡시페닐기, 이소부톡시페닐기, s-부톡시페닐기, t-부톡시페닐기, 펜틸옥시페닐기, 헥실옥시페닐기, 시클로헥실옥시페닐기, 헵틸옥시페닐기, 옥틸옥시페닐기, 2-에틸헥실옥시페닐기, 노닐옥시페닐기, 데실옥시페닐기, 3,7-디메틸옥틸옥시페닐기, 라우릴옥시페닐기 등을 들 수 있다.

[0045] 상기 C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐기로서는, 메틸페닐기, 에틸페닐기, 디메틸페닐기, 프로필페닐기, 메시틸기, 메틸에틸페닐기, 이소프로필페닐기, 부틸페닐기, 이소부틸페닐기, s-부틸페닐, t-부틸페닐기, 펜틸페닐기, 이소아밀페닐기, 헥실페닐기, 헵틸페닐기, 옥틸페닐기, 노닐페닐기, 데실페닐기, 도데실페닐기 등을 들 수 있다.

[0046] 상기 R로 표시되는 아릴옥시기는 탄소수가 통상적으로 6 내지 60 정도인 것이며, 바람직하게는 7 내지 48인 것이다. 아릴옥시기로서는 페녹시기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페녹시기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페녹시기, 1-나프틸옥시기, 2-나프틸옥시기, 펜타플루오로페닐옥시기 등을 들 수 있으며, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페녹시기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페녹시기가 바람직하다.

[0047] 상기 C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페녹시기로서는, 메톡시페녹시기, 에톡시페녹시기, 프로필옥시페녹시기, 이소프로필옥시페녹시기, 부톡시페녹시기, 이소부톡시페녹시기, s-부톡시페녹시기, t-부톡시페녹시기, 펜틸옥시페녹시기, 헥실옥시페녹시기, 시클로헥실옥시페녹시기, 헵틸옥시페녹시기, 옥틸옥시페녹시기, 2-에틸헥실옥시페녹시기, 노닐옥시페녹시기, 데실옥시페녹시기, 3,7-디메틸옥틸옥시페녹시기, 라우릴옥시페녹시기 등을 들 수 있다.

[0048] 상기 C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페녹시기로서는, 메틸페녹시기, 에틸페녹시기, 디메틸페녹시기, 프로필페녹시기, 1,3,5-트리메틸페녹시기, 메틸에틸페녹시기, 이소프로필페녹시기, 부틸페녹시기, 이소부틸페녹시기, s-부틸페녹시기, t-부틸페녹시기, 펜틸페녹시기, 이소아밀페녹시기, 헥실페녹시기, 헵틸페녹시기, 옥틸페녹시기, 노닐페녹시기, 데실페녹시기, 도데실페녹시기 등을 들 수 있다.

[0049] 상기 R로 표시되는 아릴티오기는 탄소수가 통상적으로 6 내지 60 정도인 것이며, 바람직하게는 7 내지 48인 것이다. 아릴티오기로서는 페닐티오기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐티오기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐티오기, 1-나프틸티오기, 2-나프틸티오기, 펜타플루오로페닐티오기 등을 들 수 있으며, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐티오기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐티오기가 바람직하다.

[0050] 상기 R로 표시되는 아릴알킬기는 탄소수가 통상적으로 7 내지 60 정도인 것이며, 바람직하게는 7 내지 48인 것이다. 아릴알킬기로서는 페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐

-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬기, 1-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬기, 2-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬기 등을 들 수 있으며, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬기가 바람직하다.

[0051] 상기 R로 표시되는 아릴알콕시기는 탄소수가 통상적으로 7 내지 60 정도인 것이며, 바람직하게는 7 내지 48인 것이다. 아릴알콕시기로서는 페닐메톡시기, 페닐에톡시기, 페닐부톡시기, 페닐헥실옥시기, 페닐헵틸옥시기, 페닐옥틸옥시기 등의 페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시기, 1-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시기, 2-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시기 등을 들 수 있으며, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시기가 바람직하다.

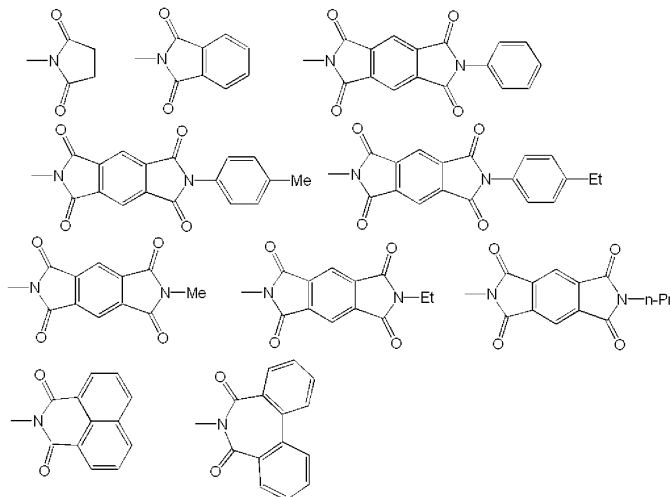
[0052] 상기 R로 표시되는 아릴알킬티오기는 탄소수가 통상적으로 7 내지 60 정도인 것이며, 바람직하게는 7 내지 48인 것이다. 아릴알킬티오기로서는 페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬티오기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬티오기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬티오기, 1-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬티오기, 2-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬티오기 등을 들 수 있으며, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬티오기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬티오기가 바람직하다.

[0053] 상기 R로 표시되는 아실기는 탄소수가 통상적으로 2 내지 20 정도인 것이며, 바람직하게는 2 내지 18인 것이다. 아실기로서는 아세틸기, 프로피오닐기, 부티릴기, 이소부티릴기, 피발로일기, 벤조일기, 트리플루오로아세틸기, 펜타플루오로벤조일기 등을 들 수 있다.

[0054] 상기 R로 표시되는 아실옥시기는 탄소수가 통상적으로 2 내지 20 정도인 것이며, 바람직하게는 2 내지 18인 것이다. 아실옥시기로서는 아세톡시기, 프로피오닐옥시기, 부티릴옥시기, 이소부티릴옥시기, 피발로일옥시기, 벤조일옥시기, 트리플루오로아세틸옥시기, 펜타플루오로벤조일옥시기 등을 들 수 있다.

[0055] 상기 R로 표시되는 아미드기는 탄소수가 통상적으로 2 내지 20 정도인 것이며, 바람직하게는 2 내지 18인 것이다. 아미드기로서는 포름아미드기, 아세트아미드기, 프로피오아미드기, 부티로아미드기, 벤즈아미드기, 트리플루오로아세트아미드기, 펜타플루오로벤즈아미드기, 디포름아미드기, 디아세트아미드기, 디프로피오아미드기, 디부티로아미드기, 디벤즈아미드기, 디트리플루오로아세트아미드기, 디펜타플루오로벤즈아미드기 등을 들 수 있다.

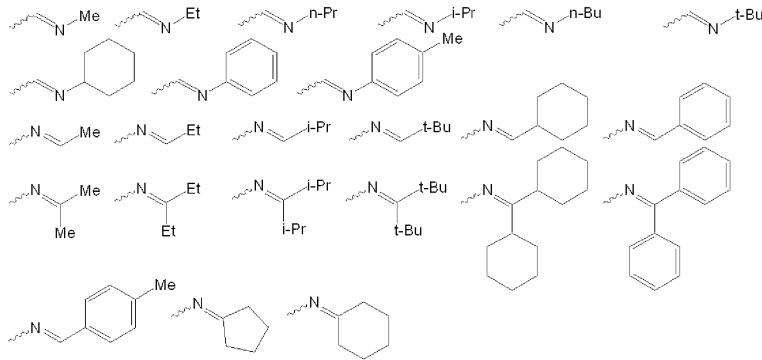
[0056] 상기 R로 표시되는 산 이미드기란, 산 이미드로부터 그의 질소 원자에 결합한 수소 원자를 1개 제거하여 얻어지는 1가의 잔기를 의미한다. 이 산 이미드기는 탄소수가 통상적으로 2 내지 60 정도인 것이며, 바람직하게는 2 내지 48인 것이다. 산 이미드기로서는, 이하의 구조식으로 표시되는 기 등을 들 수 있다.



[0057] (식 중, 질소 원자로부터 연장된 선은 결합손을 나타내고, Me는 메틸기, Et는 에틸기, n-Pr은 n-프로필기를 나타내고, 이하 동일함)

[0059] 상기 R로 표시되는 이민 잔기란, 이민 화합물(즉, 분자 내에 -N=C-를 갖는 유기 화합물이고, 그 예로서는 알디민, 케티민 및 이들 분자 중의 질소 원자에 결합한 수소 원자가 알킬기 등으로 치환된 화합물 등을 들 수 있음)로부터 수소 원자 1개를 제거한 1가의 잔기를 의미한다. 이 이민 잔기는 통상적으로 탄소수 2 내지 20 정도

이고, 바람직하게는 2 내지 18이다. 구체적으로는, 이하의 구조식으로 표시되는 기 등을 들 수 있다.



[0060]

[0061]

(식 중, i-Pr은 이소프로필기, n-Bu는 n-부틸기, t-Bu는 t-부틸기를 나타내고, 파선으로 나타낸 결합은 "썩기형으로 표시되는 결합" 및/또는 "파선으로 표시되는 결합"인 것을 의미하고, 여기서 "썩기형으로 표시되는 결합"이란, 지면(紙面)으로부터 앞쪽을 향해 나와 있는 결합을 의미하며, "파선으로 표시되는 결합"이란, 지면의 뒤편으로 나와 있는 결합을 의미함)

[0062]

상기 R로 표시되는 치환 아미노기는, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 및 1가의 복소환기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개 또는 2개의 기로 치환된 아미노기를 의미한다. 상기 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 또는 1가의 복소환기는 치환기를 가질 수도 있다. 치환 아미노기의 탄소수는 상기 치환기의 탄소수를 포함시키지 않고 통상적으로 1 내지 60 정도이며, 바람직하게는 2 내지 48이다. 치환 아미노기로서는 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 에틸아미노기, 디에틸아미노기, 프로필아미노기, 디프로필아미노기, 이소프로필아미노기, 디이소프로필아미노기, 부틸아미노기, 이소부틸아미노기, s-부틸아미노기, t-부틸아미노기, 펜틸아미노기, 헥실아미노기, 시클로헥실아미노기, 헵틸아미노기, 옥틸아미노기, 2-에틸헥실아미노기, 노닐아미노기, 데실아미노기, 3,7-디메틸옥틸아미노기, 라우릴아미노기, 시클로펜틸아미노기, 디시클로펜틸아미노기, 시클로헥실아미노기, 디시클로헥실아미노기, 피롤리딜기, 피페리딜기, 디트리플루오로메틸아미노기, 페닐아미노기, 디페닐아미노기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐아미노기, 디(C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐)아미노기, 디(C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐)아미노기, 1-나프틸아미노기, 2-나프틸아미노기, 펜타플루오로페닐아미노기, 피리딜아미노기, 피리다지닐아미노기, 피리미딜아미노기, 피라질아미노기, 트리아질아미노기페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬아미노기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬아미노기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬아미노기, 디(C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬)아미노기, 디(C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬)아미노기, 1-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬아미노기, 2-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬아미노기 등을 들 수 있다.

[0063]

상기 R로 표시되는 치환 실릴기는, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 및 1가의 복소환기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1, 2 또는 3개의 기로 치환된 실릴기를 의미한다. 치환 실릴기의 탄소수는 통상적으로 1 내지 60 정도 이고, 바람직하게는 3 내지 48이다. 또한, 상기 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 또는 1가의 복소환기는 치환기를 가질 수도 있다. 치환 실릴기로서는 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, 트리프로필실릴기, 트리이소프로필실릴기, 디메틸이소프로필실릴기, 디에틸이소프로필실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 펜틸디메틸실릴기, 헥실디메틸실릴기, 헵틸디메틸실릴기, 옥틸디메틸실릴기, 2-에틸헥실-디메틸실릴기, 노닐디메틸실릴기, 데실디메틸실릴기, 3,7-디메틸옥틸-디메틸실릴기, 라우릴디메틸실릴기, 페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴기, 1-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴기, 2-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴기, 페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 트리-p-크실릴실릴기, 트리벤질실릴기, 디페닐메틸실릴기, t-부틸디페닐실릴기, 디메틸페닐실릴기 등을 들 수 있다.

[0064]

상기 R로 표시되는 치환 실릴옥시기는, 알콕시기, 아릴옥시기, 아릴알콕시기 및 1가의 복소환옥시기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1, 2 또는 3개의 기로 치환된 실릴옥시기를 의미한다. 치환 실릴옥시기의 탄소수는 통상적으로 1 내지 60 정도이고, 바람직하게는 3 내지 48이다. 상기 알콕시기, 아릴옥시기, 아릴알콕시기 또는 1가의 복소환옥시기는 치환기를 가질 수도 있다. 치환 실릴옥시기로서는 트리메틸실릴옥시기, 트리에틸실릴옥시기, 트리프로필실릴옥시기, 트리이소프로필실릴옥시기, 디메틸이소프로필실릴옥시기, 디에틸이소프로필실릴옥시기, t-부틸디메틸실릴옥시기, 펜틸디메틸실릴옥시기, 헥실디메틸실릴옥시기, 헵틸디메틸실릴옥시기, 옥틸디메틸

실릴옥시기, 2-에틸헥실-디메틸실릴옥시기, 노닐디메틸실릴옥시기, 데실디메틸실릴옥시기, 3,7-디메틸옥틸-디메틸실릴옥시기, 라우릴디메틸실릴옥시기, 페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴옥시기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴옥시기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴옥시기, 1-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴옥시기, 2-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴옥시기, 페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬디메틸실릴옥시기, 트리페닐실릴옥시기, 트리-p-크실릴실릴옥시기, 트리벤질실릴옥시기, 디페닐메틸실릴옥시기, t-부틸디페닐실릴옥시기, 디메틸페닐실릴옥시기 등을 들 수 있다.

[0065] 상기 R로 표시되는 치환 실릴티오기는, 알킬티오기, 아릴티오기, 아릴알킬티오기 및 1가의 복소환티오기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1, 2 또는 3개의 기로 치환된 실릴티오기를 의미한다. 치환 실릴티오기의 탄소수는 통상적으로 1 내지 60 정도이고, 바람직하게는 3 내지 48이다. 상기 알콕시기, 아릴티오기, 아릴알킬티오기 또는 1가의 복소환 티오기는 치환기를 가질 수도 있다. 치환 실릴티오기로서는 트리메틸실릴티오기, 트리에틸실릴티오기, 트리프로필실릴티오기, 트리아이소프로필실릴티오기, 디메틸이소프로필실릴티오기, 디에틸이소프로필실릴티오기, t-부틸디메틸실릴티오기, 헥틸디메틸실릴티오기, 헥실디메틸실릴티오기, 헵틸디메틸실릴티오기, 옥틸디메틸실릴티오기, 2-에틸헥실-디메틸실릴티오기, 노닐디메틸실릴티오기, 데실디메틸실릴티오기, 3,7-디메틸옥틸-디메틸실릴티오기, 라우릴디메틸실릴티오기, 페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴티오기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴티오기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴티오기, 1-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴티오기, 2-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴티오기, 페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬디메틸실릴티오기, 트리페닐실릴티오기, 트리-p-크실릴실릴티오기, 트리벤질실릴티오기, 디페닐메틸실릴티오기, t-부틸디페닐실릴티오기, 디메틸페닐실릴티오기 등을 들 수 있다.

[0066] 상기 R로 표시되는 치환 실릴아미노기는, 알킬아미노기, 아릴아미노기, 아릴알킬아미노기 및 1가의 복소환 아미노기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1, 2 또는 3개의 기로 치환된 실릴아미노기를 의미한다. 치환 실릴아미노기의 탄소수는 통상적으로 1 내지 60 정도이고, 바람직하게는 3 내지 48이다. 상기 알콕시기, 아릴아미노기, 아릴알킬아미노기 또는 1가의 복소환 아미노기는 치환기를 가질 수도 있다. 치환 실릴아미노기로서는 트리메틸실릴아미노기, 트리에틸실릴아미노기, 트리프로필실릴아미노기, 트리아이소프로필실릴아미노기, 디메틸이소프로필실릴아미노기, 디에틸이소프로필실릴아미노기, t-부틸디메틸실릴아미노기, 헥틸디메틸실릴아미노기, 헥실디메틸실릴아미노기, 헵틸디메틸실릴아미노기, 옥틸디메틸실릴아미노기, 2-에틸헥실-디메틸실릴아미노기, 노닐디메틸실릴아미노기, 데실디메틸실릴아미노기, 3,7-디메틸옥틸-디메틸실릴아미노기, 라우릴디메틸실릴아미노기, 페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴옥시기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴아미노기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴아미노기, 1-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴아미노기, 2-나프틸-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬실릴아미노기, 페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬디메틸실릴아미노기, 트리페닐실릴아미노기, 트리-p-크실릴실릴아미노기, 트리벤질실릴아미노기, 디페닐메틸실릴아미노기, t-부틸디페닐실릴티오아미노기, 디메틸페닐실릴아미노기 등을 들 수 있다.

[0067] 상기 R로 표시되는 1가의 복소환기는, 복소환식 화합물로부터 수소 원자 1개를 제거한 나머지 원자단을 의미한다. 1가의 복소환기의 탄소수는 통상적으로 3 내지 60 정도이고, 바람직하게는 3 내지 20이다. 또한, 1가의 복소환기의 탄소수에는 치환기의 탄소수는 포함되지 않는다. 여기서, 복소환식 화합물이란, 환식 구조를 갖는 유기 화합물 중 환을 구성하는 원소가 탄소 원자뿐만 아니라, 산소, 황, 질소, 인, 붕소 등의 헤테로 원자를 환 내에 포함하는 것을 말한다. 1가의 복소환기로서는 티에닐기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬티에닐기, 피롤릴기, 푸릴기, 피리딜기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬피리딜기, 피페리딜기, 퀴놀릴기, 이소퀴놀릴기 등이 예시되며, 티에닐기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬티에닐기, 피리딜기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬피리딜기가 바람직하다. 또한, 1가의 복소환기는 1가의 방향족 복소환기인 것이 바람직하다.

[0068] 상기 R로 표시되는 헤테로아릴옥시기는 탄소수가 통상적으로 6 내지 60 정도인 것이며, 바람직하게는 7 내지 48인 것이다. 헤테로아릴옥시기로서는 티에닐기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시티에닐기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬티에닐기, 피리딜옥시기, 피리딜옥시기, 이소퀴놀릴옥시기 등을 들 수 있으며, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시피리딜기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬피리딜기가 바람직하다.

[0069] 상기 C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시피리딜기로서는, 메톡시피리딜기, 에톡시피리딜기, 프로필옥시피리딜기, 이소프로필옥시피리딜기, 부톡시피리딜기, 이소부톡시피리딜기, s-부톡시피리딜기, t-부톡시피리딜기, 헵틸옥시피리딜기, 헥실옥시피리딜기, 시클로헥실옥시피리딜기, 헵틸옥시피리딜기, 옥틸옥시피리딜기, 2-에틸헥실옥시피리딜기, 노닐옥

시피리딜기, 테실옥시피리딜기, 3,7-디메틸옥틸옥시피리딜기, 라우릴옥시피리딜기 등을 들 수 있다.

[0070] 상기 C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬피리딜옥시기로서는, 메틸피리딜옥시기, 에틸피리딜옥시기, 디메틸피리딜옥시기, 프로필피리딜옥시기, 1,3,5-트리메틸피리딜옥시기, 메틸에틸피리딜옥시기, 이소프로필피리딜옥시기, 부틸피리딜옥시기, 이소부틸피리딜옥시기, s-부틸피리딜옥시기, t-부틸피리딜옥시기, 펜틸피리딜옥시기, 이소아밀피리딜옥시기, 헥실피리딜옥시기, 헵틸피리딜옥시기, 옥틸피리딜옥시기, 노닐피리딜옥시기, 데실피리딜옥시기, 도데실피리딜옥시기 등을 들 수 있다.

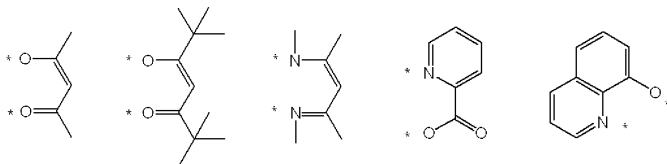
[0071] 상기 R로 표시되는 헤테로아릴티오기는 탄소수가 통상적으로 6 내지 60 정도인 것이며, 바람직하게는 7 내지 48인 것이다. 헤테로아릴티오기로서는 피리딜티오기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시피리딜티오기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬피리딜티오기, 이소퀴놀릴티오기 등을 들 수 있으며, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시피리딜티오기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬피리딜티오기가 바람직하다.

[0072] 상기 R로 표시되는 아릴알케닐기는 탄소수가 통상적으로 8 내지 60 정도인 것이며, 바람직하게는 8 내지 48인 것이다. 아릴알케닐기로서는 페닐-C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알케닐기("C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알케닐"은 알케닐 부분의 탄소수가 2 내지 12인 것을 의미하고, 이하 동일함), C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알케닐기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알케닐기, 1-나프틸-C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알케닐기, 2-나프틸-C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알케닐기 등을 들 수 있으며, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알케닐기, C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알케닐기가 바람직하다.

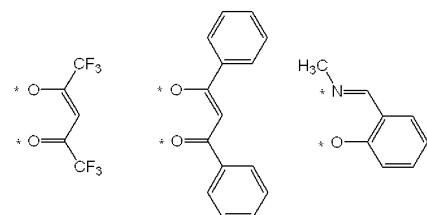
[0073] 상기 R로 표시되는 아릴알키닐기는 탄소수가 통상적으로 8 내지 60 정도인 것이며, 바람직하게는 8 내지 48인 것이다. 아릴알키닐기로서는 페닐-C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알키닐기("C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알키닐"은 알키닐 부분의 탄소수가 2 내지 12인 것을 의미하고, 이하 동일함), C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알키닐기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알키닐기, 1-나프틸-C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알키닐기, 2-나프틸-C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알키닐기 등을 들 수 있으며, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알콕시페닐-C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알키닐기, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>12</sub>알킬페닐-C<sub>2</sub> 내지 C<sub>12</sub>알키닐기가 바람직하다.

[0074] 상기 R로 표시되는 치환 카르복실기는 탄소수가 통상적으로 2 내지 60 정도인 것이며, 바람직하게는 2 내지 48인 것이고, 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 또는 1개의 복소환기로 치환된 카르복실기를 의미한다. 치환 카르복실기로서는 메톡시카르보닐기, 에톡시카르보닐기, 프로폭시카르보닐기, 이소프로폭시카르보닐기, 부톡시카르보닐기, 이소부톡시카르보닐기, s-부톡시카르보닐기, t-부톡시카르보닐기, 펜틸옥시카르보닐기, 헥실옥시카르보닐기, 시클로헥실옥시카르보닐기, 헵틸옥시카르보닐기, 옥틸옥시카르보닐기, 2-에틸헥실옥시카르보닐기, 노닐옥시카르보닐기, 데실옥시카르보닐기, 3,7-디메틸옥틸옥시카르보닐기, 도데실옥시카르보닐기, 트리플루오로메톡시카르보닐기, 펜타플루오로에톡시카르보닐기, 퍼플루오로부톡시카르보닐기, 퍼플루오로헥실옥시카르보닐기, 퍼플루오로옥틸옥시카르보닐기, 피리딜옥시카르보닐기, 나프톡시카르보닐기, 피리딜옥시카르보닐기 등을 들 수 있다. 상기 알킬기, 아릴기, 아릴알킬기 또는 1개의 복소환기는 치환기를 가질 수도 있다. 치환 카르복실기의 탄소수에는 상기 치환기의 탄소수는 포함되지 않는다.

[0075] 상기 모노 음이온성의 2좌 배위자로서는, 상기 화학식 (3)에서의 R<sup>x</sup>와 R<sup>y</sup>를 연결하는 원호 부분은 수소 원자 이외의 원자수가 3 내지 30인 2개의 기인 것이 바람직하고, 예를 들면 이하의 구조를 들 수 있다.

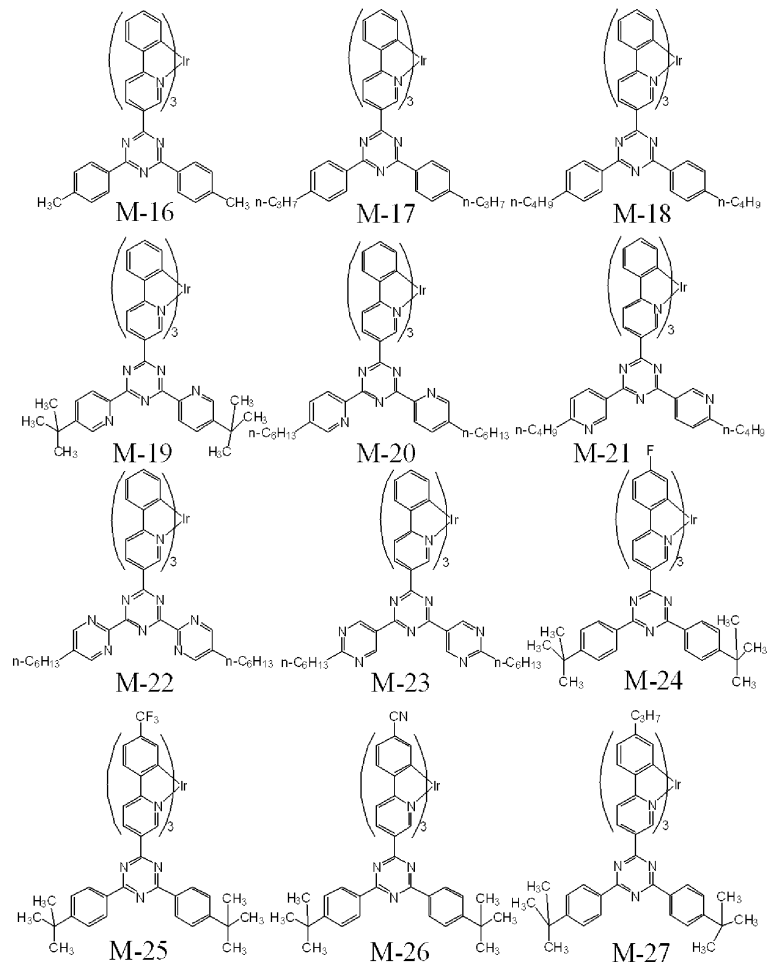


[0076]

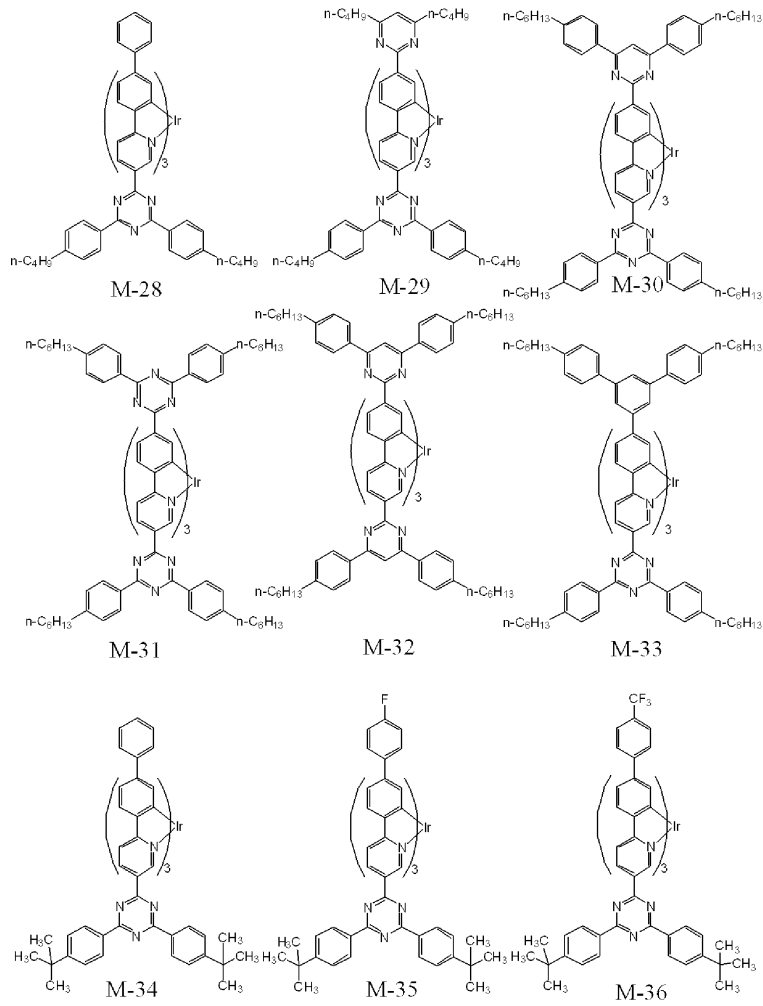


[0077]

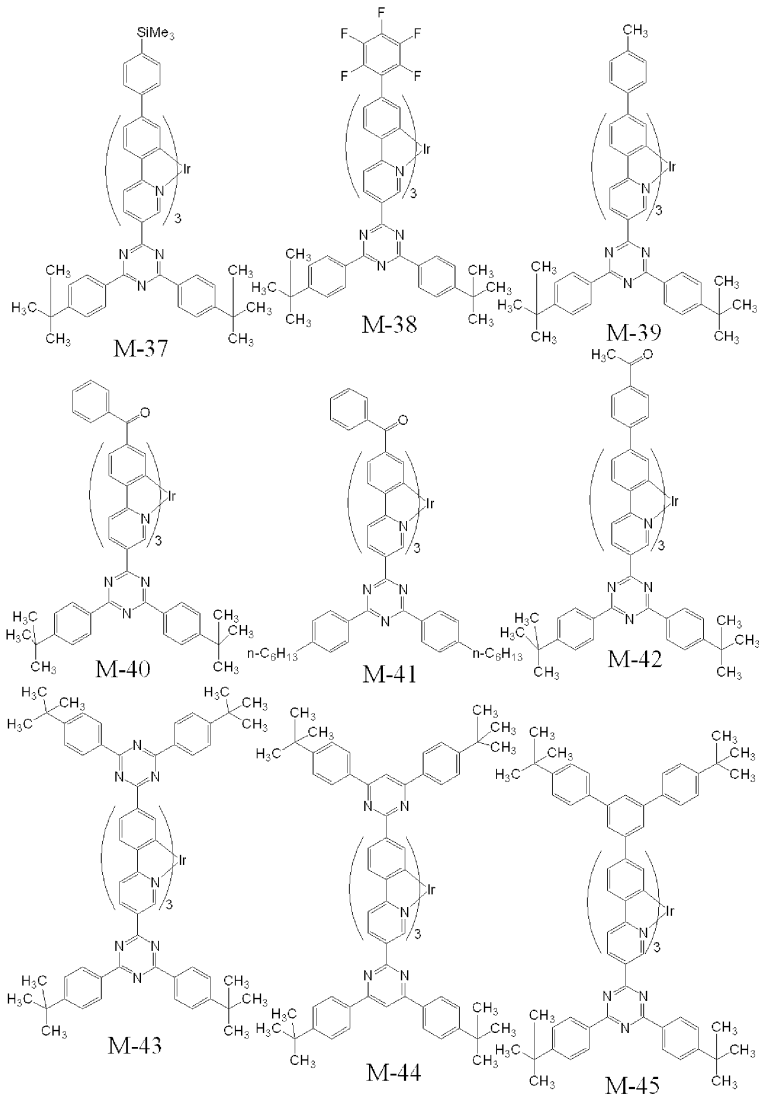




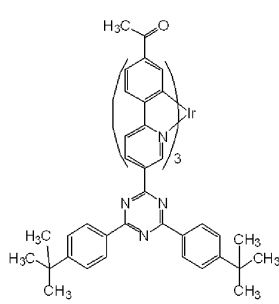
[0082]



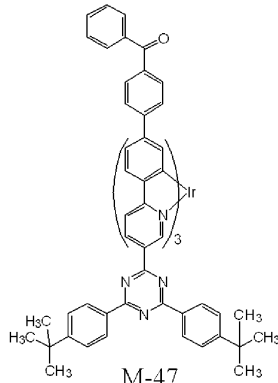
[0083]



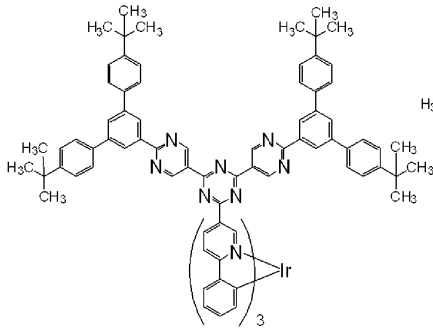
[0084]



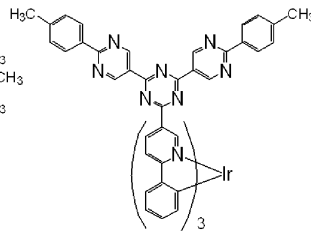
M-46



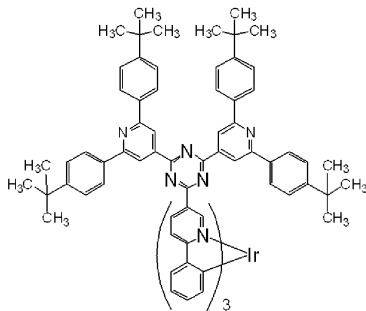
M-47



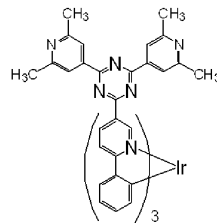
M-48



M-49



M-50



M-51

[0085]

[0086]

상기 금속 착체 M-1 내지 M-51 중 대표적인 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 열거하면, 금속 착체 M-1은 1.62 eV, 금속 착체 M-3은 1.92 eV, 금속 착체 M-7은 2.08 eV, 금속 착체 M-16은 2.05 eV, 금속 착체 M-51은 2.46 eV이다.

[0087]

상기 금속 착체로서는, 안정된 고효율 발광의 관점에서 금지 전이를 풀기 쉬운 삼중항 여기 상태의 수명이 짧은 금속 착체가 바람직하다.

[0088]

또한, 상기 금속 착체는 1종 단독으로 사용할 수도 있고, 2종 이상을 병용할 수도 있다.

[0089]

이어서, 상기 금속 착체의 제조 방법을 설명한다.

[0090]

상기 금속 착체는, 예를 들면 배위자가 되는 화합물과 금속 화합물을 용액 중에서 반응시킴으로써 합성할 수 있다. 필요에 따라 반응계 중에 염기, 은염 화합물 등이 존재하고 있을 수도 있다. 또한, 2-페닐피리딘 유도체를 배위자에 갖는 금속 착체와 헤테로환 방향족 화합물의 커플링 반응에 의해 상기 금속 착체를 합성할 수 있다.

[0091]

착체화의 방법(즉, 배위자가 되는 화합물과 금속 화합물을 용액 중에서 반응시키는 방법)으로서, 이리듐 착체의 경우 문헌 [J. Am. Chem. Soc. 1984, 106, 6647 ; Inorg. Chem. 1991, 30, 1685; Inorg. Chem. 1994, 33, 545; Inorg. Chem. 2001, 40, 1704; Chem. Lett., 2003, 32, 252] 등에 기재된 방법이 예시되며, 백금 착체의 경우 문헌 [Inorg. Chem., 1984, 23, 4249; Chem. Mater. 1999, 11, 3709; Organometallics, 1999, 18, 1801] 등에 기재된 방법을 들 수 있고, 팔라듐 착체의 경우 문헌 [J. Org. Chem., 1987, 52, 73] 등에 기재된 방법을 들 수 있다.

[0092]

착체화의 반응 온도는 통상적으로 용매의 융점으로부터 비점 사이에서 반응시킬 수 있으며, -78 °C 내지 용매의

비점이 바람직하다. 반응 시간은 통상적으로 30분 내지 30 시간 정도이다. 단, 착체화 반응에서 마이크로 웨이브 반응 장치를 사용하는 경우 용매의 비점 이상에서 반응시킬 수도 있고, 반응 시간은 수분 내지 수 시간 정도이다.

[0093] 상기 배위자가 되는 화합물은, 예를 들면 2-페닐피리딘 유도체와 헤테로환 방향족 화합물의 스즈키(Suzuki) 커플링, 그리냐르(Grignard) 커플링, 스틸(Stille) 커플링 등에 의해 합성할 수 있다. 필요에 따라 유기 용매에 용해하고, 예를 들면 알칼리, 적절한 촉매 등을 사용하여 유기 용매의 융점 이상 비점 이하의 온도에서 반응시킴으로써 합성할 수 있다. 이 합성에는, 예를 들면 문헌 ["Organic Syntheses", Collective Volume VI, 407-411페이지, John Wiley & Sons, Inc., 1988년; Chem. Rev., 제106권, 2651페이지(2006년); Chem. Rev., 제102권, 1359페이지(2002년); Chem. Rev., 제95권, 2457페이지(1995년); J. Organomet. Chem., 제576권, 147페이지(1999년)] 등에 기재된 방법을 이용할 수 있다.

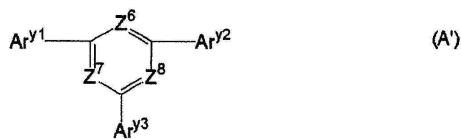
[0094] 상기 헤테로환 방향족 화합물은, 문헌 ["HOUBEN-WEYL METHODS OF ORGANIC CHEMISTRY 4<sup>TH</sup> EDITION", 제E9b권, 1페이지, GEORG THIEME VERLAG STUTTGART; HOUBEN-WEYL METHODS OF ORGANIC CHEMISTRY 4<sup>TH</sup> EDITION, 제E9c권, 667페이지, GEORG THIEME VERLAG STUTTGART] 등에 기재된 방법으로 합성할 수 있다.

[0095] -유기 화합물-

[0096] 상기 유기 화합물은 저분자 화합물일 수도 있고, 고분자 화합물일 수도 있지만, 발광 소자에 사용했을 때 발광 효율이나 수명 등의 소자 특성이나 성막성의 관점에서 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량이  $2 \times 10^3$  이상인 것이 바람직하고,  $2 \times 10^3$  내지  $1 \times 10^8$ 인 것이 보다 바람직하고,  $1 \times 10^4$  내지  $1 \times 10^6$ 인 것이 특히 바람직하다. 또한, 본 명세서에서 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량이  $2 \times 10^3$  이상인 화합물을 고분자 화합물이라고 하고, 한편 단일 조성으로 이루어지는 것을 저분자 화합물(통상적으로 수 평균 분자량은  $2 \times 10^3$  미만임)이라고 한다. 또한, 상기 유기 화합물은 덴드리머나 올리고머 등의 저분자 화합물과 고분자 화합물의 중간적인 구조인 것일 수도 있다.

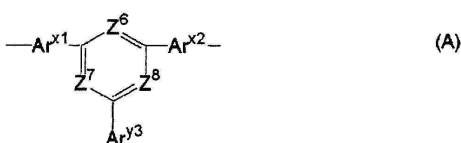
[0097] 상기 유기 화합물로서는, 예를 들면 트리아졸 유도체, 옥사졸 유도체, 이미다졸 유도체, 옥사디아졸 유도체, 플루오레논 유도체, 안트라퀴노디메탄 유도체, 트리아진 유도체, 피리미딘 유도체, 피리딘 유도체 및 이들의 잔기를 갖는 화합물 등을 들 수 있으며, 트리아진 유도체, 피리미딘 유도체가 바람직하다.

[0098] 상기 유기 화합물로서는, 구동 전압을 한층 더 감소시키는 관점에서 하기 화학식 (A')로 표시되는 화합물 또는 그의 잔기를 갖는 화합물인 것이 바람직하고, 하기 화학식 (A)로 표시되는 2가의 기를 갖는 화합물인 것이 보다 바람직하고, 하기 화학식 (A)로 표시되는 2가의 기를 갖는 화합물이 하기 화학식 (A)로 표시되는 2가의 기를 반복 단위로서 갖는 고분자 화합물인 것이 특히 바람직하고, 이들에서  $Z^6$ ,  $Z^7$  및  $Z^8$ 이 질소 원자인 화합물인 것이 특히 바람직하다.



[0099]

[0100] (식 중,  $Ar^{y1}$ ,  $Ar^{y2}$  및  $Ar^{y3}$ 은 각각 독립적으로 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내고,  $Z^6$ ,  $Z^7$  및  $Z^8$ 은 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내되, 단  $Z^6$ ,  $Z^7$  및  $Z^8$  중 적어도 2개는 질소 원자이고,  $Z^6$ ,  $Z^7$  및  $Z^8$  중 어느 하나가 탄소 원자인 경우에는 상기 탄소 원자에 결합하는 수소 원자는 치환기에 의해 치환되어 있을 수도 있음)

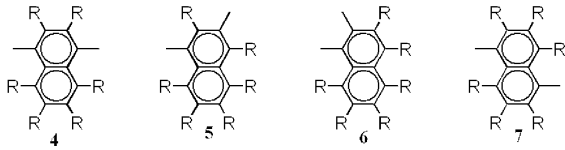
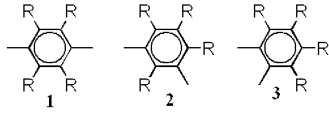


[0101]

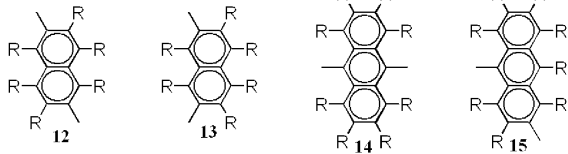
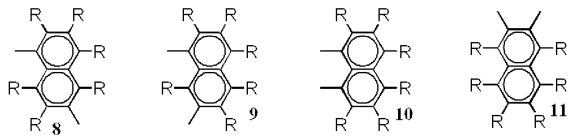
[0102] (식 중,  $Ar^{x1}$  및  $Ar^{x2}$ 는 아릴렌기 또는 2가의 복소환기를 나타내고,  $Ar^{y3}$  및  $Z^6$  내지  $Z^8$ 은 상기와 동일한 의미를

가짐)

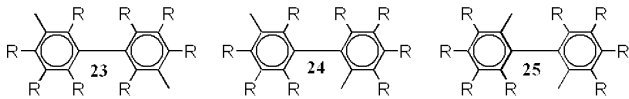
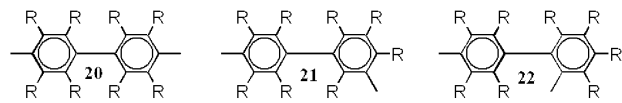
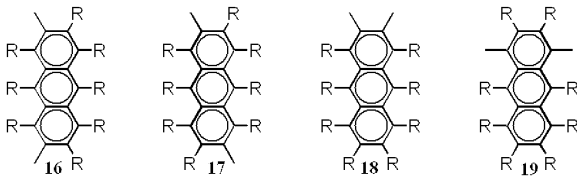
[0103] 상기 화학식 (A) 중  $Ar^{x1}$  및  $Ar^{x2}$  로 표시되는 아릴렌기로서는, 페닐렌기(예를 들면, 하기 화학식 1 내지 3), 나프탈렌디일기(예를 들면, 하기 화학식 4 내지 13), 안트라센-디일기(예를 들면, 하기 화학식 14 내지 19), 비페닐-디일기(예를 들면, 하기 화학식 20 내지 25), 터페닐-디일기(예를 들면, 하기 화학식 26 내지 28), 축합 환 화합물기(예를 들면, 하기 화학식 29 내지 35), 플루오렌-디일기(예를 들면, 하기 화학식 36 내지 38), 스틸벤-디일기(하기 화학식 39 내지 42), 디스틸벤-디일기(예를 들면, 하기 화학식 43, 44), 벤조플루오렌-디일기(예를 들면, 하기 화학식 A-1 내지 A-3), 디벤조플루오렌-디일기(예를 들면, 하기 화학식 A-4) 등이 예시된다.



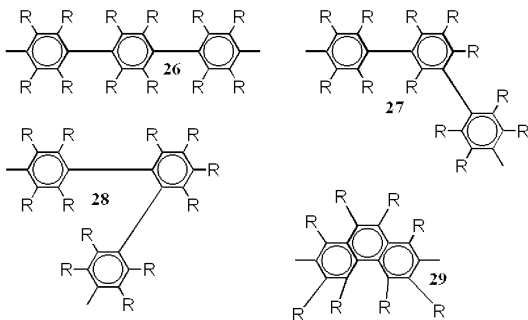
[0104]



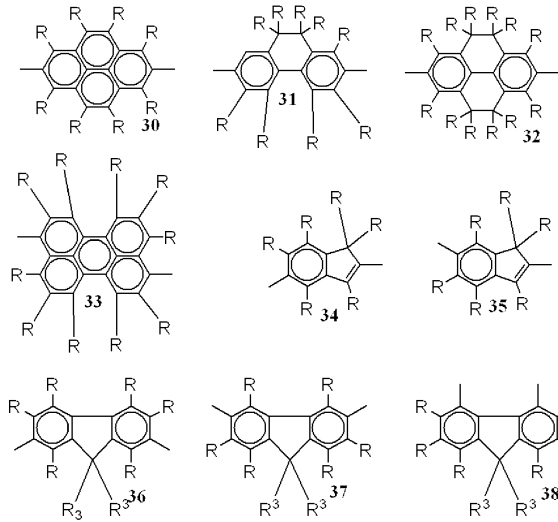
[0105]



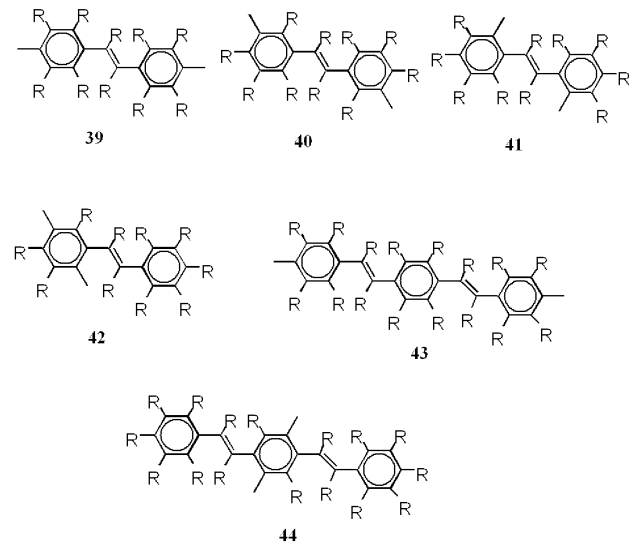
[0106]



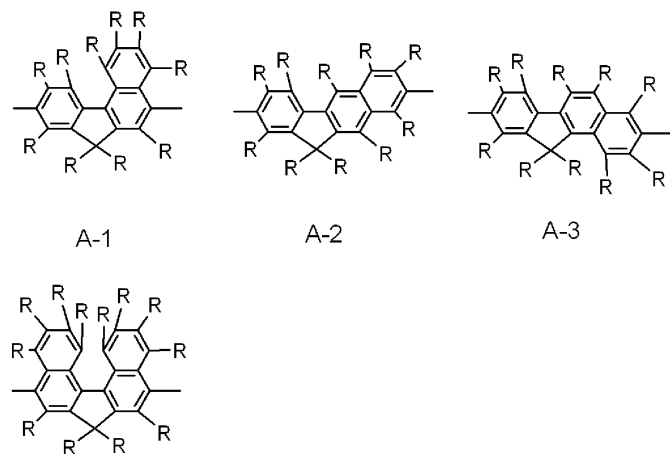
[0107]



[0108]



[0109]



[0110]

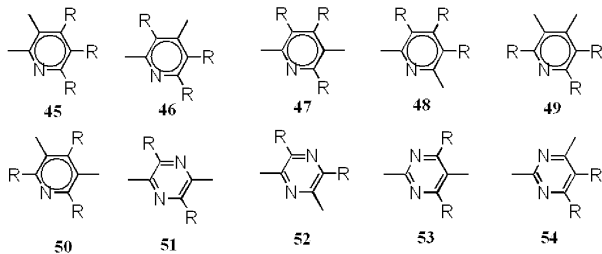
[0111]

(식 중, R은 상기와 동일한 의미를 갖고, R<sup>3</sup>은 수소 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 할로겐 원자, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 카르복실기, 치환 카르복실기, 니트르기, 시아노기를 나타내고, 복수개 있는 R 및 R<sup>3</sup>은 각각 동일하거나

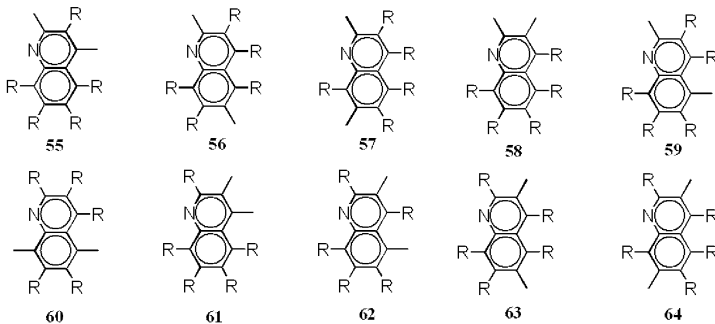
상이할 수 있음)

[0112] 상기 화학식 (A) 중  $Ar^{y3}$ 으로 표시되는 아릴기는, 상기 R로 표시되는 아릴기의 항에서 설명하여 예시한 것과 동일하다.

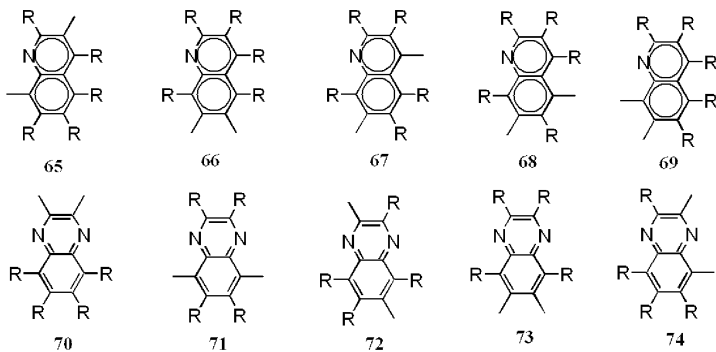
[0113]  $Ar^{x1}$  및  $Ar^{x2}$ 로 표시되는 2가의 복소환기로서는, 예를 들면 피리딘디일기(예를 들면, 하기 화학식 45 내지 50), 디아자페닐렌기(예를 들면, 하기 화학식 51 내지 54), 퀴놀린디일기(예를 들면, 하기 화학식 55 내지 69), 퀴놀살린디일기(예를 들면, 하기 화학식 70 내지 74), 아크리딘디일기(예를 들면, 하기 화학식 75 내지 78), 비피리딘디일기(예를 들면, 하기 화학식 79 내지 81), 페난트롤린디일기(예를 들면, 하기 화학식 82 내지 84), 카르바졸 구조를 갖는 기(예를 들면, 하기 화학식 85 내지 87) 등의 헤테로 원자로서 질소를 포함하는 2가의 복소환기; 헤테로 원자로서 산소, 규소, 질소, 황, 셀레늄 등을 포함하는 5원환 복소환기(예를 들면, 하기 화학식 88 내지 92); 헤테로 원자로서 산소, 규소, 질소, 황, 셀레늄 등을 포함하는 5원환 축합 복소환기(예를 들면, 하기 화학식 93 내지 103); 헤테로 원자로서 산소, 규소, 질소, 황, 셀레늄 등을 포함하는 5원환 복소환기로 그 헤테로 원자의  $\alpha$  위치에서 결합하여 2량체나 올리고머가 되어 있는 기(예를 들면, 하기 화학식 104 또는 105); 헤테로 원자로서 산소, 규소, 질소, 황, 셀레늄 등을 포함하는 5원환 복소환기로 그 헤테로 원자의  $\alpha$  위치에서 페닐기에 결합하고 있는 기(예를 들면, 하기 화학식 106 내지 112); 헤테로 원자로서 산소, 질소, 황 등을 포함하는 5원환 축합 복소환기에 페닐기나 푸릴기, 티에닐기가 치환된 기(예를 들면, 하기 화학식 113 내지 118) 등을 들 수 있다.



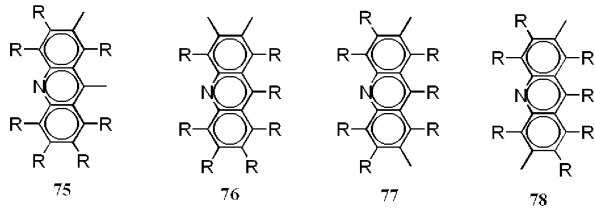
[0114]



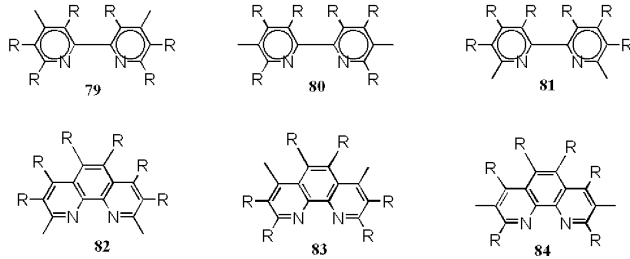
[0115]



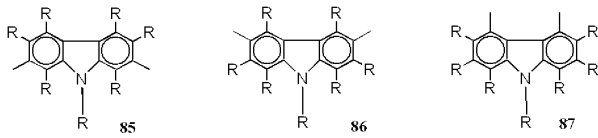
[0116]



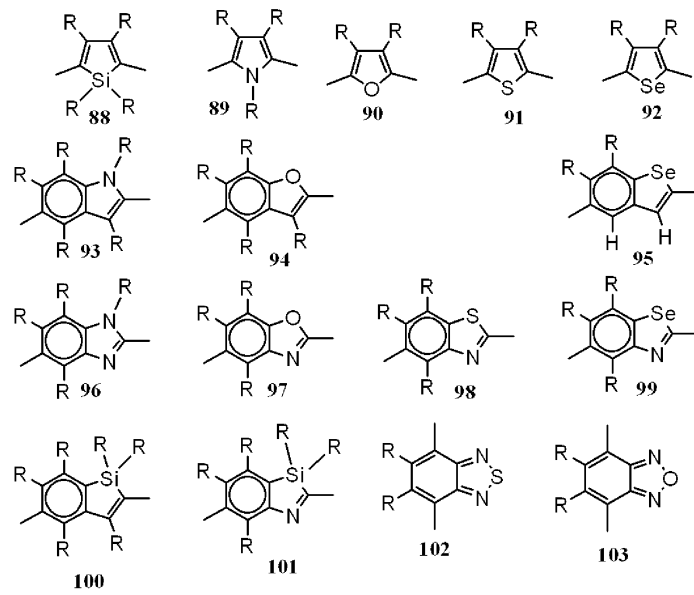
[0117]



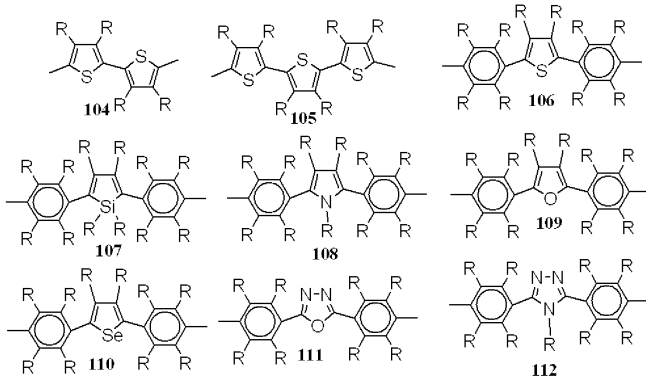
[0118]



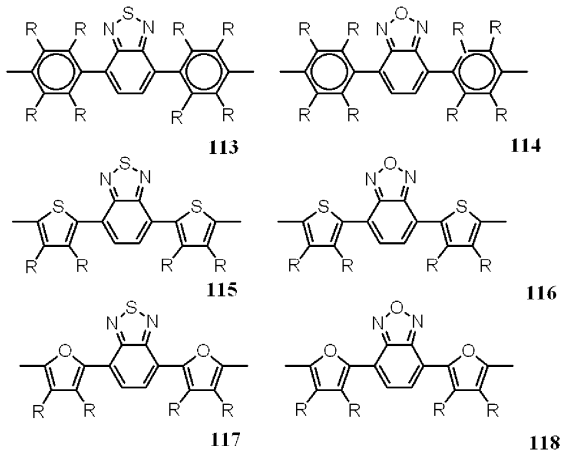
[0119]



[0120]



[0121]



[0122]

[0123] (식 중, R은 상기와 동일함)

[0124] Ar<sup>y3</sup>으로 표시되는 1가의 복소환기는, 상기 R로 표시되는 1가의 복소환기로서 설명하여 예시한 것과 동일하다.

[0125] 상기 화학식 (A') 중 Ar<sup>y1</sup> 및 Ar<sup>y2</sup>로 표시되는 아릴기는, 상기 Ar<sup>x1</sup> 및 Ar<sup>x2</sup>로 표시되는 아릴렌기로서 설명하여 예시한 것에서 2개의 결합손 중 1개가 R로 치환된 것과 동일하다.

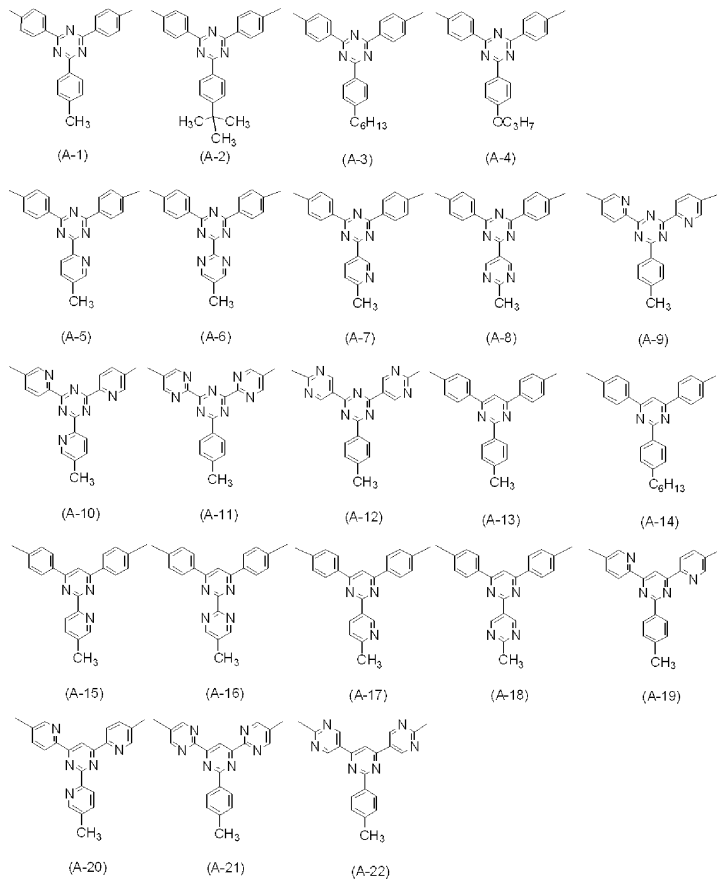
[0126] 상기 화학식 (A') 중 Ar<sup>y3</sup>으로 표시되는 아릴기는, 상기 R로 표시되는 아릴기로서 설명하여 예시한 것과 동일하다.

[0127] 상기 화학식 (A') 중 Ar<sup>y1</sup> 및 Ar<sup>y2</sup>로 표시되는 1가의 복소환기는, 상기 Ar<sup>x1</sup> 및 Ar<sup>x2</sup>로 표시되는 2가의 복소환기로서 설명하여 예시한 것에서 2개의 결합손 중 1개가 R로 치환된 것과 동일하다.

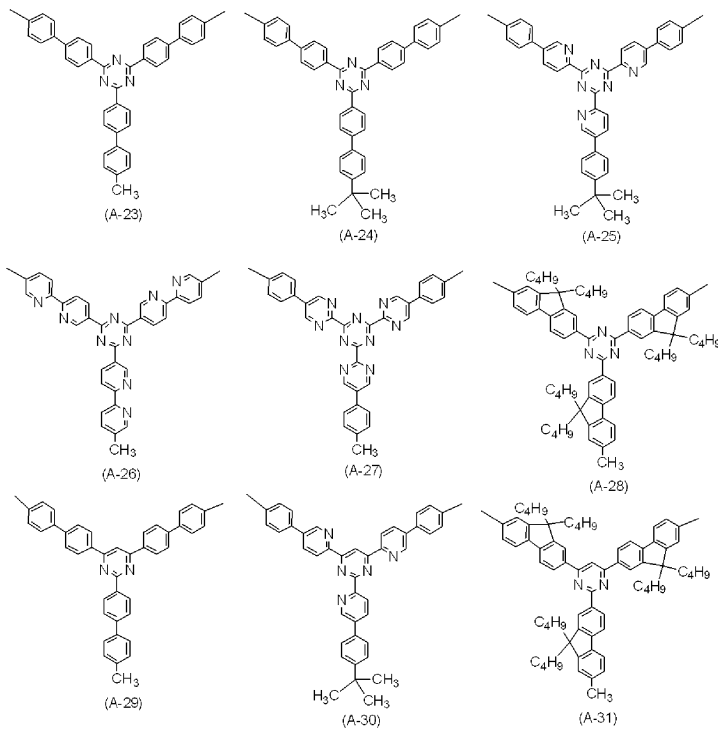
[0128] 상기 화학식 (A') 중, Ar<sup>y3</sup>으로 표시되는 1가의 복소환기는, 상기 R로 표시되는 1가의 복소환기로서 설명하여 예시한 것과 동일하다.

[0129] 상기 화학식 (A) 및 (A') 중 Ar<sup>x1</sup> 내지 Ar<sup>x3</sup>, Ar<sup>y1</sup> 내지 Ar<sup>y3</sup>으로 표시되는 기가 가질 수도 있는 치환기로서는, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 할로젠 원자, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 카르복실기, 치환 카르복실기, 시아노기 및 니트로기를 들 수 있다. 이들 치환기는 상기 R로 표시되는 기, 원자로서 설명하여 예시한 것과 동일하다.

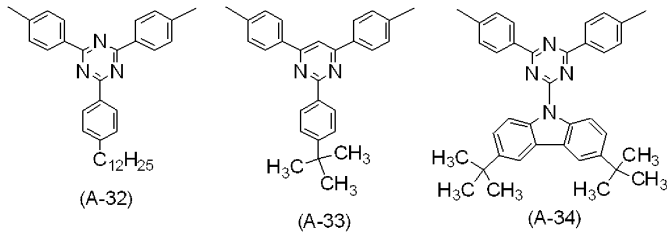
[0130] 상기 화학식 (A)로 표시되는 2가의 기로서는, 이하의 것을 들 수 있다.



[0131]



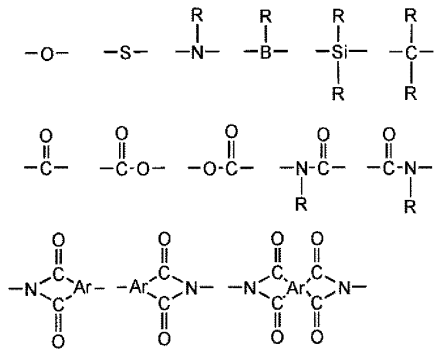
[0132]



[0133]

[0134] 상기 유기 화합물이 고분자 화합물인 경우, 박막으로 했을 때의 전하 수송성, 발광 소자에 사용했을 때 발광 효율이나 수명 등의 소자 특성의 관점에서 공액계 고분자가 바람직하다. 여기서, 공액계 고분자란, 중합체의 주쇄 골격에 따라서 비국재 π 전자쌍이 존재하고 있는 고분자 화합물을 의미한다. 이 비국재 전자로서는, 2중 결합 대신에 홑 전자 또는 고립 전자쌍이 공명에 가해지는 경우도 있다.

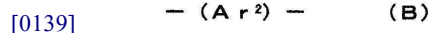
[0135] 상기 유기 화합물이 고분자 화합물인 경우, 발광 특성이나 전하 수송 특성을 손상시키지 않는 범위에서 비공액의 단위로 연결되어 있을 수도 있고, 반복 단위에 이들의 비공액 부분이 포함되어 있을 수도 있다. 비공액인 결합 구조로서는, 이하에 나타내는 식으로 표시되는 구조, 및 이하에 나타내는 식으로 표시되는 구조 중 2개 이상을 조합한 구조를 들 수 있다. 또한, 이하에 나타내는 식 중 R은 상기와 동일한 의미를 갖는다. Ar은 방향족 탄화수소환 또는 복소환을 나타낸다.



[0136]

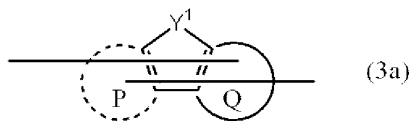
[0137] 상기 유기 화합물이 고분자 화합물인 경우 랜덤 공중합체, 블록 공중합체 또는 그래프트 공중합체일 수도 있고, 이들의 중간적인 구조를 갖는 고분자, 예를 들면 블록성을 띤 랜덤 공중합체일 수도 있다. 형광 또는 인광의 양자 수율이 높은 고분자 발광체를 얻는 관점에서는 완전한 랜덤 공중합체보다 블록성을 띤 랜덤 공중합체, 블록 공중합체 또는 그래프트 공중합체가 바람직하다. 또한, 상기 유기 화합물에는 주쇄에 분지가 있으며, 말단부가 3개 이상 있는 것이나 덴드리머도 포함된다.

[0138] 상기 화학식 (A)로 표시되는 2가의 기를 반복 단위로써 갖는 고분자 화합물은, 추가로 하기 화학식 (B)로 표시되는 반복 단위를 가질 수도 있다.



[0140] (식 중, Ar<sup>2</sup>는 치환기를 가질 수도 있는 아릴렌기 또는 치환기를 가질 수도 있는 2가의 복소환기를 나타냄)

[0141] 상기 화학식 (B) 중 Ar<sup>2</sup>로 표시되는 치환기를 가질 수도 있는 아릴렌기로서는, 치환기를 가질 수도 있는 페닐렌기 또는 치환기를 가질 수도 있는 나프틸렌기, 하기 화학식 (3a)로 표시되는 기를 들 수 있다.



[0142]

[0143] (식 중, P환 및 Q환은 각각 독립적으로 방향환을 나타내지만, P환은 존재하지 않을 수도 있고, 2개의 결합손은 P환이 존재하는 경우에는 각각 P환 또는 Q환 상에 존재하고, P환이 존재하지 않는 경우에는 각각 Y<sup>1</sup>을 포함하는 5원환, 6원환 또는 Q환 상에 존재하고, P환, Q환 및 Y<sup>1</sup>을 포함하는 5원환 또는 6원환은 각각 독립적으로

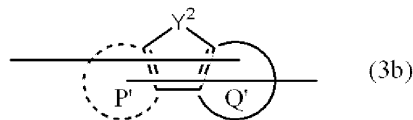
알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 할로젠 원자, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 카르복실기, 치환 카르복실기 및 시아노기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1종의 치환기를 가질 수도 있고, Y<sup>1</sup>은 -C(R<sup>11</sup>)(R<sup>12</sup>)-, -C(R<sup>14</sup>)(R<sup>15</sup>)-C(R<sup>16</sup>)(R<sup>17</sup>)- 또는 -C(R<sup>32</sup>)=C(R<sup>33</sup>)-을 나타내고, R<sup>11</sup>, R<sup>12</sup>, R<sup>14</sup> 내지 R<sup>17</sup>, R<sup>32</sup> 및 R<sup>33</sup>은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 실릴옥시기, 치환 실릴옥시기, 1가의 복소환기 또는 할로젠 원자를 나타냄)

[0144] 상기 화학식 (3a) 중, P환, Q환 및 Y<sup>1</sup>을 포함하는 5원환 또는 6원환이 가질 수도 있는 치환기인 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 할로젠 원자, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 카르복실기, 치환 카르복실기 및 시아노기는, 상기 R로 표시되는 기, 원자로서 설명하여 예시한 것과 동일하다.

[0145] 상기 화학식 (3a) 중, R<sup>11</sup>, R<sup>12</sup>, R<sup>14</sup> 내지 R<sup>17</sup>, R<sup>32</sup> 및 R<sup>33</sup>으로 표시되는 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 실릴옥시기, 치환 실릴옥시기, 1가의 복소환기 및 할로젠 원자는, 상기 R로 표시되는 기, 원자로서 설명하여 예시한 것과 동일하다.

[0146] 상기 화학식 (B) 중 Ar<sup>2</sup>로 표시되는 2가의 복소환기란, 복소환식 화합물로부터 수소 원자 2개를 제거한 나머지 원자단을 말하며, 상기 기는 치환기를 가질 수도 있다. 상기 복소환식 화합물이란, 환식 구조를 갖는 유기 화합물 중 환을 구성하는 원소가 탄소 원자뿐만 아니라, 산소 원자, 질소 원자, 규소 원자, 게르마늄 원자, 주석 원자, 인 원자, 붕소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 및 텔루륨 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자를 1종 이상 갖는 것을 말한다. 또한, 2가의 복소환기는 2가의 방향족 복소환기인 것이 바람직하다. 2가의 복소환기의 치환기를 제거한 부분의 탄소수는 통상적으로 3 내지 60 정도이다. 2가의 복소환기의 치환기를 포함시킨 전체 탄소수는 통상적으로 3 내지 100 정도이다.

[0147] 상기 화학식 (B) 중 Ar<sup>2</sup>로 표시되는 2가의 복소환기로서는, 하기 화학식 (3b)로 표시되는 기를 들 수 있다.



[0148]

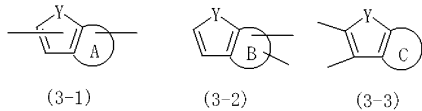
[0149] (식 중, P'환 및 Q'환은 각각 독립적으로 방향환을 나타내지만, P'환은 존재하거나 존재하지 않을 수도 있고, 2개의 결합선은 P'환이 존재하는 경우에는 각각 P'환 또는 Q'환 상에 존재하고, P'환이 존재하지 않는 경우에는 각각 Y<sup>2</sup>를 포함하는 5원환 또는 6원환 또는 Q'환 상에 존재하고, P'환, Q'환 및 Y<sup>2</sup>를 포함하는 5원환 또는 6원환은 각각 독립적으로 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 할로젠 원자, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 카르복실기, 치환 카르복실기 및 시아노기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1종의 치환기를 가질 수도 있고, Y<sup>2</sup>는 -O-, -S-, -Se-, -B(R<sup>6</sup>)-, -Si(R<sup>7</sup>)(R<sup>8</sup>)-, -P(R<sup>9</sup>)-, -PR<sup>10</sup>(=O)-, -N(R<sup>13</sup>)-, -O-C(R<sup>18</sup>)(R<sup>19</sup>)-, -S-C(R<sup>20</sup>)(R<sup>21</sup>)-, -N-C(R<sup>22</sup>)(R<sup>23</sup>)-, -Si(R<sup>24</sup>)(R<sup>25</sup>)-C(R<sup>26</sup>)(R<sup>27</sup>)-, -Si(R<sup>28</sup>)(R<sup>29</sup>)-Si(R<sup>30</sup>)(R<sup>31</sup>)-, -N=C(R<sup>34</sup>)- 또는 -Si(R<sup>35</sup>)=C(R<sup>36</sup>)-을 나타내고, R<sup>6</sup> 내지 R<sup>10</sup>, R<sup>13</sup>, R<sup>18</sup> 내지 R<sup>31</sup> 및 R<sup>34</sup> 내지 R<sup>36</sup>은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 실릴옥시기, 치환 실릴옥시기, 1가의 복소환기 또는 할로젠 원자를 나타냄)

[0150] 상기 화학식 중 P'환, Q'환 및 Y<sup>2</sup>를 포함하는 5원환 또는 6원환이 가질 수도 있는 치환기인 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 할로젠 원자, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미

드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 카르복실기, 치환 카르복실기 및 시아노기는, 상기 R로 표시되는 기, 원자로서 설명하여 예시한 것과 동일하다.

[0151] 상기 화학식 중, R<sup>6</sup> 내지 R<sup>10</sup>, R<sup>13</sup>, R<sup>18</sup> 내지 R<sup>31</sup> 및 R<sup>34</sup> 내지 R<sup>36</sup>으로 표시되는 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 실릴옥시기, 치환 실릴옥시기, 1가의 복소환기 및 할로젠 원자는 상기 R로 표시되는 기, 원자로서 설명하여 예시한 것과 동일하다.

[0152] 상기 화학식 (3a), 상기 화학식 (3b)로 표시되는 기로서는, 하기 화학식 (3-1), 하기 화학식 (3-2) 또는 하기 화학식 (3-3)으로 표시되는 기; 하기 화학식 (3-4) 또는 하기 화학식 (3-5)로 표시되는 기를 들 수 있고, 하기 화학식 (3-4) 또는 하기 화학식 (3-5)로 표시되는 기가 바람직하다.



[0153]

[0154] (식 중, A환, B환 및 C환은 각각 독립적으로 방향환을 나타내고, 화학식 (3-1), (3-2) 및 (3-3)은 각각 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 할로젠 원자, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 카르복실기, 치환 카르복실기 및 시아노기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 치환기를 가질 수도 있고, Y는 상기와 동일한 의미를 나타냄)



[0155]

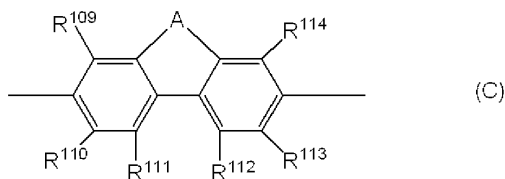
[0156] (식 중, D환, E환, F환 및 G환은 각각 독립적으로 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 할로젠 원자, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 카르복실기, 치환 카르복실기 및 시아노기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기를 가질 수도 있는 방향환을 나타내고, Y는 상기와 동일한 의미를 나타냄)

[0157] 상기 화학식 중, Y는 -S-, -O-, -C(R<sup>11</sup>)(R<sup>12</sup>)-인 것이 고발광 효율의 관점에서 바람직하고, 더욱 바람직하게는 -S-, -O-이다. 여기서, R<sup>11</sup>, R<sup>12</sup>는 상기와 동일한 의미를 나타낸다.

[0158] 상기 화학식 (3-1) 내지 (3-5)에서의 방향환으로서는, 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 테트라센환, 펜타센환, 피렌환, 페난트렌환 등의 방향족 탄화수소환; 피리딘환, 비피리딘환, 페난트롤린환, 퀴놀린환, 이소퀴놀린환, 티오펜환, 푸란환, 피롤환 등의 복소 방향환을 들 수 있다.

[0159] 상기 화학식 (3-1) 내지 (3-5)로 표시되는 기가 가질 수도 있는 치환기로서는, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알키닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 카르복실기, 치환 카르복실기가 바람직하다.

[0160] 상기 화학식 (3-1) 내지 (3-5)로 표시되는 기 중에서도, 하기 화학식 (C)로 표시되는 기가 바람직하다.

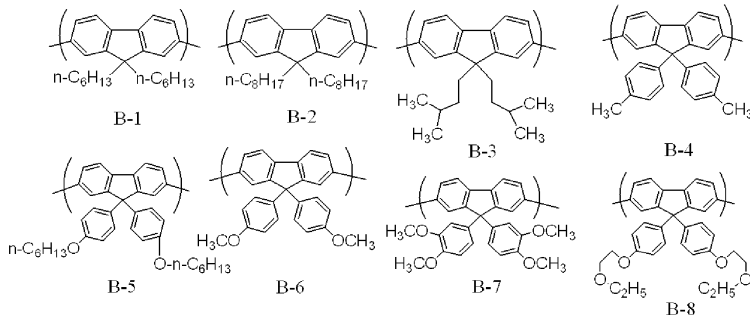


[0161]

[0162] (식 중, R<sup>109</sup>, R<sup>110</sup>, R<sup>111</sup>, R<sup>112</sup>, R<sup>113</sup> 및 R<sup>114</sup>는 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 알킬기, 알킬옥시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 알케닐기,

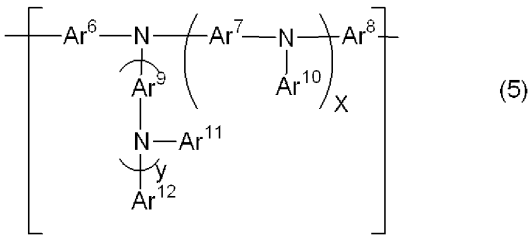
알킬닐기, 아릴알케닐기, 아릴알킬닐기, 아실기, 아실옥시기, 아미드기, 산 이미드기, 이민 잔기, 치환 아미노기, 치환 실릴기, 치환 실릴옥시기, 치환 실릴티오기, 치환 실릴아미노기, 시아노기, 니트로기, 1가의 복소환기, 헤테로아릴옥시기, 헤테로아릴티오기, 알킬옥시카르보닐기, 아릴옥시카르보닐기, 아릴알킬옥시카르보닐기, 헤테로아릴옥시카르보닐기 또는 카르복실기를 나타내고, R<sup>109</sup>와 R<sup>110</sup> 및 R<sup>112</sup>와 R<sup>113</sup>은 각각 하나가 되어 환을 형성하고 있을 수도 있고, A는 -O-, -Si(R<sup>24</sup>)(R<sup>25</sup>)-, -C(R<sup>26</sup>)(R<sup>27</sup>)-, -P(R<sup>9</sup>)- 또는 -PR<sup>10</sup>(=O)-를 나타내고, R<sup>9</sup>, R<sup>10</sup>, R<sup>24</sup> 내지 R<sup>27</sup>은 상기와 동일한 의미를 가짐)

[0163] 상기 화학식 (B)로 표시되는 반복 단위로서는, 이하의 화학식 B-1 내지 B-8로 표시되는 반복 단위를 들 수 있다.



[0164]

[0165] 상기 화학식 (A)로 표시되는 2가의 기를 반복 단위로서 갖는 고분자 화합물은, 추가로 2가의 방향족 아민기를 반복 단위로서 가질 수도 있다. 이 2가의 방향족 아민기로서는, 하기 화학식 (5)로 표시되는 반복 단위가 바람직하다.



[0166]

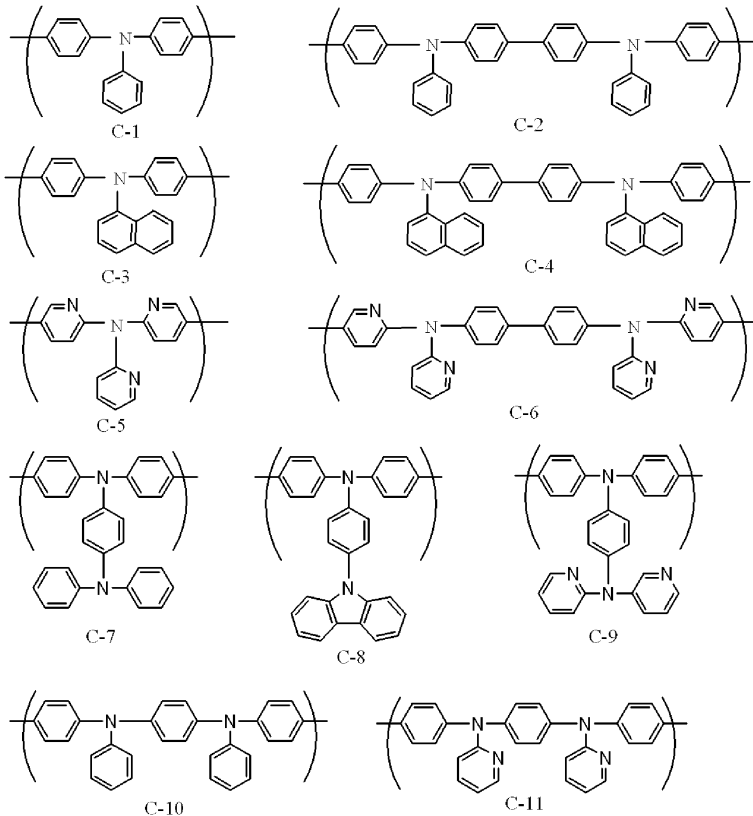
[0167] (식 중, Ar<sup>6</sup>, Ar<sup>7</sup>, Ar<sup>8</sup> 및 Ar<sup>9</sup>는 각각 독립적으로 아릴렌기 또는 2가의 복소환기를 나타내고, Ar<sup>6</sup>, Ar<sup>7</sup> 및 Ar<sup>8</sup>은 서로 결합하여 환을 형성하고 있을 수도 있고, Ar<sup>10</sup>, Ar<sup>11</sup> 및 Ar<sup>12</sup>는 각각 독립적으로 아릴기 또는 1가의 복소환기를 나타내고, Ar<sup>6</sup> 내지 Ar<sup>12</sup>는 치환기를 가질 수도 있고, x 및 y는 각각 독립적으로 0 또는 1이고, 0 ≤ x+y ≤ 1임)

[0168] 상기 화학식 (5) 중 Ar<sup>6</sup> 내지 Ar<sup>9</sup>로 표시되는 아릴렌기, 2가의 복소환기는, 상기 Ar로 표시되는 2가의 복소환기로서 설명하여 예시한 것과 동일하다.

[0169] 상기 화학식 (5) 중 Ar<sup>10</sup> 내지 Ar<sup>12</sup>로 표시되는 아릴기 및 1가의 복소환기는, 상기 R로 표시되는 아릴기 및 1가의 복소환기로서 설명하여 예시한 것과 동일하다.

[0170] 상기 화학식 (5) 중 아릴렌기, 2가의 복소환기, 아릴기 및 1가의 복소환기가 가질 수도 있는 치환기로서는, 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알킬닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 할로젠 원자, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 카르복실기, 치환 카르복실기, 시아노기 및 니트로기를 들 수 있다. 이들 치환기는, 상기 금속 착체를 구성하는 배위자가 가질 수도 있는 치환기로서 설명하여 예시한 것과 동일하다.

[0171] 상기 화학식 (5)로 표시되는 반복 단위로서는, 이하의 화학식 C-1 내지 C-11로 표시되는 반복 단위를 들 수 있다.



[0172]

[0173]

상기 화학식 중, 방향환 상의 수소 원자는 독립적으로 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기, 탄소 원자수 1 내지 20의 알콕시기, 탄소 원자수 7 내지 26의 페닐알킬기, 탄소 원자수 7 내지 26의 페닐알콕시기, 페닐기, 페녹시기, 탄소 원자수 7 내지 26의 알킬기 치환 페닐기, 탄소 원자수 7 내지 26의 알콕시기 치환 페닐기, 탄소 원자수 2 내지 21의 알킬카르보닐기, 포르밀기, 탄소 원자수 2 내지 21의 알콕시카르보닐기 또는 카르복실기로 치환되어 있을 수도 있다. 또한, 2개의 치환기가 존재하는 경우, 이들이 서로 결합하여 환을 형성하고 있을 수도 있다.

[0174]

페닐알킬기로서는 탄소 원자수가 7 내지 26, 바람직하게는 11 내지 21, 보다 바람직하게는 14 내지 18인 것들을 들 수 있으며, 구체적으로는 페닐메틸기, 페닐에틸기, 페닐프로필기, 페닐부틸기, 페닐펜틸기, 페닐헥실기, 페닐헵틸기, 페닐옥틸기, 페닐노닐기, 페닐데실기, 페닐도데실기 등을 들 수 있다.

[0175]

페닐알콕시기로서는 탄소 원자수가 7 내지 26, 바람직하게는 11 내지 21, 보다 바람직하게는 14 내지 18인 것들을 들 수 있으며, 구체적으로는 페닐메톡시기, 페닐에톡시기, 페닐프로필옥시기, 페닐부톡시기, 페닐펜틸옥시기, 페닐헥실옥시기, 페닐헵틸옥시기, 페닐옥틸옥시기, 페닐노닐옥시기, 페닐데실옥시기, 페닐도데실옥시기 등을 들 수 있다.

[0176]

알킬기 치환 페닐기란, 페닐기 상의 1개 이상의 수소 원자가 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기로 치환된 기, 즉 모노알킬페닐기, 디알킬페닐기, 트리알킬페닐기, 테트라알킬페닐기 및 펜타알킬페닐기를 말한다. 알킬기 치환 페닐기로서는 탄소 원자수가 7 내지 26, 바람직하게는 11 내지 21, 보다 바람직하게는 14 내지 18인 것들을 들 수 있으며, 구체적으로는 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타메틸페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타에틸페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타프로필페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타이소프로필페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타부틸페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타이소부틸페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타-s-부틸페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타-t-부틸페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타펜틸페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타이소아밀페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타헥실페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타헵틸페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타옥틸페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타(2-에틸헥실)페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타노닐페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타데실페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타(3,7-디메틸옥틸)페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타도데실페닐기 등을 들 수 있다.

[0177]

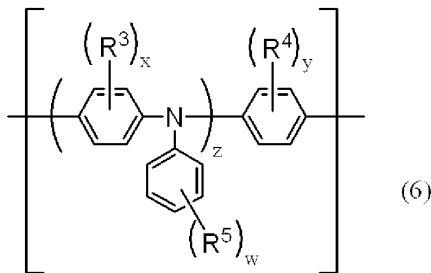
알콕시기 치환 페닐기란, 페닐기 상의 1개 이상의 수소 원자가 탄소 원자수 1 내지 20의 알콕시기로 치환된 기, 즉 모노알콕시페닐기, 디알콕시페닐기, 트리알콕시페닐기, 테트라알콕시페닐기 및 펜타알콕시페닐기를 말한다.

알콕시기 치환 페닐기로서는 탄소 원자수가 7 내지 26, 바람직하게는 11 내지 21, 보다 바람직하게는 14 내지 18인 것을 들 수 있으며, 구체적으로는 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타메톡시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타에톡시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타프로필옥시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타이소프로필옥시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타부톡시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타이소부톡시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타-s-부톡시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타-t-부톡시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타펜틸옥시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타헥실옥시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타헵틸옥시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타옥틸옥시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타(2-에틸헥실옥시)페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타노닐옥시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타데실옥시페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타(3,7-디메틸옥틸옥시)페닐기; 모노, 디, 트리, 테트라 또는 펜타도데실옥시페닐기 등을 들 수 있다.

[0178] 알킬카르보닐기로서는 탄소 원자수가 2 내지 21, 바람직하게는 5 내지 15, 보다 바람직하게는 8 내지 12인 것을 들 수 있으며, 구체적으로는 아세틸기, 프로피오닐기, 부티릴기, 이소부티릴기, 펜타노일기, 헥사노일기, 헵타노일기, 옥타노일기, 2-에틸헥사노일기, 노나노일기, 데카노일기, 3,7-디메틸옥타노일기, 도데카노일기 등을 들 수 있다.

[0179] 알콕시카르보닐기로서는 탄소 원자수가 2 내지 21, 바람직하게는 5 내지 15, 보다 바람직하게는 8 내지 12인 것을 들 수 있으며, 구체적으로는 메톡시카르보닐기, 에톡시카르보닐기, 프로필옥시카르보닐기, 이소프로필옥시카르보닐기, 부톡시카르보닐기, 이소부톡시카르보닐기, s-부톡시카르보닐기, t-부톡시카르보닐기, 펜틸옥시카르보닐기, 헥실옥시카르보닐기, 헵틸옥시카르보닐기, 옥틸옥시카르보닐기, 2-에틸헥실옥시카르보닐기, 노닐옥시카르보닐기, 데실옥시카르보닐기, 3,7-디메틸옥틸옥시카르보닐기, 도데실옥시카르보닐기 등을 들 수 있다.

[0180] 상기 화학식 (5)로 표시되는 반복 단위 중에서, 하기 화학식 (6)으로 표시되는 반복 단위가 바람직하다.

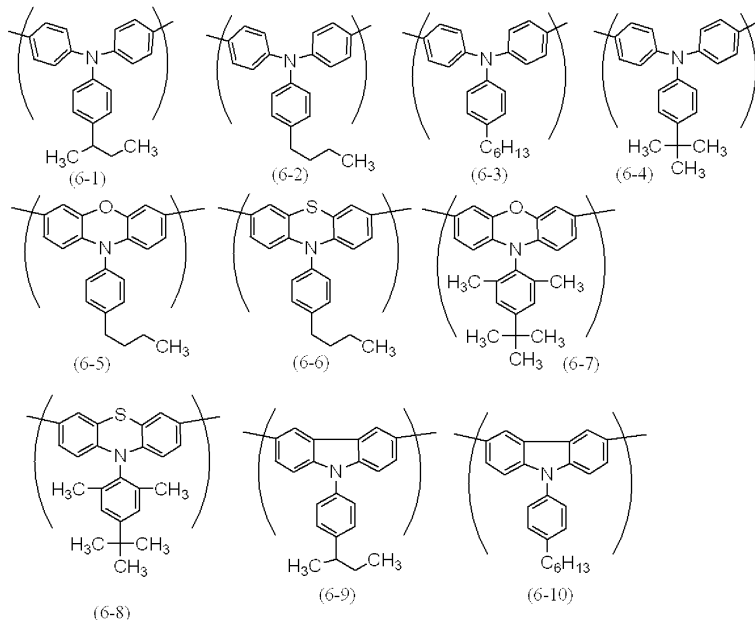


[0181]

[0182] (식 중,  $R^3$ ,  $R^4$  및  $R^5$ 는 독립적으로 탄소 원자수 1 내지 20의 알킬기, 탄소 원자수 1 내지 20의 알콕시기, 탄소 원자수 7 내지 26의 페닐알킬기, 탄소 원자수 7 내지 26의 페닐알콕시기, 페닐기, 페녹시기, 탄소 원자수 7 내지 26의 알킬기 치환 페닐기, 탄소 원자수 7 내지 26의 알콕시기 치환 페닐기, 탄소 원자수 2 내지 21의 알킬카르보닐기, 포르밀기, 탄소 원자수 2 내지 21의 알콕시카르보닐기 또는 카르복실기를 나타내거나, 또는  $R^3$ 과  $R^4$ 는 상기한 기를 나타내는 대신에 하나가 되어 환을 형성하고 있을 수도 있고, x 및 y는 독립적으로 0 내지 4의 정수이고, z는 1 또는 2이고, w는 0 내지 5의 정수이고,  $R^3$ ,  $R^4$  및  $R^5$  중 적어도 1종이 복수개 존재하는 경우에는, 그 복수개 존재하는 기는 동일하거나 상이할 수 있음)

[0183] 상기 화학식 (6) 중의  $R^3$ 과  $R^4$ 가 상기한 기를 나타내는 대신에 하나가 되어 환을 형성하는 경우, 이 환으로서는 예를 들면 치환기를 가질 수도 있는  $C_5$  내지  $C_{14}$ 의 복소환을 들 수 있다. 복소환으로서는, 예를 들면 모르폴린환, 티오모르폴린환, 피롤환, 피페리딘환, 피페라진환 등을 들 수 있다.

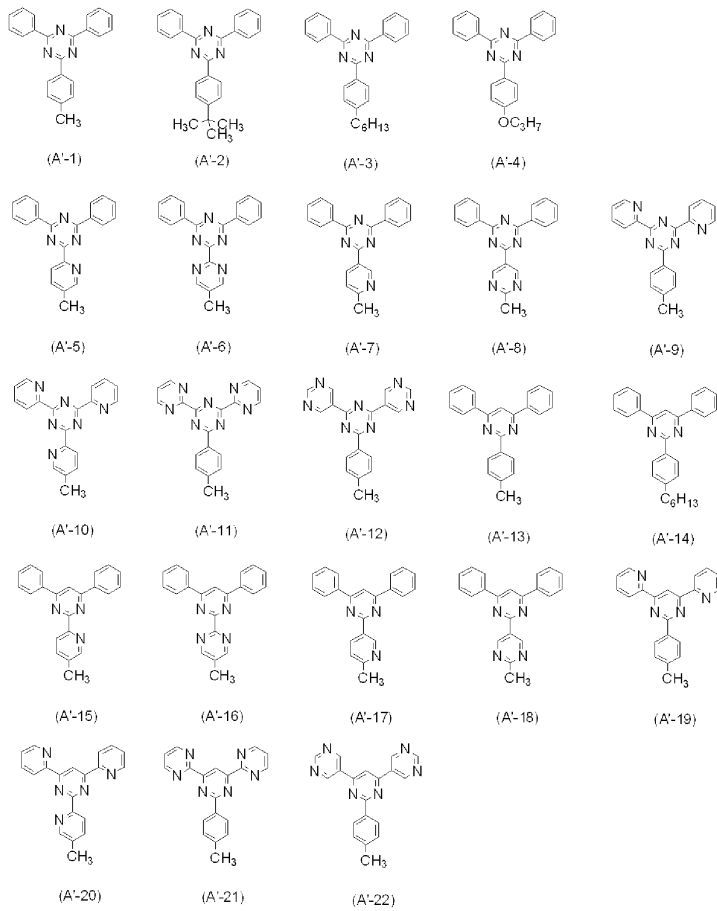
[0184] 이러한 상기 화학식 (6)으로 표시되는 반복 단위로서는, 하기 화학식 (6-1) 내지 (6-10)으로 표시되는 반복 단위를 들 수 있다.



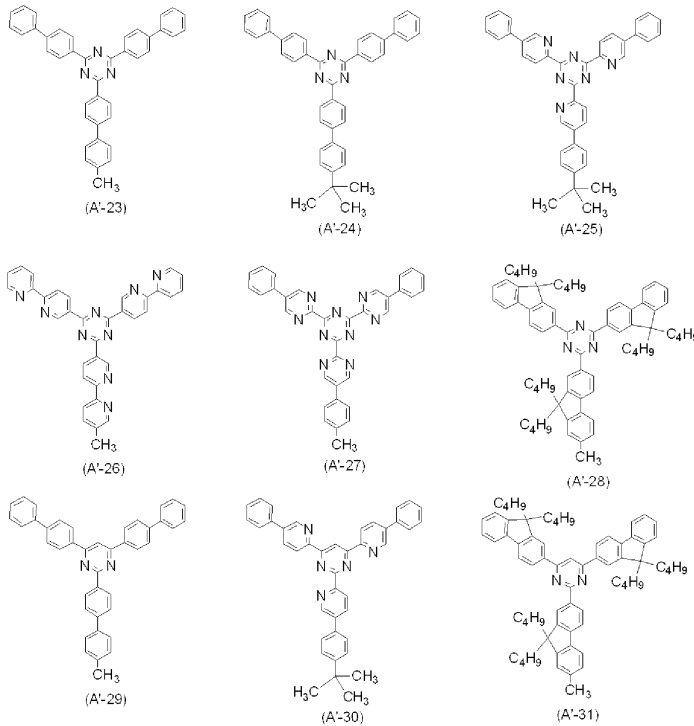
[0185]

[0186]

상기 화학식 (A')로 표시되는 유기 화합물(저분자 화합물)로서는, 이하의 것을 들 수 있다.



[0187]



[0188]

[0189] 상기 유기 화합물 (A'-1) 내지 (A'-31) 중, 대표적인 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 이하의 표에 나타낸다.

표 1

화합물	LUMO (eV)	화합물	LUMO (eV)	화합물	LUMO (eV)	화합물	LUMO (eV)
A'-1	1. 7 6	A'-10	1. 9 2	A'-18	1. 8 7	A'-25	1. 9 9
A'-2	1. 7 5	A'-11	2. 0 2	A'-19	1. 8 0	A'-26	2. 3 2
A'-5	1. 8 7	A'-12	2. 5 0	A'-20	1. 7 7	A'-27	2. 0 2
A'-6	1. 9 9	A'-13	1. 6 1	A'-21	2. 0 7	A'-28	1. 8 4
A'-7	1. 9 2	A'-15	1. 6 0	A'-22	2. 3 5	A'-29	1. 8 2
A'-8	2. 1 1	A'-16	1. 5 8	A'-23	1. 8 7	A'-30	1. 8 8
A'-9	1. 9 4	A'-17	1. 7 3	A'-24	1. 8 7	-	-

[0190]

[0191] 상기 유기 화합물은 구동 전압 감소의 관점에서 LUMO의 에너지 레벨의 값이 -1.00 내지 -2.50 eV인 것이 바람직하고, -1.30 내지 -2.40 eV인 것이 보다 바람직하다.

[0192] 상기 유기 화합물은 1종 단독으로 사용할 수도 있고, 2종 이상을 병용할 수도 있다.

[0193] -조합-

[0194] 본 발명의 조성물에서 상기 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값과 상기 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차는 0.40 eV 미만이고, 바람직하게는 0.35 eV 이하이고, 보다 바람직하게는 0.30 eV 이하이지만, 발광 효율의 관점에서 상기 금속 착체의 LUMO의 에너지가 상기 유기 화합물의 LUMO의 에너지보다 작은 것이 바람직하다.

[0195] 본 발명의 조성물에서, 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값과 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차가 0.40 eV 미만인 되는 금속 착체와 유기 화합물의 조합으로서는, 예를 들면 이하의 양태가 생각된다.

[0196] 1) 1종의 금속 착체와 1종의 유기 화합물의 조합

[0197] 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값과 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차가 0.40 eV 미만이 되는 조합.

- [0198] 2) 1종의 금속 착체와 2종 이상의 유기 화합물의 조합
- [0199] 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값과 모든 유기 화합물 중에서 LUMO의 에너지 레벨이 최대인 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차가 0.40 eV 미만이 되는 조합.
- [0200] 3) 2종 이상의 금속 착체와 1종의 유기 화합물의 조합
- [0201] 모든 금속 착체 중에서 LUMO의 에너지 레벨이 최대인 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값과 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차가 0.40 eV 미만이 되는 조합.
- [0202] 4) 2종 이상의 금속 착체와 2종 이상의 유기 화합물의 조합
- [0203] 모든 금속 착체 중에서 LUMO의 에너지 레벨이 최대인 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값과 모든 유기 화합물 중에서 LUMO의 에너지 레벨이 최대인 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차가 0.40 eV 미만이 되는 조합.
- [0204] 본 명세서에서, 상기 LUMO의 에너지 레벨의 값은 계산 과학적 수법으로 산출한 값이다. 본 명세서에서 계산 과학적 수법이란, 양자 화학 계산 프로그램 가우시안(Gaussian) 03을 사용하여 B3LYP 레벨의 밀도 범함수법에 의해 기저 상태의 구조 최적화를 행하고, 상기 최적화된 구조에서의 LUMO의 에너지 레벨의 값을 산출하는 것을 말한다. 이 때, 기저 함수로서 중심 금속 원자에는 LANL2DZ를, 그 이외의 원자에는 6-31g\*를 사용한다.
- [0205] 상기 LUMO의 에너지 레벨이란 상기 유기 화합물이 고분자 화합물이며, 반복 단위를 갖는 경우, 상기 유기 화합물이 갖는 반복 단위에 대하여 생각되는 모든 조합으로 3량체를 형성하고, 상기 3량체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 구했을 때, 이 절대값이 최대가 되는 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 상기 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값(즉, LUMO의 에너지 레벨의 값이 음인 경우, 절대값이란 해당 음의 부호를 뺀 값을 의미하고, 본 명세서에서 동일함)으로 정의한다.
- [0206] 상기 유기 화합물이 저분자 화합물이거나 고분자 화합물이며, 반복 단위를 갖지 않는 경우, 상기 유기 화합물 그 자체에 대하여 상기 계산 과학적 수법을 적용하여 구해지는 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 상기 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값으로 정의한다.
- [0207] 이어서, 본 발명의 조성물에서, 상기 금속 착체와 상기 유기 화합물의 바람직한 조합을 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차와 함께 이하의 표에 나타낸다.
- [0208] 1) 유기 화합물이 저분자 화합물인 경우

표 2

금속 착체	유기 화합물	LUMO 차 (eV)	금속 착체	유기 화합물	LUMO 차 (eV)
M-1	(A'-1)	0.14	M-3	(A'-18)	0.05
M-1	(A'-2)	0.13	M-3	(A'-19)	0.12
M-1	(A'-5)	0.25	M-3	(A'-20)	0.15
M-1	(A'-6)	0.37	M-3	(A'-21)	0.15
M-1	(A'-7)	0.30	M-3	(A'-24)	0.05
M-1	(A'-9)	0.32	M-3	(A'-25)	0.05
M-1	(A'-10)	0.30	M-3	(A'-26)	0.07
M-1	(A'-13)	0.01	M-3	(A'-28)	0.10
M-1	(A'-15)	0.02	M-3	(A'-29)	0.08
M-1	(A'-16)	0.04	M-3	(A'-30)	0.10
M-1	(A'-17)	0.11	M-7	(A'-1)	0.32
M-1	(A'-18)	0.25	M-7	(A'-2)	0.33
M-1	(A'-19)	0.18	M-7	(A'-5)	0.21
M-1	(A'-20)	0.15	M-7	(A'-6)	0.09
M-1	(A'-24)	0.25	M-7	(A'-7)	0.16
M-1	(A'-25)	0.25	M-7	(A'-8)	0.03
M-1	(A'-26)	0.37	M-7	(A'-9)	0.14
M-1	(A'-29)	0.22	M-7	(A'-10)	0.16
M-1	(A'-30)	0.20	M-7	(A'-11)	0.06
M-3	(A'-1)	0.16	M-7	(A'-17)	0.35
M-3	(A'-2)	0.17	M-7	(A'-18)	0.21
M-3	(A'-5)	0.05	M-7	(A'-19)	0.28
M-3	(A'-6)	0.07	M-7	(A'-20)	0.31
M-3	(A'-7)	0	M-7	(A'-21)	0.01
M-3	(A'-8)	0.19	M-7	(A'-23)	0.27
M-3	(A'-9)	0.02	M-7	(A'-24)	0.21
M-3	(A'-10)	0	M-7	(A'-25)	0.21
M-3	(A'-11)	0.10	M-7	(A'-26)	0.09
M-3	(A'-13)	0.31	M-7	(A'-27)	0.24
M-3	(A'-15)	0.32	M-7	(A'-28)	0.06
M-3	(A'-16)	0.34	M-7	(A'-29)	0.24
M-3	(A'-17)	0.19	M-7	(A'-30)	0.26

[0209]

[0210] 2) 유기 화합물이 고분자 화합물인 경우

표 3

금속 착체		고분자 화합물 (반복 단위)		LUMO차 (eV)
1	2	1	2	
M-1	-	F 8	(A-15)	0.37
M-1	-	F 8	(A-16)	0.34
M-1	-	F 8	(A-29)	0.31
M-1	-	F 8	(A-24)	0.39
M-3	-	F 8	(A-13)	0.10
M-3	-	F 8	(A-15)	0.07
M-3	-	F 8	(A-16)	0.04
M-3	-	F 8	(A-17)	0.24
M-3	-	F 8	(A-20)	0.33
M-3	-	F 8	(A-29)	0.01
M-3	-	F 8	(A-1)	0.24
M-3	-	F 8	(A-2)	0.22
M-3	-	F 8	(A-6)	0.20
M-3	-	F 8	(A-24)	0.09
M-3	-	F 8	(A-32)	0.21
M-3	-	F 8	(A-33)	0.10
M-3	-	F 8	(A-34)	0.33
M-7	-	F 8	(A-13)	0.06
M-7	-	F 8	(A-15)	0.09
M-7	-	F 8	(A-16)	0.12
M-7	-	F 8	(A-17)	0.08
M-7	-	F 8	(A-18)	0.24
M-7	-	F 8	(A-20)	0.17
M-7	-	F 8	(A-29)	0.15
M-7	-	F 8	(A-1)	0.08
M-7	-	F 8	(A-2)	0.06
M-7	-	F 8	(A-6)	0.04
M-7	-	F 8	(A-8)	0.39
M-7	-	F 8	(A-9)	0.33
M-7	-	F 8	(A-10)	0.30
M-7	-	F 8	(A-24)	0.07
M-7	-	F 8	(A-32)	0.05
M-7	-	F 8	(A-33)	0.06
M-7	-	F 8	(A-34)	0.17

[0211]

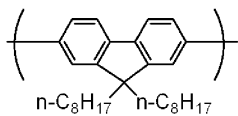
표 4

금속 착체		고분자 화합물 (반복 단위)		LUMO차 (eV)
1	2	1	2	
M-16	-	F8	(A-13)	0.03
M-16	-	F8	(A-15)	0.06
M-16	-	F8	(A-16)	0.09
M-16	-	F8	(A-17)	0.11
M-16	-	F8	(A-18)	0.27
M-16	-	F8	(A-20)	0.20
M-16	-	F8	(A-29)	0.12
M-16	-	F8	(A-1)	0.11
M-16	-	F8	(A-2)	0.09
M-16	-	F8	(A-6)	0.07
M-16	-	F8	(A-9)	0.36
M-16	-	F8	(A-10)	0.33
M-16	-	F8	(A-24)	0.04
M-16	-	F8	(A-32)	0.08
M-16	-	F8	(A-33)	0.03
M-16	-	F8	(A-34)	0.20
M-1	M-16	F8	(A-13)	0.03
M-1	M-16	F8	(A-15)	0.06
M-1	M-16	F8	(A-16)	0.09
M-1	M-16	F8	(A-17)	0.11
M-1	M-16	F8	(A-18)	0.27
M-1	M-16	F8	(A-20)	0.20
M-1	M-16	F8	(A-29)	0.12
M-1	M-16	F8	(A-1)	0.11
M-1	M-16	F8	(A-2)	0.09
M-1	M-16	F8	(A-6)	0.07
M-1	M-16	F8	(A-9)	0.36
M-1	M-16	F8	(A-10)	0.33
M-1	M-16	F8	(A-24)	0.04

[0212]

[0213]

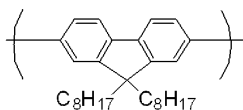
\* 표 중, "F8"은 하기 화학식으로 표시되는 반복 단위, "-"는 해당 금속 착체, 해당 반복 단위가 존재하지 않는 것을 의미한다.



[0214]

[0215]

상기 표를 보충하면서 상기 금속 착체와 상기 유기 화합물의 조합의 대표예를 설명하면, 금속 착체가 M-6, M-8, M-14, M-18인 경우, 유기 화합물은 예를 들면 (A'-1) 내지 (A'-31)이고; 금속 착체가 M-10, M-11, M-12인 경우, 유기 화합물은 예를 들면 (A'-1) 내지 (A'-31)이고; 금속 착체가 M-20인 경우, 유기 화합물은 예를 들면 (A'-5) 내지 (A'-12), (A'-26) 내지 (A'-28)의 저분자 화합물, (A-5) 내지 (A-12), (A-26) 내지 (A-28) 중 어느 하나로 표시되는 2개의 기와, 하기 화학식으로 표시되는 반복 단위 (F8)을 포함하는 고분자 화합물이고; 금속 착체 M-22인 경우, 유기 화합물은 예를 들면 (A'-5) 내지 (A'-12), (A'-26) 내지 (A'-28)의 저분자 화합물, (A-5) 내지 (A-12), (A-26) 내지 (A-28) 중 어느 하나로 표시되는 2개의 기와 반복 단위 F8을 포함하는 고분자 화합물이다.



[0216]

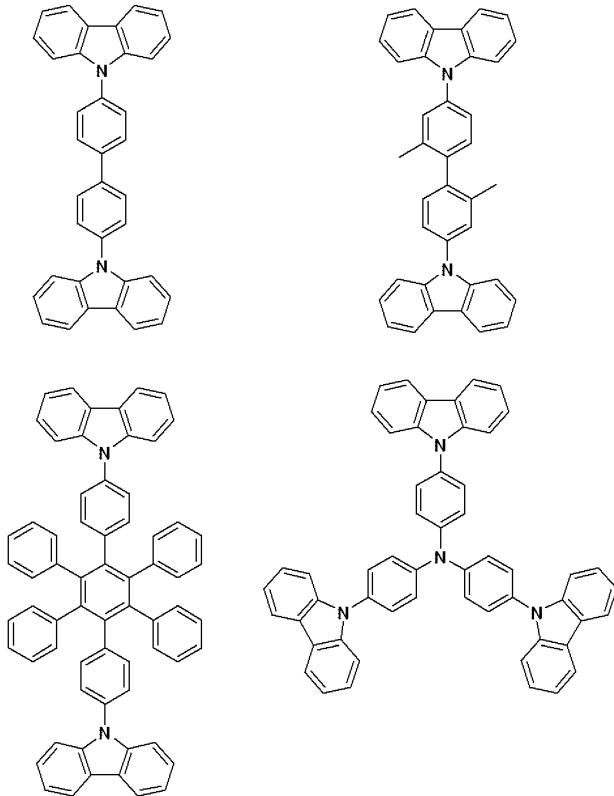
[0217]

본 발명의 조성물은, 전하 수송 재료 및/또는 발광 재료를 포함하고 있을 수도 있다.

[0218] 상기 전하 수송 재료는 정공 수송 재료와 전자 수송 재료로 분류되며, 유기 화합물(저분자 유기 화합물 및/또는 고분자 유기 화합물) 등이 있다.

[0219] 상기 정공 수송 재료로서는 방향족 아민, 카르바졸 유도체, 폴리파라페닐렌 유도체 등, 유기 전계 발광 소자의 정공 수송 재료로서 공지된 것을 들 수 있다. 상기 전자 수송 재료로서는 유기 전계 발광 소자에 전자 수송 재료로서 공지된 것, 예를 들면 옥사디아졸 유도체, 안트라퀴노디메탄 및 그의 유도체, 벤조퀴논 및 그의 유도체, 나프토퀴논 및 그의 유도체, 안트라퀴논 및 그의 유도체, 테트라시아노안트라퀴노디메탄 및 그의 유도체, 플루오레논 유도체, 디페닐디시아노에틸렌 및 그의 유도체, 디페노퀴논 유도체, 8-히드록시퀴놀린 및 그의 유도체의 금속 착체를 들 수 있다. 상기 전하 수송 재료의 저분자 유기 화합물이란, 저분자 유기 전계 발광 소자에 사용되는 호스트 화합물, 전하 주입 수송 화합물을 의미하고, 구체적으로는 예를 들면 문헌 ["유기 EL 디스플레이" (토키토 시즈오, 아다치 치하야, 무라타 히데유키행 공저, 오움사) 107페이지, 월간 디스플레이(vol.9, No.9, 2003년 26-30페이지)], 일본 특허 공개 제2004-244400호 공보, 일본 특허 공개 제2004-277377호 공보 등에 기재된 화합물을 들 수 있다. 이들 전하 수송 재료의 종류에 따라라도 상이하지만, 일반적으로 금속 착체로부터의 양호한 발광을 얻기 위해서는 이들 전하 수송 재료의 최저 삼중항 여기 에너지가 금속 착체의 최저 삼중항 여기 에너지보다 큰 것이 바람직하다.

[0220] 상기 전하 수송 재료의 저분자 유기 화합물로서는, 이하의 화합물을 들 수 있다.

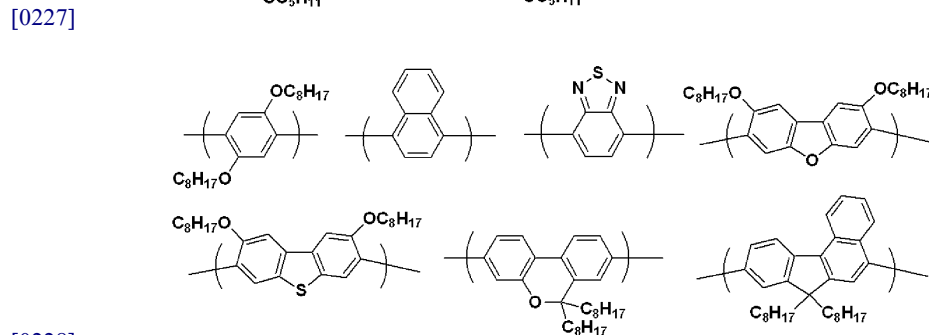
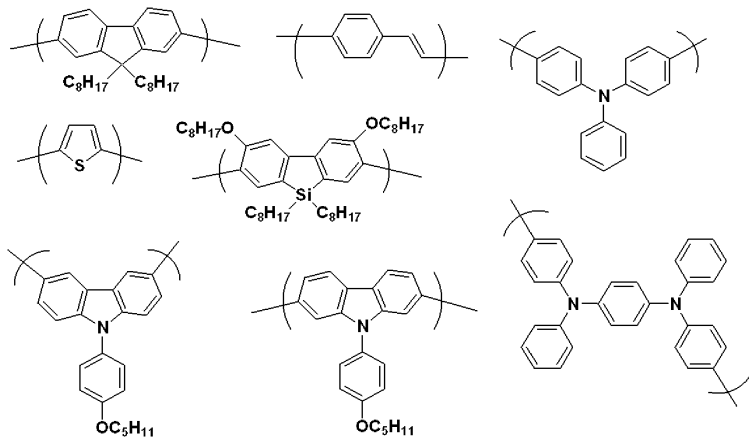


[0221]



[0225] 상기 전하 수송 재료의 고분자 유기 화합물로서는, 비공액계 고분자, 공액계 고분자를 들 수 있다. 비공액계 고분자로서는 폴리비닐카르바졸 등을 들 수 있다. 공액계 고분자로서는 주쇄에 방향환을 포함하는 중합체를 들 수 있으며, 예를 들면 치환기를 가질 수도 있는 페닐렌기, 치환기를 가질 수도 있는 플루오렌, 치환기를 가질 수도 있는 디벤조티오펜, 치환기를 가질 수도 있는 디벤조푸란, 치환기를 가질 수도 있는 디벤조실롤 등을 반복 단위로서 주쇄에 포함하는 것이나, 이들 유닛과의 공중합체를 들 수 있다. 구체적으로는, 치환기를 가질 수도 있는 벤젠환을 부분 구조로서 갖는 것을 특징으로 하는 고분자 화합물을 들 수 있다. 보다 구체적으로는, 예를 들면 일본 특허 공개 제2003-231741호 공보, 일본 특허 공개 제2004-059899호 공보, 일본 특허 공개 제2004-002654호 공보, 일본 특허 공개 제2004-292546호 공보, US5708130, W099/54385, W000/46321, W002/077060, 문헌 ["유기 EL 디스플레이"(토키토 시즈오, 아다치 치하야, 무라타 히데유키 공저, 오오사) 111페이지, 월간 디스플레이(vol.9, No.9, 2002년) 47 내지 51페이지] 등에 기재된 고분자를 들 수 있다.

[0226] 상기 전하 수송 재료의 고분자 유기 화합물로서는, 그 이외에도 상기 화학식 (3a) 또는 (3b)로 표시되는 반복 단위를 포함하는 고분자를 들 수 있으며, 예를 들면 이하의 기(즉, 이하의 예시에서 괄호를 제외한 것)를 포함하는 것, 이하의 구조를 반복 단위로서 포함하는 것을 들 수 있다.



[0228] 상기 전하 수송 재료의 저분자 유기 화합물 또는 고분자 유기 화합물의 최저 삼중항 여기 에너지(TH)와, 금속 착체의 최저 삼중항 여기 에너지(TM)가 TH>TM-0.2(eV)의 관계를 만족하는 것이 바람직하다.

[0230] 상기 전하 수송 재료의 고분자 유기 화합물을 사용하는 경우, 상기 고분자 유기 화합물의 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량은 바람직하게는 1×10<sup>3</sup> 내지 1×10<sup>8</sup>, 더욱 바람직하게는 1×10<sup>4</sup> 내지 1×10<sup>6</sup>이다. 또한, 상기 고분자의 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량은 바람직하게는 1×10<sup>3</sup> 내지 1×10<sup>8</sup>이고, 더욱 바람직하게는 5×10<sup>4</sup> 내지 5×10<sup>6</sup>이다.

[0231] 상기 발광 재료로서는 공지된 것을 사용할 수 있으며, 예를 들면 나프탈렌 유도체, 안트라센 및 그의 유도체, 페릴렌 및 그의 유도체, 폴리메틴계, 크산텐계, 쿠마린계, 시아닌계 등의 색소류, 8-히드록시퀴놀린 및 그의 유도체의 금속 착체, 방향족 아민, 테트라페닐시클로펜타디엔 및 그의 유도체, 테트라페닐부타디엔 및 그의 유도체 등의 저분자 발광 재료 등을 들 수 있다.

[0232] 본 발명의 조성물에서 상기 금속 착체의 배합량은 조합하는 유기 화합물의 종류나 최적화하고자 하는 특성에 따라 상이하지만, 상기 유기 화합물의 양을 100 중량부로 했을 때 통상적으로 0.05 내지 100 중량부이고, 바람직하게는 0.1 내지 30 중량부이다.

[0233] 본 발명의 조성물은 용매 또는 분산매를 포함하고 있을 수도 있다. 이 용매, 분산매로서는, 박막의 성분을 균일하게 용해하거나 또는 분산시켜 안정적인 것을 공지된 용매로부터 적절하게 선택하여 사용할 수 있다. 이 용매로서는, 염소계 용매(클로로포름, 염화메틸렌, 1,2-디클로로에탄, 1,1,2-트리클로로에탄, 클로로벤젠, o-디클로로벤젠 등), 에테르계 용매(테트라히드로푸란, 디옥산 등), 방향족 탄화수소계 용매(벤젠, 톨루엔, 크실렌 등), 지방족 탄화수소계 용매(시클로헥산, 메틸시클로헥산, n-펜탄, n-헥산, n-헵탄, n-옥탄, n-노난, n-데칸 등), 케톤계 용매(아세톤, 메틸에틸케톤, 시클로헥산 등), 에스테르계 용매(아세트산에틸, 아세트산부틸, 에틸셀로솔브아세테이트 등), 다가 알코올 및 그의 유도체(에틸렌글리콜, 에틸렌글리콜모노부틸에테르, 에틸렌글리콜모노에틸에테르, 에틸렌글리콜모노메틸에테르, 디메톡시에탄, 프로필렌글리콜, 디에톡시메탄, 트리에틸렌글리콜모노에틸에테르, 글리세린, 1,2-헥산디올 등), 알코올계 용매(메탄올, 에탄올, 프로판올, 이소프로판올, 시클로헥산올 등), 술폰시드계 용매(디메틸술폰시드 등), 아미드계 용매(N-메틸-2-피롤리돈, N,N-디메틸포름아미드 등) 등을 들 수 있다. 이들 용매는 1종 단독으로 사용할 수도 있고, 2종 이상을 병용할 수도 있다.

[0234] 상기 용매 또는 분산매를 포함하는 조성물을 잉크젯법에 적용하는 경우에는, 상기 조성물의 토출성 및 그의 재현성을 양호하게 하기 위해 상기 조성물은 추가로 첨가제를 함유하고 있을 수도 있다. 첨가제로서는, 노즐로부터의 증발을 억제하기 위해 고비점의 용매(아니솔, 비시클로헥실벤젠 등) 등을 들 수 있다. 상기 용매 또는 분산매를 포함하는 조성물은, 25 °C에서의 점도가 1 내지 100 mPa·s인 것이 바람직하다.

[0235] <화합물>

[0236] 본 발명의 화합물은 상기 화학식 (1)로 표시되는 금속 착체의 잔기 및 유기 화합물의 잔기를 갖는 화합물이며, 계산 과학적 수법에 의해 산출한 상기 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값과 상기 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차가 0.40 eV 미만인 화합물이다.

[0237] 본 발명의 화합물은 전형적으로 고분자 화합물이며, 상기 고분자 화합물로서는,

[0238] 1. 고분자 유기 화합물의 주쇄에 금속 착체의 잔기를 갖는 고분자 화합물;

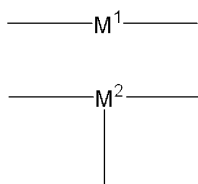
[0239] 2. 고분자 유기 화합물의 말단에 금속 착체의 잔기를 갖는 고분자 화합물;

[0240] 3. 고분자 유기 화합물의 측쇄에 금속 착체의 잔기를 갖는 고분자 화합물

[0241] 등을 들 수 있다. 주쇄에 금속 착체의 잔기를 갖는 경우에는, 선형 고분자의 주쇄에 금속 착체가 삽입된 것 이외에 금속 착체로부터 3개 이상의 고분자쇄가 결합되어 있는 것도 포함된다.

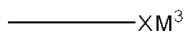
[0242] 상기 유기 화합물로서는, 상기 화학식 (1) 등으로 표시되는 구조를 갖는 금속 착체의 잔기를 포함하고, 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량이  $1 \times 10^3$  내지  $1 \times 10^8$ 이고, 그의 측쇄, 주쇄 또는 말단 또는 이들의 2개 이상에 상기 화학식 (1) 등으로 표시되는 구조를 갖는 금속 착체의 잔기를 갖는 것을 들 수 있다.

[0243] 고분자 유기 화합물의 주쇄에 금속 착체의 잔기를 갖는 고분자 화합물은, 예를 들면 하기 화학식 중 어느 하나로 표시된다.



[0244] (식 중,  $M^1$ ,  $M^2$ 는 금속 착체의 잔기를 나타내고, 그의 결합손은 상기 금속 착체의 배위자가 갖고, 상기  $M^1$ ,  $M^2$ 는 상기 결합손에 의해 고분자 주쇄를 형성하는 반복 단위와 결합하고 있고, 실선은 분자쇄를 나타냄)

[0246] 고분자 유기 화합물의 말단에 금속 착체의 잔기를 갖는 고분자 화합물은, 예를 들면 하기 화학식으로 표시된다.



[0247] (식 중,  $M^3$ 은 금속 착체의 1가의 잔기를 나타내고, 그의 결합손은 상기 금속 착체의 배위자가 갖고, 상기  $M^3$ 은 상기 결합손에 의해 X와 결합하고 있고, X는 단결합, 치환되어 있을 수도 있는 알케닐렌기, 치환되어 있을 수도 있는 알킬닐렌기, 치환되어 있을 수도 있는 아릴렌기 또는 치환되어 있을 수도 있는 2가의 복소환기를

나타내고, 실선은 분자쇄를 나타냄)

- [0249] 고분자 유기 화합물의 측쇄에 금속 착체의 잔기를 갖는 고분자 화합물은, 예를 들면 화학식:  $-Ar'$ -으로 표시된다. 상기 화학식 중,  $Ar'$ 은 2가의 방향족기, 또는 산소 원자, 규소 원자, 게르마늄 원자, 주석 원자, 인 원자, 붕소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 및 텔루륨 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 원자를 1개 이상 갖는 2가의 복소환기를 나타내고, 상기  $Ar'$ 은  $-L-X$ 로 표시되는 기를 1 내지 4개 갖고,  $X$ 는 금속 착체의 1가의 잔기를 나타내고,  $L$ 은 단결합,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=O)O-$ ,  $-S(=O)-$ ,  $-S(=O)_2-$ ,  $-Si(R^{68})(R^{69})-$ ,  $N(R^{70})-$ ,  $-B(R^{71})-$ ,  $-P(R^{72})-$ ,  $-P(=O)(R^{73})-$ , 치환되어 있을 수도 있는 알킬렌기, 치환되어 있을 수도 있는 알케닐렌기, 치환되어 있을 수도 있는 알킬닐렌기, 치환되어 있을 수도 있는 아릴렌기 또는 치환되어 있을 수도 있는 2가의 복소환기를 나타내고, 상기 알킬렌기, 상기 알케닐렌기, 상기 알킬닐렌기가  $-CH_2-$ 기를 포함하는 경우, 상기 알킬렌기에 포함되는  $-CH_2-$ 기 중 1개 이상, 상기 알케닐렌기에 포함되는  $-CH_2-$ 기 중 1개 이상, 상기 알킬닐렌기에 포함되는  $-CH_2-$ 기 중 1개 이상이 각각  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=O)O-$ ,  $-S(=O)-$ ,  $-S(=O)_2-$ ,  $-Si(R^{74})(R^{75})-$ ,  $N(R^{76})-$ ,  $-B(R^{77})-$ ,  $-P(R^{78})-$  및  $-P(=O)(R^{79})-$ 로 이루어지는 군으로부터 선택되는 기로 치환되어 있을 수도 있다.  $R^{68}$ ,  $R^{69}$ ,  $R^{70}$ ,  $R^{71}$ ,  $R^{72}$ ,  $R^{73}$ ,  $R^{74}$ ,  $R^{75}$ ,  $R^{76}$ ,  $R^{77}$ ,  $R^{78}$  및  $R^{79}$ 는 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기 및 시아노기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 기를 나타낸다.  $Ar'$ 은  $-L-X$ 로 표시되는 기 이외에 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알킬닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 할로젠 원자, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 카르복실기, 치환 카르복실기 및 시아노기로 이루어지는 군으로부터 선택되는 치환기를 가질 수도 있다.  $Ar'$ 이 복수의 치환기를 갖는 경우, 이들은 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0250] 상기 화학식 중,  $R^{68}$ ,  $R^{69}$ ,  $R^{70}$ ,  $R^{71}$ ,  $R^{72}$ ,  $R^{73}$ ,  $R^{74}$ ,  $R^{75}$ ,  $R^{76}$ ,  $R^{77}$ ,  $R^{78}$  및  $R^{79}$ 로 표시되는 알킬기, 아릴기, 1가의 복소환기 및 시아노기, 및  $Ar'$ 이 가질 수도 있는 치환기인 알킬기, 알콕시기, 알킬티오기, 아릴기, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴알킬기, 아릴알콕시기, 아릴알킬티오기, 아릴알케닐기, 아릴알킬닐기, 아미노기, 치환 아미노기, 실릴기, 치환 실릴기, 할로젠 원자, 아실기, 아실옥시기, 이민 잔기, 아미드기, 산 이미드기, 1가의 복소환기, 카르복실기, 치환 카르복실기 및 시아노기는 상기  $R$ 로 표시되는 치환기로서 설명하여 예시한 것과 동일하다.
- [0251] 상기 화학식 중 2가의 방향족기로서는, 예를 들면 페닐렌기, 피리디닐렌기, 피리미딜렌기, 나프틸렌기 등을 들 수 있다.
- [0252] 상기 화학식 중 2가의 복소환기는, 상기  $Ar^{x1}$ ,  $Ar^{x2}$ 로 표시되는 2가의 복소환기로서 설명하여 예시한 것과 동일하다.
- [0253] 본 발명의 화합물은, 캐리어(전자 또는 정공) 수송성이 우수한 공액계 고분자인 것이 바람직하다.
- [0254] 본 발명의 화합물에서 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값, 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값은 이하의 (1) 내지 (3)과 같이 정의한다.
- [0255] (1) 본 발명의 화합물이 금속 착체의 잔기를 갖는 반복 단위를 갖는 고분자 화합물(공중합체)인 경우
- [0256] 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값: 금속 착체의 잔기를 갖는 반복 단위의 1량체에서의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값.
- [0257] 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값: 고분자 화합물이 갖는 기타 반복 단위에 대하여 생각되는 모든 조합에 대하여 3량체를 형성하고, 상기 3량체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 구했을 때, 그 절대값이 최대가 되는 LUMO의 에너지 레벨의 절대값.
- [0258] (2) 본 발명의 화합물이 금속 착체의 잔기를 말단에 갖는 고분자 화합물인 경우
- [0259] 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값: 금속 착체의 잔기에서의 결합손을 수소 원자로 치환하여 이루어지는 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값.
- [0260] 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값: 고분자 화합물이 갖는 반복 단위에 대하여 생각되는 모든 조합에

대하여 3량체를 형성하고, 상기 3량체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 구했을 때, 그 절대값이 최대가 되는 LUMO의 에너지 레벨의 절대값.

- [0261] (3) 본 발명의 화합물이 상기 (1), (2) 이외인 경우
- [0262] 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값: 금속 착체의 잔기에서의 결합손을 수소 원자로 치환하여 이루어지는 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값.
- [0263] 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값: 화합물 중의 금속 착체의 잔기 이외의 부분에서 결합손을 수소 원자로 치환하여 이루어지는 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값.
- [0264] <소자>
- [0265] 본 발명의 소자는 본 발명의 조성물을 사용하여 이루어지는 것이며, 예를 들면 양극 및 음극으로 이루어지는 전극과, 이 전극간에 설치되어 상기 금속 착체 및 상기 유기 화합물을 포함하는 층을 갖는 소자이다. 또한, 본 발명의 조성물을 사용하여 막을 형성시키고, 이 막을 사용하여 본 발명의 소자를 제작할 수도 있다. 이하, 그 대표적인 것으로서 본 발명의 소자가 발광 소자인 경우에 대하여 설명한다.
- [0266] 본 발명의 발광 소자는 양극과 음극으로 이루어지는 한 쌍의 전극과, 이 전극간에 적어도 발광층을 갖는 1층(단층형) 또는 복수층(다층형)을 포함하는 박막이 형성되어 있는 것이다. 상기 박막층 중 적어도 1층은 본 발명의 조성물을 사용하여 이루어지는 것이다. 상기 박막 중의 상기 금속 착체 및 상기 유기 화합물의 합계 함유량은, 발광층 전체의 중량에 대하여 통상적으로 0.1 내지 100 중량%이고, 0.1 내지 30 중량%인 것이 바람직하고, 0.5 내지 15 중량%인 것이 보다 바람직하고, 1 내지 10 중량%인 것이 특히 바람직하다.
- [0267] 본 발명의 발광 소자가 상기 단층형인 경우에는 상기 박막이 발광층이고, 이 발광층이 상기 금속 착체를 함유한다. 또한, 본 발명의 발광 소자가 다층형인 경우에는, 예를 들면 이하의 층 구성을 취한다.
- [0268] (a) 양극/정공 주입층(정공 수송층)/발광층/음극
- [0269] (b) 양극/발광층/전자 주입층(전자 수송층)/음극
- [0270] (c) 양극/정공 주입층(정공 수송층)/발광층/전자 주입층(전자 수송층)/음극
- [0271] 본 발명의 발광 소자의 양극은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 등에 정공을 공급하는 것이며, 4.5 eV 이상의 일함수를 갖는 것이 효과적이다. 양극의 재료에는, 금속, 합금, 금속 산화물, 전기 전도성 화합물, 이들의 혼합물 등을 사용할 수 있다. 구체적으로는 산화주석, 산화아연, 산화인듐, 산화인듐주석(ITO) 등의 도전성 금속 산화물, 금, 은, 크롬, 니켈 등의 금속, 나아가서는 이들의 도전성 금속 산화물과 금속의 혼합물 또는 적층물, 요오드화구리, 황화구리 등의 무기 도전성 물질, 폴리아닐린류, 폴리티오펜류(PEDOT 등), 폴리피롤 등의 유기 도전성 재료, 이들과 ITO의 적층물 등을 들 수 있다.
- [0272] 본 발명의 발광 소자의 음극은, 전자 주입층, 전자 수송층, 발광층 등에 전자를 공급하는 것이다. 음극의 재료로서는 금속, 합금, 금속 할로겐화물, 금속 산화물, 전기 전도성 화합물 또는 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 음극의 재료로서는 알칼리 금속(리튬, 나트륨, 칼륨 등), 그의 불화물 및 산화물, 알칼리 토류 금속(마그네슘, 칼슘, 바륨, 세슘 등), 그의 불화물 및 산화물, 금, 은, 납, 알루미늄, 합금 및 혼합 금속류(나트륨-칼륨 합금, 나트륨-칼륨 혼합 금속, 리튬-알루미늄 합금, 리튬-알루미늄 혼합 금속, 마그네슘-은 합금, 마그네슘-은 혼합 금속 등), 희토류 금속(인듐, 이테르븀 등) 등을 들 수 있다.
- [0273] 본 발명의 발광 소자의 정공 주입층 및 정공 수송층은 양극으로부터 정공을 주입하는 기능, 정공을 수송하는 기능, 음극으로부터 주입된 전자를 장벽하는 기능 중 어느 하나를 갖고 있는 것이 바람직하다. 이들 층의 재료에는 카르바졸 유도체, 트리아졸 유도체, 옥사졸 유도체, 옥사디아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 폴리아릴알칸 유도체, 피라졸린 유도체, 피라졸론 유도체, 페닐렌디아민 유도체, 아릴아민 유도체, 아미노 치환 칼콘 유도체, 스티릴안트라센 유도체, 플루오레논 유도체, 히드라존 유도체, 스티벤 유도체, 실라잔 유도체, 방향족 3급 아민 화합물, 스티릴아민 화합물, 방향족 디메틸리딘계 화합물, 포르피린계 화합물, 폴리실란계 화합물, 폴리(N-비닐 카르바졸) 유도체, 유기 실란 유도체 등, 이들을 포함하는 중합체 등을 들 수 있다. 그 이외에도 아닐린계 공중합체, 티오펜 올리고머, 폴리티오펜 등의 도전성 고분자 올리고머를 들 수 있다. 이들 재료는 1 성분 단독일 수도 있고, 복수의 성분이 병용될 수도 있다. 또한, 상기 정공 주입층 및 상기 정공 수송층은 상기 재료 중 1 종 또는 2종 이상으로 이루어지는 단층 구조일 수도 있고, 동일한 조성 또는 이종 조성의 복수층으로 이루어지는 다층 구조일 수도 있다.

- [0274] 본 발명의 발광 소자의 전자 주입층 및 전자 수송층은 음극으로부터 전자를 주입하는 기능, 전자를 수송하는 기능, 양극으로부터 주입된 정공을 장벽하는 기능 중 어느 하나를 갖고 있는 것이 바람직하다. 이들 층의 재료에는 트리아졸 유도체, 옥사졸 유도체, 옥사디아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 플루오레논 유도체, 안트라퀴노디메탄 유도체, 안트론 유도체, 디페닐퀴논 유도체, 티오피란디옥시드 유도체, 카르보다이미드 유도체, 플루오레닐리덴메탄 유도체, 디스티릴피라진 유도체, 나프탈렌, 페릴렌 등의 방향환 테트라카르복실산 무수물, 프탈로시아닌 유도체, 8-퀴놀리놀 유도체의 금속 착체나 메탈프탈로시아닌, 벤조옥사졸이나 벤조티아졸을 배위자로 하는 금속 착체로 대표되는 각종 금속 착체, 유기 실란 유도체 등을 들 수 있다. 또한, 상기 전자 주입층 및 상기 전자 수송층은 상기 재료 중 1종 또는 2종 이상으로 이루어지는 다층 구조일 수도 있고, 동일한 조성 또는 이종 조성의 복수층으로 이루어지는 다층 구조일 수도 있다.
- [0275] 또한, 본 발명의 발광 소자에서 전자 주입층, 전자 수송층의 재료로서는, 절연체 또는 반도체의 무기 화합물도 사용할 수 있다. 전자 주입층, 전자 수송층이 절연체나 반도체로 구성되어 있으면 전류의 누설을 유효하게 방지하고, 전자 주입성을 향상시킬 수 있다. 이러한 절연체로서는 알칼리 금속 칼코게나이드, 알칼리 토류 금속 칼코게나이드, 알칼리 금속의 할로겐화물 및 알칼리 토류 금속의 할로겐화물로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1종의 금속 화합물을 사용할 수 있다. 바람직한 알칼리 금속 칼코게나이드로서는, CaO, BaO, SrO, BeO, BaS 및 CaSe를 들 수 있다. 또한, 전자 주입층, 전자 수송층을 구성하는 반도체로서는, Ba, Ca, Sr, Yb, Al, Ga, In, Li, Na, Cd, Mg, Si, Ta, Sb 및 Zn으로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1종의 원소를 포함하는 산화물, 질화물 또는 산화질화물 등을 들 수 있다. 이들 산화물, 질화물 및 산화질화물은 1종 단독으로 사용할 수도 있고, 2종 이상을 병용할 수도 있다.
- [0276] 음극과 접하는 박막과의 계면 영역에 환원성 도펀트가 첨가되어 있을 수도 있다. 환원성 도펀트로서는, 알칼리 금속, 알칼리 토류 금속의 산화물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속, 알칼리 금속의 산화물, 알칼리 금속의 할로겐화물, 알칼리 토류 금속의 산화물, 알칼리 토류 금속의 할로겐화물, 희토류 금속의 산화물, 희토류 금속의 할로겐화물, 알칼리 금속 착체, 알칼리 토류 금속 착체 및 희토류 금속 착체로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 1종의 화합물이 바람직하다.
- [0277] 본 발명의 발광 소자의 발광층은 전압 인가시에 양극 또는 정공 주입층으로부터 정공을 주입할 수 있으며, 음극 또는 전자 주입층으로부터 전자를 주입할 수 있는 기능, 주입한 전하(전자와 정공)를 전계의 힘으로 이동시키는 기능, 전자와 정공의 재결합의 장소를 제공하고, 이것을 발광으로 연결하는 기능을 갖는 것이다. 본 발명의 발광 소자의 발광층은 적어도 상기 금속 착체 및 상기 유기 화합물을 함유하는 것이 바람직하고, 상기 금속 착체 및 상기 유기 화합물을 게스트 재료로 하는 호스트 재료를 함유시킬 수도 있다. 상기 호스트 재료로서는, 예를 들면 플루오렌 골격을 갖는 것, 카르바졸 골격을 갖는 것, 디아틸아민 골격을 갖는 것, 피리딘 골격을 갖는 것, 피라진 골격을 갖는 것, 트리아진 골격을 갖는 것, 아틸실란 골격을 갖는 것 등을 들 수 있다. 상기 호스트 재료의 T1(최저 삼중항 여기 상태의 에너지 레벨)은 게스트 재료의 T1보다 큰 것이 바람직하고, 그 차가 0.2 eV보다 큰 것이 더욱 바람직하다. 상기 호스트 재료는 저분자 화합물일 수도 있고, 고분자 화합물일 수도 있다. 또한, 상기 호스트 재료와 상기 금속 착체 등의 발광 재료를 혼합하여 도포하거나, 또는 공증착 등을 행함으로써 상기 발광 재료가 상기 호스트 재료에 도핑된 발광층을 형성할 수 있다.
- [0278] 본 발명의 발광 소자에서 상기 각 층의 형성 방법으로서, 진공 증착법(저항 가열 증착법, 전자빔법 등), 스퍼터링법, LB법, 분자 적층법, 도포법(캐스팅법, 스핀 코팅법, 바 코팅법, 블레이드 코팅법, 롤 코팅법, 그라비아 인쇄, 스크린 인쇄, 잉크젯법 등) 등을 들 수 있다. 이 중에서 제조 공정을 간략화할 수 있다는 점에서 도포로 성막하는 것이 바람직하다. 상기 도포법에서는 상기 금속 착체 및 상기 유기 화합물을 용매에 용해하여 도포액을 제조하고, 상기 도포액을 원하는 층(또는 전극) 상에 도포·건조함으로써 형성할 수 있다. 상기 도포액 중에는 호스트 재료 및/또는 결합제로서 수지를 함유시킬 수 있으며, 이 수지는 용매에 용해 상태로 할 수도 있고, 분산 상태로 할 수도 있다. 상기 수지로서는 비공액계 고분자(예를 들면, 폴리비닐카르바졸), 공액계 고분자(예를 들면, 폴리올레핀계 고분자)를 사용할 수 있다. 보다 구체적으로는, 예를 들면 폴리염화비닐, 폴리카르보네이트, 폴리스티렌, 폴리메틸메타크릴레이트, 폴리부틸메타크릴레이트, 폴리에스테르, 폴리술폰, 폴리페닐렌옥시드, 폴리부타디엔, 폴리(N-비닐카르바졸), 탄화수소 수지, 케톤 수지, 페녹시 수지, 폴리아미드, 에틸셀룰로오스, 아세트산비닐, ABS 수지, 폴리우레탄, 멜라민 수지, 불포화 폴리에스테르 수지, 알키드 수지, 에폭시 수지, 실리콘 수지 등으로부터 목적에 따라 선택할 수 있다. 용액은 목적에 따라, 임의 성분으로서 산화 방지제, 점도 조정제 등을 함유할 수도 있다.
- [0279] 본 발명의 발광 소자의 각 층의 바람직한 막 두께는 재료의 종류나 층 구성에 따라 상이하지만, 일반적으로는 막 두께가 지나치게 얇으면 핀홀 등의 결함이 발생하기 쉽고, 반대로 지나치게 두꺼우면 높은 인가 전압이 필요

해져 발광 효율이 악화되기 때문에, 통상적으로 수 nm 내지 1 μm가 바람직하다.

[0280] 본 발명의 발광 소자의 용도로서는, 예를 들면 면상 광원, 조명, 광원, 사인용 광원, 백 라이트용 광원, 디스플레이 장치, 프린터 헤드 등을 들 수 있다. 상기 디스플레이 장치로서는, 공지된 구동 기술, 구동 회로 등을 사용하여 세그먼트형, 도트 매트릭스형 등의 구성을 선택할 수 있다.

[0281] [실시에]

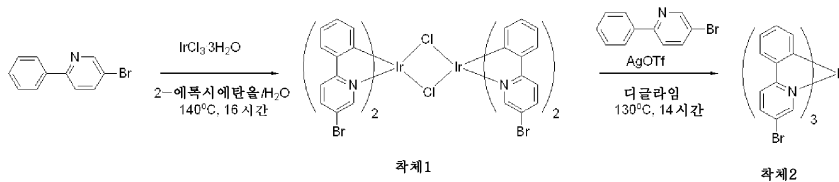
[0282] 이하, 본 발명을 보다 상세히 설명하기 위해 실시예를 나타내지만, 본 발명은 이것으로 한정되는 것은 아니다.

[0283] <합성에 1>(금속 착체 (MC-1)의 합성)

[0284] · 5-브로모-2-페닐피리딘의 합성

[0285] 반응 용기에 2,5-디브로모피리딘(7.11 g, 30 mmol), 톨루엔(130 mL), 페닐붕산(4.57 g, 37.5 mmol) 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(1.73 g, 1.5 mmol)을 칭량하고, 질소 기류하에 50 °C에서 교반하면서 반응물을 용해시켰다. 이것에 2 M 탄산나트륨 수용액(30 mL)을 첨가하고, 80 °C에서 6 시간 동안 교반하였다. 얻어진 반응 용액의 유기층을 회수하고, 탄산나트륨 수용액 및 포화 식염수로 세정하였다. 유기층을 황산나트륨으로 건조시키고, 여과한 후 증류 제거하였다. 이 잔사를 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피(헥산/톨루엔)로 정제하고, 용매를 증류 제거하여 5-브로모-2-페닐피리딘(6.21 g, 26.5 mmol)을 얻었다.

[0286] · 금속 착체(착체 1, 2)의 합성



[0287] 반응 용기에 5-브로모-2-페닐피리딘(7.39 g, 30 mmol), 염화이리듐 삼수화물(4.76 g, 13.5 mmol), 2-에톡시에탄올(58 mL) 및 물(19 mL)을 칭량하고, 질소 기류하에 140 °C에서 16 시간 동안 가열하였다. 공냉한 후, 얻어진 반응 혼합물을 여과 분별하고, 물, 메탄올, 헥산의 순으로 세정함으로써 황색 고체로서 상기 화학식으로 표시되는 금속 착체(착체 1, 9.10 g, 6.58 mmol)를 얻었다.

[0289] 반응 용기에 금속 착체(착체 1, 6.94 g, 5.0 mmol), 5-브로모-2-페닐피리딘(7.32 g, 30.0 mmol) 및 디글라임(43 mL)을 칭량하고, 트리플루오로메탄술폰산은(2.57 g, 10.0 mmol)을 첨가하여 130 °C에서 14 시간 동안 교반하였다. 얻어진 반응물을 여과 분별하고, 고체를 염화메틸렌(1.3 L)에 용해시켰다. 이 용액을 여과하고, 여과액을 약 150 mL 정도로 농축하였다. 석출된 고체를 여과 분별 회수하고, 헥산으로 세정함으로써 상기 화학식으로 표시되는 금속 착체(착체 2, 6.35 g, 7.1 mmol)를 얻었다.

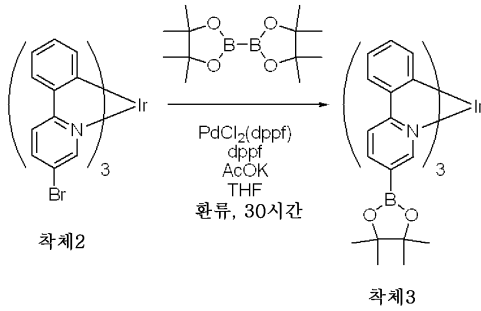
LC-MS (포지티브) m/z : 890 ([M+H]<sup>+</sup>)

<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>)

δ 6.51 (d, J = 7.8 Hz, 3 H), δ 6.72 (m, 3 H), δ 6.84 (m, 3 H), δ 7.66 (d, J = 2.0 Hz, 3 H), δ 7.80 (d, J = 7.8 Hz, 3 H), δ 8.05 (dd, J = 2.0, 8.8 Hz, 3 H), δ 8.14 (d, J = 8.8 Hz, 3 H)

[0290]

[0291] · 금속 착체(착체 3)의 합성



[0292]

[0293]

질소 기류하에 반응 용기에 금속 착체(착체 2, 3.27 g, 3.7 mmol), 아세트산칼륨(3.27 g, 33.3 mmol), 비스(피나콜레이트)디보론(3.38 g, 13.3 mmol), 1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센(245 mg, 0.44 mmol), [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐(II)(361 mg, 0.44 mmol) 및 테트라히드로푸란(400 mL)을 칭량하고, 30 시간 동안 환류하였다. 얻어진 반응 용액을 농축하고, 염화메틸렌(150 mL)을 첨가하여 용해시킨 후에 여과하였다. 이 여과액을 실리카 겔 크로마토그래피(염화메틸렌)로 정제하고, 용매를 증류 제거하여 잔사를 디에틸에테르로 세정함으로써, 상기 화학식으로 표시되는 금속 착체(착체 3, 2.55 g, 2.47 mmol)를 얻었다.

LC-MS (포지티브) m/z : 1072 ([M+K]<sup>+</sup>)

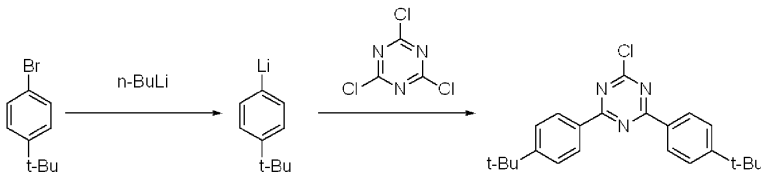
<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>)

δ 1.21 (s, 36 H), δ 6.87 (m, 9 H), δ 7.69 (d, J = 7.7 Hz, 3 H), δ 7.82 (s, 3 H), δ 7.86 (m, 6 H)

[0294]

[0295]

· 2,4-디(4'-tert-부틸페닐)-6-클로로-1,3,5-트리아진 합성



[0296]

[0297]

아르곤 기류하에 반응 용기에 1-브로모-4-tert-부틸벤젠(125 g, 587 mmol)과 테트라히드로푸란(470 mL)을 투입하고, -70 °C로 냉각하였다. 이것에 n-부틸리튬/헥산 용액(1.6 M, 367 mL, 587 mmol)을 -70 °C에서 90분에 걸쳐서 적하하고, 적하 종료 후 -70 °C에서 2 시간 동안 교반하여 4-tert-부틸페닐리튬/THF 용액을 얻었다. 아르곤 기류하에 별도의 반응 용기에 염화시아놀(50.8 g, 276 mmol)과 테트라히드로푸란(463 mL)을 투입하고, -70 °C로 냉각하였다. 이것에, 앞서 제조한 4-tert-부틸페닐리튬/THF 용액을 반응 온도가 -60 °C 이하가 되도록 냉각하면서 천천히 적하하였다. 적하 종료 후, 반응 용액을 -40 °C에서 4 시간, 실온에서 4 시간 동안 교반하였다. 이 반응 혼합물에 물(50 mL)을 첨가하여 반응을 종료시키고, 테트라히드로푸란을 증류 제거하였다. 이 잔사에 물(1 L)과 클로로포름(2 L)을 첨가하여 유기층을 추출하고, 추가로 물(1 L)로 유기층을 세정한 후 용매를 증류 제거하였다. 이 잔사를 아세토니트릴(600 mL)에 용해시켜 열시(熱時) 여과로 불용 고체를 제거하였다. 얻어진 여과액을 100 mL 정도까지 농축하고, -70 °C로 냉각시켜 석출된 고체를 여과 분별 회수하였다. 회수한 고체를 클로로포름(200 mL)/헥산(600 mL) 혼합 용매에 용해시키고, 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피(전개 용매: 클로로포름/헥산)로 정제하였다. 용매를 증류 제거하고, 이 잔사를 아세토니트릴로부터 재결정함으로써 2,4-디(4'-tert-부틸페닐)-6-클로로-1,3,5-트리아진(41.3 g, 109 mmol)을 얻었다.

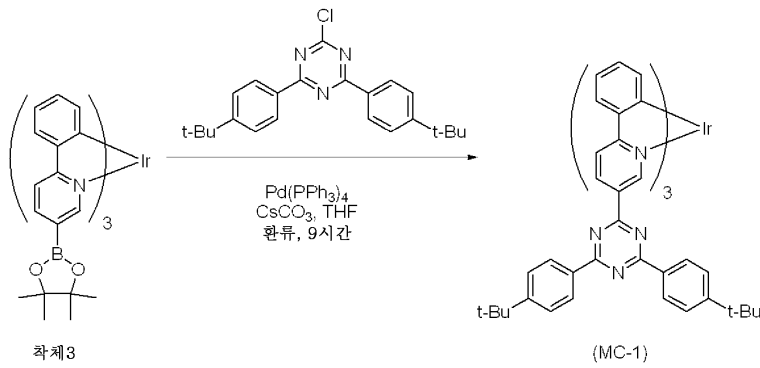
LC-MS (APPI, 포지티브) m/z : 380 ([M+H]<sup>+</sup>)

<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>)

δ 1.39 (s, 18 H), δ 7.56 (d, J = 8.4 Hz, 4 H), δ 8.54 (d, J = 8.4 Hz, 4 H)

[0298]

[0299] · 금속 착체 (MC-1)의 합성



[0300]

[0301]

질소 기류하에 반응 용기에 금속 착체(착체 3, 546 mg, 0.53 mmol), 2,4-디(4'-tert-부틸페닐)-6-클로로-1,3,5-트리아진(702 mg, 1.85 mmol), 탄산세슘(1.73 g, 5.31 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(196 mg, 0.17 mmol) 및 테트라히드로푸란(53 mL)을 칭량하고, 9 시간 동안 환류하였다. 얻어진 반응 용액을 농축하고, 이것에 톨루엔을 첨가하여 용해시켰다. 이 용액을 여과하고, 여과액을 실리카 겔 크로마토그래피로 2회 정제하였다(1회째, 전개 용매: 톨루엔, 2회째, 전개 용매: 헥산/톨루엔=1/1). 용매를 증류 제거하고, 잔사를 메탄올로 세정함으로써 상기 화학식으로 표시되는 금속 착체(MC-5, 257 mg, 0.15 mmol)를 얻었다.

LC-MS (APCI, 포지티브) m/z : 1 6 8 6 ([M+H]<sup>+</sup>)

<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>)

δ 1.20 (s, 54 H), δ 6.96 (m, 9 H), δ 7.39 (d, J = 8.4 Hz, 12 H), δ 7.83 (d, J = 7.5 Hz, 3 H), δ 8.18 (d, J = 8.4 Hz, 3 H), δ 8.36 (d, J = 8.4 Hz, 12 H), δ 9.14 (d, J = 8.4 Hz, 3 H), δ 9.33 (s, 3 H)

[0302]

[0303]

[분석 조건 1]

[0304]

측정하는 고분자 화합물(중합체)은 약 0.05 중량%의 농도가 되도록 테트라히드로푸란에 용해시키고, SEC에 50 μL 주입하였다. SEC의 이동상으로서 테트라히드로푸란을 사용하여 0.6 mL/분의 유속으로 흘렸다. 칼럼으로서 TSKgel SuperHM-H(도소 제조) 2개와 TSKgel SuperH2000(도소 제조) 1개를 직렬로 연결하여 사용하였다. 검출기에는 시차 굴절률 검출기(시마즈 세이사꾸쇼 제조, 상품명: RID-10A)를 사용하였다.

[0305]

[분석 조건 2]

[0306]

측정하는 고분자 화합물(중합체)은 약 0.05 중량%의 농도가 되도록 테트라히드로푸란에 용해시키고, SEC에 10 μL 주입하였다. SEC의 이동상으로서 테트라히드로푸란을 사용하여 2.0 mL/분의 유속으로 흘렸다. 칼럼으로서 PLgel MIXED-B(폴리머 래버러토리즈 제조)를 사용하였다. 검출기에는 UV-VIS 검출기(시마즈 세이사꾸쇼 제조: SPD-10Avp)를 사용하였다.

[0307]

LC-MS의 측정은, 이하의 방법으로 행하였다. 측정 시료를 약 2 mg/mL의 농도가 되도록 클로로포름 또는 테트라히드로푸란에 용해시키고, LC-MS(애질런트 테크놀로지 제조, 상품명: 1100LCMSD)에 약 1 μL 주입하였다. LC-MS의 이동층에는, 약 0.1 중량%의 아세트산을 첨가한 이온 교환수와 약 0.1 중량%의 아세트산을 첨가한 아세토니트릴을 비율을 변화시키면서 사용하여 0.2 mL/분의 유량으로 흘렸다. 칼럼은 L-칼럼 2 ODS(3 μm)(가가꾸 붓시즈 효카 쟁구 기구 제조, 내경 2.1 mm, 길이 100 mm, 입경 3 μm)를 사용하였다.

[0308]

NMR의 측정은, 이하의 방법으로 행하였다. 측정 시료 5 내지 10 mg을 약 0.5 mL의 중클로로포름 또는 중디메틸술폰-d<sub>6</sub>에 용해시키고, NMR(비리안(Varian, Inc.) 제조, 상품명: 머큐리 300)을 사용하여 측정하였다.

[0309]

<합성에 2>

[0310]

· 중합체 1의 합성

[0311]

200 mL 세퍼러블 플라스크에 9,9-디옥틸플루오렌-2,7-디붕산에틸렌글리콜에스테르 2.65 g(5.0 mmol), 9,9-디옥틸-2,7-디브로모플루오렌 1.98 g(순도 96.9 %, 3.5 mmol), 2,4-비스(4-브로모페닐)-6-(4-n-부틸페닐)-1,3,5-트리아진 0.53 g(1.0 mmol), N,N'-비스(4-브로모페닐)-N,N'-비스(2,6-디메틸-4-tert-부틸페닐)-1,4-페닐

렌디아민 0.37 g(0.5 mmol), 메틸트리옥틸암모늄클로라이드(상품명: 알리코트(Aliquat) 336, 알드리치사 제조) 0.65 g 및 톨루엔 50 mL를 첨가하였다. 질소 분위기하에 여기에 비스트리페닐포스핀팔라듐디클로라이드 3.5 mg을 첨가하고, 95 °C로 가열하였다. 얻어진 용액에 17.5 중량% 탄산나트륨 수용액 13.5 mL를 적하하면서 105 °C로 가열한 후, 3 시간 동안 교반하였다. 이어서, 여기에 페닐붕산 0.61 g, 비스트리페닐포스핀팔라듐디클로라이드 3.5 mg 및 톨루엔 50 mL를 첨가하고, 105 °C에서 16 시간 동안 교반하였다.

[0312] 얻어진 용액으로부터 수상을 제거한 후, 여기에 N,N-디에틸디티오카르바미산나트륨 삼수화물 3.04 g 및 이온 교환수 30 mL를 첨가하고, 85 °C에서 2 시간 동안 교반하였다. 유기상을 수상과 분리한 후, 유기상을 이온 교환수 65 mL(2회), 3 중량% 아세트산 수용액 65 mL(2회), 이온 교환수 65 mL(2회)의 순서로 세정하였다.

[0313] 유기상을 메탄올 800 mL에 적하한 바, 침전물이 발생하였기 때문에, 이 침전물을 여과, 건조하여 고체를 얻었다. 이 고체를 톨루엔 300 mL에 용해시키고, 미리 톨루엔을 통액시킨 실리카 겔/알루미나 칼럼에 용액을 통액시키고, 통액된 용출액을 메탄올 1500 mL에 적하한 바, 침전물이 발생하였기 때문에, 이 침전물을 여과, 건조하여 중합체(이하, "중합체 1"이라고 함)를 3.48 g 얻었다. 분석 조건 1로 측정된 중합체 1의 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량 Mn은  $1.4 \times 10^5$ 이었으며, 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량 Mw는  $3.7 \times 10^5$ 이었다.

[0314] <합성에 3>

[0315] · 중합체 2의 합성

[0316] 200 mL 세퍼러블 플라스크에 9,9-디옥틸플루오렌-2,7-디붕산에틸렌글리콜에스테르 3.18 g(6.0 mmol), 9,9-디옥틸-2,7-디브로모플루오렌 3.06 g(5.4 mmol), N,N'-비스(4-브로모페닐)-N,N'-비스(2,6-디메틸-4-tert-부틸페닐)-1,4-페닐렌디아민 0.44 g(0.6 mmol), 메틸트리옥틸암모늄클로라이드(상품명: 알리코트 336, 알드리치사 제조) 0.82 g 및 톨루엔 60 mL를 첨가하였다. 질소 분위기하에 여기에 비스트리페닐포스핀팔라듐디클로라이드 4.2 mg을 첨가하여 85 °C로 가열하였다. 얻어진 용액에 17.5 중량% 탄산나트륨 수용액 16.3 mL를 적하하면서 105 °C로 가열한 후, 1.5 시간 동안 교반하였다. 이어서, 페닐붕산 0.74 g, 비스트리페닐포스핀팔라듐디클로라이드 4.2 mg 및 톨루엔 30 mL를 첨가하고, 105 °C에서 17 시간 동안 교반하였다.

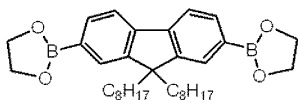
[0317] 얻어진 용액으로부터 수상을 제거한 후, 여기에 N,N-디에틸디티오카르바미산나트륨 삼수화물 3.65 g 및 이온 교환수 36 mL를 첨가하고, 85 °C에서 2 시간 동안 교반하였다. 유기상을 수상과 분리한 후, 유기상을 이온 교환수 80 mL(2회), 3 중량% 아세트산 수용액 80 mL(2회), 이온 교환수 80 mL(2회)의 순서로 세정하였다.

[0318] 유기상을 메탄올 930 mL에 적하한 바, 침전물이 발생하였기 때문에, 이 침전물을 여과, 건조하여 고체를 얻었다. 이 고체를 톨루엔 190 mL에 용해시키고, 미리 톨루엔을 통액시킨 실리카 겔/알루미나 칼럼에 용액을 통액시키고, 통액된 용출액을 메탄올 930 mL에 적하한 바, 침전물이 발생하였기 때문에, 이 침전물을 여과한 후 건조하여 중합체(이하, "중합체 2"라고 함)를 4.17 g 얻었다. 분석 조건 1로 측정된 중합체 2의 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량 Mn은  $2.7 \times 10^5$ 이었으며, 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량 Mw는  $7.1 \times 10^5$ 이었다.

[0319] <합성에 4>

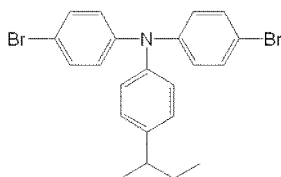
[0320] · 중합체 C의 합성(정공 수송성 고분자 화합물)

[0321] 덤로스를 접속한 플라스크에, 하기 화학식



[0322]

[0323] 로 표시되는 화합물 A 5.25 g(9.9 mmol), 하기 화학식



[0324]

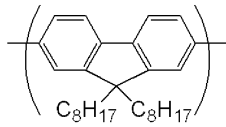
[0325] 로 표시되는 화합물 B 4.55 g(9.9 mmol), 메틸트리옥틸암모늄클로라이드(상품명: 알리코트 336, 알드리치사 제

조) 0.91 g 및 톨루엔 69 ml를 첨가하여 단량체 용액을 얻었다. 질소 분위기하에 단량체 용액을 가열하고, 80 °C에서 아세트산팔라듐 2 mg 및 트리스(2-메틸페닐)포스핀 15 mg을 첨가하였다. 얻어진 단량체 용액에 17.5 중량% 탄산나트륨 수용액 9.8 g을 주입 첨가한 후, 110 °C에서 19 시간 동안 교반하였다. 이어서, 여기에 톨루엔 1.6 ml에 용해한 페닐붕산 121 mg을 첨가하고, 105 °C에서 1 시간 동안 교반하였다.

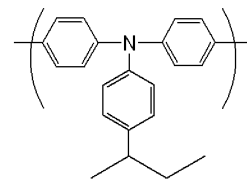
[0326] 유기상을 수상과 분리한 후, 유기상에 톨루엔 300 ml를 첨가하였다. 유기상을 3 중량% 아세트산 수용액 40 ml(2회), 이온 교환수 100 ml(1회)의 순서로 세정하고, 수상과 분리하였다. 유기상에 N,N-디에틸디티오카르바미산나트륨 삼수화물 0.44 g, 톨루엔 12 ml를 첨가하고, 65 °C에서 4 시간 동안 교반하였다.

[0327] 얻어진 반응 생성물의 톨루엔 용액을 미리 톨루엔을 통액시킨 실리카 겔/알루미나 칼럼에 통액시키고, 얻어진 용액을 메탄올 1400 ml에 적하한 바, 침전물이 발생하였기 때문에, 이 침전물을 여과, 건조하여 고체를 얻었다. 이 고체를 톨루엔 400 ml에 용해시키고, 메탄올 1400 ml에 적하한 바, 침전물이 발생하였기 때문에, 이 침전물을 여과, 건조하여 중합체(이하, "중합체 C"라고 함)를 6.33 g 얻었다. 분석 조건 1로 측정된 중합체 C의 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량 Mn은  $8.8 \times 10^4$ 이었으며, 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량 Mw는  $3.2 \times 10^5$ 이었다.

[0328] 또한, 중합체 C는 투입 원료로부터 하기 화학식



[0329]



[0330]

로 표시되는 반복 단위를 1:1(몰비)로 갖는 것으로 추측된다.

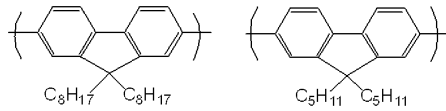
[0331]

<합성에 5>(중합체 3의 합성)

[0332]

[0333] 불활성 분위기하에 F8-디붕산(2387 mg, 4.50 mmol), F8-diBr(1505 mg, 2.70 mmol), F5(디펜틸플루오렌)-diBr(836 mg, 1.80 mmol)을 톨루엔(50 ml)에 용해시키고, 45 °C로 승온시킨 후, 아세트산팔라듐(3 mg, 0.0135 mmol) 및 트리스 o-메톡시페닐포스핀(19 mg, 0.054 mmol)을 첨가하고, 5분간 교반하였다. 이어서, 32.78 중량% 비스테트라에틸암모늄카르보네이트 수용액(20.2 ml)을 첨가하여 승온시키고, 약 4 시간 동안 가열하여 환류시켰다. 그 후, 여기에 t-부틸페닐보론산(401 mg)을 첨가하고, 밤새 가열하여 환류시켰다. 얻어진 반응액을 65 °C까지 냉각한 후, 5 중량% 디에틸디티오카르바미산나트륨 수용액(50 ml)을 첨가하여 4 시간 동안 교반하고, 수층을 분액하였다. 재차 반응액에 5 중량% 디에틸디티오카르바미산나트륨 수용액(50 ml)을 첨가하여 4 시간 동안 교반하고, 수층을 분액하였다. 그 후, 유기층을 실온까지 냉각하고, 2 N 염산수(100 ml)로 2회, 10 중량% 아세트산나트륨 수용액(100 ml)으로 2회, 물(100 ml)로 6회 세정하여 분액하였다. 얻어진 유기층을 셀라이트(100 g)를 간 여과기에 통과시킨 후, 여과기를 톨루엔(2500 ml)으로 세정하여 톨루엔 용액을 회수하였다. 톨루엔 용액 전량을 200 ml까지 농축한 후, 이것을 메탄올(2000 ml)에 적하한 바, 침전이 석출되었기 때문에 이 침전을 여과 분별하였다. 이 침전을 재차 톨루엔(200 ml)에 용해시킨 후, 얻어진 톨루엔 용액을 메탄올(2000 ml)에 적하한 바, 침전이 석출되었기 때문에 이 침전을 여과 분별하였다. 또한, 이 침전을 톨루엔(200 ml)에 용해시킨 후, 얻어진 톨루엔 용액을 메탄올(2000 ml)에 적하한 바, 침전이 석출되었기 때문에 이 침전을 여과 분별하였다. 얻어진 침전을 감압하여 건조시킴으로써, 중합체(이하, "중합체 3"이라고 함)를 2.55 g 얻었다. 중합체 3의 분석 조건 1로 측정된 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량 Mw는  $4.8 \times 10^5$ 이었으며, 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량 Mn은  $1.8 \times 10^5$ 이었다.

[0334] 또한, 중합체 3은 투입 원료로부터 하기 화학식

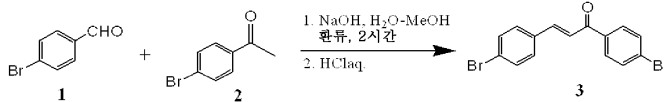


[0335]

[0336] 로 표시되는 반복 단위를 80:20(몰비)으로 갖는 중합체로 추측된다.

[0337] <합성예 6>(중합체 4의 합성)

[0338] · E-1,3-비스(4-브로모페닐)-2-프로펜-1-온(화합물 3)의 합성



[0339]

[0340] 2 L의 삼구 플라스크에 p-브로모벤즈알데히드(화합물 1) 75 g(0.40 mol)과 p-브로모아세트페논(화합물 2) 80 g(0.40 mol) 및 메탄올 400 mL를 첨가하고, 아르곤 가스로 치환한 후에 메카니컬 교반기를 사용하여 교반하였다. 얻어진 용액에, 물 400 mL에 용해시킨 수산화나트륨 1.7 g(0.04 mol)을 첨가하였다. 얻어진 현탁액을 가열하고, 2 시간 동안 환류시킨 후 실온까지 냉각하고, 2 M HCl aq. 24 mL를 첨가하여 용액을 산성으로 하였다. 대량의 황색의 침전에 충분한 양의 클로로포름(약 10 L)을 첨가하여 용해시키고, 얻어진 용액을 물로 2회 세정하였다. 유기층을 감압 증류 제거하여 얻어진 황색 침전을 대량의 메탄올에 분산시키고, 물을 적량 첨가하고(메탄올:물=1:1 정도가 되도록 물을 첨가하고), 생성된 침전을 여과 분별하여 메탄올로 세정한 후, 진공 오븐으로 가열하여 건조시켜 황색의 E-1,3-비스(4-브로모페닐)-2-프로펜-1-온(화합물 3)을 138.1 g 얻었다(수율 95 %).

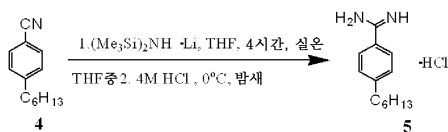
<sup>1</sup>H NMR (300MHz, CDCl<sub>3</sub>); δ(TMS, ppm) 7.90-7.87 (m, 2H, Ar-H), 7.75 (d, j = 1.8 Hz, 1H, CH=C), 7.67-7.64 (m, 2H, Ar-H), 7.58-7.52 (m, 4H, Ar-H), 7.47 (d, j = 1.8Hz, 1H, CH=C).

<sup>13</sup>C NMR (75 MHz, CDCl<sub>3</sub>); δ(TMS, ppm) 144.2, 137.0, 133.9, 132.6, 132.3, 130.3, 130.1, 128.4, 125.4, 122.2.

LC-MS (APPI); m/z = 365 [M+H]<sup>+</sup>.

[0341]

[0342] · p-헥실벤즈아미딘히드로클로라이드(화합물 5)의 합성



[0343]

[0344] 글로브 박스 내에서 p-헥실벤조니트릴(화합물 4) 16.2 g(83.7 mmol), 건조 THF ca. 20 mL 및 1 M 리튬비스트리메틸실릴아미드의 테트라히드로푸란 용액 100 mL(100 mmol)를 500 mL 사구 플라스크에 칭량하고, 질소 분위기에 실온에서 4 시간 동안 교반하였다. 빙욕을 사용하여 0 °C까지 냉각하고, 4 M 염산디옥산 용액 100 mL를 천천히 적하하였다. 빙냉하에 4 시간 동안 교반하고, 밤새 빙냉하에 정치하였다. 다음날 디에틸에테르 350 mL를 첨가하고, 초음파를 조사한 후, 기울여 따르기에 의해 상층을 버렸다. 얻어진 침전에 디에틸에테르 500 mL를 첨가하고, 초음파를 조사하면서 교반한 바, 오일상의 목적물이 고화되었기 때문에 이것을 여과 분별하였다. 반복하여 침전을 디에틸에테르로 세정한 바, 회색 분말이 되고, 이것을 모아서 진공 오븐으로 2 시간 동안 건조시켜 p-헥실벤즈아미딘히드로클로라이드(화합물 5) 23 g을 얻었다(수율 quant.).

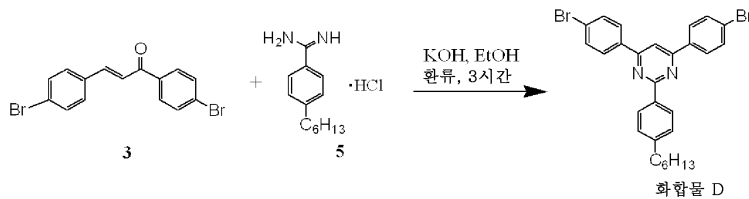
$^1\text{H NMR}$  (300MHz,  $\text{DMSO}-d_6$ ) ;  $\delta$  (TMS, ppm) 9.63 (brs, 2H, NH), 9.44 (brs, 2H, NH), 7.91 (d,  $j = 8.0$  Hz, 2H, Ar-H), 7.45 (d,  $j = 8.0$  Hz, 1H, Ar-H), 2.70 (t,  $j = 7.5$  Hz, 2H, ArCH<sub>2</sub>-), 2.70 (t,  $j = 7.5$  Hz, 2H, ArCH<sub>2</sub>-), 1.66-1.56 (m, 2H, ArCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-), 1.66-1.56 (m, 2H, ArCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-), 1.30 (brs, 6H, -CH<sub>2</sub>-), 0.88 (t,  $j = 6.2$  Hz, 3H, -CH<sub>3</sub>).

[0345]

$^{13}\text{C NMR}$  (75 MHz,  $\text{DMSO}-d_6$ ) ;  $\delta$  (TMS, ppm) 166.2, 149.8, 129.6, 128.9, 125.6, 35.73, 31.79, 31.26, 29.01, 22.79, 14.71.

[0346]

[0347] · 4,6-비스(4-브로모페닐)-2-(4-헥실페닐)피리미딘(화합물 D)의 합성



[0348]

[0349]

아르곤 가스 분위기하에 3 L 사구 플라스크에 E-1,3-비스(4-브로모페닐)-2-프로펜-1-온(화합물 3) 76 g(0.206 mol), p-헥실벤즈아미딘히드로클로라이드(화합물 5) 21 g(0.103 mol) 및 에탄올 700 mL를 칭량하고, 얻어진 현탁액에 에탄올 1.3 L에 용해시킨 수산화칼륨 12 g(0.206 mol)을 첨가하여 4 시간 동안 메카니컬 교반기로 교반하여 환류시켰다. 이 때, 현탁액의 색은 점차 오렌지색으로부터 녹색을 거쳐서 황토색으로 변화되었다. 그 후, 얻어진 용액을 액량이 약 절반이 될 때까지 감압 증류 제거하고, 충분히 냉정한 후 침전을 여과 분별하였다. 얻어진 침전을 물로 세정하고, 진공 오븐으로 밤새 건조함으로써 미정제된 화합물 D를 48.7 g 얻었다(회색 분말: 순도 82%). 이 화합물 D를 약 1 L의 빙초산을 사용하여 재결정하였다. 얻어진 침전을 디에틸에테르에 용해시키고, 포화 탄산수소나트륨(aq)으로 1회, 물로 2회 세정하고, 디에틸에테르를 감압하여 증류 제거함으로써 정제한 화합물 D를 38.6 g(백색 분말, 순도 99.44%) 얻었다. 이 화합물 D를 보다 순도를 높이기 위해 메탄올에 분산시키고, 물을 첨가하여 침전을 여과 분별한 후, 이 침전을 재차 빙초산에 의해 재결정하였다. 얻어진 침전을 디에틸에테르에 용해시키고, 포화 탄산수소나트륨(aq)으로 1회, 물로 2회 세정하고, 디에틸에테르를 감압증류 제거함으로써 순도 99.50%의 화합물 D를 29 g(백색 분말) 얻었다(수율 51%).

$^1\text{H NMR}$  (300MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) ;  $\delta$  (TMS, ppm) 8.54 (d,  $j = 7.8$  Hz, 2H, Ar-H), 8.10 (d,  $j = 8.4$  Hz, 4H, Ar-H), 7.82 (s, 1H, Ar-H), 7.65 (d,  $j = 8.4$  Hz, 4H, Ar-H), 7.32 (d,  $j = 7.9$  Hz, 2H, Ar-H), 2.70 (t,  $j = 7.6$  Hz, 2H, ArCH<sub>2</sub>-), 1.72-1.62 (m, 2H, ArCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-), 1.33 (brs, 6H, -CH<sub>2</sub>-), 0.89 (t,  $j = 9.2$  Hz, 3H, -CH<sub>3</sub>),

$^{13}\text{C NMR}$  (75 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) ;  $\delta$  (TMS, ppm) 165.1, 163.9, 146.5, 136.5, 135.5, 132.4, 129.0, 128.9, 128.7, 125.8, 109.4, 36.26, 32.04, 31.59, 29.28, 22.94, 14.42.

[0350]

LC-MS (APPI) ;  $m/z=549$  [m+h]<sup>+</sup>.

[0351]

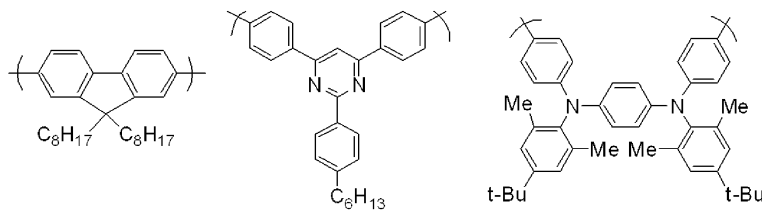
· 중합체 4의 합성

[0352]

200 mL 세퍼러블 플라스크에 9,9-디옥틸플루오렌-2,7-디붕산에틸렌글리콜에스테르 1.866 g(순도 99.9%, 3.51 mmol), 9,9-디옥틸-2,7-디브로모플루오렌 1.392 g(순도 96.9%, 2.46 mmol), 4,6-비스(4-브로모페닐)-2-(4-n-헥실페닐)-피리미딘 0.389 g(순도 99.5%, 0.70 mmol), N,N'-비스(4-브로모페닐)-N,N'-비스(2,6-디메틸-4-

tert-부틸페닐)-1,4-페닐렌디아민 0.260 g(순도 99.9 %, 0.35 mmol), 메틸트리옥틸암모늄클로라이드(상품명: 알리코트 336, 알드리치사 제조) 0.51 g 및 톨루엔 64 mL를 첨가하였다. 얻어진 혼합액을 질소 분위기하에 100 °C로 가열하였다. 여기에 비스트리페닐포스핀팔라듐디클로라이드 2.5 mg을 첨가하였다. 얻어진 용액에 17.5 중량% 탄산나트륨 수용액 9.81 g을 적하한 후, 3 시간 동안 교반하였다. 이어서, 여기에 페닐붕산 0.043 g, 비스트리페닐포스핀팔라듐디클로라이드 1.3 mg 및 톨루엔 4 mL, 17.5 중량% 탄산나트륨 수용액 9.88 g을 첨가하고, 100 °C에서 17 시간 동안 교반하였다. 얻어진 용액으로부터 수층을 제거한 후, N,N-디에틸디티오카르바미산나트륨 삼수화물 1.96 g, 이온 교환수 39 mL를 첨가하고, 85 °C에서 2 시간 동안 교반하였다. 얻어진 용액으로부터 유기층을 수층과 분리한 후, 유기층을 이온 교환수 46 mL(3회), 3 중량% 아세트산 수용액 46 mL(3회), 이온 교환수 46 mL(3회)의 순서로 세정하였다. 얻어진 유기층을 메탄올 600 mL에 적하한 바, 침전이 발생하였다. 이 침전을 여과한 후, 건조시켜 고체를 얻었다. 이 고체를 톨루엔 200 mL에 용해시켜 용액을 제조하고, 미리 톨루엔을 통액시킨 실리카 겔/알루미나 칼럼에 이 용액을 통액시키고, 통액된 용출액을 메탄올 1400 mL에 적하한 바, 침전이 발생하였다. 이 침전을 여과한 후, 건조시켜 중합체(이하, "중합체 4"라고 함)를 2.38 g 얻었다. 중합체 4의 분석 조건 1로 측정된 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량 Mn은  $1.7 \times 10^5$ 이었으며, 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량 Mw는  $4.7 \times 10^5$ 이었다.

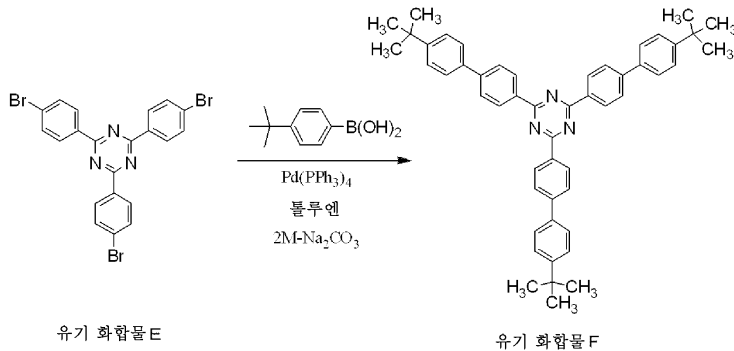
[0353] 또한, 중합체 4는, 투입 원료로부터 하기 화학식



[0354] 으로 표시되는 반복 단위를 85:10:5(몰비)로 갖는 것으로 추측된다.

[0355] <합성에 7>

[0356] 유기 화합물 F의 합성



[0357] 질소 분위기하에 유기 화합물 E(백색 결정) 8.06 g(14.65 mmol), 4-t-부틸페닐보론산 9.15 g(49.84 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1.54 g(1.32 mmol), 미리 질소 버블링한 톨루엔 500 ml 및 미리 질소 버블링한 에탄올 47.3 ml를 투입, 교반하고, 가열하여 환류시켰다. 얻어진 반응액에 미리 질소 버블링한 2 M 탄산나트륨 수용액 47.3 ml를 적하하고, 가열하여 환류시켰다. 얻어진 반응액을 방냉한 후 분액하고, 수상을 제거하고, 유기상을 회염산, 물의 순서로 세정, 분액하였다. 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조시켜, 여과, 농축하였다. 얻어진 조생성물을 실리카 겔 칼럼에 통과시키고, 얻어진 여과액에 아세토니트릴을 첨가하였다. 얻어진 결정을 감압하면서 건조시켜, 8.23 g의 백색 결정(이하, "유기 화합물 F"라고 함)을 얻었다.

[0358] <sup>1</sup>H-NMR (270MHz / CDCl<sub>3</sub>) :

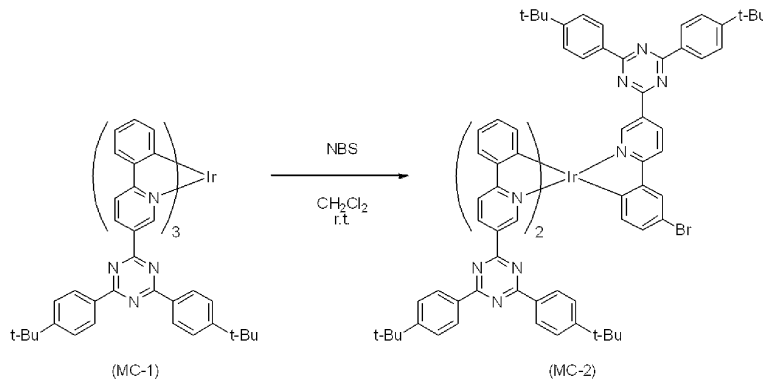
[0359] δ 1.39 (s, 27H), 7.52 (d, 6H), 7.65 (d, 6H), 7.79 (d, 6H), 8.82 (d, 6H)

[0360]

- [0361] <실시예 1>
- [0362] 스퍼터법에 의해 150 nm의 두께로 ITO막을 부착한 유리 기판에 폴리(에틸렌디옥시티오펜)/폴리스티렌술폰산의 용액(바이엘사, 상품명: AI4083)을 사용하여 스핀 코팅에 의해 65 nm의 두께로 성막하고, 핫 플레이트 위에서 200 °C에서 10분간 건조하였다.
- [0363] 이어서, 중합체 C를 0.8 중량%의 크실렌 용액의 상태로 스핀 코팅하고, 약 20 nm의 두께로 성막하였다. 그 후, 핫 플레이트 위에서 180 °C에서 60분간 열 처리하였다.
- [0364] 이어서, 크실렌 용매 중에 1.5 중량%의 농도로 용해시킨 중합체 1과, 1.5 중량%의 농도로 크실렌 용매 중에 용해시킨 금속 착체 (MC-1)을 중량비로 92.5:7.5가 되도록 혼합하여, 조성물(이하, "조성물 1"이라고 함)을 제조하였다. 조성물 1을 스핀 코팅에 의해 3000 rpm의 회전 속도로 성막하였다. 막 두께는 약 80 nm였다. 이것을 질소 가스 분위기하에 130 °C에서 10분간 건조한 후, 음극으로서 바륨을 약 5 nm, 이어서 알루미늄을 약 80 nm 증착하여 EL 소자를 제작하였다. 또한, 진공도가  $1 \times 10^{-4}$  Pa 이하에 도달한 후 금속의 증착을 개시하였다.
- [0365] 얻어진 EL 소자에 전압을 인가한 바, 이 소자로부터 금속 착체 (MC-1)에서 유래하는 600 nm에 피크를 갖는 EL 발광이 얻어졌다. 상기 소자는 2.6 V로부터 발광을 개시하였으며, 5.3 V에서  $1000 \text{ cd/m}^2$ 의 발광을 나타내고, 최대 발광 효율은 22.32 cd/A였다.
- [0366] 또한, 상기 중합체 1 및 금속 착체 (MC-1)에 대하여 양자 화학 계산 프로그램 가우시안 03을 사용하여 B3LYP 레벨의 밀도 범함수법에 의해 기저 상태의 구조 최적화를 행하고, 상기 최적화된 구조에서의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 산출한 바, 이들의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차는 0.01 eV로 산출되었다.
- [0367] <실시예 2>
- [0368] 실시예 1에서 크실렌 용매 중에 1.5 중량%의 농도로 용해시킨 중합체 1의 용액 대신에 크실렌 용매 중에 1.0 중량%의 농도로 용해시킨 중합체 4의 용액을 사용한 것 이외에는, 실시예 1과 동일하게 하여 EL 소자를 제작하였다. 얻어진 EL 소자에 전압을 인가한 바, 금속 착체 (MC-1)에서 유래하는 600 nm에 피크를 갖는 EL 발광이 얻어졌다. 상기 소자는 2.67 V로부터 발광을 개시하였으며, 6.9 V에서  $1000 \text{ cd/m}^2$ 를 나타내고, 최대 발광 효율은 24.97 cd/A였다.
- [0369] 또한, 중합체 4 및 금속 착체 (MC-1)에 대하여, 양자 화학 계산 프로그램 가우시안 03을 사용하여 B3LYP 레벨의 밀도 범함수법에 의해 기저 상태의 구조 최적화를 행하고, 상기 최적화된 구조에서의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 산출한 바, 이들의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차는 0.13 eV로 산출되었다.
- [0370] <실시예 3>
- [0371] 실시예 1에서 크실렌 용매 중에 1.5 중량%의 농도로 용해시킨 중합체 1의 용액 대신에 크실렌 용매 중에 1.5 중량%의 농도로 용해시킨 중합체 2의 용액과, 크실렌 용매 중에 1.5 중량%의 농도로 용해시킨 유기 화합물 F의 용액을 중량비로 70:30이 되도록 혼합한 용액을 사용한 것 이외에는, 실시예 1과 동일하게 하여 EL 소자를 제작하였다. 얻어진 EL 소자에 전압을 인가한 바, 금속 착체 (MC-1)에서 유래하는 600 nm에 피크를 갖는 EL 발광이 얻어졌다. 상기 소자는 2.94 V로부터 발광을 개시하였으며, 6.2 V에서  $1000 \text{ cd/m}^2$ 를 나타내고, 최대 발광 효율은 21.31 cd/A였다.
- [0372] 또한, 유기 화합물 E 및 금속 착체 (MC-1)에 대하여, 양자 화학 계산 프로그램 가우시안 03을 사용하여 B3LYP 레벨의 밀도 범함수법에 의해 기저 상태의 구조 최적화를 행하고, 상기 최적화된 구조에서의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 산출한 바, 이들의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차는 0.28 eV로 산출되었다.
- [0373] <실시예 4>
- [0374] 실시예 1에서 크실렌 용매 중에 1.5 중량%의 농도로 용해시킨 중합체 1의 용액 대신에 크실렌 용매 중에 1.5 중량%의 농도로 용해시킨 중합체 2의 용액과, 크실렌 용매 중에 1.5 중량%의 농도로 용해시킨 유기 화합물 F의 용액을 중량비로 80:20이 되도록 혼합한 용액을 사용한 것 이외에는, 실시예 1과 동일하게 하여 EL 소자를 제작하였다. 얻어진 EL 소자에 전압을 인가한 바, 금속 착체 (MC-1)에서 유래하는 피크 파장 605 nm를 갖는 EL 발광이 얻어졌다. 상기 소자는 3.01 V로부터 발광을 개시하였으며, 7.14 V에서  $1000 \text{ cd/m}^2$ 를 나타내고, 최대 발광 효율은 19.39 cd/A였다.

[0375] <실시예 5>

[0376] · 금속 착체 (MC-2)의 합성



[0377]

[0378] 아르곤 기류하에 반응 용기에 금속 착체(MC-1, 2.03 g, 1.20 mmol)와 염화메틸렌(200 mL)을 칭량하고, 금속 착체를 용해시켰다. 이것에 N-브로모숙신이미드(221 mg, 1.24 mmol)를 첨가하고, 실온에서 4 시간 동안 교반하였다. 용매를 증류 제거하고, 잔사에 톨루엔(50 mL)을 첨가하여 용해시켰다. 얻어진 톨루엔 용액을 실리카 겔 크로마토그래피로 정제하였다(전개 용매: 톨루엔). 용출된 용액을 회수하여 용매를 증류 제거한 후, 잔사에 헥산/톨루엔(2/1)(부피비)의 혼합 용액(400 mL)을 첨가하고, 생성물인 금속 착체 MC-2를 용해시켰다. 이렇게 하여 얻어진 용액을 다시 실리카 겔 크로마토그래피로 정제하였다(전개 용매: 헥산/톨루엔=2/1(부피비)). 이번에는 용출된 성분을 회수하여 용매를 증류 제거한 후, 잔사를 메탄올로 세정함으로써 금속 착체(MC-2, 1.55 g, 0.88 mmol)를 얻었다.

[0379] 금속 착체 (MC-2)

LC-MS (APCI, 포지티브) m/z : 1 7 6 5 ([M+H]<sup>+</sup>)

<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>)

δ 1.20 (s, 54 H), δ 6.85-7.00 (m, 10 H), δ 7.39 (d, J = 7.8 Hz, 12 H), δ 7.83 (d, J = 7.3 Hz, 2 H), δ 7.91 (s, 1 H), δ 8.14 (d, J = 8.8 Hz, 1 H), δ 8.19 (d, J = 8.6 Hz, 2 H), δ 8.36 (d, J = 7.8 Hz, 1 2 H), δ 9.16 (m, 3 H), δ 9.28 (s, 1 H), δ 9.33 (s, 2 H).

[0380]

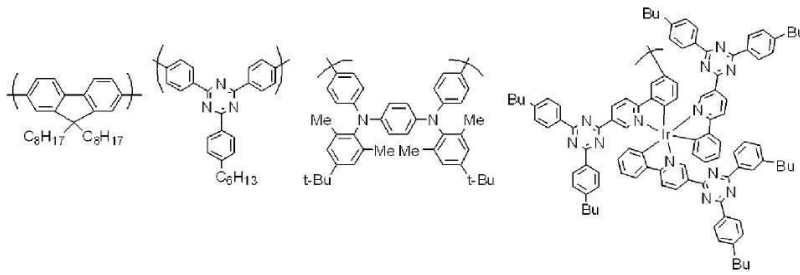
[0381] · 중합체 5의 합성

[0382] 200 mL 세퍼러블 플라스크에 9,9-디옥틸플루오렌-2,7-디붕산에틸렌글리콜에스테르 1.502 g(순도 99.9 %, 2.83 mmol), 9,9-디옥틸-2,7-디브로모플루오렌 1.392 g(순도 96.9 %, 2.15 mmol), 2,4-비스(4-브로모페닐)-6-(4-n-헥실페닐)-1,3,5-트리아진 0.157 g(순도 99.3 %, 0.28 mmol), N,N'-비스(4-브로모페닐)-N,N'-비스(2,6-디메틸-4-tert-부틸페닐)-1,4-페닐렌디아민 0.209 g(순도 99.9 %, 0.28 mmol), 금속 착체 (MC-2) 0.201 g(순도 99.4 %, 0.11 mmol), 메틸트리옥틸암모늄클로라이드(상품명: 알리코트 336, 알드리치사 제조) 0.42 g 및 톨루엔 56 mL를 첨가하였다. 얻어진 혼합액을 질소 분위기하에 100 °C로 가열하였다. 여기에 비스트리페닐포스핀팔라듐 디클로라이드 2.0 mg을 첨가하였다. 얻어진 용액에 17.5 중량% 탄산나트륨 수용액 7.83 g을 적하한 후, 3 시간 동안 교반하였다. 이어서 페닐붕산 0.035 g, 비스트리페닐포스핀팔라듐 디클로라이드 1.1 mg, 톨루엔 3 mL 및 17.5 중량% 탄산나트륨 수용액 7.80 g을 첨가하고, 100 °C에서 16 시간 동안 교반하였다.

[0383] 얻어진 용액으로부터 수층을 제거한 후, N,N-디에틸디티오카르바산나트륨 삼수화물 1.57 g 및 이온 교환수 31 mL를 첨가하고, 85 °C에서 2 시간 동안 교반하였다. 얻어진 용액으로부터 유기층을 수층과 분리한 후, 유기층을 이온 교환수 37 mL(3회), 3 중량% 아세트산 수용액 37 mL(3회), 이온 교환수 37 mL(3회)의 순서로 세정하였다. 이어서, 유기층을 메탄올 500 mL에 적하한 바, 침전이 발생하였다. 이 침전을 여과한 후, 건조시켜 고체를 얻었다. 이 고체를 톨루엔 40 mL에 용해시켜 용액을 제조하고, 이 용액을 미리 톨루엔을 통액시킨 실리카 겔/알루미나 칼럼에 통액시키고, 통액된 용출액을 메탄올 600 mL에 적하한 바, 침전이 발생하였다. 이 침전을 여과한 후, 건조시켜 중합체(이하, "중합체 5"라고 함)를 1.68 g 얻었다. 중합체 5의 분석 조건 2로 측정된 폴리스티렌 환산의 수 평균 분자량 Mn은 2.1×10<sup>4</sup>이었으며, 폴리스티렌 환산의 중량 평균 분자량 Mw는 6.3×10<sup>4</sup>이

었다.

[0384] 또한, 중합체 5는, 투입 원료로부터 하기 화학식



[0385] 로 표시되는 반복 단위를 88:5:5:2(몰비)로 갖는 것으로 추측된다.  
 [0386]

[0387] 또한, 중합체 5는 금속 착체의 잔기 및 유기 화합물의 잔기를 갖고, 상기 금속 착체 및 상기 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 이하의 방법으로 구하였다. 구체적으로는, 양자 화학 계산 프로그램 가우시안 03을 사용하여 B3LYP 레벨의 밀도 범함수법에 의해 기저 상태의 구조 최적화를 행하고, 상기 최적화된 구조에서의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 산출하였다. 그 결과, 금속 착체의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값은 2.15 eV, 유기 화합물의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값은 2.14 eV로 산출되었다.

[0388] 이어서, 실시예 1에서 조성물 1 대신에 크실렌 용매 중에 1.8 중량%의 농도로 용해시킨 중합체 5의 용액을 사용한 것 이외에는, 실시예 1과 동일하게 하여 EL 소자를 제작하였다. 얻어진 EL 소자에 전압을 인가한 바, 금속 착체 (MC-2)에서 유래하는 피크 파장 605 nm를 갖는 EL 발광이 얻어졌다. 상기 소자는 2.70 V로부터 발광을 개시하였으며, 6.2 V에서 1000 cd/m<sup>2</sup>를 나타내고, 최대 발광 효율은 18.38 cd/A였다.

[0389] 또한, 중합체 5 및 금속 착체 (MC-2)에 대하여, 양자 화학 계산 프로그램 가우시안 03을 사용하여 B3LYP 레벨의 밀도 범함수법에 의해 기저 상태의 구조 최적화를 행하고, 상기 최적화된 구조에서의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 산출한 바, 유기 화합물에서의 LUMO와 금속 착체에서 유래하는 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차는 0.01 eV로 산출되었다.

[0390] <비교예 1>

[0391] 실시예 1에서 중합체 1 대신에 중합체 2를 사용한 것 이외에는, 실시예 1과 동일하게 하여 EL 소자를 제작하였다. 얻어진 EL 소자에 전압을 인가한 바, 금속 착체 (MC-1)에서 유래하는 피크 파장 605 nm를 갖는 EL 발광이 얻어졌다. 상기 소자는 3.7 V로부터 발광을 개시하였으며, 10.3 V에서 1000 cd/m<sup>2</sup>의 발광을 나타내고, 최대 발광 효율은 9.71 cd/A였다.

[0392] 또한, 상기 중합체 2 및 금속 착체 (MC-1)에 대하여, 양자 화학 계산 프로그램 가우시안 03을 사용하여 B3LYP 레벨의 밀도 범함수법에 의해 기저 상태의 구조 최적화를 행하고, 상기 최적화된 구조에서의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 산출한 바, 이들의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차는 1.15 eV로 산출되었다.

[0393] <비교예 2>

[0394] 실시예 1에서 중합체 1 대신에 중합체 3을 사용한 것 이외에는, 실시예 1과 동일하게 하여 EL 소자를 제작하였다. 얻어진 EL 소자에 전압을 인가한 바, 금속 착체 (MC-1)에서 유래하는 피크 파장 605 nm를 갖는 EL 발광이 얻어졌다. 상기 소자는 3.61 V로부터 발광을 개시하였으며, 9.3 V에서 1000 cd/m<sup>2</sup>의 발광을 나타내고, 최대 발광 효율은 5.93 cd/A였다.

[0395] 또한, 상기 중합체 3 및 금속 착체 (MC-1)에 대하여, 양자 화학 계산 프로그램 가우시안 03을 사용하여 B3LYP 레벨의 밀도 범함수법에 의해 기저 상태의 구조 최적화를 행하고, 상기 최적화된 구조에서의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값을 산출한 바, 이들의 LUMO의 에너지 레벨의 절대값의 차는 0.77 eV로 산출되었다.

**산업상 이용가능성**

[0396] 본 발명의 조성물 등은 유기 전계 발광 소자 등의 발광 소자의 제조에 특히 유용하다.

专利名称(译)	含有金属络合物和有机化合物的组合物，以及使用该组合物的发光元件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020110018378A</a>	公开(公告)日	2011-02-23
申请号	KR1020107028558	申请日	2009-06-23
[标]申请(专利权)人(译)	住友化学有限公司 另一位家长住友化学有限公司是分租		
申请(专利权)人(译)	住友化学(株)制		
当前申请(专利权)人(译)	住友化学(株)制		
[标]发明人	ASADA KOHEI 아사다고헤이 GOTO OSAMU 고또오사무 SEKINE CHIZU 세끼네치즈		
发明人	아사다,고헤이 고또,오사무 세끼네,치즈		
IPC分类号	C09K11/06 H05B33/10 C07F15/00		
CPC分类号	H01L51/0085 C08G61/12 C08G61/122 C08G2261/3142 C08G2261/3162 C08G2261/3221 C08G2261/5242 C08K5/3437 C08L65/00 C09K11/06 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/1059 C09K2211/185 H01L51/0037 H01L51/0039 H01L51/0043 H01L51/0071 H01L51/50 H01L2251/308 H01L2251/552 Y10S428/917		
代理人(译)	Jangsugil Yiseokjae		
优先权	2008163037 2008-06-23 JP		
其他公开文献	KR101626170B1		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

本发明提供一种组合物，其中含有金属配合物和有机化合物的组合物和最低未占分子轨道的能级绝对值的差值，最低未占用的能级绝对值的差值用计算科学方法和有机化合物制备的金属配合物的分子轨道为0.40 eV。

