



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2008-0101746
(43) 공개일자 2008년11월21일

(51) Int. Cl.

C09K 11/06 (2006.01) *H05B 33/14* (2006.01)
H01L 51/54 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2008-0045159

(22) 출원일자 2008년05월15일

심사청구일자 없음

(30) 우선권주장

JP-P-2007-00133112 2007년05월18일 일본(JP)

JP-P-2008-00105096 2008년04월14일 일본(JP)

(71) 출원인

후지필름 가부시키키가이샤

일본 도쿄도 미나토쿠 니시 아자부 2초메 26방 30고

(72) 발명자

다케다 아키라

일본 가나가와켄 아시가라카미군 가이세이마치 우시지마 577후지필름 가부시키키가이샤 나이

(74) 대리인

특허법인코리아나

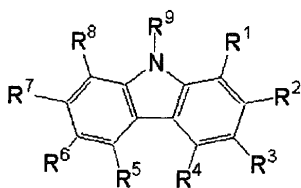
전체 청구항 수 : 총 13 항

(54) 유기 전계발광 장치

(57) 요약

유기 전계발광 장치는 한 쌍의 전극; 및 상기 한 쌍의 전극 사이에 발광층을 포함하는 유기층을 포함하는데, 여기서 상기 유기층은 하기 화학식 (I) 로 나타낸 화합물을 함유하고; 상기 발광층은 이리듐 착물 인광 물질을 함유한다:

[화학식 I]



[식 중,

$R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7$ 및 R^8 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고, R^1 내지 R^8 의 인접 치환기들은 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

R^9 는 알킬기, 알케닐기, 아릴기, 헤테로-아릴기 또는 실릴기를 나타내고 이들 기 각각은 치환기로 치환될 수 있고;

R^1 내지 R^9 중 하나 이상은 중수소 원자 또는 중수소 원자를 함유하는 치환기를 나타낸다].

특허청구의 범위

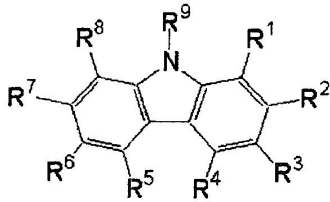
청구항 1

한 쌍의 전극; 및

상기 한 쌍의 전극 사이에 발광층을 포함하는 유기층

을 포함하는 유기 전계발광 장치로서, 상기 유기층은 하기 화학식 (I) 로 나타낸 화합물을 함유하고; 상기 발광층은 이리듐 착물 인광 물질을 함유하는 유기 전계발광 장치:

[화학식 I]



[식 중,

$R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7$ 및 R^8 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고, R^1 내지 R^8 의 인접 치환기들은 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

R^9 는 알킬기, 알케닐기, 아릴기, 헤테로-아릴기 또는 실릴기를 나타내고, 이들 기 각각은 치환기로 치환될 수 있고;

R^1 내지 R^9 중 하나 이상은 중수소 원자 또는 중수소 원자를 함유하는 치환기를 나타낸다].

청구항 2

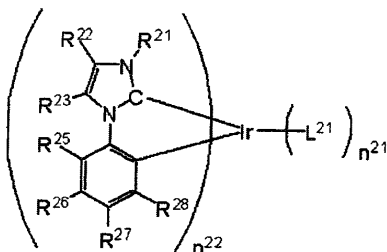
제 1 항에 있어서, 이리듐 착물 인광 물질이 470 nm 미만의 최대방출파장을 가진 유기 전계발광 장치.

청구항 3

제 1 항에 있어서, 이리듐 착물 인광 물질이 카르빈 탄소를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 유기 전계발광 장치.

청구항 4

제 3 항에 있어서, 카르빈 탄소를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질이 하기 화학식 (II) 로 나타내어지는 유기 전계발광 장치:



[식 중,

$R^{21}, R^{22}, R^{23}, R^{25}, R^{26}, R^{27}$ 및 R^{28} 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

L^{21} 은 리간드를 나타내고;

n^{22} 은 1 내지 3 의 정수를 나타내고;

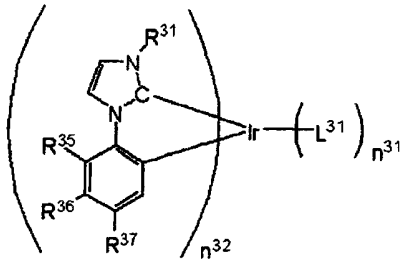
n^{21} 은 0 내지 4 의 정수를 나타내고;

C 는 이리듐 원자에 배위된 카르빈 탄소를 나타낸다].

청구항 5

제 4 항에 있어서, 카르빈 탄소를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질이 하기 화학식 (III) 으로 나타내어지는 유기 전계발광 장치:

[화학식 III]



[식 중,

R^{31} 은 알킬기 또는 아릴기를 나타내고;

R^{35} , R^{36} 및 R^{37} 각각은 수소 원자, 불소 원자, 알킬기 또는 시아노기를 나타내고, R^{35} 및 R^{36} 또는 R^{36} 및 R^{37} 은 서로 결합되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있고;

L^{31} 은 리간드를 나타내고;

n^{32} 는 1 내지 3 의 정수를 나타내고;

n^{31} 은 0 내지 4 의 정수를 나타내고;

C 는 이리듐 원자에 배위된 카르빈 탄소를 나타낸다].

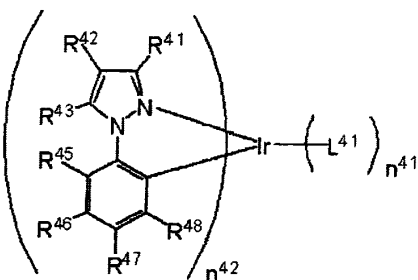
청구항 6

제 1 항에 있어서, 이리듐 착물 인광 물질이 피라졸 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 유기 전계발광 장치.

청구항 7

제 6 항에 있어서, 피라졸 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질이 하기 화학식 (IV) 로 나타내어지는 유기 전계발광 장치:

[화학식 IV]



[식 중,

R^{41} , R^{42} , R^{43} , R^{45} , R^{46} , R^{47} 및 R^{48} 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

L^{41} 은 리간드를 나타내고;

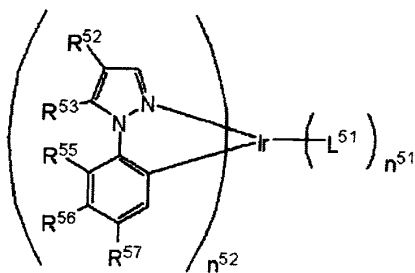
n^{42} 는 1 내지 3 의 정수를 나타내고;

n^{41} 은 0 내지 4 의 정수를 나타낸다].

청구항 8

제 7 항에 있어서, 피라졸 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질이 하기 화학식 (V) 로 나타내어지는 유기 전계 발광 장치:

[화학식 V]



[식 중,

R^{52} 및 R^{53} 각각은 수소 원자, 알킬기 또는 아릴기를 나타내고;

R^{55} , R^{56} 및 R^{57} 각각은 수소 원자, 불소 원자, 알킬기 또는 시아노기를 나타내고, R^{55} 및 R^{56} 또는 R^{56} 및 R^{57} 은 서로 결합되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있고;

L^{51} 은 리간드를 나타내고;

n^{52} 은 1 내지 3 의 정수를 나타내고;

n^{51} 은 0 내지 4 의 정수를 나타낸다].

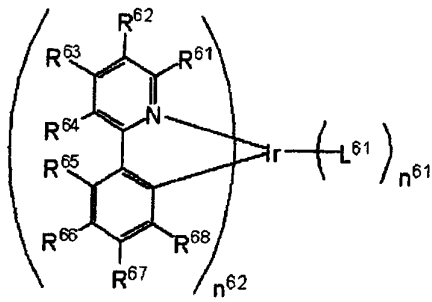
청구항 9

제 1 항에 있어서, 이리듐 착물 인광 물질이 피리딘 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 유기 전계발광 장치.

청구항 10

제 9 항에 있어서, 피리딘 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질이 하기 화학식 (VI) 로 나타내어지는 유기 전계발광 장치:

[화학식 VI]



[식 중,

R^{61} , R^{62} , R^{63} , R^{64} , R^{65} , R^{66} , R^{67} 및 R^{68} 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

L^{61} 은 리간드를 나타내고;

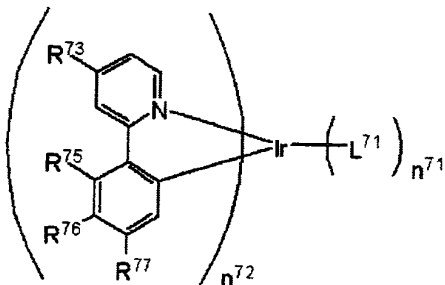
n^{62} 는 1 내지 3 의 정수를 나타내고;

n^{61} 은 0 내지 4 의 정수를 나타낸다].

청구항 11

제 10 항에 있어서, 피리딘 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질이 하기 화학식 (VII) 로 나타내어지는 유기 전계발광 장치:

[화학식 VII]



[식 중,

R^{73} 은 수소 원자, 알킬기, 아미노기 또는 알콕실기를 나타내고;

R^{75} , R^{76} 및 R^{77} 각각은 수소 원자, 불소 원자, 시아노기 또는 알킬기를 나타내고;

L^{71} 은 리간드를 나타내고;

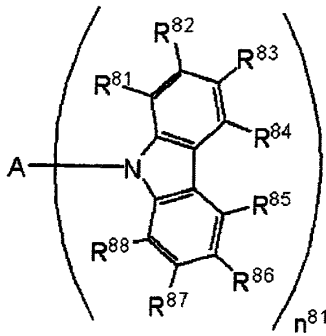
n^{72} 는 1 내지 3 의 정수를 나타내고;

n^{71} 은 0 내지 4 의 정수를 나타낸다].

청구항 12

제 1 항에 있어서, 화학식 (I) 로 나타낸 화합물이 하기 화학식 (VIII) 로 나타내어지고, 상기 화학식 (VIII) 으로 나타낸 화합물은 하나 이상의 중수소 원자를 포함하는 유기 전계발광 장치:

[화학식 VIII]



[식 중,

R^{81} , R^{82} , R^{83} , R^{84} , R^{85} , R^{86} , R^{87} 및 R^{88} 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고, R^{81} 내지 R^{88} 의 인접한 치환기들은 서로 결합되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있고;

A는 연결기를 나타내고;

n^{81} 은 2 내지 6의 정수를 나타낸다].

청구항 13

제 1 항에 있어서, 화학식 (I)로 나타낸 화합물이 발광층에 포함되는 유기 전계발광 장치.

명세서

발명의 상세한 설명

기술 분야

<1> 본 발명은, 전기 에너지를 광으로 전환시켜 광을 방출시킬 수 있는 유기 전계발광 장치 (이하, "유기 EL 장치", "발광 장치" 또는 "장치" 라고도 지칭함)에 관한 것이며, 구체적으로는 발광 특성 및 내구성이 우수한 유기 전계발광 장치에 관한 것이다.

배경 기술

- <2> 유기 발광 물질을 이용하는 각종 유형의 디스플레이 장치 (유기 발광 장치)가 근래에 활발하게 연구 및 개발되고 있다. 그 중에서도, 유기 EL 장치는 저전압으로 고휘도의 광을 방출할 수 있는 유망한 디스플레이 장치로서 대중의 관심을 사로잡고 있다.
- <3> 또한 최근에는, 인광 물질을 이용함으로써 상기 장치의 효율을 상승시키는 것이 진척되어 왔다. 인광 물질로서, 이리듐 착물 및 백금 착물이 공지되어 있다 (U.S. 특허 6,303,238, WO 00/57676 및 WO 00/70655 참고).
- <4> 도펀트 (dopant)로서의 Ir(ppy)(이리듐-트리스(페닐피리딘)) 및 호스트 물질 (host material)로서의 CBP (4,4'-디카르바졸비페닐) 조합을 포함하는 발광층이 특허 문헌 3에 개시되어 있다.
- <5> WO 02/047440에서는, 중수소 원자를 함유하는 유기 화합물이 사용되어 있으나, 인광 금속 착물 물질과 조합된 유기 화합물을 이용하는 경우의 효과와 관련해서는 이 특허에서는 기술되어 있지 않다.
- <6> 통상의 온도에서 인광이 있는 중수소 원자를 함유하는 카르바졸 물질을 JP-A-2005-48004 (본원에서 사용되는 바와 같은 용어 "JP-A"는 "일본 특허 공개 공보"를 지칭함)에서 사용하였으나, 이 특허에서는 인광 금속 착물 물질과 조합된 물질을 이용하는 경우의 효과와 관련해서는 기술되어 있지 않다.

발명의 내용

해결 하고자하는 과제

<7> **발명의 개요**

<8> 본 발명은 효율성 (소비 전력) 및 내구성이 우수한 발광 장치를 제공한다.

과제 해결수단

<9> 이는 하기 수단으로 달성되었다.

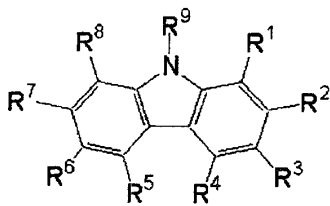
<10> <1>

<11> 한 쌍의 전극; 및

<12> 상기 한 쌍의 전극 사이에 발광층을 포함하는 유기층

<13> 을 포함하는 유기 전계발광장치로서, 상기 유기층은 하기 화학식 (I) 로 나타낸 화합물을 함유하고; 상기 발광층은 이리듐 착물 인광 물질을 함유하는 유기 전계발광 장치:

<14> [화학식 I]



<15>

<16> [식 중,

<17> $R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7$ 및 R^8 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고, R^1 내지 R^8 의 인접 치환기들은 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

<18> R^9 는 알킬기, 알케닐기, 아릴기, 헤테로-아릴기 또는 실릴기를 나타내고, 이들 기 각각은 치환기로 치환될 수 있고;

<19> R^1 내지 R^9 중 하나 이상은 중수소 원자 또는 중수소 원자를 함유하는 치환기를 나타낸다].

<20> <2>

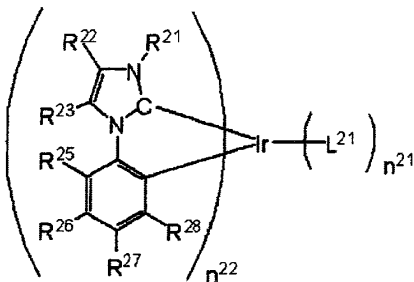
<21> <1> 에 있어서, 이리듐 착물 인광 물질이 470 nm 미만의 최대방출파장을 가진 유기 전계발광 장치.

<22> <3>

<23> <1> 에 있어서, 이리듐 착물 인광 물질이 카르빈 (carbene) 탄소를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 유기 전계발광 장치.

<24> <4>

<25> <3> 에 있어서, 카르빈 탄소를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질이 하기 화학식 (II) 로 나타내어지는 유기 전계발광 장치:



<26>

<27> [식 중,

<28> R^{21} , R^{22} , R^{23} , R^{25} , R^{26} , R^{27} 및 R^{28} 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

<29> L^{21} 은 리간드를 나타내고;

<30> n^{22} 은 1 내지 3 의 정수를 나타내고;

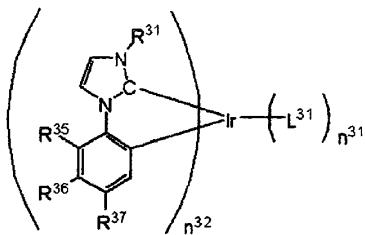
<31> n^{21} 은 0 내지 4 의 정수를 나타내고;

<32> C 는 이리듐 원자에 배위된 카르빈 탄소를 나타낸다].

<33> <5>

<34> <4> 에 있어서, 카르빈 탄소를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질이 하기 화학식 (III) 으로 나타내어지는 유기 전계발광 장치:

<35> [화학식 III]



<36>

<37> [식 중,

<38> R^{31} 은 알킬기 또는 아릴기를 나타내고;

<39> R^{35} , R^{36} 및 R^{37} 각각은 수소 원자, 불소 원자, 알킬기 또는 시아노기를 나타내고, R^{35} 및 R^{36} 또는 R^{36} 및 R^{37} 은 서로 결합되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있고;

<40> L^{31} 은 리간드를 나타내고;

<41> n^{32} 는 1 내지 3 의 정수를 나타내고;

<42> n^{31} 은 0 내지 4 의 정수를 나타내고;

<43> C 는 이리듐 원자에 배위된 카르빈 탄소를 나타낸다].

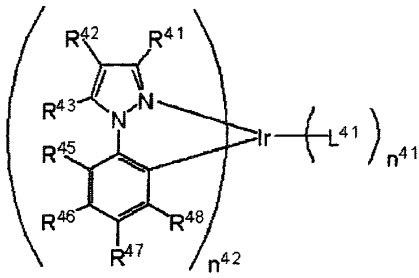
<44> <6>

<45> <1> 에 있어서, 이리듐 착물 인광 물질이 피라졸 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 유기 전계발광 장치.

<46> <7>

<47> <6> 에 있어서, 피라졸 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질이 하기 화학식 (IV) 로 나타내어지는 유기 전계발광 장치:

<48> [화학식 IV]



<49>

<50> [식 중,

<51> R^{41} , R^{42} , R^{43} , R^{45} , R^{46} , R^{47} 및 R^{48} 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

<52> L^{41} 은 리간드를 나타내고;

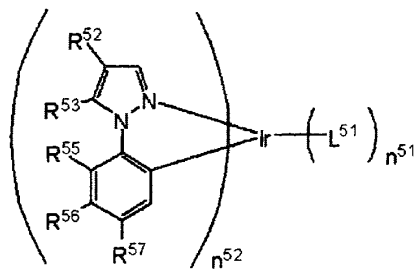
<53> n^{42} 는 1 내지 3 의 정수를 나타내고;

<54> n^{41} 은 0 내지 4 의 정수를 나타낸다].

<55> <8>

<56> <7> 에 있어서, 피라졸 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질이 하기 화학식 (V) 로 나타내어지는 유기 전계 발광 장치:

<57> [화학식 V]



<58>

<59> [식 중,

<60> R^{52} 및 R^{53} 각각은 수소 원자, 알킬기 또는 아릴기를 나타내고;

<61> R^{55} , R^{56} 및 R^{57} 각각은 수소 원자, 불소 원자, 알킬기 또는 시아노기를 나타내고, R^{55} 및 R^{56} 또는 R^{56} 및 R^{57} 은 서로 결합되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있고;

<62> L^{51} 은 리간드를 나타내고;

<63> n^{52} 은 1 내지 3 의 정수를 나타내고;

<64> n^{51} 은 0 내지 4 의 정수를 나타낸다].

<65> <9>

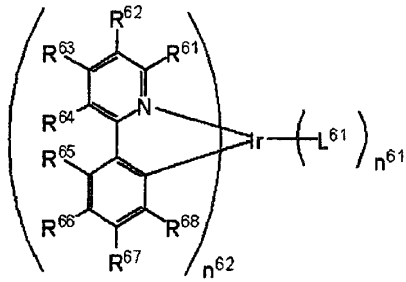
<66> <1> 에 있어서, 이리듐 착물 인광 물질이 피리딘 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 유기 전계발광 장치.

<67> <10>

<68> <9> 에 있어서, 피리딘 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광

물질이 하기 화학식 (VI) 로 나타내어지는 유기 전계발광 장치:

<69> [화학식 VI]



<70>

<71> [식 중,

<72> R^{61} , R^{62} , R^{63} , R^{64} , R^{65} , R^{66} , R^{67} 및 R^{68} 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고;

<73> L^{61} 이 리간드를 나타내고;

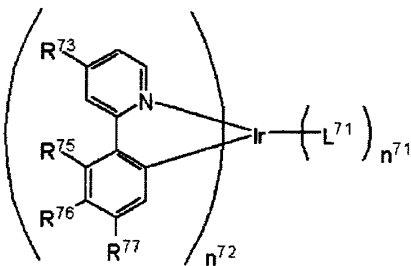
<74> n^{62} 는 1 내지 3 의 정수를 나타내고;

<75> n^{61} 은 0 내지 4 의 정수를 나타낸다].

<76> <11>

<77> <10> 에 있어서, 피리딘 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질이 하기 화학식 (VII) 로 나타내어지는 유기 전계발광 장치:

<78> [화학식 VII]



<79>

<80> [식 중,

<81> R^{73} 은 수소 원자, 알킬기, 아미노기 또는 알콕실기를 나타내고;

<82> R^{75} , R^{76} 및 R^{77} 각각은 수소 원자, 불소 원자, 시아노기 또는 알킬기를 나타내고;

<83> L^{71} 은 리간드를 나타내고;

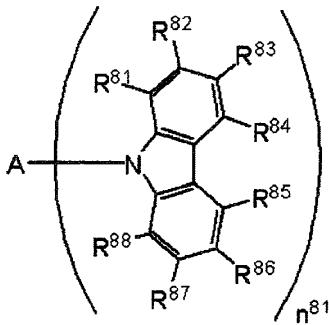
<84> n^{72} 는 1 내지 3 의 정수를 나타내고;

<85> n^{71} 은 0 내지 4 의 정수를 나타낸다].

<86> <12>

<87> <1> 에 있어서, 화학식 (I) 로 나타낸 화합물이 하기 화학식 (VIII) 로 나타내어지고, 화학식 (VIII) 으로 나타낸 화합물은 하나 이상의 중수소 원자를 포함하는 유기 전계발광 장치:

<88> [화학식 VIII]



<89>

<90> [식 중,

<91> $R^{81}, R^{82}, R^{83}, R^{84}, R^{85}, R^{86}, R^{87}$ 및 R^{88} 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고, R^{81} 내지 R^{88} 의 인접한 치환기들은 서로 결합되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있고;

<92> A는 연결기를 나타내고;

<93> n^{81} 은 2 내지 6의 정수를 나타낸다].

<94> <13>

<95> <1>에 있어서, 화학식 (I)로 나타낸 화합물이 발광층에 포함되는 유기 전계발광 장치.

효 과

<96> 본 발명은 효율성 (소비 전력) 및 내구성이 우수한 유기 전계발광 장치를 제공할 수 있다.

발명의 실시를 위한 구체적인 내용

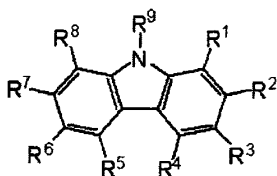
<97> 발명의 상세한 설명

<98> 본 발명의 유기 전계발광 장치 (이하, 종종 "본 발명의 장치"로 지칭됨)는, 한 쌍의 전극 및 상기 한 쌍의 전극 사이에 발광층을 포함하는 하나 이상의 유기층 (이 유기층은 유기 화합물을 단독으로 포함하는 층일 수 있거나 또는 무기 화합물을 함유하는 유기층일 수 있음)을 포함하는 유기 전계발광 장치이고, 상기 유기층 중 어느 것이든 하기 화학식 (I)로 나타낸 화합물을 하나 이상 함유하며, 상기 발광층은 이리듐 착물 인광 물질을 하나 이상 함유한다.

<99> 본 발명의 화학식 (I)로 나타낸 화합물은, 화학 안정성이 우수하고, 장치 구동 중에 물질 분해를 거의 수반하지 않고, 분해된 생성물로 인한 이리듐 착물 인광 물질을 이용하는 유기 전계발광 장치의 효율 저하 및 수명 기간의 감축을 방지할 수 있다.

<100> 화학식 (I)로 나타낸 화합물을 하기에 설명할 것이다:

<101> [화학식 I]



<102>

<103> 화학식 (I)에서, R^1 내지 R^8 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고, R^1 내지 R^8 의 인접한 치환기는 서로 결합되어 축합 고리를 형성할 수 있고; R^9 는 알킬기, 알케닐기, 아릴기, 헤테로-아릴기 또는 실릴기를 나타내고, 각각의 기는 치환기로 치환될 수 있으며, R^1 내지 R^9 중 하나 이상은 중수소 원자 또는 중수소 원자를

함유한 치환기를 나타낸다.

- <104> R^1 내지 R^8 로 나타낸 치환기는 특별히 한정되지 않는다. 예를 들어, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로-아릴기, 아미노기, 알콕실기, 아릴옥시기, 헤테로시클릭옥시기, 아실기, 알콕시카르보닐기, 아릴옥시카르보닐기, 아실옥시기, 아실아미노기, 알콕시카르보닐아미노기, 아릴옥시카르보닐아미노기, 술폰아미노기, 술폰아미도기, 카르바미도기, 알킬티오기, 아릴티오기, 헤테로시클릭 티오기, 술폰기, 술폰기, 우레이도기, 인산 아미도기, 히드록실기, 머탑토기, 할로젠기, 시아노기, 술폰기, 카르복실기, 니트로기, 히드록삼산기, 술폰노기, 히드라지노기, 이미노기, 헤테로시클릭기, 실릴기, 실릴옥시기, 중수소 원자 등을 들 수 있다. 이들 치환기는 추가로 다른 치환기로 치환될 수 있으며, 이들 치환기는 서로 결합되어 고리를 형성할 수 있다.
- <105> 알킬기는 바람직하게는 탄소수가 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수가 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수가 1 내지 10 으로, 예를 들어, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, tert-부틸, n-옥틸, n-노닐, n-데실, n-도데실, n-옥타데실, n-헥사데실, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로옥틸, 1-아다만틸, 트리플루오로메틸 등을 들 수 있다.
- <106> 알케닐기는 바람직하게는 탄소수가 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수가 2 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수가 2 내지 10 으로, 예를 들어, 비닐, 알릴, 1-프로페닐, 1-이소프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-펜테닐, 등을 들 수 있다.
- <107> 알키닐은 바람직하게는 탄소수가 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수가 2 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수가 2 내지 10 으로, 예를 들어 에티닐, 프로파르길, 1-프로피닐, 3-펜티닐 등을 들 수 있다.
- <108> 아릴기는 바람직하게는 탄소수가 6 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수가 6 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수가 6 내지 12 로, 예를 들어, 페닐, o-메틸페닐, m-메틸페닐, p-메틸페닐, 2,6-자일릴, p-쿠메닐, 메시틸, 나프틸, 안트라닐 등을 들 수 있다.
- <109> 헤테로-아릴기는 바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 이고, 헤테로-원자는 예를 들어 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로, 구체적으로는 예를 들어 이미다졸릴, 피라졸릴, 피리디닐, 피라질, 피리미딜, 트리아지닐, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 피롤릴, 인돌릴, 푸릴, 티에닐, 벤족사졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 카르바졸릴, 아제피닐 등을 들 수 있다.
- <110> 아미노기는 바람직하게는 탄소수 0 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 0 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 0 내지 10 으로, 예를 들어 아미노, 메틸아미노, 디메틸아미노, 디에틸아미노, 벤질아미노, 디페닐아미노, 디톨릴아미노 등을 들 수 있다.
- <111> 알콕실기는 바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 10 으로, 예를 들어, 메톡시, 에톡시, 부톡시, 2-에틸헥실옥시 등을 들 수 있다.
- <112> 아릴옥시기는 바람직하게는 탄소수 6 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 6 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 6 내지 12 로, 예를 들어 페닐옥시, 1-나프틸옥시, 2-나프틸옥시 등을 들 수 있다.
- <113> 헤테로시클릭 옥시기는 바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 1 내지 20, 특히 바람직하게는 1 내지 12 로, 예를 들어 피리디닐옥시, 피라질옥시, 피리미딜옥시, 퀴놀릴옥시 등을 들 수 있다.
- <114> 아실기는 바람직하게는 탄소수 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 12 로, 예를 들어 아세틸, 벤조일, 포르밀, 피발로일 등을 들 수 있다.
- <115> 알콕시카르보닐기는 바람직하게는 탄소수 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 12 로, 예를 들어 메톡시카르보닐, 에톡시카르보닐 등을 들 수 있다.
- <116> 아릴옥시카르보닐기는 바람직하게는 탄소수 7 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 7 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 7 내지 12 로, 예를 들어 페닐옥시카르보닐 등을 들 수 있다.
- <117> 아실옥시기는 바람직하게는 탄소수 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 10 으로, 예를 들어 아세톡시, 벤조일옥시 등을 들 수 있다.
- <118> 아실아미노기는 바람직하게는 탄소수 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 10 으로, 예를 들어 아세틸아미노, 벤조일아미노 등을 들 수 있다.
- <119> 알콕시카르보닐아미노기는 바람직하게는 탄소수 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 특히 바람직

하계는 탄소수 2 내지 12 로, 예를 들어 메톡시카르보닐아미노 등을 들 수 있다.

- <120> 아릴옥시카르보닐아미노기는 바람직하게는 탄소수 7 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 7 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 7 내지 12 로, 예를 들어 페닐옥시카르보닐아미노 등을 들 수 있다.
- <121> 술포닐아미노기는 바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 메탄술포닐아미노, 벤젠술포닐아미노 등을 들 수 있다.
- <122> 술파모일기는 바람직하게는 탄소수 0 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 0 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 0 내지 12 로, 예를 들어 술파모일, 메틸술파모일, 디메틸술파모일, 페닐술파모일 등을 들 수 있다.
- <123> 카르바모일기는 바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 카르바모일, 메틸카르바모일, 디에틸카르바모일, 페닐카르바모일 등을 들 수 있다.
- <124> 알킬티오기는 바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 메틸티오, 에틸티오 등을 들 수 있다.
- <125> 아릴티오기는 바람직하게는 탄소수 6 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 6 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 6 내지 12 로, 예를 들어 페닐티오 등을 들 수 있다.
- <126> 헤테로시클릭 티오기는 바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 피리딜티오, 2-벤즈이미다졸릴티오, 2-벤즈사졸릴티오, 2-벤조티아졸릴티오 등을 들 수 있다.
- <127> 술포닐기는 바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 1 내지 12 로, 예를 들어 메실, 토실, 트리플루오로메탄술포닐 등을 들 수 있다.
- <128> 술피닐기는 바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 메탄술피닐, 벤젠술피닐 등을 들 수 있다.
- <129> 우레이도기는 바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 우레이도, 메틸우레이도, 페닐우레이도 등을 들 수 있다.
- <130> 인산 아미도 기는 바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 디에틸인산 아미도, 페닐인산 아미도 등을 들 수 있다.
- <131> 할로겐 원자로서, 예를 들어 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자 등을 들 수 있다.
- <132> 헤테로시클릭기는 바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 이고, 헤테로-원자는 예를 들어 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로, 구체적으로는 예를 들어 피페리딜, 모르폴리노, 피롤리딜 등을 들 수 있다.
- <133> 실릴기는 바람직하게는 탄소수 3 내지 40, 더욱 바람직하게는 탄소수 3 내지 30, 특히 바람직하게는 탄소수 3 내지 24 로, 예를 들어 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리아이소프로필실릴, 디메틸-tert-부틸실릴, 디메틸페닐실릴, 디페닐-tert-부틸실릴, 트리페닐실릴, 트리-1-나프틸실릴, 트리-2-나프틸실릴 등을 들 수 있다.
- <134> 실릴옥시기는 바람직하게는 탄소수 3 내지 40, 더욱 바람직하게는 탄소수 3 내지 30, 특히 바람직하게는 탄소수 3 내지 24 로, 예를 들어 트리메틸실릴옥시, 트리페닐실릴옥시 등을 들 수 있다.
- <135> R¹ 내지 R⁸ 로 나타낸 치환기로서, 중수소 원자, 알킬기, 아릴기, 헤테로-아릴기, 할로겐 기, 시아노기 및 실릴기가 바람직하고, 중수소원자, 알킬기, 헤테로-아릴기, 할로겐 기, 시아노기 및 실릴기가 더욱 바람직하고, 중수소 원자, 알킬기, 헤테로-아릴기, 및 실릴기가 특히 바람직하다. 이들 치환기는 추가로 다른 치환기로 치환될 수 있고, 이들 치환기는 서로 결합되어 고리를 형성할 수 있다.
- <136> R¹ 내지 R⁸ 로 나타낸 알킬기로서, 바람직한 것은 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, tert-부틸, n-옥틸, 시클로프로필, 시클로펜틸, 시클로헥실, 1-아다만틸 및 트리플루오로메틸이고, 더욱 바람직한 것은 메틸, 이소프로필, tert-부틸, n-옥틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 1-아다만틸 및 트리플루오로메틸이고, 특히 바람직한 것은 tert-부틸, 시클로헥실, 1-아다만틸 및 트리플루오로메틸이다. 이들 치환기는 다른 치환기로 추가로 치환될 수 있으며, 이들 치환기는 서로 결합되어 고리를 형성할 수 있다.

<137> R¹ 내지 R⁸ 로 나타낸 헤테로-아릴기로서, 바람직한 것은 이미다졸릴, 피라졸릴, 피리딜, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 피롤릴, 인돌릴, 푸릴, 티에닐, 벤즈사졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 카르바졸릴 및 아제피닐이고, 더욱 바람직한 것은 이미다졸릴, 피라졸릴, 퀴놀릴, 인돌릴, 푸릴, 티에닐, 벤즈이미다졸릴, 카르바졸릴 및 아제피닐이고, 특히 바람직한 것은 인돌릴, 푸릴, 티에닐, 벤즈이미다졸릴, 카르바졸릴 및 아제피닐이다. 이들 치환기는 추가로 다른 치환기로 치환될 수 있거나, 축합 고리 구조를 형성할 수 있거나, 또는 이들 치환기들은 서로 결합되어 고리를 형성할 수 있다.

<138> R¹ 내지 R⁸ 로 나타낸 실릴기로서, 바람직한 것은 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리아소프로필실릴, 디메틸-tert-부틸실릴, 디메틸페닐실릴, 메틸디페닐실릴, 디페닐-tert-부틸실릴 및 트리페닐실릴이고, 더욱 바람직한 것은 트리메틸실릴, 트리아소프로필실릴, 디메틸-tert-부틸실릴, 디페닐-tert-부틸실릴 및 트리페닐실릴이고 특히 바람직한 것은 트리메틸실릴, 디메틸-tert-부틸실릴 및 트리페닐실릴이다. 이들 치환기는 다른 치환기로 추가로 치환될 수 있고, 이들 치환기는 서로 결합되어 고리를 형성할 수 있다.

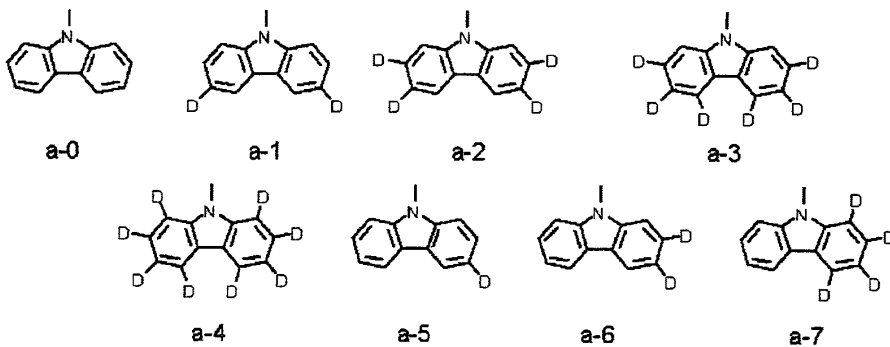
<139> R² 및 R⁷ 로 나타낸 치환기로서, 바람직한 것은 알킬기, 아릴기, 실릴기 및 중수소 원자이고, 더욱 바람직한 것은 알킬기, 실릴기 및 중수소 원자이고, 특히 바람직한 것은 tert-부틸기, 아다만틸기, 트리메틸실릴기, 트리페닐실릴기 및 중수소 원자이다.

<140> R³ 및 R⁶ 으로 나타낸 치환기로서, 바람직한 것은 알킬기, 아릴기, 실릴기 및 중수소 원자이고, 더욱 바람직한 것은 알킬기, 실릴기 및 중수소 원자이고, 특히 바람직한 것은 tert-부틸기, 아다만틸기, 트리메틸실릴기, 트리페닐실릴기 및 중수소 원자이다.

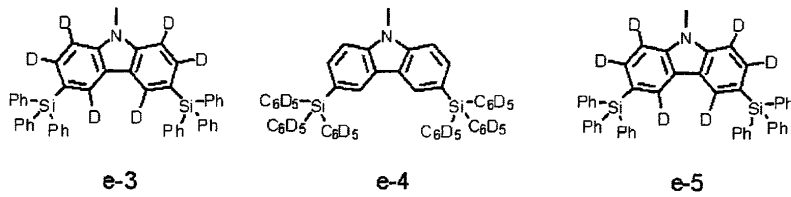
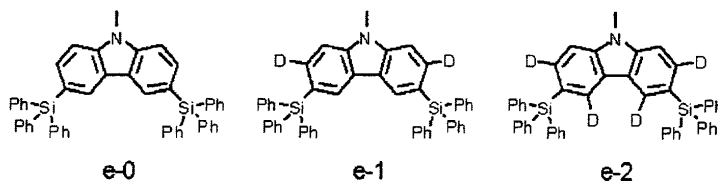
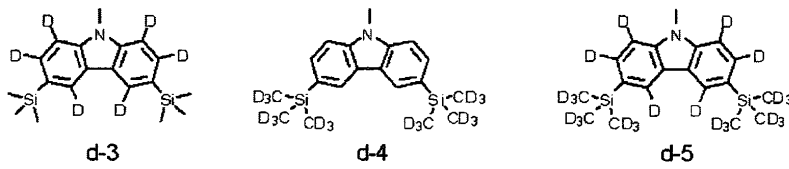
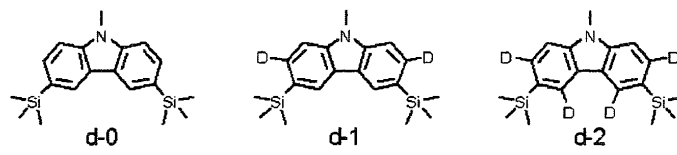
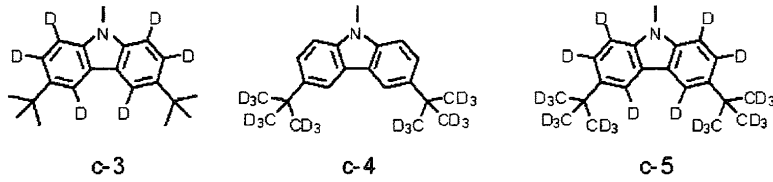
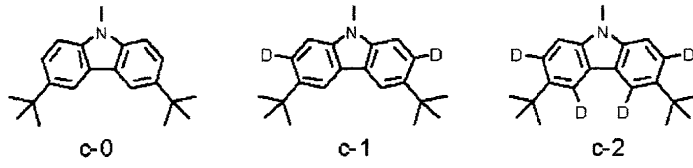
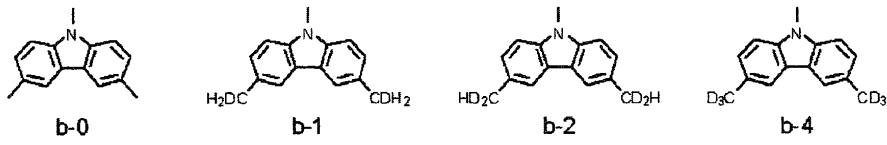
<141> R¹ 내지 R⁸ 로 나타낸 치환기들의 조합의 구체적인 예는 하기에 나타내었으나, 본 발명이 이들 화합물로 한정되는 것은 아니다. 구조 화학식에서, D 는 중수소 원자를 나타낸다.

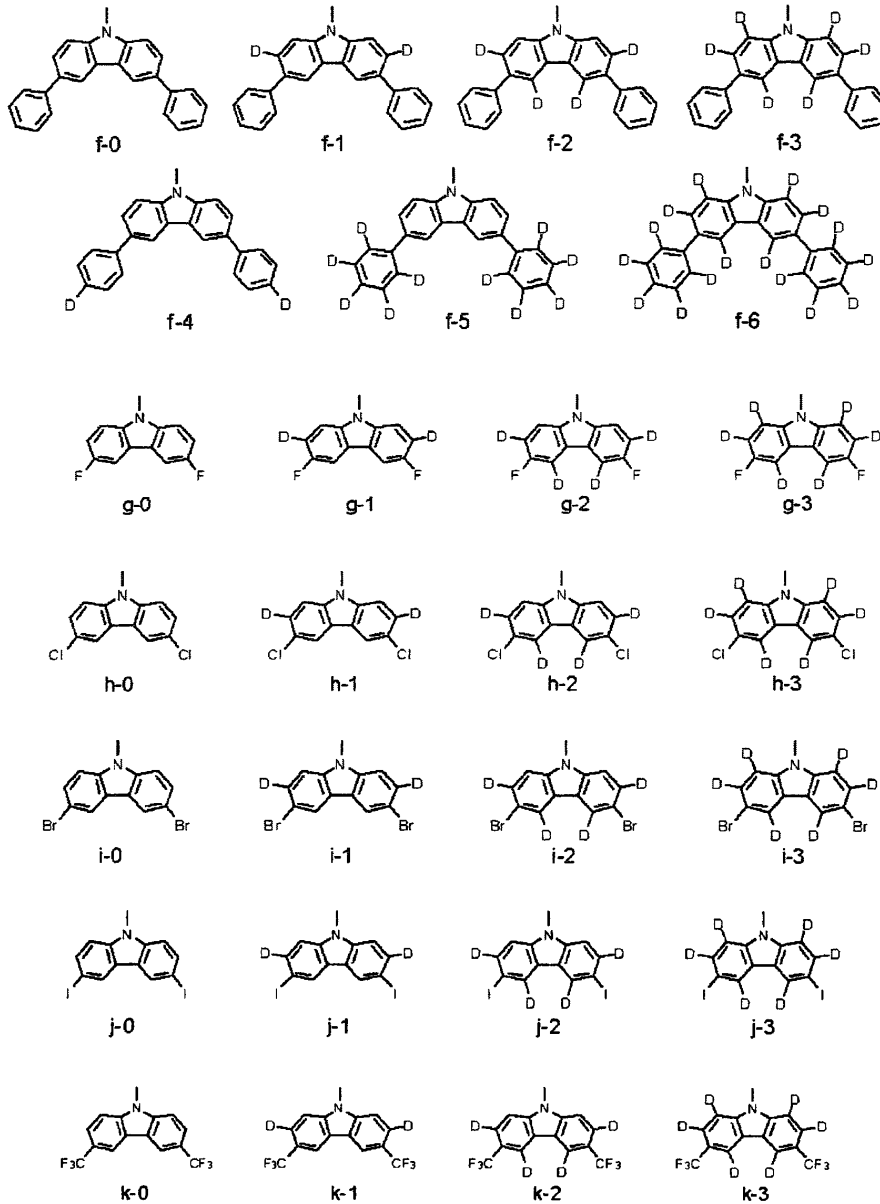
<142> 예를 들어, 화학식 (a-0) 에서는, R¹ 내지 R⁸ 모두는 수소 원자를 나타내고, 화학식 (a-1) 에서는, R¹, R², R⁴, R⁵, R⁷ 및 R⁸ 모두는 수소 원자를 나타내고, R³ 및 R⁶ 은 중수소 원자를 나타내고, 화학식 (a-4) 에서는, R¹ 내지 R⁸ 모두는 중수소 원자를 나타낸다.

<143> 부수적으로, 화학식 (a-0) 내지 (k-0) (중수소 원자를 함유하지 않음) 은 화학식 (I) 을 만족시키지 않으나, 상기 이외의 화학식들은 화학식 (I) 을 만족시킨다.



<144>





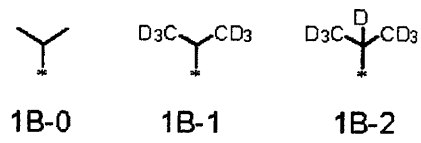
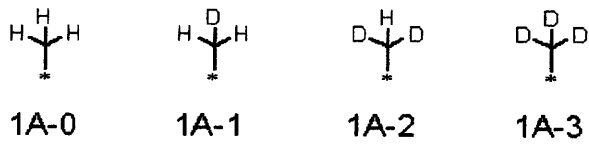
<146>

<147> R^9 는 알킬기, 알케닐기, 아릴기, 헤테로-아릴기 또는 실릴기, 바람직하게는 아릴기, 헤테로-아릴기 또는 실릴기, 더욱 바람직하게는 아릴기 또는 헤테로-아릴기, 특히 바람직하게는 아릴기를 나타낸다.

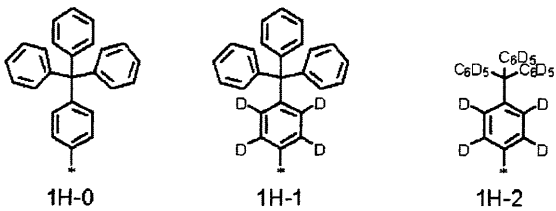
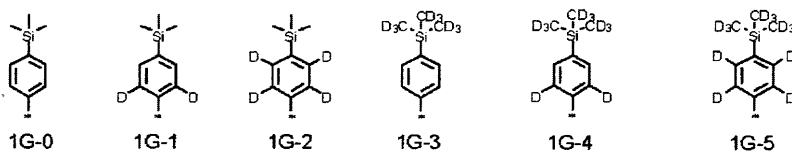
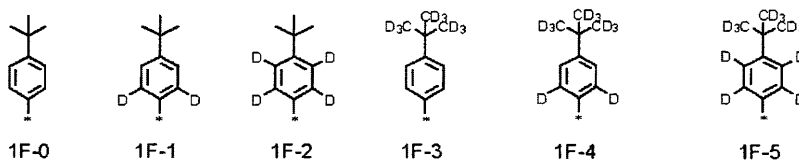
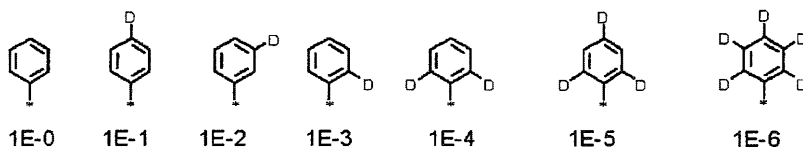
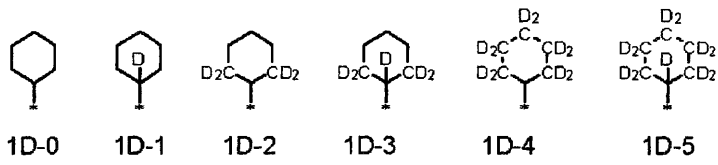
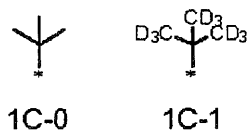
<148> R^9 로 나타낸 아릴기로서, 바람직한 것은 페닐, *o*-메틸페닐, 2,6-자일릴 및 메시틸이고, 더욱 바람직한 것은 페닐 및 메시틸이고, 특히 바람직한 것은 페닐기이다. 이들 치환기는 축합 고리 구조를 형성할 수 있고, 이들 치환기는 서로 결합되어 고리를 형성할 수 있는데, 그 예로는 비페닐, 나프틸, 안트라닐, 페난트릴, 피레닐, 나프타세닐 등을 들 수 있다. 이들 치환기는 다른 치환기로 추가로 치환될 수 있다.

<149> 카르바졸 및 R^1 내지 R^8 을 포함하는 복수개의 구조들이 R^9 에 결합할 수 있고, 바람직하게는 1 내지 6 개의 구조, 더욱 바람직하게는 1 내지 3 개의 구조, 특히 바람직하게는 1 내지 2 개의 구조가 R^9 에 결합될 수 있다.

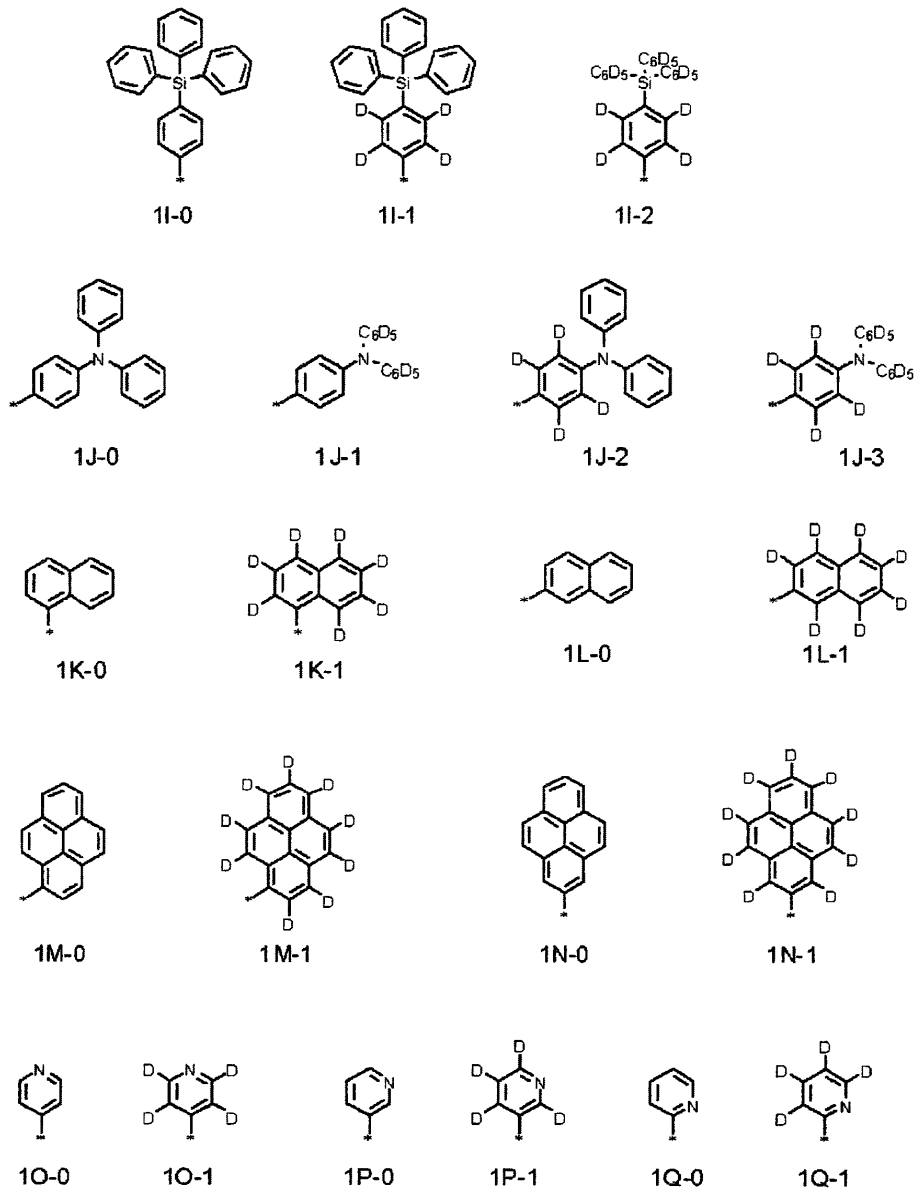
<150> 카르바졸 및 R^1 내지 R^8 을 포함하는 하나의 구조가 결합된 R^9 로 나타낸 치환기들의 구체적인 예는 하기에 나타냈으나, 본 발명이 이들 화합물에 한정되는 것은 아니다. 하기 화학식에서, * 는 카르바졸의 질소 원자가 결합되는 부분이다. 또한, (a-0) 내지 (k-0) (중수소 원자를 함유하지 않음) 과 (1A-0) 내지 (1Q-0) (중수소 원자를 함유하지 않음) 과의 조합은 화학식 (I) 을 만족시키지 않으나, 상기 이외의 양쪽 군들의 유사 조합들은 화학식 (I) 을 만족시킨다.



<151>



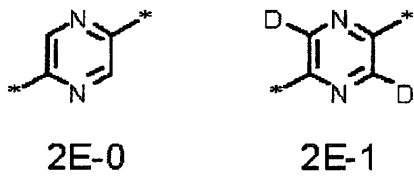
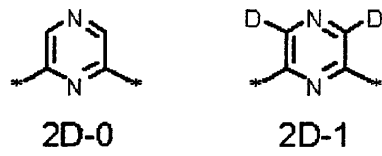
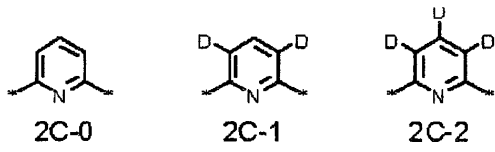
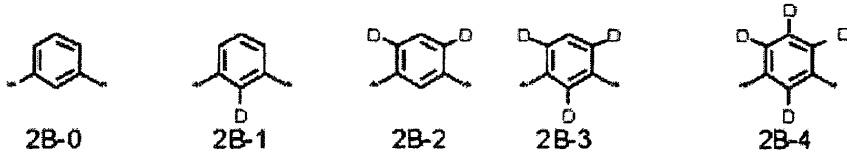
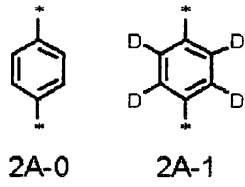
<152>



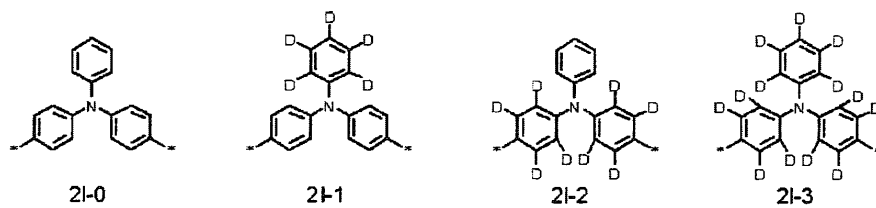
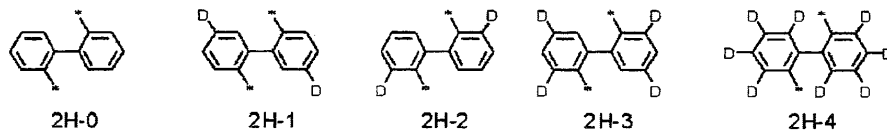
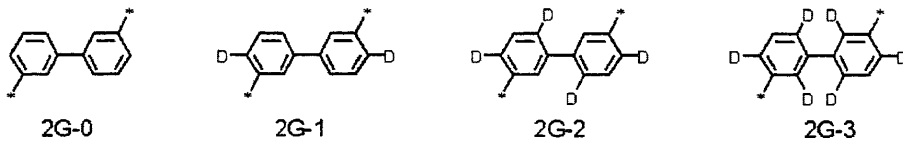
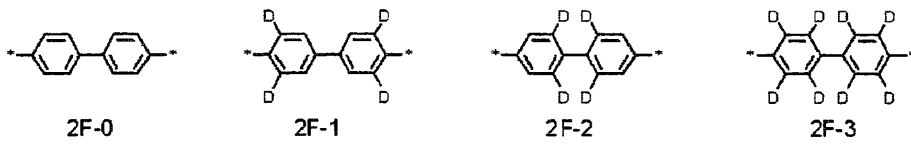
<153>

<154>

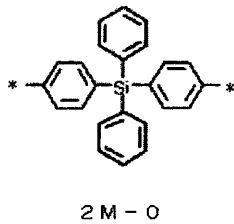
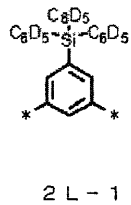
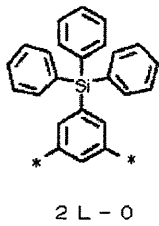
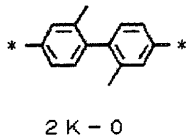
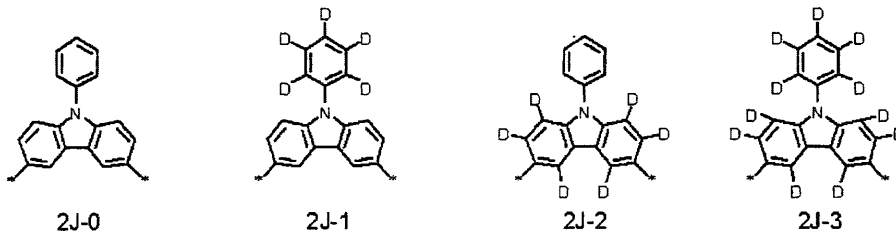
카르바졸 및 R¹ 내지 R⁸ 을 포함하는 2 개의 구조가 결합되는 R⁹ 로 나타낸 치환기들의 구체적인 예는 하기에 나타내었으나, 본 발명이 이들 화합물에 한정되는 것은 아니다. 하기 화학식에서, * 는 카르바졸의 질소 원자가 결합되는 부분이다. 또한, 상기 (a-0) 내지 (k-0) (중수소 원자를 함유하지 않음) 및 하기 (2A-0) 내지 (2M-0) (중수소 원자를 함유하지 않음) 의 조합은 화학식 (I) 을 만족시키지 않으나, 상기 이외의 양쪽 군들의 유사한 조합들은 화학식 (I) 을 만족시킨다.



<155>



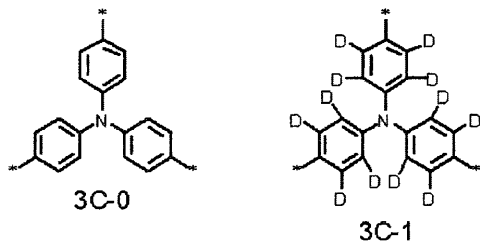
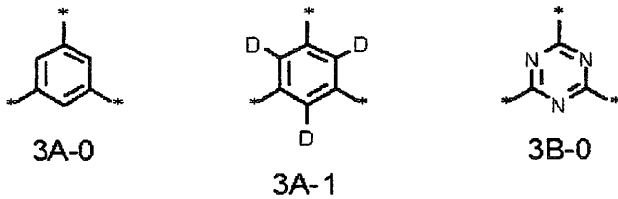
<156>



<157>

<158>

카르바졸 및 R¹ 내지 R⁸ 을 포함하는 구조 3 개가 결합된 R⁹ 로 나타낸 치환기의 구체적인 예는 하기에 나타내었으나, 본 발명이 이들 화합물에 한정되지는 않는다. 하기 화학식에서, * 는 카르바졸의 질소 원자가 결합하는 부분이다. 또한, 상기 (a-0) 내지 (k-0) (중수소 원자를 함유하지 않음) 및 하기 (3A-0) 내지 (3C-0) (중수소 원자를 함유하지 않음) 의 조합은 화학식 (I) 을 만족시키지 않으나, 상기 이외의 양쪽 군들의 유사한 조합은 화학식 (I) 을 만족한다.

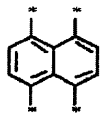


<159>

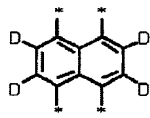
<160>

카르바졸 및 R¹ 내지 R⁸ 을 포함하는 구조 4 개가 결합한 R⁹ 로 나타낸 치환기의 구체적인 예는 하기에 나타냈으나, 본 발명이 이들 화합물에 한정되지는 않는다. 하기 화학식에서, * 는 카르바졸의 질소 원자가 결합하는 부분이다. 또한, 상기 (a-0) 내지 (k-0) (중수소 원자를 함유하지 않음) 및 하기 (4A-0) 내지 (4C-0) (중

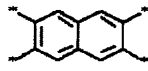
수소 원자를 함유하지 않음)의 조합은 화학식 (I)을 만족시키지 않으나, 상기 이외의 양쪽 군들의 유사한 조합은 화학식 (I)을 만족한다.



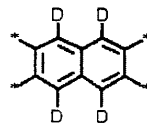
4A-0



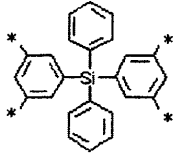
4A-1



4B-0



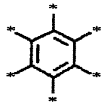
4B-1



4C-0

<161>

<162> 카르바졸 및 R¹ 내지 R⁸을 포함하는 구조 6 개가 결합하는 R⁹로 나타낸 치환기의 구체적인 예를 하기에 나타냈으나, 본 발명이 이들 화합물에 한정되지는 않는다. 하기 화학식에서, *는 카르바졸의 질소 원자가 결합하는 부분이다. 또한, 상기 (a-0) 내지 (k-0) (중수소 원자를 함유하지 않음) 및 하기 (6A-0)의 조합은 화학식 (I)을 만족시키지 않으나, 상기 이외의 양쪽 군들의 유사한 조합은 화학식 (I)을 만족한다.



6A-0

<163>

<164> 화학식 (I)에서, R¹ 내지 R⁹ 중 하나 이상은 중수소 원자 또는 중수소 원자를 함유하는 치환기를 나타낸다.

<165> 본 발명에서, R¹ 내지 R⁹ 중 하나 이상은 중수소 원자 또는 중수소 원자를 함유하는 치환기를 나타낸다는 것은, 중수소 원자가 결합된 위치에서 중수소 원자 대 수소 원자의 비율 (중수소 원자의 원자 개수 / 수소 원자의 원자 개수)이 100/0 내지 1/99의 범위에 포함되는 것을 의미한다.

<166> 이는, 화학식 (I)로 나타낸 화합물에 대해서, 수소 원자 및 중수소 원자 이외에는 동일한 구조인 점에 있어서 특정 위치에서 수소 원자를 포함하는 것 및 중수소 원자를 포함하는 것이 상기의 범위 내에서 혼합되는 것을 의미한다.

<167> 화학식 (I)에서, 중수소 원자 대 수소 원자의 비율 (중수소 원자의 원자 개수 / 수소 원자의 원자 개수)는 100/0 내지 1/99 범위에 포함되는 것이 바람직하고, 100/0 내지 50/50의 범위에 포함되는 것이 더욱 바람직하며, 100/0 내지 80/20의 범위에 포함되는 것이 특히 바람직하다.

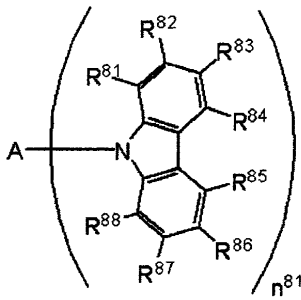
<168> 중수소 원자 대 수소 원자의 비율의 범위는 바람직하게는 100/0 내지 5/95, 더욱 바람직하게는 100/0 내지 50/50, 특히 바람직하게는 100/0 내지 80/20이다.

<169> R¹ 내지 R⁸에 대해서, R¹ 내지 R⁸ 중 하나 이상이 중수소 원자를 나타내는 것이 바람직하고, R¹ 내지 R⁸ 중 둘 이상이 중수소 원자를 나타내는 것이 더욱 바람직하며, R¹ 내지 R⁸ 모두가 중수소 원자를 나타내는 것이 특히 바람직하다.

<170> R¹ 내지 R⁸에 있어서, 중수소 원자를 나타내는 이들은 바람직하게는 R² 내지 R⁷이고, 더욱 바람직하게는 R², R³, R⁶ 및 R⁷이고, R³ 및 R⁶이 중수소 원자를 나타내는 것이 특히 바람직하다.

<171> 화학식 (I)로 나타낸 화합물이 화학식 (VII)로 나타낸 화합물인 것이 특히 바람직하다. 화학식 (VIII)로 나타낸 화합물을 하기에 설명할 것이다.

<172> [화학식 VIII]



<173>

<174> 화학식 (VIII) 에서, R⁸¹ 내지 R⁸⁸ 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고, R⁸¹ 내지 R⁸⁸ 의 인접 치환기들은 서로 결합되어 축합 고리를 형성할 수 있고; A 는 연결기를 나타내고; n⁸¹ 은 2 내지 6 의 정수를 나타낸다. 화학식 (VIII) 으로 나타낸 화합물은 중수소 원자 하나 이상을 포함한다.

<175> R⁸¹ 내지 R⁸⁸ 각각은 상술한 R¹ 내지 R⁸ 과 동일한 의미를 지니고, 바람직한 범위도 동일하다. 본원에서, R⁸¹ 내지 R⁸⁸ 과 R¹ 내지 R⁸ 사이의 대응 관계란 전자 단위의 번호가 후자 군의 번호와 대응 관계에 있음을 의미한다. 다른 유사한 대응 관계도 동일한 의미를 가진다.

<176> n⁸¹ 은 바람직하게는 2 내지 4, 더욱 바람직하게는 2 또는 3, 특히 바람직하게는 2 이다.

<177> A 로 나타낸 연결기는 바람직하게는 알킬렌, 아릴렌, 헤테로-아릴렌, 또는 실릴렌, 더욱 바람직하게는 아릴렌 또는 헤테로-아릴렌이고, 특히 바람직하게는 아릴렌이다. 이들 연결기는 예를 들어 R¹ 로 나타낸 치환기로 추가 치환될 수 있다.

<178> A 로 나타낸 연결기에는 또한 (2A-0) 내지 (6A-0) (중수소 원자를 포함하지 않는 것 및 중수소 원자를 포함하는 것) 에서 상술한 것이 포함된다.

<179> 아릴렌은 바람직하게는 페닐렌, 나프틸렌, 비페닐렌 또는 터페닐렌이고, 더욱 바람직하게는 페닐렌 또는 비페닐렌이고, 특히 바람직하게는 페닐렌이다.

<180> 페닐렌은 1,2,3,4,5,6-헥사-치환된 페닐렌, 1,2,4,5-테트라-치환된 페닐렌, 1,3,5-트리-치환된 페닐렌, 1,2-디-치환된 페닐렌, 1,3-디-치환된 페닐렌 또는 1,4-디-치환된 페닐렌이 바람직하고, 1,2-디-치환된 페닐렌, 1,3-디-치환된 페닐렌 또는 1,4-디-치환된 페닐렌이 더욱 바람직하며, 1,3-디-치환된 페닐렌 또는 1,4-디-치환된 페닐렌이 특히 바람직하다. 트리-치환 또는 그 이상의 치환의 경우, R¹ 으로 나타낸 치환기는 카르바졸 외에 치환될 수 있다.

<181> 화학식 (VIII) 로 나타낸 화합물에서, 중수소 원자를 포함한다는 것은, 중수소 원자가 결합되는 위치에서 중수소 원자 대 수소 원자의 비 (중수소 원자의 원자 개수 / 수소 원자의 원자 개수) 가 100/0 내지 1/99 의 범위에 포함되는 것을 의미한다.

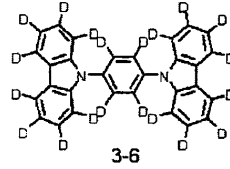
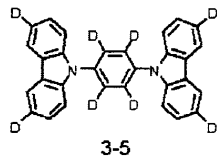
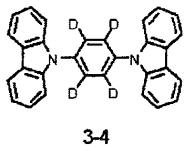
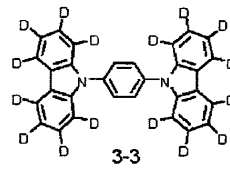
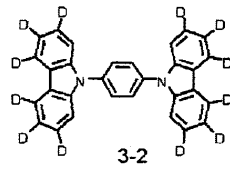
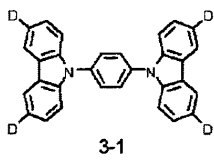
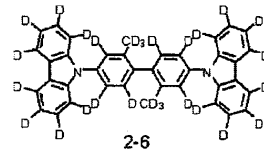
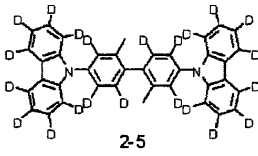
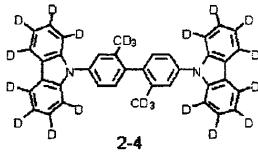
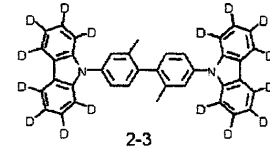
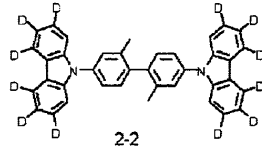
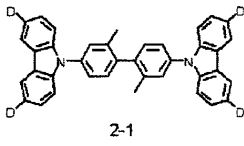
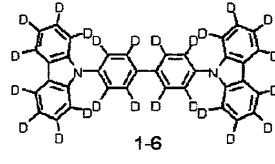
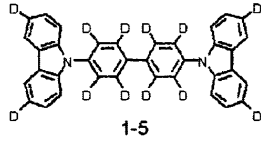
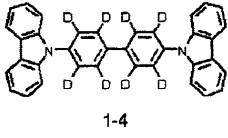
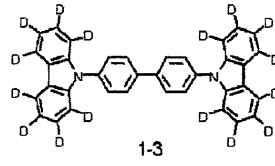
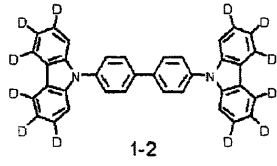
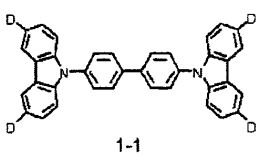
<182> 중수소 원자 대 수소 원자의 비의 범위는 바람직하게는 100/0 내지 5/95, 더욱 바람직하게는 100/0 내지 50/50, 특히 바람직하게는 100/0 내지 80/20 이다.

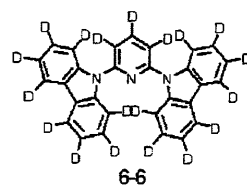
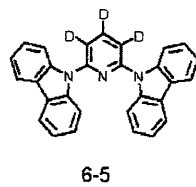
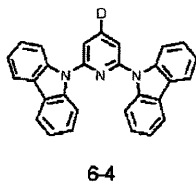
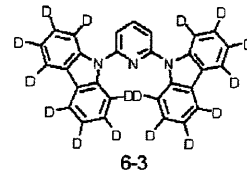
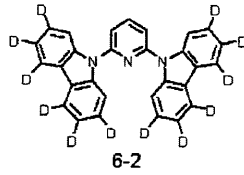
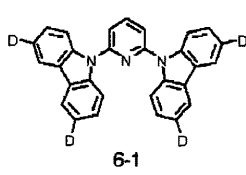
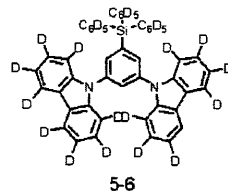
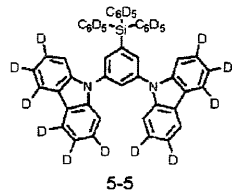
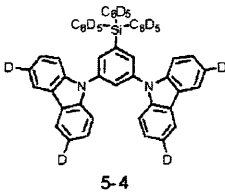
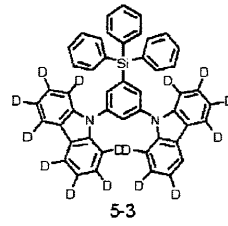
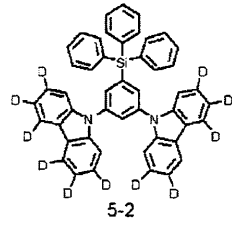
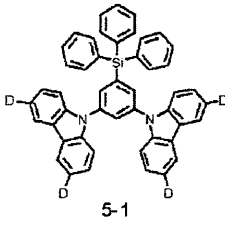
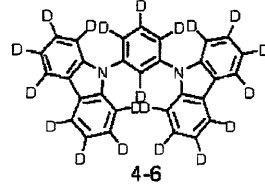
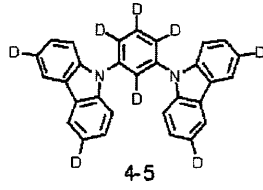
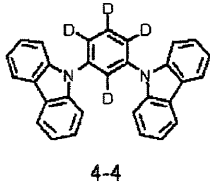
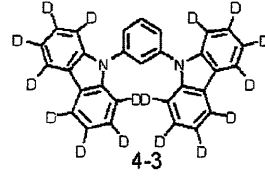
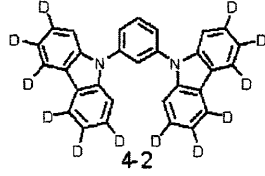
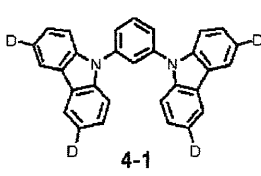
<183> 본 발명의 화학식 (I) 로 나타낸 화합물은 저분자량 화합물, 또는 올리고머 화합물일 수 있거나, 또는 주쇄 또는 측쇄에 화학식 (I) 로 나타낸 구조를 가진 중합체 화합물 (질량 평균 분자량 (폴리스티렌 환산) 이 1,000 내지 5,000,000 인 것이 바람직하고, 2,000 내지 1,000,000 인 것이 더욱 바람직하며, 3,000 내지 100,000 인 것이 보다 더욱 바람직함) 일 수 있다. 화학식 (I) 로 나타낸 화합물은 저분자량 화합물인 것이 바람직하다.

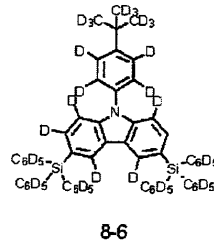
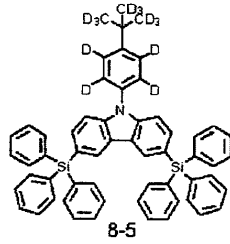
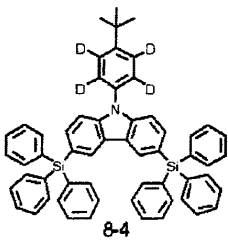
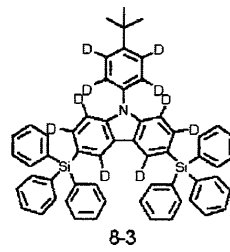
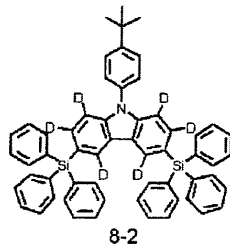
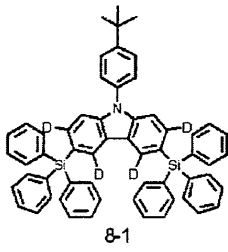
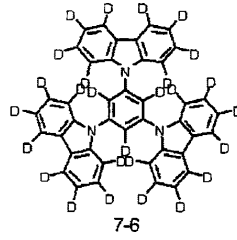
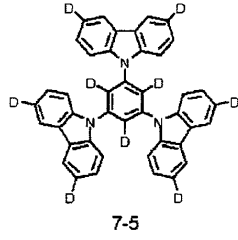
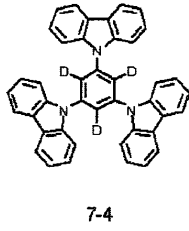
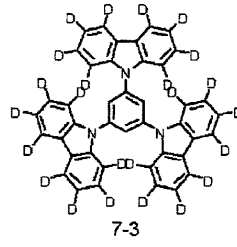
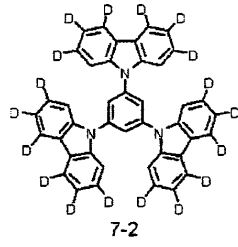
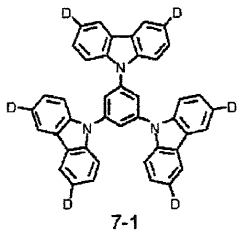
<184> 본 발명의 화학식 (I) 로 나타낸 화합물이 올리고머 화합물, 또는 주쇄 또는 측쇄에 화학식 (I) 로 나타낸 구조를 가진 중합체 화합물인 경우에서, 그 구조가 주쇄에 함유되어 있을 때, R¹ 내지 R⁹ 중 둘 이상이 함유되는 것이 바람직하고, R³, R⁶ 및 R⁹ 중 둘 이상이 함유되는 것이 더욱 바람직하며, R³ 및 R⁶ 이 함유되는 것이 특히 바람직하다. 상기 구조가 측쇄에 함유된 경우에는, R¹ 내지 R⁹ 중 어느 것이든 함유되는 것이 바람직하고, R³,

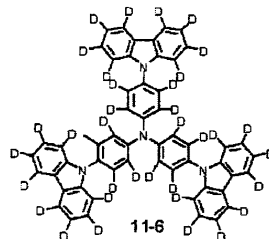
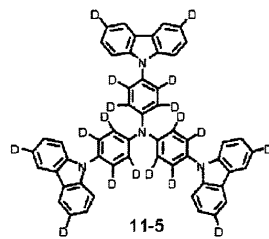
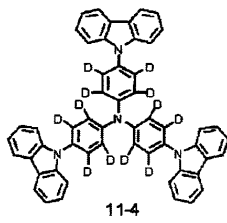
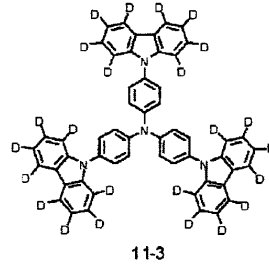
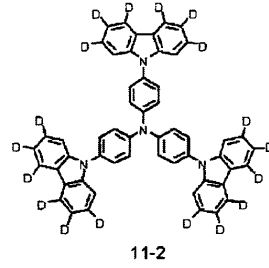
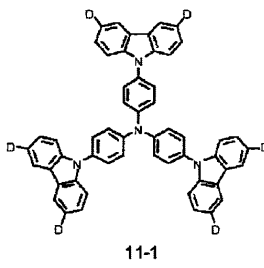
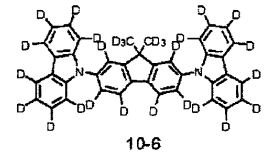
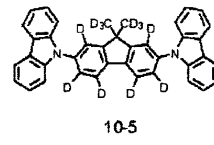
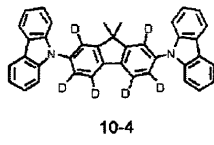
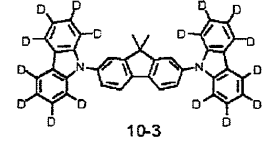
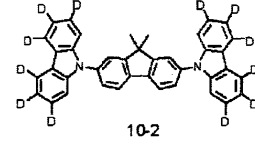
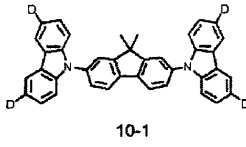
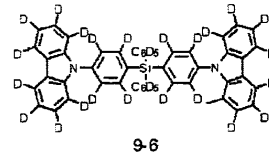
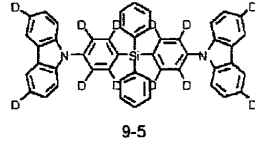
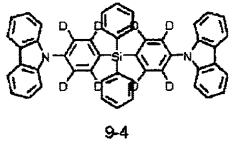
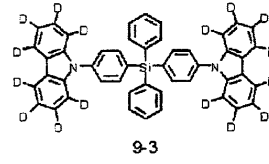
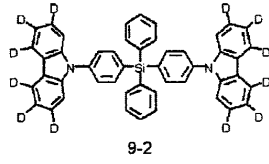
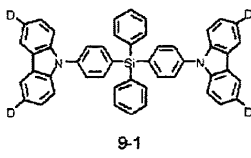
R^6 및 R^9 중 어느 것이든 함유되는 것이 더욱 바람직하고, R^9 가 함유되는 것이 특히 바람직하다.

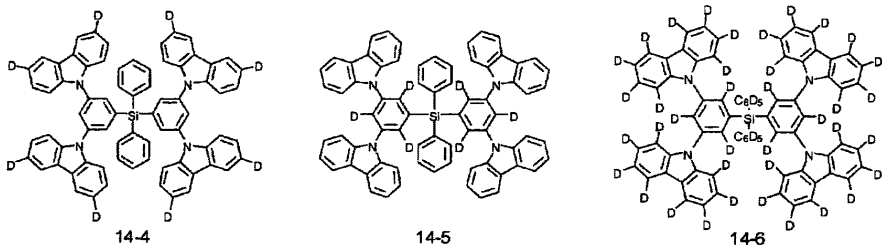
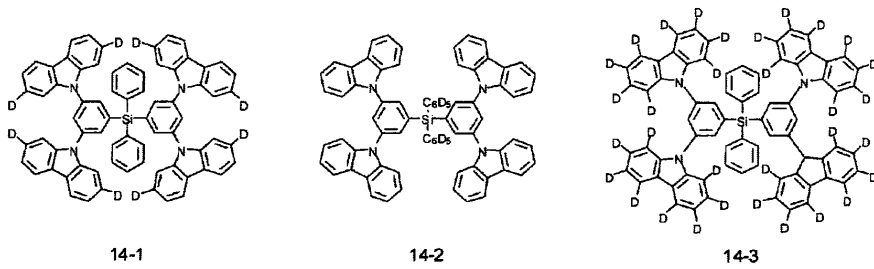
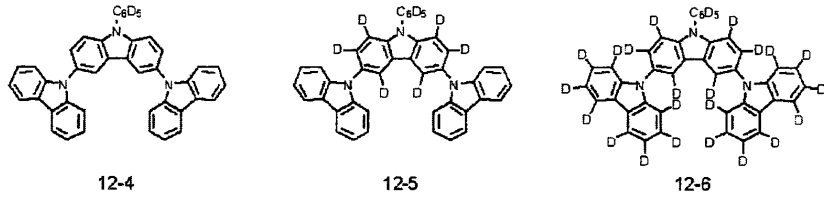
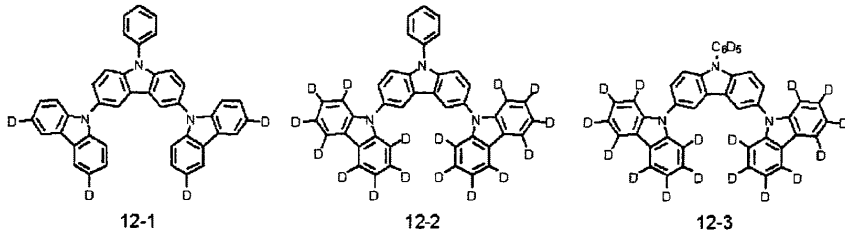
- <185> 본 발명에서, 본 발명의 화학식 (I) 로 나타낸 화합물의 용도는 한정되지 않으며, 유기층 중 어느 층에도 함유될 수 있다. 본 발명의 화학식 (I) 로 나타낸 화합물은 바람직하게는 발광층, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 수송층, 전자 주입층, 여기자 차단층 및 전하 차단층 중 어느 것 또는 이들 층의 둘 이상에도 함유될 수 있다.
- <186> 본 발명의 화학식 (I) 로 나타낸 화합물은, 정공의 주입 및 수송을 담당한다는 관점에서 볼 때, 발광층, 정공 주입층 또는 정공 수송층에 함유되는 것이 바람직하고, 정공 및 전자의 재결합에 의해 발생하는 여기 상태에 대한 물질의 안정성 측면에서 볼 때 발광층에 함유되는 것이 특히 바람직하다.
- <187> 본 발명에서는, 화학식 (I) 로 나타낸 화합물에 있어서, 발광층 또는 발광층에 인접한 층 들 중 하나에 함유되는 것이 바람직한데, 화학식 (I) 로 나타낸 화합물은 발광층 및 발광층에 인접한 층 양자 모두의 층에 함유될 수 있다.
- <188> 본 발명의 화학식 (I) 로 나타낸 화합물이 발광층에 1 내지 100 질량%, 더욱 바람직하게는 50 내지 100 질량%, 보다 더욱 바람직하게는 80 내지 100 질량% 의 양으로 함유되는 것이 바람직하다.
- <189> 본 발명의 화학식 (I) 로 나타낸 화합물이 발광층 이외의 층에 함유되는 경우에는, 그 화합물의 함량이 1 내지 100 질량%, 더욱 바람직하게는 50 내지 100 질량%, 보다 더욱 바람직하게는 80 내지 100 질량% 인 것이 바람직하다.
- <190> 화학식 (I) 로 나타낸 화합물의 구체적인 예는 하기에 나타내었으나, 본 발명이 이들 화합물에 한정되는 것은 아니다.
- <191> 예를 들어, 예시 화합물 (1-1) 은 (a-1) 및 (2F-0) 의 조합을 나타내고, 예시 화합물 (1-6) 은 (a-4) 및 (2F-3) 의 조합을 나타낸다.



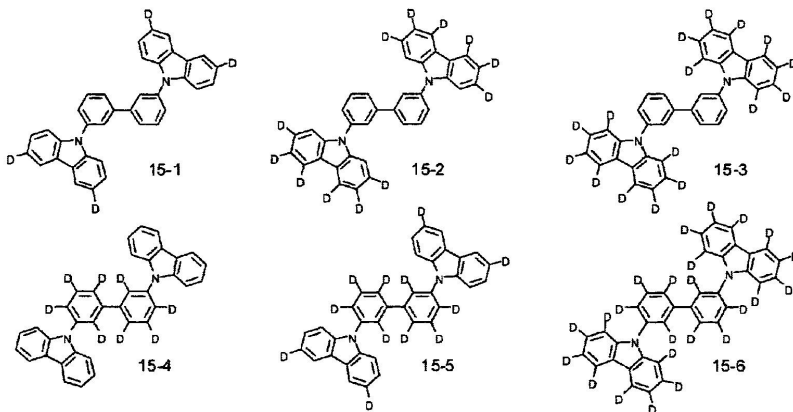








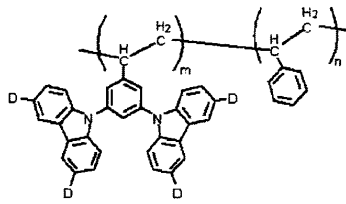
<196>



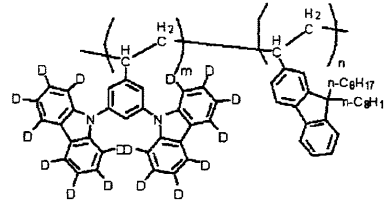
<197>

<198>

화학식 (I) 로 나타낸 화합물을 함유하는 중합체 화합물 및 올리고머 화합물의 구체적인 예는 하기에 나타내었으나, 본 발명이 이들 화합물에 한정되지는 않는다. 중합체 화합물은 동중합체 (homopolymer) 화합물일 수 있거나 또는 공중합체 (copolymer) 일 수 있고, 공중합체는 랜덤 공중합체, 교대 공중합체 (alternating copolymer) 및 블록 공중합체 중 어느 것도 될 수 있다. 화학식에서, m/n 은 중합체에 함유된 각각의 단량체의 몰비를 의미하고, m 은 1 내지 100 의 정수이고, n 은 0 내지 99 의 정수이고, m 과 n 의 합계는 100 이다.



13-1



13-2

<199>

<200> 화학식 (I) 로 나타낸 중수소 원자를 함유하는 화합물은 각종 공지의 방법에 따라 합성될 수 있다. 예를 들어, 화학식 (I) 로 나타낸 화합물 내 수소 원자는 JP-A-2004-11400 및 JP-A-2004-46066 에 개시된 방법을 이용하여 중수소 원자로 전환될 수 있다. 게다가, 본 발명의 화학식 (I) 로 나타낸 중수소 원자를 함유하는 화합물은 중수소 원자를 함유하는 물질로 합성될 수 있다. 중수소 원자를 함유하는 물질로는, 구체적으로는 비브로모벤젠-d5 (CAS No. 4165-57-5), 메틸 요오다이드-d3 (CAS No. 865-50-9), 문헌 [J. Am. Chem. Soc., Vol. 126, No. 40 item 13033-03043 (2004)] 에 기술된 방법에 따라 합성될 수 있는 레조르시놀-d6 및 그의 술폰산 에스테르를 들 수 있다.

<201> 발광 물질로는, 이리듐 착물 인광 물질이 본 발명에서 사용되었으나, 다른 인광 물질을 조합해 사용할 수 있다.

<202> 이리듐 착물 인광 물질로서, 카르빈을 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물, 피라졸 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 및 피리딘 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물이 매우 바람직하고, 카르빈을 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 및 피라졸 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물이 더욱 바람직하고, 피라졸 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물이 특히 바람직하다.

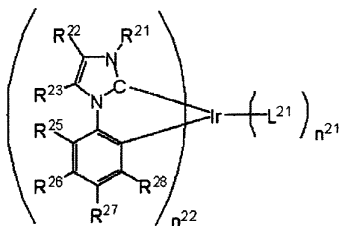
<203> 리간드 및 이리듐 원자가 서로 결합한다는 것은 리간드 및 이리듐 원자 사이의 결합이 공유 결합, 배위 결합 및 이온 결합 중 어느 것일 수 있음을 의미한다.

<204> 이리듐 원자에 배위결합하는 카르빈으로서는, 일산화탄소, 이소니트릴기 및 헤테로 원자로 안정화된 탄소 카르빈을 들 수 있다.

<205> 카르빈을 통한 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질로서, 하기 화학식 (II) 로 나타낸 이리듐 착물이 바람직하다.

<206> 화학식 (II) 는 하기에 설명할 것이다.

<207> [화학식 II]



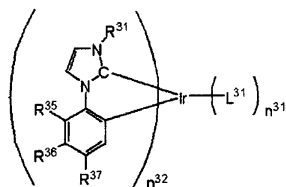
<208>

<209> 화학식 (II) 에서, R²¹ 내지 R²³ 및 R²⁵ 내지 R²⁸ 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고; L²¹ 은 리간드를 나타내고; n²² 는 정수 1 내지 3 을 나타내고; n²¹ 은 정수 0 내지 4 를 나타내고; C 는 이리듐에 배위 결합한 카르빈 탄소를 나타낸다.

<210> R²¹ 내지 R²³ 및 R²⁵ 내지 R²⁸ 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다. 치환기의 예에는, 예를 들어 알킬기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 10 으로, 예를 들어 메틸, 에틸, 이소프로필, tert-부틸, n-옥틸, n-데실, n-헥사데실, 시클로프로필, 시클로펜틸, 시클로헥실 등을 들 수 있음), 알케닐기 (바람직하게는 탄소수 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 10 으로, 예를 들어 비닐, 알릴, 2-부테닐, 3-펜티닐 등을 들 수 있음),

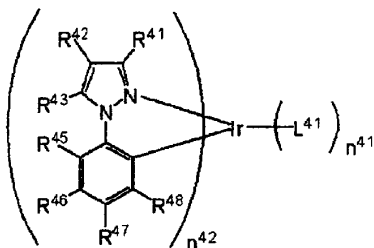
알키닐기 (바람직하게는 탄소수 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 10 으로, 예를 들어 프로파르길, 3-펜틸닐 등을 들 수 있음), 아릴기 (바람직하게는 탄소수 6 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 6 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 6 내지 12 로, 예를 들어, 페닐, p-메틸페닐, 나프틸, 안트라닐 등을 들 수 있음), 아미노기 (바람직하게는 탄소수 0 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 0 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 0 내지 10 으로 예를 들어, 아미노, 메틸아미노, 디메틸아미노, 디에틸아미노, 디벤질아미노, 디페닐아미노, 디톨릴아미노 등을 들 수 있음), 알콕실기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 10, 예를 들어, 메톡시, 에톡시, 부톡시, 2-에틸헥실옥시 등을 들 수 있음), 아릴옥시기 (바람직하게는 탄소수 6 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 6 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 6 내지 12 로, 예를 들어 페닐옥시, 1-나프틸옥시, 2-나프틸옥시 등을 들 수 있음), 헤테로시클릭 옥시기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 피리딜옥시, 피라질옥시, 피리미딜옥시, 퀴놀릴옥시 등을 들 수 있음), 아실기 (바람직하게는 탄소수 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 12 로, 예를 들어 아세틸, 벤조일, 포르밀, 피발로일 등을 들 수 있음), 알콕시카르보닐기 (바람직하게는 탄소수 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 12 로, 예를 들어 메톡시카르보닐, 에톡시카르보닐 등을 들 수 있음), 아릴옥시카르보닐기 (바람직하게는 탄소수 7 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 7 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 7 내지 12 로, 예를 들어 페닐옥시카르보닐 등을 들 수 있음), 아실옥시기 (바람직하게는 탄소수 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 10 로, 예를 들어 아세톡시, 벤조일옥시 등을 들 수 있음), 아실아미노기 (바람직하게는 탄소수 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 10 로, 예를 들어 아세틸아미노, 벤조일아미노 등을 들 수 있음), 알콕시카르보닐아미노기 (바람직하게는 탄소수 2 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 2 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 2 내지 12 로, 예를 들어 메톡시카르보닐-아미노, 등을 들 수 있음), 아릴옥시카르보닐아미노기 (바람직하게는 탄소수 7 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 7 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 7 내지 12 로, 예를 들어 페닐옥시카르보닐아미노 등을 들 수 있음), 술포닐아미노기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 메탄술포닐아미노, 벤젠술포닐아미노 등을 들 수 있음), 술포모일기 (바람직하게는 탄소수 0 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 0 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 0 내지 12 로, 예를 들어 술포모일, 메틸술포모일, 디메틸술포모일, 페닐술포모일 등을 들 수 있음), 카르바모일기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 카르바모일, 메틸카르바모일, 디에틸카르바모일, 페닐카르바모일 등을 들 수 있음), 알킬티오기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어, 메틸티오, 에틸티오 등을 들 수 있음), 아릴티오기 (바람직하게는 탄소수 6 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 6 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 6 내지 12 로, 예를 들어 페닐티오 등을 들 수 있음), 헤테로시클릭 티오기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 피리딜티오, 2-벤즈이미졸릴티오, 2-벤조사졸릴티오, 2-벤조-티아졸릴티오 등을 들 수 있음), 술포닐기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 메실, 토실 등을 들 수 있음), 술포닐기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 메탄술포닐, 벤젠술포닐 등을 들 수 있음), 우레이도기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 우레이도, 메틸우레이도, 페닐우레이도 등을 들 수 있음), 인산 아미도기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 20, 특히 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 예를 들어 디에틸인산 아미도, 페닐인산 아미도 등을 들 수 있음), 히드록시기, 머캅토기, 할로젠 원자 (예를 들어, 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자, 요오드 원자), 시아노기, 술포기, 카르복실기, 니트로기, 히드록삼산기, 술포노기, 히드라지노기, 이미노기, 헤테로시클릭기 (바람직하게는 탄소수 1 내지 30, 더욱 바람직하게는 탄소수 1 내지 12 로, 헤테로 원자로서는 예를 들어 질소 원자, 산소 원자, 황 원자를 들 수 있으며, 구체적으로 예를 들면 이미다졸릴, 피리딜 퀴놀릴, 푸릴, 티에닐, 피페리딜, 모르폴리노, 벤조사졸릴, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 카르바졸릴, 아제피닐 등을 들 수 있음), 실릴기 (바람직하게는 탄소수 3 내지 40, 더욱 바람직하게는 탄소수 3 내지 30, 특히 바람직하게는 탄소수 3 내지 24 로, 예를 들어 트리메틸실릴, 트리페닐실릴 등을 들 수 있음), 실릴옥시기 (바람직하게는 탄소수 3 내지 40, 더욱 바람직하게는 탄소수 3 내지 30, 특히 바람직하게는 탄소수 3 내지 24 로, 예를 들어 트리메틸실릴옥시, 트리페닐실릴옥시 등을 들 수 있음) 이 포함된다. 상기 치환기들은 추가로 치환될 수 있다.

- <211> R^{21} 및 R^{22} , 또는 R^{22} 및 R^{23} 은 서로 결합되어 시클릭 고리 구조를 형성할 수 있다.
- <212> R^{21} 로 나타낸 치환기는 바람직하게는 알킬기, 아릴기 또는 헤테로-아릴기이고, 더욱 바람직하게는 알킬기 또는 아릴기이고, 특히 바람직하게는 메틸기, tert-부틸기, 페닐기, 메시틸기 또는 2-o-자일릴기이다.
- <213> R^{22} 및 R^{23} 으로 나타낸 치환기는 바람직하게는 알킬기, 아릴기 또는 헤테로-아릴기이고, 더욱 바람직하게는 알킬기 또는 아릴기이고, 특히 바람직하게는 메틸기, tert-부틸기 또는 페닐기이다.
- <214> R^{25} 내지 R^{27} 로 나타낸 치환기는 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 헤테로-아릴기, 할로젠기 또는 시아노기이고, 더욱 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 할로젠 기, 또는 시아노기이고, 특히 바람직하게는 메틸기, tert-부틸기, 페닐기, 불소 원자 또는 시아노기이다.
- <215> L^{21} 은 리간드를 나타낸다. 리간드의 예로서, 예를 들어 문헌 [H.Yersin, Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds, Springer-Verlag (1987), and Akio Yamamoto, Yuki Kinzoku Kagaku-Kiso to Oyo-(Organic Metal Chemistry-Elements and Applications), Shokabo Publishing Co. (1982)] 에 기술된 리간드를 들 수 있다. 바람직한 리간드로는 할로젠 리간드 (바람직하게는 염소 리간드, 불소 리간드), 질소-함유 헤테로시클릭 리간드 (예를 들어, 비피리딜, 페난트롤린, 페닐피리딘, 피라졸릴피리딘, 벤즈이미다졸릴피리딘, 페닐피라졸, 피롤린산, 디피롤린산 등), 디케톤 리간드, 니트릴 리간드, CO 리간드, 이소니트릴 리간드, 포스포러스 리간드 (예를 들어, 포스핀 유도체, 아인산 에스테르 유도체, 포스피닌 유도체 등) 및 카르복실산 리간드 (예를 들어, 아세트산 리간드 등) 이고, 더욱 바람직한 리간드는 질소-함유 헤테로시클릭 리간드 (예를 들어, 비피리딜, 페난트롤린, 페닐피리딘, 피라졸릴피리딘, 벤즈이미다졸릴피리딘 및 페닐피라졸) 이다.
- <216> 질소-함유 헤테로시클릭 리간드 내 질소-함유 헤테로시클릭 고리로서, 피리딘 고리, 피라진 고리, 피리미딘 고리, 피리다진 고리, 피롤 고리, 피라졸 고리, 이미다졸 고리, 트리아졸 고리, 티아졸 고리, 옥사졸 고리, 옥사디아졸 고리, 티아디아졸 고리 및 아자포스피닌 고리가 바람직하고, 피리딘 고리, 피롤 고리, 피라졸 고리 및 이미다졸 고리가 더욱 바람직하고, 피리딘 고리, 피라졸 고리 및 이미다졸 고리가 보다 더욱 바람직하다.
- <217> 질소-함유 헤테로시클릭 리간드는 치환기를 가질 수 있다. 치환기의 예로서, 상기 R^{11} 에 기술된 바와 같은 것들을 들 수 있는데, 예를 들어, 알킬기, 아릴기, 알콕실기, 불소 원자, 시아노기 및 치환된 아미노기가 바람직하다.
- <218> n^{22} 는 바람직하게는 2 또는 3 이고, 특히 바람직하게는 3 이다. n^{21} 이 2 또는 3 인 경우, 복수 개의 L^{21} 은 상동 또는 상이할 수 있다. n^{22} 이 2 또는 3 인 경우에는, n^{22} 에 의해 개수가 결정된 리간드는 상동 또는 상이할 수 있다.
- <219> 카르빈을 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유한 화학식 (II) 로 나타낸 이리듐 착물 인광 물질은 하기 화학식 (III) 으로 나타낸 이리듐 착물 인광물질인 것이 더욱 바람직하다.
- <220> 화학식 (III) 을 하기에 설명할 것이다.
- <221> [화학식 III]



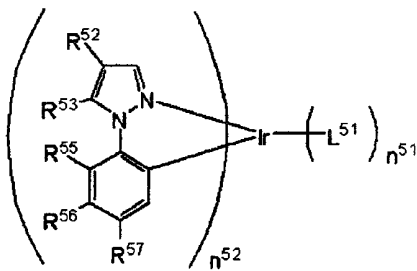
- <222>
- <223> 화학식 (III) 에서, R^{31} 은 알킬기 또는 아릴기를 나타내고; R^{35} , R^{36} 및 R^{37} 각각은 수소 원자, 불소 원자, 알킬기 또는 시아노기를 나타낸다. R^{35} 및 R^{36} 또는 R^{36} 및 R^{37} 은 서로 결합되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있다. L^{31} 은 리간드를 나타내고, n^{32} 는 1 내지 3 의 정수를 나타내고, n^{31} 은 0 내지 4 의 정수를 나타내고, C 는 이리듐에 배위결합한 카르빈 탄소를 나타낸다.

- <224> R³¹ 은 알킬기 또는 아릴기를 나타내고, 알킬기를 나타내는 것이 더욱 바람직하다.
- <225> R³¹ 로 나타낸 알킬기로서, 메틸기, 에틸기, tert-부틸기 및 시클로헥실기가 바람직하고, 메틸기 및 tert-부틸기가 더욱 바람직하고 메틸기가 특히 바람직하다.
- <226> R³¹ 로 나타낸 아릴기로서는, 페닐기, p-메틸페닐기, 2-자일릴기, 5-자일릴기, 메시틸기, 1-나프틸기, 2-나프틸기 및 안트라닐기가 바람직하고, 페닐기, p-메틸페닐기, 2-자일릴기, 5-자일릴기 및 메시틸기가 더욱 바람직하고, 페닐기가 특히 바람직하다.
- <227> R³⁵ 및 R²⁵, R³⁶ 및 R²⁶, R³⁷ 및 R²⁷ 각각은 동일한 의미를 지닌다.
- <228> R³⁵ 는 수소 원자, 불소 원자, 알킬기 또는 시아노기가 바람직하고, 수소 원자, 불소 원자 또는 시아노기가 더욱 바람직하고, 불소 원자가 특히 바람직하다.
- <229> R³⁶ 은 수소 원자, 불소 원자, 알킬기 또는 시아노기가 바람직하고, 수소 원자, 불소 원자 또는 시아노기가 더욱 바람직하고, 시아노기가 특히 바람직하다.
- <230> R³⁷ 은 수소 원자, 불소 원자, 알킬기 또는 시아노기가 바람직하고, 불소 원자 또는 시아노기가 더욱 바람직하고, 시아노기가 특히 바람직하다.
- <231> R³⁵, R³⁶ 및 R³⁷ 로 나타낸 알킬기로서, 메틸기, 에틸기, tert-부틸기, 시클로헥실기, 트리플루오로메틸기 및 퍼플루오로부틸기가 바람직하고, 메틸기, tert-부틸기, 트리플루오로메틸기 및 퍼플루오로부틸기가 더욱 바람직하고, 트리플루오로메틸기가 특히 바람직하다.
- <232> R³⁵ 및 R³⁶, 또는 R³⁶ 및 R³⁷ 가 서로 결합함으로써 형성된 벤조-축합 고리 구조로서는, 디벤조푸라닐, 디벤조티오페닐, N-페닐카르바졸릴, N-메틸카르바졸릴, 9,9-디메틸플루오레닐, N-페닐인돌릴, N-메틸인돌릴, 벤조티에닐 및 1,1-디메틸인덴일이 바람직하고, 디벤조푸릴, 디벤조티오페닐, N-페닐카르바졸릴, N-메틸카르바졸릴 및 9,9-디메틸플루오레닐이 더욱 바람직하고, 디벤조푸라닐이 특히 바람직하다.
- <233> R³⁵ 및 R³⁶, 또는 R³⁶ 및 R³⁷ 이 서로 결합함으로써 형성된 디벤조푸라닐 구조 또는 디벤조티오페닐 구조는 R³⁵ 또는 R³⁷ 의 위치에서 산소 원자 또는 황 원자에 결합되는 구조가 바람직하고, R³⁵ 위치에서 산소 원자 또는 황 원자에 결합되는 구조가 특히 바람직하다.
- <234> L³¹ 은 L²¹ 의 것과 동일한 의미를 지니고, 바람직한 범위도 또한 동일하다.
- <235> n³¹ 및 n²¹, 및 n²¹ 및 n²² 각각은 동일한 의미를 지니고, 바람직한 범위도 또한 동일하다.
- <236> 피라졸 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질은 바람직하게는 하기 화학식 (IV) 로 나타낸 이리듐 착물이다.
- <237> 화학식 (IV) 는 하기에 설명할 것이다.
- <238> [화학식 IV]



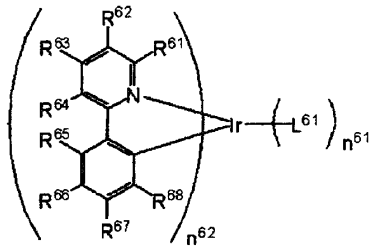
- <239>
- <240> 화학식 (IV) 에서, R⁴¹, R⁴², R⁴³, R⁴⁵, R⁴⁶, R⁴⁷ 및 R⁴⁸ 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고; L⁴¹ 은 리간드를 나타내고; n⁴² 는 1 내지 3 의 정수를 나타내고; n⁴¹ 은 0 내지 4 의 정수를 나타낸다.

- <241> R^{41} 내지 R^{43} 및 R^{45} 내지 R^{48} 은, 각각 R^{21} 내지 R^{23} 및 R^{25} 내지 R^{28} 의 것과 동일한 의미를 갖는다.
- <242> R^{41} 내지 R^{43} 으로 나타낸 치환기는 알킬기, 아릴기 또는 헤테로-아릴기가 바람직하고, 알킬기 또는 아릴기가 더욱 바람직하고, 메틸기, tert-부틸기 또는 페닐기가 특히 바람직하다.
- <243> R^{45} 내지 R^{47} 로 나타낸 치환기는 알킬기, 아릴기, 헤테로-아릴기, 할로젠기 또는 시아노기가 바람직하고, 알킬기, 아릴기, 할로젠기 또는 시아노기가 더욱 바람직하고, 메틸기, tert-부틸기, 페닐기, 불소 원자 또는 시아노기가 특히 바람직하다.
- <244> R^{45} 및 R^{46} , 또는 R^{46} 및 R^{47} 은 서로 결합되어 시클릭 구조를 형성할 수 있다.
- <245> L^{41} 은 L^{21} 의 것과 동일한 의미를 지니며, 바람직한 범위도 또한 동일하다.
- <246> n^{41} 및 n^{21} , 및 n^{42} 및 n^{22} 각각은 동일한 의미를 지니고, 그의 바람직한 범위도 또한 동일하다.
- <247> 화학식 (IV) 로 나타낸, 피라졸 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질은 하기 화학식 (V) 로 나타낸 이리듐 착물 인광 물질인 것이 더욱 바람직하다.
- <248> 화학식 (V) 을 하기에 설명할 것이다.
- <249> [화학식 V]



- <250>
- <251> 화학식 (V) 에서, R^{52} 및 R^{53} 각각은 수소 원자, 알킬기 또는 아릴기를 나타내고; R^{55} , R^{56} 및 R^{57} 각각은 수소 원자, 불소 원자, 알킬기 또는 시아노기를 나타내고, R^{55} 및 R^{56} , 또는 R^{56} 및 R^{57} 은 서로 결합되어 축합 고리 구조를 형성할 수 있고; L^{51} 은 리간드를 나타내고; n^{52} 는 1 내지 3 의 정수를 나타내고; n^{51} 은 0 내지 4 의 정수를 나타낸다.
- <252> R^{52} 및 R^{53} 각각은 바람직하게는 수소 원자, 알킬기 또는 아릴기를 나타내고, 더욱 바람직하게는 수소 원자, 메틸기, tert-부틸기 또는 페닐기를 나타내고, 특히 바람직하게는 수소 원자를 나타낸다.
- <253> R^{55} 및 R^{35} , R^{56} 및 R^{36} , R^{57} 및 R^{37} 각각은 동일한 의미를 지니며, 그의 바람직한 범위도 또한 동일하다.
- <254> L^{51} 은 L^{21} 의 것과 동일한 의미를 지니고, 그의 바람직한 범위도 또한 동일하다.
- <255> n^{51} 및 n^{21} , 및 n^{52} 및 n^{22} 각각은 동일한 의미를 지니고, 바람직한 범위도 또한 동일하다.
- <256> 피리딘 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질은 하기 화학식 (VI) 로 나타낸 이리듐 착물이 바람직하다.
- <257> 화학식 (VI) 는 하기에 설명할 것이다.

<258> [화학식 VI]



<259>

<260> 화학식 (VI) 에서, R⁶¹ 내지 R⁶⁸ 각각은 수소 원자 또는 치환기를 나타내고; L⁶¹ 은 리간드를 나타내고; n⁶² 는 1 내지 3 의 정수를 나타내고; n⁶¹ 은 0 내지 4 의 정수를 나타낸다.

<261> R⁶¹ 내지 R⁶³ 및 R⁶⁵ 내지 R⁶⁸ 은, R²¹ 내지 R²³ 및 R²⁵ 내지 R²⁸ 의 것 각각과 동일한 의미를 지닌다. R⁶⁴ 는 R²³ 의 것과 동일한 의미를 지닌다.

<262> R⁶¹ 내지 R⁶⁴ 로 나타낸 치환기는 바람직하게는 알킬기, 알콕실기, 아릴옥시기, 헤테로 아릴옥시기 또는 치환된 아미노기이고, 더욱 바람직하게는 알킬기, 알콕실기, 아릴옥시기 또는 치환된 아미노기이고, 특히 바람직하게는 메틸기, tert-부틸기, 메톡시기, 페녹시기, 디메틸아미노기 또는 디페닐아미노기이다.

<263> R⁶¹ 및 R⁶², 또는 R⁶² 및 R⁶³, 또는 R⁶³ 및 R⁶⁴ 는 서로 결합되어 시클릭 구조를 형성할 수 있다.

<264> R⁶⁵ 내지 R⁶⁸ 로 나타낸 치환기는 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 헤테로 아릴기, 할로젠 원자 또는 시아노기이고, 더욱 바람직하게는 알킬기, 아릴기, 할로젠 원자 또는 시아노기이고, 특히 바람직하게는 메틸기, tert-부틸기, 페닐기, 불소 원자 또는 시아노기이다.

<265> R⁶⁵ 및 R⁶⁶, 또는 R⁶⁶ 및 R⁶⁷, 또는 R⁶⁷ 및 R⁶⁸ 은 서로 결합되어 시클릭 구조를 형성할 수 있다.

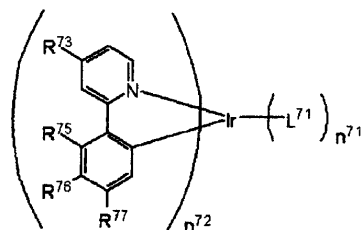
<266> L⁶¹ 은 L²¹ 의 것과 동일한 의미를 가지며, 바람직한 범위도 또한 동일하다.

<267> n⁶¹ 및 n²¹, 및 n⁶² 및 n²² 각각은 동일한 의미를 지니며, 바람직한 범위도 동일하다.

<268> 화학식 (VI) 로 나타낸, 피리딘 구조의 질소 원자를 통해 이리듐 원자에 결합하는 리간드를 함유하는 이리듐 착물 인광 물질은 하기 화학식 (VII) 로 나타낸 이리듐 착물 인광 물질인 것이 더욱 바람직하다.

<269> 화학식 (VII) 는 하기에 나타낼 것이다.

<270> [화학식 VII]

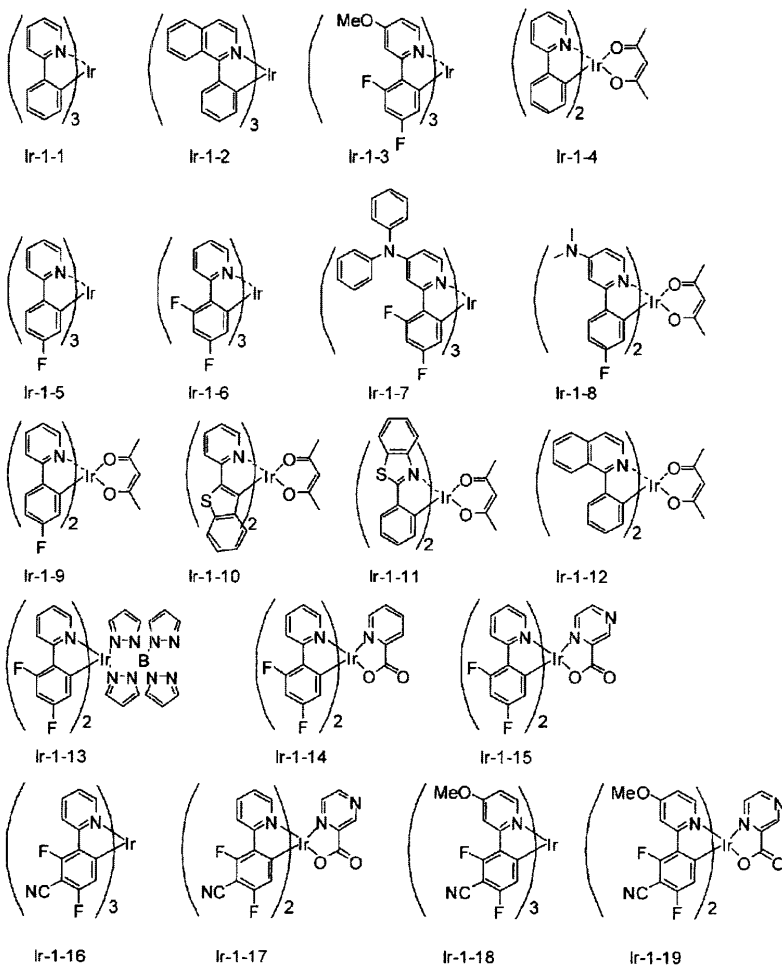


<271>

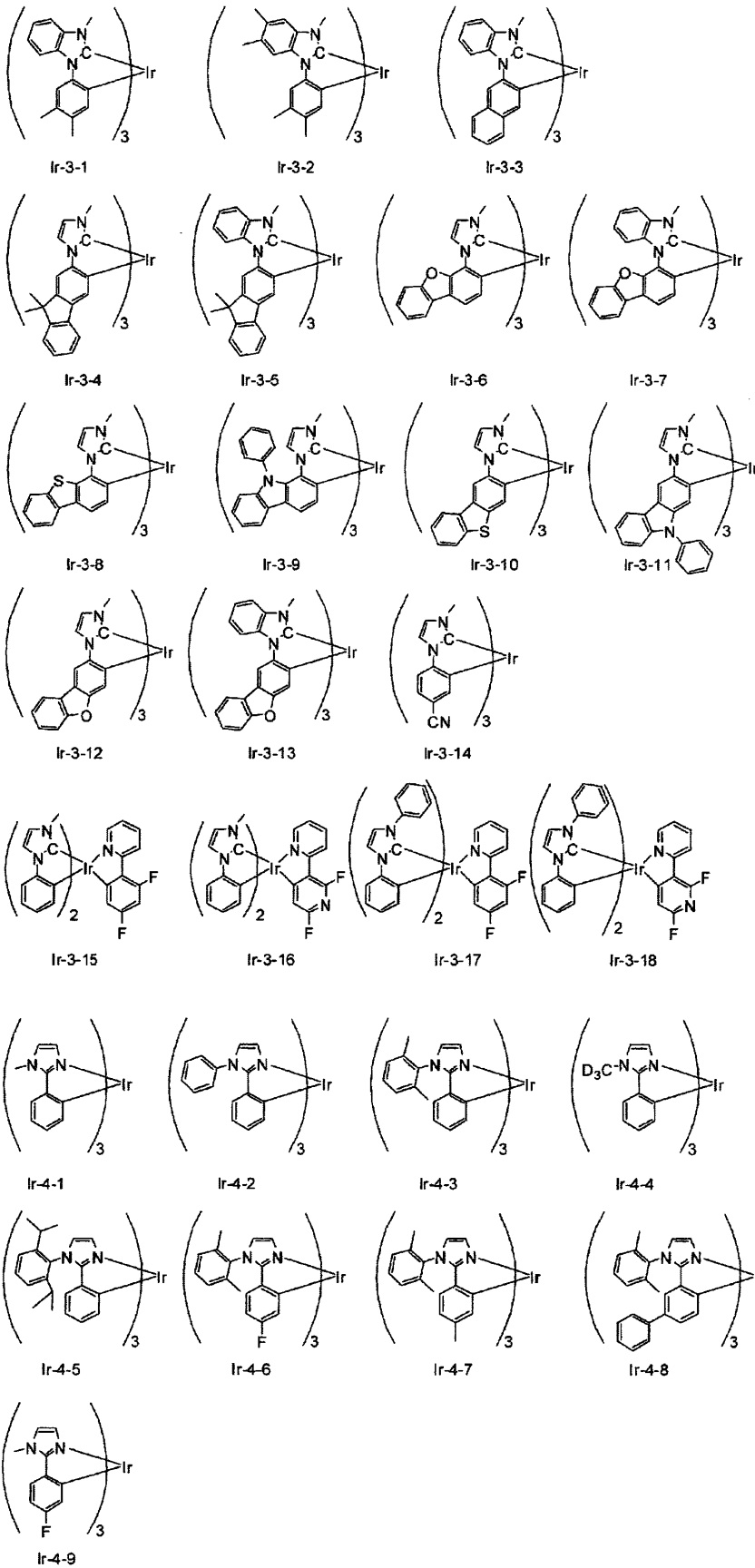
<272> 화학식 (VII) 에서, R⁷³ 은 수소 원자, 알킬기, 아미노기 또는 알콕실기를 나타내고; R⁷⁵ 내지 R⁷⁷ 은 각각 수소 원자, 불소 원자 또는 알킬기를 나타내고; L⁷¹ 은 리간드를 나타내고; n⁷² 는 1 내지 3 의 정수를 나타내고; n⁷¹ 은 0 내지 4 의 정수를 나타낸다.

<273> R⁷³ 은 바람직하게는 알킬기, 아미노기, 또는 알콕실기를 나타내고, 더욱 바람직하게는 메틸기, tert-부틸기, 디메틸아미노기, 디페닐아미노기, 메톡시기, tert-부톡시기 또는 페녹시기이고, 특히 바람직하게는 메톡시를 나타낸다.

- <274> R⁷⁵ 는 바람직하게는 수소 원자, 불소 원자, 알킬기 또는 시아노기를 나타내고, 더욱 바람직하게는 수소 원자, 불소 원자 또는 시아노기를 나타내고, 특히 바람직하게는 불소 원자를 나타낸다.
- <275> R⁷⁶ 은 바람직하게는 수소 원자, 불소 원자, 알킬기 또는 시아노기를 나타내고, 더욱 바람직하게는 수소 원자, 불소 원자 또는 시아노기를 나타내고, 특히 바람직하게는 시아노기를 나타낸다.
- <276> R⁷⁷ 은 바람직하게는 수소 원자, 불소 원자, 알킬기 또는 시아노기, 더욱 바람직하게는 불소 원자 또는 시아노기, 특히 바람직하게는 불소 원자를 나타낸다.
- <277> R⁷⁵, R⁷⁶ 및 R⁷⁷ 로 나타낸 알킬기는 바람직하게는 메틸기, 에틸기, tert-부틸기, 시클로헥실기, 트리플루오로메틸기 또는 퍼플루오로부틸기이고, 더욱 바람직하게는 메틸기, tert-부틸기, 트리플루오로메틸기 또는 퍼플루오로부틸기이고, 특히 바람직하게는 트리플루오로메틸기이다.
- <278> L⁷¹ 은 L²¹ 의 것과 동일한 의미를 지니고, 바람직한 범위도 동일하다.
- <279> n⁷¹ 및 n²¹, 및 n⁷² 및 n²² 각각은 동일한 의미를 지니고, 바람직한 범위도 동일하다.
- <280> 이리듐 착물 인광 물질의 최대 방출 파장은 방출 스펙트럼의 최대값에서 가장 큰 방출 강도를 가진 파장이다. 최대 방출 파장은 바람직하게는 450 내지 470 nm, 더욱 바람직하게는 450 내지 465 nm, 특히 바람직하게는 450 내지 460 nm 이다.
- <281> 이리듐 착물 인광 물질로서, WO 00/70655, W001/41512, WO 02/5645, JP-A-2002-117978, WO 04/085450, WO 06/121811, WO 05/019373, WO 05/113704, WO 04/016711 및 문헌 [Coordination Chemistry Reviews, 250 (2006) 2093-2126] 에서 기술한 화합물들을 들 수 있다.
- <282> 이리듐 착물 인광 물질의 구체적인 예를 하기에 나타내었다. 그러나, 본 발명이 이들 화합물에 한정되는 것은 아니다.



<283>



<286>

<287>

<288>

<289>

상기에 예시한 착물 화합물들은 예를 들어 하기에 기술된 방법으로 제조될 수 있다.

상기 금속 착물 화합물은 각종 방법, 예를 들어 문헌 [G.R. Newkome et al., *Journal of Organic Chemistry*, 53, 786 (1988)] 에서 p.789 의 좌측 컬럼의 53 제 줄, 우측 컬럼의 7 제 줄] 에 기술된 방법, p 790 의 좌측

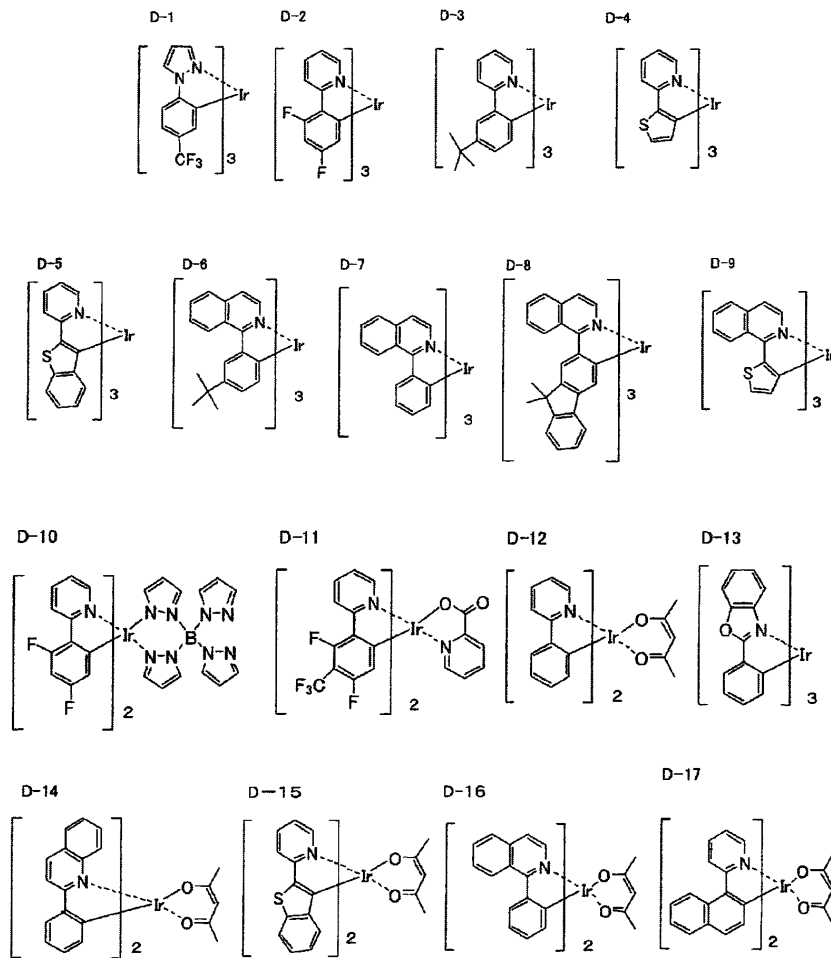
컬럼의 18 내지 38 제 줄, 우측 컬럼의 19 내지 30 제 줄에 기술된 방법, 및 이들 방법의 조합, 및 문헌 [H. Lexy 등, *Chemische Berichte*, 113, 2749 (1980), p2752, 26 내지 35 제 줄] 에 기술된 방법에 따라 합성할 수 있다.

- <290> 예를 들어, 화합물은 리간드 또는 그의 분해된 생성물 및 금속 화합물을 용매 (예컨대, 할로젠계 용매, 알콜계 용매, 에테르계 용매, 에스테르계 용매, 케톤계 용매, 니트릴계 용매, 아미드계 용매, 술폰계 용매, 술폭시드계 용매 및 물을 들 수 있음) 의 존재하 또는 용매 부재하, 염기 (무기 또는 유기성의 각종 염기, 예컨대 소듐 메톡시드, 포타슘 t-부톡실레이트, 트리에틸아민 및 포타슘 카르보네이트를 들 수 있음) 의 존재하 또는 염기의 부재하에서, 실온 또는 그 이하, 또는 가열함으로써 수득할 수 있다.
- <291> 본 발명에 있어서, 발광 물질로서 이리듐 착물을 이용하는 것이 바람직하나, 이리듐 착물은 발광 층 이외의 층에서도 사용할 수 있다.
- <292> 이리듐 착물은 발광층 내에서, 발광층을 구성하는 모든 화합물 양에 대해 일반적으로는 0.1 내지 50 질량% 의 비율로 함유되지만, 내구성 및 외부 양자 효율의 관점에서 볼 때, 상기 양은 1 내지 50 질량%인 것이 바람직하고, 2 내지 40 질량%인 것이 더욱 바람직하다.
- <293> 본 발명의 장치를 구성하는 각 요소에 대해서는 하기에 상세히 설명할 것이다.
- <294> 유기 전계발광 장치
- <295> 본 발명의 장치는 하기에 상세히 설명할 것이다.
- <296> 본 발명의 발광 장치는, 캐소드 (cathode) 및 애노드 (anode) 를 가진 기관, 그 전극 사이에 유기 발광층 (이하, 종종 단순히 "발광층"으로 지칭함) 을 포함하는 유기층 (유기층은 유기 화합물을 단독으로 포함하는 유기층일 수 있거나, 또는 무기 화합물을 함유하는 유기층일 수 있음) 을 포함한다. 따라서, 본 발명의 유기층은 발광층을 단독으로 포함하는 구성을 지닐 수 있다. 발광 장치의 특성에서 볼 때, 애노드 및 캐소드 층 적어도 하나의 전극이 투명한 것이 바람직하다.
- <297> 본 발명에서 유기층의 적층의 구현으로서, 적층은 애노드 측에서부터, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층의 순서인 것이 바람직하다. 또한, 전하 차단층은 정공 수송층과 발광층 사이에서, 또는 발광층과 전자 수송층 사이에서 제공될 수 있다. 정공 주입층은 애노드와 정공 수송층 사이에서 제공될 수 있으며, 전자 주입층은 캐소드와 전자 수송층 사이에서 제공될 수 있다. 각 층은 복수의 2 차 층으로 나누어질 수 있다.
- <298> 본 발명의 발광 장치의 구성요소를 하기에 설명한다.
- <299> 기관:
- <300> 본 발명에 사용되는 기관은 바람직하게는 유기층으로부터 방출되는 광을 산란 또는 감쇄 (attenuate) 하지 않는 기관이다. 기관의 물질의 구체적인 예는 무기 물질, 예컨대 산화이트륨으로 안정화된 지르코니아 (yttria stabilized zirconia; YSZ), 유리 등, 및 유기 물질, 예컨대 폴리에스테르, 예를 들어, 폴리에틸렌 테레프탈레이트, 폴리부틸렌 프탈레이트, 폴리에틸렌 나프탈레이트 등, 폴리스티렌, 폴리카르보네이트, 폴리에테르 술폰, 폴리알릴레이트, 폴리이미드, 폴리시클로올레핀, 노르보르넨 수지, 폴리(클로로트리플루오로에틸렌) 등을 포함한다.
- <301> 유리를 기관으로서 사용하는 경우에는, 유리로부터의 이온 용출을 감소시키기 위해 알칼리-비함유 유리를 물질로서 사용하는 것이 바람직하다. 또한, 소다 석회 유리를 사용하는 경우에는, 실리카와 같은 차단벽 코팅 (barrier coat) 을 제공하는 것이 바람직하다. 유기 물질의 경우에, 내열성, 치수 안정성, 내용매성, 전기 절연성 및 가공성이 우수한 물질을 사용하는 것이 바람직하다.
- <302> 기관의 형상, 구조 및 크기는 특별히 한정되지 않으며, 이들은 발광 장치의 의도하고 있는 용도 또는 목적에 따라 임의대로 선택할 수 있다. 일반적으로, 기관은 플레이트 형상을 갖는 것이 바람직하다. 기관의 구조는 단일층 구조 또는 적층 구조일 수 있으며, 단일 부재로 이루어질 수 있거나 또는 둘 이상의 부재로 형성될 수 있다.
- <303> 기관은 무색 투명하거나, 또는 유색 투명할 수 있지만, 유기 발광층으로부터 방출되는 광을 산란 또는 감쇄하지 않는 관점에서 볼 때, 무색 투명한 기관을 사용하는 것이 바람직하다.
- <304> 기관은 이의 정면 또는 후면 상의 수분 침투 방지층 (기체 차단벽 층) 을 가질 수 있다.

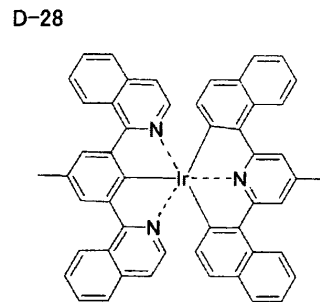
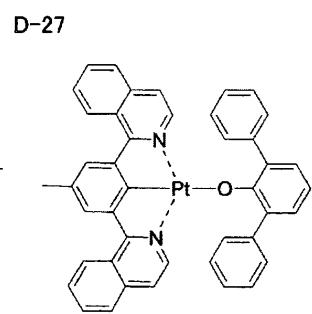
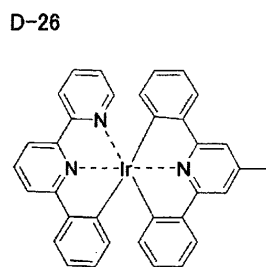
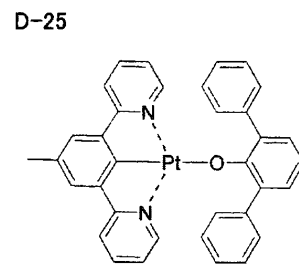
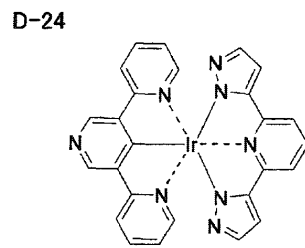
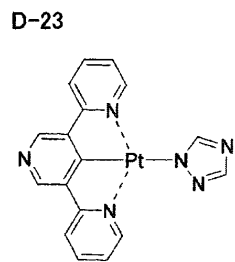
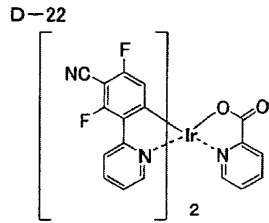
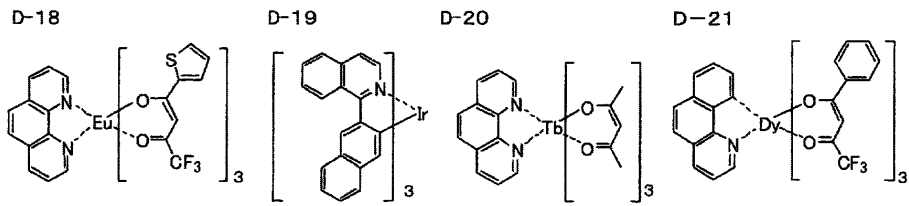
- <305> 수분 침투 방지층 (기체 차단벽 층) 으로서는, 규소 니트라이드 및 규소 옥사이드와 같은 무기 물질을 이용하는 것이 바람직하다. 수분 침투 방지층 (기체 차단벽 층) 은 예를 들어 고주파 스퍼터링법에 의해 형성될 수 있다.
- <306> 열가소성 기판을 사용하는 경우에는, 필요한 경우, 하드 코트층 및 언더 코트층이 추가로 제공될 수 있다.
- <307> 애노드:
- <308> 애노드는 유기층에 정공을 공급하는 전극의 기능을 갖기에 일반적으로 충분하다. 애노드의 형상, 구조 및 크기는 특별하게 한정되지는 않으며, 이들은 발광 장치의 의도하고 있는 용도 또는 목적에 따라, 공지된 전극 물질로부터 임의대로 선택할 수 있다. 상기된 바와 같이, 애노드는 일반적으로 투명 애노드로서 제공된다.
- <309> 애노드 물질로서, 예를 들어, 금속, 합금, 금속 옥사이드, 전기 전도성 화합물 및 이들 물질의 혼합물을 바람직하게 들 수 있다. 애노드 물질의 구체적인 예는 전기 전도성 금속 옥사이드, 예컨대 안티몬 또는 붓소로 도핑된 주석 옥사이드 (ATO, FTO), 주석 옥사이드, 아연 옥사이드, 인듐 옥사이드, 인듐 주석 옥사이드 (ITO), 인듐 아연 옥사이드 (IZO) 등, 금속, 예컨대 금, 은, 크롬, 니켈 등, 이들 금속과 전기 전도성 금속 옥사이드와의 혼합물 또는 적층물, 무기 전기 전도성 물질, 예컨대 구리 요오다이드, 구리 술파이드 등, 유기 전기 전도성 물질, 예컨대 폴리아닐린, 폴리티오펜, 폴리피롤 등, 이들 물질과 ITO 와의 적층물 등을 포함한다. 이들 물질 중, 생산성, 고 전도성, 투명성 등의 관점에서 볼 때, 전기 전도성 금속 옥사이드가 바람직하고, ITO 가 특히 바람직하다.
- <310> 애노드는 예를 들어, 습식법, 예컨대 인쇄법, 코팅법 등, 물리적 방법, 예컨대 진공 증착법, 스퍼터링법, 이온 도금법 등, 및 화학적 방법, 예컨대 CVD 방법, 플라즈마 CVD 방법 등으로부터, 애노드에 사용될 물질에 대한 안정성을 고려하여 임의대로 선택한 각종 방법에 따라 기관 상에 형성할 수 있다. 예를 들어, ITO 를 애노드 물질로서 선택한 경우에는, 애노드를 직류 또는 고주파 스퍼터링법, 진공 증착법, 이온 도금법 등에 따라 형성할 수 있다.
- <311> 본 발명의 장치에 있어서, 형성되는 애노드의 위치는 특별히 한정되지 않고, 어디에서라도 형성될 수 있다. 위치는 발광 장치의 의도하고 있는 용도 및 목적에 따라 임의대로 선택될 수 있으나, 기관 상에 형성되는 것이 바람직하다. 이러한 경우, 애노드는 기관의 일면의 전면에서 또는 일부에서 형성될 수 있다.
- <312> 애노드를 형성하는 패터닝으로서, 패터닝은 포토리소그래피와 같은 화학 에칭에 의해 수행할 수 있거나, 레이저에 의한 물리적 에칭에 의해 실시할 수 있거나, 포개놓은 마스크 상에 진공 증착 또는 스퍼터링으로써 수행할 수 있거나, 또는 리프트-오프법 및 인쇄법을 이용할 수 있다.
- <313> 애노드의 두께는 일반적으로 규정할 수 없고, 애노드의 물질에 따라 임의로 선택할 수 있으나, 그 두께는 통상 10 nm 내지 50 μm 정도, 바람직하게는 50 nm 내지 20 μm 이다.
- <314> 애노드의 저항값은 바람직하게는 $10^3 \Omega/\square$ 이하, 더욱 바람직하게는 $10^2 \Omega/\square$ 이하이다. 애노드가 투명한 경우에는, 애노드는 무색 투명하거나 또는 유색 투명할 수 있다. 투명한 애노드 측으로부터 발광을 얻기 위해서는, 투과율은 바람직하게는 60 % 이상, 더욱 바람직하게는 70 % 이상이다.
- <315> 투명 애노드와 관련하여, 상세한 설명이 Yutaka Sawada 가 감수한 문헌 [Tomei Denkyoku-Maku no Shintenkai (New Development in Transparent Electrode Films), CMC Publishing Co., Ltd (1999)] 에서 발견되며, 이는 본 발명에 참조될 수 있다. 내열성이 낮은 플라스틱 기재를 사용하는 경우, ITO 또는 IZO 를 이용하고, 150 $^{\circ}\text{C}$ 이하의 저온에서 투명한 애노드 필름을 형성하는 것이 바람직하다.
- <316> 캐소드:
- <317> 캐소드는 일반적으로 유기층에 전자를 주입하는 전극의 기능을 갖는 데 충분하다. 캐소드의 형상, 구조 및 크기는 특별히 한정되지 않으며, 이들은 발광 장치의 의도하고 있는 용도 또는 목적에 따라, 공지된 전극 물질로부터 임의대로 선택될 수 있다.
- <318> 캐소드의 물질로서, 예를 들어, 금속, 합금, 금속 옥사이드, 전기 전도성 화합물, 및 이들 물질의 혼합물을 들 수 있다. 캐소드 물질의 구체적인 예에는 알칼리 금속 (예를 들어, Li, Na, K, Cs 등), 알칼리토금속 (예를 들어, Mg, Ca 등), 금, 은, 납, 알루미늄, 소듐-포타슘 합금, 리튬-알루미늄 합금, 마그네슘-은 합금, 인듐, 희토 금속, 예를 들어, 이테르븀 등이 포함된다. 이들 물질은 한 종류를 단독으로 사용할 수 있으나, 안정성 및 전자 주입성의 양립성 관점으로 볼 때, 둘 이상 종류의 물질을 병용하는 것이 바람직하다.

- <319> 캐소드를 구성하는 물질로서, 알칼리 금속 및 알칼리토 금속이 전자 주입성 면에서 바람직하고, 알루미늄을 주로 포함하는 물질이 그의 뛰어난 보존 안정성 면에서 바람직하다.
- <320> 알루미늄을 주로 포함하는 물질은 알루미늄 단독, 0.01 내지 10 질량%의 알칼리 금속 또는 알칼리토금속을 갖는 알루미늄의 합금 또는 이들의 혼합물 (예컨대 리튬-알루미늄 합금 및 마그네슘-알루미늄 합금 등) 을 의미한다.
- <321> 캐소드 물질은 JP-A-2-15595 및 JP-A-5-121172 에 상세하게 개시되어 있으며, 상기 특허에서 기술된 물질을 또한 본 발명에서도 사용할 수 있다.
- <322> 캐소드는 특별한 한정 없이 공지된 방법에 의해 형성할 수 있다. 예를 들어, 캐소드를 구성하고 있는 물질에 대한 적합성을 고려하여, 습식법, 예컨대 인쇄법, 코팅법 등, 물리적 방법, 예컨대 진공 증착법, 스퍼터링법, 이온 도금법 등, 및 화학적 방법, 예컨대 CVD 방법, 플라즈마 CVD 방법 등에 따라 형성할 수 있다.
 예를 들어, 금속을 캐소드 물질로서 선택하는 경우에는, 하나 또는 둘 이상 종류의 상기 물질을 동시에 또는 스퍼터링법 등으로 순서 있게 캐소드를 형성할 수 있다.
- <323> 캐소드를 형성하는 패터닝 방법은 포토-리소그래피에 의한 방법과 같은 화학적 에칭에 의해 수행될 수 있거나, 레이저에 의한 방법과 같은 물리적 에칭에 의해 실시할 수 있거나, 포개놓은 마스크 상에 진공 증착 또는 스퍼터링으로써 수행할 수 있거나, 또는 리프트-오프법 및 인쇄법을 이용할 수 있다.
- <324> 형성될 캐소드의 위치는 특별히 한정되지 않으며, 본 발명 어디에서든지 형성될 수 있다. 캐소드는 유기층의 전면 상에 형성될 수 있거나 또는 일부에서 형성될 수 있다.
- <325> 알칼리 금속 또는 알칼리토금속의 플루오라이드 또는 옥사이드를 포함하는 유전체층이, 0.1 내지 5 nm 의 두께로 캐소드와 유기층 사이에 삽입될 수 있다. 상기 유전체층은 전자 주입층의 한 종류로 간주할 수 있다. 유전체층은, 예를 들어, 진공 증착법, 스퍼터링법, 이온 도금법 등에 따라 형성될 수 있다.
- <326> 캐소드의 두께는 일반적으로 규정할 수 없고, 캐소드의 물질에 따라 임의로 선택할 수 있으나, 일반적으로 두께는 10 nm 내지 5 μm 정도, 바람직하게는 50 nm 내지 1 μm 이다.
- <327> 캐소드는 투명하거나 또는 불투명할 수 있다. 투명한 캐소드는, 두께가 1 내지 10 nm 인 캐소드 물질의 박막을 형성하고, 투명 전도성 물질, 예컨대 ITO 및 IZO 를 추가로 적층함으로써 형성할 수 있다.
- <328> 유기층:
- <329> 본 발명의 유기층을 하기에 설명할 것이다.
- <330> 본 발명의 장치는 발광층을 포함하는 유기층을 적어도 하나 갖는다. 발광층 이외의 유기층으로서, 앞서 기술된 바와 같은 정공 수송층, 전자 수송층, 전하 차단층, 정공 주입층 및 전자 주입층을 들 수 있다.
- <331> 유기층의 형성:
- <332> 본 발명의 장치에서, 유기층을 구성하는 각각의 층은 건조-필름 형성 법, 예컨대 진공 증착법, 스퍼터링법 등, 전사법 (transfer method) 및 인쇄법 중 어느 것이든지 이에 의해 바람직하게 형성될 수 있다.
- <333> -발광층-
- <334> 발광층은, 전계 적용 때에, 애노드, 정공 주입층 또는 정공 수송층으로부터 정공을 받고, 캐소드, 전자 주입층 또는 전자 수송층으로부터 전자를 받아서, 정공과 전자를 재결합시켜, 광을 방출시키는 기능을 갖는 층이다.
 발광층은 하나의 층을 포함할 수 있거나 또는 두 개 이상의 층을 포함할 수 있고, 둘 이상의 층을 포함하는 경우에는, 각 층은 상이한 발광색으로 광을 방출할 수 있다.
- <335> 본 발명에서 발광층은 발광 물질 단독으로 이루어질 수 있거나, 또는 호스트 물질 및 발광 물질의 혼합층을 포함할 수 있다.
- <336> 본원에서, 호스트 물질이란, 발광층을 구성하는 물질들 중 발광 물질 이외의 물질이며, 발광 물질을 분산시키고 발광층에 분산물을 유지시키는 기능, 애노드 및 정공 수송층으로부터의 정공을 받는 기능, 캐소드 및 전자 수송층으로부터 전자를 받는 기능, 정공 및 전자 중 적어도 하나를 수송시키는 기능, 정공 및 전자의 재결합 장소를 제공하는 기능, 재결합에 의해 발생한 여기자의 에너지를 발광 물질에 이동시키는 기능, 및 정공 및 전자 중 적어도 하나를 발광 물질에 수송시키는 기능 중 적어도 한 기능을 가진 물질을 의미한다.

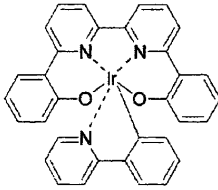
- <337> 호스트 물질은 전자 수송 물질인 것이 바람직하다. 호스트 물질은 한 종류를 단독으로 사용할 수 있거나, 또는 두 종류 이상을 이용할 수 있다. 예를 들어, 전자 수송 호스트 물질과 정공 수송 호스트 물질의 혼합 구성물을 들 수 있다. 또한, 전자 수송성이 없고 발광하지 않는 물질을 발광층에 함유할 수 있다.
- <338> 본 발명에서 발광층에 함유되는 발광층으로서, 예를 들어 카르바졸 구조를 갖는 것, 디아릴아민 구조를 갖는 것, 피리딘 구조를 갖는 것, 피라진 구조를 갖는 것, 트리아진 구조를 갖는 것, 아릴실란 구조를 갖는 것 및 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층의 항목에서 후술될 물질을 들 수 있다.
- <339> 본 발명에서 사용가능한 형광 물질의 예는 벤족사졸 유도체, 벤즈이미다졸 유도체, 벤조티아졸 유도체, 스티릴 벤젠 유도체, 폴리페닐 유도체, 디페닐부타디엔 유도체, 테트라페닐부타디엔 유도체, 나프탈이미드 유도체, 쿠마린 유도체, 축합 방향족 화합물, 페리논 유도체, 옥사디아졸 유도체, 옥사진 유도체, 알다진 유도체, 피라리딘 유도체, 시클로펜타디엔 유도체, 비스스티릴안트라센 유도체, 퀴나크리돈 유도체, 피롤로피리딘 유도체, 티아디아졸로피리딘 유도체, 시클로펜타디엔 유도체, 스티릴아민 유도체, 디케토피롤로피롤 유도체, 방향족 디메틸리딘 화합물, 8-퀴놀리놀 유도체의 금속 착물 및 피로메텐 유도체의 금속 착물로 대표되는 각종 금속 착물, 중합체 화합물, 예컨대 폴리티오펜, 폴리페닐렌, 폴리페닐렌비닐렌 등 및 유기 실란 유도체와 같은 화합물이 포함된다.
- <340> 본 발명에서 단독으로 또는 조합하여 사용할 수 있는 인광 물질의 예에는 전이 금속 원자 또는 란탄계 원자를 포함하는 착물이 포함된다.
- <341> 전이 금속 원자는 특별히 한정되지는 않지만, 바람직하게는 루테튬, 로듐, 팔라듐, 텅스텐, 레늄, 오스뮴, 이리듐 및 백금을 들 수 있으며, 더욱 바람직하게는 레늄, 이리듐 및 백금이다.
- <342> 란탄계 원자로서, 란탄, 세륨, 프라세오디뮴, 네오디뮴, 사마륨, 유로퓸, 가돌리늄, 테르븀, 디스프로슘, 홀뮴, 에르븀, 툴륨, 이테르븀 및 루테튬을 들 수 있다. 이들 란탄계 원자 중, 네오디뮴, 유로퓸 및 가돌리늄이 바람직하다.
- <343> 착물의 리간드의 예로서, 예를 들어, 문헌 [G. Wilkinson 등, Comprehensive Coordination Chemistry, Pergamon Press (1987); H. Yersin, Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds, Springer-Verlag (1987); 및 Akio Yamamoto, Yuki Kinzoku Kagaku-Kiso to Oyo-(Organic Metal Chemistry -Elements and Applications), Shokabo Publishing Co. (1982)] 에 기술된 리간드를 들 수 있다.
- <344> 리간드의 구체적인 예는 할로젠 리간드 (바람직하게는 염소 리간드), 질소-함유 헤테로시클릭 리간드 (예를 들어, 페닐피리딘, 벤조퀴놀린, 퀴놀리놀, 비피리딜, 페난트롤린, 등), 디케톤 리간드 (예를 들어, 아세틸아세톤, 등), 카르복실산 리간드 (예를 들어, 아세트산 리간드, 등), 일산화탄소 리간드, 이소니트릴 리간드 및 시아노 리간드를 바람직하게 들 수 있는데, 더욱 바람직하게는 질소-함유 헤테로시클릭 리간드를 들 수 있다. 이러한 착물은 화합물 내에 하나의 전이 금속 원자를 가질 수 있거나, 또는 둘 이상의 전이 금속 원자를 갖는 소위 다핵 착물일 수 있다. 이는 동시에 상이한 금속 원자를 포함할 수 있다.
- <345> 상기 이리듐 착물 인광물질과 병용 가능한 발광물질의 구체적인 예로서는, 예를 들어 하기의 화합물을 들 수 있지만, 본 발명이 이들로 한정되지는 않는다.



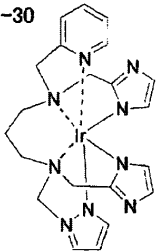
<346>



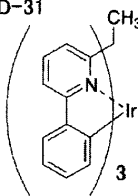
D-29



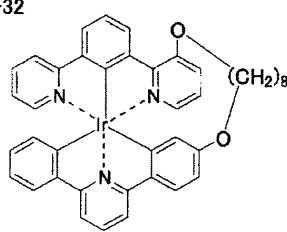
D-30



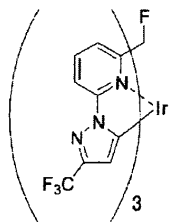
D-31



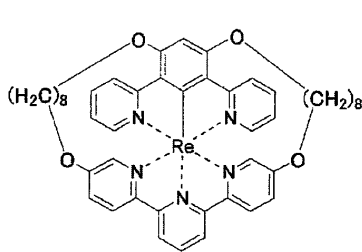
D-32



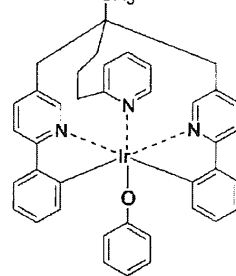
D-33



D-34



D-35



<348>

<349>

이리듐 착물 인광 물질을 함유하는 본 발명의 인광 물질은 발광층 내에 바람직하게는 0.1 내지 40 질량%, 더욱 바람직하게는 0.5 내지 20 질량%의 양으로 포함된다. 본 발명의 인광 물질 이외의 인광 물질이 병용되는 경우에는, 본 발명의 인광 물질은 인광 물질들의 모든 양을 기준으로 바람직하게는 50 질량% 이상의 비율로, 더욱 바람직하게는 80 질량% 이상의 비율로 포함된다.

<350>

본 발명의 발광층 내 포함된 호스트 물질로서, 화학식 (I)로 나타낸 화합물을 들 수 있으나, 상기 화합물 이외의 호스트 물질도 병용될 수 있다. 예를 들어, 본 발명 이외에, 카르바졸 구조를 갖는 것들, 디아릴아민 구조를 갖는 것들, 피리딘 구조를 갖는 것들, 피라진 구조를 갖는 것들, 트리아진 구조를 갖는 것들, 아릴실란 구조를 갖는 것들, 및 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층의 항목에서 후술될 물질을 들 수 있다. 병용될 수 있는 호스트 물질은 화학식 (I)로 나타낸 화합물의 90 질량% 이하, 더욱 바람직하게는 50 질량% 이하, 특히 바람직하게는 10 질량% 이하의 비율로 발광층 내 포함된다.

<351>

발광층의 두께는 특별히 한정되지 않으나, 바람직하게는 1 nm 내지 500 nm, 더욱 바람직하게는 5 nm 내지 200 nm, 보다 더욱 바람직하게는 10 nm 내지 100 nm 인 것이 일반적이다.

<352>

정공 주입층 및 정공 수송층:

<353>

정공 주입층 및 정공 수송층은 애노드 또는 애노드 측으로부터 정공을 받아 그 정공을 캐소드 측으로 수송하는 기능을 하는 층이다. 정공 주입층 및 정공 수송층은 구체적으로는 카르바졸 유도체, 트리아졸 유도체, 옥사졸 유도체, 옥사디아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 폴리아릴알칸 유도체, 피라졸린 유도체, 피라졸론 유도체, 페닐렌디아민 유도체, 아릴아민 유도체, 아미노-치환된 찰콘 유도체, 스티릴안트라센 유도체, 플루오레논 유도체, 히드라존 유도체, 스티렌 유도체, 실라잔 유도체, 방향족 3차 아민 화합물, 스티릴아민 화합물, 방향족 디메틸리딘 화합물, 포르피린 화합물, 유기 실란 유도체, 탄소, 및 페닐아졸 또는 페닐아진을 리간드로서 갖는 Ir 착물로 나타내는 각종 금속 착물을 함유하는 층이 바람직하다.

<354>

구동 전압의 저감의 관점에서, 정공 주입층 및 정공 수송층의 두께는 각각 500 nm 이하인 것이 바람직하다.

<355>

정공 수송층의 두께는 바람직하게는 1 nm 내지 500 nm, 더욱 바람직하게는 5 nm 내지 200 nm, 보다 더욱 바람직하게는 10 nm 내지 100 nm 이다. 정공 주입층의 두께는 바람직하게는 0.1 nm 내지 200 nm, 더욱 바람직하게는 0.5 nm 내지 100 nm, 보다 더욱 바람직하게는 1 nm 내지 100 nm 이다.

- <356> 정공 주입층 및 정공 수송층은 상기 물질 하나 또는 둘 이상을 포함하는 단일 층 구조일 수 있거나, 또는 상동 또는 상이한 조성물의 복수개의 층을 포함하는 다중층 구조일 수 있다.
- <357> 전자 주입층 및 전자 수송층:
- <358> 전자 주입층 및 전자 수송층은 캐소드 또는 캐소드 측으로부터 전자를 받아 그 전자를 애노드 측으로 수송하는 기능을 갖는 층이다. 전자 주입층 및 전자 수송층은 구체적으로 트리아졸 유도체, 옥사졸 유도체, 옥사디아졸 유도체, 이미다졸 유도체, 플루오레논 유도체, 안트라퀴노디메탄 유도체, 안트론 유도체, 디페닐퀴논 유도체, 티오피란 디옥사이드 유도체, 카르보다이미드 유도체, 플루오레닐리덴-메탄 유도체, 디스티릴피라진 유도체, 나프탈렌, 페틸렌 등과 같은 방향족 고리 테트라카르복실산 무수물, 프탈로시아닌 유도체, 8-퀴놀리놀 유도체의 금속 착물, 메탈프탈로시아닌, 벤족사졸 또는 벤조트리아졸을 리간드로서 갖는 금속 착물로 나타낸 각종 금속 착물, 유기 실란 유도체 등을 함유하는 층이 바람직하다.
- <359> 구동 전압 저감의 관점에서, 전자 주입층 및 전자 수송층의 두께는 각각 500 nm 이하인 것이 바람직하다.
- <360> 전자 수송층의 두께는 바람직하게는 1 nm 내지 500 nm, 더욱 바람직하게는 5 nm 내지 200 nm, 보다 더욱 바람직하게는 10 nm 내지 100 nm 이다. 전자 주입층의 두께는 바람직하게는 0.1 nm 내지 200 nm, 더욱 바람직하게는 0.2 nm 내지 100 nm, 보다 더욱 바람직하게는 0.5 nm 내지 50 nm 이다.
- <361> 전자 주입층 및 전자 수송층은 상기 물질 하나 또는 둘 이상을 포함하는 단일 층 구조일 수 있거나, 또는 상동 또는 상이한 조성의 복수층을 포함하는 다중층 구조일 수 있다.
- <362> 정공 차단층:
- <363> 정공 차단층은 애노드 측으로부터 발광층으로 수송된 정공이 캐소드 측을 향하여 통과하는 것을 방지하는 기능을 갖는 층이다. 본 발명에서는, 정공 차단층이 캐소드 측에서 발광층에 인접한 유기층으로서 제공될 수 있다.
- <364> 정공 차단층을 구성하는 유기 화합물의 예로서, 알루미늄 착물, 예컨대 BAlq, 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, 예컨대 BCP 를 들 수 있다.
- <365> 정공 차단층의 두께는 바람직하게는 1 nm 내지 500 nm, 더욱 바람직하게는 5 nm 내지 200 nm, 보다 더욱 바람직하게는 10 nm 내지 100 nm 이다.
- <366> 정공 차단층은 상기 물질 하나 또는 둘 이상을 포함하는 단일 층 구조일 수 있거나, 또는 상동 또는 상이한 조성의 복수층을 포함하는 다중층 구조일 수 있다.
- <367> 보호층:
- <368> 본 발명에서, 유기 EL 장치는 보호층으로 완전히 보호될 수 있다.
- <369> 보호층에 포함되는 물질로서는 예를 들어, 물, 산소 등의 장치 열화를 가속화시키는 물질이 장치 내에 들어오는 것을 억제할 수 있는 기능을 갖는 것이면 충분하다.
- <370> 상기 물질의 구체적인 예에는, 금속, 예컨대 In, Sn, Pb, Au, Cu, Ag, Al, Ti, Ni 등, 금속 옥사이드, 예컨대 MgO, SiO, SiO₂, Al₂O₃, GeO, NiO, CaO, BaO, Fe₂O₃, Y₂O₃, TiO₂ 등, 금속 니트라이드, 예컨대 SiN_x, SiN_xO_y 등, 금속 플루오라이드, 예컨대 MgF₂, LiF, AlF₃, CaF₂ 등, 폴리에틸렌, 폴리프로필렌, 폴리메틸 메타크릴레이트, 폴리이미드, 폴리우레아, 폴리테트라플루오로에틸렌, 폴리클로로트리플루오로에틸렌, 폴리디클로로디플루오로에틸렌, 클로로트리플루오로에틸렌과 디클로로디플루오로에틸렌과의 공중합체, 테트라플루오로에틸렌 및 적어도 하나의 공단량체를 포함하는 단량체 혼합물을 공중합하여 수득한 공중합체, 공중합체 주쇄에 시클릭 구조를 갖는 불소-함유 공중합체, 1 % 이상의 흡습율을 갖는 수분 흡수 물질, 0.1 % 이하의 흡습율을 갖는 방습 물질이 포함된다.
- <371> 보호층의 형성 방법은 특별히 한정되지 않으며, 예를 들어, 진공 증착법, 스퍼터링법, 반응성 스퍼터링법, MBE (분자 빔 에피택시) 법, 클러스터 이온빔법, 이온 도금법, 플라즈마 중합법 (고주파 여기 이온 도금법), 플라즈마 CVD 법, 레이저CVD 법, 열 CVD 법, 기체 소스 CVD 법, 코팅법, 인쇄법, 전사법 등을 본 발명에 적용할 수 있다.
- <372> 밀봉 용기:

- <373> 본 발명의 장치는 밀봉 용기에서 완전히 밀봉될 수 있다.
- <374> 또, 밀봉 용기와 발광 장치 사이의 공간에 수분 흡수제 또는 불활성 액체를 충전시킬 수 있다. 수분 흡수제로서는, 특별히 한정되지는 않지만, 예를 들어, 바륨 옥사이드, 소듐 옥사이드, 포타슘 옥사이드, 칼슘 옥사이드, 황산나트륨, 황산칼슘, 황산마그네슘, 포스포러스 펜톡사이드, 칼슘 클로라이드, 마그네슘 클로라이드, 구리 클로라이드, 세슘 플루오라이드, 니오븀 플루오라이드, 칼슘 브로마이드, 바나듐 브로마이드, 분자체, 제올라이트, 마그네슘 옥사이드 등을 들 수 있다. 불활성 액체로서는 특별히 한정되지는 않지만, 예를 들어, 파라핀, 액체 파라핀, 불소 용매, 예컨대 퍼플루오로알칸, 퍼플루오로아민, 퍼플루오로에테르 등, 염소 용매, 및 실리콘 오일을 들 수 있다.

<375> 구동 방법:

<376> 본 발명의 장치의 애노드와 캐소드 사이에 DC (필요에 따라 교류 인자를 포함할 수 있음) 전압 (통상 2 내지 15 V), 또는 직류 전류를 적용함으로써, 방출을 수득할 수 있다.

<377> 본 발명의 장치의 구동 방법에 대해서는, JP-A-2-148687, JP-A-6-301355, JP-A-5-29080, JP-A-7-134558, JP-A-8-234685, JP-A-8-241047, 일본 특허 2784615 및 U.S. 특허 5,828,429 및 6,023,308 에 기재된 구동 방법을 본 발명에 적용할 수 있다.

<378> 실시예

<379> 기타:

<380> 본 발명의 장치는, 디스플레이 장치, 디스플레이, 백라이트, 전자사진, 조명 광원, 기록 광원, 노광 광원, 판독 광원, 인디케이터, 간판, 인테리어 디자인, 광 통신 등에 바람직하게 사용될 수 있다.

<381> [실시예]

<382> 본 발명은 실시예에 의해 상세하게 설명할 수 있지만, 본 발명이 이들로 한정되는 것으로 해석되서는 안된다.

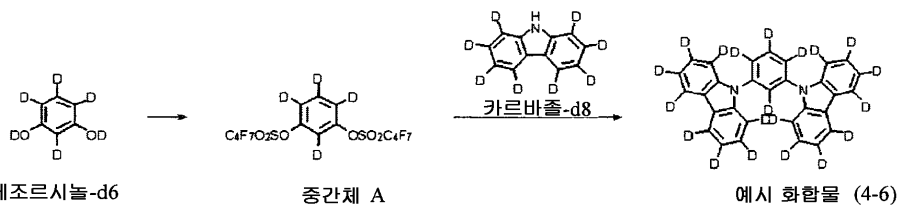
<383> 예시 화합물 합성:

<384> 예시 화합물 (1-3) 은 문헌 [Heterocycles, Vol. 67, No. 1,353-359 (2006)] 에 기술된 1 내지 8-위치에 중수소 원자를 포함한 카르바졸을 이용해, 4,4'-디브로모비페닐과, 팔라듐 촉매 및 구리 촉매를 이용해 커플링 시킴으로써 합성할 수 있다.

<385> 예시 화합물 (4-3) 은 예시 화합물 (1-3) 에서와 동일한 방법으로 1,3-디브로모벤젠과의 커플링으로써 합성할 수 있다.

<386> 예시 화합물 (12-3) 은, 예시 화합물 (1-3) 에서와 동일한 방식으로 문헌 [Tetrahedron, Vol. 54, No. 42, 12707-12714 (1998)] 에 기술된 3,6-디브로모-9-페닐카르바졸과의 커플링으로써, 합성할 수 있다.

<387> 예시 화합물 (4-6) 은 하기 방법에 따라 합성할 수 있다.

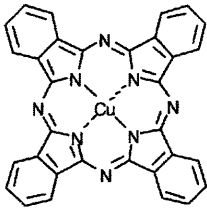


<388> 레조르시놀-d6 은 문헌 [J. Am. Chem. Soc., Vol. 126, No. 40, 13033-03043 (2004)] 에 기술된 방법에 따라 합성할 수 있다.

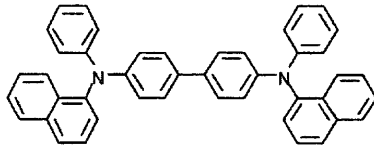
<390> 레조르시놀-d6 (4.6 g) 및 트리에틸아민 (14 ml) 을 탈수 아세트니트릴 (40 ml) 내에서 혼합한다. 반응 용기를 수조 (water bath) 내에서 냉각하면서, 노니플루오로부탄술포닐 플루오라이드 (15.5 ml) 를 첨가한다. 반응 혼합물을 실온에서 3 시간 동안 교반한 후, 물을 첨가하고, 헥산-에틸 아세테이트의 혼합 용매로 반응 용액으로부터 유기층을 추출한다. 추출된 유기층을 희석된 염산, 물 및 포화 염수의 순서로 세정하고, 무수 황산나트륨으로 건조시킨 후 용매를 감압하에서 증류시켜내어 25.9 g 의 중간체 A 의 미정제 (crude) 생성물을 수득한다.

- <391> 중간체 A 의 미정제 생성물 (13.6 g), 카르바졸-d8 (7.0 g), 비스(벤질리덴아세톤) 팔라듐 (0.56 g), XantPhos (CAS No.161265-03-8, 1.16 g) 및 루비듐 카르보네이트 (23 g) 을, 질소 분위기하, 톨루엔 (200 ml) 중 혼합하고, 혼합물을 가열 환류한다. 8 시간 경과 후, 비스(벤질리덴아세톤) 팔라듐 (0.28 g)을 추가로 첨가하고, 반응 혼합물을 추가 3 시간 동안 가열 환류한다. 반응 혼합물을 실온까지 냉각시킨 후, 물 및 에틸 아세테이트를 반응 혼합물에 첨가하고, 불용물을 여과함으로써 수득한 유기층을, 물 및 포화 염수로 세정하고, 무수 황산 나트륨으로 건조한다. 유기층을 감압하에서 농축해 수득한 미정제 생성물을, 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (부피비 20 을 가진 헥산/에틸 아세테이트의 혼합 용리액) 로 정제하고, 재결정화 및 승화 정제에 추가로 적용시켜 2.7 g 의 예시 화합물 (4-6) 을 수득한다.
- <392> 1,2-디브로모부탄을 내부 표준 물질로 하고, 중 (heavy) 클로로포름 및 중 디메틸 술폭사이드를 용매로 사용하는 ¹H-NMR 로 측정된 예시 화합물 (4-6) 의 중수소로의 전환도는 모든 위치에서 96% 이다.
- <393> 상기 제조 방법에 있어서, 정의된 치환기가 일정한 합성 방법의 조건하에서 변화하는 경우, 또는 그 방법을 실시하는데 부적절한 경우, 관능기의 보호 또는 탈보호 (예를 들어, T.W. Greene, Protective Groups in Organic Synthesis, John Wiley & Sons Inc. (1981)) 와 같은 수단에 의해 용이하게 제조가 가능하다. 또, 필요에 따라 치환기 도입 등과 같은 반응 공정의 순서를 임의로 변화시키는 것도 가능하다.
- <394> 유기 전계발광 장치의 제조 및 평가
- <395> (1) 비교예 1 의 유기 전계발광 장치의 제조
- <396> 0.5 mm 의 두께 및 2.5 cm 정사각형인 ITO 필름을 갖는 유리 기판 (Geomatec Co., Ltd. 제조, 표면 저항 10Ω/□) 을 세정기에 넣고, 2-프로판올 중에서 초음파 세정한 후, 30 분간 UV-오존 처리를 한다. 투명 애노드 (ITO 필름) 상에 진공 증착으로써, 하기의 유기층을 순서대로 증착한다.
- <397> 본 발명의 실시예에 있어서의 증착 속도는 달리 언급되지 않는 한 0.2 nm/초이다. 증착 속도는 석영 진동자 필름 형성 컨트롤러, CRTM-9000 (ULVAC, Inc. 제조) 로 측정한다. 이하에 나타난 각 필름의 필름 두께도 또한, CRTM-9000 의 수치 및 Dektak 필러 유형 두께 계량기로 측정된 두께로 작성한 검량선으로부터 계산한 것이다.
- <398> <1> 화합물 A: 필름 두께 : 80 nm
- <399> <2> 화합물 B: 필름 두께 : 10 nm
- <400> <3> 비교 화합물 1 + 발광 물질 A (10 중량%) 의 공-증착: 필름 두께: 60 nm
- <401> <4> 화합물 C: 필름 두께 : 10 nm
- <402> <5> 화합물 D: 필름 두께 : 30 nm
- <403> 마지막으로, 리튬 플루오라이드 0.1 nm 및 금속 알루미늄을 이 순서대로 100 nm 의 두께로 증착해 캐소드를 제조한다. 이것을 대기에 접하게 하지 않도록 아르곤 가스로 대체한 글로브 박스 내에 넣고, 스테인레스 스틸의 밀봉 캔 및 UV-경화형의 접착제 (XNR5516HV, Nagase Ciba 제조) 를 이용해 밀봉해 비교예 1 의 유기 전계 발광 장치를 수득한다.
- <404> (2) 비교예 2 내지 8 및 실시예 1 내지 8 의 유기 전계 발광 장치의 제조
- <405> 하기의 표 1 에 나타난 바와 같이, 하기에 나타난 구조를 가진 발광물질 A 를 발광 물질 B 내지 H로, 하기에 나타난 비교 화합물 1 을 비교 화합물 2, 예시 화합물 (1-3) 및 예시 화합물 (4-6) 로 변경하는 것을 제외하고는, 비교예 1 에서와 동일한 방법에 따라, 비교예 2 내지 8 및 실시예 1 내지 8 의 유기 전계 발광 장치를 제조한다.

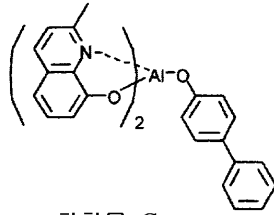
<406> 화합물 A 내지 D 의 화학 구조를 하기에 나타낸다.



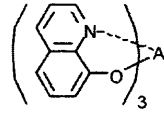
화합물 A



화합물 B



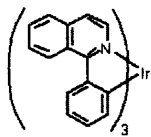
화합물 C



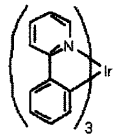
화합물 D

<407>

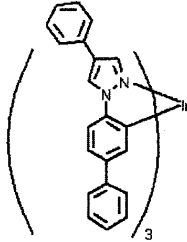
<408> 발광 물질 A 내지 H 의 화학 구조 및 용액 상태의 방출 파장을 하기에 나타낸다.



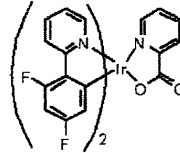
발광 물질 A
(620 nm)



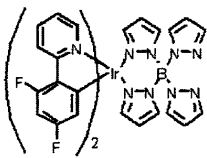
발광 물질 B
(514 nm)



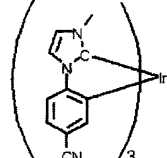
발광 물질 C
(478 nm)



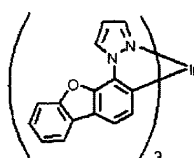
발광 물질 D
(466 nm)



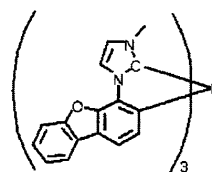
발광 물질 E
(460 nm)



발광 물질 F
(458 nm)



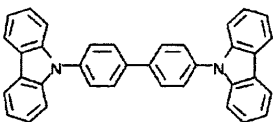
발광 물질 G
(456 nm)



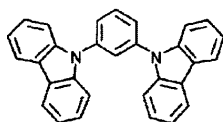
발광 물질 H
(444 nm)

<409>

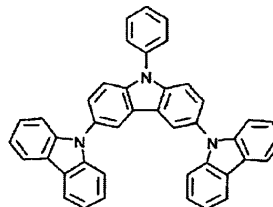
<410> 비교 화합물 1 내지 3 의 화학 구조를 하기에 나타낸다.



비교 화합물 1



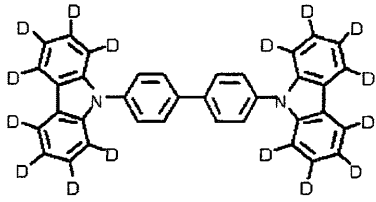
비교 화합물 2



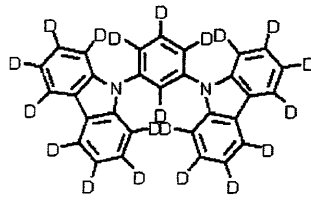
비교 화합물 3

<411>

<412> 예시 화합물 (1-3) 및 (4-6) 의 화학 구조를 하기에 나타낸다.



예시 화합물 (1-3)



예시 화합물 (4-6)

<413>
<414> 수득된 유기 전계발광 장치는 하기 방법에 따라 평가한다.

<415> (1) 구동 전압의 측정

<416> 유기 전계발광 장치 각각을 방출 스펙트럼 측정 시스템인 ELS1500 (Shimadzu Corporation 제조) 상에 세팅해, 휘도가 100 Cd/m² 일 때 적용된 전압을 측정한다.

<417> (2) 구동 내구성의 평가

<418> 유기 전계 발광 장치 각각을, OLED 테스트 시스템 ST-D 형 (TSK Co. 제조) 상에 세팅하고, 그 장치를 정전류 모드에서 정 방향 정전류 0.4 mA 의 조건으로 구동시켜, 휘도 반감기 (휘도가 초기 휘도의 50% 로 저하할 때까지 요구되는 시간) 을 발견한다.

<419> 유기 전계 장치의 평가 결과는 하기 표 1 에 나타내 바와 같다. 구동 전압 및 휘도 반감시간에 관해서는, 동일한 발광 물질을 사용한 비교예와 실시예의 조합으로, 비교예의 결과를 100 으로 하는 상대값으로 실시예의 결과를 나타낸다.

표 1

| 실시예 번호 | 발광물질 | 발광물질 과 증착되는 물질 | 구동전압의 상대값 | 휘도 반감시간의 상대값 |
|--------|--------|----------------|-----------|--------------|
| 비교예 1 | 발광물질 A | 비교 화합물 1 | 100 | 100 |
| 실시예 1 | 발광물질 A | 예시 화합물 (1-3) | 95 | 110 |
| 비교예 2 | 발광물질 B | 비교 화합물 1 | 100 | 100 |
| 실시예 2 | 발광물질 B | 예시 화합물 (1-3) | 97 | 115 |
| 비교예 3 | 발광물질 C | 비교 화합물 2 | 100 | 100 |
| 실시예 3 | 발광물질 C | 예시 화합물 (4-6) | 95 | 112 |
| 비교예 4 | 발광물질 D | 비교 화합물 2 | 100 | 100 |
| 실시예 4 | 발광물질 D | 예시 화합물 (4-6) | 90 | 140 |
| 비교예 5 | 발광물질 E | 비교 화합물 2 | 100 | 100 |
| 실시예 5 | 발광물질 E | 예시 화합물 (4-6) | 92 | 135 |
| 비교예 6 | 발광물질 F | 비교 화합물 2 | 100 | 100 |
| 실시예 6 | 발광물질 F | 예시 화합물 (4-6) | 90 | 160 |
| 비교예 7 | 발광물질 G | 비교 화합물 2 | 100 | 100 |
| 실시예 7 | 발광물질 G | 예시 화합물 (4-6) | 80 | 210 |
| 비교예 8 | 발광물질 H | 비교 화합물 2 | 100 | 100 |
| 실시예 8 | 발광물질 H | 예시 화합물 (4-6) | 85 | 180 |

<420>
<421> 상기 결과로 볼 때, 화학식 (I) 로 나타낸 화합물 및 이리듐 착물 인광 물질을 조합해 사용한 본 발명의 유기

전계발광 장치가 현저한 효과를 가지며, 특히 조합된 발광 물질의 발광 파장이 짧을 수록, 더욱 현저한 효과를 나타낸다.

<422> (2) 비교예 2-1 내지 2-13 및 실시예 2-1 내지 2-7 의 유기 전계발광 장치의 제조 및 평가:

<423> 비교예 1 의 장치 내 발광 물질 A 및 비교 화합물 1 을, 하기 표 2 에 나타난 발광 물질 및 발광 물질과 공증착되는 물질 (호스트 물질) 의 조합으로 변경하는 것을 제외하고는 비교예 2-1 내지 2-13 및 실시예 2-1 내지 2-7 의 장치를 비교예 1 에서와 동일한 방식으로 제조하고, 동일한 방법으로 평가한다. 수득한 결과를 표 2 에 나타낸다. 그러나, 비교예 2-5* 및 실시예 2-5** 의 장치는, 비교예 1 의 비교 화합물 1 을 함유하는 층과 화합물 B 를 함유하는 층 사이에, 두께가 3 nm 인 비교 화합물 3 을 함유하는 층 및 두께가 3 nm 인 예시 화합물 (12-2) 을 함유하는 층 각각을 갖는다.

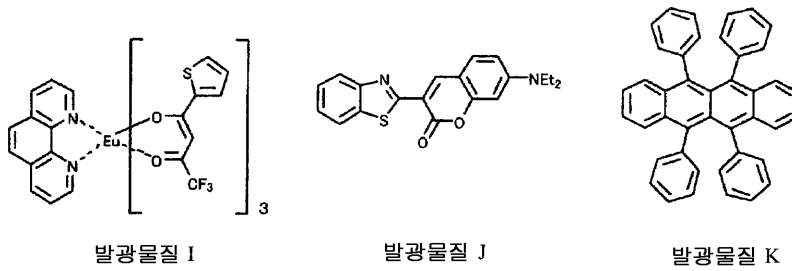
표 2

| 실시에 번호 | 발광물질 | 발광물질과 공증착되는 물질 | 구동전압의 상대값 | 취도 반감시간의 상대값 |
|-----------|--------|----------------|-----------|--------------|
| 비교예 2-1 | 발광물질 E | 비교 화합물 4 | 100 | 100 |
| 실시예 2-1 | 발광물질 E | 예시 화합물 (2-3) | 95 | 140 |
| 비교예 2-2 | 발광물질 E | 비교 화합물 5 | 100 | 100 |
| 실시예 2-2 | 발광물질 E | 예시 화합물 (3-1) | 98 | 130 |
| 비교예 2-3 | 발광물질 E | 비교 화합물 6 | 100 | 100 |
| 실시예 2-3 | 발광물질 E | 예시 화합물 (5-3) | 90 | 135 |
| 비교예 2-4 | 발광물질 G | 비교 화합물 7 | 100 | 100 |
| 실시예 2-4 | 발광물질 G | 예시 화합물 (8-2) | 98 | 200 |
| 비교예 2-5* | 발광물질 G | 비교 화합물 7 | 100 | 100 |
| 실시예 2-5** | 발광물질 G | 예시 화합물 (8-2) | 95 | 220 |
| 비교예 2-6 | 발광물질 G | 비교 화합물 8 | 100 | 100 |
| 실시예 2-6 | 발광물질 G | 예시 화합물 (9-5) | 89 | 190 |
| 비교예 2-7 | 발광물질 G | 비교 화합물 9 | 100 | 100 |
| 실시예 2-7 | 발광물질 G | 예시 화합물 (14-3) | 87 | 195 |
| 비교예 2-8 | 발광물질 I | 비교 화합물 1 | 100 | 100 |
| 비교예 2-9 | 발광물질 I | 예시 화합물 (1-3) | 98 | 110 |
| 비교예 2-10 | 발광물질 J | 비교 화합물 4 | 100 | 100 |
| 비교예 2-11 | 발광물질 J | 예시 화합물 (2-3) | 95 | 105 |
| 비교예 2-12 | 발광물질 K | 비교 화합물 2 | 100 | 100 |
| 비교예 2-13 | 발광물질 K | 예시 화합물 (4-1) | 97 | 103 |

* 두께가 3nm인 비교화합물 8을 함유하는 층을 지님.

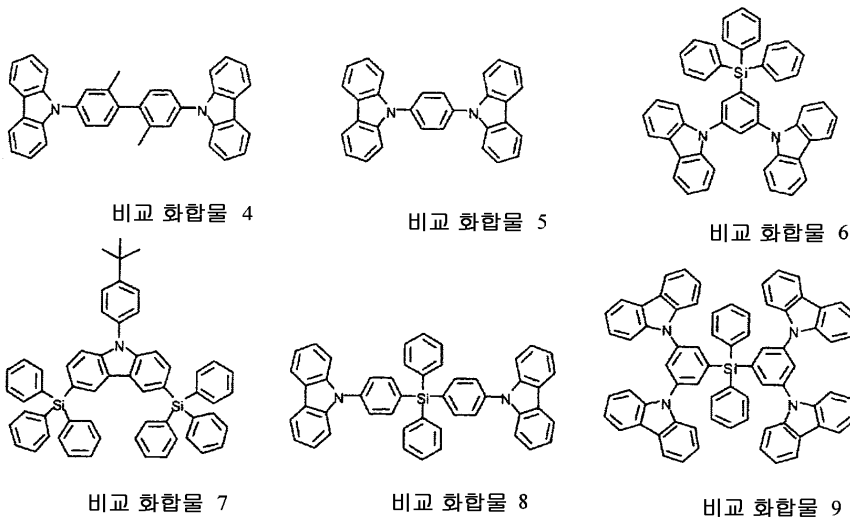
** 두께가 3nm인 예시 화합물 (12-2)을 함유하는 층을 지님.

<425> 발광 물질 I 내지 K 의 화학 구조는 하기에 나타낸다.



<426>

<427> 비교 화합물 4 내지 9 의 화학 구조는 하기에 나타낸다.



<428>

<429> 표 2 에 나타낸 결과로 볼 때, 화학식 (I) 로 나타낸 화합물 및 이리듐 착물 인광 물질을 조합한 구현예에 있어서, 본 발명의 유기 전계 발광 장치는 특히 현저한 효과를 가지며, 발광층 이외의 층에서 사용된 경우에도 효과를 보인다.

<430> (3) 비교예 3-1 및 3-2 및 실시예 3-1 및 3-2 의 유기 전계발광 장치의 제조 및 평가:

<431> 비교예 1 의 비교 화합물 1 및 화합물 B 를 하기 표 3 에 나타낸 물질로 변경한 것 이외에는, 비교예 3-1 및 3-2, 및 실시예 3-1 및 3-2 의 장치를 비교예 1 에서와 동일한 방법으로 제조하고 동일한 방법으로 평가한다. 수득한 결과를 표 3 에 나타낸다.

표 3

| 발광장치 | 화합물 B의 층 | 비교 화합물 1의 층 | 구동전압의 상대값 | 휘도반감시간의 상대값 |
|---------|--------------|--------------|-----------|-------------|
| 비교예 3-1 | 비교 화합물 5 | 비교 화합물 1 | 100 | 100 |
| 실시예 3-1 | 예시 화합물 (3-3) | 비교 화합물 1 | 97 | 130 |
| 비교예 3-2 | 비교 화합물 5 | 비교 화합물 1 | 100 | 100 |
| 실시예 3-2 | 예시 화합물 (3-3) | 예시 화합물 (1-3) | 89 | 205 |

<432>

<433> 표 3 에서의 결과로부터, 본 발명의 효과는 발광층에 인접하는 유기층에서 화학식 (I) 로 나타낸 화합물을 사용함으로써 수득할 수도 있고, 발광층과 발광층에 인접하는 유기층 각각에서 화학식 (I) 로 나타낸 화합물을 이용함으로써 특히 현저한 효과를 수득할 수 있는 것을 알 수 있다.

<434> (4) 비교예 4-1 및 4-2 의 유기 전계발광 장치의 제조 및 평가

<435> 비교예 1 의 유기 전계발광 장치에서 사용한 비교 화합물 1 및 화합물 C 를 하기 표 4 에 나타낸 물질로 변경한 것을 제외하고는 비교예 4-1 및 4-2 의 장치를 비교예 1 에서와 동일한 방법으로 제조하고 동일한 방법으로 평가한다. 수득한 결과를 표 4 에 나타낸다.

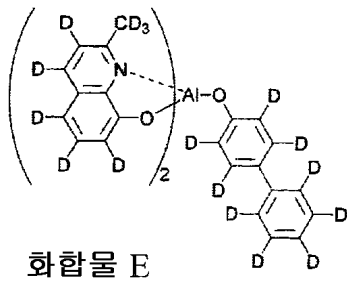
표 4

| 발광장치 | 비교 화합물 1의 층 | 화합물 C의 층 | 구동전압의 상대값 | 휘도 반감시간의 상대값 |
|---------|-------------|----------|-----------|--------------|
| 비교예 4-1 | 비교 화합물 2 | 화합물 C | 100 | 100 |
| 비교예 4-2 | 비교 화합물 2 | 화합물 E | 98 | 103 |

<436>

<437>

화합물 E 의 화학 구조는 하기에 나타낸 바와 같다.



<438>

<439>

표 4 에서, 화합물 C 를 사용하는 경우 및 화합물 C 를 중수소화시킴으로써 수득한 화합물 E 를 사용한 경우에, 구동 전압 및 휘도의 반감 시간에 있어서 차이점은 거의 없었다.

<440>

표 1 및 표 4 의 결과는, 본 발명의 효과가 화합물의 중수소화에 의해 수득되어지는 것이 아니라, 특정의 구조를 갖고 중수소 원자를 포함하는 화학식 (I) 로 나타낸 화합물을 이용함으로써, 특유의 효과가 수득되는 것임을 나타낸다.

<441>

본 발명은 효율 (소비 전력) 및 내구성이 우수한 유기 전계발광 장치를 제공할 수 있다.

<442>

외국 우선권의 이익이 본 출원에서 주장되어 있는, 각각 및 모든 외국 특허 출원의 전 개시는, 이를 온전히 진술하듯이 본원에서 참조 인용된다.