



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2020년02월27일  
(11) 등록번호 10-2082373  
(24) 등록일자 2020년02월21일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07D 241/40 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)  
H01L 51/50 (2006.01) H05B 33/14 (2006.01)  
(21) 출원번호 10-2012-0091986  
(22) 출원일자 2012년08월22일  
심사청구일자 2017년08월01일  
(65) 공개번호 10-2013-0027420  
(43) 공개일자 2013년03월15일  
(30) 우선권주장  
JP-P-2011-189086 2011년08월31일 일본(JP)  
JP-P-2012-152280 2012년07월06일 일본(JP)  
(56) 선행기술조사문헌  
KR1020110042004 A\*  
(뒷면에 계속)

(73) 특허권자  
가부시킴가이샤 한도오따이 에네루기 켄큐쇼  
일본국 가나가와켄 아쓰기시 하세 398  
(72) 발명자  
타카스 타카코  
일본국 243-0036 가나가와켄 아쓰기시 하세 398  
가부시킴가이샤 한도오따이 에네루기 켄큐쇼 내  
오사카 하루에  
일본국 243-0036 가나가와켄 아쓰기시 하세 398  
가부시킴가이샤 한도오따이 에네루기 켄큐쇼 내  
시타가키 사토코  
일본국 243-0036 가나가와켄 아쓰기시 하세 398  
가부시킴가이샤 한도오따이 에네루기 켄큐쇼 내  
(74) 대리인  
황의만

전체 청구항 수 : 총 14 항

심사관 : 지무근

(54) 발명의 명칭 복소환 화합물, 발광 소자, 발광 장치, 전자 기기, 조명 장치 및 유기 화합물

(57) 요약

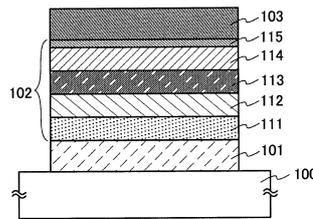
본 발명은, 발광 소자에서, 발광층의 발광 물질을 분산시키는 호스트 재료로서 사용할 수 있는 신규의 복소환 화합물을 제공한다.

화학식 G1으로 나타내어지는 복소환 화합물을 제공한다. R<sup>1</sup> 내지 R<sup>10</sup>은, 어느 하나가 화학식 G1-1으로 나타내어

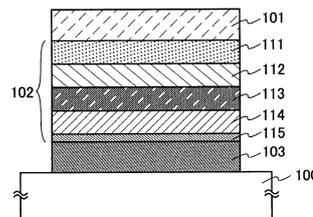
(뒷면에 계속)

대표도 - 도1

(A)



(B)



지는 치환기를 나타내고, 다른 어느 하나가 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 치환 또는 무치환의 비페닐기, 또는 화학식 G1-2로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 나머지는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다.  $a^1$  및  $a^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고,  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

(56) 선행기술조사문헌

KR1020110077930 A\*

W02010074087 A1

JP2010222268 A

JP2007189001 A

JP2007070361 A

JP2006016384 A

JP2003040873 A

\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

명세서

청구범위

청구항 1

식 G1로 나타내어지는 유기 화합물로서,

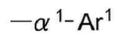


상기 식 G1에서,

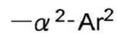
R<sup>1</sup>은 식 G1-1로 나타내어지는 치환기를 나타내고,

R<sup>2</sup>는 수소를 나타내고,

R<sup>3</sup> 내지 R<sup>10</sup>의 어느 하나는 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 치환 또는 무치환의 비페닐기, 또는 식 G1-2로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 나머지는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타내고,



(G1-1)



(G1-2)

상기 식 G1-1 및 상기 식 G1-2에 있어서,

상기 식 G1-1 중의 α<sup>1</sup> 및 상기 식 G1-2 중의 α<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고,

상기 식 G1-1 중의 Ar<sup>1</sup> 및 상기 식 G1-2 중의 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타내는, 유기 화합물.

청구항 2

삭제

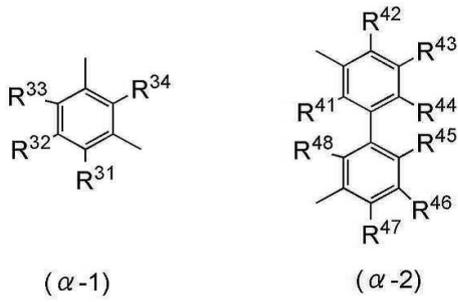
청구항 3

삭제

청구항 4

제 1 항에 있어서,

$a^1$  및  $a^2$ 가 각각 독립적으로 식  $a-1$  또는 식  $a-2$ 로 나타내어지고,



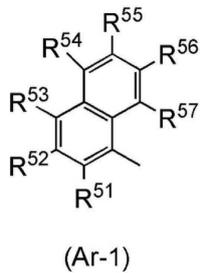
상기 식  $a-1$  및 상기 식  $a-2$ 에 있어서,

상기 식  $a-1$  중의  $R^{31}$  내지  $R^{34}$  및 상기 식  $a-2$  중의  $R^{41}$  내지  $R^{48}$ 은, 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 치환 또는 무치환의 비페닐기, 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타내는, 유기 화합물.

### 청구항 5

제 1 항에 있어서,

$Ar^1$  및  $Ar^2$ 가 식  $Ar-1$ 로 나타내어지고,



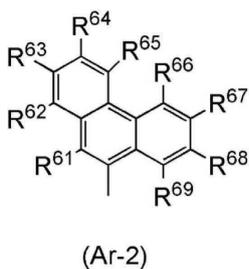
상기 식  $Ar-1$ 에 있어서,

$R^{51}$  내지  $R^{57}$ 은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타내는, 유기 화합물.

### 청구항 6

제 1 항에 있어서,

$Ar^1$  및  $Ar^2$ 가 식  $Ar-2$ 로 나타내어지고,



상기 식 Ar-2에 있어서,

R<sup>61</sup> 내지 R<sup>69</sup>는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타내는, 유기 화합물.

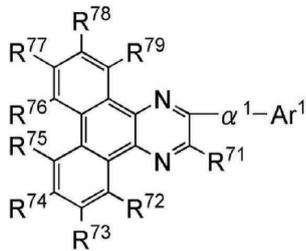
**청구항 7**

삭제

**청구항 8**

제 1 항에 있어서,

상기 유기 화합물은 식 G3으로 나타내어지고,



(G3)

상기 식 G3에 있어서,

R<sup>72</sup> 내지 R<sup>79</sup>는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타내고,

R<sup>71</sup>은 수소를 나타내고,

$\alpha^1$ 은 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고,

Ar<sup>1</sup>은 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타내는, 유기 화합물.

**청구항 9**

삭제

**청구항 10**

삭제

**청구항 11**

제 1 항에 따른 유기 화합물을 포함한 발광 장치로서,

한 쌍의 전극; 및

상기 한 쌍의 전극 사이에 상기 유기 화합물을 함유한 발광층을 더 포함하는, 발광 장치.

**청구항 12**

제 11 항에 있어서,  
상기 발광층은 발광 재료를 더 포함하는, 발광 장치.

**청구항 13**

제 12 항에 있어서,  
상기 발광 재료는 인광성 화합물인, 발광 장치.

**청구항 14**

제 11 항에 있어서,  
상기 한 쌍의 전극 중 하나와 상기 발광층 사이에, 상기 유기 화합물을 포함한 전자 수송층을 더 포함하는, 발광 장치.

**청구항 15**

제 14 항에 있어서,  
상기 전자 수송층은 상기 발광층과 접촉하는, 발광 장치.

**청구항 16**

제 14 항에 있어서,  
상기 한 쌍의 전극 중 상기 하나와 상기 전자 수송층 사이에 제 2 전자 수송층을 더 포함하는, 발광 장치.

**청구항 17**

전자 기기로서,  
제 11 항에 따른 발광 장치를 포함하는, 전자 기기.

**청구항 18**

조명 장치로서,  
제 11 항에 따른 발광 장치를 포함하는, 조명 장치.

**청구항 19**

삭제

**청구항 20**

삭제

**청구항 21**

제 8 항에 있어서,

$R^{72}$  내지  $R^{79}$  는 각각 독립적으로 수소를 나타내는, 유기 화합물.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 복소환(複素環) 화합물, 발광 소자, 발광 장치, 전자 기기, 및 조명 장치에 관한 것이다. 또한, 상기 복소환 화합물을 합성할 때 사용되는 유기 화합물에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 최근, 일렉트로루미네선스(EL: Electro Luminescence)를 이용한 발광 소자의 연구 개발이 활발히 행해지고 있다. 이들 발광 소자의 기본적인 구성은, 한 쌍의 전극 간에 발광 물질을 포함한 층을 끼운 것이다. 이 소자에 전압을 인가함으로써, 발광 물질로부터의 발광을 얻을 수 있다.

[0003] 이러한 발광 소자는 자발광(自發光)형이기 때문에, 액정 디스플레이와 비교하여 화소의 시인성(視認性)이 높고, 백 라이트가 불필요하다는 등의 이점이 있어, 플랫 패널 디스플레이 소자로서 적합하다고 생각되고 있다. 또한, 이러한 발광 소자는 박형 경량으로 제작할 수 있다는 것도 큰 이점이다. 또한, 응답 속도가 상당히 빠른 것도 특징 중 하나이다.

[0004] 이들의 발광 소자는 막 형상으로 형성할 수 있기 때문에, 면 형상으로 발광을 얻을 수 있다. 따라서, 대면적의 소자를 용이하게 형성할 수 있다. 이는 백열 전구나 LED로 대표되는 점 광원 또는 형광등으로 대표되는 선 광원에서 얻기 어려운 특색이기 때문에, 조명 등에 응용할 수 있는 면 광원으로서의 이용 가치도 높다.

[0005] 그 일렉트로루미네선스를 이용한 발광 소자는, 발광 물질이 유기 화합물인지 무기 화합물인지에 따라 크게 나눌 수 있다. 발광 물질에 유기 화합물을 사용하여 한 쌍의 전극 사이에 상기 유기 화합물을 포함한 층을 형성한 유기 EL 소자인 경우, 발광 소자에 전압을 인가함으로써 음극으로부터 전자가, 양극으로부터 정공(홀)이 각각 발광성 유기 화합물을 포함한 층에 주입되어 전류가 흐른다. 그리고, 주입된 전자 및 정공이 발광성 유기 화합물을 여기 상태로 도달시켜 여기된 발광성 유기 화합물로부터 발광을 얻는다.

[0006] 유기 화합물이 형성하는 여기 상태의 종류로서는 1중항 여기 상태와 3중항 여기 상태가 가능하고, 1중항 여기 상태( $S^*$ )로부터의 발광이 형광이라고 불리고, 3중항 여기 상태( $T^*$ )로부터의 발광이 인광이라고 불린다. 또한, 발광 소자에서의 그것의 통계적인 생성 비율은,  $S^*:T^*=1:3$ 인 것으로 생각되고 있다.

[0007] 1중항 여기 상태를 발광으로 변환하는 화합물(이하, 형광성 화합물이라고 부름)에서는 실온에서 3중항 여기 상태로부터의 발광(인광)은 관측되지 않고, 1중항 여기 상태로부터의 발광(형광)만이 관측된다. 따라서, 형광성 화합물을 사용한 발광 소자에서의 내부 양자 효율(주입한 캐리어에 대하여 발생하는 포톤의 비율)의 이론적 한계는,  $S^*:T^*=1:3$ 인 것을 근거로 25%라고 지적되어 있다.

[0008] 한편, 3중항 여기 상태를 발광으로 변환하는 화합물(이하, 인광성 화합물이라고 부름)을 사용하면 3중항 여기 상태로부터의 발광(인광)이 관측된다. 또한, 인광성 화합물은 항간(項間) 교차(1중항 여기 상태에서부터 3중항 여기 상태로 이동하는 것)가 일어나기 쉽기 때문에 내부 양자 효율은 100%까지 이론상으로는 가능해진다. 즉, 형광성 화합물보다 높은 발광 효율을 실현할 수 있다. 이와 같은 이유로, 효율이 높은 발광 소자를 실현하기 위하여 인광성 화합물을 사용한 발광 소자의 개발이 최근 활발히 행해지고 있다.

[0009] 상술한 인광성 화합물을 사용하여 발광 소자의 발광층을 형성하는 경우, 인광성 화합물의 농도 소광(消光)이나 3중항-3중항 소멸에 의한 소광을 억제하기 위하여 다른 화합물로 이루어지는 매트릭스 중에 상기 인광성 화합물이 분산되도록 하여 형성하는 경우가 많다. 이때, 매트릭스가 되는 화합물은 호스트 재료라고 불리고, 인광성 화합물과 같이 매트릭스 중에 분산되는 화합물은 게스트 재료라고 불린다.

[0010] 인광성 화합물을 게스트 재료로 하는 경우 호스트 재료에 필요한 성질은, 상기 인광성 화합물보다 큰 3중항 여기 에너지(기저 상태와 3중항 여기 상태 사이의 에너지 차이)를 갖는 것이다.

[0011] 또한, 1중항 여기 에너지(기저 상태와 1중항 여기 상태 사이의 에너지 차이)는 3중항 여기 에너지보다 크기 때문에, 큰 3중항 여기 에너지를 갖는 물질은 큰 1중항 여기 에너지도 갖는다. 따라서, 상술한 바와 같은 큰 3중

항 여기 에너지를 갖는 물질은 형광성 화합물을 발광 물질(게스트 재료)로서 사용한 발광 소자에서도 유익하다.

[0012] 인광성 화합물을 게스트 재료로 하는 경우의 호스트 재료의 일례로서 디벤조[f,h]퀴녹살린 환을 갖는 화합물의 연구가 행해지고 있다(예를 들어, 특허문헌 1 및 특허문헌 2 참조).

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0013] (특허문헌 0001) 국제공개 제 03/058667호  
 (특허문헌 0002) 일본국 특개2007-189001호 공보

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

[0014] 상기 디벤조[f,h]퀴녹살린 환을 갖는 화합물은, 평면적인 구조를 갖기 때문에 결정화되기 쉽다. 결정화되기 쉬운 화합물을 사용한 발광 소자는 수명이 짧다. 그러나, 입체적으로 부피가 큰 구조의 화합물로 하기 위하여 디벤조[f,h]퀴녹살린 환에 다른 골격을 직접 결합시키면, 공역계가 넓어져 3중항 여기 에너지의 저하를 초래하는 경우가 있다.

[0015] 또한, 저소비 전력으로 신뢰성이 높은 발광 장치, 전자 기기 및 조명 장치를 실현하기 위하여, 구동 전압이 낮은 발광 소자, 발광 효율이 높은 발광 소자, 또는 장수명인 발광 소자가 요구되고 있다.

[0016] 따라서, 본 발명의 일 형태는, 발광 소자에서 발광층의 발광 물질을 분산시키는 호스트 재료로서 사용할 수 있는 신규의 복소환 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다. 특히, 인광성 화합물을 발광 물질에 사용하는 경우의 호스트 재료로서 적합하게 사용할 수 있는 신규의 복소환 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[0017] 본 발명의 일 형태는 구동 전압이 낮은 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다. 또한, 본 발명의 일 형태는 발광 효율이 높은 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다. 또한, 본 발명의 일 형태는 장수명인 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다. 본 발명의 일 형태는 이 발광 소자를 사용함으로써 소비 전력이 저감된 발광 장치, 전자 기기, 및 조명 장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

**과제의 해결 수단**

[0018] 본 발명의 일 형태는, 디벤조[f,h]퀴녹살린 환과 캐리어 수송 골격이 아릴렌기를 개재(介在)하여 결합한 화합물이다. 또한, 본 발명의 일 형태는, 디벤조[f,h]퀴녹살린 환과 캐리어 수송 골격이 아릴렌기를 개재하여 결합한 화합물을 사용한 발광 소자이다.

[0019] 상기 캐리어 수송 골격으로서, 나프탈렌 골격, 페난트렌 골격, 또는 트리페닐렌 골격을 들 수 있다.

[0020] 퀴녹살린 골격을 갖는 화합물은 전자 수송성이 높고, 발광 소자에 사용함으로써 구동 전압이 낮은 소자를 실현할 수 있다. 본 발명의 일 형태의 화합물은 디벤조[f,h]퀴녹살린 환과 캐리어 수송 골격을 갖기 때문에, 캐리어를 받는 것이 용이하게 된다. 따라서, 상기 화합물을 발광층의 호스트 재료에 사용함으로써, 전자와 정공이 확실히 발광층 내에서 재결합하여 발광 소자의 수명이 짧게 되는 것을 억제할 수 있기 때문에, 장수명인 소자를 실현할 수 있다.

[0021] 또한, 상기 화합물은, 디벤조[f,h]퀴녹살린 환과 캐리어 수송 골격이 페닐렌기나 비페닐디일기 등 6원 환으로 구성되는 아릴렌기를 개재하여 결합하기 때문에, 직접적으로 결합하는 경우와 비교하여 공역이 넓어지기 어렵다. 이에 의하여, HOMO 준위(최고 점유 분자 궤도 준위)와 LUMO 준위(최저공 분자 궤도 준위) 사이의 밴드 갭이 좁게 되거나, 3중항 여기 에너지의 준위(T1 준위)나 1중항 여기 에너지의 준위(S1 준위)가 저하되는 것을 방지할 수 있다. 따라서, 발광층의 발광 물질을 분산시키는 호스트 재료로서 적합하게 사용할 수 있다. 특히, 인광성 화합물을 발광 물질에 사용할 때의 호스트 재료로서 적합하게 사용할 수 있다. 또한, 발광 소자에

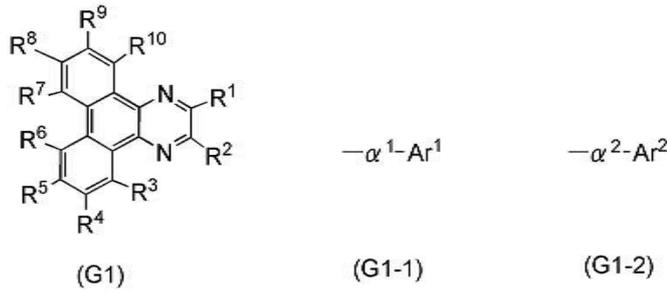
사용함으로써, 발광 효율이 높은 소자를 실현할 수 있다.

[0022] 또한, 디벤조[f,h]퀴녹살린 환과 캐리어 수송 골격이 아릴렌기를 개재하여 결합함으로써 입체적인 구조를 취하기 쉽기 때문에, 막이 결정화되기 어렵고, 스테킹으로 인한 T1 준위나 S1 준위의 저하를 억제할 수 있다. 이에 의하여도, HOMO 준위와 LUMO 준위 사이의 밴드 갭을 좁게 되거나, T1 준위나 S1 준위가 저하되는 것을 방지할 수 있다. 따라서, 발광 소자에 사용함으로써 발광 효율이 높은 소자를 실현할 수 있다.

[0023] 또한, 디벤조[f,h]퀴녹살린 환, 페닐렌기나 비페닐디일기 등 벤젠 골격, 캐리어 수송 골격인 나프탈렌 골격, 페난트렌 골격, 및 트리페닐렌 골격은 전기 화학적으로 안정적이다. 따라서, 이들 골격으로 구성되는 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 발광 소자에 사용함으로써 장수명인 소자를 실현할 수 있다.

[0024] 본 발명의 일 형태는, 하기 화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물이다.

[0025] [화학식 G1]



[0026]

[0027] 화학식 G1 중에서, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>10</sup>은, 어느 하나가 화학식 G1-1로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 다른 어느 하나가 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 치환 또는 무치환의 비페닐기, 또는 화학식 G1-2로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 나머지는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다. 또한, 화학식 G1-1 중의 α<sup>1</sup> 및 화학식 G1-2 중의 α<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고, 화학식 G1-1 중의 Ar<sup>1</sup> 및 화학식 G1-2 중의 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

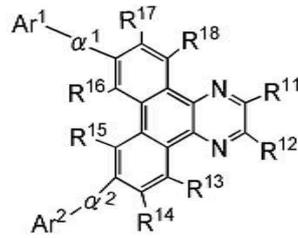
[0028] 또한, 본 발명의 일 형태에서는, α<sup>1</sup> 및 α<sup>2</sup>에 있어서 페닐렌기 또는 비페닐디일기가 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기로서는, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 치환 또는 무치환의 비페닐기, 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 갖는다. 또한, 상기 페닐기, 상기 비페닐기, 상기 나프틸기, 상기 페난트릴기, 또는 상기 트리페닐레닐기가 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기로서는 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 페닐기, 또는 비페닐기를 갖는다.

[0029] 또한, 본 발명의 일 형태에서는, Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>에 있어서, 나프틸기, 페난트릴기, 또는 트리페닐레닐기가 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기로서는 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 페닐기, 또는 비페닐기를 갖는다.

[0030] 또한, 본 발명의 일 형태에서는, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>10</sup> 중 어느 것이 페닐기 또는 비페닐기를 나타낸 경우, 상기 페닐기 또는 상기 비페닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기를 가져도 좋다.

[0031] 본 발명의 일 형태는, 하기 화학식 G2-1로 나타내어지는 복소환 화합물이다.

[0032] [화학식 G2-1]



(G2-1)

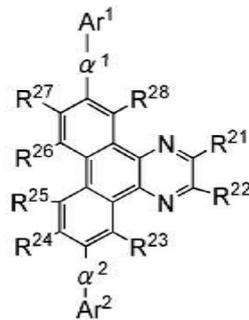
[0033]

[0034] 화학식 G2-1 중에서, R<sup>11</sup> 내지 R<sup>18</sup>은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타내고, α<sup>1</sup> 및 α<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고, Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 나프틸기, 또는 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

[0035] 또한, 화학식 G2-1 중에서, R<sup>11</sup> 내지 R<sup>18</sup> 중 어느 것이 페닐기 또는 비페닐기를 나타내는 경우, 상기 페닐기 또는 상기 비페닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기를 가져도 좋다.

[0036] 본 발명의 일 형태는, 하기 화학식 G2-2로 나타내어지는 복소환 화합물이다.

[0037] [화학식 G2-2]



(G2-2)

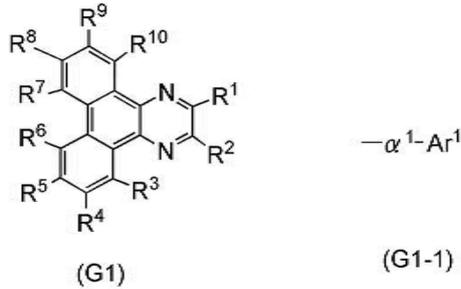
[0038]

[0039] 화학식 G2-2 중에서, R<sup>21</sup> 내지 R<sup>28</sup>은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타내고, α<sup>1</sup> 및 α<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고, Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

[0040] 또한, 화학식 G2-2 중에서, R<sup>21</sup> 내지 R<sup>28</sup> 중 어느 것이 페닐기 또는 비페닐기를 나타내는 경우, 상기 페닐기 또는 상기 비페닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기를 가져도 좋다.

[0041] 본 발명의 일 형태는 하기 화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물이다.

[0042] [화학식 G1]

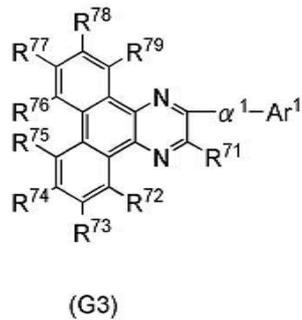


[0043]

[0044] 화학식 G1 중에서, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>10</sup>은, 어느 하나가 화학식 G1-1로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 나머지는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다. 또한, 화학식 G1-1 중의 α<sup>1</sup>은 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고, Ar<sup>1</sup>은 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

[0045] 본 발명의 일 형태는 하기 화학식 G3으로 나타내어지는 복소환 화합물이다.

[0046] [화학식 G3]



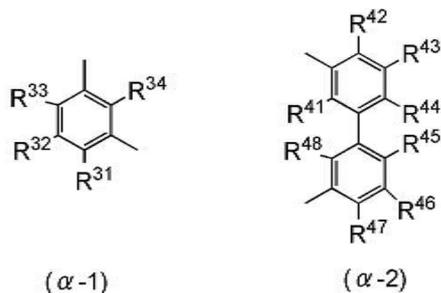
[0047]

[0048] 화학식 G3 중에서, R<sup>71</sup> 내지 R<sup>79</sup>는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타내고, α<sup>1</sup>은 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고, Ar<sup>1</sup>은 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

[0049] 또한, 화학식 G3 중에서, R<sup>71</sup> 내지 R<sup>79</sup> 중 어느 것이 페닐기 또는 비페닐기를 나타내는 경우, 상기 페닐기 또는 상기 비페닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기를 가져도 좋다.

[0050] 화학식 G1-1 중의 α<sup>1</sup>, 화학식 G1-2 중의 α<sup>2</sup>, 화학식 G2-1 중 및 화학식 G2-2 중의 α<sup>1</sup> 및 α<sup>2</sup>, 및 화학식 G3 중의 α<sup>1</sup>은, 각각 독립적으로 화학식 α-1 또는 화학식 α-2로 나타내어지는 것이 바람직하다.

[0051] [화학식 α-1 및 화학식 α-2]



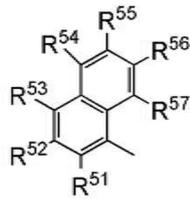
[0052]

[0053] 화학식 α-1 중의 R<sup>31</sup> 내지 R<sup>34</sup> 및 화학식 α-2 중의 R<sup>41</sup> 내지 R<sup>48</sup>은, 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기, 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

[0054] 또한, 화학식 α-1 중의 R<sup>31</sup> 내지 R<sup>34</sup> 및 화학식 α-2 중의 R<sup>41</sup> 내지 R<sup>48</sup> 중 어느 것이 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 페난트릴기, 또는 트리페닐레닐기를 나타내는 경우, 상기 페닐기, 상기 비페닐기, 상기 나프틸기, 상기 페난트릴기, 또는 상기 트리페닐레닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 페닐기, 또는 비페닐기를 가져도 좋다.

[0055] 화학식 G1-1 중의 Ar<sup>1</sup>, 화학식 G1-2 중의 Ar<sup>2</sup>, 화학식 G2-1 중 및 화학식 G2-2 중의 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>, 및 화학식 G3 중의 Ar<sup>1</sup>은 화학식 Ar-1로 나타내어지는 것이 바람직하다.

[0056] [화학식 Ar-1]



(Ar-1)

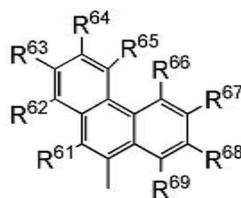
[0057]

[0058] 화학식 Ar-1 중에서, R<sup>51</sup> 내지 R<sup>57</sup>은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다.

[0059] 또한, 화학식 Ar-1 중에서, R<sup>51</sup> 내지 R<sup>57</sup> 중 어느 것이 페닐기 또는 비페닐기를 나타내는 경우, 상기 페닐기 또는 상기 비페닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기를 가져도 좋다.

[0060] 또는, 화학식 G1-1 중의 Ar<sup>1</sup>, 화학식 G1-2 중의 Ar<sup>2</sup>, 화학식 G2-1 중 및 화학식 G2-2 중의 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>, 및 화학식 G3 중의 Ar<sup>1</sup>은 화학식 Ar-2로 나타내어지는 것이 바람직하다.

[0061] [화학식 Ar-2]



(Ar-2)

[0062]

[0063] 화학식 Ar-2 중에서, R<sup>61</sup> 내지 R<sup>69</sup>은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다.

[0064] 또한, 화학식 Ar-2 중에서, R<sup>61</sup> 내지 R<sup>69</sup> 중 어느 것이 페닐기 또는 비페닐기를 나타내는 경우, 상기 페닐기 또는 상기 비페닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기를 가져도 좋다.

[0065] 또한, 본 발명의 일 형태는 상기 복소환 화합물을 포함한 발광 소자이다. 특히, 양극 및 음극 사이에 발광층을 갖는 발광 소자에서, 상기 발광층이 발광 물질과, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 포함하는 구성이 바람직하다.

[0066] 또한, 양극 및 음극 사이에 발광층을 갖는 발광 소자에서, 상기 발광층이 발광 물질, 전자 수송성 화합물, 및 정공 수송성 화합물을 포함하고, 상기 전자 수송성 화합물은 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물이고 상기 정공

수송성 화합물은 상기 전자 수송성 화합물보다 정공 수송성이 높고, 카르바졸 골격, 트리아릴아민 골격, 디벤조티오펜 골격, 또는 디벤조푸란 골격을 갖는 것이 바람직하다.

[0067] 또한, 이때, 발광층의 양극 측에 접한 층이 상기 발광층에 포함되는 정공 수송성 화합물을 포함하는 것이 바람직하다.

[0068] 또한, 상기 발광 소자에서, 발광층의 음극 측에 접한 층이 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 포함하는 것이 바람직하다.

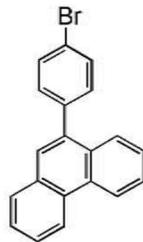
[0069] 또한, 본 발명의 일 형태는, 상기 발광 소자를 발광부에 구비한 발광 장치이다. 또한, 본 발명의 일 형태는, 상기 발광 장치를 표시부에 구비한 전자 기기이다. 또한, 본 발명의 일 형태는, 상기 발광 장치를 발광부에 구비한 조명 장치이다.

[0070] 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 사용한 발광 소자는 구동 전압이 낮거나, 발광 효율이 높거나, 또는 장수명이기 때문에, 소비 전력이 낮은 발광 장치를 실현할 수 있다. 마찬가지로, 본 발명의 일 형태를 적용함으로써, 소비 전력이 낮은 전자 기기 및 조명 장치를 실현할 수 있다.

[0071] 또한, 본 명세서 중에서의 발광 장치란, 발광 소자를 사용한 화상 표시 디바이스를 포함한다. 또한, 발광 소자에 커넥터, 예를 들어 이방 도전성 필름 또는 TAB(Tape Automated Bonding) 테이프 또는 TCP(Tape Carrier Package)가 장착된 모듈, TAB 테이프나 TCP의 끝에 프린트 배선 기판이 설치된 모듈, 또는 발광 소자에 COG(Chip On Glass) 방식으로 IC(집적 회로)가 직접 실장된 모듈도 모두 다 발광 장치에 포함하는 것으로 한다. 또한, 조명 기구 등에 사용되는 발광 장치도 포함하는 것으로 한다.

[0072] 또한, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 합성할 때에 사용하는 구조식 900으로 나타내어지는 유기 화합물도 본 발명의 일 형태이다.

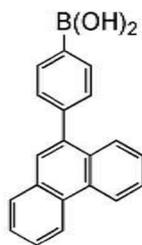
[0073] [구조식 900]



(900)

[0074] 또한, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 합성할 때에 사용하는 구조식 901로 나타내어지는 유기 화합물도 본 발명의 일 형태이다.

[0076] [구조식 901]



(901)

[0077]

**발명의 효과**

[0078] 본 발명의 일 형태는, 발광 소자에서, 발광층의 발광 물질을 분산시키는 호스트 재료로서 사용할 수 있는 신규의 복소환 화합물을 제공할 수 있다. 본 발명의 일 형태는, 구동 전압이 낮은 발광 소자를 제공할 수 있다.

또한, 본 발명의 일 형태는, 발광 효율이 높은 발광 소자를 제공할 수 있다. 또한, 본 발명의 일 형태는, 장수명인 발광 소자를 제공할 수 있다. 본 발명의 일 형태는, 상기 발광 소자를 사용함으로써, 소비 전력이 저감된 발광 장치, 전자 기기, 및 조명 장치를 제공할 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

[0079]

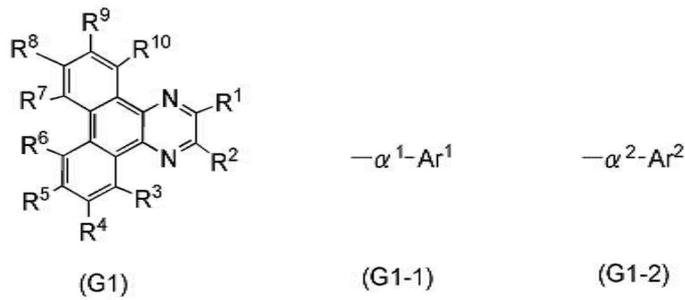
- 도 1(A) 및 도 1(B)는 본 발명의 일 형태의 발광 소자를 설명하는 도면.
- 도 2(A) 및 도 2(B)는 본 발명의 일 형태의 발광 소자를 설명하는 도면.
- 도 3(A) 및 도 3(B)는 본 발명의 일 형태의 발광 장치를 설명하는 도면.
- 도 4(A) 및 도 4(B)는 본 발명의 일 형태의 발광 장치를 설명하는 도면.
- 도 5(A) 내지 도 5(D)는 본 발명의 일 형태의 전자 기기를 설명하는 도면.
- 도 6은 본 발명의 일 형태의 액정 표시 장치를 설명하는 도면.
- 도 7은 본 발명의 일 형태의 조명 장치를 설명하는 도면.
- 도 8은 본 발명의 일 형태의 조명 장치를 설명하는 도면.
- 도 9(A) 내지 도 9(C)는 본 발명의 일 형태의 전자 기기를 설명하는 도면.
- 도 10(A) 및 도 10(B)는 2-[4-나프탈렌-1-일]페닐]디벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: NPDBq)의 <sup>1</sup>H NMR 차트를 도시한 도면.
- 도 11(A)는 NPDBq의 톨루엔 용액의 흡수 스펙트럼을 도시한 도면이고, 도 11(B)는 발광 스펙트럼을 도시한 도면.
- 도 12(A)는 NPDBq의 박막의 흡수 스펙트럼을 도시한 도면이고, 도 12(B)는 발광 스펙트럼을 도시한 도면.
- 도 13(A) 및 도 13(B)는 2-[3-(페난트렌-9-일)페닐]디벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: mPnPDBq)의 <sup>1</sup>H NMR 차트를 도시한 도면.
- 도 14(A)는 mPnPDBq의 톨루엔 용액의 흡수 스펙트럼을 도시한 도면이고, 도 14(B)는 발광 스펙트럼을 도시한 도면.
- 도 15(A)는 mPnPDBq의 박막의 흡수 스펙트럼을 도시한 도면이고, 도 15(B)는 발광 스펙트럼을 도시한 도면.
- 도 16(A) 및 도 16(B)는 2-[4-(페난트렌-9-일)페닐]디벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: DBqPPn)의 <sup>1</sup>H NMR 차트를 도시한 도면.
- 도 17(A)는 DBqPPn의 톨루엔 용액의 흡수 스펙트럼을 도시한 도면이고, 도 17(B)는 발광 스펙트럼을 도시한 도면.
- 도 18(A)는 DBqPPn의 박막의 흡수 스펙트럼을 도시한 도면이고, 도 18(B)는 발광 스펙트럼을 도시한 도면.
- 도 19는 실시예의 발광 소자를 설명하는 도면.
- 도 20은 실시예 4의 발광 소자의 휘도-전류 효율 특성을 도시한 도면.
- 도 21은 실시예 4의 발광 소자의 전압-전류 특성을 도시한 도면.
- 도 22는 실시예 4의 발광 소자의 휘도-색도 좌표 특성을 도시한 도면.
- 도 23은 실시예 4의 발광 소자의 휘도-파워 효율 특성을 도시한 도면.
- 도 24는 실시예 4의 발광 소자의 발광 스펙트럼을 도시한 도면.
- 도 25는 실시예 4의 발광 소자의 신뢰성 시험의 결과를 도시한 도면.
- 도 26은 실시예 5의 발광 소자의 휘도-전류 효율 특성을 도시한 도면.

- 도 27은 실시예 5의 발광 소자의 전압-전류 특성을 도시한 도면.
- 도 28은 실시예 5의 발광 소자의 휘도-색도 좌표 특성을 도시한 도면.
- 도 29는 실시예 5의 발광 소자의 휘도-과워 효율 특성을 도시한 도면.
- 도 30은 실시예 5의 발광 소자의 발광 스펙트럼을 도시한 도면.
- 도 31은 실시예 6의 발광 소자의 휘도-전류 효율 특성을 도시한 도면.
- 도 32는 실시예 6의 발광 소자의 전압-전류 특성을 도시한 도면.
- 도 33은 실시예 6의 발광 소자의 휘도-색도 좌표 특성을 도시한 도면.
- 도 34는 실시예 6의 발광 소자의 휘도-과워 효율 특성을 도시한 도면.
- 도 35는 실시예 6의 발광 소자의 발광 스펙트럼을 도시한 도면.
- 도 36은 실시예 7의 발광 소자의 휘도-전류 효율 특성을 도시한 도면.
- 도 37은 실시예 7의 발광 소자의 전압-전류 특성을 도시한 도면.
- 도 38은 실시예 7의 발광 소자의 휘도-색도 좌표 특성을 도시한 도면.
- 도 39는 실시예 7의 발광 소자의 휘도-과워 효율 특성을 도시한 도면.
- 도 40은 실시예 7의 발광 소자의 발광 스펙트럼을 도시한 도면.
- 도 41은 실시예 7의 발광 소자의 신뢰성 시험의 결과를 도시한 도면.
- 도 42(A) 및 도 42(B)는 NPDBq의 LC/MS 분석의 결과를 도시한 도면.
- 도 43(A) 및 도 43(B)는 NPDBq의 TOF-SIMS에 의한 측정 결과를 도시한 도면.
- 도 44(A) 및 도 44(B)는 NPDBq의 TOF-SIMS에 의한 측정 결과를 도시한 도면.
- 도 45(A) 및 도 45(B)는 mPnPDBq의 LC/MS 분석의 결과를 도시한 도면.
- 도 46(A) 및 도 46(B)는 mPnPDBq의 TOF-SIMS에 의한 측정 결과를 도시한 도면.
- 도 47(A) 및 도 47(B)는 mPnPDBq의 TOF-SIMS에 의한 측정 결과를 도시한 도면.
- 도 48(A) 및 도 48(B)는 DBqPPn의 LC/MS 분석의 결과를 도시한 도면.
- 도 49(A) 및 도 49(B)는 DBqPPn의 TOF-SIMS에 의한 측정 결과를 도시한 도면.
- 도 50(A) 및 도 50(B)는 DBqPPn의 TOF-SIMS에 의한 측정 결과를 도시한 도면.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

- [0080] 이하, 본 발명의 실시형태에 대하여 도면을 사용하여 자세히 설명한다. 다만, 본 발명은 이하의 설명에 한정되지 않고 본 발명의 취지 및 그 범위에서 이탈하지 않고 그 형태 및 자세한 사항을 다양하게 변경할 수 있는 것은 당업자라면 용이하게 이해할 수 있다. 따라서, 본 발명은 이하에 나타내는 실시형태의 기재 내용에 한정하여 해석되는 것은 아니다.
- [0081] (실시형태 1)
- [0082] 본 실시형태에서는, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물에 대하여 설명한다.
- [0083] 본 발명의 일 형태는 화학식 G1으로 나타내어지는 복소환 화합물이다.

[0084] [화학식 G1]



[0085]

[0086] 화학식 G1 중에서, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>10</sup>은, 어느 하나가 화학식 G1-1로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 다른 어느 하나가 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 치환 또는 무치환의 비페닐기, 또는 화학식 G1-2로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 나머지는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다. 또한, 화학식 G1-1 중의 α<sup>1</sup> 및 화학식 G1-2 중의 α<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고, 화학식 G1-1 중의 Ar<sup>1</sup> 및 화학식 G1-2 중의 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

[0087] 또한, 화학식 G1-1 중의 α<sup>1</sup> 및 화학식 G1-2 중의 α<sup>2</sup>에서 페닐렌기 또는 비페닐디일기가 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기로서는, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 치환 또는 무치환의 비페닐기, 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 갖는다. 또한, 상기 페닐기, 상기 비페닐기, 상기 나프틸기, 상기 페난트릴기, 또는 상기 트리페닐레닐기가 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기로서는 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 페닐기, 또는 비페닐기를 갖는다.

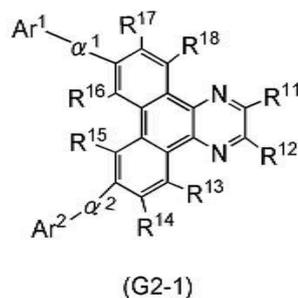
[0088] 또한, 화학식 G1-1 중의 Ar<sup>1</sup> 및 화학식 G1-2 중의 Ar<sup>2</sup>에서, 나프틸기, 페난트릴기, 또는 트리페닐레닐기가 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기로서는 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 페닐기, 또는 비페닐기를 갖는다.

[0089] 또한, 화학식 G1 중의 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>10</sup> 중 어느 것이 페닐기 또는 비페닐기를 나타내는 경우, 상기 페닐기 또는 상기 비페닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기를 가져도 좋다.

[0090] 또한, 화학식 G1에서, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>10</sup> 중 어느 하나가 화학식 G1-1로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 또 다른 어느 하나가 화학식 G1-2로 나타내어지는 치환기를 나타내면, 복소환 화합물은 분자량이 크고 높은 비정질성이나 내열성을 갖기 때문에 바람직하다.

[0091] 따라서, 본 발명의 일 형태는, 화학식 G2-1로 나타내어지는 복소환 화합물이다. 화학식 G2-1로 나타내어지는 복소환 화합물과 같이, 디벤조[f,h]퀴놀살린 환의 7위치 및 10위치에 치환기(구체적으로는, 상술한 화학식 G1-1, 화학식 G1-2로 나타내어지는 치환기)가 결합하면 입체적으로 되기 때문에, 비정질성이 더 향상되어 바람직하다.

[0092] [화학식 G2-1]



[0093]

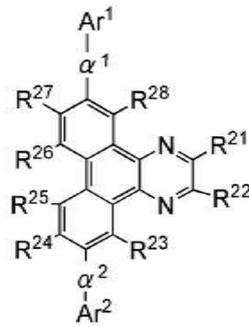
[0094] 화학식 G2-1 중에서, R<sup>11</sup> 내지 R<sup>18</sup>은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페

닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타내고,  $\alpha^1$  및  $\alpha^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고,  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

[0095] 또한, 화학식 G2-1 중에서,  $R^{11}$  내지  $R^{18}$  중 어느 것이 페닐기 또는 비페닐기를 나타내는 경우, 상기 페닐기 또는 상기 비페닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기를 가져도 좋다.

[0096] 또한, 본 발명의 일 형태는 화학식 G2-2로 나타내어지는 복소환 화합물이다.

[0097] [화학식 G2-2]



(G2-2)

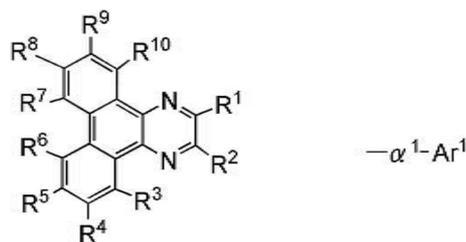
[0098] 화학식 G2-2 중에서,  $R^{21}$  내지  $R^{28}$ 은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타내고,  $\alpha^1$  및  $\alpha^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고,  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

[0100] 또한, 화학식 G2-2 중에서,  $R^{21}$  내지  $R^{28}$  중 어느 것이 페닐기 또는 비페닐기를 나타내는 경우, 상기 페닐기 또는 상기 비페닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기를 가져도 좋다.

[0101] 또한, 화학식 G1에서,  $R^1$  내지  $R^{10}$  중 어느 것이나 화학식 G1-2로 나타내어지는 치환기를 나타내지 않은 경우는, 분자량이 작고 공역이 넓어지기 어렵기 때문에 바람직하다.

[0102] 따라서, 본 발명의 일 형태는, 하기 화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물이다.

[0103] [화학식 G1]



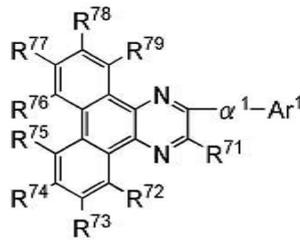
(G1)

(G1-1)

[0104] 화학식 G1 중에서,  $R^1$  내지  $R^{10}$ 은, 어느 하나가 화학식 G1-1로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 다른 어느 것이 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다. 또한, 화학식 G1-1 중의  $\alpha^1$ 은 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고,  $Ar^1$ 은 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

[0106] 또한, 본 발명의 일 형태는 화학식 G3으로 나타내어지는 복소환 화합물이다. 화학식 G3으로 나타내어지는 복소환 화합물과 같이, 디벤조[f,h]퀴놀살린 환의 2위치에 치환기(구체적으로는, 상술한 화학식 G1-1로 나타내어지는 치환기)가 결합하면 캐리어 수송성이 향상되어 바람직하다.

[0107] [화학식 G3]



(G3)

[0108]

[0109] 화학식 G3 중에서, R<sup>71</sup> 내지 R<sup>79</sup>는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타내고, α<sup>1</sup>은 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고, Ar<sup>1</sup>은 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

[0110] 또한, 화학식 G3 중에서, R<sup>71</sup> 내지 R<sup>79</sup> 중 어느 것이 페닐기 또는 비페닐기를 나타내는 경우, 상기 페닐기 또는 상기 비페닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기를 가져도 좋다.

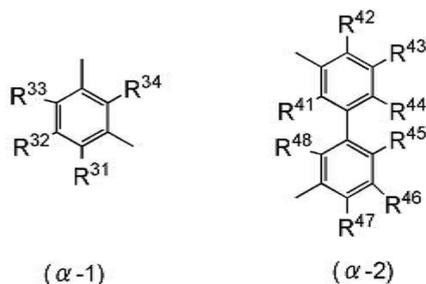
[0111] 화학식 G1 내지 화학식 G3에서, 복소환 화합물은 화학식 G1-1 및 화학식 G1-2로 나타내어지는 치환기 외, 치환기를 더 가져도 좋지만, 합성의 용이성을 고려하면 갖지 않는 것이 바람직하다. 치환기를 더 가지면 보다 입체적으로 되어 결정화되기 어려워지기 때문에 바람직하다. 또한, 치환기로서 알킬기를 갖는 경우, 용체에 대한 용해성이 향상되어 바람직하다. 치환기로서 아릴기를 갖는 경우, 캐리어 수송성이 향상되어 바람직하다.

[0112] 화학식 G1-1 중의 α<sup>1</sup>, 화학식 G1-2 중의 α<sup>2</sup>, 화학식 G2-1 및 화학식 G2-2 중의 α<sup>1</sup> 및 α<sup>2</sup>, 및 화학식 G3 중의 α<sup>1</sup>에서, 벤젠 골격이 파라 치환인 경우, 캐리어 수송성이 향상되어 바람직하다.

[0113] 또한, 화학식 G1-1 중의 α<sup>1</sup>, 화학식 G1-2 중의 α<sup>2</sup>, 화학식 G2-1 중 및 화학식 G2-2 중의 α<sup>1</sup> 및 α<sup>2</sup>, 및 화학식 G3 중의 α<sup>1</sup>에서, 벤젠 골격이 메타 치환인 경우, 벤젠 골격에 결합되는 치환기(디벤조[f,h]퀴놀살린 환과 캐리어 수송 골격)끼리 공역이 넓어지기 어렵고, 높은 T1 준위, 높은 S1 준위, 또는 HOMO 준위와 LUMO 준위 사이의 넓은 밴드 갭을 갖기 때문에 바람직하다.

[0114] 따라서, 화학식 G1-1 중의 α<sup>1</sup>, 화학식 G1-2 중의 α<sup>2</sup>, 화학식 G2-1 중 및 화학식 G2-2 중의 α<sup>1</sup> 및 α<sup>2</sup>, 및 화학식 G3 중의 α<sup>1</sup>은, 각각 독립적으로 화학식 α-1 또는 화학식 α-2로 나타내어지는 것이 바람직하다.

[0115] [화학식 α-1 및 화학식 α-2]



[0116]

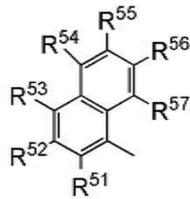
[0117] 화학식 α-1 중의 R<sup>31</sup> 내지 R<sup>34</sup> 및 화학식 α-2 중의 R<sup>41</sup> 내지 R<sup>48</sup>은, 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기, 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환

또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

[0118] 또한, 화학식 α-1 중의 R<sup>31</sup> 내지 R<sup>34</sup> 및 화학식 α-2 중의 R<sup>41</sup> 내지 R<sup>48</sup> 중 어느 것이 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 페난트릴기, 또는 트리페닐레닐기를 나타내는 경우, 상기 페닐기, 상기 비페닐기, 상기 나프틸기, 상기 페난트릴기, 또는 상기 트리페닐레닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 페닐기, 또는 비페닐기를 가져도 좋다.

[0119] 또한, 나프탈렌 골격은 축합환(縮合環)이기 때문에 캐리어 수송성이 높은 골격이다. 특히, 2환의 축합환이며 공역이 작기 때문에, 밴드 갭이 넓고 T1 준위나 S1 전위가 높은 골격이다. 따라서, 화학식 G1-1 중의 Ar<sup>1</sup>, 화학식 G1-2 중의 Ar<sup>2</sup>, 화학식 G2-1 중 및 화학식 G2-2의 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>, 및 화학식 G3 중의 Ar<sup>1</sup>은 치환 또는 무치환의 나프틸기인 것이 바람직하다. 구체적으로는, 화학식 Ar-1로 나타내어지는 것이 바람직하다. 이로써, T1 준위가 높은 복소환 화합물을 얻을 수 있다.

[0120] [화학식 Ar-1]



(Ar-1)

[0121]

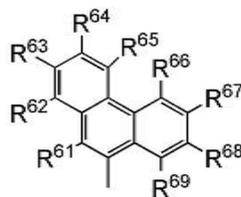
[0122] 화학식 Ar-1 중에서, R<sup>51</sup> 내지 R<sup>57</sup>은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다.

[0123] 또한, 화학식 Ar-1 중에서, R<sup>51</sup> 내지 R<sup>57</sup> 중 어느 것이 페닐기 또는 비페닐기를 나타내는 경우, 상기 페닐기 또는 상기 비페닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기를 가져도 좋다.

[0124] 화학식 Ar-1과 바와 같이, Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>가 치환 또는 무치환의 나프탈렌-1-일기이면, 입체적으로 되어 결정화되기 어렵기 때문에 바람직하다.

[0125] 또한, 페난트렌 골격은 축합환이기 때문에 캐리어 수송성이 높은 골격이다. 또한, 분자량이 크기 때문에 열물성이 양호하다. 특히, 헬리센 구조이기 때문에, 밴드 갭이 넓고 T1 준위나 S1 전위가 높은 골격이다. 따라서, 화학식 G1-1 중의 Ar<sup>1</sup>, 화학식 G1-2 중의 Ar<sup>2</sup>, 화학식 G2-1 중 및 화학식 G2-2의 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>, 및 화학식 G3 중의 Ar<sup>1</sup>은 치환 또는 무치환의 페난트릴기인 것이 바람직하다. 구체적으로는, 화학식 Ar-2로 나타내어지는 것이 바람직하다. 이로써, T1 준위가 높은 복소환 화합물을 얻을 수 있다.

[0126] [화학식 Ar-2]



(Ar-2)

[0127]

[0128] 화학식 Ar-2 중에서, R<sup>61</sup> 내지 R<sup>69</sup>은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다.

[0129] 또한, 화학식 Ar-2 중에서, R<sup>61</sup> 내지 R<sup>69</sup> 중 어느 것이 페닐기 또는 비페닐기를 나타내는 경우, 상기 페닐기 또는 상기 비페닐기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기를 가져도 좋다.

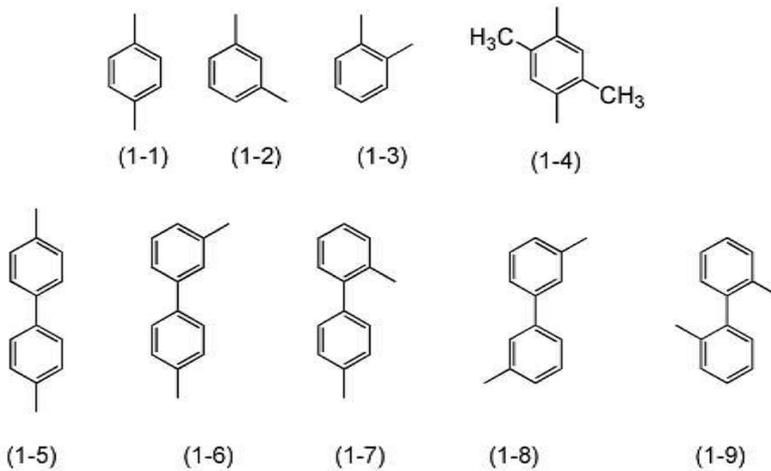
[0130] 또한, 트리페닐렌 골격은 축합환이기 때문에 캐리어 수송성이 높은 골격이다. 또한, 분자량이 크기 때문에 열물성이 양호하다. 분자량이 큰 축합환이지만, 헬리센 구조를 조합(구부러진 축합환)한 것이며, 밴드 갭이 넓고 T1 준위나 S1 준위가 높은 골격이기 때문에 바람직하다. 따라서, 화학식 G1-1 중의 Ar<sup>1</sup>, 화학식 G1-2 중의 Ar<sup>2</sup>, 화학식 G2-1 중 및 화학식 G2-2의 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>, 및 화학식 G3 중의 Ar<sup>1</sup>은, 치환 또는 무치환의 트리페닐렌기로 나타내어지는 것이 바람직하다. 이에 의하여, T1 준위가 높은 복소환 화합물을 얻을 수 있다.

[0131] 상기 각 화학식에서, a<sup>1</sup> 및 a<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타낸다. 상기 페닐렌기 및 상기 비페닐디일기는, 치환기로서 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 치환 또는 무치환의 비페닐기, 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 가져도 좋다.

[0132] a<sup>1</sup> 및 a<sup>2</sup>에 포함되는 페닐렌기 모두가 메타 치환인 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물은 높은 T1 준위를 갖기 때문에 바람직하다. a<sup>1</sup> 및 a<sup>2</sup>에 포함되는 페닐렌기 모두가 파라 치환인 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물은 발광 소자에 사용함으로써 구동 전압이 낮은 소자를 실현할 수 있기 때문에 바람직하다.

[0133] a<sup>1</sup> 및 a<sup>2</sup>의 구체적인 구조의 일례를 구조식 1-1 내지 구조식 1-9로 나타낸다.

[0134] [구조식 1-1 내지 구조식 1-9]

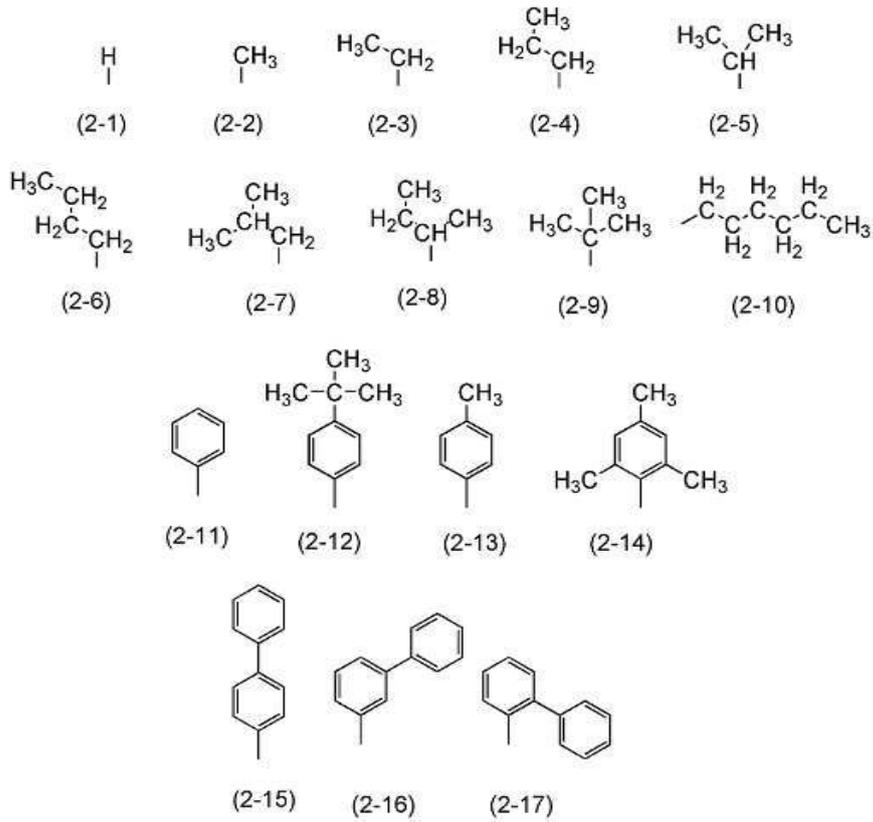


[0135]

[0136] 구조식 1-2, 구조식 1-6, 구조식 1-8로 나타낸 바와 같이, 페닐렌 골격 모두가 메타 치환인 경우나, 구조식 1-3, 구조식 1-7, 구조식 109로 나타낸 바와 같이, 페닐렌 골격 모두가 오르토 치환인 경우는, 공역이 넓어지기 어려워 S1 준위나 T1 준위를 높게 유지할 수 있고, HOMO 준위와 LUMO 준위 사이의 밴드 갭을 넓게 유지할 수 있기 때문에 바람직하다. 또한, 구조가 입체적으로 되어 막질이 향상되기 때문에 바람직하다. 특히, 메타 위치에서 결합한 경우는, 복소환 화합물의 합성이 용이하기 때문에 바람직하다. 또한, 구조식 1-1, 1-4, 1-5로 나타낸 바와 같이, 페닐렌 골격 모두가 파라 치환인 경우는, 캐리어 수송성이 향상되어 발광 소자의 구동 전압을 저감할 수 있기 때문에 바람직하다.

[0137] 상기 각 화학식에서, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>18</sup>, R<sup>21</sup> 내지 R<sup>28</sup>, R<sup>51</sup> 내지 R<sup>57</sup>, R<sup>61</sup> 내지 R<sup>69</sup>, 및 R<sup>71</sup> 내지 R<sup>79</sup>는, 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다. R<sup>1</sup> 내지 R<sup>18</sup>, R<sup>21</sup> 내지 R<sup>28</sup>, R<sup>51</sup> 내지 R<sup>57</sup>, R<sup>61</sup> 내지 R<sup>69</sup>, 및 R<sup>71</sup> 내지 R<sup>79</sup>의 구체적인 구조로서는, 예를 들어 구조식 2-1 내지 구조식 2-17로 나타내는 치환기를 들 수 있다.

[0138] [구조식 2-1 내지 구조식 2-17]

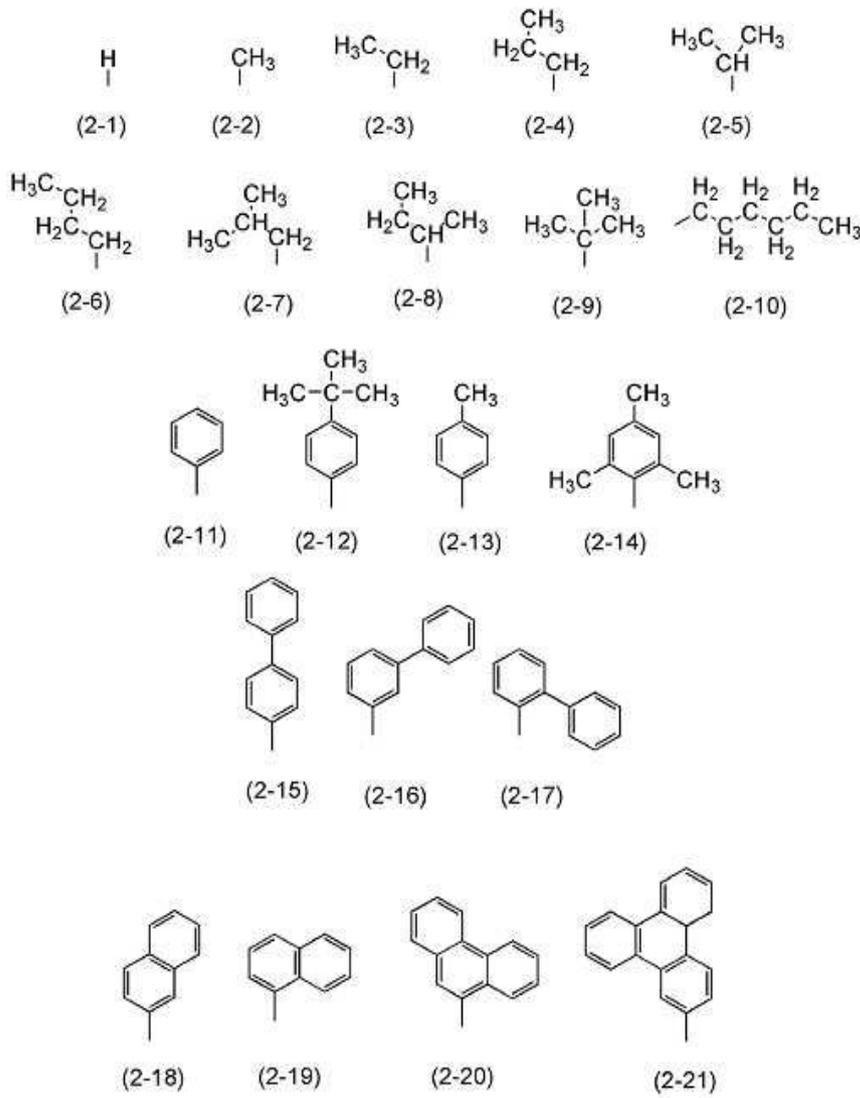


[0139]

[0140]

상기 각 화학식에서, R<sup>31</sup> 내지 R<sup>34</sup>, 및 R<sup>41</sup> 내지 R<sup>48</sup>은, 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 치환 또는 무치환의 비페닐기, 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다. R<sup>31</sup> 내지 R<sup>34</sup>, 및 R<sup>41</sup> 내지 R<sup>48</sup>의 구체적인 구조로서는, 예를 들어 구조식 2-1 내지 구조식 2-21로 나타내는 치환기를 들 수 있다.

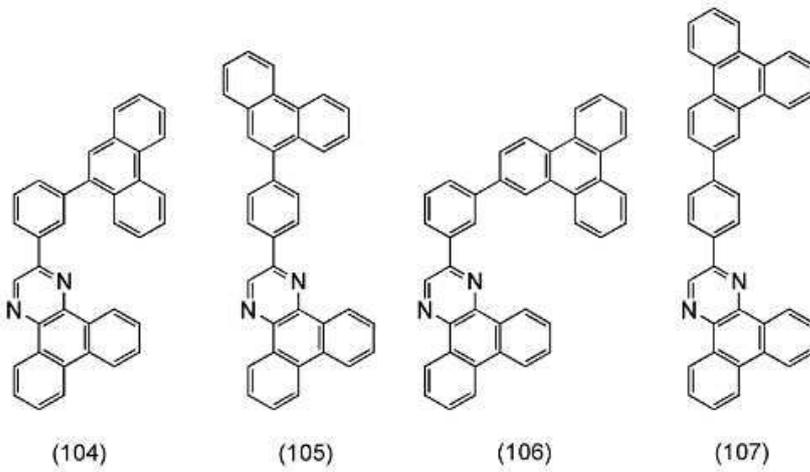
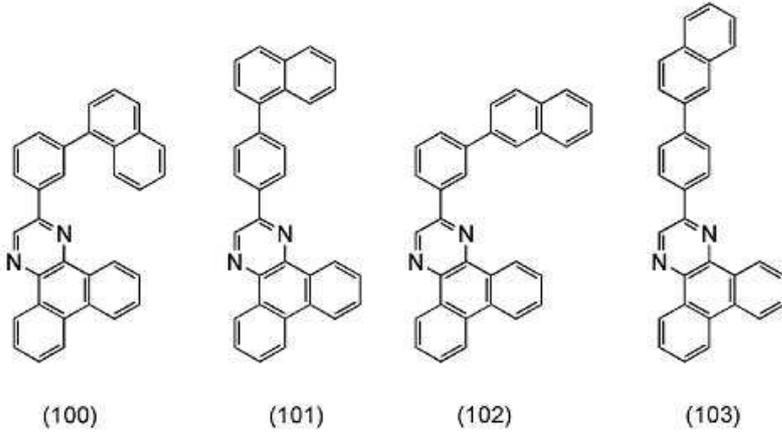
[0141] [구조식 2-1 내지 구조식 2-21]



[0142]

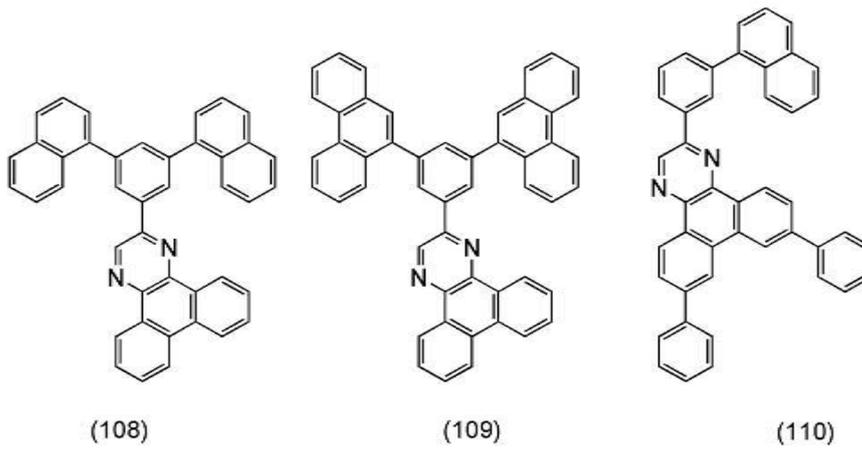
[0143] 화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물의 구체적인 예로서는, 구조식 100 내지 구조식 110, 구조식 120 내지 구조식 133, 및 구조식 140 내지 구조식 153으로 나타내어지는 복소환 화합물을 들 수 있다. 다만, 본 발명은 이들에 한정되지 않는다.

[0144] [구조식 100 내지 구조식 107]



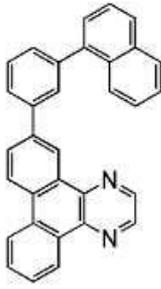
[0145]

[0146] [구조식 108 내지 구조식 110]

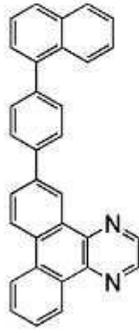


[0147]

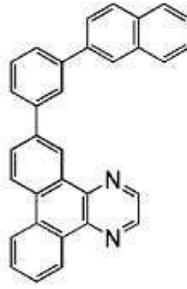
[0148] [구조식 120 내지 구조식 127]



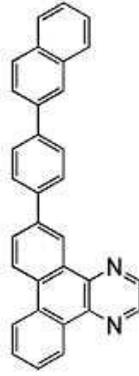
(120)



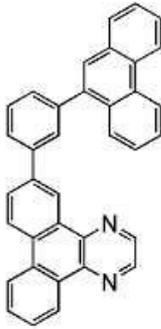
(121)



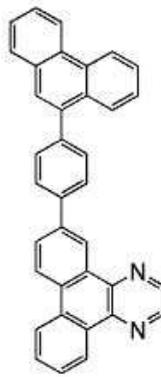
(122)



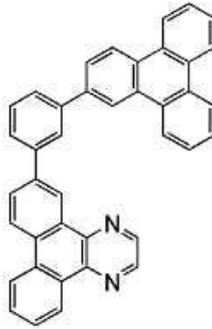
(123)



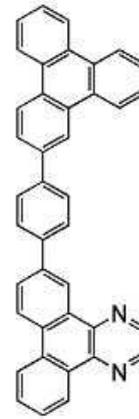
(124)



(125)



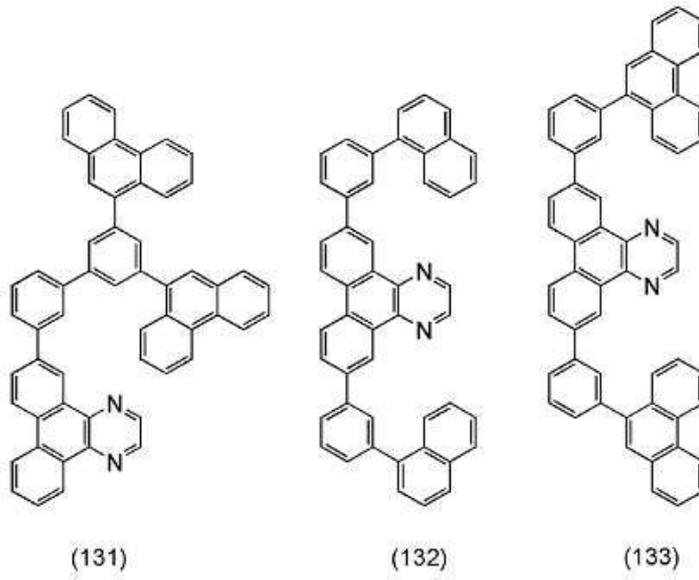
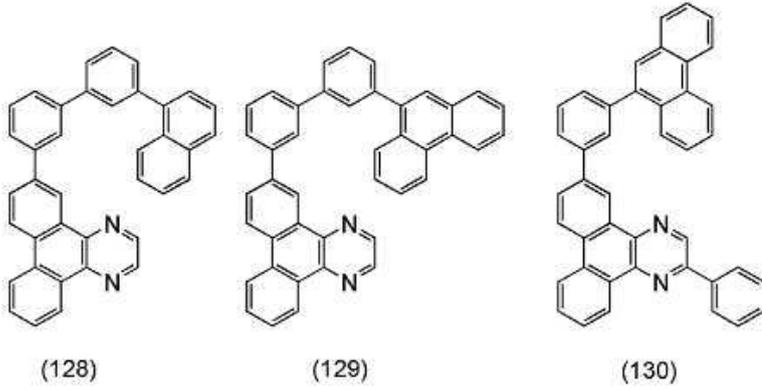
(126)



(127)

[0149]

[0150] [구조식 128 내지 구조식 133]

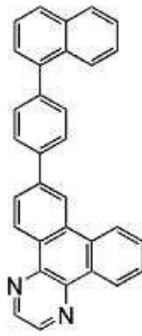


[0151]

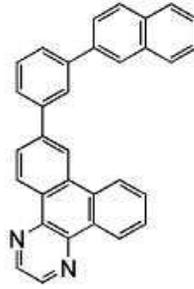
[0152] [구조식 140 내지 구조식 147]



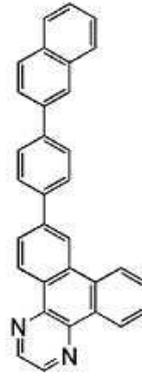
(140)



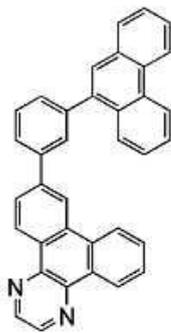
(141)



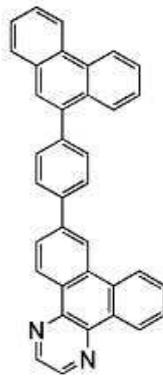
(142)



(143)



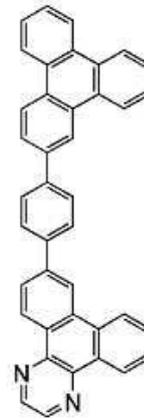
(144)



(145)



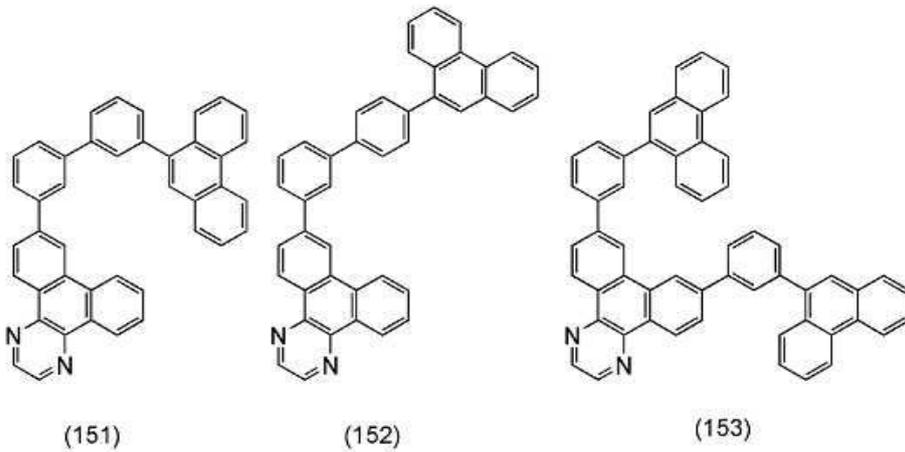
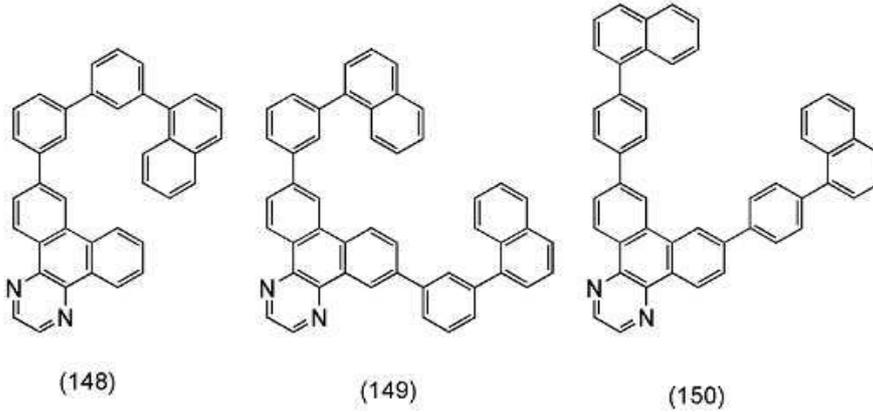
(146)



(147)

[0153]

[0154] [구조식 148 구조식 153]



[0155]

[0156] 본 발명의 일 형태인 복소환 화합물의 합성 방법으로서는 다양한 반응을 적용할 수 있다. 예를 들어, 이하에서 나타내는 합성 반응을 행함으로써 화학식 G1로 나타내어지는 본 발명의 일 형태인 복소환 화합물을 합성할 수 있다. 또한, 본 발명의 일 형태인 복소환 화합물의 합성 방법은 이하의 합성 방법에 한정되지 않는다.

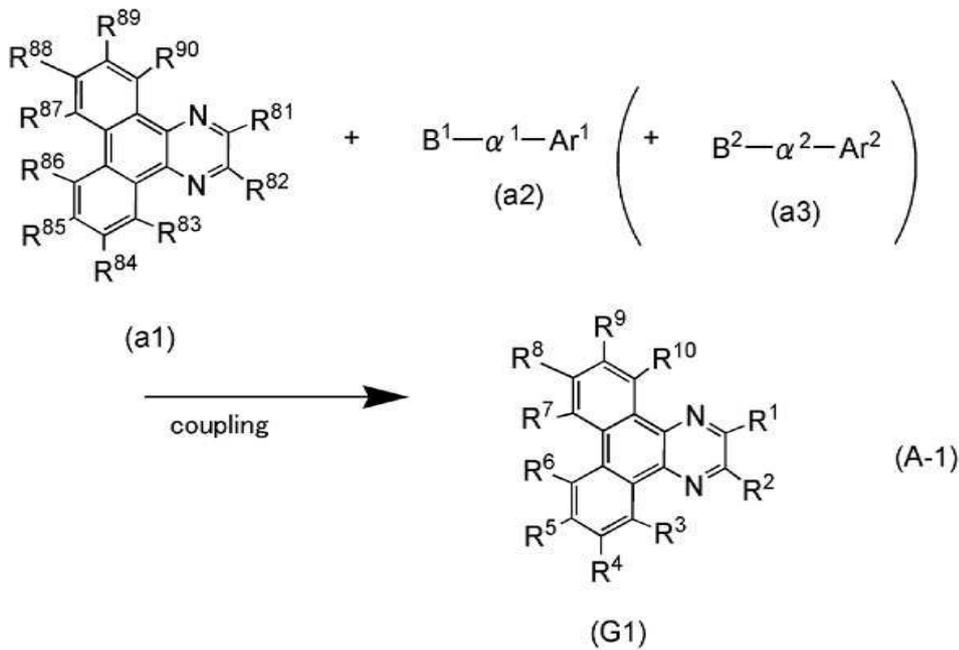
[0157]

《화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물의 합성 방법 1》

[0158]

합성 스킴 A-1로 나타내는 바와 같이, 할로겐화 디벤조퀴놀살린 화합물(a1)과 아릴 붕소 화합물(a2)을 커플링시킴으로써, 상기 화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물을 합성할 수 있다. 특히, 화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물에서, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>10</sup> 중 어느 하나가 화학식 G1-2로 나타내어지는 치환기를 갖는 경우에는, 합성 스킴 A-1의 괄호 내에 나타낸 아릴 붕소 화합물(a3)을 추가로 사용하고, 할로겐화 디벤조퀴놀살린 화합물(a1)과 아릴 붕소 화합물(a2)과 아릴 붕소 화합물(a3)을 커플링시킴으로써, 상기 화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물을 합성할 수 있다. 합성 스킴 A-1을 이하에 나타낸다.

[0159] [합성 스킴 A-1]



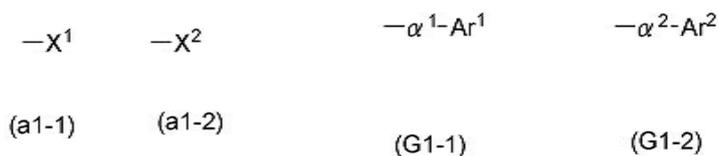
[0160]

[0161] 합성 스킴 A-1에서, α<sup>1</sup> 및 α<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐렌기를 나타내고, Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다. B<sup>1</sup> 및 B<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 보론산 또는 디알콕시보론을 나타낸다.

[0162] 합성 스킴 A-1에서, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>10</sup>은, 어느 하나가 화학식 G1-1로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 다른 어느 하나가 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 치환 또는 무치환의 비페닐기, 또는 화학식 G1-2로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 나머지는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다.

[0163] 합성 스킴 A-1에서, R<sup>81</sup> 내지 R<sup>90</sup>은, 어느 하나가 화학식 a1-1로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 다른 어느 하나가 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 치환 또는 무치환의 비페닐기, 또는 화학식 a1-2로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 나머지는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다.

[0164] [화학식 a1-1 및 화학식 a1-2, 및 화학식 G1-1 및 화학식 G1-2]



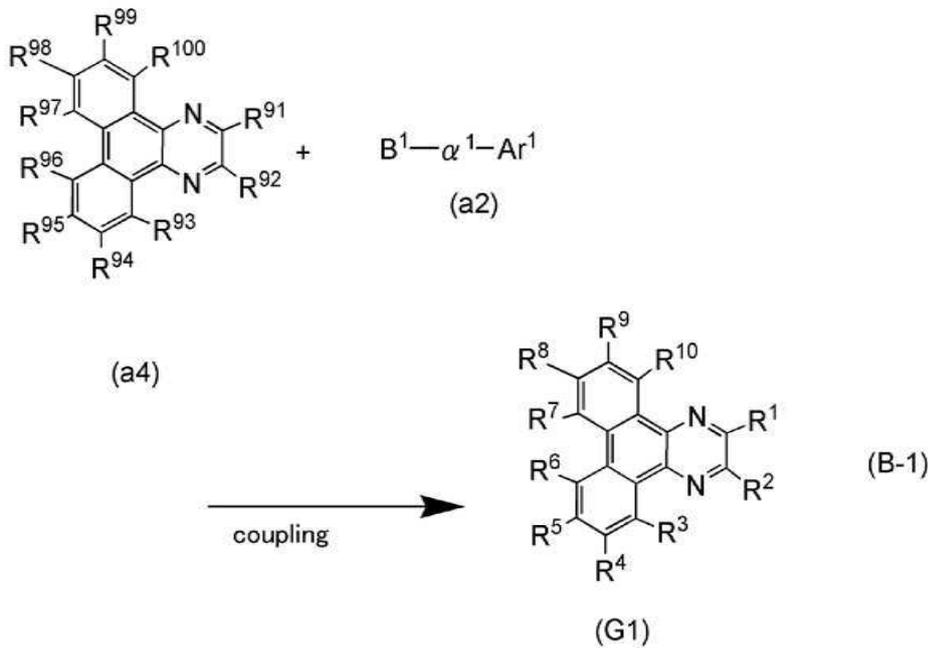
[0165]

[0166] 화학식 a1-1 중의 X<sup>1</sup> 및 화학식 a1-2 중의 X<sup>2</sup>는, 각각 독립적으로, 염소, 브롬 또는 요오드를 나타낸다. X<sup>1</sup> 및 X<sup>2</sup>는 높은 반응성을 갖기 때문에, 바람직하게는 브롬, 더 바람직하게는 요오드를 나타낸다. 화학식 G1-1 중의 α<sup>1</sup> 및 화학식 G1-2 중의 α<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐렌기를 나타내고, 화학식 G1-1 중의 Ar<sup>1</sup> 및 화학식 G1-2 중의 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

[0167] 또한, 합성 스킴 A-1에서, α<sup>1</sup>은 X<sup>1</sup>이 결합한 부분에 결합하고, α<sup>2</sup>는 X<sup>2</sup>가 결합한 부분에 결합한다.

- [0168] 또한, 합성 스킴 A-1에서, 커플링 반응에 대한 다양한 조건이 있지만, 그 일례로서 염기 존재하에서 금속 촉매를 사용한 합성 방법을 적용할 수 있다.
- [0169] 합성 스킴 A-1에서, 스즈키-미야우라 반응을 사용하는 경우에 대하여 설명한다.
- [0170] 금속 촉매로서는 팔라듐 촉매를 사용할 수 있고, 팔라듐 촉매로서는 팔라듐 착체와 그 배위자의 혼합물을 사용할 수 있다. 또한, 팔라듐 착체로서는, 초산팔라듐(II), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0), 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II)디클로라이드 등을 들 수 있다. 또한, 배위자로서는, 트리(오르토-톨릴)포스핀이나, 트리페닐포스핀이나, 트리스클로헥실포스핀 등을 들 수 있다.
- [0171] 또한, 염기로서 사용할 수 있는 물질로서는, 나트륨 *tert*-부톡시드 등 유기 염기나, 탄산나트륨, 탄산칼륨 등 무기 염기 등을 들 수 있다.
- [0172] 또한, 상기 반응을 용액 중에서 하는 것이 바람직하고, 사용할 수 있는 용매로서는, 아세트니트릴과 물의 혼합 용매, 톨루엔이나 크실렌 등의 시너류와 물의 혼합 용매, 톨루엔이나 크실렌과 에탄올 등의 알코올류와 물의 3종류를 혼합시킨 혼합 용매, 1,3-디메틸-3,4,5,6-테트라하이드로-2(1H)-피리미딘(DMPU)과 물의 혼합 용매, 에틸렌글리콜디메틸에테르 등의 에테르류와 물의 혼합 용매 등을 들 수 있다.
- [0173] 다만, 사용할 수 있는 촉매, 염기, 용매는 이들에 한정되는 것이 아니다.
- [0174] 또한, 합성 스킴 A-1에서, 아릴 붕소 화합물(a2) 대신에, 아릴 알루미늄, 아릴 지르코늄, 아릴 아연, 또는 아릴 주석 등을 사용하여도 좋다. 또한, 질소나 아르곤 등 불활성 분위기하에서 반응시키는 것이 바람직하다. 또한, 전자파를 사용하여 가열하여도 좋다.
- [0175] 특히,  $a^1$  및  $a^2$ 가 마찬가지로 또  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 가 마찬가지로 경우나, 화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물이 화학식 G1-2로 나타내어지는 치환기를 포함하지 않은 경우, 상기 합성 스킴 A-1은 상기 화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물을 순도나 수율이 좋게 합성할 수 있기 때문에 바람직한 합성 방법이다.
- [0176] 바꿔 말하면,  $a^1$  및  $a^2$ 가 마찬가지로 또  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 가 마찬가지로 경우는, 화합물(a1)에 화합물(a2)과 화합물(a3) 중 어느 것을 이등량(二等量) 첨가하여 반응시킬 수 있어 간편하다. 또한, 화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물이 화학식 G1-2로 나타내어지는 치환기를 포함하지 않은 경우는, 화합물(a1)에 화합물(a2)만을 첨가하여 반응시킴으로써 합성할 수 있어 간편하다.
- [0177] 상술한 공정에 의하여, 본 실시형태의 복소환 화합물을 합성할 수 있다.
- [0178] ≪화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물의 합성 방법 2≫
- [0179] 이하에서는, 화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물의 다른 합성 방법에 대하여 설명한다. 구체적으로는, 화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물이 화학식 G1-2로 나타내어지는 치환기를 포함한 경우의 합성 방법의 일례에 대하여 설명한다. 합성 스킴 B-1로 나타내는 바와 같이, 할로젠화 디벤조퀴녹살린 화합물(a4)과 아릴 붕소 화합물(a2)을 커플링시킴으로써, 상기 화학식 G1로 나타내어지는 복소환 화합물을 합성할 수 있다. 합성 스킴 B-1을 이하에 나타낸다.

[0180] [합성 스킴 B-1]



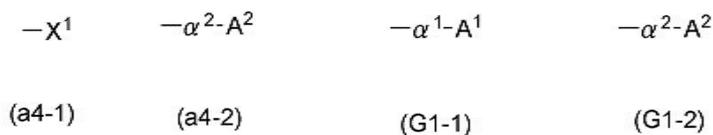
[0181]

[0182] 합성 스킴 B-1에서,  $\alpha^1$ 은 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고,  $Ar^1$ 은 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.  $B^1$ 은 보론산 또는 디알콕시보론을 나타낸다.

[0183] 합성 스킴 B-1에서,  $R^{91}$  내지  $R^{100}$ 은, 어느 하나가 하기 화학식 a4-1로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 다른 어느 하나가 하기 화학식 a4-2로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 나머지는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다.

[0184] 합성 스킴 B-1에서,  $R^1$  내지  $R^{10}$ 은, 어느 하나가 하기 화학식 G1-1로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 다른 어느 하나가 하기 화학식 G1-2로 나타내어지는 치환기를 나타내고, 나머지는 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 6인 알킬기, 치환 또는 무치환의 페닐기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐기를 나타낸다.

[0185] [화학식 a4-1 및 화학식 a4-2, 및 화학식 G1-1 및 화학식 G1-2]



[0186]

[0187] 화학식 a4-1에서,  $X^1$ 은 염소, 브롬, 또는 요오드를 나타낸다.  $X^1$ 은 높은 반응성을 갖기 때문에, 바람직하게는 브롬, 더 바람직하게는 요오드를 나타낸다. 화학식 G1-1 중에서,  $\alpha^1$ 은 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고,  $Ar^1$ 은 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다. 화학식 a4-2 및 화학식 G1-2 중,  $\alpha^2$ 는 치환 또는 무치환의 페닐렌기, 또는 치환 또는 무치환의 비페닐디일기를 나타내고,  $Ar^2$ 는 치환 또는 무치환의 나프틸기, 치환 또는 무치환의 페난트릴기, 또는 치환 또는 무치환의 트리페닐레닐기를 나타낸다.

[0188] 또한, 합성 스킴 B-1에서,  $\alpha^1$ 은  $X^1$ 이 결합한 부분에 결합한다.

[0189] 또한, 합성 스킴 B-1에서, 커플링 반응에 대한 다양한 조건이 있지만, 그 일례로서 염기 존재하에서 금속 촉매를 사용한 합성 방법을 적용할 수 있다.

- [0190] 합성 스킴 B-1에서, 스키-미야우라 반응을 사용할 수 있다. 자세한 내용에 대하여는 상기 합성 스킴 A-1을 참조할 수 있어 생략한다.
- [0191] 상술한 공정에 의하여, 본 실시형태의 복소환 화합물을 합성할 수 있다.
- [0192] 본 실시형태의 복소환 화합물은 넓은 밴드 갭을 갖기 때문에, 발광 소자에서 발광층의 발광 물질을 분산시키는 호스트 재료에 사용함으로써 높은 발광 효율을 얻을 수 있다. 특히, 인광성 화합물을 분산시키는 호스트 재료로서 적합하다. 또한, 본 실시형태의 복소환 화합물은 전자 수송성이 높은 물질이기 때문에, 발광 소자에서의 전자 수송층의 재료로서 적합하게 사용할 수 있다. 본 실시형태의 복소환 화합물을 사용함으로써, 구동 전압이 낮은 발광 소자를 실현할 수 있다. 또한, 발광 효율이 높은 발광 소자를 실현할 수 있다. 또한, 장수명인 발광 소자를 실현할 수 있다. 또한, 이 발광 소자를 사용함으로써, 소비 전력이 저감된 발광 장치, 전자 기기 및 조명 장치를 얻을 수 있다.
- [0193] 또한, 본 실시형태의 복소환 화합물은, 유기 박막 태양 전지에 사용할 수 있다. 구체적으로는, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물은 캐리어 수송성을 갖기 때문에, 캐리어 수송층이나 캐리어 주입층에 사용할 수 있다. 또한, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물은 광 여기되기 때문에 발광층에 사용할 수 있다.
- [0194] (실시형태 2)
- [0195] 본 실시형태에서는, 본 발명의 일 형태로서, 실시형태 1에서 설명한 복소환 화합물을 사용한 발광 소자에 대하여 도 1(A) 및 도 1(B)를 사용하여 설명한다. 본 실시형태에서는, 상기 복소환 화합물을 발광층에 사용한 발광 소자에 대하여 설명한다.
- [0196] 본 실시형태의 발광 소자는, 한 쌍의 전극 사이에 적어도 발광층을 갖는 EL층을 협지하여 형성된다. EL층은 발광층 외에 복수의 층을 가져도 좋다. 상기 복수의 층은, 전극으로부터 떨어진 곳에 발광 영역이 형성되도록, 즉 전극으로부터 떨어진 부위에서 캐리어가 재결합하도록, 캐리어 주입성이 높은 물질이나 캐리어 수송성이 높은 물질로 이루어진 층을 조합하여 적층된 것이다. 본 명세서에서는, 캐리어 주입성이 높은 물질이나 캐리어 수송성이 높은 물질로 이루어진 층을 캐리어 주입, 수송 등의 기능을 갖는 기능층이라고도 한다. 기능층으로서, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층, 전자 수송층 등을 사용할 수 있다.
- [0197] 도 1(A)에 도시한 본 실시형태의 발광 소자에서, 한 쌍의 전극, 제 1 전극(101) 및 제 2 전극(103), 사이에 발광층(113)을 갖는 EL층(102)이 형성된다. EL층(102)은 정공 주입층(111), 정공 수송층(112), 발광층(113), 전자 수송층(114), 전자 주입층(115)을 갖는다. 도 1(A)에서의 발광 소자는, 기판(100) 위에 제 1 전극(101)과, 제 1 전극(101) 위에 순차적으로 적층된 정공 주입층(111), 정공 수송층(112), 발광층(113), 전자 수송층(114), 전자 주입층(115)과, 또 그 위에 형성된 제 2 전극(103)으로 구성된다. 또한, 본 실시형태에서 기재하는 발광 소자에서, 제 1 전극(101)은 양극으로서 기능하고, 제 2 전극(103)은 음극으로서 기능한다.
- [0198] 기판(100)은 발광 소자의 지지체로서 사용된다. 기판(100)으로서는 예를 들어 유리, 석영, 또는 플라스틱 등을 사용할 수 있다. 또한, 가요성 기판을 사용하여도 좋다. 가요성 기판이란 구부릴 수 있는(플렉시블) 기판을 가리키고, 예를 들어 폴리카보네이트, 폴리아릴레이트, 폴리테트라플루오로에틸렌으로 이루어지는 플라스틱 기판 등을 들 수 있다. 또한, 필름(폴리프로필렌, 폴리에스테르, 폴리불화비닐, 폴리염화비닐 등으로 이루어짐), 무기 증착 필름 등을 사용할 수도 있다. 또한, 발광 소자의 지지체로서 기능하는 것이라면, 이것들 이외의 것이어도 좋다.
- [0199] 제 1 전극(101)으로서는 일함수가 큰(구체적으로는 4.0eV 이상) 금속, 합금, 도전성 화합물 및 이들의 혼합물 등을 사용하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 예를 들어 산화인듐-산화주석(ITO: Indium Tin Oxide), 실리콘 또는 산화실리콘을 함유한 산화인듐-산화주석, 산화인듐-산화아연(Indium Zinc Oxide), 산화텅스텐 및 산화아연을 함유한 산화인듐(IWZO) 등을 들 수 있다. 이들 도전성 금속 산화물막은 일반적으로 스퍼터링법으로 형성되지만, 졸-겔법 등을 응용하여 제작하여도 좋다. 예를 들어, 산화인듐-산화아연의 막은 산화인듐에 대하여 1wt% 내지 20wt%의 산화아연을 첨가한 타깃을 사용하여 스퍼터링법으로 형성할 수 있다. 또한, 산화텅스텐 및 산화아연을 함유한 산화인듐(IWZO)의 막은 산화인듐에 대하여 산화텅스텐을 0.5wt% 내지 5wt%, 산화아연을 0.1wt% 내지 1wt% 함유한 타깃을 사용하여 스퍼터링법으로 형성할 수 있다. 그 이외에, 금, 백금, 니켈, 텅스텐, 크롬, 몰리브덴, 철, 코발트, 구리, 팔라듐, 또는 금속 재료의 질화물(예를 들어, 질화티타늄) 등을 들 수 있다.
- [0200] 다만, EL층(102) 중에서 제 1 전극(101)에 접하여 형성되는 층이, 후술하는 유기 화합물과 전자 수용체(억셉

터)를 혼합하여 이루어지는 복합 재료를 사용하여 형성되는 경우에는, 제 1 전극(101)에 사용하는 물질은 일함수의 대소에 관계없이, 다양한 금속, 합금, 도전성 화합물 및 이들의 혼합물 등을 사용할 수 있다. 예를 들어, 알루미늄, 은, 알루미늄을 포함하는 합금(예를 들어, Al-Si) 등도 사용할 수 있다.

[0201] 제 1 전극(101) 위에 형성되는 EL층(102)은 적어도 발광층(113)을 갖고, EL층(102)의 일부에는 본 발명의 일 형태인 복소환 화합물을 포함하여 형성된다. EL층(102)의 일부에는 공지의 물질을 사용할 수도 있고, 저분자계 화합물 및 고분자계 화합물 중 어느 것을 사용할 수도 있다. 또한, EL층(102)을 형성하는 물질에는 유기 화합물만으로 이루어진 것뿐만 아니라, 무기 화합물을 일부에 포함한 구성도 포함하는 것으로 한다.

[0202] 또한, EL층(102)은 발광층(113) 이외에, 도 1(A) 및 도 1(B)에 도시한 바와 같이, 정공 주입층(111), 정공 수송층(112), 전자 수송층(114), 전자 주입층(115) 등을 적절히 조합하여 적층함으로써 형성된다.

[0203] 정공 주입층(111)은 정공 주입성이 높은 물질을 포함한 층이다. 정공 주입성이 높은 물질로서는 예를 들어, 몰리브덴 산화물, 티타늄 산화물, 바나듐 산화물, 레늄 산화물, 루테튬 산화물, 크롬 산화물, 지르코늄 산화물, 하프늄 산화물, 탄탈 산화물, 은 산화물, 텅스텐 산화물, 망간 산화물 등의 금속 산화물을 사용할 수 있다. 또한, 프탈로시아닌(약칭: H<sub>2</sub>Pc), 구리(II)프탈로시아닌(약칭: CuPc) 등의 프탈로시아닌계의 화합물을 사용할 수 있다.

[0204] 또한, 저분자의 유기 화합물인 4,4',4''-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민(약칭: TDATA), 4,4',4''-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트리페닐아민(약칭: MTDATA), 4,4'-비스[N-(4-디페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: DPAB), 4,4'-비스[N-(4-[N'-(3-메틸페닐)-N'-페닐아미노]페닐)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: DNTPD), 1,3,5-트리스[N-(4-디페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]벤젠(약칭: DPA3B), 3-[N-(9-페닐카르바졸-3-일)-N-페닐아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzPCA1), 3,6-비스[N-(9-페닐카르바졸-3-일)-N-페닐아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzPCA2), 3-[N-(1-나프틸)-N-(9-페닐카르바졸-3-일)아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzPCN1) 등의 방향족 아민 화합물 등을 사용할 수 있다.

[0205] 또한, 고분자화합물(올리고머, 덴드리머, 폴리머 등)을 사용할 수도 있다. 예를 들어, 폴리(N-비닐카르바졸)(약칭: PVK), 폴리(4-비닐트리페닐아민)(약칭: PVTPA), 폴리[N-(4-{N'-[4-(4-디페닐아미노)페닐]페닐-N'-페닐아미노}페닐)메타크릴아미드](약칭: PTPDMA), 폴리[N,N'-비스(4-부틸페닐)-N,N'-비스(페닐)벤지딘](약칭: Poly-TPD) 등의 고분자 화합물을 들 수 있다. 또한, 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(스티렌설포산)(PEDOT/PSS), 폴리아닐린/폴리(스티렌설포산)(PAni/PSS) 등의 산을 첨가한 고분자 화합물을 사용할 수 있다.

[0206] 또한, 정공 주입층(111)으로서 유기 화합물과 전자 수송체(억셉터)를 혼합하여 이루어진 복합 재료를 사용해도 좋다. 이와 같은 복합 재료는 전자 수송체에 의하여 유기 화합물에 정공이 발생하기 때문에, 정공 주입성 및 정공 수송성이 우수하다. 이 경우, 유기 화합물은 발생한 정공을 우수하게 수송할 수 있는 재료(정공 수송성이 높은 물질)인 것이 바람직하다.

[0207] 복합 재료에 사용하는 유기 화합물로서, 방향족 아민 화합물, 카르바졸 유도체, 방향족 탄화수소, 고분자 화합물(올리고머, 덴드리머, 폴리머 등) 등 다양한 화합물을 사용할 수 있다. 또한, 복합 재료에 사용하는 유기 화합물로서는 정공 수송성이 높은 유기 화합물인 것이 바람직하다. 구체적으로는, 10<sup>-6</sup> cm<sup>2</sup>/Vs 이상의 정공 이동도를 갖는 물질인 것이 바람직하다. 다만, 전자보다 정공의 수송성이 높은 물질이면 이들 이외의 물질을 사용하여도 좋다. 이하에서는, 복합 재료에 사용할 수 있는 유기 화합물을 구체적으로 열거한다.

[0208] 복합 재료에 사용할 수 있는 유기 화합물로서는, 예를 들어 TDATA, MTDATA, DPAB, DNTPD, DPA3B, PCzPCA1, PCzPCA2, PCzPCN1, 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: NPB 또는 α-NPD), N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(약칭: TPD), 4-페닐-4'-(9-페닐플루오렌-9-일)트리페닐아민(약칭: BPAFLP) 등의 방향족 아민 화합물이나, 4,4'-디(N-카르바졸릴)비페닐(약칭: CBP), 1,3,5-트리스[4-(N-카르바졸릴)페닐]벤젠(약칭: TCPB), 9-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]-9H-카르바졸(약칭: CzPA), 9-페닐-3-[4-(10-페닐-9-안트릴)페닐]-9H-카르바졸(약칭: PCzPA), 1,4-비스[4-(N-카르바졸릴)페닐]-2,3,5,6-테트라페닐벤젠 등의 카르바졸 유도체를 사용할 수 있다.

[0209] 또한, 2-tert-부틸-9,10-디(2-나프틸)안트라센(약칭: t-BuDNA), 2-tert-부틸-9,10-디(1-나프틸)안트라센, 9,10-비스(3,5-디페닐페닐)안트라센(약칭: DPPA), 2-tert-부틸-9,10-비스(4-페닐페닐)안트라센(약칭: t-BuDBA), 9,10-디(2-나프틸)안트라센(약칭: DNA), 9,10-디페닐안트라센(약칭: DPAnth), 2-tert-부틸안트라센(약칭: t-BuAnth), 9,10-비스(4-메틸-1-나프틸)안트라센(약칭: DMNA), 9,10-비스[2-(1-나프틸)페닐]-2-tert-부틸

안트라센, 9,10-비스[2-(1-나프틸)페닐]안트라센, 2,3,6,7-테트라메틸-9,10-디(1-나프틸)안트라센 등의 방향족 탄화수소 화합물을 사용할 수 있다.

- [0210] 또한, 2,3,6,7-테트라메틸-9,10-디(2-나프틸)안트라센, 9,9'-비안트릴, 10,10'-디페닐-9,9'-비안트릴, 10,10'-비스(2-페닐페닐)-9,9'-비안트릴, 10,10'-비스[(2,3,4,5,6-펜타페닐)페닐]-9,9'-비안트릴, 안트라센, 테트라센, 루브렌, 페틸렌, 2,5,8,11-테트라(*tert*-부틸)페틸렌, 펜타센, 코로넨, 4,4'-비스(2,2-디페닐비닐)비페닐(약칭: DPVBi), 9,10-비스[4-(2,2-디페닐비닐)페닐]안트라센(약칭: DPVPA) 등의 방향족 탄화수소 화합물을 사용할 수 있다.
- [0211] 또한, 전자 수용체로서는 7,7,8,8-테트라시아노-2,3,5,6-테트라플루오르퀴노디메탄(약칭: F<sub>4</sub>-TCNQ), 클로라닐 등의 유기 화합물이나, 전이 금속 산화물을 들 수 있다. 또한 원소 주기율표 제 4족 내지 제 8족에 속하는 금속의 산화물을 들 수 있다. 구체적으로는, 산화바나듐, 산화니오브, 산화탄탈, 산화크롬, 산화몰리브덴, 산화텅스텐, 산화망간, 산화레늄은 전자 수용성이 높기 때문에 바람직하다. 그 중에서도, 특히 산화몰리브덴은 대기 중에서도 안정적이고 흡습성이 낮으며 취급하기 쉽기 때문에 바람직하다.
- [0212] 또한, 상술한 PVK, PVTPA, PTPDMA, Poly-TPD 등의 고분자 화합물과, 상술한 전자 수용체를 사용하여 복합 재료를 형성하여, 정공 주입층(111)에 사용하여도 좋다.
- [0213] 정공 수송층(112)은 정공 수송성이 높은 물질을 포함한 층이다. 정공 수송성이 높은 물질로서는, 예를 들어 카르바졸 골격, 트리아릴아민 골격, 디벤조티오펜 골격, 또는 디벤조푸란 골격을 갖는 물질을 사용할 수 있다. 구체적으로는, 예를 들어 NPB, TPD, BPAFLP, 4,4'-비스[N-(9,9-디메틸플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: DFLDPBi), 4,4'-비스[N-(스피로-9,9'-비플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: BSPB) 등의 방향족 아민 화합물을 사용할 수 있다. 여기서 기술한 물질은 주로 10<sup>-6</sup> cm<sup>2</sup>/Vs 이상의 정공 이동도를 갖는 물질이다. 다만, 전자보다 정공의 수송성이 높은 물질이면 이들 이외의 물질을 사용하여도 좋다. 또한, 정공 수송성이 높은 물질을 포함한 층은 단층에 한정되지 않고 상기 물질로 이루어진 층이 2층 이상 적층된 것으로 하여도 좋다.
- [0214] 또한, 정공 수송층(112)에는 CBP, CzPA, PCzPA와 같은 카르바졸 유도체나 t-BuDNA, DNA, DPAnth와 같은 안트라센 유도체를 사용하여도 좋다.
- [0215] 또한, 정공 수송층(112)에는 PVK, PVTPA, PTPDMA, Poly-TPD 등의 고분자 화합물을 사용할 수도 있다.
- [0216] 발광층(113)은 발광 물질을 포함한 층이다. 본 실시형태에서는 실시형태 1에 기재된 복소환 화합물을 발광층에 포함한다.
- [0217] 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물은 발광성 유기 화합물이기 때문에, 발광 물질로서 사용할 수 있다.
- [0218] 또한, 발광 물질(게스트 재료)을 다른 물질(호스트 재료)에 분산시킨 구성의 발광층에서, 상기 복소환 화합물을 호스트 재료로서 사용할 수 있다. 상기 복소환 화합물에 발광 물질인 게스트 재료를 분산시킨 구성으로 함으로써, 게스트 재료로부터의 발광을 얻을 수 있다. 이와 같이, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 발광층에서의 호스트 재료로서 사용하는 것이 유용하다.
- [0219] 또한, 발광 물질(게스트 재료)을 분산시키기 위한 물질(호스트 재료)은 복수 종류 사용할 수 있다.
- [0220] 또한, 발광층은 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물 및 게스트 재료뿐만 아니라, 다른 재료를 포함하여도 좋다.
- [0221] 발광 물질로서는 예를 들어, 형광을 발광하는 형광성 화합물이나 인광을 발광하는 인광성 화합물을 사용할 수 있다. 발광층(113)에 사용할 수 있는 형광성 물질로서는 예를 들어, 청색계의 발광 재료로서, N,N'-비스[4-(9H-카르바졸-9-일)페닐]-N,N'-디페닐스티벤-4,4'-디아민(약칭: YGA2S), 4-(9H-카르바졸-9-일)-4'-(10-페닐-9-안트릴)트리페닐아민(약칭: YGAPA), 4-(10-페닐-9-안트릴)-4'-(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)트리페닐아민(약칭: PCBAPA) 등을 들 수 있다. 또한, 녹색계의 발광 재료로서, N-(9,10-디페닐-2-안트릴)-N,9-디페닐-9H-카르바졸-3-아민(약칭: 2PCAPA), N-[9,10-비스(1,1'-비페닐-2-일)-2-안트릴]-N,9-디페닐-9H-카르바졸-3-아민(약칭: 2PCABPhA), N-(9,10-디페닐-2-안트릴)-N,N',N'-트리페닐-1,4-페닐렌디아민(약칭: 2DPAPA), N-[9,10-비스(1,1'-비페닐-2-일)-2-안트릴]-N,N',N'-트리페닐-1,4-페닐렌디아민(약칭: 2DPABPhA), N-[9,10-비스(1,1'-비페닐-2-일)-N-[4-(9H-카르바졸-9-일)페닐]-N-페닐안트라센-2-아민(약칭: 2YGABPhA), N,N,9-트리페닐안트라센-9-아민(약칭: DPhAPhA) 등을 들 수 있다. 또한, 황색계 발광 재료로서, 루브렌, 5,12-비스(1,1'-비페닐-4-일)-6,11-디페닐테트라센(약칭: BPT) 등을 들 수 있다. 또한, 적색계 발광 재료로서는,

N,N,N',N'-테트라키스(4-메틸페닐)테트라센-5,11-디아민(약칭: p-mPhTD), 7,14-디페닐-N,N,N',N'-테트라키스(4-메틸페닐)아세나프토[1,2-a]플루오란텐-3,10-디아민(약칭: p-mPhAFD) 등을 들 수 있다.

[0222] 또한, 발광층(113)에 사용할 수 있는 인광성 화합물로서는 예를 들어, 녹색계의 발광 재료로서, 트리스(2-페닐피리디나토-N,C<sup>2'</sup>)이리듐(III)(약칭: [Ir(ppy)<sub>3</sub>]), 비스(2-페닐피리디나토-N,C<sup>2'</sup>)이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: [Ir(ppy)<sub>2</sub>(acac)]), 비스(1,2-디페닐-1H-벤즈이미다졸라토)이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: [Ir(pbi)<sub>2</sub>(acac)]), 비스(벤조[h]퀴놀리나토)이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: [Ir(bzq)<sub>2</sub>(acac)]), 트리스(벤조[h]퀴놀리나토)이리듐(III)(약칭: [Ir(bzq)<sub>3</sub>]) 등을 들 수 있다. 또한, 황색계의 발광 재료로서, 비스(2,4-디페닐-1,3-옥사졸라토-N,C<sup>2'</sup>)이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: [Ir(dpo)<sub>2</sub>(acac)]), 비스[2-(4'-피플루오르페닐페닐)피리디나토]이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: [Ir(p-PF-ph)<sub>2</sub>(acac)]), 비스(2-페닐벤조티아졸라토-N,C<sup>2'</sup>)이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: [Ir(bt)<sub>2</sub>(acac)]), (아세틸아세토나토)비스[2,3-비스(4-플루오르페닐)-5-메틸피라지나토]이리듐(III)(약칭: [Ir(Fdppr-Me)<sub>2</sub>(acac)]), (아세틸아세토나토)비스[2-(4-메톡시페닐)-3,5-디메틸피라지나토]이리듐(III)(약칭: [Ir(dmmoppr)<sub>2</sub>(acac)]) 등을 들 수 있다. 또한, 주황색계의 발광 재료로서, 트리스(2-페닐퀴놀리나토-N,C<sup>2'</sup>)이리듐(III)(약칭: [Ir(pq)<sub>3</sub>]), 비스(2-페닐퀴놀리나토-N,C<sup>2'</sup>)이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: [Ir(pq)<sub>2</sub>(acac)]), (아세틸아세토나토)비스(3,5-디메틸-2-페닐피라지나토)이리듐(III)(약칭: [Ir(mppr-Me)<sub>2</sub>(acac)]), (아세틸아세토나토)비스(5-이소프로필-3-메틸-2-페닐피라지나토)이리듐(III)(약칭: [Ir(mppr-iPr)<sub>2</sub>(acac)]) 등을 들 수 있다. 또한, 적색계 발광 재료로서, 비스[2-(2'-벤조[4,5-a]티에닐)피리디나토-N,C<sup>3'</sup>]이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: [Ir(btp)<sub>2</sub>(acac)]), 비스(1-페닐이소퀴놀리나토-N,C<sup>2'</sup>)이리듐(III)아세틸아세토네이트(약칭: [Ir(piq)<sub>2</sub>(acac)]), (아세틸아세토나토)비스[2,3-비스(4-플루오르페닐)퀴놀살리나토]이리듐(III)(약칭: [Ir(Fdpq)<sub>2</sub>(acac)]), (아세틸아세토나토)비스(2,3,5-트리페닐피라지나토)이리듐(III)(약칭: [Ir(tppr)<sub>2</sub>(acac)]), (디피바로일메타나토)비스(2,3,5-트리페닐피라지나토)이리듐(III)(약칭: [Ir(tppr)<sub>2</sub>(dpm)]), 2,3,7,8,12,13,17,18-옥타에틸-21H,23H-포르피린 백금(II)(약칭: PtOEP) 등 유기 금속 착체를 들 수 있다. 또한, 트리스(아세틸아세토나토)(모노페난트롤린)테르븀(III)(약칭: [Tb(acac)<sub>3</sub>(Phen)]), 트리스(1,3-디페닐-1,3-프로판디오나토)(모노페난트롤린)유로퓸(III)(약칭: [Eu(DBM)<sub>3</sub>(Phen)]), 트리스[1-(2-테노일)-3,3,3-트리플루오로아세토나토](모노페난트롤린)유로퓸(III)(약칭: [Eu(TTA)<sub>3</sub>(Phen)]) 등의 희토류 금속 착체는 희토류 금속 이온으로부터의 발광(상이한 다중도간의 전자 전이(electron transition))이기 때문에, 인광성 화합물로서 사용할 수 있다.

[0223] 또한, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물은, 디벤조[f,h]퀴놀살린 골격이 LUMO 준위에 대하여 지배적인 골격이라고 생각할 수 있다. 또한, 상기 화합물은 사이클릭 볼타메트리(CV) 측정에 따르면, 적어도 -2.8eV 이하, 구체적으로는 -2.9eV 이하의 깊은 LUMO 준위를 갖는다. 예를 들어, 실시예 3에 따르면, CV 측정으로 구한 DBqPPn(약칭)의 LUMO 준위는 -2.95eV이다. 한편, 상술한 [Ir(mppr-Me)<sub>2</sub>(acac)], [Ir(mppr-iPr)<sub>2</sub>(acac)], [Ir(tppr)<sub>2</sub>(acac)], [Ir(tppr)<sub>2</sub>(dpm)]와 같은 피라진 골격을 갖는 인광성 화합물도 대략 동등의 깊은 LUMO 준위를 갖는다. 따라서, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 호스트 재료로 하고, 피라진 골격을 갖는 인광성 화합물을 게스트 재료로 한 발광층의 구성은, 발광층 내에서 전자가 트랩되는 것을 최대한 억제할 수 있어, 매우 낮은 전압으로 발광 소자를 구동할 수 있다.

[0224] 또한, 호스트 재료는 게스트 재료(발광 물질)보다 깊은 HOMO 준위, 또 얇은 LUMO 준위를 갖는 것이 바람직하다. 이와 같은 구성으로 하면, 호스트 재료에 주입된 캐리어를 게스트 재료에 효율적으로 주입하기 쉽게 된다. 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물은 비교적으로 깊은(값이 작은) HOMO 준위와 얇은(값이 큰) LUMO 준위를 갖기 때문에 호스트 재료로서 바람직하다. 보다 구체적으로는, 게스트 재료의 HOMO 준위는 -6.0eV 이상 -5.0eV 이하인 것이 바람직하다. 게스트 재료의 LUMO 준위는 -3.5eV 이상 -2.5eV 이하인 것이 바람직하다.

[0225] 또한, 발광 물질로서 고분자 화합물을 사용할 수 있다. 구체적으로는, 청색계 발광 재료로서, 폴리(9,9-디옥틸플루오렌-2,7-디일)(약칭: PFO), 폴리[(9,9-디옥틸플루오렌-2,7-디일)-co-(2,5-디메톡시벤젠-1,4-디일)](약칭:

PF-DMOP), 폴리((9,9-디옥틸플루오렌-2,7-디일)-co-[N,N'-디-(p-부틸페닐)-1,4-디아미노벤젠])(약칭: TAB-PFH) 등을 들 수 있다. 또한, 녹색계의 발광 재료로서, 폴리(p-페닐렌비닐렌)(약칭: PPV), 폴리[(9,9-디헥실플루오렌-2,7-디일)-alt-co-(벤조[2,1,3]티아디아졸-4,7-디일)](약칭: PFBT), 폴리[(9,9-디옥틸-2,7-디비닐렌플루오렌)-alt-co-(2-메톡시-5-(2-에틸헥실옥시)-1,4-페닐렌)] 등을 들 수 있다. 또한, 주황색 내지 적색계의 발광 재료로서, 폴리[2-메톡시-5-(2'-에틸헥실옥시)-1,4-페닐렌비닐렌](약칭: MEH-PPV), 폴리(3-부틸티오펜-2,5-디일)(약칭: R4-PAT), 폴리{[9,9-디헥실-2,7-비스(1-시아노비닐렌)플루오레닐렌]-alt-co-[2,5-비스(N,N'-디페닐아미노)-1,4-페닐렌]}, 폴리{[2-메톡시-5-(2-에틸헥실옥시)-1,4-비스(1-시아노비닐렌페닐렌)-alt-co-[2,5-비스(N,N'-디페닐아미노)-1,4-페닐렌]}(약칭: CN-PPV-DPD) 등을 들 수 있다.

[0226] 본 실시형태에서 기재하는 발광층(113)의 다른 형태에 대하여 설명한다. 발광층(113)은 인광성 화합물, 제 1 유기 화합물, 및 제 2 유기 화합물을 포함한 구성으로 할 수 있다. 인광성 화합물은 발광층(113)에서의 게스트 재료(발광 물질)이다. 또한, 제 1 유기 화합물 및 제 2 유기 화합물 중, 발광층(113)에 포함되는 비율이 많은 쪽을 발광층(113)에서의 호스트 재료로 한다. 제 1 유기 화합물 또는 제 2 유기 화합물로서, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 사용할 수 있다.

[0227] 발광층(113)에서, 상기 게스트 재료를 호스트 재료에 분산시킴으로써 발광층의 결정화를 억제할 수 있다. 또한, 게스트 재료의 농도가 높음에 기인하는 농도 소광을 억제하여 발광 소자의 발광 효율을 높일 수 있다.

[0228] 또한, 제 1 유기 화합물 및 제 2 유기 화합물 각각의 T1 준위는 인광성 화합물의 T1 준위보다 높은 것이 바람직하다. 제 1 유기 화합물(또는 제 2 유기 화합물)의 T1 준위가 인광성 화합물의 T1 준위보다 낮으면, 발광에 기여하는 인광성 화합물의 3중항 여기 에너지를 제 1 유기 화합물(또는 제 2 유기 화합물)이 소광(퀵칭)하여, 발광 효율의 저하를 초래하기 때문이다.

[0229] 인광성 화합물로서는, 인광성 유기 금속 이리듐 착체 등을 사용할 수 있다. 또한, 제 1 유기 화합물 및 제 2 유기 화합물로서는, 전자를 받기 쉬운 화합물(전자 수송성 화합물)과, 정공을 받기 쉬운 화합물(정공 수송성 화합물)을 조합하는 것이 바람직하다.

[0230] 전자 수송성 화합물로서 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 사용할 수 있다.

[0231] 정공 수송성 화합물로서는, 전자 수송성 화합물로서 사용하는 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물보다 정공 수송성이 높은 화합물을 사용한다. 예를 들어, 상기에서 기재한, 정공 수송층(112)에 사용할 수 있는 화합물을 적용할 수 있다. 예를 들어, 카르바졸 골격, 트리아릴아민 골격, 디벤조티오펜 골격, 또는 디벤조푸란 골격을 갖는 물질을 사용할 수 있다. 다만, 이들 화합물로서는 사용하는 인광성 화합물보다 T1 준위가 높은 것을 선택한다. 또한, 정공 수송성 화합물의 HOMO 준위와 인광성 화합물의 HOMO 준위의 차이가 0.2eV 이내이면, 인광성 화합물이 정공을 많이 트랩하지 않기 때문에 발광 영역이 넓어져 바람직하다. 구체적으로는, 예를 들어 4-페닐-4'-(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)트리페닐아민(약칭: PCBA1BP), PCzPCN1, 4,4',4''-트리스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]트리페닐아민(약칭: 1'-TNATA), 2,7-비스[N-(4-디페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]-스피로-9,9'-비플루오렌(약칭: DPA2SF), N,N'-비스(9-페닐카르바졸-3-일)-N,N'-디페닐벤젠-1,3-디아민(약칭: PCA2B), N-(9,9-디메틸-2-N',N'-디페닐아미노-9H-플루오렌-7-일)디페닐아민(약칭: DPNF), N,N',N''-트리페닐-N,N',N''-트리스(9-페닐카르바졸-3-일)벤젠-1,3,5-트리아민(약칭: PCA3B), 2-[N-(9-페닐카르바졸-3-일)-N-페닐아미노]스피로-9,9'-비플루오렌(약칭: PCASF), 2-[N-(4-디페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]스피로-9,9'-비플루오렌(약칭: DPASF), N,N'-비스[4-(카르바졸-9-일)페닐]-N,N'-디페닐-9,9-디메틸플루오렌-2,7-디아민(약칭: YGA2F), TPD, DPAB, N-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-N-(9,9-디메틸-2-[N'-페닐-N''-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)아미노]-9H-플루오렌-7-일)페닐아민(약칭: DFLADFL), PCzPCA1, 3-[N-(4-디페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzDPA1), 3,6-비스[N-(4-디페닐아미노페닐)-N-페닐아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzDPA2), DNTPD, 3,6-비스[N-(4-디페닐아미노페닐)-N-(1-나프틸)아미노]-9-페닐카르바졸(약칭: PCzTPN2), PCzPCA2를 들 수 있다.

[0232] 또한, 전자를 받기 쉬운 화합물과 정공을 받기 쉬운 화합물로 제 1 유기 화합물과 제 2 유기 화합물을 구성하는 경우 그 혼합비에 의하여 캐리어 밸런스를 제어할 수 있다. 구체적으로는, 제 1 유기 화합물:제 2 유기 화합물=1:9 내지 9:1의 범위가 바람직하다.

[0233] 전자 수송층(114)은 전자 수송성이 높은 물질을 포함한 층이다. 전자 수송성이 높은 물질로서 예를 들어, 트리스(8-퀴놀리놀라토)알루미늄(약칭: Alq), 트리스(4-메틸-8-퀴놀리놀라토)알루미늄(약칭: Almq<sub>3</sub>), 비스(10-히드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨(약칭: BeBq<sub>2</sub>), 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀라토)(4-페닐페놀라토)알루미늄(약칭: BA1q) 등, 퀴놀린 골격 또는 벤조퀴놀린 골격을 갖는 금속 착체 등을 들 수 있다. 또한, 이밖에 비스[2-(2-하

이드록시페닐)벤조옥사졸라토]아연(약칭: Zn(BOX)<sub>2</sub>), 비스[2-(2-하이드록시페닐)벤조티아졸라토]아연(약칭: Zn(BTZ)<sub>2</sub>) 등의 옥사졸계, 티아졸계 배위자를 갖는 금속 착체 등도 사용할 수 있다. 또한, 금속 착체 외에도, 2-(4-비페닐일)-5-(4-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(약칭: PBD)나, 1,3-비스[5-(p-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸-2-일]벤젠(약칭: OXD-7), 3-(4-비페닐릴)-4-페닐-5-(4-tert-부틸페닐)-1,2,4-트리아졸(약칭: TAZ), 바소페난트롤린(약칭: BPhen), 바소큐프로인(약칭: BCP) 등도 사용할 수 있다. 여기에 든 물질은 주로 10<sup>6</sup> cm<sup>2</sup>/Vs 이상의 전자 이동도를 갖는 물질이다. 또한, 전자 수송층은 단층뿐만 아니라, 상기 물질로 이루어지는 층이 2층 이상 적층된 것으로 하여도 좋다.

[0234] 전자 주입층(115)은 전자 주입성이 높은 물질을 포함한 층이다. 전자 주입층(115)에는, 리튬, 세슘, 칼슘, 불화리튬, 불화세슘, 불화칼슘, 리튬 산화물 등과 같은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 또는 이들의 화합물을 사용할 수 있다. 또한, 불화에르븀과 같은 희토류 금속 화합물을 사용할 수 있다. 또한, 전술한 전자 수송층(114)을 구성하는 물질을 사용할 수도 있다.

[0235] 또는, 전자 주입층(115)에 유기 화합물과 전자 공여체(도너)를 혼합하여 이루어지는 복합 재료를 사용하여도 좋다. 이와 같은 복합 재료는 전자 공여체에 의하여 유기 화합물에 전자가 발생하기 때문에, 전자 주입성 및 전자 수송성이 우수하다. 이 경우, 유기 화합물로서는, 발생한 전자의 수송이 우수한 재료인 것이 바람직하고, 구체적으로는, 예를 들면, 상술한 전자 수송층(114)을 구성하는 물질(금속 착체나 복소 방향족 화합물 등)을 사용할 수 있다. 전자 공여체로서는, 유기 화합물에 대하여 전자 공여성을 나타내는 물질이면 좋다. 구체적으로는, 알칼리 금속이나 알칼리 토금속이나 희토류 금속이 바람직하고, 리튬, 세슘, 마그네슘, 칼슘, 에르븀, 이테르븀 등을 들 수 있다. 또한, 알칼리 금속 산화물이나 알칼리 토금속 산화물이 바람직하고, 리튬 산화물, 칼슘 산화물, 바륨 산화물 등을 들 수 있다. 또한, 산화 마그네슘과 같은 루이스 염기를 사용할 수도 있다. 또한, 테트라티아플발렌(약칭: TTF) 등의 유기 화합물을 사용할 수도 있다.

[0236] 또한, 상술한 정공 주입층(111), 정공 수송층(112), 발광층(113), 전자 수송층(114), 전자 주입층(115)은 각각 증착법(진공 증착법을 포함함), 잉크젯법, 도포법 등의 방법으로 형성할 수 있다.

[0237] 제 2 전극(103)은, 제 2 전극(103)이 음극으로서 기능할 때는 일함수가 작은(바람직하게는 3.8eV 이하) 금속, 합금, 도전성 화합물 및 이들의 혼합물 등을 사용하여 형성하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 원소 주기율표의 제 1족 또는 제 2족에 속하는 원소, 즉 리튬이나 세슘 등의 알칼리 금속, 및 칼슘, 스트론튬 등의 알칼리 토금속, 마그네슘(Mg), 및 이것들을 포함하는 합금(예를 들면, Mg-Ag, Al-Li), 유로퓸, 이테르븀 등의 희토류 금속 및 이것들을 포함하는 합금 이외에, 알루미늄이나 은 등을 사용할 수 있다.

[0238] 다만, EL층(102) 중에서, 제 2 전극(103)에 접하여 형성되는 층에 상술한 유기 화합물과 전자 공여체(도너)를 혼합하여 이루어지는 복합 재료를 사용하는 경우에는, 일함수의 대소에 관계없이 알루미늄, 은, ITO, 실리콘 또는 산화실리콘을 함유한 산화인듐-산화주석 등 다양한 도전성 재료를 사용할 수 있다.

[0239] 또한, 제 2 전극(103)을 형성하는 경우에는, 진공 증착법이나 스퍼터링법을 사용할 수 있다. 또한 은 페이스트 등을 사용할 경우에는, 도포법이나 잉크젯법 등을 사용할 수 있다.

[0240] 상술한 발광 소자는, 제 1 전극(101)과 제 2 전극(103) 사이에 생긴 전위차에 의하여 전류가 흘러, EL층(102)에서 정공과 전자가 재결합함으로써 발광한다. 그리고, 이 발광은 제 1 전극(101) 또는 제 2 전극(103) 중 어느 한쪽 또는 양쪽 모두를 통하여 외부에 추출된다. 따라서, 제 1 전극(101) 또는 제 2 전극(103) 중 어느 한쪽 또는 양쪽 모두가 가시광에 대한 투광성을 갖는 전극이 된다.

[0241] 또한, 제 1 전극(101)과 제 2 전극(103) 사이에 형성되는 층의 구성은 상술한 것에 한정되지 않는다. 발광 영역과 금속이 근접됨으로써 발생하는 소광을 방지하도록 제 1 전극(101) 및 제 2 전극(103)으로부터 떨어진 부위에 정공과 전자가 재결합하는 발광 영역을 형성한 구성이라면 상기 이외의 것이라도 좋다.

[0242] 즉, 층의 적층 구조는 특별히 한정되지 않고, 전자 수송성이 높은 물질, 정공 수송성이 높은 물질, 전자 주입성이 높은 물질, 정공 주입성이 높은 물질, 바이폴러성(전자 및 정공의 수송성이 높은)의 물질, 또는 정공 블록 재료 등으로 이루어진 층을, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 호스트 재료로서 포함하는 발광층과 자유롭게 조합시켜서 구성하면 좋다.

[0243] 또한, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물은 전자 수송성이 높은 물질이기 때문에, 전자 수송층에 사용할 수 있다.

- [0244] 또한, 발광층(특히 발광층의 호스트 재료) 및 전자 수송층의 양쪽에 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 적용함으로써, LUMO 준위가 가까운 재료가 접하기 때문에, 전자 수송층으로부터 발광층으로 전자가 양호하게 주입된다. 따라서, 매우 낮은 구동 전압을 실현할 수 있다.
- [0245] 도 1(B)에 도시한 발광 소자는, 기판(100) 위에서 한 쌍의 전극, 제 1 전극(101) 및 제 2 전극(103), 사이에 EL층(102)이 형성된다. EL층(102)은 정공 주입층(111), 정공 수송층(112), 발광층(113), 전자 수송층(114), 전자 주입층(115)을 갖는다. 도 1(B)에서의 발광 소자는, 기판(100) 위에 음극으로서 기능하는 제 2 전극(103)과, 제 2 전극(103) 위에 순차적으로 적층된 전자 주입층(115), 전자 수송층(114), 발광층(113), 정공 수송층(112), 정공 주입층(111)과, 또 그 위에 형성된 양극으로서 기능하는 제 1 전극(101)으로 구성된다.
- [0246] 이하에서, 발광 소자의 구체적인 형성 방법을 기재한다.
- [0247] 본 실시형태의 발광 소자는 한 쌍의 전극 사이에 EL층이 협지된 구조이다. EL층은 적어도 발광층을 갖고, 발광층은 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 호스트 재료로서 사용하여 형성된다. 또한, EL층은 발광층 이외에 기능층(정공 주입층, 정공 수송층, 전자 수송층, 전자 주입층 등)을 포함하여도 좋다. 전극(제 1 전극 및 제 2 전극), 발광층 및 기능층은 액적 도출법(잉크젯법), 스펀코팅법, 인쇄법 등의 습식법을 사용하여 형성하여도 좋고, 진공 증착법, CVD법, 스퍼터링법 등의 건식법을 사용하여 형성하여도 좋다. 습식법을 사용하면 대기압하에서 형성할 수 있기 때문에, 간이한 장치 및 공정으로 형성할 수 있고 공정이 간략화되고 생산성이 향상되는 효과가 있다. 한편, 건식법은 재료를 용해시킬 필요가 없기 때문에 용액에 용해되기 어려운 재료를 사용할 수 있고 다양하게 재료를 선택할 수 있다.
- [0248] 발광 소자를 구성하는 모든 박막을 습식법으로 형성하여도 좋다. 이 경우, 습식법에 필요한 설비만으로 발광 소자를 형성할 수 있다. 또한, 발광층을 형성할 때까지의 적층을 습식법으로 행하고, 발광층 위에 적층하는 기능층이나 제 1 전극 등을 건식법으로 형성하여도 좋다. 또한, 발광층을 형성하기 전의 제 2 전극이나 기능층을 건식법으로 형성하고, 발광층 및 발광층 위에 적층하는 기능층이나 제 1 전극을 습식법으로 형성하여도 좋다. 물론, 본 실시형태는 이것에 한정되지 않고, 사용하는 재료나 필요한 막 두께, 계면 상태에 따라 적절히 습식법과 건식법을 선택하고 조합하여 발광 소자를 제작할 수 있다.
- [0249] 본 실시형태에서는, 유리, 플라스틱 등으로 이루어진 기판 위에 발광 소자를 제작한다. 한 기판 위에 이러한 발광 소자를 복수 제작함으로써, 패시브 매트릭스형의 발광 장치를 제작할 수 있다. 또한, 유리, 플라스틱 등으로 이루어진 기판 위에, 예를 들어, 박막 트랜지스터(TFT)를 형성하고, TFT와 전기적으로 접속된 전극 위에 발광 소자를 제작하여도 좋다. 이로써, TFT에 의하여 발광 소자의 구동을 제어하는 액티브 매트릭스형 발광 장치를 제작할 수 있다. 또한, TFT의 구조는 특별히 한정되지 않는다. 스테거형 TFT라도 좋고, 역스테거형 TFT라도 좋다. 또한, TFT에 사용하는 반도체의 결정성에 관하여도 특별히 한정되지 않고, 비정질 반도체를 사용하여도 좋고, 결정성 반도체를 사용하여도 좋다. 또한, TFT 기판에 형성되는 구동용 회로에 관하여도 N형 및 P형의 TFT로 이루어지는 것이라도 좋고, N형 또는 P형 중 어느 한 쪽만으로 이루어지는 것이라도 좋다.
- [0250] 이상과 같이, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 사용하여 발광 소자를 제작할 수 있다. 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물을 발광 소자에 사용함으로써, 구동 전압이 낮은 발광 소자를 얻을 수 있다. 또한, 발광 효율이 높은 발광 소자를 얻을 수 있다. 또한, 장수명인 발광 소자를 얻을 수 있다.
- [0251] 또한, 이와 같이 함으로써 얻어진 본 발명의 일 형태인 발광 소자를 사용한 발광 장치(화상 표시 디바이스)는 저소비 전력을 실현할 수 있다.
- [0252] 또한, 본 실시형태에서 나타난 발광 소자를 사용하여 패시브 매트릭스형 발광 장치나, 박막 트랜지스터(TFT)에 의하여 발광 소자의 구동을 제어하는 액티브 매트릭스형 발광 장치를 제작할 수 있다.
- [0253] 본 실시형태는 다른 실시형태와 적절히 조합하여 사용할 수 있다.
- [0254] (실시형태 3)
- [0255] 본 실시형태는, 복수의 발광 유닛을 적층한 구성의 발광 소자(이하, 적층형 소자라고 함)의 형태에 대하여 도 2(A) 및 도 2(B)를 참조하여 설명한다. 이 발광 소자는, 제 1 전극과 제 2 전극 사이에 복수의 발광 유닛을 갖는 발광 소자이다.
- [0256] 도 2(A)에서, 제 1 전극(301)과 제 2 전극(303) 사이에는 제 1 발광 유닛(311)과 제 2 발광 유닛(312)이 적층된다. 본 실시형태에서, 제 1 전극(301)은 양극으로서 기능하는 전극이고, 제 2 전극(303)은 음극으로서 기능하는 전극이다. 제 1 전극(301)과 제 2 전극(303)은 실시형태 2와 같은 것을 적용할 수 있다. 제 1 발광 유닛

(311)과 제 2 발광 유닛(312)은 같은 구성이라도 좋고 다른 구성이라도 좋다. 또한, 제 1 발광 유닛(311)과 제 2 발광 유닛(312)은 그 구성으로서 실시형태 2와 같은 것을 적용하여도 좋고, 어느 하나가 다른 구성이라도 좋다.

[0257] 또한, 제 1 발광 유닛(311)과 제 2 발광 유닛(312) 사이에는 전하 발생층(313)이 형성된다. 전하 발생층(313)은 제 1 전극(301)과 제 2 전극(303)에 전압을 인가할 때, 한쪽의 발광 유닛에 전자를 주입하고 다른 쪽의 발광 유닛에 정공을 주입하는 기능을 갖는다. 본 실시형태의 경우에는 제 1 전극(301)에 제 2 전극(303)보다 전위가 높게 되도록 전압을 인가하면, 전하 발생층(313)으로부터 제 1 발광 유닛(311)에 전자가 주입되고 제 2 발광 유닛(312)에 정공이 주입된다.

[0258] 또한, 전하 발생층(313)은 광의 추출 효율의 관점에서 가시광에 대한 투광성을 갖는 것이 바람직하다. 또한, 전하 발생층(313)은 제 1 전극(301)이나 제 2 전극(303)보다 낮은 도전율이라도 기능한다.

[0259] 전하 발생층(313)은 정공 수송성이 높은 유기 화합물과 전자 수송체(억셉터)를 포함하는 구성이라도 좋고, 전자 수송성이 높은 유기 화합물과 전자 공여체(도너)를 포함하는 구성이라도 좋다. 또한 이들 두 구성이 적층되어 있어도 좋다.

[0260] 정공 수송성이 높은 유기 화합물에 전자 수송체가 첨가된 구성으로 하는 경우에서, 정공 수송성이 높은 유기 화합물로서는 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물 이외에, 예를 들어, NPB나 TPD, TDATA, MTDATA, 4,4'-비스[N-(스피로-9,9'-비플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: BSPB) 등의 방향족 아민 화합물 등을 사용할 수 있다. 여기서 기술한 물질은 주로  $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$  이상의 정공 이동도를 갖는 물질이다. 다만, 전자보다 정공의 수송성이 높은 유기 화합물이라면 상기 이외의 물질을 사용하여도 좋다.

[0261] 또한, 전자 수송체로서는 7,7,8,8-테트라시아노-2,3,5,6-테트라플루오르퀴노디메탄(약칭: F<sub>4</sub>-TCNQ), 클로라닐 등을 들 수 있다. 또한, 전이 금속 산화물을 들 수 있다. 또한, 원소 주기율표의 제 4족 내지 제 8족에 속하는 금속의 산화물을 들 수 있다. 구체적으로는, 산화바나듐, 산화니오브, 산화탄탈, 산화크롬, 산화몰리브덴, 산화텅스텐, 산화망간, 산화레늄은 전자 수용성이 높기 때문에 바람직하다. 그 중에서도, 특히 산화몰리브덴은 대기 중에서도 안정적이고 흡습성이 낮으며 취급하기 쉽기 때문에 바람직하다.

[0262] 한편, 전자 수송성이 높은 유기 화합물에 전자 공여체가 첨가된 구성으로 하는 경우에서, 전자 수송성이 높은 유기 화합물로서는 예를 들어, Alq, Almq<sub>3</sub>, BeBq<sub>2</sub>, BA1q 등 퀴놀린 골격 또는 벤조퀴놀린 골격을 갖는 금속 착체 등을 사용할 수 있다. 또한, Zn(BOX)<sub>2</sub>, Zn(BTZ)<sub>2</sub> 등의 옥사졸계, 티아졸계 배위자를 갖는 금속 착체 등도 사용할 수 있다. 또한, 금속 착체 외에도, PBD나 OXD-7, TAZ, BPhen, BCP 등도 사용할 수 있다. 여기에 든 물질은 주로  $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$  이상의 전자 이동도를 갖는 물질이다. 다만, 정공보다 전자의 수송성이 높은 유기 화합물이라면 상기 이외의 물질을 사용하여도 좋다.

[0263] 또한, 전자 공여체로서 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 희토류 금속, 또는 원소 주기율표의 제 13 족에 속하는 금속, 및 그것의 산화물이나 탄산염 등을 사용할 수 있다. 구체적으로는 리튬, 세슘, 마그네슘, 칼슘, 이테르븀, 인듐, 산화리튬, 탄산세슘 등을 사용하는 것이 바람직하다. 또한, 테트라티아나프타센과 같은 유기 화합물을 전자 공여체로서 사용하여도 좋다.

[0264] 또한, 상술한 재료를 사용하여 전하 발생층(313)을 형성함으로써, 발광 유닛이 적층된 경우에서 구동 전압이 상승되는 것을 억제할 수 있다.

[0265] 본 실시형태에서는, 2개의 발광 유닛을 갖는 발광 소자에 대하여 설명하였지만, 마찬가지로, 도 2(B)에 도시한 바와 같이 3개 이상의 발광 유닛을 적층한 발광 소자도 적용할 수 있다. 본 실시형태에 따른 발광 소자와 같이, 한 쌍의 전극 사이에 복수의 발광 유닛을 전하 발생층으로 칸막이하여 배치함으로써 전류 밀도를 낮게 유지하면서 고휘도로 발광하는 장수명 소자를 실현할 수 있다.

[0266] 또한, 각각의 발광 유닛의 발광색을 상이하게 함으로써, 발광 소자 전체로서, 원하는 색의 발광을 얻을 수 있다. 예를 들어, 2개의 발광 유닛을 갖는 발광 소자에서, 제 1 발광 유닛의 발광색과 제 2 발광 유닛의 발광색을 보색(補色) 관계가 되도록 함으로써, 발광 소자 전체로서 백색 발광하는 발광 소자를 얻을 수도 있다. 또한, "보색"이란 그들이 혼합되면 무채색이 되는 색들 사이의 관계를 가리킨다. 즉, 보색 관계에 있는 색을 발광하는 물질로부터 얻어진 광을 혼합하면, 백색 발광을 얻을 수 있다. 또한, 3개의 발광 유닛을 갖는 발광 소자의 경우에도 마찬가지로, 예를 들어, 제 1 발광 유닛의 발광색이 적색이고, 제 2 발광 유닛의 발광색이 녹색

이고, 제 3 발광 유닛의 발광색이 청색인 경우, 발광 소자 전체로서는 백색 발광을 얻을 수 있다.

- [0267] 또한, 본 실시형태는 다른 실시형태와 적절히 조합할 수 있다.
- [0268] (실시형태 4)
- [0269] 본 실시형태에서는, 본 발명의 일 형태인 발광 소자를 갖는 발광 장치에 대하여 도 3(A) 및 도 3(B)를 사용하여 설명한다. 또한, 도 3(A)는 발광 장치를 도시한 상면도이고, 도 3(B)는 도 3(A)를 A-B 및 C-D에서 절단한 단면도이다.
- [0270] 본 실시형태의 발광 장치는 구동 회로부인 소스 측 구동 회로(401) 및 게이트 측 구동 회로(403), 화소부(402), 봉지 기관(404), 절재(405), FPC(플렉시블 프린트 서킷)(409), 및 소자 기관(410)을 갖는다. 절재(405)로 둘러싸인 내측은 공간(233)이 되어 있다.
- [0271] 또한, 리드 배선(408)은 소스 측 구동 회로(401) 및 게이트 측 구동 회로(403)에 입력되는 신호를 전송하기 위한 배선이고, 외부 입력 단자가 되는 FPC(플렉시블 프린트 서킷)(409)으로부터 비디오 신호, 클럭 신호, 스타트 신호, 리셋 신호 등을 받아들인다. 또한, 여기서는 FPC만이 도시되었지만, 이 FPC에는 프린트 배선 기관(PWB)이 부착되어도 좋다. 본 명세서에 있어서의 발광 장치에는, 발광 장치 본체뿐만 아니라, 거기에 FPC 또는 PWB가 부착된 상태도 포함하는 것으로 한다.
- [0272] 도 3(A)에 도시한 소자 기관(410) 위에는 구동 회로부 및 화소부가 형성되어 있지만, 도 3(B)에서는, 구동 회로부인 소스 측 구동 회로(401)와 화소부(402) 중 하나의 화소가 도시되어 있다.
- [0273] 또한, 소스 측 구동 회로(401)는 n채널형 TFT(423)와 p채널형 TFT(424)를 조합한 CMOS 회로가 형성된다. 또한, 구동 회로는, TFT로 형성되는 다양한 CMOS회로, PMOS회로 또는 NMOS회로로 형성하여도 좋다. 또한, 본 실시형태에서는, 기관 위에 구동 회로를 형성한 드라이버 일체형을 기재하지만, 반드시 그렇게 할 필요는 없고, 구동 회로를 기관 위가 아닌 외부에 형성할 수도 있다.
- [0274] 또한, 화소부(402)는 스위칭용 TFT(411)와, 전류 제어용 TFT(412)와 이의 드레인에 전기적으로 접속된 제 1 전극(413)을 포함하는 복수의 화소에 의하여 형성된다. 또한, 제 1 전극(413)의 단부를 덮도록 절연물(414)이 형성되어 있다. 여기서 포지티브형 감광성 아크릴 수지막을 사용함으로써 형성한다.
- [0275] 또한, 피복성을 양호하게 하기 위하여 절연물(414)의 상단부 또는 하단부에 곡률을 갖는 곡면이 형성되도록 한다. 예를 들어, 절연물(414)의 재료로서 포지티브형 감광성 아크릴을 사용한 경우, 절연물(414)의 상단부에만 곡률반경(0.2 μm 내지 3 μm)을 갖는 곡면을 가지게 하는 것이 바람직하다. 또한, 절연물(414)로서, 네거티브형 감광성 수지 및 포지티브형 감광성 수지 중 어느 쪽도 사용할 수 있다.
- [0276] 제 1 전극(413) 위에는 발광층(416) 및 제 2 전극(417)이 각각 형성된다. 여기에서, 양극으로서 기능하는 제 1 전극(413)에 사용하는 재료로서는, 일함수가 큰 재료를 사용하는 것이 바람직하다. 예를 들어, ITO막, 또는 실리콘을 함유한 인듐주석 산화물막, 2wt% 내지 20 wt%의 산화아연을 포함하는 산화인듐막, 질화티타늄막, 크롬막, 텅스텐막, Zn막, Pt막 등의 단층막 이외에, 질화티타늄막과 알루미늄을 주성분으로 하는 막과의 적층, 질화티타늄막과 알루미늄을 주성분으로 하는 막과 질화티타늄막의 3층 구조 등을 사용할 수 있다. 적층 구조로 하면, 배선의 저항이 낮고 양호한 음 접촉을 취할 수 있다.
- [0277] 또한, 발광층(416)은 증착 마스크를 사용한 증착법, 잉크젯법 등의 액적 토출법, 인쇄법, 스핀코팅법 등의 다양한 방법으로 형성된다. 발광층(416)은 실시형태 1에서 기재한 복소환 화합물을 포함한다. 또한, 발광층(416)을 구성하는 다른 재료로서는 저분자 재료, 올리고머, 덴드리머 또는 고분자 재료라도 좋다.
- [0278] 또한, 발광층(416) 위에 형성되고 음극으로서 기능하는 제 2 전극(417)에 사용하는 재료로서는 일함수가 작은 재료(Al, Mg, Li, Ca, 또는 이들의 합금이나 화합물, Mg-Ag, Mg-In, Al-Li 등)를 사용하는 것이 바람직하다. 또한, 발광층(416)에서 생긴 광이 제 2 전극(417)을 투과하도록 하는 경우에는, 제 2 전극(417)으로서 막 두께를 얇게 한 금속 박막과 투명 도전막(ITO, 2wt% 내지 20 wt%의 산화아연을 함유한 산화인듐, 실리콘 또는 산화실리콘을 함유한 산화인듐-산화주석, 산화아연 등)과의 적층을 사용하는 것이 좋다.
- [0279] 또한, 절재(405)로 봉지 기관(404)을 소자 기관(410)과 접합함으로써 소자 기관(410), 봉지 기관(404) 및 절재(405)로 둘러싸인 공간(407)에 발광 소자(418)가 구비된 구조가 되어 있다. 또한, 공간(407)에는 충전제가 충전되어 있고, 불활성 가스(질소나 아르곤 등)가 충전되는 경우 이외에, 절재(405)로 충전되는 경우도 있다.
- [0280] 또한, 절재(405)에는 에폭시계 수지를 사용하는 것이 바람직하다. 또한, 이들 재료는 최대한 수분이나 산소를

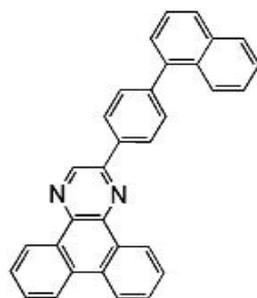
투과시키지 않는 재료인 것이 바람직하다. 또한, 봉지 기관(404)에 사용하는 재료로서 유리 기관이나 석영 기관 이외에, FRP(Fiberglass-Reinforced Plastics), PVF(폴리비닐플루오라이드), 폴리에스테르 또는 아크릴 등으로 이루어진 플라스틱 기관을 사용할 수 있다.

- [0281] 상술한 바와 같이 하여, 본 발명의 일 형태인 발광 소자를 갖는 액티브 매트릭스형 발광 장치를 얻을 수 있다.
- [0282] 또한 본 발명의 발광 소자는, 상술한 액티브 매트릭스형 발광 장치뿐만 아니라 패시브 매트릭스형 발광 장치에 사용할 수도 있다. 도 4(A) 및 도 4(B)에 본 발명의 발광 소자를 사용한 패시브 매트릭스형 발광 장치의 사시도 및 단면도를 도시하였다. 도 4(A)는 발광 장치의 사시도이고 도 4(B)는 도 4(A)를 X-Y에서 절단한 단면도이다.
- [0283] 도 4(A) 및 도 4(B)에서, 기관(501) 위의 제 1 전극(502)과 제 2 전극(503) 사이에는 EL층(504)이 형성된다. 제 1 전극(502)의 단부는 절연층(505)으로 덮인다. 그리고, 절연층(505) 위에는 격벽층(506)이 형성된다. 격벽층(506)의 측벽은 기관면에 가까워질수록 한쪽의 측벽과 다른 쪽의 측벽과의 간격이 좁아지는 경사를 갖는다. 즉, 격벽층(506)의 단변 방향의 단면은 사다리꼴이며, 저변(절연층(505)의 면 방향과 같은 방향을 향하고, 절연층(505)과 접하는 변)이 상변(절연층(505)의 면 방향과 같은 방향을 향하고, 절연층(505)과 접하지 않는 변)보다 짧다. 상술한 바와 같이, 격벽층(506)을 형성함으로써 크로스토크 등에 기인한 발광 소자의 불량을 방지할 수 있다.
- [0284] 상술한 바와 같이 하여 본 발명의 일 형태인 발광 소자를 갖는 패시브 매트릭스형의 발광 장치를 얻을 수 있다.
- [0285] 또한, 본 실시형태에서 기재한 발광 장치(액티브 매트릭스형, 패시브 매트릭스형)는 모두 본 발명의 일 형태인 발광 소자를 사용하여 형성되기 때문에 소비 전력이 낮은 발광 장치를 얻을 수 있다.
- [0286] 또한, 본 실시형태는 다른 실시형태와 적절히 조합할 수 있다.
- [0287] (실시형태 5)
- [0288] 본 실시형태에서는, 실시형태 4에서 기재한 본 발명의 일 형태의 발광 장치를 그 일부에 포함한 전자 기기 및 조명 장치에 대하여 도 5(A) 내지 도 9(C)를 사용하여 설명한다.
- [0289] 전자 기기로서는 비디오 카메라, 디지털 카메라 등의 카메라, 고글형 디스플레이, 내비게이션 시스템, 음향 재생 장치(카 오디오, 오디오 컴포넌트 등), 컴퓨터, 게임 기기, 휴대형 정보 단말기(모바일 컴퓨터, 휴대 전화, 휴대형 게임기 또는 전자 서적 등), 기록 매체를 구비한 화상 재생 장치(구체적으로는 Digital Versatile Disc(DVD) 등의 기록 매체를 재생하여 그 화상을 표시할 수 있는 표시 장치를 구비한 장치) 등을 들 수 있다.
- [0290] 도 5(A)는 본 발명의 일 형태에 따른 텔레비전 장치이며, 하우징(611), 지지대(612), 표시부(613), 스피커부(614), 비디오 입력 단자(615) 등을 포함한다. 이 텔레비전 장치에서, 표시부(613)에는 본 발명의 일 형태인 발광 장치를 적용할 수 있다. 본 발명의 일 형태인 발광 장치는, 구동 전압이 낮고 높은 발광 효율을 얻을 수 있고 장수명이기 때문에, 본 발명의 일 형태인 발광 장치를 적용함으로써 신뢰성이 높고 소비 전력이 저감된 텔레비전 장치를 얻을 수 있다.
- [0291] 도 5(B)는 본 발명의 일 형태에 따른 컴퓨터이며, 본체(621), 하우징(622), 표시부(623), 키보드(624), 외부 접속 포트(625), 포인팅 디바이스(626) 등을 포함한다. 이 컴퓨터에서, 표시부(623)에는 본 발명의 발광 장치를 적용할 수 있다. 본 발명의 일 형태인 발광 장치는, 구동 전압이 낮고 높은 발광 효율을 얻을 수 있고 장수명이기 때문에, 본 발명의 일 형태인 발광 장치를 적용함으로써 신뢰성이 높고 소비 전력이 저감된 컴퓨터를 얻을 수 있다.
- [0292] 도 5(C)는 본 발명의 일 형태에 따른 휴대 전화이며, 본체(631), 하우징(632), 표시부(633), 음성 입력부(634), 음성 출력부(635), 조작키(636), 외부 접속 포트(637), 안테나(638) 등을 포함한다. 이 휴대 전화에서, 표시부(633)에는 본 발명의 발광 장치를 적용할 수 있다. 본 발명의 일 형태인 발광 장치는, 구동 전압이 낮고 높은 발광 효율을 얻을 수 있고 장수명이기 때문에, 본 발명의 일 형태인 발광 장치를 적용함으로써 신뢰성이 높고 소비 전력이 저감된 휴대 전화를 얻을 수 있다.
- [0293] 도 5(D)는 본 발명의 일 형태에 따른 카메라이며, 본체(641), 표시부(642), 하우징(643), 외부 접속 포트(644), 리모트 컨트롤 수신부(645), 수상부(646), 배터리(647), 음성 입력부(648), 조작키(649), 접안부(650) 등을 포함한다. 이 카메라에서, 표시부(642)에는 본 발명의 일 형태인 발광 장치를 적용할 수 있다. 본 발명의 일 형태인 발광 장치는, 구동 전압이 낮고 높은 발광 효율을 얻을 수 있고 장수명이기 때문에, 본 발명의 일 형태인

발광 장치를 적용함으로써 신뢰성이 높고 소비 전력이 저감된 카메라를 얻을 수 있다.

- [0294] 상술한 바와 같이, 본 발명의 일 형태인 발광 장치의 적용 범위는 극히 넓고, 이 발광 장치를 다양한 분야의 전자 기기에 적용할 수 있다. 본 발명의 일 형태인 발광 장치를 사용함으로써 신뢰성이 높고 소비 전력이 저감된 전자 기기를 얻을 수 있다
- [0295] 또한, 본 발명의 일 형태의 발광 장치는, 조명 장치로서 사용할 수도 있다. 도 6은 본 발명의 일 형태인 발광 장치를 백 라이트로서 사용한 액정 표시 장치의 일례이다. 도 6에 도시한 액정 표시 장치는 하우징(701), 액정층(702), 백 라이트(703), 하우징(704)을 갖고, 액정층(702)은 드라이버 IC(705)와 접속된다. 또한, 백 라이트(703)에는 본 발명의 일 형태인 발광 장치가 사용되고 단자(706)에 의하여 전류가 공급된다.
- [0296] 이와 같이, 본 발명의 일 형태의 발광 장치를 액정 표시 장치의 백 라이트로서 사용함으로써, 저소비 전력의 백 라이트를 얻을 수 있다. 또한, 본 발명의 일 형태의 발광 장치는, 면 발광의 조명 장치이며 대면적화할 수도 있기 때문에, 백 라이트의 대면적화도 할 수 있다. 따라서, 저소비 전력이며, 대면적화된 액정 표시 장치를 얻을 수 있다.
- [0297] 도 7은 본 발명의 일 형태의 발광 장치를 조명 장치인 전기 스탠드로서 사용한 예이다. 도 7에 도시한 전기 스탠드는 하우징(801)과 광원(802)을 갖고, 광원(802)으로서 본 발명의 일 형태인 발광 장치가 사용된다. 구동 전압이 낮고 높은 발광 효율을 얻을 수 있고 장수명이기 때문에, 본 발명의 일 형태인 발광 장치를 적용함으로써 신뢰성이 높고 저소비 전력인 전기 스탠드를 얻을 수 있다.
- [0298] 도 8은 본 발명의 일 형태인 발광 장치를 실내의 조명 장치(901)로서 사용한 예이다. 본 발명의 일 형태인 발광 장치는 대면적화할 수도 있기 때문에, 대면적인 조명 장치로서 사용할 수 있다. 또한, 본 발명의 일 형태인 발광 장치는 구동 전압이 낮고 높은 발광 효율을 얻을 수 있고 장수명이기 때문에, 본 발명의 일 형태인 발광 장치를 적용함으로써 신뢰성이 높고 저소비 전력인 조명 장치를 얻을 수 있다. 상술한 바와 같이, 본 발명의 일 형태인 발광 장치를 실내의 조명 장치(901)로서 사용한 방에, 도 5(A)에서 설명한 바와 같은 본 발명의 일 형태인 텔레비전 장치(902)를 설치하여 공공 방송이나 영화를 감상할 수 있다.
- [0299] 도 9(A) 및 도 9(B)는 폴더형 태블릿 단말이다. 도 9(A)는 태블릿 단말을 연 상태이며, 하우징(9630), 표시부(9631a), 표시부(9631b), 표시 모드 전환 스위치(9034), 전원 스위치(9035), 전력 절약 모드 전환 스위치(9036), 후크(9033), 조작 스위치(9038)를 갖는다.
- [0300] 표시부(9631a)나 표시부(9631b)에 본 발명의 일 형태의 발광 장치를 적용할 수 있다.
- [0301] 표시부(9631a)는 일부를 터치 패널의 영역(9632a)으로 할 수 있고, 표시된 조작키(9037)에 터치함으로써 데이터를 입력할 수 있다. 또한, 표시부(9631a)에서는 일례로서, 반분의 영역이 표시의 기능만을 갖는 구성으로 하고 나머지 부분의 영역이 터치 패널의 기능을 갖는 구성으로 하였지만, 이 구성에 한정되지 않는다. 표시부(9631a)의 모든 영역이 터치 패널의 기능을 갖는 구성으로 하여도 좋다. 예를 들어, 표시부(9631a)의 전체 면에 키보드 버튼을 표시시켜 터치 패널로 하고, 표시부(9631b)를 표시 화면으로서 사용할 수 있다.
- [0302] 또한 표시부(9631b)에서도 표시부(9631a)와 마찬가지로 표시부(9631b)의 일부를 터치 패널 영역(9632b)으로 할 수 있다. 또한 터치 패널의 키보드 표시 전환 버튼(9639)이 표시되어 있는 위치를 손가락이나 스타일러스 등으로 터치함으로써 표시부(9631b)에 키보드 버튼을 표시할 수 있다.
- [0303] 또한, 터치 패널 영역(9632a)과 터치 패널 영역(9632b)에 대하여 동시에 터치 입력을 수행할 수도 있다.
- [0304] 또한, 표시 모드 전환 스위치(9034)는 세로 표시 또는 가로 표시 등의 표시 방향을 전환하며, 흑백 표시나 컬러 표시의 전환 등을 선택할 수 있다. 전력 절약 모드 전환 스위치(9036)는 태블릿 단말에 내장된 광 센서로 검출되는 사용시의 외광의 광량에 따라 표시의 휘도를 최적하게 할 수 있다. 태블릿 단말은 광 센서뿐만 아니라, 자이로 센서, 가속도 센서 등 기울기를 검출하는 센서와 같은 다른 검출 장치를 내장하여도 좋다.
- [0305] 또한, 도 9(A)에서는 표시부(9631a)와 표시부(9631b)의 표시 면적이 같은 예를 도시하였지만 이것에 특별히 한정되지 않고, 한쪽 표시부의 크기와 다른 쪽 표시부의 크기가 상이하여도 좋고 표시 품질이 상이하여도 좋다. 예를 들어, 한쪽이 다른 쪽보다 고정제한 표시가 가능한 표시 패널로 하여도 좋다.
- [0306] 도 9(B)는 태블릿 단말을 닫은 상태를 도시한 것이며, 하우징(9630), 태양 전지(9633), 충방전 제어 회로(9634), 배터리(9635), DCDC 컨버터(9636)를 갖는다. 또한, 도 9(B)에서는 충방전 제어 회로(9634)의 일례로서 배터리(9635), DCDC 컨버터(9636)를 갖는 구성을 도시하였다.

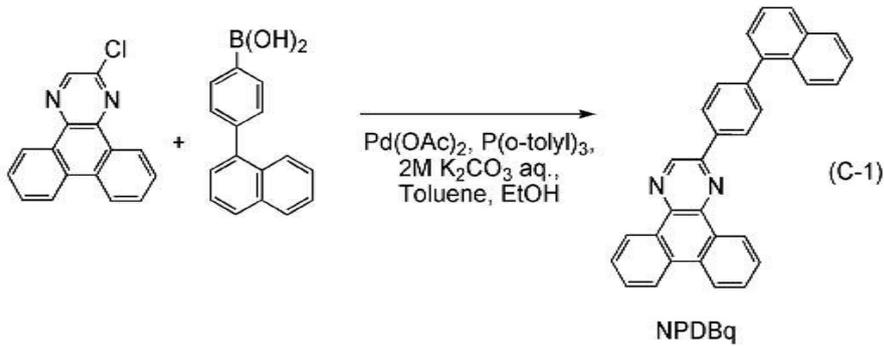
- [0307] 또한, 태블릿 단말은 접을 수 있기 때문에, 사용하지 않을 때는 하우스(9630)를 닫은 상태로 할 수 있다. 따라서, 표시부(9631a), 표시부(9631b)를 보호할 수 있기 때문에 내구성이 우수하며 장기 사용의 관점에서 보아도 신뢰성이 우수한 태블릿 단말을 제공할 수 있다.
- [0308] 또한, 상기 이외에도, 도 9(A) 및 도 9(B)에 도시한 태블릿 단말은 다양한 정보(정지 화상, 동영상, 텍스트 화상 등)를 표시하는 기능, 달력, 날짜 또는 시각 등을 표시부에 표시하는 기능, 표시부에 표시한 정보를 터치 입력 조작하거나 편집하는 터치 입력 기능, 각종 소프트웨어(프로그램)에 의하여 처리를 제어하는 기능 등을 가질 수 있다.
- [0309] 태블릿 단말의 표면에 장착된 태양 전지(9633)에 의하여, 터치 패널, 표시부, 또는 영상 신호 처리부 등에 전력을 공급할 수 있다. 또한, 태양 전지(9633)를 하우스(9630)의 한쪽 또는 양쪽에 설치함으로써, 배터리(9635)를 효율적으로 충전할 수 있는 구성으로 할 수 있기 때문에 적합하다. 또한 배터리(9635)로서 리튬 이온 전지를 사용하면, 소형화를 도모할 수 있는 등의 장점이 있다.
- [0310] 또한, 도 9(B)에 도시한 충전 제어 회로(9634)의 구성 및 동작에 대하여 도 9(C)에 블록도를 도시하여 설명한다. 도 9(C)는 태양 전지(9633), 배터리(9635), DCDC 컨버터(9636), 컨버터(9637), 스위치(SW1) 내지 스위치(SW3), 표시부(9631)를 도시한 것이며, 배터리(9635), DCDC 컨버터(9636), 컨버터(9637), 스위치(SW1) 내지 스위치(SW3)가 도 9(B)에 도시한 충전 제어 회로(9634)에 대응하는 개소이다.
- [0311] 우선, 외광을 이용하여 태양 전지(9633)에 의하여 발전되는 경우의 동작 예에 대하여 설명한다. 태양 전지(9633)에 의하여 발전된 전력은 배터리(9635)를 충전하기 위한 전압이 되도록 DCDC 컨버터(9636)로 승압 또는 강압된다. 그리고, 표시부(9631)의 동작에 태양 전지(9633)로부터의 전력이 사용될 때는 스위치(SW1)를 온 상태로 하여, 컨버터(9637)에 의하여 표시부(9631)에 필요한 전압으로 승압 또는 강압을 수행한다. 또한, 표시부(9631)에서 표시를 수행하지 않을 때는 스위치(SW1)를 오프 상태로 하고, 스위치(SW2)를 온 상태로 하여 배터리(9635)를 충전하는 구성으로 하면 좋다.
- [0312] 또한, 태양 전지(9633)에 관하여는 발전 수단의 일례로서 도시하였지만, 특별히 한정되지 않고 압전 소자(피에조 소자)나 열전 변환 소자(펄티어 소자) 등의 다른 발전 수단에 의한 배터리(9635)를 충전하는 구성이라도 좋다. 예를 들어, 무선(비접촉)으로 전력을 송수신하여 충전하는 무접점 전력 전송 모듈이나, 다른 충전 수단을 조합하여 수행하는 구성으로 하여도 좋다.
- [0313] 또한, 본 실시형태는 다른 실시형태와 적절히 조합할 수 있다.
- [0314] (실시에 1)
- [0315] <합성에 1>
- [0316] 본 실시예에서는, 하기 구조식 101로 나타내어지는 2-[4-나프탈렌-1-일]페닐]디벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: NPDBq)의 합성 방법에 대하여 설명한다.
- [0317] [구조식 101]



(101)  
NPDBq

- [0318]
- [0319] <<NPDBq의 합성>>
- [0320] NPDBq의 합성 스킴 C-1을 하기에 나타낸다.

[0321] [합성 스킴 C-1]



[0322]

[0323] 200mL의 삼구 플라스크에서 2-클로로디벤조[f,h]퀴녹살린 2.7g(10mmol), 4-(1-나프틸)-페닐보론산 2.7g(11mmol), 초산 파라듐(II) 23mg(0.1mmol), 트리(오르토-톨릴) 포스핀 91mg(0.3mmol), 톨루엔 43mL, 에탄올 4mL, 2mol/L 탄산칼륨 수용액 14mL의 혼합물을 감압하에서 교반하면서 탈기한 후, 질소 분위기하에서 80°C로 12시간 가열 교반하여 반응시켰다.

[0324] 반응후, 이 반응 혼합액에 톨루엔 500mL을 첨가하고, 이 혼합액의 유기층을 플로리실(와코순약공업주식회사, 카탈로그 번호: 540-00135), 알루미늄(머크, 중성), 셀라이트(와코순약공업주식회사, 카탈로그 번호: 531-16855)를 통하여 여과하였다. 얻어진 여과액을 물로 세정하고, 황산마그네슘을 첨가하여 수분을 흡착시켰다. 이 현탁액을 여과해서 여과액을 얻었다. 얻어진 여과액을 농축하여 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의한 정제를 행하였다. 이때, 크로마토그래피의 전개 용매로서, 톨루엔과 헥산의 혼합 용매(톨루엔:헥산=1:5)를 사용하였다. 얻어진 프랙션을 농축하고 메탄올을 첨가하고 초음파 처리를 행한 후, 재결정한 결과, 목적물인 황색 분말(粉末) 수량 3.0g를 수율 69%로 얻었다.

[0325] 실리카 겔 박층 크로마토그래피(TLC)에서의 Rf값(전개 용매 초산에틸:헥산=1:10)은, 목적물에 대하여는 0.33이고, 2-클로로디벤조[f,h]퀴녹살린에 대하여는 0.55이었다.

[0326] 핵 자기 공명법(NMR)에 의하여 이 화합물이 목적물인 2-[4-(나프탈렌-1-일)페닐]디벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: NPDBq)인 것을 확인하였다.

[0327] 얻어진 물질의 <sup>1</sup>H NMR 데이터를 이하에서 기재한다. <sup>1</sup>H NMR(CDC1<sub>3</sub>, 300MHz): δ (ppm)=7.47-7.62(m, 4H), 7.75-8.03(m, 9H), 8.50(d, J=8.3Hz, 2H), 8.68(d, J=7.3Hz, 2H), 9.27(d, J=7.8Hz, 1H), 9.46-9.50(m, 2H).

[0328] 또한, <sup>1</sup>H NMR 차트를 도 10(A) 및 도 10(B)에 도시하였다. 도 10(B)는 도 10(A)에서의 7.00ppm 내지 9.60ppm의 범위를 확대하여 도시한 차트이다.

[0329] 또한, NPDBq의 톨루엔 용액의 흡수 스펙트럼을 도 11(A)에 도시하고 도 11(B)에 발광 스펙트럼을 도시하였다. 또한, NPDBq의 박막의 흡수 스펙트럼을 도 12(A)에 도시하고 발광 스펙트럼을 도 12(B)에 도시하였다. 흡수 스펙트럼의 측정에는 자외 가시 분광 광도계(닛폰 분광 주식회사 제조, V550형)를 사용하였다. 용액은 석영 셀에 넣고, 박막은 석영 기판에 증착시켜 샘플을 제작하여 측정하였다. 흡수 스펙트럼에 관하여, 용액에 대하여는 석영 셀에 톨루엔만을 넣고 측정한 흡수 스펙트럼을 뺀 흡수 스펙트럼을 나타내고, 박막에 대하여는 석영 기판의 흡수 스펙트럼을 뺀 흡수 스펙트럼을 나타낸다. 도 11(A) 내지 도 12(B)에서 가로축은 파장(nm), 세로축은 강도(임의 단위)를 나타낸다. 톨루엔 용액의 경우에는 377nm 부근에 흡수 피크를 볼 수 있고, 발광 파장의 피크는 398nm이었다. 또한, 박막의 경우에는, 385nm 부근에 흡수 피크를 볼 수 있고, 발광 파장의 피크는 429nm, 445nm 및 488nm(여기 파장 378nm)이었다.

[0330] 또한, NPDBq의 박막의 전기 화학적 특성을 측정(측정 기기:리켄 케이키사(Riken Keiki Co., Ltd.)제, AC-2)하였다. 또한, 박막의 전기 화학적 특성은 이하와 같이 행하였다.

[0331] HOMO 준위의 값은 대기중에서 광전자 분광법(리켄 케이키사(Riken Keiki Co., Ltd.)제, AC-2)으로 측정한 이온화 포텐셜의 값을, 음의 값으로 환산함으로써 얻었다. 또한, LUMO 준위의 값은, 박막의 흡수 스펙트럼의 데이터를 사용하여, 직접 전이를 가정한 Tauc 플롯으로부터 흡수단을 구하고, 그 흡수단을 광학적 에너지 갭으로서 HOMO 준위의 값에 가산함으로써 얻었다.

- [0332] 박막의 전기 화학적 특성의 측정 결과에 따르면, HOMO 준위는 -5.84eV, LUMO 준위는 -2.78eV, 및 밴드 갭(Bg)은 3.06eV이었다.
- [0333] 상술한 결과에 의하여, NPDBq는 비교적 깊은 HOMO 준위와, 비교적 얇은 LUMO 준위와, 비교적 넓은 Bg를 갖는 것이 확인되었다.
- [0334] 또한, NPDBq에 대하여 용액의 전기 화학적 특성을 측정하였다.
- [0335] 또한, 측정 방법으로는, 사이클릭 볼타메트리(CV) 측정으로 조사하였다. 측정에는, 전기화학 아날라이저 (BAS(주)제, 모델번호: ALS 모델 600A 또는 600C)를 사용하였다.
- [0336] HOMO 준위의 값이 -6.21eV인 것을 알았다. 따라서, HOMO 준위가 이 값에 가까운 재료에 정공을 효율적으로 주입할 수 있는 것을 알았다. 또한, HOMO 준위가 깊기 때문에(값이 작기 때문에), 이것보다 얇은(값이 큰) 재료에 정공을 효율적으로 주입할 수 있는 것을 알았다.
- [0337] LUMO 준위의 값이 -2.95eV인 것을 알았다. 따라서, LUMO 준위가 이 값에 가까운 재료에 전자를 효율적으로 주입할 수 있는 것을 알았다. LUMO 준위가 얇기 때문에(값이 크기 때문에), 이것보다 깊은(값이 작은) 재료에 전자를 효율적으로 주입할 수 있는 것을 알았다. 또한, 100 사이클후에서도 환원 피크가 같은 값이 되었다. 상기에 의하여, 환원 상태와 중성 상태 사이의 산화 환원의 반복에 양호한 특성을 나타내는 것을 알았다.
- [0338] 또한, 상기 사이클릭 볼타메트리(CV) 측정의 측정 방법에 관하여는 이하와 같다.
- [0339] CV 측정에서의 용액은 용매로서 탈수 디메틸포름아미드(DMF)((주)알도리치제, 99.8%, 카탈로그 번호: 22705-6)를 이용하고, 지지 전해질인 과염소산 테트라-n-부틸암모늄( $n\text{-Bu}_4\text{NClO}_4$ )((주)도쿄화학제, 카탈로그 번호: T0836)을 100mmol/L의 농도가 되도록 용해시키고, 측정 대상을 2mmol/L의 농도가 되도록 더 용해시켜 조제하였다. 또한, 작용 전극으로서는 백금 전극(BAS(주) 제작, PTE 백금 전극)을, 보조 전극으로서는 백금 전극(BAS(주) 제작, VC-3용 Pt 카운터 전극(5cm))을, 참조 전극으로서는  $\text{Ag}/\text{Ag}^+$  전극(BAS(주) 제작, RE7 비수용매계 참조 전극)을 각각 사용하였다. 또한, 측정은 실온(20℃ 내지 25℃)에서 행하였다. 또한, CV 측정시의 스캔 속도는 0.1V/sec로 통일하였다.
- [0340] (참조 전극의 진공 준위에 대한 포텐셜 에너지의 산출)
- [0341] 우선, 본 실시예에서 사용하는 참조 전극( $\text{Ag}/\text{Ag}^+$  전극)의 진공 준위에 대한 포텐셜 에너지(eV)를 산출하였다. 즉,  $\text{Ag}/\text{Ag}^+$  전극의 페르미 준위를 산출하였다. 메탄올 중의 페로센의 산화 환원 전위는, 표준 수소 전극에 대하여 +0.610[V vs. SHE]인 것이 알려져 있다(참고 문헌; Christian R. Goldsmith et al., J. Am. Chem. Soc., Vol. 124, No.1, 83-96, 2002).
- [0342] 한편, 본 실시예에서 사용하는 참조 전극을 사용하여 메탄올 중에 있어서의 페로센의 산화 환원 전위를 계산한 결과, +0.11[V vs.  $\text{Ag}/\text{Ag}^+$ ]이었다. 따라서, 본 실시예에서 사용하는 참조 전극의 포텐셜 에너지는 표준 수소 전극에 대하여 0.50[eV] 낮은 것을 알았다.
- [0343] 여기서, 표준 수소 전극의 진공 준위에 대한 포텐셜 에너지는 -4.44eV인 것이 알려져 있다[참고 문헌: Toshihiro Ohnishi and Tamami Koyama, Macromolecular EL material, Kyoritsu Shuppan, p.64-67]. 상술한 바와 같이, 본 실시예에서 사용하는 참조 전극의 진공 준위에 대한 포텐셜 에너지는, -4.44-0.50=-4.94[eV]라고 산출할 수 있었다.
- [0344] 본 실시예의 화학물의 산화 반응 특성의 측정은, 참조 전극에 대한 작용 전극의 전위를 약 0.2V로부터 약 1.5V 까지 주사한 후, 약 1.5V로부터 약 0.2V까지 주사함으로써 행하였다.
- [0345] 이어서, 목적물을 CV 측정한 HOMO 준위의 산출에 대하여 기재한다. 산화 반응 측정에서의 산화 피크 전위  $E_{pa}$ [V]와, 환원 피크 전위  $E_{pc}$ [V]를 산출하였다. 따라서, 반과전위( $E_{pa}$ 와  $E_{pc}$ 의 중간의 전위)는  $(E_{pa}+E_{pc})/2$ [V]라고 산출할 수 있다. 이것은, 본 실시예의 화학물이 반과전위의 값[V vs.  $\text{Ag}/\text{Ag}^+$ ]의 전기 에너지에 의하여 산화되는 것을 나타내고, 이 에너지는 HOMO 준위에 상당한다.
- [0346] 본 실시예의 화학물의 환원 반응 특성의 측정은, 참조 전극에 대한 작용 전극의 전위를 약 -1.4V로부터 약 -2.1V까지 주사한 후, 약 -2.1V로부터 약 -1.4V까지 주사함으로써 행하였다.

- [0347] 이어서, 목적물을 CV 측정된 LUMO 준위의 산출에 대하여 기재한다. 환원 반응 측정에서의 환원 피크 전위  $E_{pc}[V]$ 와, 산화 피크 전위  $E_{pa}[V]$ 를 산출하였다. 따라서, 반과전위( $E_{pa}$ 와  $E_{pc}$ 의 중간 전위)는  $(E_{pa}+E_{pc})/2[V]$ 라고 산출할 수 있다. 이것은, 본 실시예의 화합물이 반과전위의 값[V vs.  $Ag/Ag^+$ ]의 전기 에너지에 의하여 환원되는 것을 나타내고, 이 에너지는 LUMO 준위에 상당한다.
- [0348] 또한, 본 실시예에서 얻어진 NPDBq를 액체 크로마토그래프 질량 분석(Liquid Chromatography Mass Spectrometry(약칭: LC/MS 분석))에 의하여 분석하였다.
- [0349] LC/MS 분석은, Acquity UPLC(Waters사 제조) 및 Xevo G2 Tof MS(Waters사 제조)를 사용하여 행하였다. MS 분석에서는, 일렉트로 스프레이 이온화법(ElectroSpray Ionization(약칭: ESI))에 의한 이온화를 행하였다. 이때의 캐필러리 전압(capillary voltage)은 3.0kV로 하고, 샘플콘 전압(sample cone voltage)은 30V로 하고, 검출은 포지티브 모드로 행하였다. 이상의 조건으로 이온화된 성분을 충돌실(collision cell) 내에서 아르곤 가스와 충돌시켜 프로덕트 이온으로 해리시켰다. 아르곤을 충돌시킬 때의 에너지(collision energy)는 50eV로 하였다. 또한, 측정하는 질량 범위는  $m/z=100$  내지 1200로 하였다. 측정 결과를 도 42(A) 및 도 42(B)에 도시하였다.
- [0350] 도 42(A) 및 도 42(B)의 결과로부터, NPDBq는 수소 이온의 유무나 등위체의 존재에 기인하고, 주로  $m/z=406$  부근,  $m/z=229$  부근,  $m/z=202$  부근,  $m/z=177$  부근,  $m/z=165$  부근에 프로덕트 이온에서 유리하는 피크가 각각에서 복수 검출되는 것을 알았다. 또한, 도 42(A) 및 도 42(B)에 도시한 결과는 NPDBq에서 유래하는 특징적인 결과를 나타내는 것을 생각하면, 혼합물 중에 포함된 NPDBq를 동정하는 데 중요한 데이터라고 할 수 있다.
- [0351] 또한,  $m/z=406$  부근의 피크는, NPDBq에서의 디벤조[f,h]퀴녹살린 환으로부터 C와 N이 하나씩 탈리된 상태의 양이온의 프로덕트 이온에서 유래한다고 추정되고, 본 발명의 일 형태인 복소환 화합물의 특징 중 하나이다. 특히, 디벤조[f,h]퀴녹살린 환의 2위치에 치환기(NPDBq에서는 페닐렌기+나프탈렌 골격)가 결합한 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물의 특징 중 하나이다.
- [0352] 또한,  $m/z=229$  부근의 피크는, 디벤조[f,h]퀴녹살린과 같은 디아자트리페닐레닐기의 양이온의 프로덕트 이온에서 유래한다고 추정되지만,  $m/z=202$  부근,  $m/z=177$  부근,  $m/z=165$ 부근의 피크도 동시에 검출되어 있고, 이것은 본 발명의 일 형태인 복소환 화합물 NPDBq가 디벤조[f,h]퀴녹살린 환을 포함한 것을 시사하는 것이다.
- [0353] 또한, NPDBq를 비행 시간 2차 이온 질량 분석계(Time-of-flight secondary ion mass spectrometer: TOF-SIMS)에 의하여 측정된 정성(定性) 스펙트럼(양이온 및 음이온)을 도 43(A) 내지 도 44(B)에 도시하였다.
- [0354] 또한, 도 43(A) 및 도 43(B)는 각각 양이온에서의 측정 결과이다. 도 43(A)에서는, 가로축이 0 내지 500의 범위의  $m/z$ 를 나타내고 세로축이 강도(임의 단위)를 나타낸다. 도 43(B)에서는, 가로축이 400 내지 1200의 범위의  $m/z$ 를 나타내고 세로축이 강도(임의 단위)를 나타낸다. 또한, 도 44(A) 및 도 44(B)는 각각 음이온에서의 측정 결과이다. 도 44(A)에서는, 가로축이 0 내지 400의 범위의  $m/z$ 를 나타내고 세로축이 강도(임의 단위)를 나타낸다. 또한, 도 44(B)에서는, 가로축이 400 내지 1200의 범위의  $m/z$ 를 나타내고 세로축이 강도(임의 단위)를 나타낸다.
- [0355] 장치는 TOF SIMS 5(ION-TOF사 제조), 1차 이온원은  $Bi_3^{++}$ 를 사용하였다. 또한, 1차 이온은 펄스 폭 7nm 내지 12nm의 펄스 형상으로 조사하고, 그 조사량은 8.2E10 내지 6.7E11 ions/cm<sup>2</sup>(1E12 ions/cm<sup>2</sup> 이하), 가속 전압은 25eV, 전류값은 0.2pA로 하였다. 또한, 시료로서는 NPDBq의 분말을 사용하여 측정하였다.
- [0356] 도 43(A) 및 도 43(B)의 결과로부터, NPDBq는 수소 이온의 유무나 등위체의 존재에 기인하고, 주로  $m/z=433$  부근에 프리커서(precursor) 이온의 피크가 복수 검출되는 것을 알았다. 또한,  $m/z=226$  부근,  $m/z=202$  부근,  $m/z=176$  부근,  $m/z=165$  부근에 프로덕트 이온에서 유래한 피크도 동시에 각각에서 복수 검출되어 있고, 디벤조[f,h]퀴녹살린 환을 포함한 것을 시사한다. 또한, TOF-SIMS에 의한 측정 결과도 혼합물 중에 포함되는 NPDBq를 동정하는 데 중요한 데이터라고 할 수 있다.
- [0357] 도 44(A) 및 도 44(B)의 결과로부터, NPDBq는 수소 이온의 유무나 등위체의 존재에 기인하고, 주로  $m/z=419$  부근에 프로덕트 이온에서 유래하는 피크가 검출되고,  $m/z=433$  부근에 프리커서 이온에서 유래하는 피크가 검출되고,  $m/z=849$  부근에 프로덕트 이온의 올리고머에서 유래하는 피크가 검출되고,  $m/z=863$  및  $m/z=875$  부근에 2량체 이온에서 유래하는 피크가 각각에서 복수 검출되는 것을 알았다. 또한, 도 44(A) 및 도 44(B)에 도시한 결과는, NPDBq에 유리하는 특징적인 결과를 나타내는 것을 생각하면, 혼합물 중에 포함되는 NPDBq를 동정하는 데

중요한 데이터라고 할 수 있다.

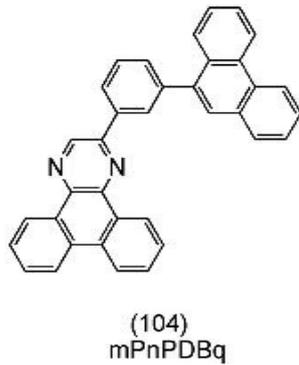
[0358] 또한, m/z=419 부근의 피크는, NPDBq에서의 디벤조[f,h]퀴녹살린 환으로부터 하나의 N이 탈리된 상태의 라디칼 양이온의 프로덕트 이온에서 유래한다고 추정되고, 본 발명의 일 형태인 복소환 화합물의 특징 중 하나이다. 특히, 디벤조[f,h]퀴녹살린 환의 2위치에 치환기(NPDBq에서는 페닐렌기+나프탈렌 골격)가 결합한 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물의 특징 중 하나이다.

[0359] (실시예 2)

[0360] <합성예 2>

[0361] 본 실시예에서는, 하기 구조식 104로 나타내어지는 2-[3-(페난트렌-9-일)페닐]디벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: mPnPDBq)의 합성 방법에 대하여 설명한다.

[0362] [구조식 104]

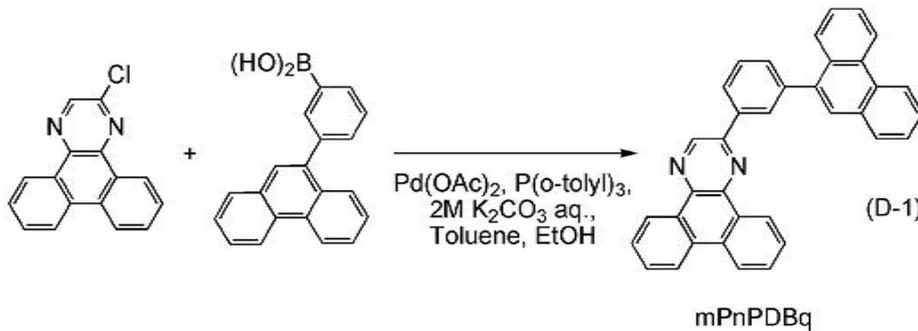


[0363]

[0364] <<mPnPDBq의 합성>>

[0365] mPnPDBq의 합성 스킴 D-1을 하기에 나타낸다.

[0366] [합성 스킴 D-1]



[0367]

[0368] 200mL의 삼구 플라스크로 2-클로로디벤조[f, h]퀴녹살린 1.6g(6.1mmol), 3-(페난트렌-9-일)페닐보론산 2.0g(6.71mmol), 초산 파라듐(II) 47mg(0.2mmol), 트리(오르토-톨릴) 포스핀 190mg(0.6mmol), 톨루엔 30mL, 에탄올 3mL, 2mol/L 탄산칼륨 수용액 10mL의 혼합물을 감압하에서 교반하면서 탈기한 후, 질소 분위기하에서 100 °C로 14시간 가열 교반하여 반응시켰다.

[0369] 반응후, 이 반응 혼합액에 톨루엔 500mL을 첨가하고, 이 혼합액의 유기층을 알루미늄(머크, 중성), 셀라이트(와코순약공업주식회사, 카탈로그 번호: 531-16855)를 통하여 여과하였다. 얻어진 여과액을 물로 세정하고, 황산 마그네슘을 첨가하여 수분을 흡착시켰다. 이 현탁액을 여과해서 여과액을 얻었다. 얻어진 여과액을 농축하여 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의한 정제를 행하였다. 이때, 크로마토그래피의 전개 용매로서, 톨루엔의 혼합 용매를 사용하였다. 얻어진 프랙션을 농축하고 톨루엔을 첨가하고 초음파 처리를 행한 후 재결정한 결과, 목적물인 황색 분말(粉末) 수량 0.60g를 수율 20%로 얻었다.

[0370] 실리카 겔 박층 크로마토그래피(TLC)에서의 Rf 값(전개 용매 톨루엔)은, 목적물에 대하여는 0.55이고, 2-클로로디벤조[f,h]퀴녹살린에 대하여는 0.75이었다.

- [0371] 핵 자기 공명법(NMR)에 의하여 이 화합물이 목적물인 2-[3-(페난트렌-9-일)페닐]디벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: mPnPDBq)인 것을 확인하였다.
- [0372] 얻어진 물질의  $^1\text{H}$  NMR 데이터를 이하에서 기재한다.  $^1\text{H}$  NMR( $\text{CDCl}_3$ , 300MHz):  $\delta$  (ppm)=7.59-7.85(m, 1H), 7.97(d, J=6.8Hz, 1H), 8.03(d, J=7.8Hz, 1H), 8.45(d, J=6.8Hz, 1H), 8.56(s, 1H), 8.66(d, J=7.8Hz, 2H), 8.79(d, J=8.8Hz, 1H), 8.84(d, J=8.3Hz, 1H), 9.25(d, J=7.8Hz, 1H), 9.39(d, J=9.3Hz, 1H), 9.47(s, 1H).
- [0373] 또한,  $^1\text{H}$  NMR 차트를 도 13(A) 및 도 13(B)에 도시하였다. 도 13(B)는 도 13(A)에서의 7.00ppm 내지 9.60ppm의 범위를 확대하여 나타낸 차트이다.
- [0374] 또한, mPnPDBq의 톨루엔 용액의 흡수 스펙트럼을 도 14(A)에 도시하고 도 14(B)에 발광 스펙트럼을 도시하였다. 또한, mPnPDBq의 박막의 흡수 스펙트럼을 도 15(A)에 도시하고 발광 스펙트럼을 도 15(B)에 도시하였다. 흡수 스펙트럼의 측정 방법은 실시예 1과 마찬가지로이다. 도 14(A) 내지 도 15(B)에서 가로축은 파장(nm), 세로축은 강도(임의 단위)를 나타낸다. 톨루엔 용액의 경우에는 372nm 부근에 흡수 피크를 볼 수 있고, 발광 파장의 피크는 387nm 및 406nm(여기 파장 362nm)이었다. 또한, 박막의 경우에는, 383nm 부근에 흡수 피크를 볼 수 있고, 발광 파장의 피크는 425nm 및 441nm(여기 파장 381nm)이었다.
- [0375] 또한, mPnPDBq의 박막의 전기 화학적 특성을 측정(측정 기기:리켄 케이키사(Riken Keiki Co., Ltd.)제, AC-2)하였다. 또한, 박막의 전기 화학적 특성은 실시예 1과 같은 방법으로 측정하였다.
- [0376] 박막의 전기 화학적 특성의 측정 결과에 따르면, HOMO 준위는 -5.90eV, LUMO 준위는 -2.79eV, 및 밴드 갭(Bg)은 3.11eV이었다.
- [0377] 상술한 결과에 의하여, mPnPDBq는 비교적 깊은 HOMO 준위와, 비교적 얇은 LUMO 준위와, 비교적 넓은 Bg를 갖는 것이 확인되었다.
- [0378] 또한, mPnPDBq에 대하여 용액의 전기 화학적 특성을 측정하였다.
- [0379] 또한, 측정 방법으로는, 사이클릭 볼타메트리(CV) 측정에 의하여 조사되었다. 측정에는, 전기화학 아날라이저(BAS(주)제, 모델번호: ALS 모델 600A 또는 600C)를 사용하였다.
- [0380] HOMO 준위의 값이 -6.20eV인 것을 알았다. 따라서, HOMO 준위가 이 값에 가까운 재료에 정공을 효율적으로 주입할 수 있는 것을 알았다. 또한, HOMO 준위가 깊기 때문에(값이 작기 때문에), 이것보다 얇은(값이 큰) 재료에 정공을 효율적으로 주입할 수 있는 것을 알았다.
- [0381] LUMO 준위의 값이 -2.95eV인 것을 알았다. 따라서, LUMO 준위가 이 값에 가까운 재료에 전자를 효율적으로 주입할 수 있는 것을 알았다. 또한, LUMO 준위가 얇기 때문에(값이 크기 때문에), 이것보다 깊은(값이 작은) 재료에 전자를 효율적으로 주입할 수 있는 것을 알았다. 또한, 100 사이클 후에서도 환원 피크가 같은 값이 되었다. 상기에 의하여, 환원 상태와 중성 상태 사이의 산화 환원의 반복에 양호한 특성을 나타내는 것을 알았다.
- [0382] 또한, CV 측정의 측정 방법에 관하여는 실시예 1과 마찬가지로 측정하였다.
- [0383] 또한, 본 실시예에서 얻어진 mPnPDBq를 LC/MS 분석에 의하여 분석하였다. LC/MS 분석의 측정 방법, 측정 조건 등은 실시예 1과 마찬가지로이다. 측정 결과를 도 45(A) 및 도 45(B)에 도시하였다.
- [0384] 도 45(A) 및 도 45(B)의 결과로부터, 수소 이온의 유무나 등위체의 존재에 mPnPDBq기인하고, 는 주로 m/z=456 부근, m/z=229 부근, m/z=202 부근, m/z=177 부근, m/z=165 부근에 프로덕트 이온에서 유래하는 피크가 각각에서 복수 검출되는 것을 알았다. 또한, 도 45(A) 및 도 45(B)에 도시한 결과는 mPnPDBq에서 유래하는 특징적인 결과를 나타내는 것을 생각하면, 혼합물 중에 포함된 mPnPDBq를 동정하는 데 중요한 데이터라고 할 수 있다.
- [0385] 또한, m/z=456 부근의 피크는, mPnPDBq에서의 디벤조[f,h]퀴녹살린 환으로부터 C와 N이 하나씩 탈리된 상태의 양이온의 프로덕트에서 유래한다고 추정되고, 본 발명의 일 형태인 복소환 화합물의 특징 중 하나이다. 특히, 디벤조[f,h]퀴녹살린 환의 2위치에 치환기(mPnPDBq에서는 페닐렌기+페난트렌 골격)가 결합한 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물의 특징 중 하나이다.
- [0386] 또한, m/z=229 부근의 피크는, 디벤조[f,h]퀴녹살린 환과 같은 디아자트리페닐레닐기의 양이온의 프로덕트 이온에서 유래한다고 추정되지만, m/z=202 부근, m/z=177 부근, m/z=165부근의 피크도 동시에 검출되어 있고, 이것은 본 발명의 일 형태인 복소환 화합물 mPnPDBq가 디벤조[f,h]퀴녹살린 환을 포함한 것을 시사하는 것이다.

[0387] 또한, mPnPDBq를 TOF-SIMS에 의하여 측정된 정성 스펙트럼(양이온 및 음이온)을 도 46(A) 내지 도 47(B)에 도시하였다.

[0388] 또한, 도 46(A) 및 도 46(B)는 각각 양이온에서의 측정 결과이다. 도 46(A)에서는, 가로축이 0 내지 500의 범위의 m/z를 나타내고 세로축이 강도(임의 단위)를 나타낸다. 도 46(B)에서는, 가로축이 400 내지 1200의 범위의 m/z를 나타내고 세로축이 강도(임의 단위)를 나타낸다. 또한, 도 47(A) 및 도 47(B)는 각각 음이온에서의 측정 결과이다. 도 47(A)에서는, 가로축이 0 내지 400의 범위의 m/z를 나타내고 세로축이 강도(임의 단위)를 나타낸다. 또한, 도 47(B)에서는, 가로축이 400 내지 1200의 범위의 m/z를 나타내고 세로축이 강도(임의 단위)를 나타낸다.

[0389] 장치는 TOF SIMS 5(ION-TOF사 제조), 1차 이온원은 Bi<sub>3</sub><sup>++</sup>를 사용하였다. 또한, 1차 이온은 펄스 폭 7nm 내지 12nm의 펄스 형상으로 조사하고, 그 조사량은 8.2E10 내지 6.7E11 ions/cm<sup>2</sup>(1E12 ions/cm<sup>2</sup> 이하), 가속 전압은 25eV, 전류값은 0.2pA로 하였다. 또한, 시료로서는 mPnPDBq의 분말을 사용하여 측정하였다.

[0390] 도 46(A) 및 도 46(B)의 결과로부터, mPnPDBq는 수소 이온의 유무나 등위체의 주로 존재에 기인하고, m/z=483 부근에 프리커서 이온에서 유래하는 피크가 복수 검출되는 것을 알았다. 또한, 수소 이온의 유무나 등위체의 존재에 기인하고, m/z=229 부근, m/z=202 부근, m/z=176 부근, m/z=165 부근에 프로덕트 이온에서 유래하는 피크도 동시에 각각에서 복수 검출되어 있고, 디벤조[f,h]퀴녹살린 환을 포함한 것을 시사한다. 또한, TOF-SIMS에 의한 측정 결과도 혼합물 중에 포함되는 mPnPDBq를 동정하는 데 중요한 데이터라고 할 수 있다.

[0391] 도 47(A) 및 도 47(B)의 결과로부터, mPnPDBq는 수소 이온의 유무나 등위체의 존재에 기인하고, 주로 m/z=469 부근에 프로덕트 이온에서 유래하는 피크가 검출되고, m/z=483 부근에 프리커서 이온에서 유래하는 피크가 각각에서 복수 검출되는 것을 알았다. 또한, 도 47(A) 및 도 47(B)에 도시한 결과는, mPnPDBq에 유리하는 특징적인 결과를 나타내는 것을 생각하면, 혼합물 중에 포함되는 mPnPDBq를 동정하는 데 중요한 데이터라고 할 수 있다.

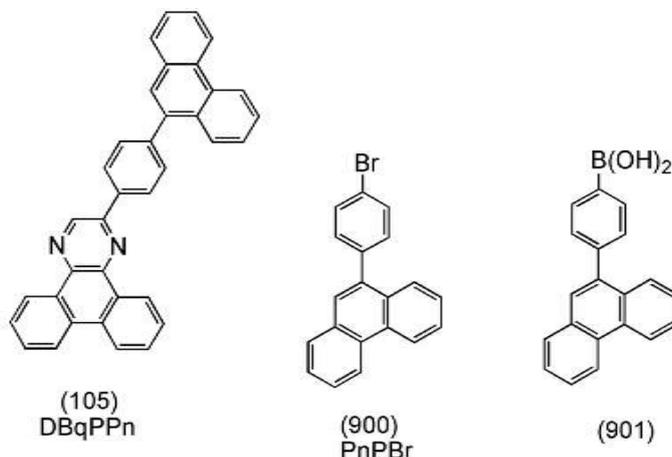
[0392] 또한, m/z=469 부근의 피크는, mPnPDBq에서의 디벤조[f,h]퀴녹살린 환으로부터 하나의 N이 탈리된 상태의 라디칼 양이온의 프로덕트 이온에서 유래한다고 추정되고, 본 발명의 일 형태인 복소환 화합물의 특징 중 하나이다. 특히, 디벤조[f,h]퀴녹살린 환의 2위치에 치환기(mPnPDBq에서는 페닐렌기+페난트렌 골격)가 결합한 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물의 특징 중 하나이다.

[0393] (실시예 3)

[0394] <합성에 3>

[0395] 본 실시예에서는, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물인, 하기 구조식 105로 나타내어지는 2-[4-(페난트렌-9-일)페닐]디벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: DBqPPn)의 합성 방법에 대하여 설명한다. 또한, 본 발명의 일 형태의 유기 화합물인, 하기 구조식 900으로 나타내어지는 9-(4-브로모페닐)페난트렌(약칭: PnPBr) 및 하기 구조식 901로 나타내어지는 4-(페난트렌-9-일)페닐보론산의 합성 방법에 대하여도 설명한다.

[0396] [구조식 105, 구조식 900, 및 구조식 901]

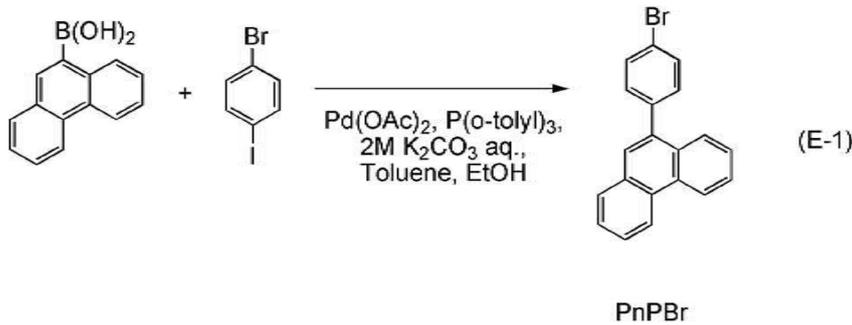


[0397]

[0398] [단계 1: 9-(4-브로모페닐)페난트렌(약칭: PnPBr)의 합성]

[0399] 단계 1의 합성 스킴을 합성 스킴 E-1로 나타낸다.

[0400] [합성 스킴 E-1]



[0401]

[0402] 200mL의 삼구 플라스크에서 1-브로모-4-요오드벤젠 7.7g(27mmol), 9-페난트렌보론산 5.0g(23mmol), 초산 과라뿔 61mg(0.3mmol), 트리(오르토-톨릴) 포스핀 247mg(0.8mmol), 톨루엔 100mL, 에탄올 10mL, 2mol/L 탄산칼륨 수용액 35mL의 혼합물을 감압하에서 교반하면서 탈기한 후, 질소 분위기하에서 80℃로 9시간 가열 교반하여 반응시켰다.

[0403] 반응후, 이 반응 혼합액에 톨루엔 500mL을 첨가하고, 이 혼합액의 유기층을 플로리실(와코순약공업주식회사, 카탈로그 번호: 540-00135), 알루미늄(머크, 중성), 셀라이트(와코순약공업주식회사, 카탈로그 번호: 531-16855)를 통하여 여과하였다. 얻어진 여과액을 물로 세정하고, 황산마그네슘을 첨가하여 수분을 흡착시켰다. 이 현탁액을 여과해서 여과액을 얻었다. 얻어진 여과액을 농축하여 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의한 정제를 행하였다. 이때, 크로마토그래피의 전개 용매로서, 톨루엔과 헥산의 혼합 용매(톨루엔:헥산=1:5)를 사용하였다. 얻어진 프랙션을 농축하고 톨루엔, 헥산에 의하여 재결정시킨 결과, 목적물인 백색 분말 수량 5.0g를 수율 66%로 얻었다.

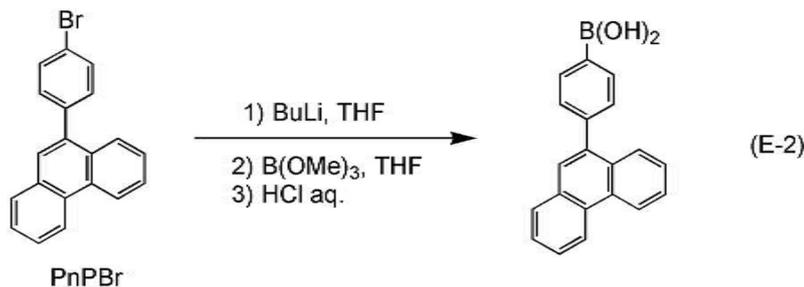
[0404] 핵 자기 공명법(NMR)에 의하여 이 화합물이 9-(4-브로모페닐)페난트렌(약칭: PnPBr)인 것을 확인하였다.

[0405] 얻어진 물질의 <sup>1</sup>H NMR 데이터를 이하에서 기재한다. <sup>1</sup>H NMR(CDCl<sub>3</sub>, 300MHz): δ (ppm)=7.42(d, J=8.3Hz, 2H), 7.49-7.71(m, 7H), 7.84-7.91(m, 2H), 8.73(d, J=7.8Hz, 1H), 8.78(d, J=8.3Hz, 1H).

[0406] [단계 2: 4-(페난트렌-9-일)페닐보론산의 합성]

[0407] 단계 2의 합성 스킴을 합성 스킴 E-2로 나타낸다.

[0408] [합성 스킴 E-2]



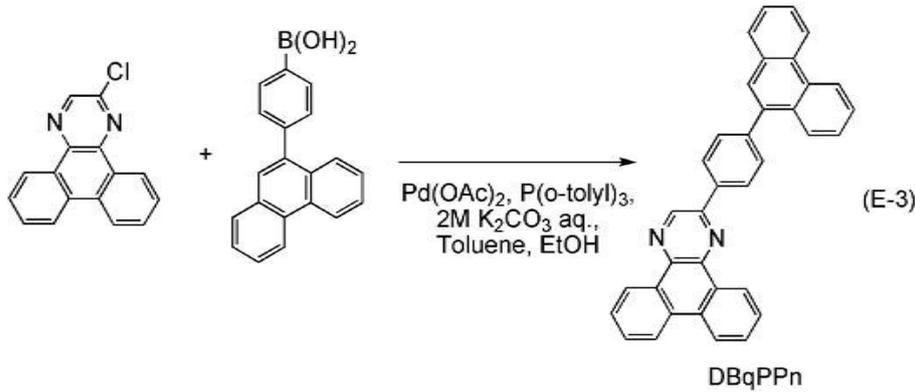
[0409]

[0410] 100mL의 삼구 플라스크에서, 상기 단계 1로 얻어진 PnPBr 2.0g(11mmol)를 넣고, 플라스크 내를 질소 치환하였다. 플라스크에 테트라하이드로푸란(THF) 35mL를 첨가하고, 이 용액을 -80℃로 교반하였다. 이 용액에 n-부틸리튬(1.6mol/L 헥산 용액) 8.3mL(14mmol)을 시린지로부터 적하하여 추가하였다. 적하 후, 이 용액을 같은 온도에서 2시간 동안 교반하였다. 교반 후, 이 용액에 붕산트리메틸 1.3mL(11mmol)을 첨가하여, 실온으로 되돌리면서 18시간 동안 교반하였다. 이 용액에 염산(1.0mol/L)를 첨가하고 1시간 동안 교반하였다. 유기층을 포화탄산수소나트륨 수용액과 포화 식염수로 세정한 후, 유기층에 황산마그네슘을 첨가하여 수분을 흡착시켰다. 이 혼합물을 자연 여과하고 얻어진 여과액을 농축한 결과, 목적물인 백색 고체를 얻었다. 이 고체를 초산에틸/헥산에 의하여 재결정한 결과, 목적물인 백색 분말의 고체를 2.5g, 수율 74%로 얻었다.

[0411] [단계 3: 2-[4-(페난트렌-9-일)페닐]디벤조[f,h]퀴녹살린(약칭: DBqPPn)의 합성]

[0412] 단계 3의 합성 스킴을 합성 스킴 E-3으로 나타낸다.

[0413] [합성 스킴 E-3]



[0414]

[0415] 200mL의 삼구 플라스크에서 2-클로로디벤조[f, h]퀴녹살린 2.0g(7.6mmol), 상기 단계 2로 얻어진 4-(페난트렌-9-일)페닐보론산 2.5g(8.4mmol), 초산 파라듐(II) 18mg(0.1mmol), 트리(오르토-톨릴) 포스핀 73mg(0.2mmol), 톨루엔 30mL, 에탄올 3mL, 2mol/L 탄산칼륨 수용액 10mL의 혼합물을 감압하에서 교반하면서 탈기한 후, 질소 분위기하에서 80℃로 10.5시간 가열 교반하여 반응시켰다.

[0416] 반응 후, 이 반응 혼합액에 톨루엔 500mL를 첨가하고, 이 혼합액의 유기층을 플로리실(와코순약공업주식회사, 카탈로그 번호: 540-00135), 알루미늄(머크, 중성), 셀라이트(와코순약공업주식회사, 카탈로그 번호: 531-16855)를 통하여 여과하였다. 얻어진 여과액을 물로 세정하고, 황산마그네슘을 첨가하여 수분을 흡착시켰다. 이 현탁액을 여과해서 여과액을 얻었다. 얻어진 여과액을 농축하여 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피에 의한 정제를 행하였다. 이때, 크로마토그래피의 전개 용매로서, 톨루엔과 헥산의 혼합 용매(톨루엔:헥산=3:5)를 사용하였다. 얻어진 프랙션을 농축하고 톨루엔에 의하여 재결정한 결과, 목적물인 백색 분말 수량 1.6g를 수율 44%로 얻었다.

[0417] 실리카 겔 박층 크로마토그래피(TLC)에서의 Rf 값(전개 용매 초산에틸:헥산=1:10)은, 목적물에 대하여는 0.20이고, 2-클로로디벤조[f, h]퀴녹살린에 대하여는 0.55이었다.

[0418] 핵 자기 공명법(NMR)에 의하여 이 화합물이 목적물인 2-[4-(페난트렌-9-일)페닐]디벤조[f, h]퀴녹살린(약칭: DBqPPn)인 것을 확인하였다.

[0419] 얻어진 물질의 <sup>1</sup>H NMR 데이터를 이하에서 기재한다. <sup>1</sup>H NMR(CDC<sub>13</sub>, 300MHz): δ (ppm)=7.60-7.85(m, 11H), 7.96(d, J=7.3Hz, 1H), 8.04(d, J=7.3Hz, 1H), 8.53(d, J=8.8Hz, 2H), 8.69(d, J=8.3Hz, 2H), 8.77(d, J=7.8Hz, 1H), 8.83(d, J=6.8Hz, 1H), 9.28(d, J=8.3Hz, 1H), 9.48-9.52(m, 2H).

[0420] 또한, <sup>1</sup>H NMR 차트를 도 16(A) 및 도 16(B)에 도시하였다. 또한, 도 16(B)는 도 16(A)에서의 7.00ppm 내지 9.60ppm의 범위를 확대하여 도시한 차트이다.

[0421] 또한, DBqPPn의 톨루엔 용액의 흡수 스펙트럼을 도 17(A)에 도시하고 도 17(B)에 발광 스펙트럼을 도시하였다. 또한, DBqPPn의 박막의 흡수 스펙트럼을 도 18(A)에 도시하고 발광 스펙트럼을 도 18(B)에 도시하였다. 흡수 스펙트럼의 측정 방법은 실시예 1과 마찬가지로이다. 도 17(A) 내지 도 18(B)에서 가로축은 파장(nm), 세로축은 강도(임의 단위)를 나타낸다. 톨루엔 용액의 경우에는 375nm 부근에 흡수 피크를 볼 수 있고, 발광 파장의 피크는 404nm(여기 파장 337nm)이었다. 또한, 박막의 경우에는, 387nm 부근에 흡수 피크를 볼 수 있고, 발광 파장의 피크는 439nm(여기 파장 387nm)이었다.

[0422] 또한, DBqPPn의 박막의 전기 화학적 특성을 측정(측정 기기:리켄 케이키사(Riken Keiki Co., Ltd.)제, AC-2)하였다. 또한, 박막의 전기 화학적 특성은 실시예 1과 같은 방법으로 측정하였다.

[0423] 박막의 전기 화학적 특성의 측정 결과에 따르면, HOMO 준위는 -5.91eV, LUMO 준위는 -2.88eV, 및 밴드 갭(Bg)은 3.03eV이었다.

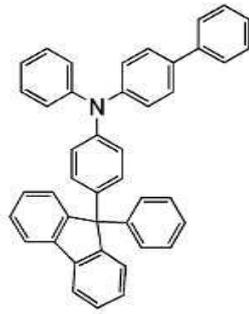
- [0424] 상술한 결과에 의하여, DBqPPn은 비교적 깊은 HOMO 준위와, 비교적 얇은 LUMO 준위와, 비교적 넓은 Bg를 갖는 것이 확인되었다.
- [0425] 또한, DBqPPn에 대하여 용액의 전기 화학적 특성을 측정하였다.
- [0426] 또한, 측정 방법으로는, 사이클릭 볼타메트리(CV) 측정에 의하여 조사하였다. 측정에는, 전기화학 아날라이저(BAS(주)제, 모델번호: ALS 모델 600A 또는 600C)를 사용하였다.
- [0427] HOMO 준위의 값이 -6.15eV인 것을 알았다. 따라서, HOMO 준위가 이 값에 가까운 재료에 정공을 효율적으로 주입할 수 있는 것을 알았다. 또한, HOMO 준위가 깊기 때문에(값이 작기 때문에), 이것보다 얇은(값이 큰) 재료에 정공을 효율적으로 주입할 수 있는 것을 알았다.
- [0428] LUMO 준위의 값이 -2.95eV인 것을 알았다. 따라서, LUMO 준위가 이 값에 가까운 재료에 전자를 효율적으로 주입할 수 있는 것을 알았다. LUMO 준위가 낮기 때문에(값이 크기 때문에), 이것보다 깊은(값이 작은) 재료에 전자를 효율적으로 주입할 수 있는 것을 알았다. 또한, 100 사이클 후에서도 환원 피크가 같은 값이 되었다. 상기에 의하여, 환원 상태와 중성 상태 사이의 산화 환원의 반복에 양호한 특성을 나타내는 것을 알았다.
- [0429] 또한, CV 측정의 측정 방법에 관하여는 실시예 1과 마찬가지로 측정하였다.
- [0430] 또한, 본 실시예에서 얻어진 DBqPPn를 LC/MS 분석에 의하여 분석하였다. LC/MS 분석의 측정 방법, 측정 조건등은 실시예 1과 마찬가지로이다. 측정 결과를 도 48(A) 및 도 48(B)에 도시하였다.
- [0431] 도 48(A) 및 도 48(B)의 결과로부터, DBqPPn은 수소 이온의 유무나 등위체의 존재에 기인하고, 주로 m/z=456 부근, m/z=229 부근, m/z=202 부근, m/z=177 부근, m/z=165 부근에 프로덕트 이온에서 유래하는 피크가 각각에서 복수 검출되는 것을 알았다. 또한, 도 48(A) 및 도 48(B)에 도시한 결과는 DBqPPn에서 유래하는 특징적인 결과를 나타내는 것을 생각하면, 혼합물 중에 포함된 DBqPPn를 동정하는 데 중요한 데이터라고 할 수 있다.
- [0432] 또한, m/z=456 부근의 피크는, DBqPPn에서의 디벤조[f,h]퀴놀살린 환으로부터 C와 N이 하나씩 탈리된 상태의 양이온의 프로덕트 이온에서 유래한다고 추정되고, 본 발명의 일 형태인 복소환 화합물의 특징 중 하나이다. 특히, 디벤조[f,h]퀴놀살린 환의 2위치에 치환기(DBqPPn에서는 페닐렌기+페난트렌 골격)가 결합한 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물의 특징 중 하나이다.
- [0433] 또한, m/z=229 부근의 피크는, 디벤조[f,h]퀴놀살린 환과 같은 디아자트리페닐레닐기의 양이온의 프로덕트 이온에 유래한다고 추정되지만, m/z=202 부근, m/z=177 부근, m/z=165부근의 피크도 동시에 검출되어 있고, 이것은 본 발명의 일 형태인 복소환 화합물 DBqPPn가 디벤조[f,h]퀴놀살린 환을 포함한 것을 시사하는 것이다.
- [0434] 또한, DBqPPn를 TOF-SIMS에 의하여 측정된 정성 스펙트럼(양이온 및 음이온)을 도 49(A) 내지 도 50(B)에 도시하였다.
- [0435] 또한, 도 49(A) 및 도 49(B)는 각각 양이온에서의 측정 결과이다. 도 49(A)에서는, 가로축이 0 내지 500의 범위의 m/z를 나타내고 세로축이 강도(임의 단위)를 나타낸다. 도 49(B)에서는, 가로축이 400 내지 1200의 범위의 m/z를 나타내고 세로축이 강도(임의 단위)를 나타낸다. 또한, 도 50(A) 및 도 50(B)는 각각 음이온에서의 측정 결과이다. 도 50(A)에서는, 가로축이 0 내지 400의 범위의 m/z를 나타내고 세로축이 강도(임의 단위)를 나타낸다. 또한, 도 50(B)에서는, 가로축이 400 내지 1200의 범위의 m/z를 나타내고 세로축이 강도(임의 단위)를 나타낸다.
- [0436] 장치는 TOF SIMS 5(ION-TOF사 제조), 1차 이온원은  $Bi_3^{++}$ 를 사용하였다. 또한, 1차 이온은 펄스 폭 7nm 내지 12nm의 펄스 형상으로 조사하고, 그 조사량은  $8.2E10$  내지  $6.7E11$  ions/cm<sup>2</sup>( $1E12$  ions/cm<sup>2</sup> 이하), 가속 전압은 25eV, 전류값은 0.2pA로 하였다. 또한, 시료로서는 DBqPPn의 분말을 사용하여 측정하였다.
- [0437] 도 49(A) 및 도 49(B)의 결과로부터, DBqPPn은 수소 이온의 유무나 등위체의 존재에 기인하고, 주로 m/z=483 부근에 프리커서 이온에서 유래하는 피크가 복수 검출되는 것을 알았다. 또한, 수소 이온의 유무나 등위체의 존재에 기인하고, m/z=229 부근, m/z=201 부근, m/z=176 부근, m/z=165 부근에 프로덕트 이온에서 유래한 피크도 동시에 각각에서 복수 검출되어 있고, 디벤조[f,h]퀴놀살린 환을 포함한 것을 시사한다. 또한, TOF-SIMS에 의한 측정 결과도 혼합물 중에 포함되는 DBqPPn를 동정하는 데 중요한 데이터라고 할 수 있다.
- [0438] 도 50(A) 및 도 50(B)의 결과로부터, DBqPPn은 수소 이온의 유무나 등위체의 존재에 기인하고, 주로 m/z=469 부근에 프로덕트 이온에서 유래하는 피크가 검출되고, m/z=483 부근에 프리커서 이온에서 유래하는 피크가 각각에

서 복수 검출되는 것을 알았다. 또한, 도 50(A) 및 도 50(B)에 도시한 결과는, DBqPPn에 유리하는 특징적인 결과를 나타내는 것을 생각하면, 혼합물 중에 포함되는 DBqPPn를 동정하는 데 중요한 데이터라고 할 수 있다.

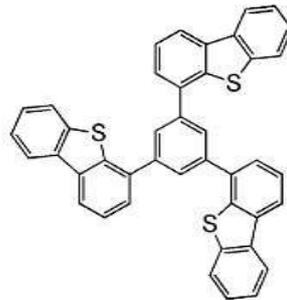
[0439] 또한,  $m/z=469$  부근의 피크는, DBqPPn에서의 디벤조[f,h]퀴녹살린 환으로부터 하나의 N이 탈리된 상태의 라디칼 양이온의 프로덕트 이온에 유래한다고 추정되고, 본 발명의 일 형태인 복소환 화합물의 특징 중 하나이다. 특히, 디벤조[f,h]퀴녹살린 환의 2위치에 치환기(DBqPPn에서는 페닐렌기+페난트렌 골격)가 결합한 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물의 특징 중 하나이다.

[0440] (실시예 4)

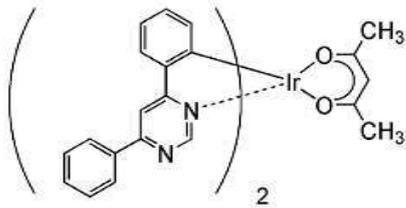
[0441] 본 실시예에서는, 본 발명의 일 형태의 발광 소자에 대하여 도 19를 사용하여 설명한다. 본 실시예에서 사용하는 재료의 화학식을 이하에 나타낸다. 또한, 이미 상술한 재료에 대하여는 생략한다.



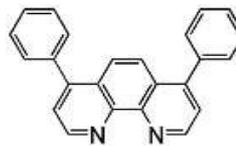
BPAFLP



DBT3P-II



[Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)]



BPhen

[0442] 이하에 실시예의 발광 소자 1 및 발광 소자 2의 제작 방법을 기재한다.

[0443] (발광 소자 1)

[0444] 우선, 유리 기판(1100) 위에 산화실리콘을 함유한 인듐주석 산화물(ITSO)을 스퍼터링법으로 성막하여 제 1 전극(1101)을 형성하였다. 또한, 그 막 두께는 110nm로 하고, 전극 면적은 2mm×2mm로 하였다. 여기서, 제 1 전극(1101)은 발광 소자의 양극으로서 기능하는 전극이다.

[0445] 다음에, 기판(1100) 위에 발광 소자를 형성하기 위한 전(前)처리로서, 기판 표면을 물로 세정하고 200℃에서 1시간 소성(燒成)한 후, UV 오존 처리를 370초 행하였다.

[0446] 그 후, 10<sup>-4</sup>Pa 정도까지 내부가 감압된 진공 증착 장치에 기판을 도입하고, 진공 증착 장치 내의 가열실에서 170℃에서 30분간 진공 소성을 행한 후, 기판(1100)을 30분 정도 방치하여 냉각하였다.

[0447] 다음에, 제 1 전극(1101)이 형성된 면이 하방을 향하도록 제 1 전극(1101)이 형성된 유리 기판(1100)을 진공 증착 장치 내에 설치된 기판 홀더에 고정하고, 10<sup>-4</sup>Pa 정도까지 감압한 후, 제 1 전극(1101) 위에, 저항 가열을 사용한 증착법에 의하여, 4,4',4''-(1,3,5-벤젠트리일)트리(디벤조티오펜)(약칭: DBT3P-II)과 산화몰리브덴을 공증착함으로써 정공 주입층(1111)을 형성하였다. 그 막 두께를 40nm로 하고, DBT3P-II와 산화몰리브덴의 비율은 증량비로 4:2(=DBT3P-II:산화몰리브덴)가 되도록 조절하였다. 또한, 공증착법이란 하나의 처리실 내에서 복수의 증착원으로부터 동시에 증착하는 증착법이다.

[0448] 다음에, 정공 주입층(1111) 위에 4-페닐-4'-(9-페닐플루오렌-9-일)트리페닐아민(약칭: BPAFLP)을 20nm의 막 두

께가 되도록 성막하여 정공 수송층(1112)을 형성하였다.

- [0450] 그리고, 실시예 1에서 합성한 2-[4-나프탈렌-1-일]페닐]디벤조[f,h]퀴놀살린(약칭: NPDBq), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(약칭: NPB) 및 (아세틸아세토나토)비스(4,6-디페닐피리미디나토)이리듐(III)(약칭:[Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)])을 공증착하여, 정공 수송층(1112) 위에 발광층(1113)을 형성하였다. 여기서, NPDBq, NPB 및 [Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)]의 중량비는 0.8:0.2:0.05(=NPDBq:NPB:[Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)])가 되도록 조절하였다. 또한, 발광층(1113)의 막 두께는 40nm로 하였다.
- [0451] 또한, 발광층(1113) 위에 NPDBq를 막 두께 10nm가 되도록 성막하여 제 1 전자 수송층(1114a)을 형성하였다.
- [0452] 그 후, 제 1 전자 수송층(1114a) 위에 바소페난트롤린(약칭: BPhen)을 막 두께 20nm가 되도록 성막하여 제 2 전자 수송층(1114b)을 형성하였다.
- [0453] 또한, 제 2 전자 수송층(1114b) 위에 불화리튬(LiF)을 1nm의 막 두께로 증착하여 전자 주입층(1115)을 형성하였다.
- [0454] 마지막으로, 음극으로서 기능하는 제 2 전극(1103)으로서 알루미늄을 200nm의 막 두께가 되도록 증착함으로써 본 실시예의 발광 소자 1을 제작하였다.
- [0455] 또한, 상술한 증착 과정에 있어서, 증착은 모두 저항 가열법으로 행하였다.
- [0456] (발광 소자 2)
- [0457] 발광 소자 2의 발광층(1113)은, 실시예 3에서 합성한 2-[4-(페난트렌-9-일)페닐]디벤조[f,h]퀴놀살린(약칭: DBqPPn), NPB 및 [Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)]를 공증착함으로써 형성하였다. 여기서, DBqPPn, NPB 및 [Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)]의 중량비는 0.8:0.2:0.05(=DBqPPn:NPB:[Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)])가 되도록 조절하였다. 또한, 발광층(1113)의 막 두께는 40nm로 하였다.
- [0458] 발광 소자 2의 제 1 전자 수송층(1114a)은, DBqPPn를 막 두께 10nm가 되도록 성막함으로써 형성하였다. 발광층(1113) 및 제 1 전자 수송층(1114a) 이외에는 발광 소자 1과 마찬가지로 제작하였다.
- [0459] 이상에 의하여 얻어진 발광 소자 1 및 발광 소자 2의 소자 구조를 표 1에 나타낸다.

표 1

	제 1 전극	정공 주입층	정공 수송층	발광층	제 1 전자 수송층	제 2 전자 수송층	전자 주입층	제 2 전극
발광 소자 1	ITSO 110nm	DBT3P-II:MoOx (=4:2) 40nm	BPAFL P 20nm	NPDBq : NPB : [Ir(dppm) <sub>2</sub> (acac)] (=0.8:0.2:0.05) 40nm	NPDBq 10nm	BPhen 20nm	LiF 1nm	Al 200nm
발광 소자 2	ITSO 110nm	DBT3P-II:MoOx (=4:2) 40nm	BPAFL P 20nm	DBqPPn : NPB : [Ir(dppm) <sub>2</sub> (acac)] (=0.8:0.2:0.05) 40nm	DBqPPn 10nm	BPhen 20nm	LiF 1nm	Al 200nm

- [0460]
- [0461] 발광 소자 1 및 발광 소자 2를 질소 분위기의 글로브 박스 내에서 발광 소자가 대기에 노출되지 않도록 유리 기판에 의하여 봉지하는 작업을 행한 후, 이들의 발광 소자의 동작 특성에 대하여 측정을 행하였다. 또한, 측정은 실온(25℃로 유지된 분위기)에서 행하였다.
- [0462] 발광 소자 1 및 발광 소자 2의 휘도-전류 효율 특성을 도 20에 도시하였다. 도 20에서 가로축은 휘도(cd/m<sup>2</sup>)를 나타내고 세로축은 전류 효율(cd/A)을 나타낸다. 또한, 전압-전류 특성을 도 21에 도시하였다. 도 21에서 가로축은 전압(V)을 나타내고 세로축은 전류(mA)를 나타낸다. 또한, 휘도-색도 좌표 특성을 도 22에 도시하였다. 도 22에서 가로축은 휘도(cd/m<sup>2</sup>)를 나타내고 세로축은 색도 좌표(x 좌표, 또는 y 좌표)를 나타낸다. 또한, 휘

도-파워 효율 특성을 도 23에 도시하였다. 도 23에서 가로축은 휘도(cd/m<sup>2</sup>)를, 세로축은 파워 효율(lm/W)을 나타낸다. 또한, 각 발광 소자에서의 휘도가 1000cd/m<sup>2</sup> 부근일 때의 전압(V), 전류 밀도(mA/cm<sup>2</sup>), CIE 색도 좌표(x, y), 휘도(cd/m<sup>2</sup>), 전류 효율(cd/A), 외부 양자 효율(%)을 표 2에 나타낸다.

표 2

	전압(V)	전류 밀도(mA/cm <sup>2</sup> )	색도 x	색도 y	휘도(cd/m <sup>2</sup> )	전류 효율(cd/A)	외부 양자 효율(%)
발광 소자 1	2.8	1.1	0.56	0.43	750	67	26
발광 소자 2	2.8	1.3	0.56	0.43	900	71	29

[0463]

[0464]

또한, 발광 소자 1 및 발광 소자 2에 0.1mA의 전류를 흘린 경우의 발광 스펙트럼을 도 24에 도시하였다. 도 24에서, 가로축은 파장(nm)을 나타내고 세로축은 발광 강도(임의 단위)를 나타낸다. 도 24 및 표 2에 의하여, 750cd/m<sup>2</sup>의 휘도일 때의 발광 소자 1의 CIE 색도 좌표는 (x, y)=(0.56, 0.43)이었다. 900cd/m<sup>2</sup>의 휘도일 때의 발광 소자 2의 CIE 색도 좌표는 (x, y)=(0.56, 0.43)이었다. 발광 소자 1 및 발광 소자 2는, [Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)]에서 유래하는 발광이 얻어진 것을 알았다. 이에 의하여, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물인 NPDBq 및 DBqPPn은 주황색의 인광 재료를 발광시킬 수 있는 T1 준위를 갖는 것을 알았다. 이에 의하여, 주황색 내지 적색의 인광 발광 재료의 호스트 재료로서 사용할 수 있는 것을 알았다.

[0465]

도 21 및 표 2에 의하여, 발광 소자 1 및 발광 소자 2는 양쪽 모두가 구동 전압이 낮은 것을 알았다. 발광 소자 1 및 발광 소자 2에서는, 발광층의 호스트 재료 및 제 1 전자 수송층의 재료에 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물인 NPDBq 또는 DBqPPn을 사용하였다. NPDBq 및 DBqPPn은 디벤조[f,h]퀴놀살린 환과 나프탈렌 환 또는 페난트렌 환이 파라 위치의 페닐렌기를 개재하여 결합한 복소환 화합물이다. 따라서, 구동 전압이 낮은 소자를 실현할 수 있다.

[0466]

또한, 도 20, 도 23 및 표 2에 의하여 발광 소자 1 및 발광 소자 2는 양쪽 모두가 전류 효율, 외부 양자 효율 및 파워 효율이 높은 것을 알았다.

[0467]

또한, 도 22를 보면, 발광 소자 1 및 발광 소자 2에서는 낮은 휘도로부터 높은 휘도까지 색 변화를 거의 볼 수 없었다. 이에 의하여, 발광 소자 1 및 발광 소자 2는 캐리어 밸런스가 양호한 소자라고 할 수 있다.

[0468]

발광 소자 1 및 발광 소자 2에서, 캐리어 밸런스가 양호한 이유 중 하나로서는 이하의 사항을 생각할 수 있다. 발광 소자 1 및 발광 소자 2에서는, 전자 수송성이 높은 NPDBq 또는 DBqPPn과, 정공 수송성이 높은 NPB를 발광층에 사용하였다. 이에 의하여, 발광 재료인 [Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)]에 전자 및 정공을 효율적으로 주입할 수 있어, 캐리어 밸런스가 양호한 소자를 실현할 수 있었다고 생각할 수 있다.

[0469]

다음에, 발광 소자 1 및 발광 소자 2의 신뢰성 시험을 행하였다. 신뢰성 시험의 결과를 도 25에 도시하였다. 도 25에서 세로축은 초기 휘도를 100%로 한 경우의 정규화 휘도(%)를 나타내고 가로축은 소자의 구동 시간(h)을 나타낸다. 신뢰성 시험은 실온하에서 초기 휘도를 5000cd/m<sup>2</sup>로 설정하고, 전류 밀도가 일정한 조건으로 본 실시예의 발광 소자를 구동하였다. 도 25에 따르면, 발광 소자 1의 410시간 후의 휘도는 초기 휘도의 80%를 유지하고, 발광 소자 2의 940시간 후의 휘도는 초기 휘도의 73%를 유지하였다. 이 신뢰성 시험의 결과로부터, 발광 소자 1 및 발광 소자 2는 장수명인 것이 밝혀졌다.

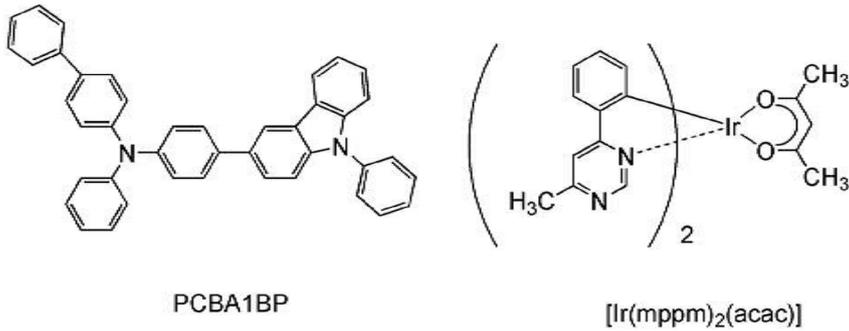
[0470]

상술한 바와 같이, 실시예 1에서 제작한 NPDBq 및 실시예 3에서 제작한 DBqPPn을 발광층의 호스트 재료 및 전자 수송층의 재료로서 사용함으로써, 구동 전압이 낮으며 발광 효율이 높고, 장수명인 발광 소자를 제작할 수 있었다.

[0471]

(실시예 5)

[0472] 본 실시예에서는, 본 발명의 일 형태의 발광 소자에 대하여 도 19를 사용하여 설명한다. 본 실시예에서 사용하는 재료의 화학식을 이하에서 기재한다. 또한, 이미 기재한 재료에 대하여는 생략한다.



[0473] 이하에서 본 실시예의 발광 소자 3의 제작 방법을 기재한다.  
 [0474] (발광 소자 3)

[0476] 발광 소자 3의 발광층(1113)은 실시예 3에서 합성한 DBqPPn, 4-페닐-4'-(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)트리페닐아민 (약칭: PCBA1BP), 및 (아세틸아세토나토)비스(6-메틸-4-페닐피리미디나토)이리듐(III)(약칭: [Ir(mppm)<sub>2</sub>(acac)])을 공중착함으로써 형성하였다. 여기서, DBqPPn, PCBA1BP 및 [Ir(mppm)<sub>2</sub>(acac)]의 중량비는 0.8:0.2:0.05(=DBqPPn:PCBA1BP:[Ir(mppm)<sub>2</sub>(acac)])가 되도록 조절하였다. 또한, 발광층(1113)의 막 두께는 40nm로 하였다.

[0477] 발광 소자 3의 제 1 전자 수송층(1114a)은, DBqPPn를 막 두께 10nm가 되도록 성막함으로써 형성하였다. 발광층(1113) 및 제 1 전자 수송층(1114a) 이외에는 발광 소자 1과 마찬가지로 제작하였다.

[0478] 이상에 의하여 얻어진 발광 소자 3의 소자 구조를 표 3에 나타낸다.

표 3

	제 1 전극	정공 주입층	정공 수송층	발광층	제 1 전자 수송층	제 2 전자 수송층	전자 주입층	제 2 전극
발광 소자 3	ITSO 110nm	DBT3P-II:MoOx (=4:2) 40nm	BPAFLP 20nm	DBqPPn : PCBA1BP : [Ir(mppm) <sub>2</sub> (acac)] (=0.8:0.2:0.05) 40nm	DBqPPn 10nm	BPhen 20nm	LiF 1nm	Al 200nm

[0479] 발광 소자 3을 질소 분위기의 글로브 박스 내에서 발광 소자가 대기에 노출되지 않도록 유리 기판에 의하여 봉지하는 작업을 행한 후, 발광 소자의 동작 특성에 대하여 측정을 행하였다. 또한, 측정은 실온(25℃로 유지된 분위기)에서 행하였다.

[0481] 발광 소자 3의 휘도-전류 효율 특성을 도 26에 도시하였다. 도 26에서 가로축은 휘도(cd/m<sup>2</sup>)를 나타내고 세로축은 전류 효율(cd/A)을 나타낸다. 또한, 전압-전류 특성을 도 27에 도시하였다. 도 27에서 가로축은 전압(V)을 나타내고 세로축은 전류(mA)를 나타낸다. 또한, 휘도-색도 좌표 특성을 도 28에 도시하였다. 도 28에서 가로축은 휘도(cd/m<sup>2</sup>)를 나타내고 세로축은 색도 좌표(x 좌표, 또는 y 좌표)를 나타낸다. 또한, 휘도-파워 효율 특성을 도 29에 도시하였다. 도 29에서 가로축은 휘도(cd/m<sup>2</sup>)를, 세로축은 파워 효율(lm/W)을 나타낸다. 또한, 발광 소자 3에서의 휘도가 1100cd/m<sup>2</sup>일 때의 전압(V), 전류 밀도(mA/cm<sup>2</sup>), CIE 색도 좌표(x, y), 전류 효율(cd/A), 외부 양자 효율(%)을 표 4에 나타낸다.

표 4

	전압(V)	전류 밀도 (mA/cm <sup>2</sup> )	색도 x 색도 y	휘도 (cd/m <sup>2</sup> )	전류 효율 (cd/A)	외부 양자 효율(%)
발광 소자 3	2.9	1.7	0.45 0.54	1100	62	18

[0482]

[0483]

또한, 발광 소자 3에 0.1mA의 전류를 흘린 경우의 발광 스펙트럼을 도 30에 도시하였다. 도 30에서, 가로축은 파장(nm)을 나타내고 세로축은 발광 강도(임의 단위)를 나타낸다. 도 30 및 표 4에 의하여, 1100cd/m<sup>2</sup>의 휘도 일 때의 발광 소자 3의 CIE 색도 좌표는 (x, y)=(0.45, 0.54)이었다. 발광 소자 3은, [Ir(mppm)<sub>2</sub>(acac)]에서 유래하는 발광이 얻어진 것을 알았다. 이에 의하여, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물인 DBqPPn은 녹색의 인광 재료를 충분히 발광시킬 수 있는 T1 준위를 갖는 것을 알았다. 이에 의하여, 녹색 내지 적색의 인광 발광 재료의 호스트 재료로서 사용할 수 있는 것을 알았다.

[0484]

도 27 및 표 4에 의하여, 발광 소자 3은 구동 전압이 낮은 것을 알았다. 발광 소자 3에서는, 발광층의 호스트 재료 및 제 1 전자 수송층의 재료에 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물인 DBqPPn을 사용하였다. DBqPPn은 디벤조[f,h]퀴놀살린 환과 페난트렌 환이 파라 위치의 페닐렌기를 개재하여 결합한 복소환 화합물이다. 따라서, 구동 전압이 낮은 소자를 실현할 수 있다.

[0485]

또한, 도 26, 도 29 및 표 4에 의하여, 발광 소자 3은 전류 효율, 외부 양자 효율, 및 파워 효율이 높은 것을 알았다.

[0486]

또한, 도 28을 보면, 발광 소자 3에서는 낮은 휘도로부터 높은 휘도까지 색 변화를 거의 볼 수 없었다. 이에 의하여, 발광 소자 3은 캐리어 밸런스가 양호한 소자라고 할 수 있다.

[0487]

발광 소자 3에서, 캐리어 밸런스가 양호한 이유 중 하나로서는 이하의 사항을 생각할 수 있다. 발광 소자 3에서는, 전자 수송성이 높은 DBqPPn과, 정공 수송성이 높은 PCBA1BP를 발광층에 사용하였다. 이에 의하여, 발광 재료인 [Ir(mppm)<sub>2</sub>(acac)]에 전자 및 정공을 효율적으로 주입할 수 있어, 캐리어 밸런스가 양호한 소자를 실현할 수 있었다고 생각할 수 있다.

[0488]

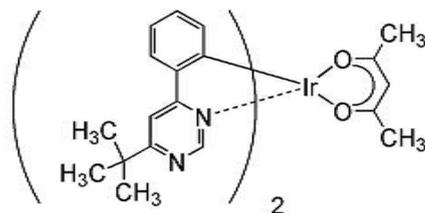
상술한 바와 같이, 실시예 3에서 제작한 DBqPPn을 발광층의 호스트 재료 및 전자 수송층의 재료로서 사용함으로써, 구동 전압이 낮고 발광 효율이 높은 발광 소자를 제작할 수 있었다.

[0489]

(실시예 6)

[0490]

본 실시예에서는, 본 발명의 일 형태의 발광 소자에 대하여 도 19를 사용하여 설명한다. 본 실시예에서 사용하는 재료의 화학식을 이하에서 기재한다. 또한, 이미 기재한 재료에 대하여는 생략한다.



[Ir(tBuppm)<sub>2</sub>(acac)]

[0491]

이하에서 본 실시예의 발광 소자 4의 제작 방법을 기재한다.

[0492]

(발광 소자 4)

[0494]

발광 소자 4의 발광층(1113)은 실시예 2에서 합성한 2-[3-(페난트렌-9-일)페닐]디벤조[f,h]퀴놀살린(약칭: mPnPDBq), PCBA1BP 및 (아세틸아세토나토)비스(6-tert-부틸-4-페닐피리미디나토)이리듐(III)(약

칭: $[\text{Ir}(\text{tBuppm})_2(\text{acac})]$ )을 공증착함으로써 형성하였다. 여기서, mPnPDBq, PCBA1BP 및  $[\text{Ir}(\text{tBuppm})_2(\text{acac})]$ 의 중량비는 0.8:0.2:0.05(=mPnPDBq PCBA1BP: $[\text{Ir}(\text{tBuppm})_2(\text{acac})]$ )가 되도록 조절하였다. 또한, 발광층(1113)의 막 두께는 40nm로 하였다.

[0495] 발광 소자 4의 제 1 전자 수송층(1114a)은, mPnPDBq를 막 두께 10nm가 되도록 성막함으로써 형성하였다. 발광층(1113) 및 제 1 전자 수송층(1114a) 이외에는 발광 소자 1과 마찬가지로 제작하였다.

[0496] 상기에 의하여 얻어진 발광 소자 4의 소자 구조를 표 5에 나타낸다.

표 5

	제 1 전극	정공 주입층	정공 수송층	발광층	제 1 전자 수송층	제 2 전자 수송층	전자 주입층	제 2 전극
발광 소자 4	ITSO 110nm	DBT3P-II:MoOx (=4:2) 40nm	BPAFLP 20nm	mPnPDBq : PCBA1BP : $[\text{Ir}(\text{tBuppm})_2(\text{acac})]$ (=0.8:0.2:0.05) 40nm	mPnPDBq 10nm	BPhe n 20nm	LiF 1nm	Al 200nm

[0497]

[0498] 발광 소자 4를 질소 분위기의 글로브 박스 내에서 발광 소자가 대기에 노출되지 않도록 유리 기판에 의하여 봉지하는 작업을 행한 후, 발광 소자의 동작 특성에 대하여 측정을 행하였다. 또한, 측정은 실온(25℃로 유지된 분위기)에서 행하였다.

[0499] 발광 소자 4의 휘도-전류 효율 특성을 도 31에 도시하였다. 도 31에서 가로축은 휘도( $\text{cd}/\text{m}^2$ )를 나타내고 세로축은 전류 효율( $\text{cd}/\text{A}$ )을 나타낸다. 또한, 전압-전류 특성을 도 32에 도시하였다. 도 32에서 가로축은 전압(V)을 나타내고 세로축은 전류(mA)를 나타낸다. 또한, 휘도-색도 좌표 특성을 도 33에 도시하였다. 도 33에서 가로축은 휘도( $\text{cd}/\text{m}^2$ )를 나타내고 세로축은 색도 좌표(x 좌표, 또는 y 좌표)를 나타낸다. 또한, 휘도-파워 효율 특성을 도 34에 도시하였다. 도 34에서 가로축은 휘도( $\text{cd}/\text{m}^2$ )를, 세로축은 파워 효율( $\text{lm}/\text{W}$ )을 나타낸다. 또한, 발광 소자 4에서의 휘도가  $750\text{cd}/\text{m}^2$ 일 때의 전압(V), 전류 밀도( $\text{mA}/\text{cm}^2$ ), CIE 색도 좌표(x, y), 전류 효율( $\text{cd}/\text{A}$ ), 외부 양자 효율(%)을 표 6에 나타낸다.

표 6

	전압(V)	전류 밀도( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )	색도 x 색도 y	휘도( $\text{cd}/\text{m}^2$ )	전류 효율( $\text{cd}/\text{A}$ )	외부 양자 효율(%)
발광 소자 4	3.0	1.1	0.41 0.57	750	71	20

[0500]

[0501] 또한, 발광 소자 4에 0.1mA의 전류를 흘린 경우의 발광 스펙트럼을 도 35에 도시하였다. 도 35에서, 가로축은 파장(nm)을 나타내고 세로축은 발광 강도(임의 단위)를 나타낸다. 도 35 및 표 6에 도시한 바와 같이,  $750\text{cd}/\text{m}^2$ 의 휘도일 때의 발광 소자 4의 CIE 색도 좌표는 (x, y)=(0.41, 0.57)이었다. 발광 소자 4는,  $[\text{Ir}(\text{tBuppm})_2(\text{acac})]$ 에서 유래하는 발광이 얻어진 것을 알았다. 이에 의하여, 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물인 mPnPDBq는 녹색의 인광 재료를 충분히 발광시킬 수 있는 T1 준위를 갖는 것을 알았다. 이에 의하여, 녹색 내지 적색의 인광 발광 재료의 호스트 재료로서 사용할 수 있는 것을 알았다.

[0502] 도 32 및 표 6에 의하여, 발광 소자 4는 구동 전압이 낮은 것을 알았다. 발광 소자 4에서는, 발광층의 호스트 재료 및 제 1 전자 수송층의 재료에 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물인 mPnPDBq를 사용하였다. 따라서, 구

동 전압이 낮은 소자를 실현할 수 있다. 또한, 도 31, 도 34 및 표 6으로부터, 발광 소자 4는 전류 효율, 외부 양자 효율 및 파워 효율이 높은 것을 알았다. mPnPDBq는 디벤조[f,h]퀴녹살린 환과 페난트렌 환이 메타 위치의 페닐렌기를 개재하여 결합한 복소환 화합물이다. 따라서, 발광 효율이 높은 소자를 실현할 수 있다.

[0503] 또한, 도 31을 보면, 발광 소자 4는 낮은 휘도로부터 높은 휘도까지 전류 효율의 변화가 작았다. 또한, 도 33을 보면, 발광 소자 4는 낮은 휘도로부터 높은 휘도까지 색 변화를 거의 볼 수 없었다. 이에 의하여, 발광 소자 4는 캐리어 밸런스가 양호한 소자라고 할 수 있다.

[0504] 발광 소자 4에서, 캐리어 밸런스가 양호한 이유 중 하나로서는 이하의 사항을 생각할 수 있다. 발광 소자 4에서는, 전자 수송성이 높은 mPnPDBq과, 정공 수송성이 높은 PCBA1BP를 발광층에 사용하였다. 이에 의하여, 발광 재료인 [Ir(tBuppm)<sub>2</sub>(acac)]에 전자 및 정공을 효율적으로 주입할 수 있어, 캐리어 밸런스가 양호한 소자를 실현할 수 있었다고 생각할 수 있다.

[0505] 상술한 바와 같이, 실시예 2에서 제작한 mPnPDBq을 발광층의 호스트 재료 및 전자 수송층의 재료로서 사용함으로써, 구동 전압이 낮고 발광 효율이 높은 발광 소자를 제작할 수 있었다.

[0506] (실시예 7)

[0507] 본 실시예에서는, 본 발명의 일 형태의 발광 소자에 대하여 도 19를 사용하여 설명한다. 본 실시예에서 사용한 재료는 전술한 실시예에서 기재한 재료이기 때문에, 화학식에 대하여는 생략한다.

[0508] 이하에서 본 실시예의 발광 소자 5의 제작 방법을 기재한다.

[0509] (발광 소자 5)

[0510] 발광 소자 5의 발광층(1113)은 실시예 2에서 합성한 mPnPDBq, PCBA1BP 및 [Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)]를 공증착함으로써 형성하였다. 여기서, mPnPDBq, PCBA1BP 및 [Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)]의 중량비는 0.8:0.2:0.05(=mPnPDBq PCBA1BP: [Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)])가 되도록 조절하였다. 또한, 발광층(1113)의 막 두께는 40nm로 하였다.

[0511] 발광 소자 5의 제 1 전자 수송층(1114a)은, mPnPDBq를 막 두께 10nm가 되도록 성막함으로써 형성하였다. 발광층(1113) 및 제 1 전자 수송층(1114a) 이외에는 발광 소자 1과 마찬가지로 제작하였다.

[0512] 이상에 의하여 얻어진 발광 소자 5의 소자 구조를 표 7에 나타낸다.

표 7

	제 1 전극	정공 주입층	정공 수송층	발광층	제 1 전자 수송층	제 2 전자 수송층	전자 주입층	제 2 전극
발광 소자 5	ITSO 110nm	DBT3P-II:MoOx (=4:2) 40nm	BPAFLP 20nm	mPnPDBq : PCBA1BP : [Ir(dppm) <sub>2</sub> (acac)] (=0.8:0.2:0.05) 40nm	mPnPDBq 10nm	BPhen 20nm	LiF 1nm	Al 200nm

[0513]

[0514] 발광 소자 5를 질소 분위기의 글로브 박스 내에서 발광 소자가 대기에 노출되지 않도록 유리 기판에 의하여 봉지하는 작업을 행한 후, 발광 소자의 동작 특성에 대하여 측정을 행하였다. 또한, 측정은 실온(25℃로 유지된 분위기)에서 행하였다.

[0515] 발광 소자 5의 휘도-전류 효율 특성을 도 36에 도시하였다. 도 36에서 가로축은 휘도(cd/m<sup>2</sup>)를 나타내고 세로축은 전류 효율(cd/A)을 나타낸다. 또한, 전압-전류 특성을 도 37에 도시하였다. 도 37에서 가로축은 전압(V)을 나타내고 세로축은 전류(mA)를 나타낸다. 또한, 휘도-색도 좌표 특성을 도 38에 도시하였다. 도 38에서 가로축은 휘도(cd/m<sup>2</sup>)를 나타내고 세로축은 색도 좌표(x 좌표, 또는 y 좌표)를 나타낸다. 또한, 휘도-파워 효율 특성을 도 39에 도시하였다. 도 39에서 가로축은 휘도(cd/m<sup>2</sup>)를, 세로축은 파워 효율(lm/W)을 나타낸다.

또한, 발광 소자 5에서의 휘도가  $900\text{cd/m}^2$ 일 때의 전압(V), 전류 밀도( $\text{mA/cm}^2$ ), CIE 색도 좌표(x, y), 전류 효율( $\text{cd/A}$ ), 외부 양자 효율(%)을 표 8에 나타낸다.

표 8

	전압(V)	전류 밀도( $\text{mA/cm}^2$ )	색도 x 색도 y	휘도( $\text{cd/m}^2$ )	전류 효율( $\text{cd/A}$ )	외부 양자 효율(%)
발광 소자 5	2.9	1.2	0.56 0.44	900	78	30

[0516]

[0517]

또한, 발광 소자 5에 0.1mA의 전류를 흘린 경우의 발광 스펙트럼을 도 40에 도시하였다. 도 40에서, 가로축은 파장(nm)을 나타내고 세로축은 발광 강도(임의 단위)를 나타낸다. 도 40 및 표 8에 도시한 바와 같이,  $900\text{cd/m}^2$ 의 휘도일 때의 발광 소자 5의 CIE 색도 좌표는 (x, y)=(0.56, 0.44)이었다. 발광 소자 5는,  $[\text{Ir}(\text{dppm})_2(\text{acac})]$ 에서 유래하는 발광이 얻어진 것을 알았다.

[0518]

도 37 및 표 8에 의하여, 발광 소자 5는 구동 전압이 낮은 것을 알았다. 발광 소자 5에서는, 발광층의 호스트 재료 및 제 1 전자 수송층의 재료에 본 발명의 일 형태의 복소환 화합물인 mPnPDBq를 사용하였다. 따라서, 구동 전압이 낮은 소자를 실현할 수 있다. 또한, 도 36, 도 39 및 표 8을 보면, 발광 소자 5는 전류 효율, 외부 양자 효율 및 파워 효율이 높은 것을 알았다. mPnPDBq는 디벤조[f,h]퀴놀살린 환과 페난트렌 환이 메타 위치의 페닐렌기를 개재하여 결합한 복소환 화합물이다. 따라서, 발광 효율이 높은 소자를 실현할 수 있다.

[0519]

또한, 도 38을 보면 알 수 있는 바와 같이, 발광 소자 5는 낮은 휘도로부터 높은 휘도까지 전류 효율의 변화가 작았다. 또한, 도 38을 보면, 발광 소자 5는 낮은 휘도로부터 높은 휘도까지 색 변화를 거의 볼 수 없었다. 이에 의하여, 발광 소자 5는 캐리어 밸런스가 양호한 소자라고 할 수 있다.

[0520]

발광 소자 5에서, 캐리어 밸런스가 양호한 이유 중 하나로서는 이하의 사항을 생각할 수 있다. 발광 소자 5에서는, 전자 수송성이 높은 mPnPDBq과, 정공 수송성이 높은 PCBA1BP를 발광층에 사용하였다. 이에 의하여, 발광 재료인  $[\text{Ir}(\text{dppm})_2(\text{acac})]$ 에 전자 및 정공을 효율적으로 주입할 수 있어, 캐리어 밸런스가 양호한 소자를 실현할 수 있었다고 생각할 수 있다.

[0521]

다음에, 발광 소자 5의 신뢰성 시험을 행하였다. 신뢰성 시험의 결과를 도 41에 도시하였다. 도 41에서 세로축은 초기 휘도를 100%로 한 경우의 정규화 휘도(%)를 나타내고 가로축은 소자의 구동 시간(h)을 나타낸다. 신뢰성 시험은 실온하에서 초기 휘도를  $5000\text{cd/m}^2$ 로 설정하고, 전류 밀도가 일정한 조건으로 본 실시예의 발광 소자를 구동하였다. 도 41에 따르면, 발광 소자 5의 500시간 후의 휘도는 초기 휘도의 73%를 유지하였다. 이 신뢰성 시험의 결과로부터, 발광 소자 5는 장수명인 것이 밝혀졌다.

[0522]

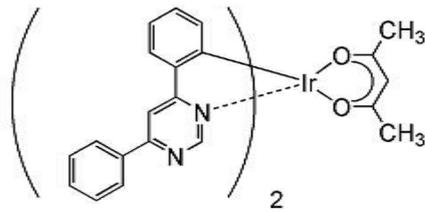
상술한 바와 같이, 실시예 2에서 제작한 mPnPDBq를 발광층의 호스트 재료 및 전자 수송층의 재료로서 사용함으로써, 구동 전압이 낮으며 발광 효율이 높고, 장수명인 발광 소자를 제작할 수 있었다.

[0523]

(참고예 1)

[0524]

상기 실시예 4 및 실시예 7에서 사용한 (아세틸아세토나토)비스(4,6-디페닐피리미디나토)이리듐(III)(약칭:  $[\text{Ir}(\text{dppm})_2(\text{acac})]$ )의 합성 방법에 대하여 구체적으로 설명한다.  $[\text{Ir}(\text{dppm})_2(\text{acac})]$ 의 구조를 이하에 나타낸다.



[Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)]

[0525]

[0526]

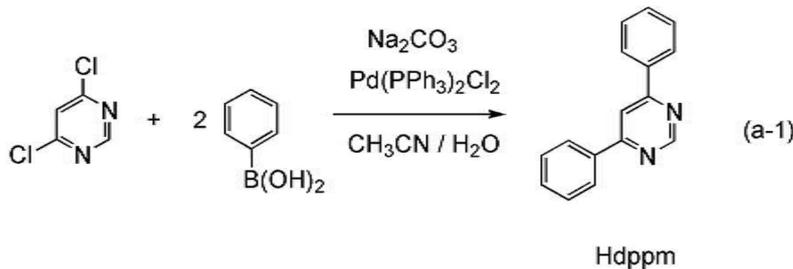
<단계 1; 4,6-디페닐피리미딘(약칭: Hdppm)의 합성>

[0527]

우선, 4,6-디클로로피리미딘 5.02g, 페닐보론산 8.29g, 탄산나트륨 7.19g, 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II)디클로라이드(약칭: Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) 0.29g, 물 20mL, 아세토니트릴 20mL를 환류관이 장착된 가지형 플라스크(recovery flask)에 넣고, 내부를 아르곤으로 치환시켰다. 이 반응 용기에 마이크로파(2.45GHz 100W)를 60분 동안 조사함으로써 가열하였다. 여기서, 페닐보론산 2.08g, 탄산나트륨 1.79g, Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 0.070g, 물 5mL, 아세토니트릴 5mL를 플라스크에 더 넣고, 마이크로파(2.45GHz 100W)를 다시 60분 동안 조사함으로써 가열하였다. 그 후 이 용액에 물을 첨가하고, 디클로로메탄으로 유기층을 추출하였다. 얻어진 추출액을 물로 세정하고 황산마그네슘을 사용하여 건조시켰다. 건조한 후의 용액을 여과하였다. 이 용액의 용매를 증류 제거하고, 얻어진 잔류물을 디클로로메탄을 전개 용매로서 사용하는 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제함으로써, 피리미딘 유도체 Hdppm을 얻었다(황백색 분말, 수율 38%). 또한, 마이크로파의 조사는 마이크로파 합성 장치(CEM사제 Discover)를 사용하였다. 이하에 단계 1의 합성 스킴 a-1을 나타낸다.

[0528]

[합성 스킴 a-1]



[0529]

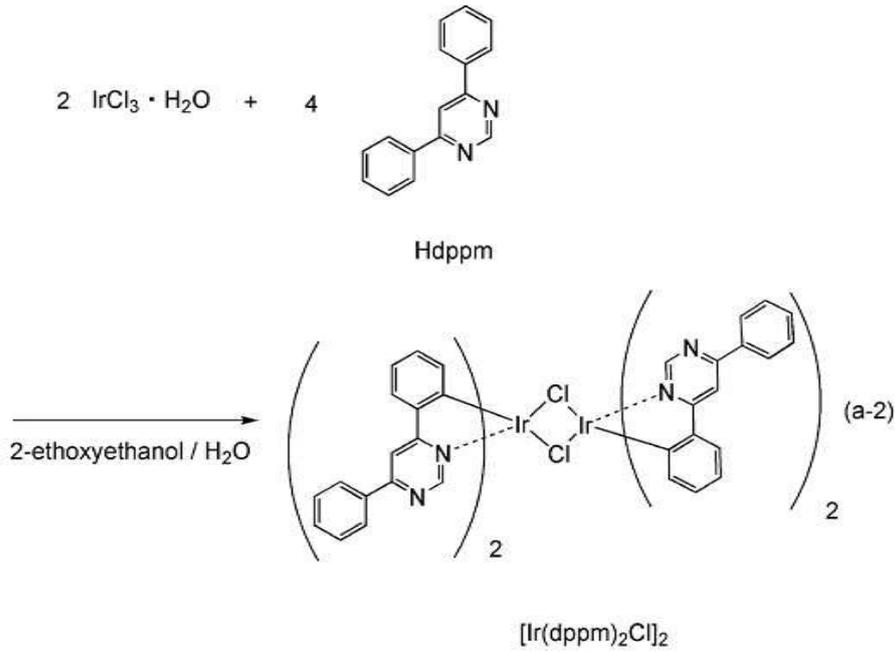
[0530]

<단계 2; 디-μ-클로로-비스[비스(4,6-디페닐피리미디나토)이리듐(III)](약칭: [Ir(dppm)<sub>2</sub>Cl]<sub>2</sub>)의 합성>

[0531]

다음에, 2-에톡시에탄올 15mL, 물 5mL, 상기 단계 1에서 얻어진 Hdppm 1.10g 및 염화이리듐 수화물(IrCl<sub>3</sub>·H<sub>2</sub>O) 0.69g를 환류관이 장착된 가지형 플라스크에 넣고, 플라스크 내를 아르곤으로 치환시켰다. 이후, 1시간 동안 마이크로파(2.45GHz, 100W)를 조사하여 반응시켰다. 용매를 증류 제거한 후, 얻어진 잔류물을 에탄올로 여과한 다음에 세정함으로써, 복핵 착체[Ir(dppm)<sub>2</sub>Cl]<sub>2</sub>를 얻었다(적갈색 분말, 수율 88%). 이하에 단계 2의 합성 스킴 a-2를 나타낸다.

[0532] [합성 스킴 a-2]

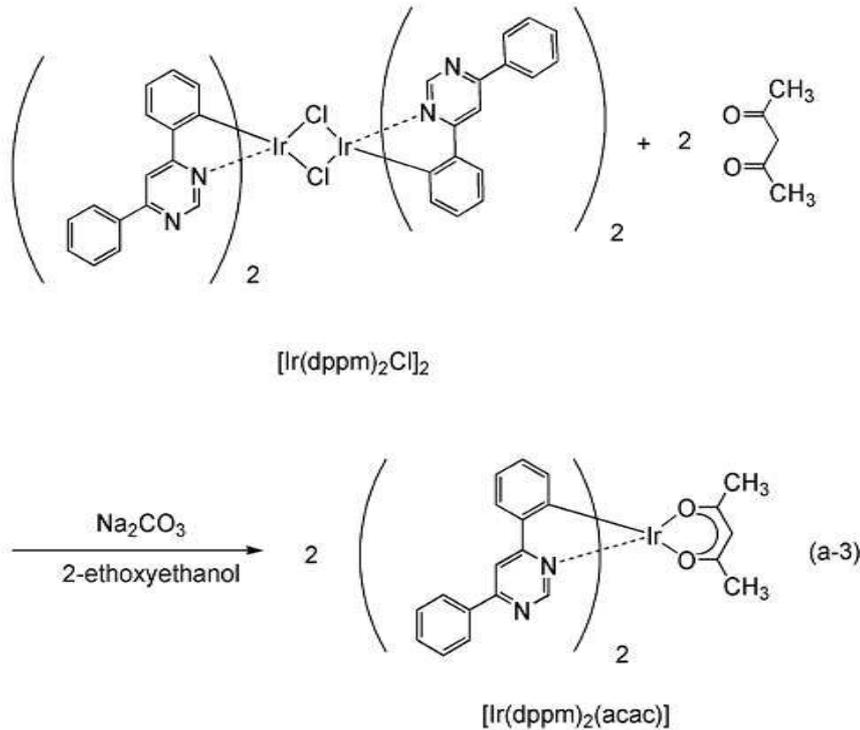


[0533]

[0534] <단계 3; (아세틸아세토나토)비스(4,6-디페닐피리미디나토)이리듐(III)(약칭:  $[\text{Ir}(\text{dppm})_2(\text{acac})]$ )의 합성>

[0535] 또한, 2-에톡시에탄올 40mL, 상기 단계 2에서 얻어진  $[\text{Ir}(\text{dppm})_2\text{Cl}]_2$  1.44g, 아세틸아세톤 0.30g, 탄산나트륨 1.07g를 환류관이 달린 가지형 플라스크에 넣고, 플라스크의 내부를 아르곤으로 치환시켰다. 그 후, 마이크로파(2.45GHz 120W)를 60분 동안 조사하여 반응시켰다. 용매를 증류 제거하여 얻어진 잔류물을 디클로로메탄에 용해하여 여과하고, 불용물을 제거하였다. 얻어진 여과액을 물, 다음에 포화 식염수로 세정하고, 황산마그네슘을 사용하여 건조시켰다. 건조한 후의 용액을 여과하였다. 이 용액의 용매를 증류 제거한 후, 얻어진 잔류물을 디클로로메탄: 아세트산에틸=50:1(체적 비율)을 전개 용매로 하는 실리카겔 컬럼 크로마토그래피에 의하여 정제하였다. 그 후, 디클로로메탄과 헥산의 혼합 용매로 재결정화시킴으로써, 목적물인 주황색 분말을 얻었다(수율 32%). 이하에 단계 3의 합성 스킴 a-3을 나타낸다.

[0536] [합성 스킴 a-3]



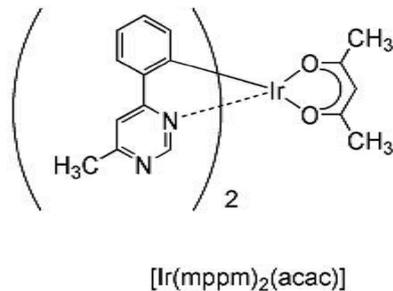
[0537]

[0538] 상기 단계 3에서 얻어진 주황색 분말의 핵자기 공명 분광법(<sup>1</sup>H-NMR)에 의한 분석 결과를 하기에서 기재한다. 이 결과로부터 본 합성예에서 [Ir(dppm)<sub>2</sub>(acac)]가 얻어진 것이 확인되었다.

[0539] <sup>1</sup>H NMR. δ(CDCl<sub>3</sub>): 1.83(s, 6H), 5.29(s, 1H), 6.48(d, 2H), 6.80(t, 2H), 6.90(t, 2H), 7.55-7.63(m, 6H), 7.77(d, 2H), 8.17(s, 2H), 8.24(d, 4H), 9.17(s, 2H).

[0540] (참고예 2)

[0541] 상기 실시예 5에서 사용한 (아세틸아세토나토)비스(6-메틸-4-페닐피리미디나토)이리듐(III)(약칭 : [Ir(mppm)<sub>2</sub>(acac)])의 합성 방법에 대하여 구체적으로 설명한다. [Ir(mppm)<sub>2</sub>(acac)]의 구조를 이하에 나타낸다.



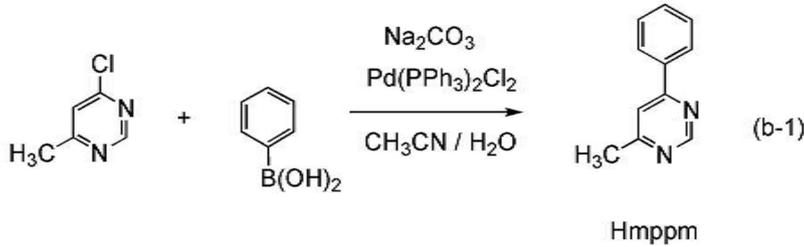
[0542]

[0543] <단계 1; 4-메틸-6-페닐피리미딘(약칭: Hmppm)의 합성>

[0544] 우선, 4-클로로-6-페닐피리미딘 4.90g, 페닐보론산 4.80g, 탄산나트륨 4.03g, 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II) 디클로라이드(약칭 : Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) 0.16g, 물 20mL, 아세토니트릴 10mL를, 환류관이 장착된 가지형 플라스크에 넣어 내부를 아르곤 치환하였다. 이 반응 용기에 마이크로파(2.45GHz 100W)를 60분 동안 조사함으로써 가열하였다. 또한, 여기서 페닐보론산 2.28g, 탄산나트륨 2.02g, Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 0.082g, 물 5mL, 아세토니트릴 10mL을 플라스크에 넣고, 마이크로파(2.45GHz 100W)를 다시 60분간 조사함으로써 가열하였다. 그 후 이 용액에 물을 첨가하여 디클로로메탄으로 추출하였다. 얻어진 추출액을 포화탄산나트륨 수용액, 물, 이어서 포화 식염수로

세정하고, 황산마그네슘으로 건조시켰다. 건조한 후의 용액을 여과하였다. 이 용액의 용매를 증류하여 제거한 후, 얻어진 잔류물을, 디클로로메탄:초산 에틸=9:1(체적비)을 전개용매로 하는 실리카겔 컬럼 크래마토그래피로 정제하고, 목적으로 하는 피리미딘 유도체 Hmppm을 얻었다(주황색 유상 물질, 수율 46%). 또한, 마이크로파의 조사는 마이크로파 합성장치(CEM사제 Discover)를 사용하였다. 이하에 단계 1의 합성 스킴 b-1을 나타낸다.

[0545] [합성 스킴 b-1]

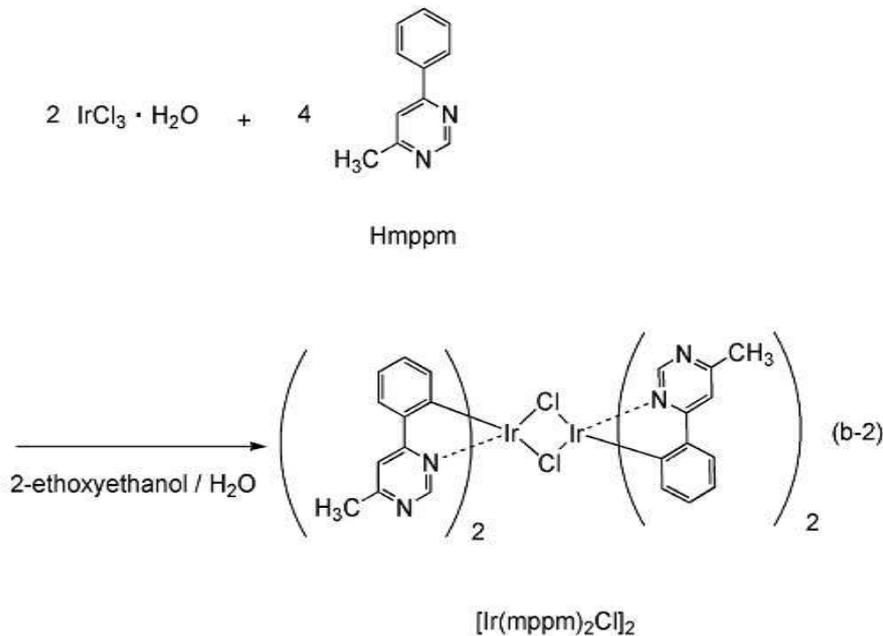


[0546]

[0547] <단계 2: 디- $\mu$ -클로로-비스[비스(6-메틸-4-페닐피리미디나토)이리듐(III)](약칭:  $[\text{Ir}(\text{mppm})_2\text{Cl}]_2$ )의 합성>

[0548] 다음에, 2-에톡시 에탄올 15mL와 물 5mL, 상기 단계 1에 의하여 얻은 Hmppm 1.51g, 염화이리듐 수화물 ( $\text{IrCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ) 1.26g를, 환류관이 장착된 가지형 플라스크에 넣고, 가지형 플라스크 내를 아르곤 치환하였다. 이후, 1시간 동안 마이크로파(2.45GHz, 100W)를 조사하여 반응시켰다. 용매를 증류하여 제거한 후, 얻어지는 잔류물을 에탄올로 세정하고 여과함으로써 복핵 착체  $[\text{Ir}(\text{mppm})_2\text{Cl}]_2$ 를 얻었다(암녹색 분말, 수율 77%). 이하에 단계 2의 합성 스킴 b-2를 나타낸다.

[0549] [합성 스킴 b-2]



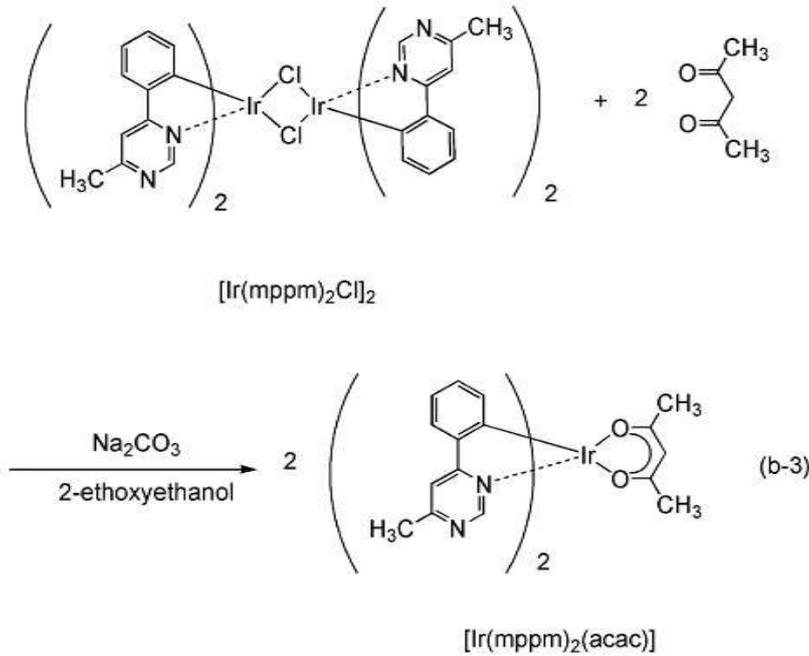
[0550]

[0551] <단계 3: (아세틸아세토나토)비스(6-메틸-4-페닐피리미디나토)이리듐(III)](약칭:  $[\text{Ir}(\text{mppm})_2(\text{acac})]$ )의 합성>

[0552] 또한, 2-에톡시에탄올 40mL, 상기 단계 2에서 얻은 복핵 착체  $[\text{Ir}(\text{mppm})_2\text{Cl}]_2$  1.84g, 아세틸아세톤 0.48g, 탄산 나트륨 1.73g를, 환류관이 장착된 가지형 플라스크에 넣고, 가지형 플라스크 내를 아르곤 치환하였다. 그 후, 마이크로파(2.45GHz 120W)를 60분 동안 조사하여 반응시켰다. 용매를 증류 제거하여 얻어진 잔류물을 디클로로메탄에 용해하여 여과하고, 불용물을 제거하였다. 얻어진 여과액을 물, 다음에 포화 식염수로 세정하고, 황산 마그네슘을 사용하여 건조시켰다. 건조한 후의 용액을 여과하였다. 이 용액의 용매를 증류하여 제거한 후, 얻어진 잔류물을, 디클로로메탄:초산 에틸=4:1(체적비)을 전개 용액으로 하는 실리카겔 컬럼 크래마토그래피로 정제하였다. 그 후, 디클로로 메탄과 헥산의 혼합 용매로 재결정화함으로써, 목적물을 황색 분말로서 얻었다(수

을 22%). 이하에 단계 3의 합성 스킴 b-3을 나타낸다.

[0553] [합성 스킴 b-3]



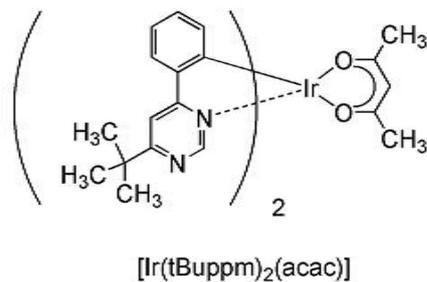
[0554]

[0555] 상기 단계 3에서 얻어진 황색 분말의 핵자기 공명 분광법(<sup>1</sup>H-NMR)에 의한 분석 결과를 하기에 나타내었다. 이 결과로부터 본 합성예에서 [Ir(mppm)<sub>2</sub>(acac)]가 얻어진 것이 확인되었다.

[0556] <sup>1</sup>H NMR. δ (CDCl<sub>3</sub>): 1.78(s, 6H), 2.81(s, 6H), 5.24(s, 1H), 6.37(d, 2H), 6.77(t, 2H), 6.85(t, 2H), 7.61-7.63(m, 4H), 8.97(s, 2H).

[0557] (참고예 3)

[0558] 상기 실시예 6에서 사용한 (아세틸아세토나토)비스(6-tert-부틸-4-페닐피리미디나토)이리듐(III)(약칭: [Ir(tBuppm)<sub>2</sub>(acac)])의 합성 방법에 대하여 구체적으로 설명한다. [Ir(tBuppm)<sub>2</sub>(acac)]의 구조를 이하에 나타낸다.

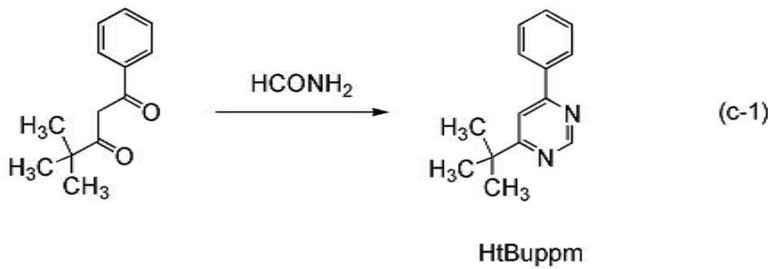


[0559]

[0560] <단계 1; 4-tert-부틸-6-페닐피리미딘(약칭: HtBuppm)의 합성>

[0561] 우선, 4, 4-디메틸-1-페닐펜탄-1, 3-디온 22.5g과 폼아미드 50g를, 환류관이 장착된 가지형 플라스크에 넣고 내부를 질소 치환시켰다. 이 반응 용기를 가열함으로써 반응 용액을 5시간 환류시켰다. 그 후, 이 용액을 수산화나트륨 수용액에 붓고 디클로로메탄으로 유기층을 추출하였다. 얻어진 유기층을 물, 포화 식염수로 세정하고 황산마그네슘으로 건조시켰다. 건조한 후의 용액을 여과하였다. 이 용액의 용매를 증류하여 제거시킨 후, 얻어진 잔류물을, 헥산:초산에틸=10:1(체적비)을 전개 용매로 하는 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 피리미딘 유도체 HtBuppm을 얻었다(무색 유상 물질, 수율 14%). 이하에 단계 1의 합성 스킴 c-1을 나타낸다.

[0562] [합성 스킴 c-1]

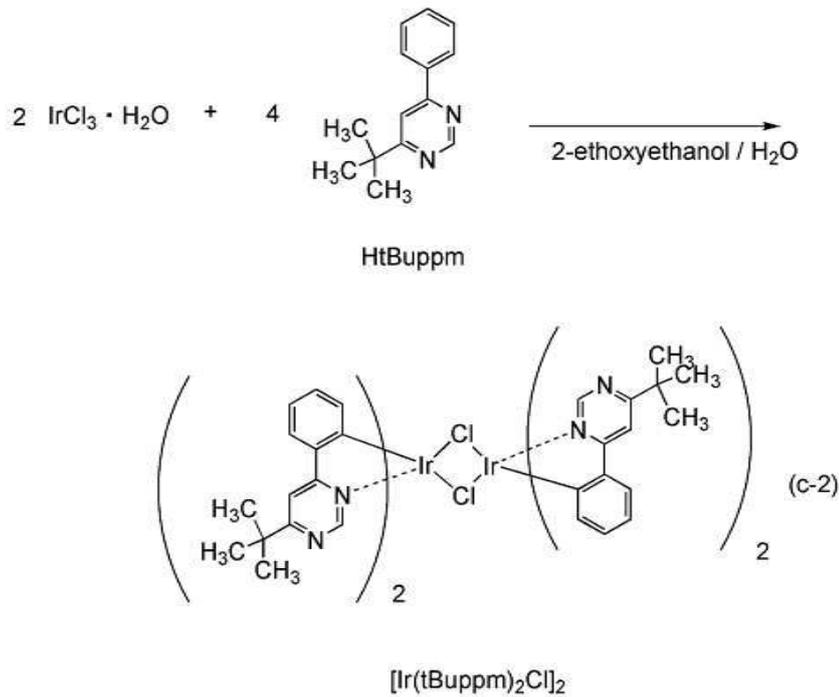


[0563]

[0564] <단계 2; 디- $\mu$ -클로로-비스[비스(6-*tert*-부틸-4-페닐피리미디나토)이리듐(III)](약칭:  $[\text{Ir}(\text{tBuppm})_2\text{Cl}]_2$ )의 합성>

[0565] 다음에, 2-에톡시에탄올 15mL와 물 5mL, 상기 단계 1에서 얻은 HtBuppm 1.49g, 염화이리듐 수화물( $\text{IrCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ) 1.04g를, 환류관이 장착된 가지형 플라스크에 넣고 플라스크 내부를 아르곤 치환시켰다. 그 후, 1시간 동안 마이크로파(2.45GHz, 100W)를 조사하여 반응시켰다. 용매를 증류하여 제거시킨 후, 얻어진 잔류물을 에탄올로 흡인 여과, 세정하여 복합착체 $[\text{Ir}(\text{tBuppm})_2\text{Cl}]_2$ 를 얻었다(황색 분말, 수율 73%). 이하에 단계 2의 합성 스킴 c-2를 나타낸다.

[0566] [합성 스킴 c-2]

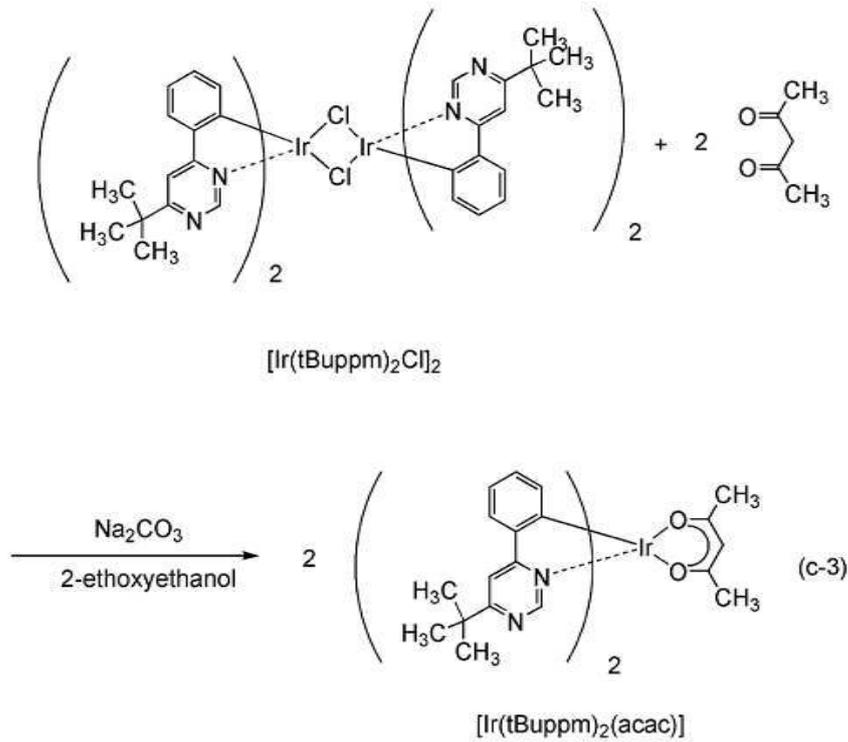


[0567]

[0568] <단계 3; (아세틸아세토나토)비스(6-*tert*-부틸-4-페닐피리미디나토)이리듐(III)(약칭:  $[\text{Ir}(\text{tBuppm})_2(\text{acac})]$ )의 합성>

[0569] 또한, 2-에톡시에탄올 40mL, 상기 단계 2에서 얻은 복합착체 $[\text{Ir}(\text{tBuppm})_2\text{Cl}]_2$  1.61g, 아세틸아세톤 0.36g, 탄산나트륨 1.27g를, 환류관이 장착된 가지형 플라스크에 넣고 플라스크 내부를 아르곤 치환시켰다. 그 후, 마이크로파(2.45GHz 120W)를 60분 동안 조사하여 반응시켰다. 용매를 증류하여 제거시키고 얻어진 잔류물을 에탄올로 흡인 여과하고 물, 에탄올로 세정하였다. 이 고체를 디클로로메탄에 용해시키고, 셀라이트(와코순약공업주식회사, 카탈로그 번호: 531-16855), 알루미늄, 셀라이트의 차례로 적층한 여과 보조제를 통하여 여과하였다. 용매를 증류하여 제거시켜 얻어진 고체를 디클로로메탄과 헥산의 혼합 용매로 재결정시킴으로써 목적물을 황색 분말로 얻었다(수율 68%). 이하에 단계 3의 합성 스킴 c-3을 나타낸다.

[0570] [합성 스킴 c-3]



[0571]

[0572] 상기 단계 3에서 얻어진 황색 분말의 핵자기 공명 분광법(<sup>1</sup>H-NMR)에 의한 분석 결과를 하기에 나타내었다. 이 결과로부터 본 합성예에서 [Ir(tBuppm)<sub>2</sub>(acac)]가 얻어진 것이 확인되었다.

[0573] <sup>1</sup>H NMR. δ (CDCl<sub>3</sub>): 1.50(s, 18H), 1.79(s, 6H), 5.26(s, 1H), 6.33(d, 2H), 6.77(t, 2H), 6.85(t, 2H), 7.70(d, 2H), 7.76(s, 2H), 9.02(s, 2H).

**부호의 설명**

- |                  |                |
|------------------|----------------|
| [0574] 100: 기관   | 101: 제 1 전극    |
| 102: EL층         | 103: 제 2 전극    |
| 111: 정공 주입층      | 112: 정공 수송층    |
| 113: 발광층         | 114: 전자 수송층    |
| 115: 전자 주입층      | 301: 제 1 전극    |
| 303: 제 2 전극      | 311: 제 1 발광 유닛 |
| 312: 제 2 발광 유닛   | 313: 전하 발생층    |
| 401: 소스 측 구동 회로  | 402: 화소부       |
| 403: 게이트 측 구동 회로 | 404: 봉지 기관     |
| 405: 절재          | 407: 공간        |
| 408: 배선          | 410: 소자 기관     |
| 411: 스위칭용 TFT    |                |
| 412: 전류 제어용 TFT  | 413: 제 1 전극    |

414: 절연물	416: 발광층
417: 제 2 전극	418: 발광 소자
423: n채널형 TFT	424: p채널형 TFT
501: 기관	502: 제 1 전극
503: 제 2 전극	504: EL층
505: 절연층	506: 격벽층
611: 하우징	612: 지지대
613: 표시부	614: 스피커부
615: 비디오 입력 단자	621: 본체
622: 하우징	623: 표시부
624: 키보드	625: 외부 접속 포트
626: 포인팅 디바이스	631: 본체
632: 하우징	633: 표시부
634: 음성 입력부	635: 음성 출력부
636: 조작키	637: 외부 접속 포트
638: 안테나	641: 본체
642: 표시부	643: 하우징
644: 외부 접속 포트	645: 리모트 컨트롤 수신부
646: 수상부	647: 배터리
648: 음성 입력부	649: 조작키
650: 접안부	701: 하우징
702: 액정층	703: 백 라이트
704: 하우징	705: 드라이버 IC
706: 단자	801: 하우징
802: 광원	901: 조명 장치
902: 텔레비전 장치	1100: 기관
1101: 제 1 전극	1103: 제 2 전극
1111: 정공 주입층	1112: 정공 수송층
1113: 발광층	1114a: 제 1 전자 수송층
1114b: 제 2 전자 수송층	1115: 전자 주입층
9033: 후크	9034: 스위치
9035: 전원 스위치	9036: 스위치
9037: 조작키	9038: 조작 스위치
9630: 하우징	9631: 표시부
9631a: 표시부	9631b: 표시부
9632a 영역	9632b: 영역

9633: 태양 전지

9634: 충방전 제어 회로

9635: 배터리

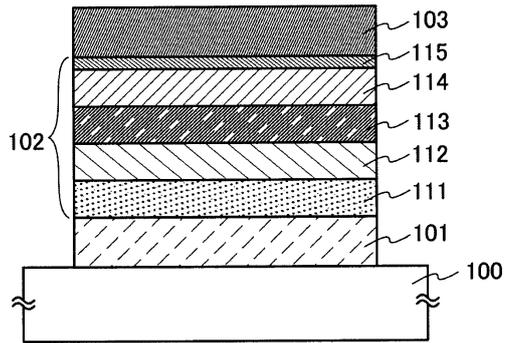
9636: DCDC 컨버터

9639: 버튼

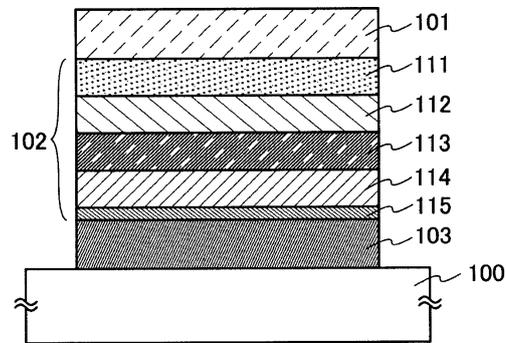
도면

도면1

(A)

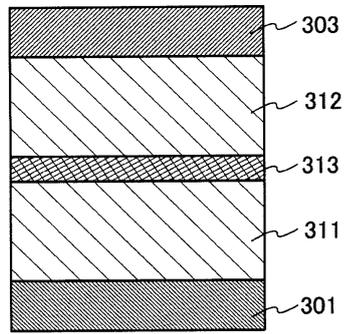


(B)

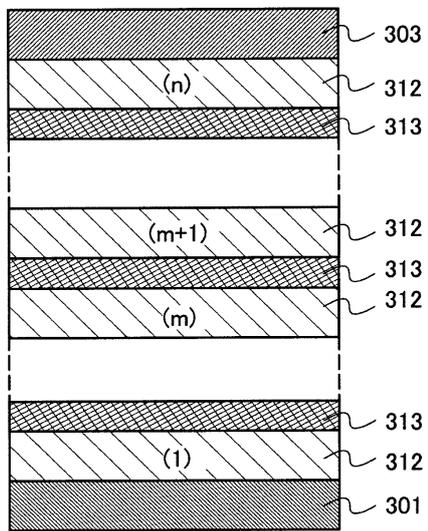


도면2

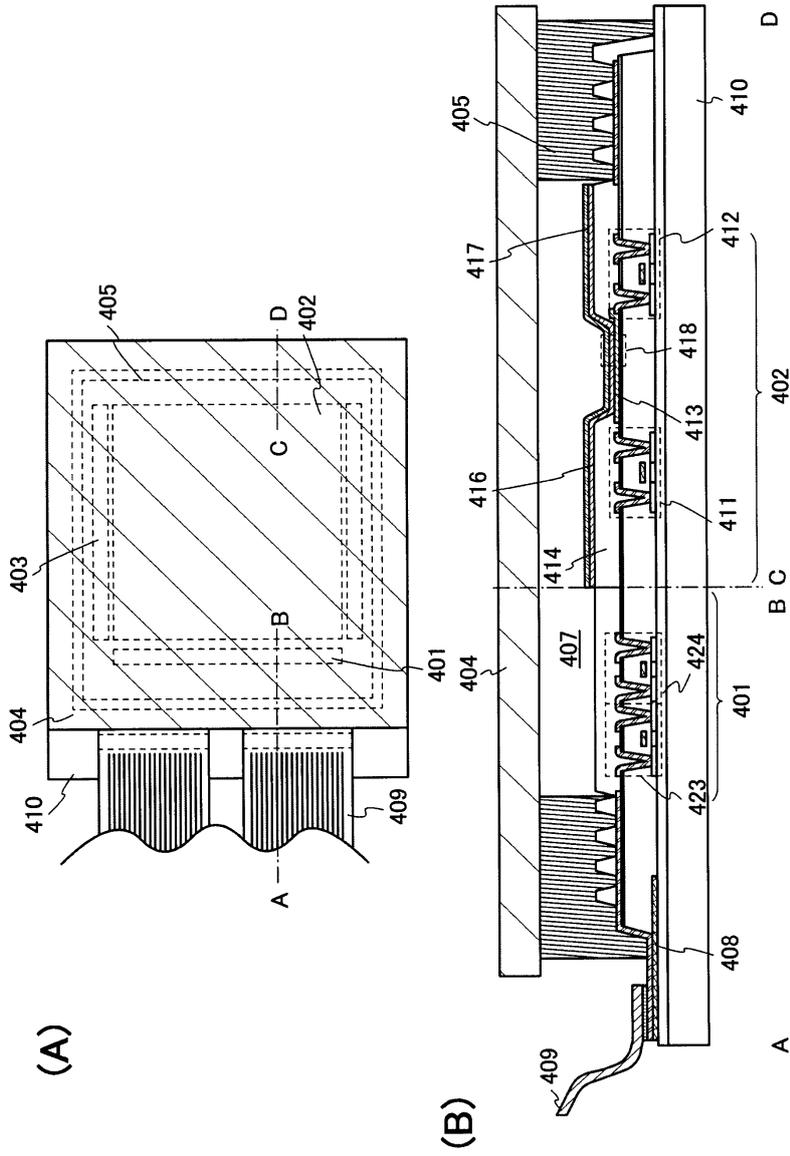
(A)



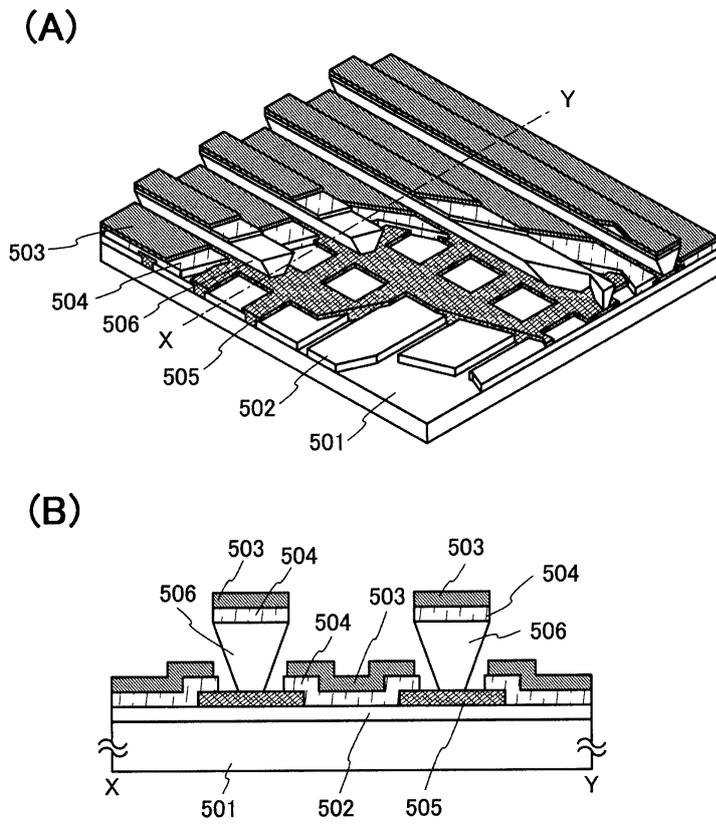
(B)



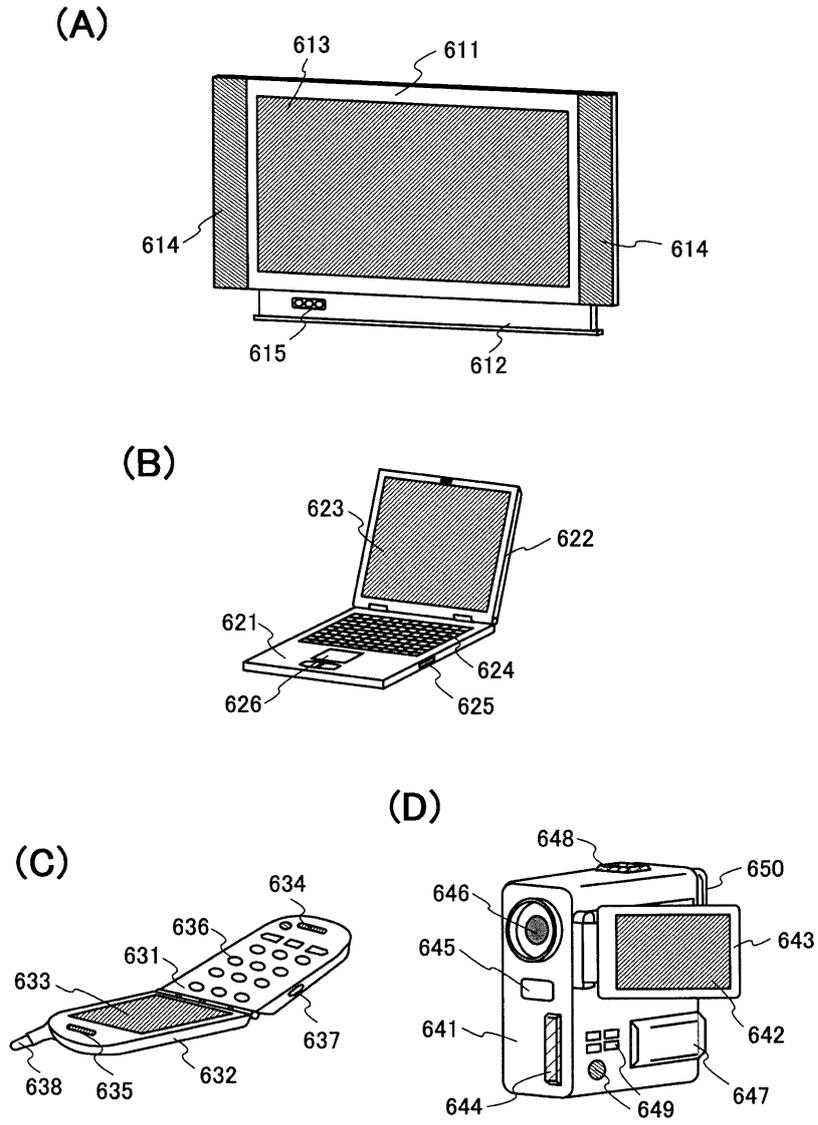
도면3



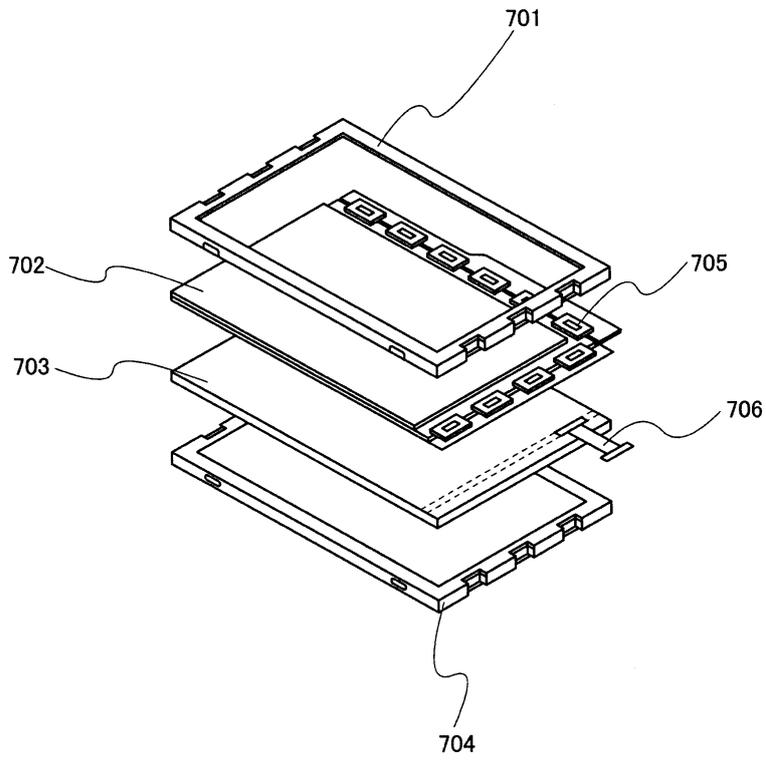
도면4



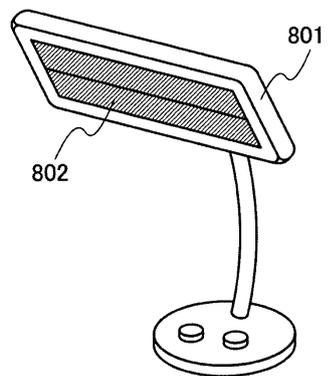
도면5



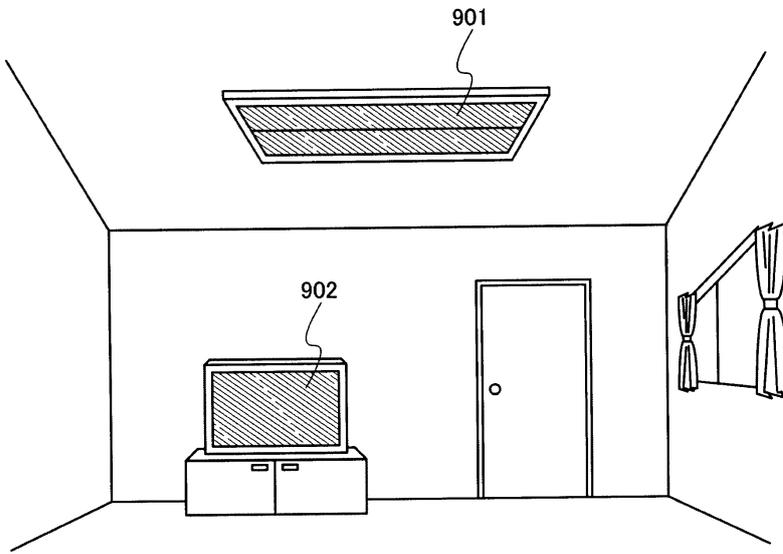
도면6



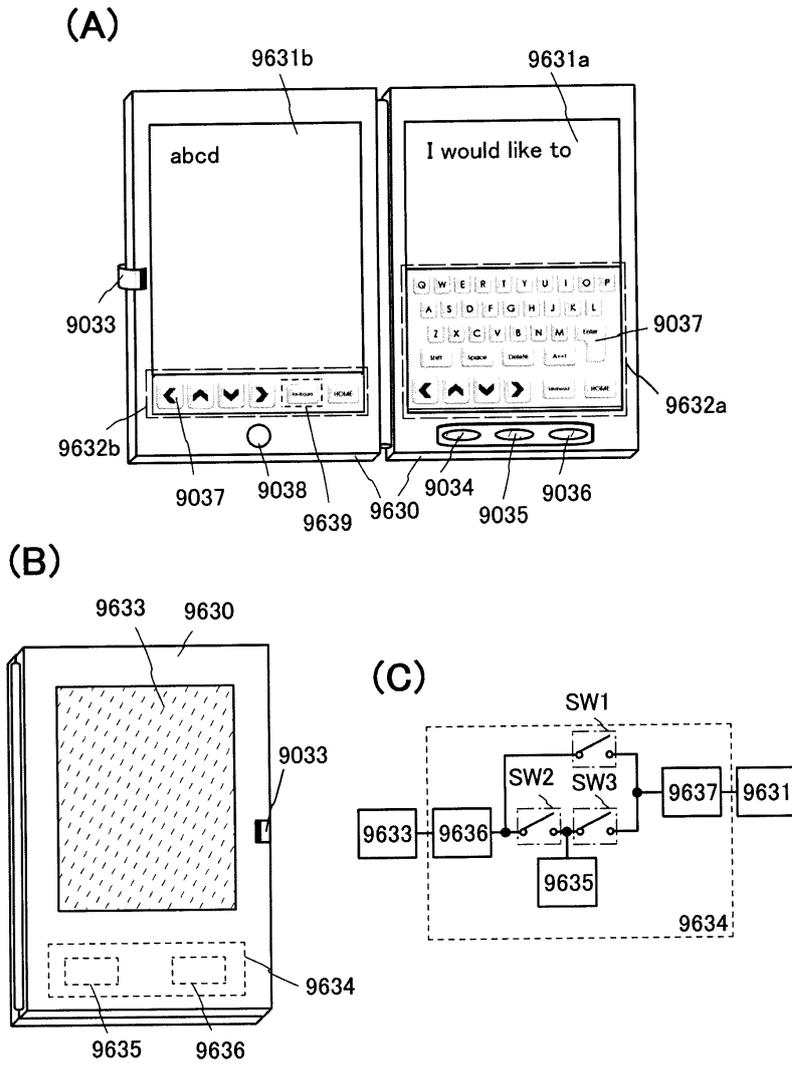
도면7



도면8

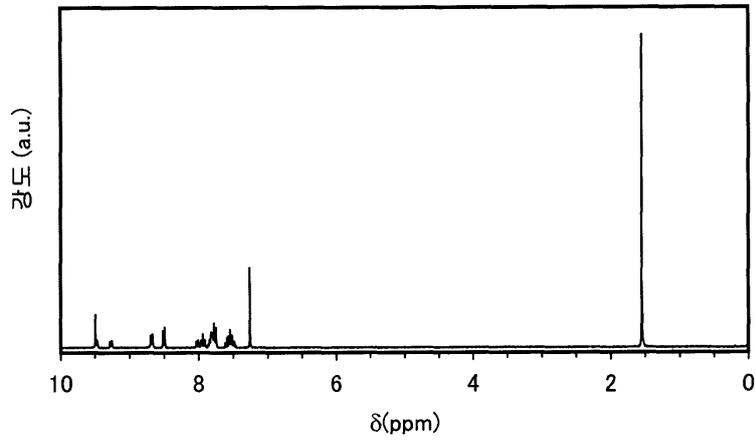


도면9

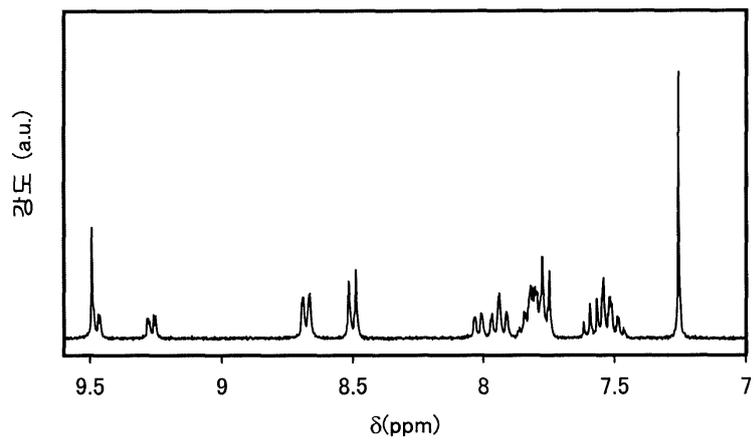


도면10

(A)

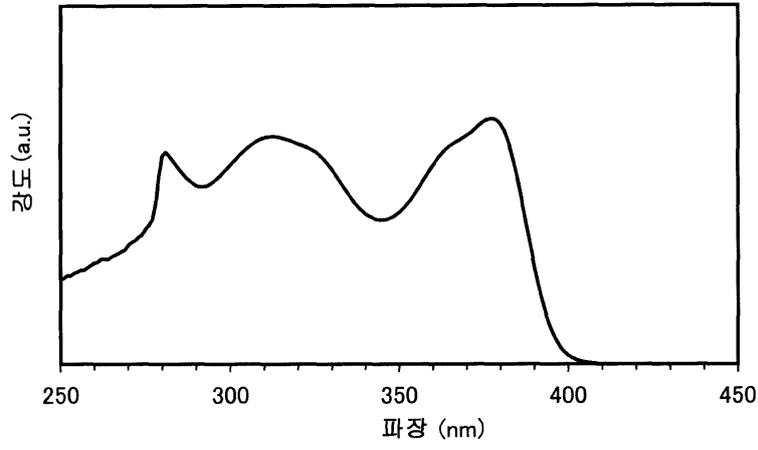


(B)

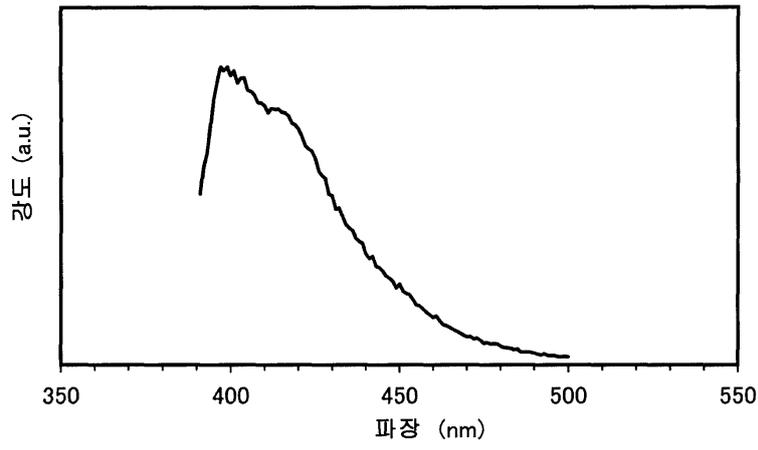


도면11

(A)

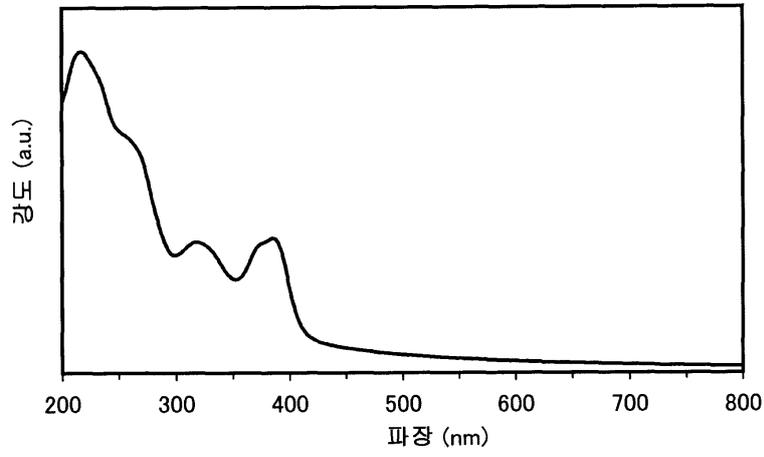


(B)

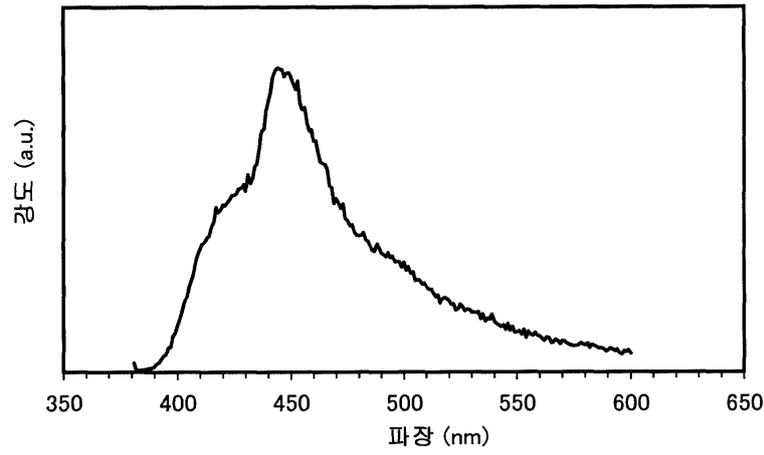


도면12

(A)

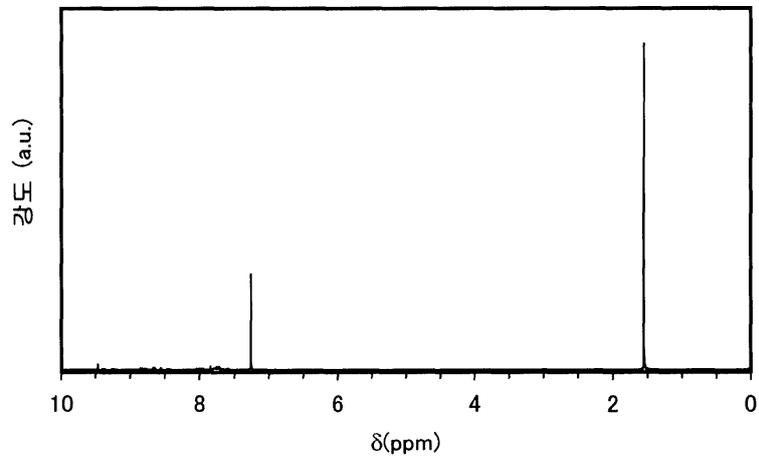


(B)

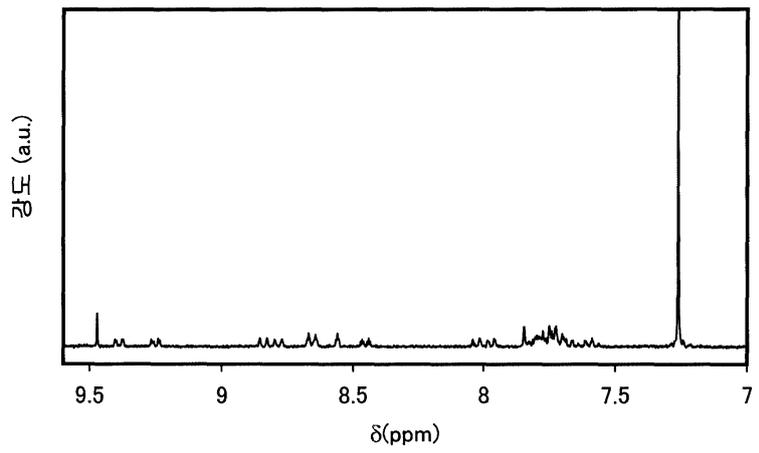


도면13

(A)

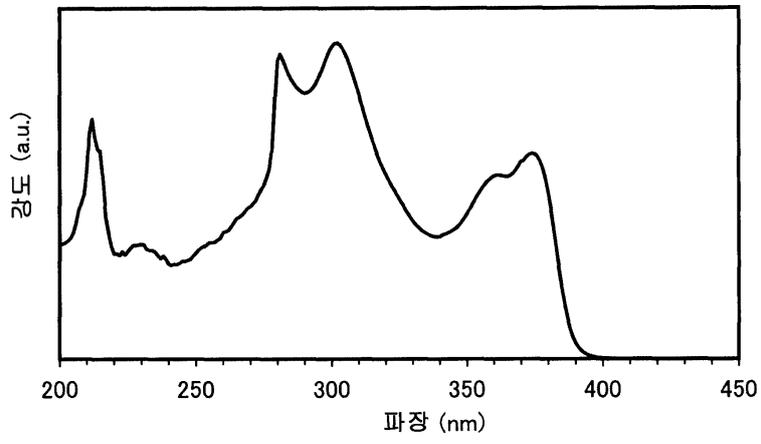


(B)

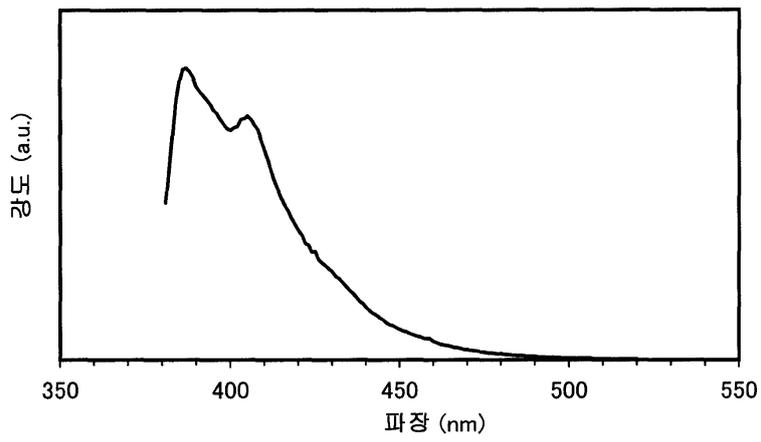


도면14

(A)

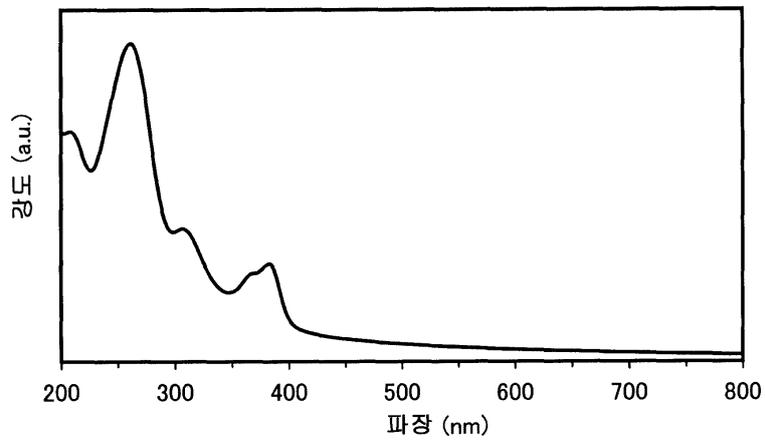


(B)

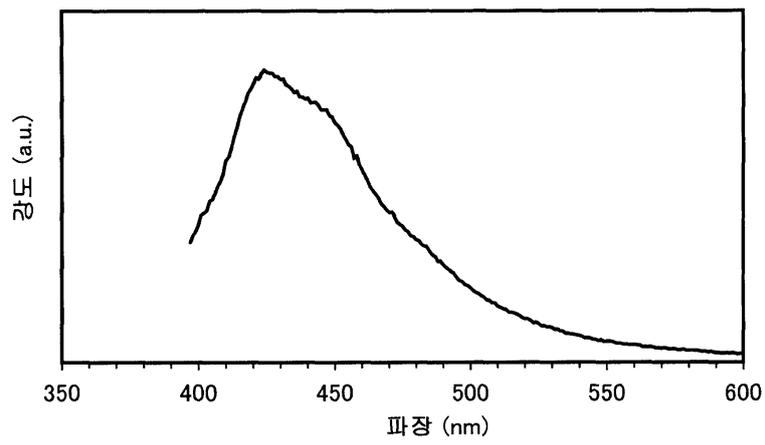


도면15

(A)

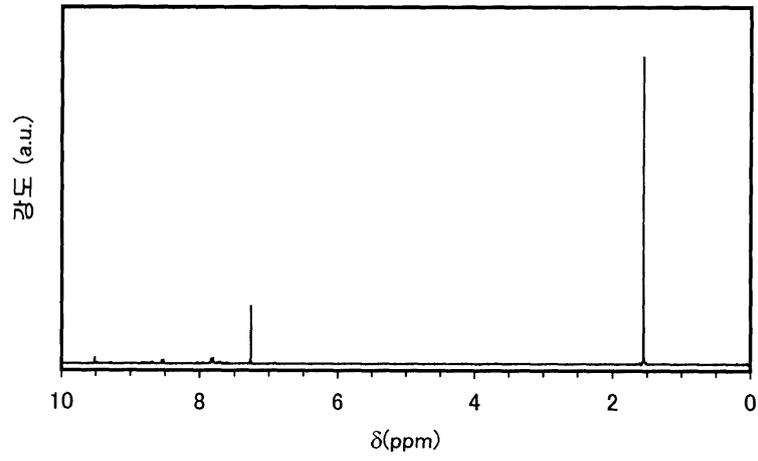


(B)

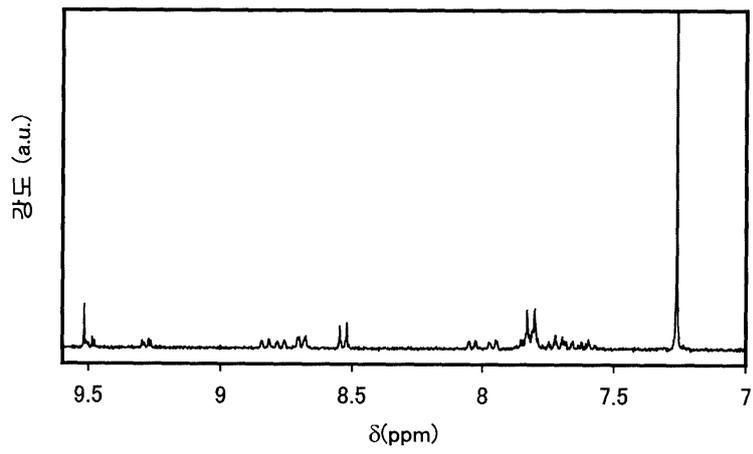


도면16

(A)

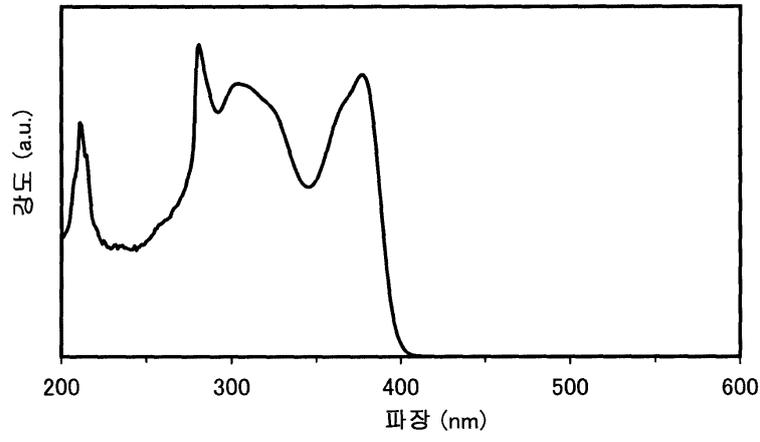


(B)

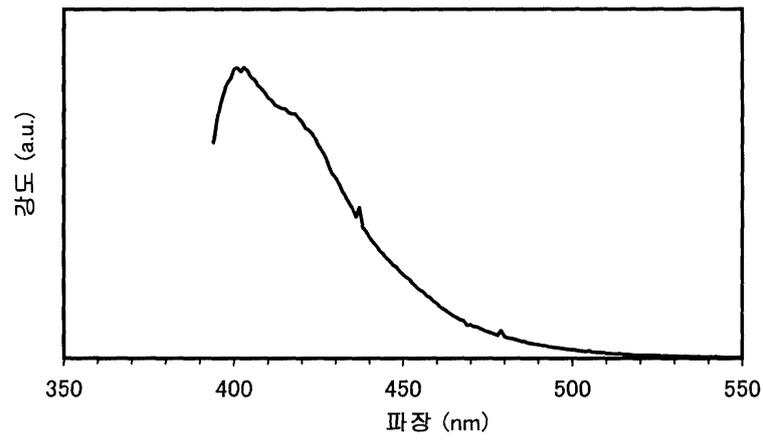


도면17

(A)

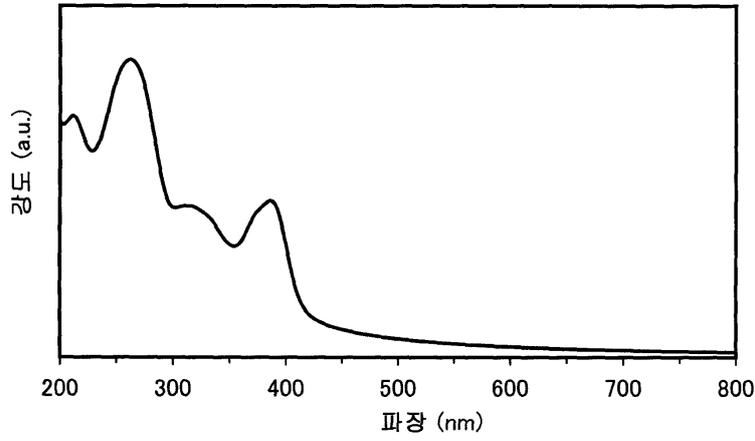


(B)

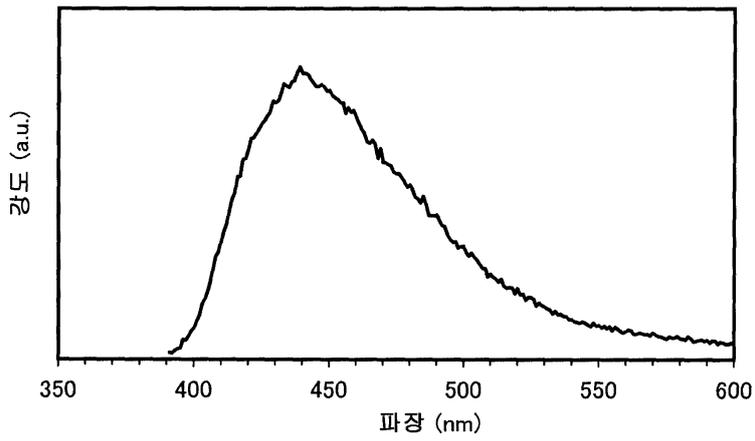


도면18

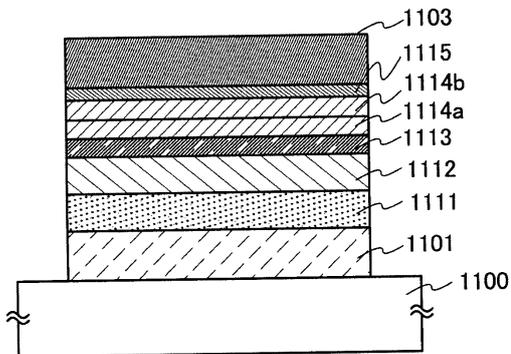
(A)



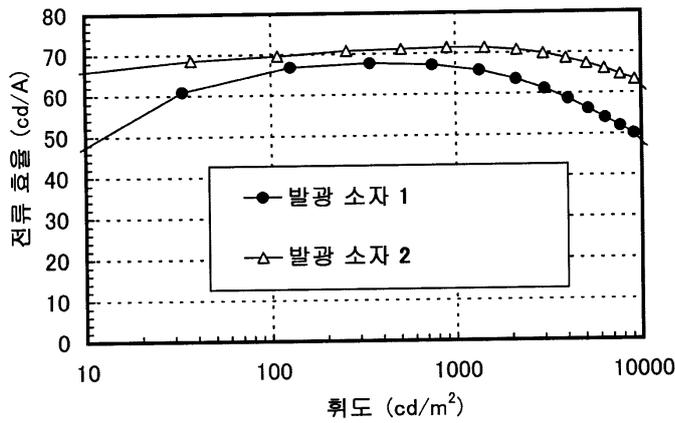
(B)



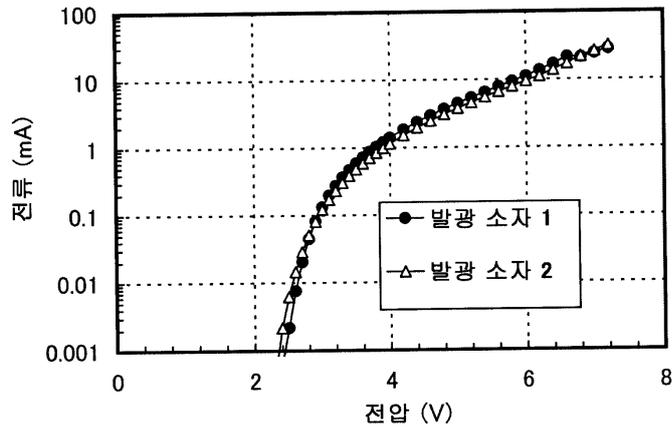
도면19



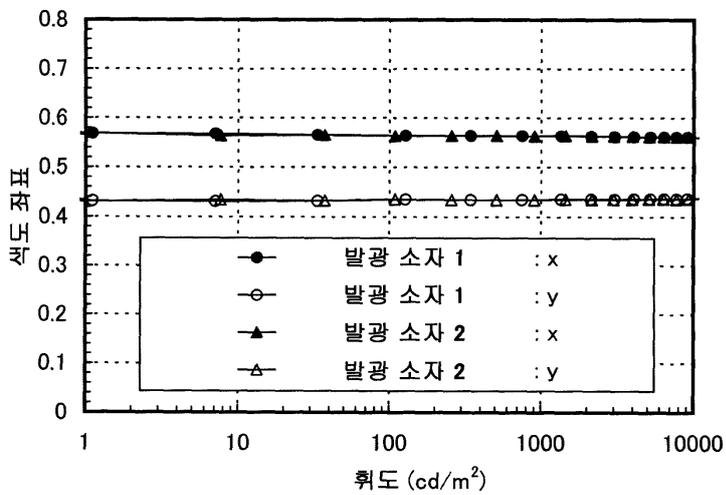
도면20



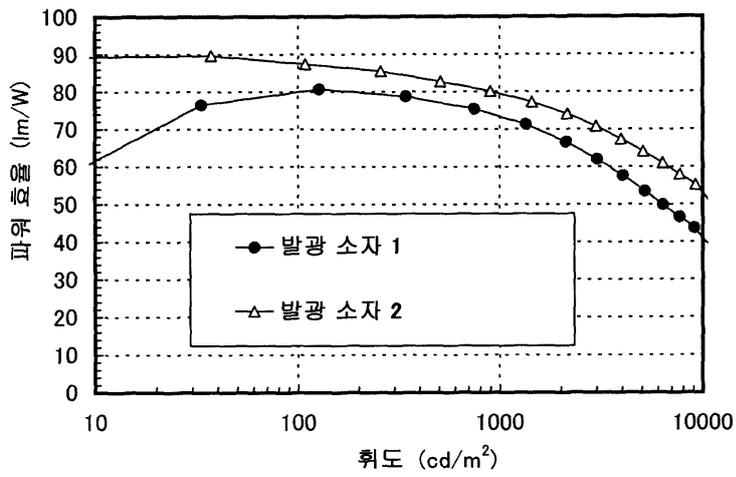
도면21



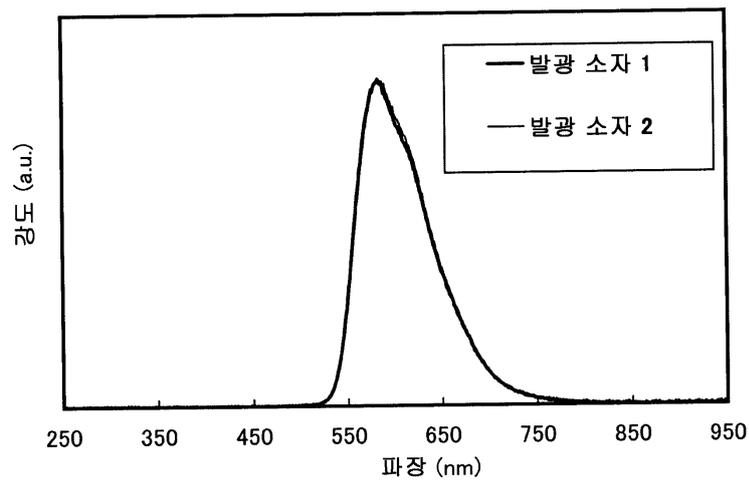
도면22



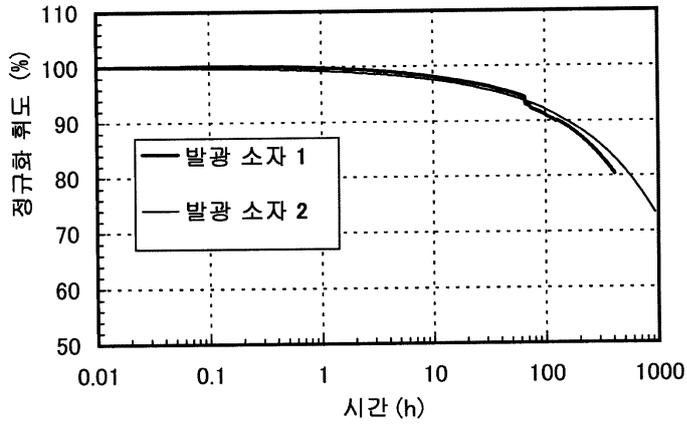
도면23



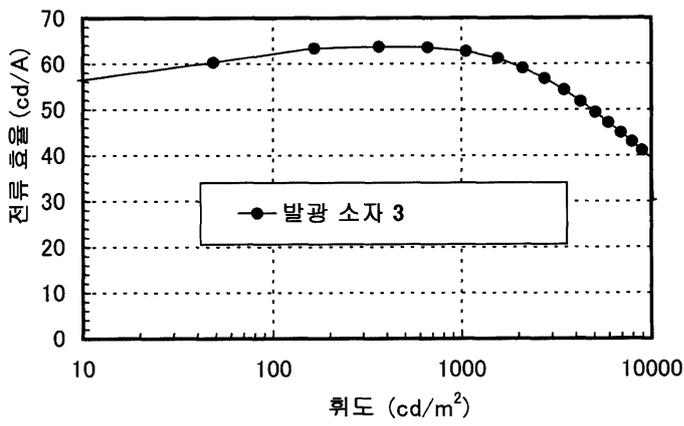
도면24



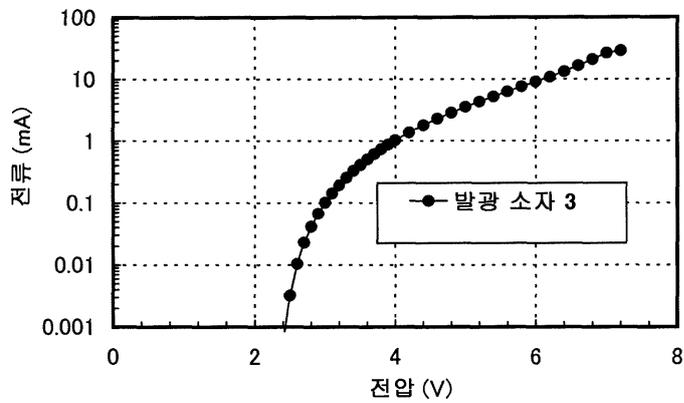
도면25



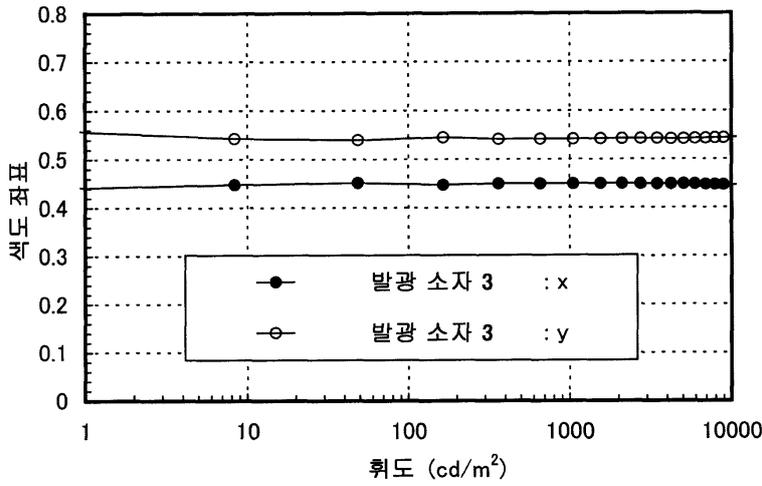
도면26



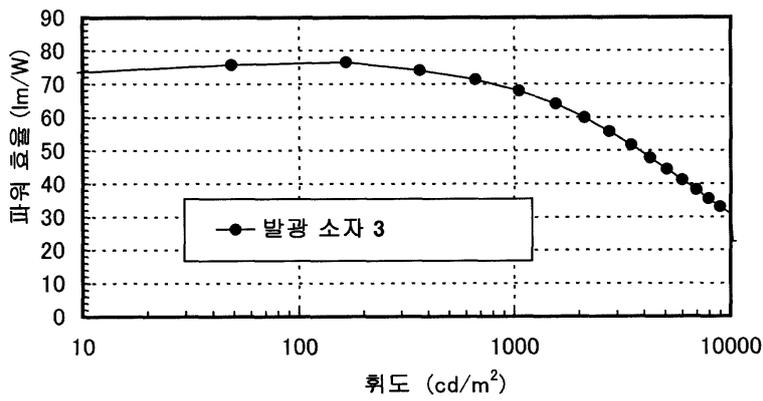
도면27



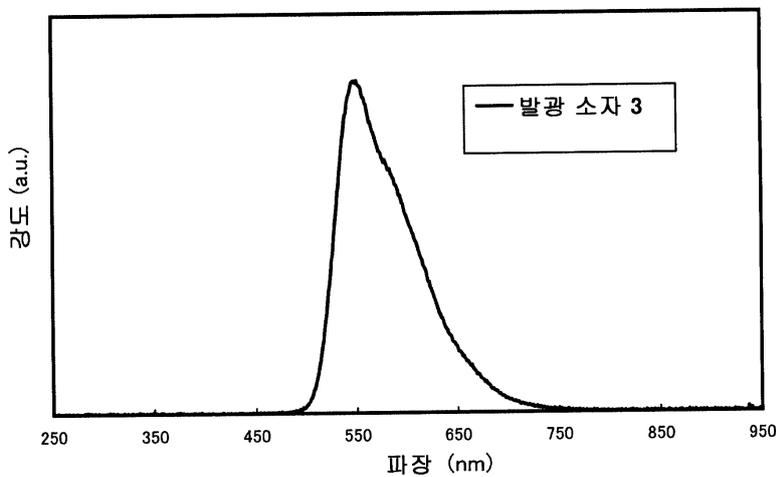
도면28



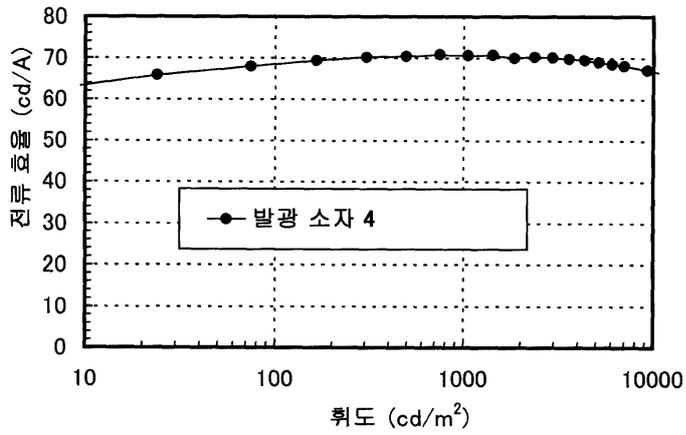
도면29



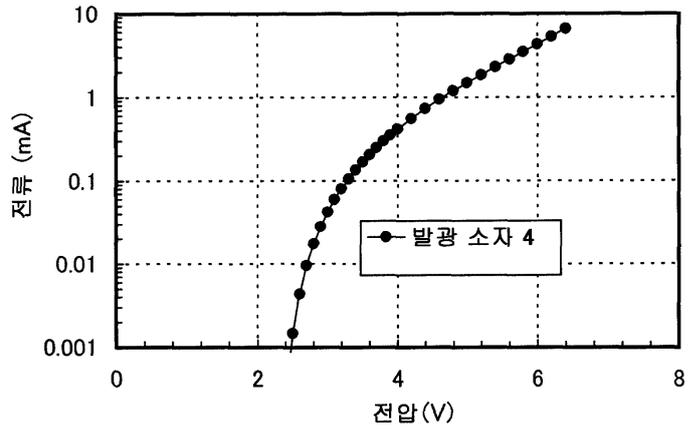
도면30



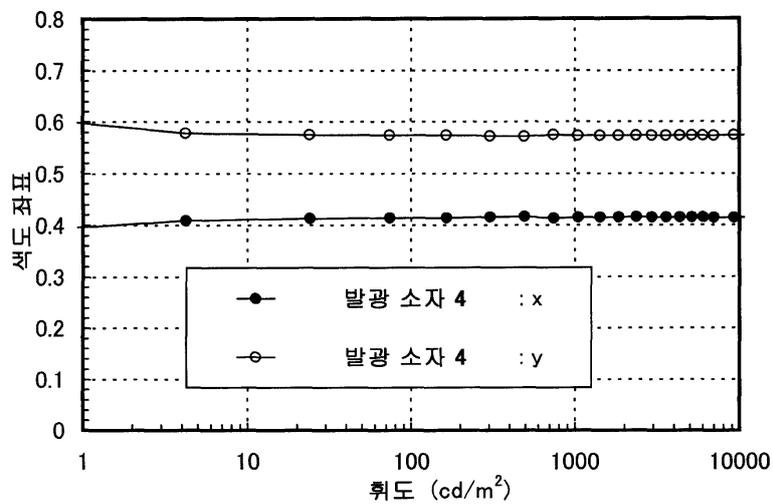
도면31



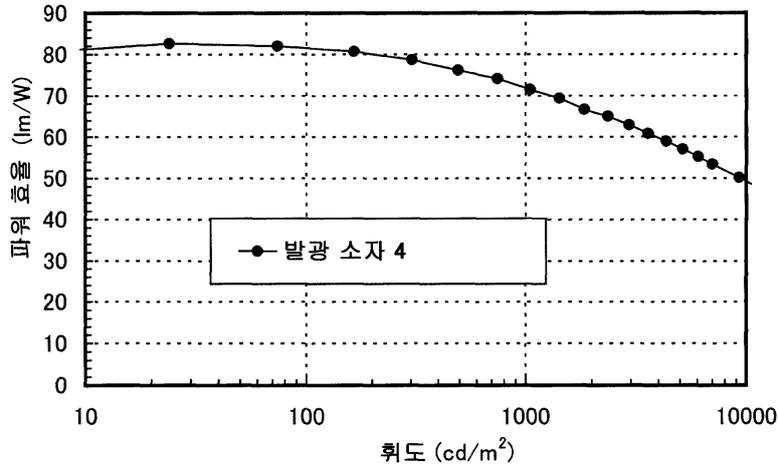
도면32



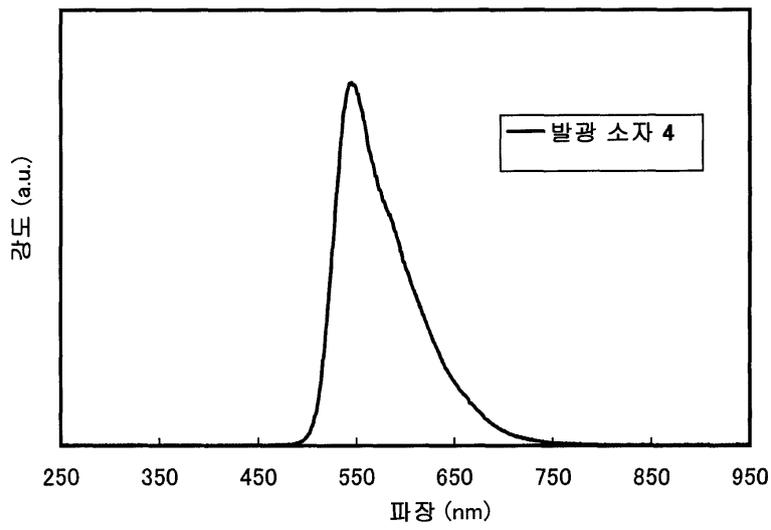
도면33



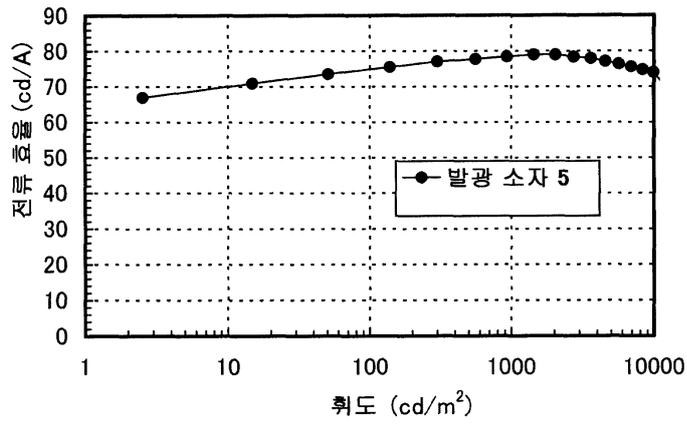
도면34



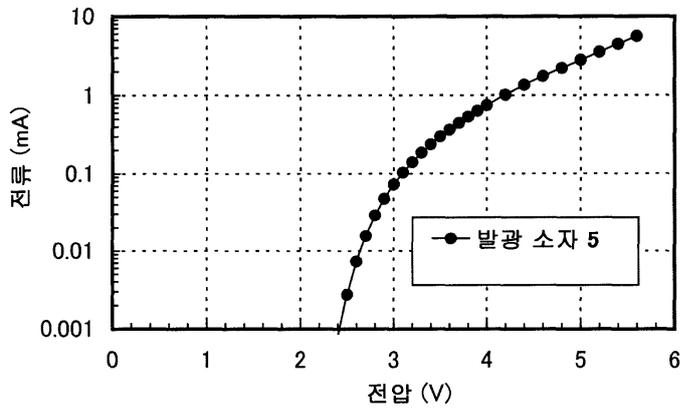
도면35



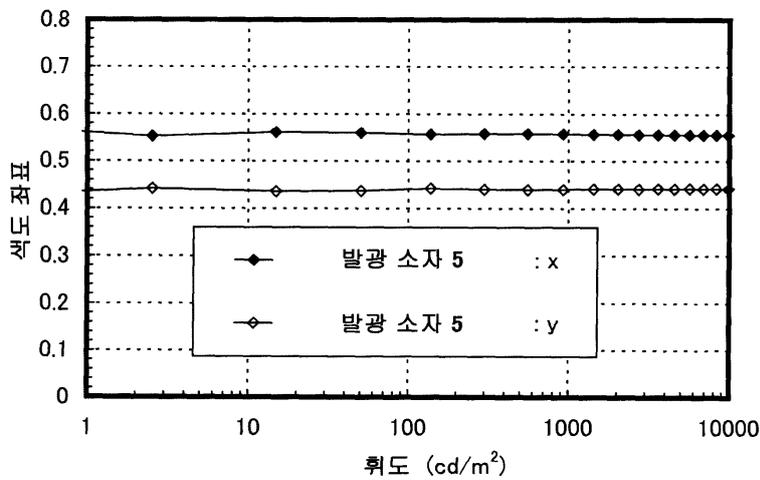
도면36



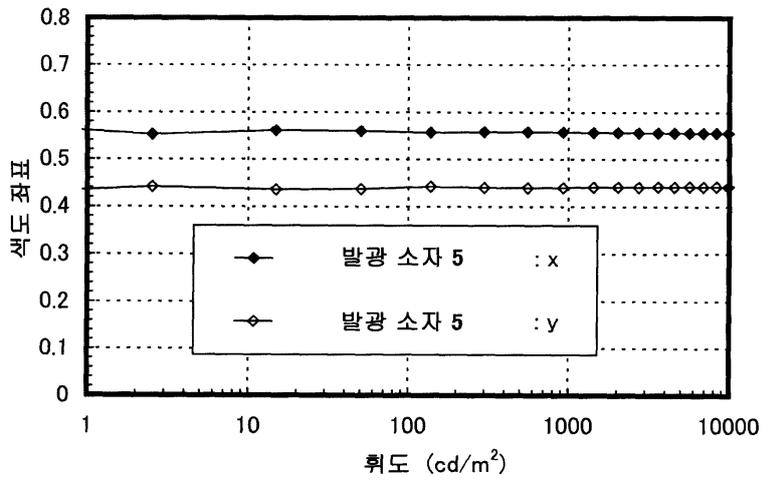
도면37



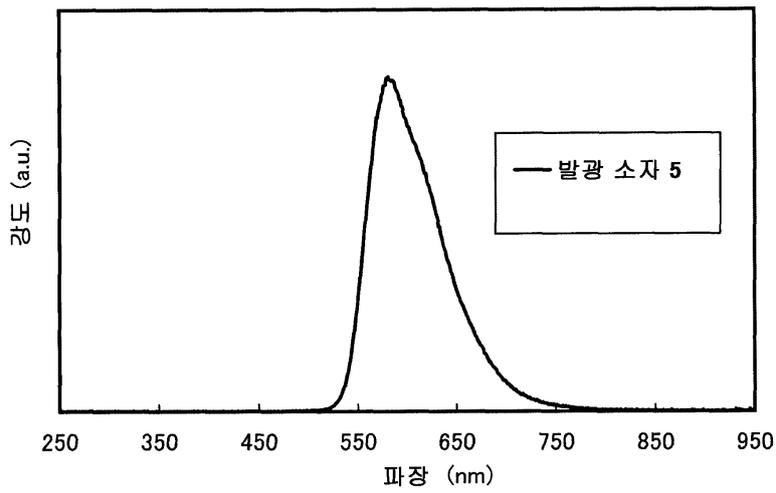
도면38



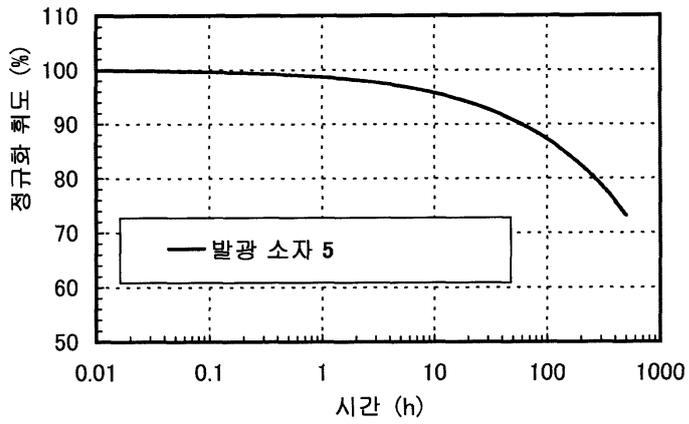
도면39



도면40

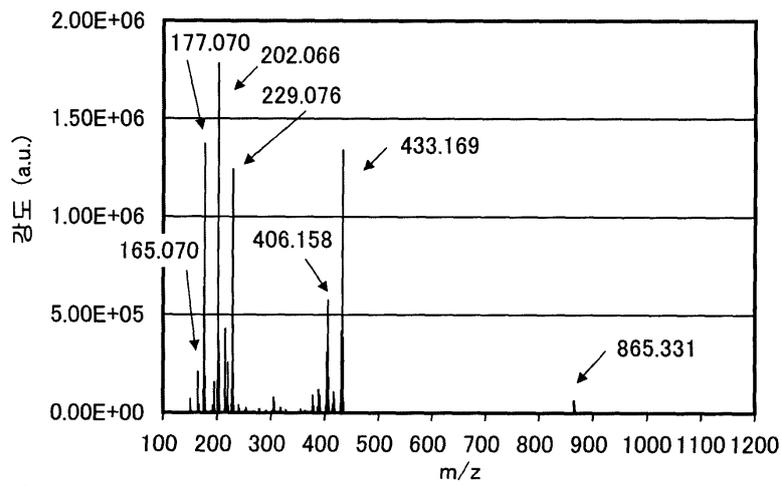


도면41

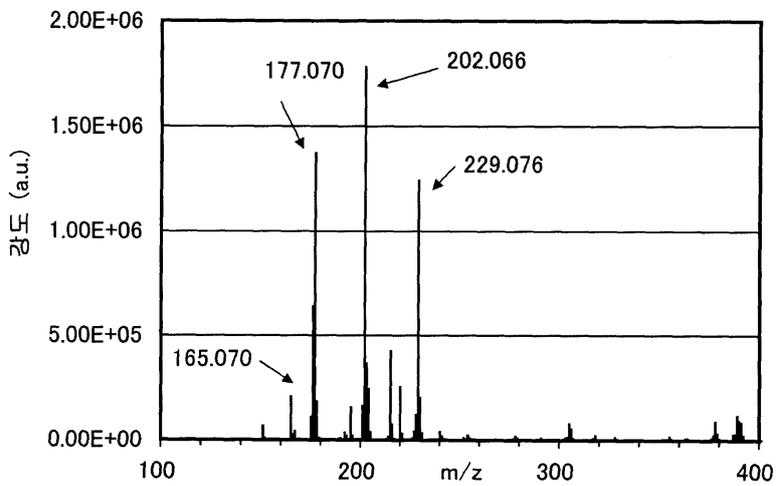


도면42

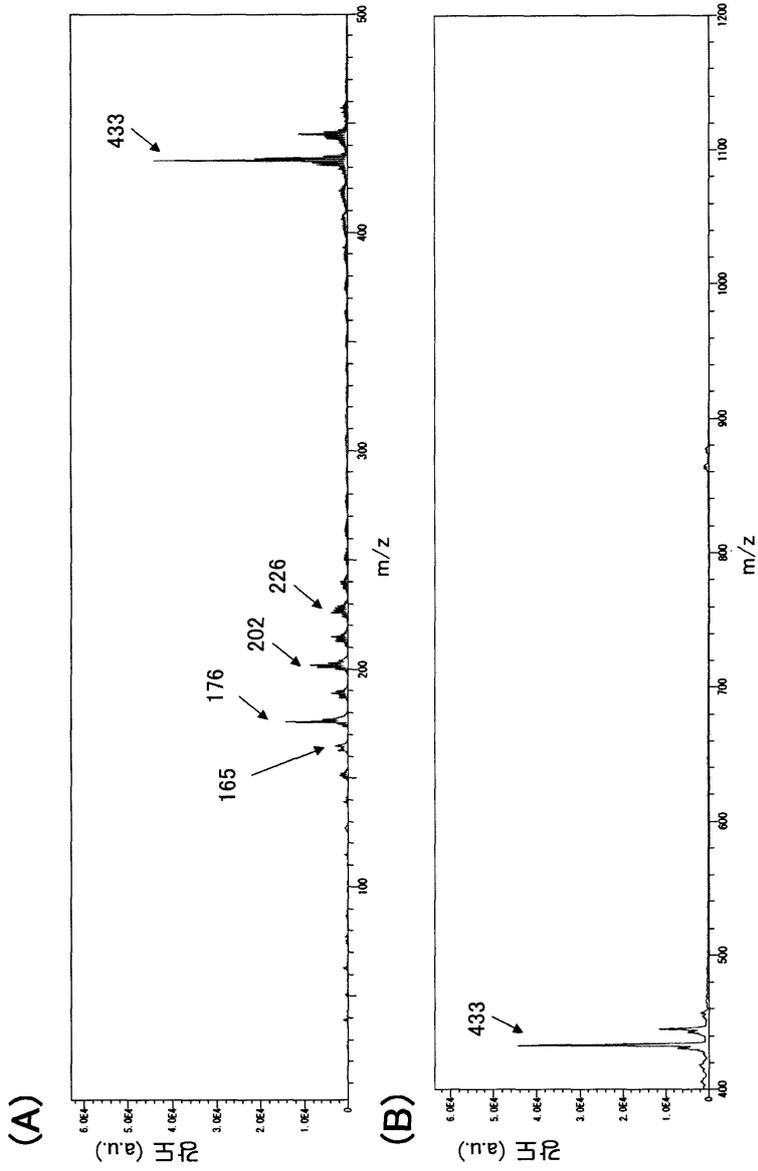
(A)



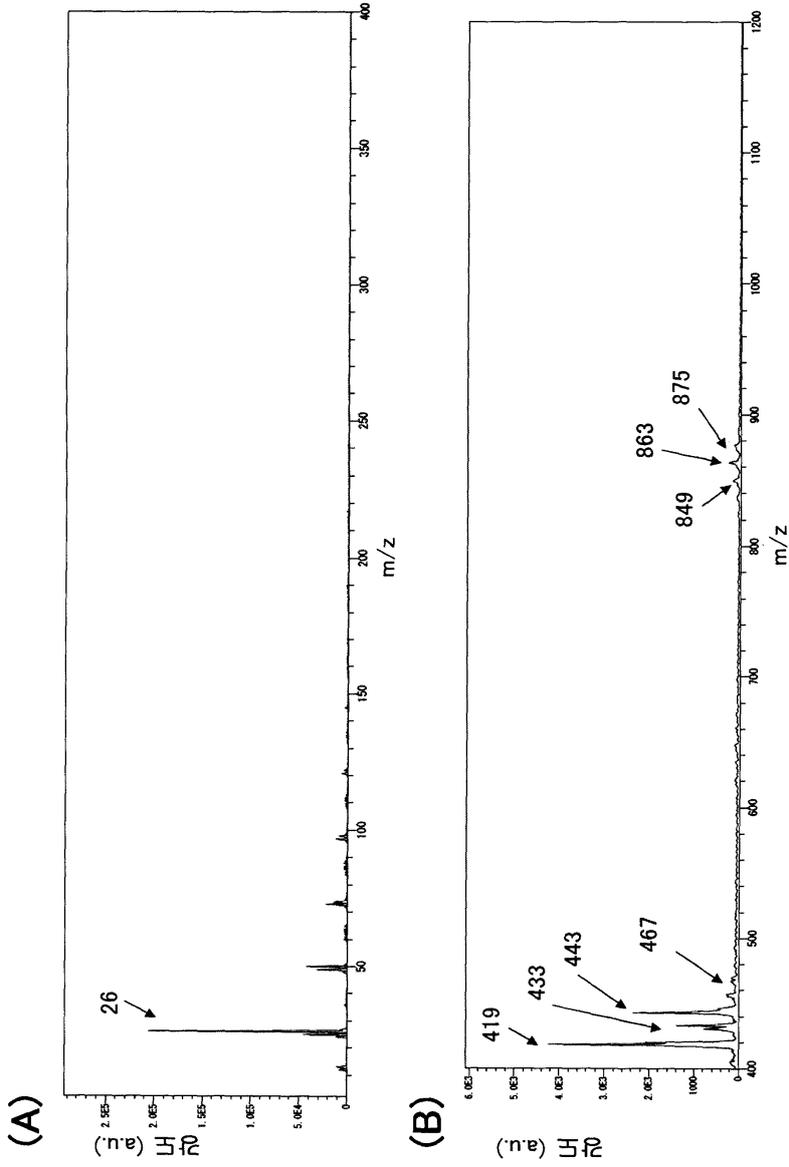
(B)



도면43

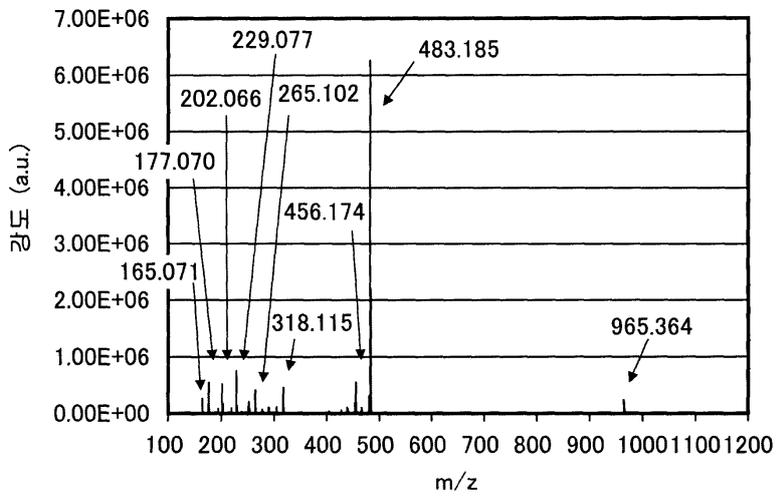


도면44

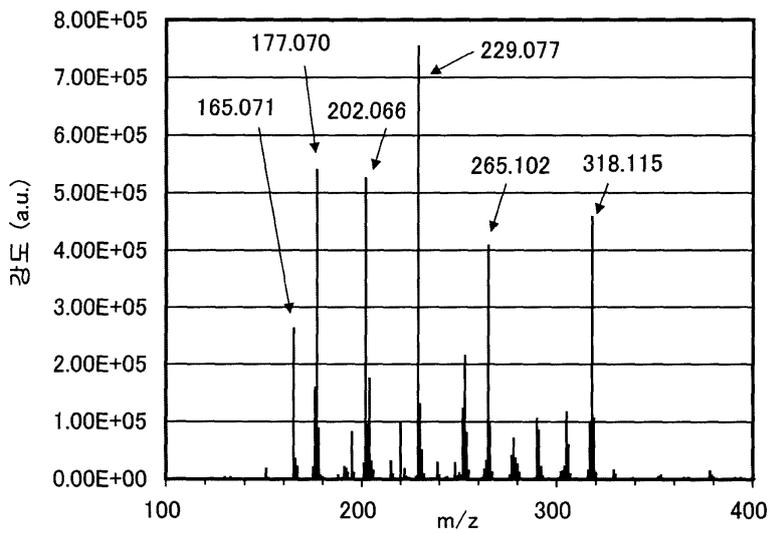


도면45

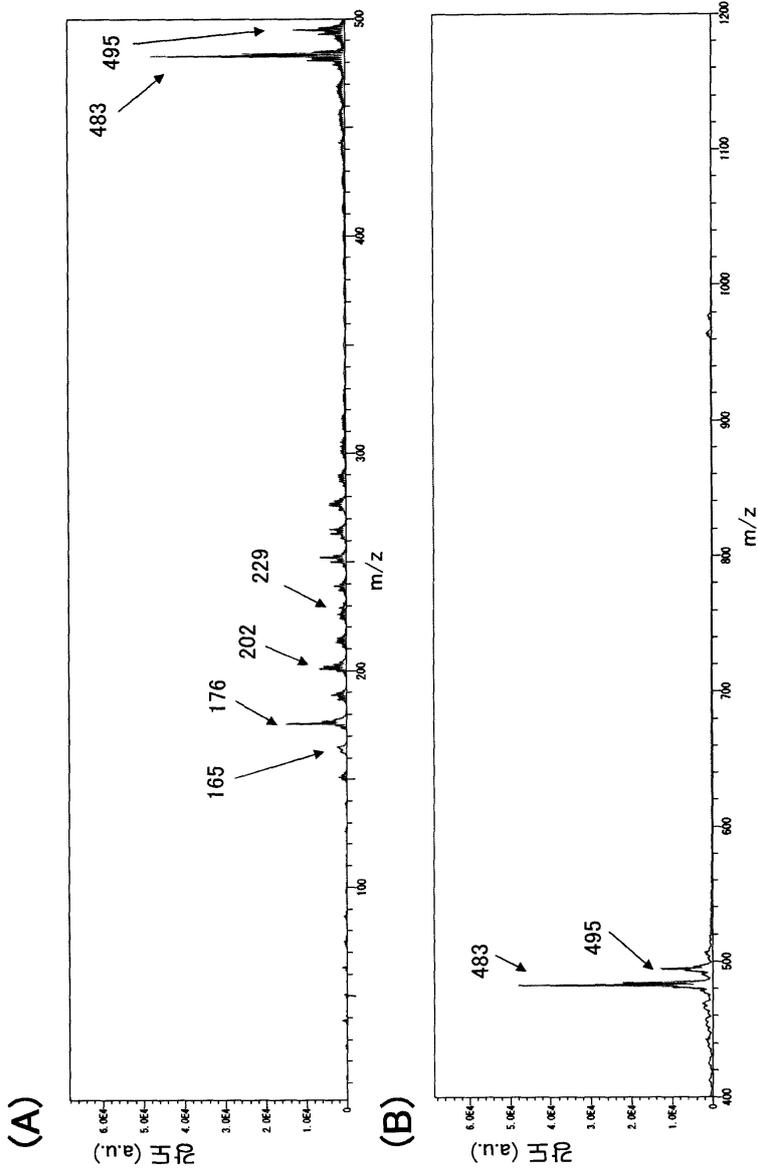
(A)



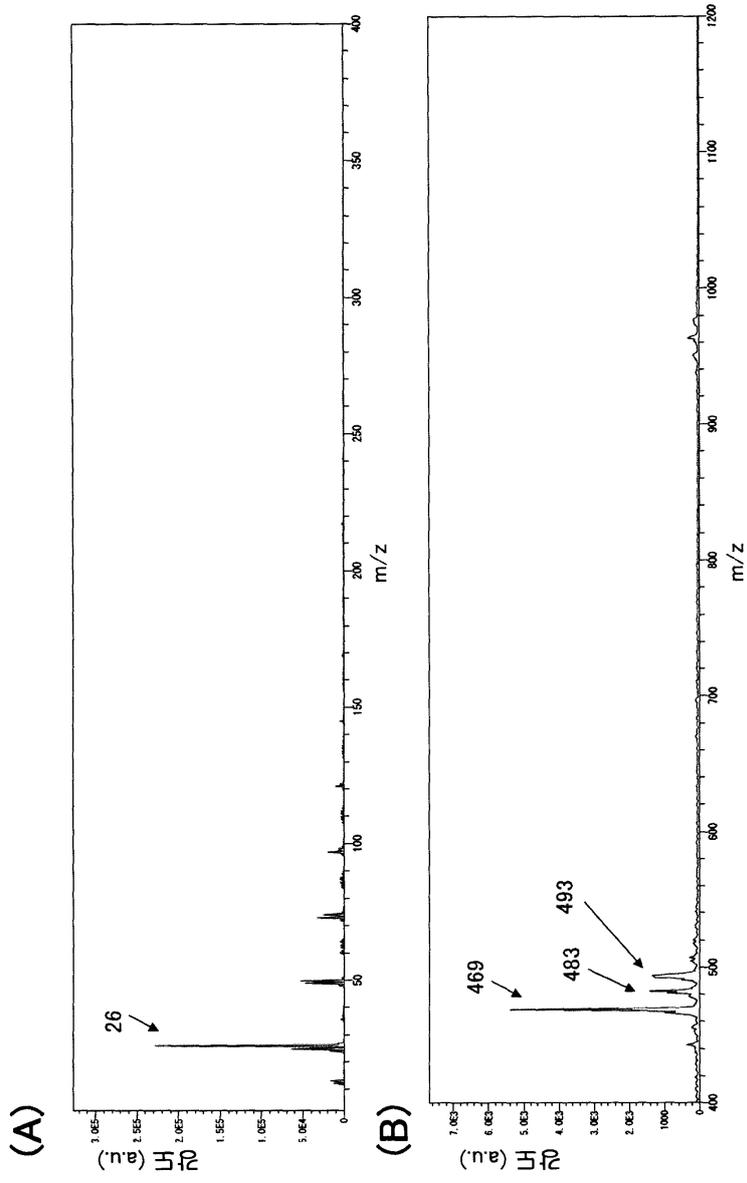
(B)



도면46

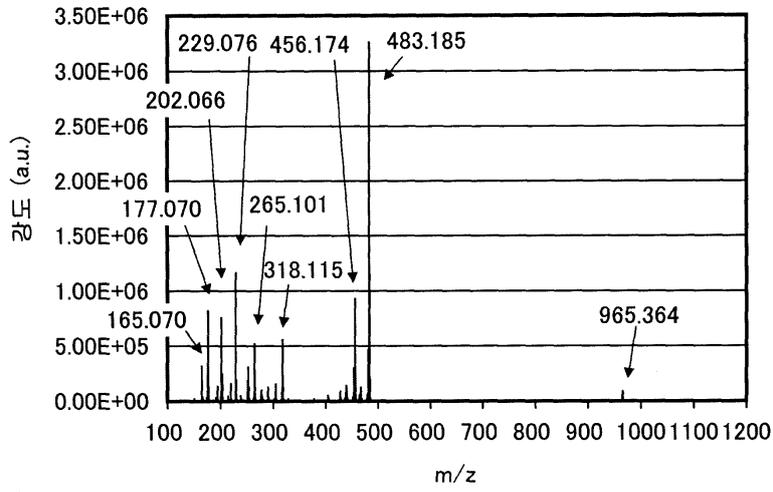


도면47

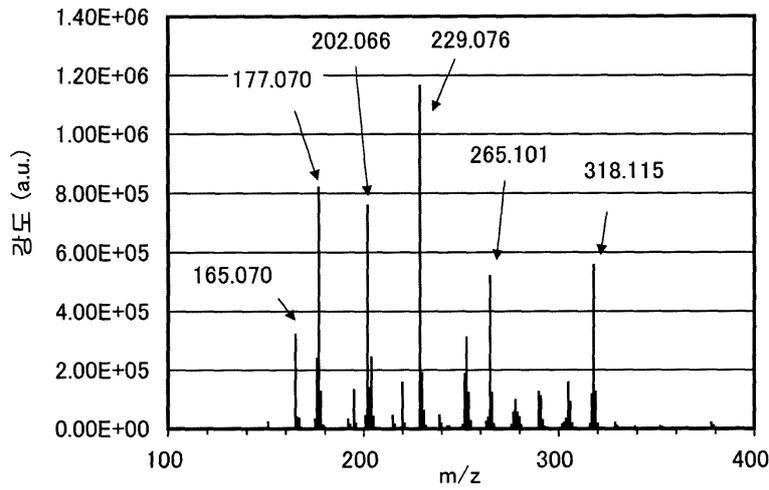


도면48

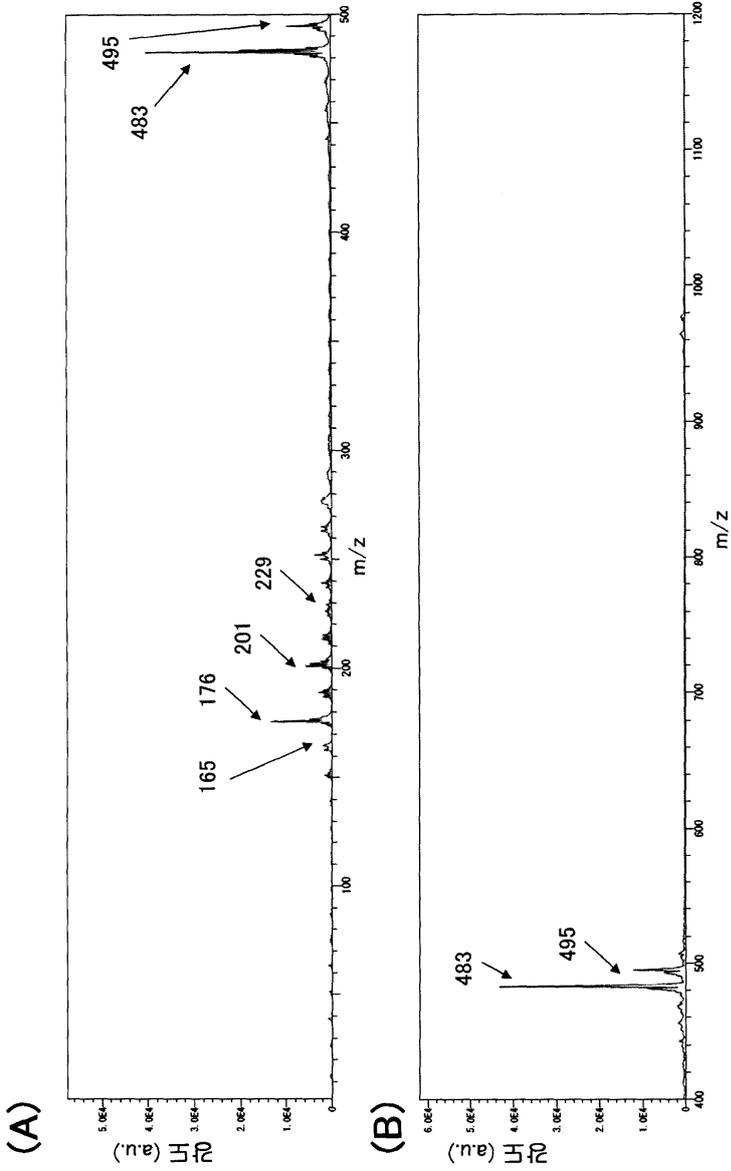
(A)



(B)



도면49



도면50

