



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호

10-2010-0021367

(43) 공개일자

2010년02월24일

(51) Int. Cl.

C09K 11/06 (2006.01) C07D 203/26 (2006.01)

H05B 33/14 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(21) 출원번호

10-2009-0073540

(22) 출원일자

2009년08월10일

심사청구일자

없음

(30) 우선권주장

1020080080008 2008년08월14일 대한민국(KR)

(71) 출원인

에스에프씨 주식회사

충청북도 청원군 오창면 각리 641-5

(72) 발명자

제종태

충북 청주시 상당구 용암동 건영아파트 106동 801호

황석광

충청북도 청원군 오창읍 각리 646-6 이안오창아파트 711-1103

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

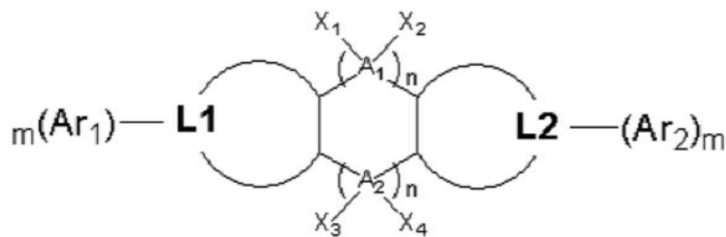
현종철

전체 청구항 수 : 총 9 항

(54) 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

(57) 요약

본 발명은 하기 식 (1)로 표시되는 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 발광 화합물은 휘도가 우수하고, 장수명을 갖는 유기전계발광소자를 제공할 수 있다.



(72) 발명자

최아람

부산광역시 해운대구 반여1동 1476-71번지 센텀피
오레 1차 102동 2202호

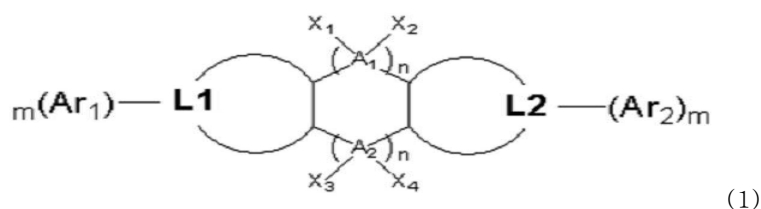
김성훈

전라북도 전주시 덕진구 여의동 제일아파트 104동
410호

특허청구의 범위

청구항 1

하기 식 (1)로 표시되는 발광 화합물;



(상기 식에서,

X₁ 내지 X₄는 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 실릴기, 니트로기, 하이드록시기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 아미노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 술폰산기, 할로젠, 중수소, 수소 및 탄소수 3 내지 19의 치환 또는 비치환된 아릴기, 헤테로아릴기, 헤테로 사이클기로 이루어진 군으로부터 선택되며;

A_1 및 A_2 는 각각 독립적으로 C, N, S, O, Si 및 Ge로 구성된 군으로부터 선택되며, 이때, n 은 0 내지 10의 정수이고;

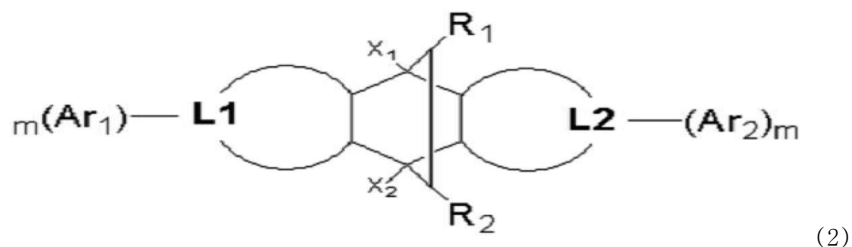
L1 및 L2는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로사이클기로 구성된 군으로부터 선택되며;

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로사이클기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이때 Ar₁과 Ar₂는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있으며, m은 0 내지 4의 정수이고;

상기 X_1 내지 X_4 , L_1 및 L_2 , Ar_1 및 Ar_2 의 치환기는 탄소수 1 내지 19의 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 알킬실릴기, 할로젠기, 탄소수 3 내지 19의 아릴기, 탄소수 3 내지 19의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 19의 헤테로사이클기, 탄소수 3 내지 19의 아릴옥시기, 탄소수 3 내지 19의 아릴실릴기 및 중수소로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기이고, 이때 인접한 치환기는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있음)

청구항 2

하기 식 (2)로 표시되는 발광 화합물:



(상기 식에서,

X_1 및 X_2 는 각각이 독립적으로 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 실릴기, 니트로기, 하이드록시기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 아미노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 술폰산기, 할로젠, 중수

소, 수소 및 탄소수 3 내지 19의 치환 또는 비치환된 아릴기, 헤테로아릴기, 헤테로 사이클기로 이루어진 군으로부터 선택되며;

R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 실릴기, 니트로기, 하이드록시기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 아미노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 술폰산기, 할로젠, 중수소, 수소 및 탄소수 3 내지 19의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 헤테로 사이클기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이때, R_1 및 R_2 는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있으며;

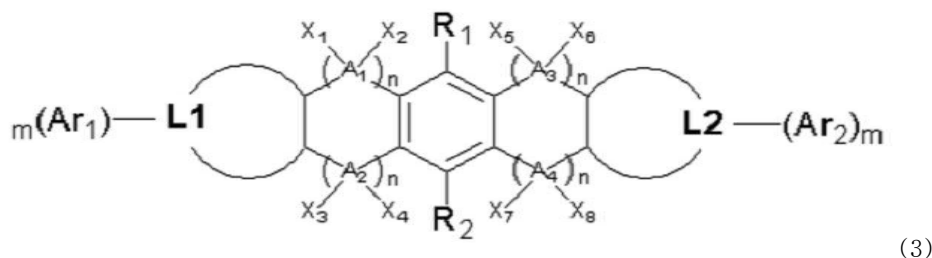
L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로사이클기로 구성된 군으로부터 선택되며;

Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로사이클기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이때 인접한 치환기는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있고, m 은 0 내지 4의 정수이며;

상기 X_1 및 X_2 , R_1 및 R_2 , L_1 및 L_2 , Ar_1 및 Ar_2 의 치환기는 탄소수 1 내지 19의 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 알킬실릴기, 할로젠기, 탄소수 3 내지 19의 아릴기, 탄소수 3 내지 19의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 19의 헤테로사이클기, 탄소수 3 내지 19의 아릴옥시기, 탄소수 3 내지 19의 아릴실릴기 및 중수소로 이루어진 군으로부터 하나 이상 선택되고, 이때 인접한 치환기는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있음)

청구항 3

하기 식 (3)으로 표시되는 발광 화합물;



(상기 식에서,

X_1 내지 X_8 은 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 실릴기, 니트로기, 하이드록시기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 아미노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 술폰산기, 할로젠, 중수소, 수소 및 탄소수 3 내지 19의 치환 또는 비치환된 아릴기, 헤테로아릴기, 헤테로 사이클기로 이루어진 군으로부터 선택되며;

A_1 내지 A_4 는 각각이 독립적으로 C, N, S, O, Si 및 Ge로 구성된 군으로부터

선택되고, n 은 0 내지 10 의 정수이며;

R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 실릴기, 니트로기, 하이드록시기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 아미노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 술폰산기, 할로젠, 중수소, 수소 및 탄소수 3 내지 19의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 헤테로 사이클기로 이루어진 군으로부터 선택되고, R_1 및

R₂는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있으며;

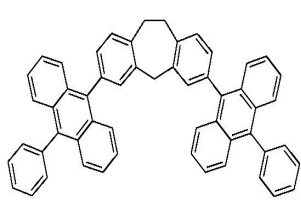
L1 및 L2는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로사이클기로 구성된 군으로부터 선택되며;

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로사이클기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이때 인접한 치환기는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있으며, m 은 0 내지 4의 정수이고;

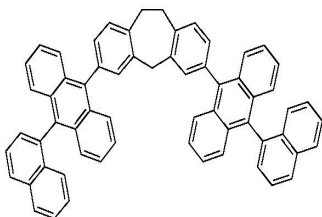
상기 X₁ 및 X₈, R₁ 및 R₂, L₁ 및 L₂, Ar₁ 및 Ar₂의 치환기는 탄소수 1 내지 19의 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 알킬실릴기, 할로젠기, 탄소수 3 내지 19의 아릴기, 탄소수 3 내지 19의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 19의 헤테로사이클기, 탄소수 3 내지 19의 아릴옥시기, 탄소수 3 내지 19의 아릴실릴기 및 중수소로 이루어진 군으로부터 하나 이상 선택되며, 이때 인접한 치환기는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있음)

청구항 4

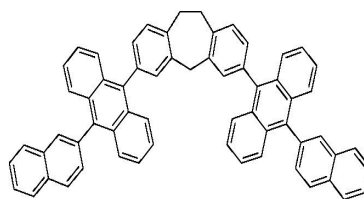
제1항 내지 제3항에 있어서, 하기 화학식(SSH001) 내지 (SSH132)로 표시되는 화합물 군으로부터 선택된 어느 하나인 것을 특징으로 하는 발광 화합물:



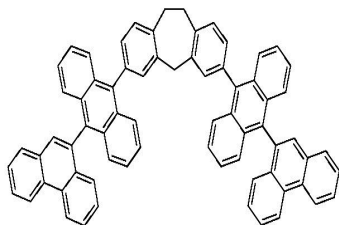
SSH001



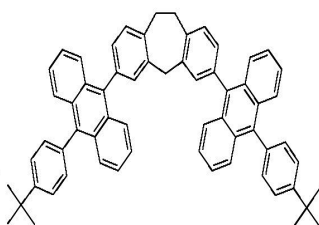
SSH002



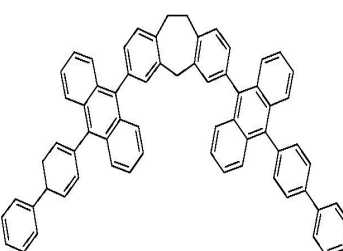
SSH003



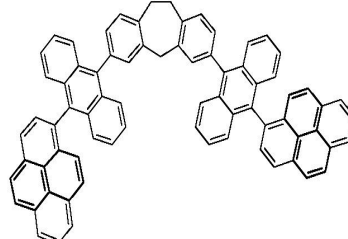
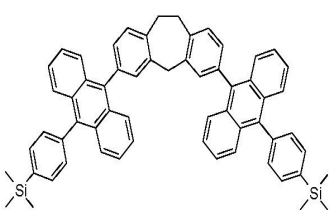
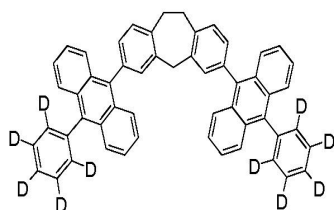
SSH004



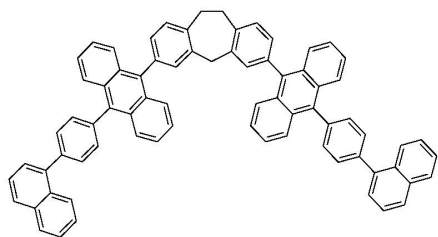
SSH005



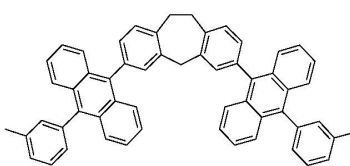
SSH006



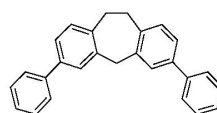
SSH007



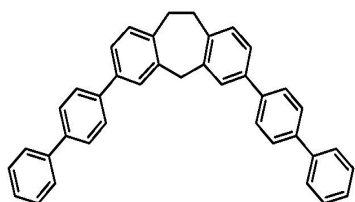
SSH008



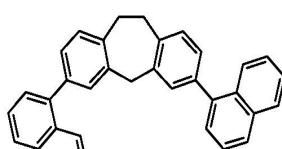
SSH009



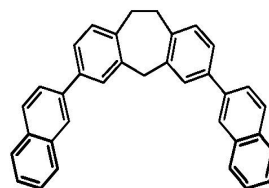
SSH010



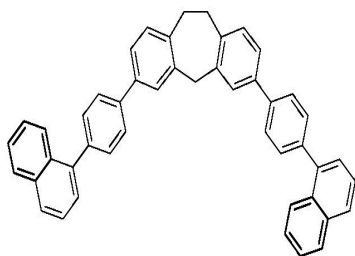
SSH011



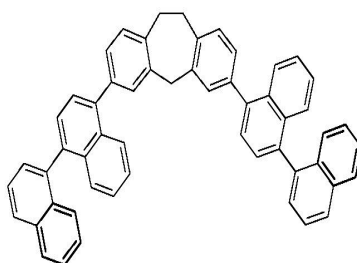
SSH012



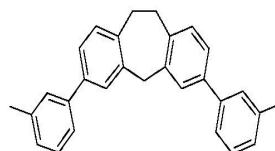
SSH013



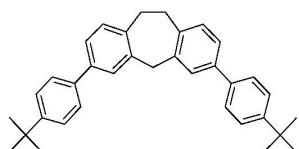
SSH014



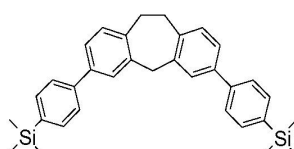
SSH015



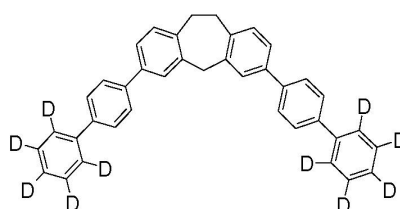
SSH016



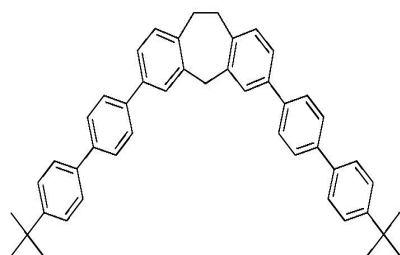
SSH017



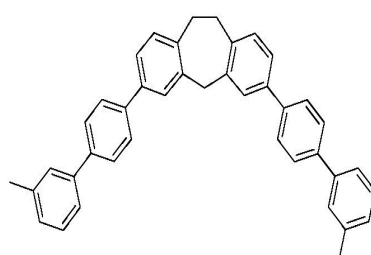
SSH018



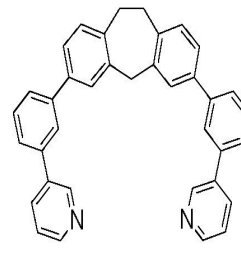
SSH019



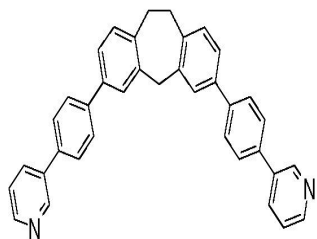
SSH020



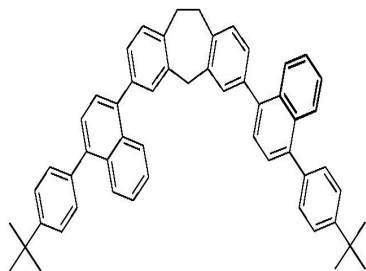
SSH021



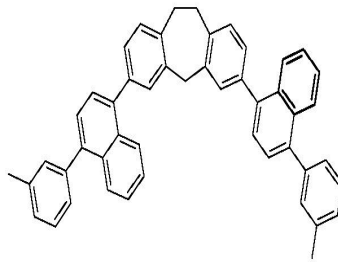
SSH022



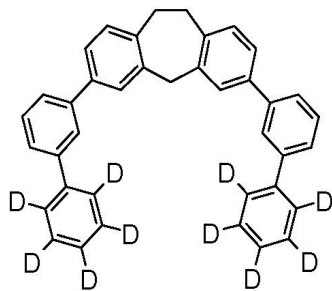
SSH023



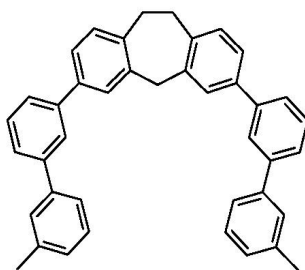
SSH024



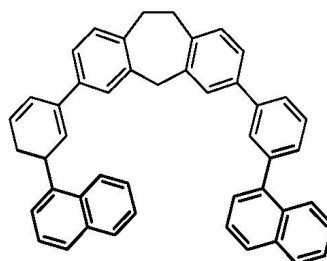
SSH025



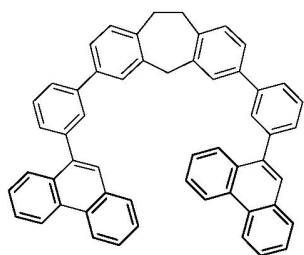
SSH026



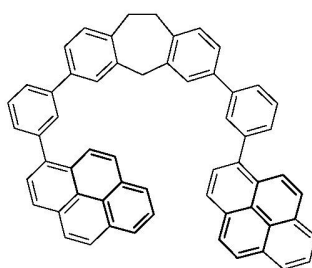
SSH027



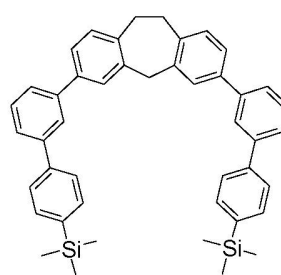
SSH028



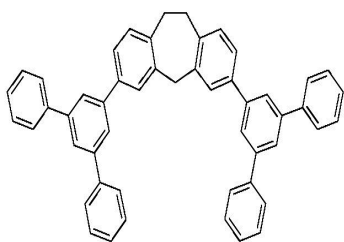
SSH029



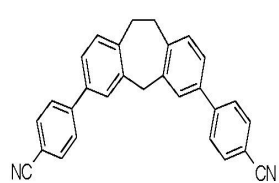
SSH030



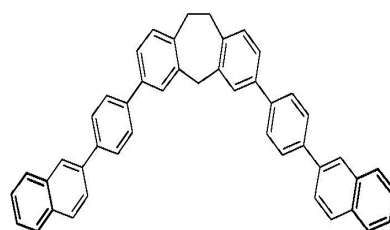
SSH031



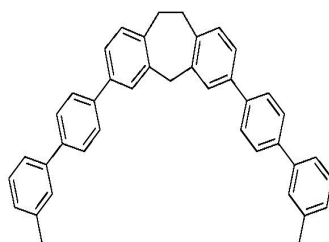
SSH032



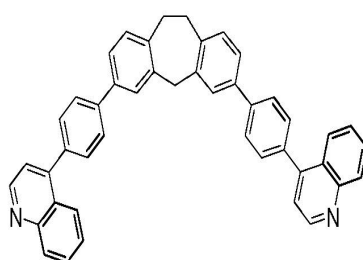
SSH033



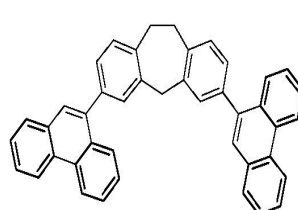
SSH034



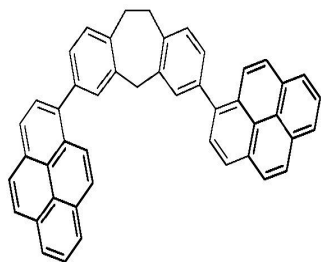
SSH035



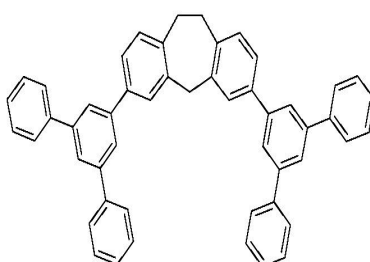
SSH036



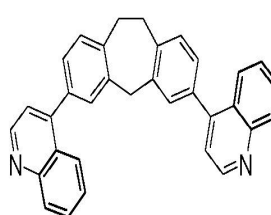
SSH037



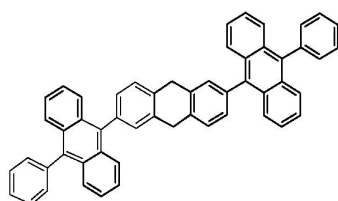
SSH038



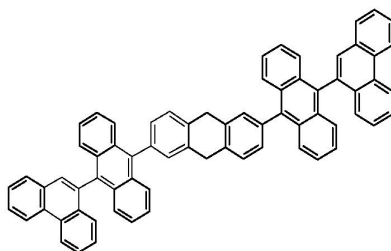
SSH039



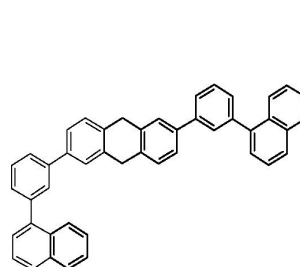
SSH040



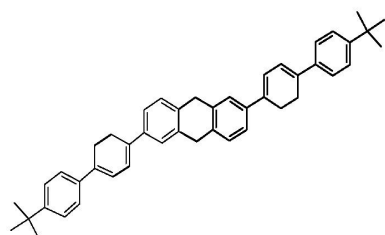
SSH041



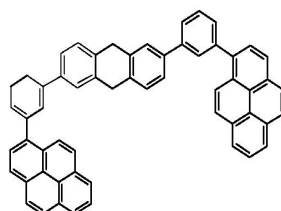
SSH042



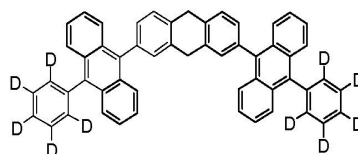
SSH043



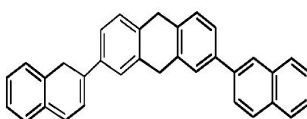
SSH044



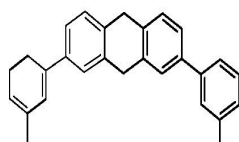
SSH045



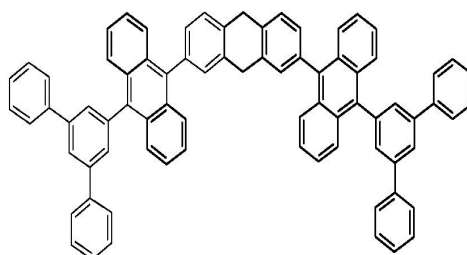
SSH046



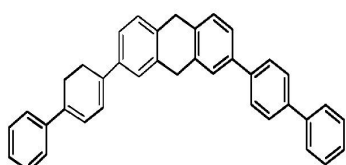
SSH047



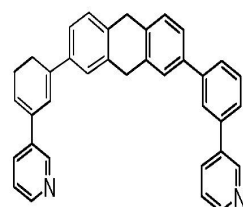
SSH048



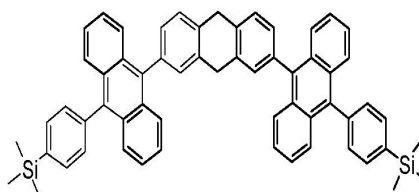
SSH049



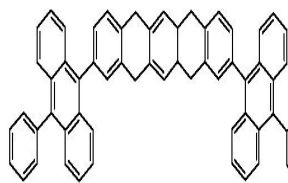
SSH050



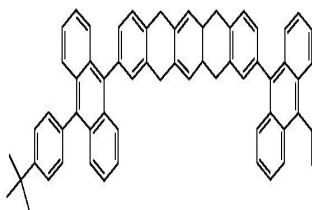
SSH051



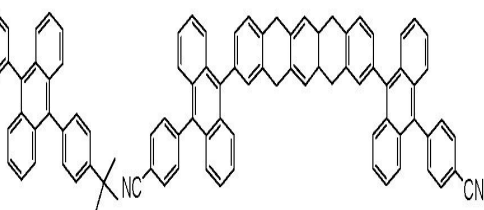
SSH052



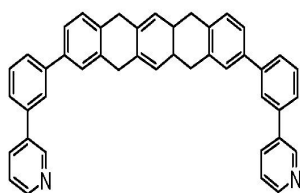
SSH053



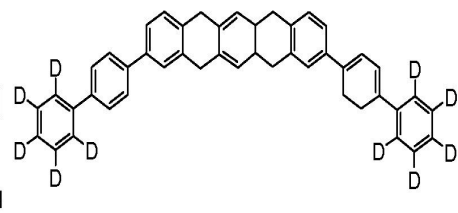
SSH054



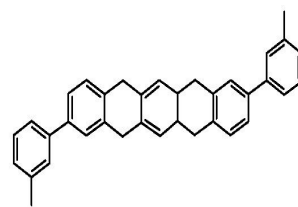
SSH055



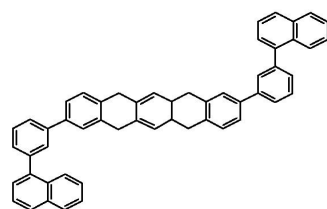
SSH056



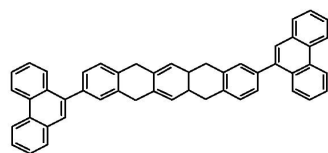
SSH057



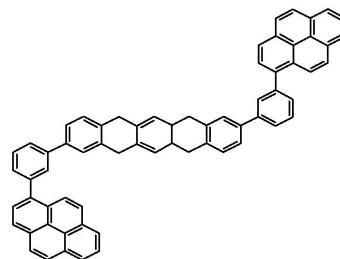
SSH058



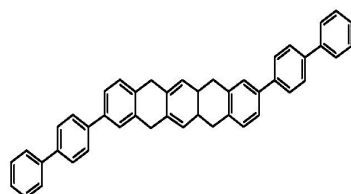
SSH059



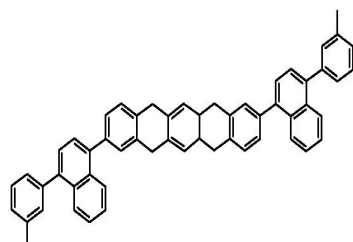
SSH060



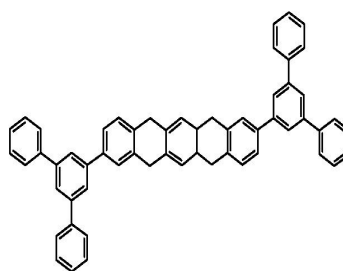
SSH061



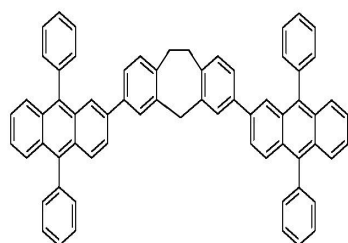
SSH062



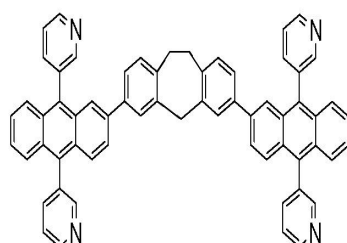
SSH063



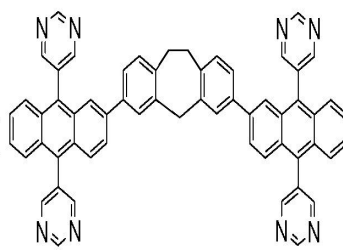
SSH064



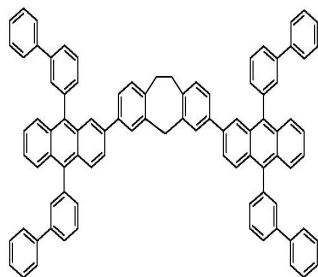
SSH065



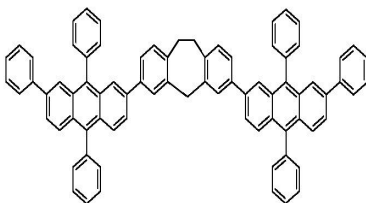
SSH066



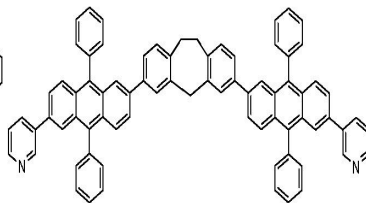
SSH067



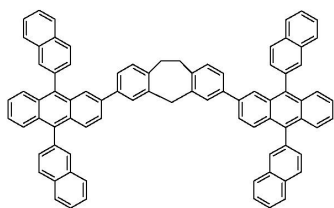
SSH068



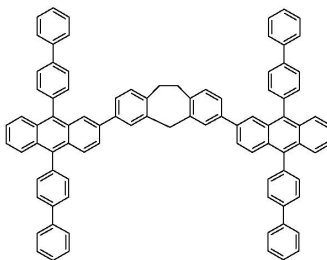
SSH069



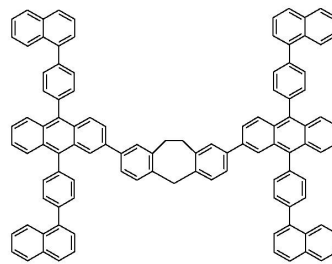
SSH070



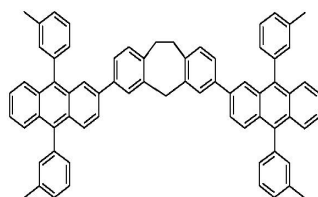
SSH071



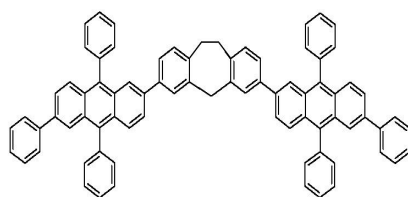
SSH072



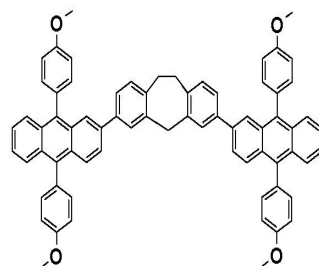
SSH073



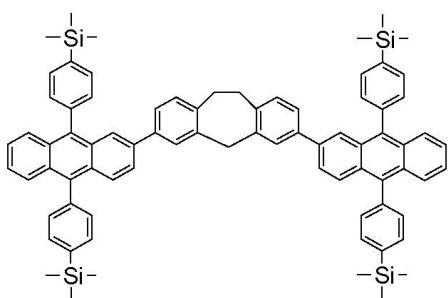
SSH074



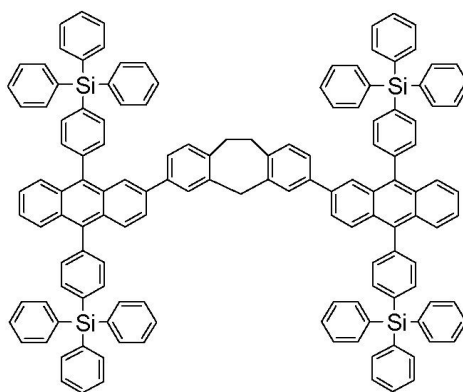
SSH075



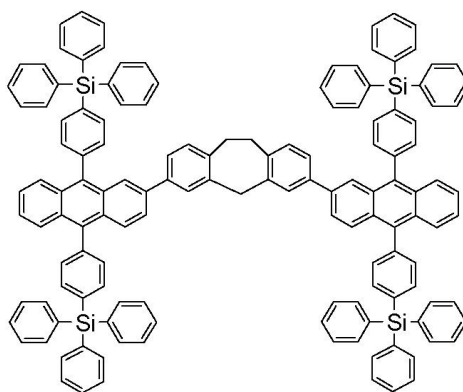
SSH076



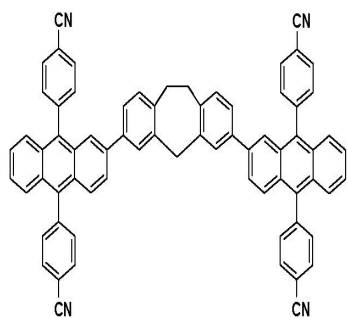
SSH077



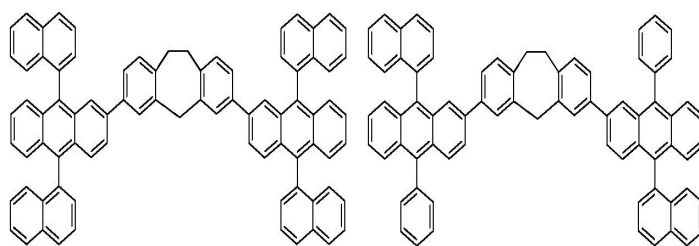
SSH078



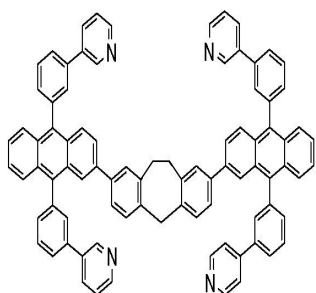
SSH079



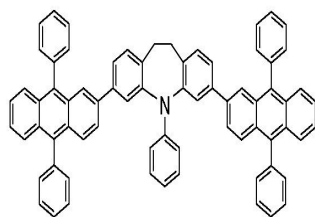
SSH080



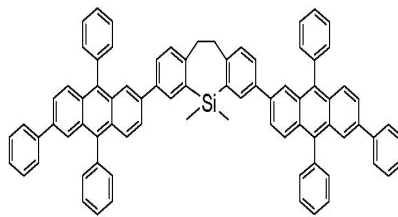
SSH081



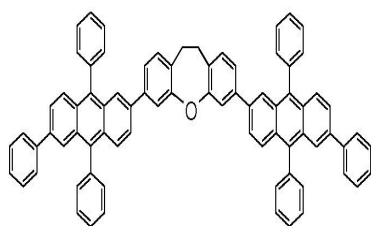
SSH082



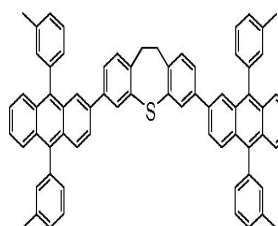
SSH083



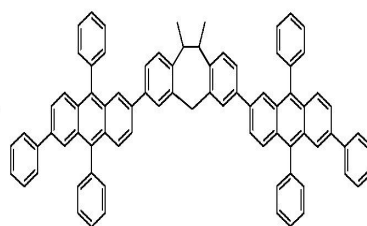
SSH084



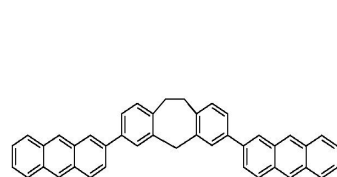
SSH085



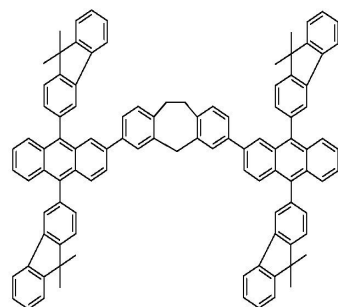
SSH086



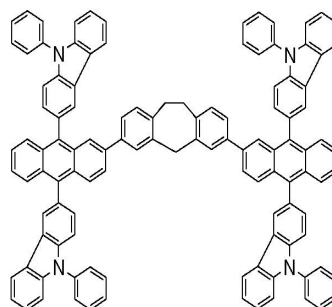
SSH087



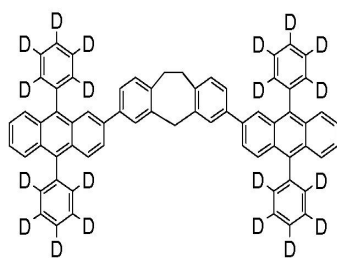
SSH088



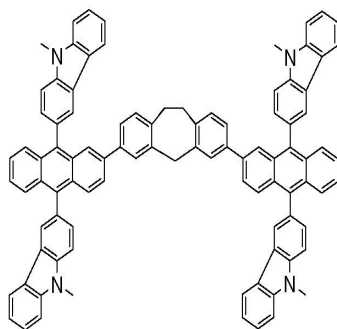
SSH089



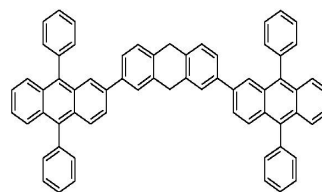
SSH090



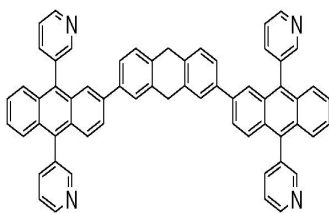
SSH091



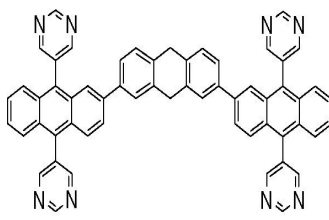
SSH092



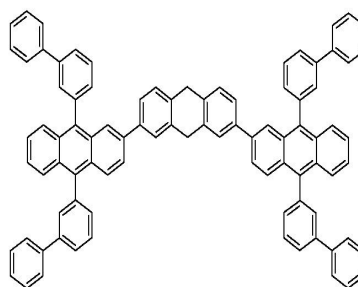
SSH093



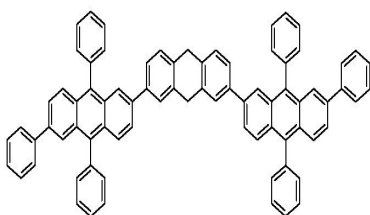
SSH094



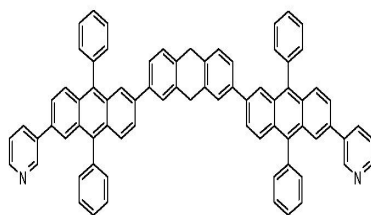
SSH095



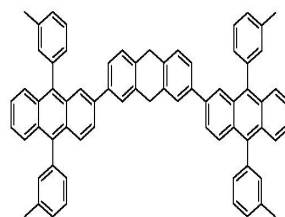
SSH096



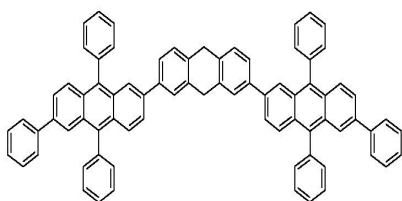
SSH097



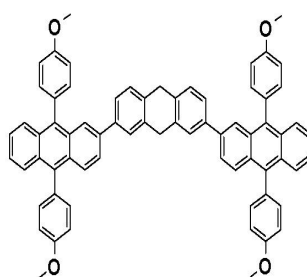
SSH098



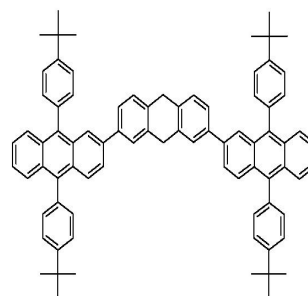
SSH099



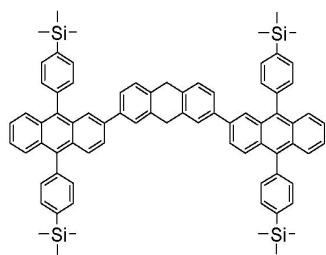
SSH100



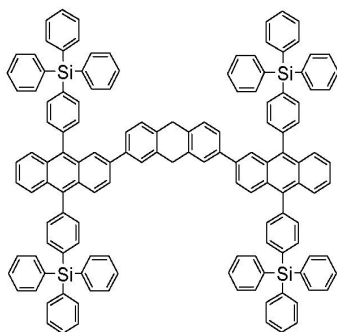
SSH101



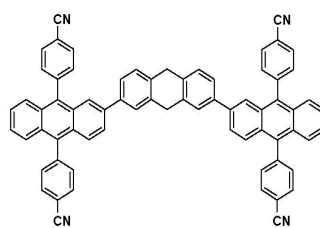
SSH102



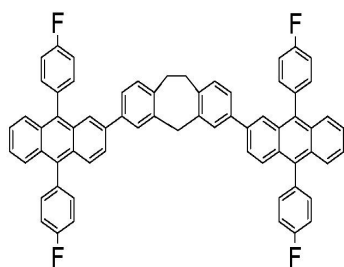
SSH103



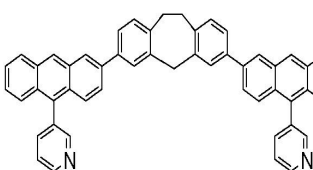
SSH104



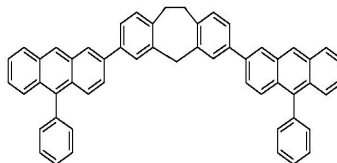
SSH105



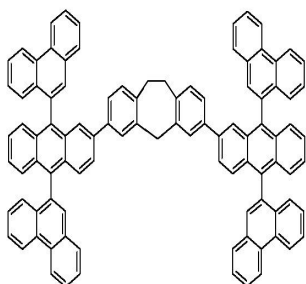
SSH106



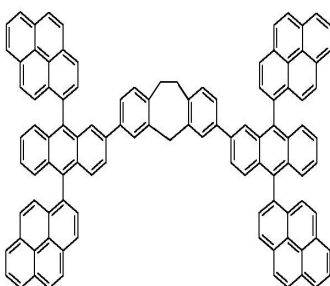
SSH107



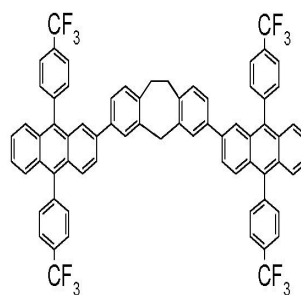
SSH108



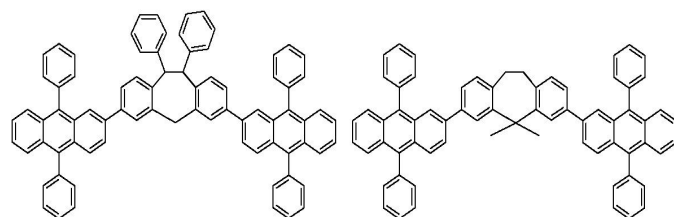
SSH109



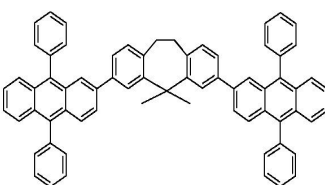
SSH110



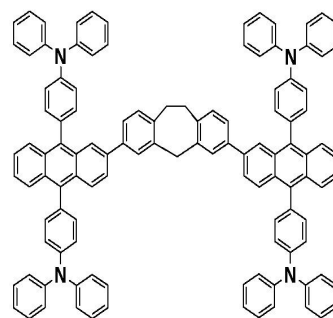
SSH111



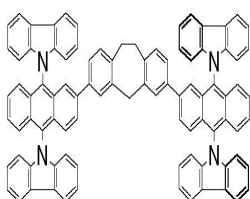
SSH112



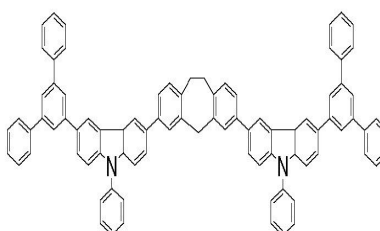
SSH113



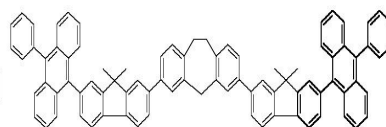
SSH114



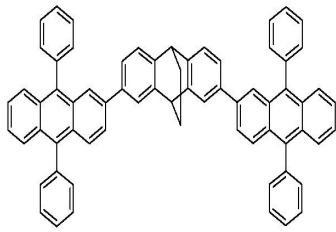
SSH115



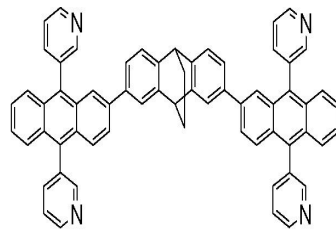
SSH116



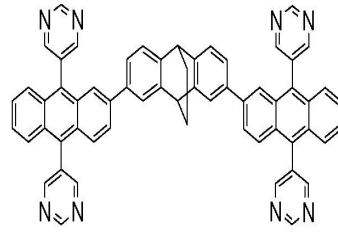
SSH117



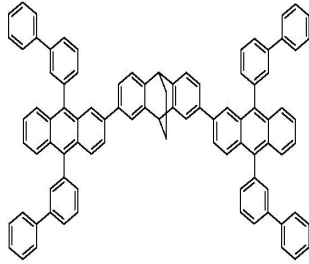
SSH118



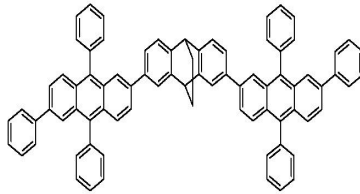
SSH119



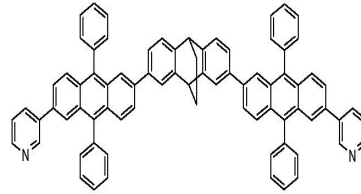
SSH120



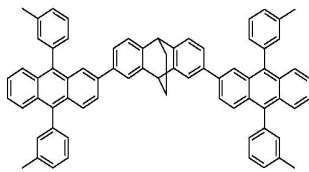
SSH121



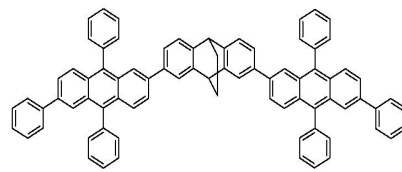
SSH122



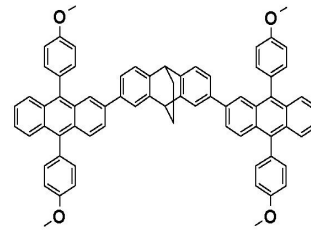
SSH123



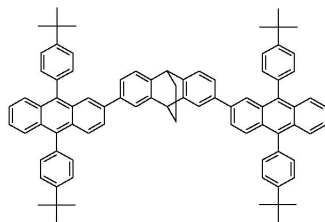
SSH124



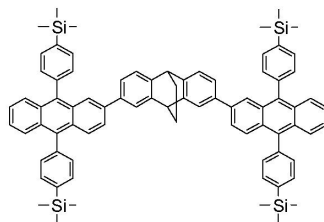
SSH125



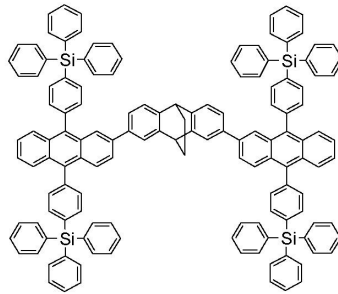
SSH126



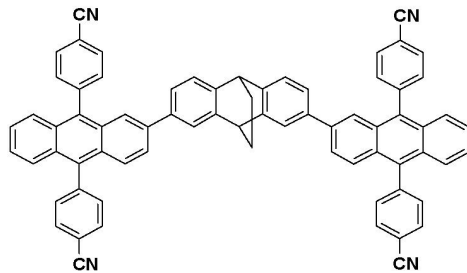
SSH127



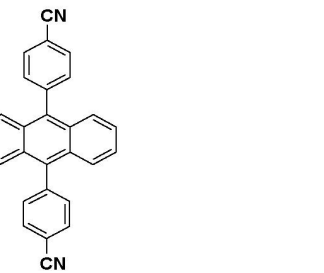
SSH128



SSH129



SSH130



SSH131

SSH132

청구항 5

애노드; 캐소드; 및 상기 애노드 및 캐소드 사이에 개재되며, 제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 따른 발광 화

합물을 포함하는 층을 구비한 유기전계발광소자.

청구항 6

제5항에 있어서, 상기 애노드 및 캐소드 사이에 정공주입층, 정공수송층, 정공저지층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자저지층으로 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 7

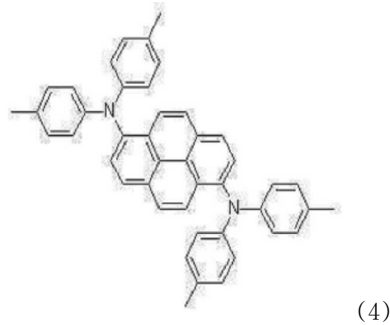
제5항에 있어서, 상기 발광 화합물은 상기 애노드 및 캐소드 사이의 발광층 중에 포함되는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 8

제7항에 있어서, 상기 발광층의 두께는 0.5nm 내지 500nm인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 9

제7항에 있어서, 상기 발광층은 게스트 화합물로서 하기 식 (4)의 화합물을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.



명세서

발명의 상세한 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한것으로서, 보다 상세하게는, 휘도가 우수하고 장수명을 갖는 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 최근 표시장치의 대형화에 따라 공간 점유가 작은 평면표시소자의 요구가 증대되고 있는데, 대표적인 평면표시소자인 액정 디스플레이는 기존의 음극선관(Cathode Ray Tube; CRT)에 비해 경량화가 가능하다는 장점은 있으나, 시야각(viewing angle)이 제한되고 배면광(back light)이 반드시 필요하다는 등의 단점을 갖고 있다. 이에 반하여, 새로운 평면표시소자인 유기전계발광소자(organic light emitting diode; OLED)는 자기 발광 현상을 이용한 디스플레이로서 시야각이 크고 액정 디스플레이에 비해 경박, 탄소해결 수 있으며, 빠른 응답 속도 등의 장점을 갖고 있다.

[0003] 유기전계발광소자의 원리를 살펴보면, 전원이 유기전계발광소자에 공급되면 전자가 이동하면서 전류가 흐르게 되는데 캐소드에서는 전자(-)가 전자수송층의 도움으로 발광층으로 이동하고, 상대적으로 애노드에서는 정공(+ 개념, 전자가 빠져나간 상태)이 정공수송층의 도움으로 발광층으로 이동하게 된다. 유기물질인 발광층에서 만난 전자와 정공은 높은 에너지를 갖는 엑시톤을 생성하게 되는데, 엑시톤은 낮은 에너지로 떨어지면서 빛을 발생하게 된다.

[0004] 이러한 유기전계발광소자에서, 정공수송층은 애노드로부터의 정공주입을 용이하게 해주어 궁극적으로 소자의 전력 효율을 개선시키며 소자의 수명을 증가시키는 재료이다. 정공주입 장벽을 낮추기 위해서는 애노드와의 이온

화 에너지가 비슷하고, 애노드와 계면접착력이 높아야 하며 외부양자 효율을 높이기 위해서는 가시광 영역에서의 흡수가 가능한 없어야 한다. 정공수송층의 정공전달 재료는 정공을 쉽게 운반시킬 뿐만 아니라 전자를 발광 영역에 속박함으로써 엑시톤 형성확률을 높여주므로 정공수송층의 정공전달재료는 위에서 언급한 기본특성 외에도 정공이동도가 높은 물질이 바람직하다고 알려져 있다. 이 계통의 물질로는 주로 정공이 주입되었을 때 생성되는 양이온 라디칼이 안정화될 수 있는 방향족 아민, 안트라센 유도체 등의 방향족 화합물이 많이 사용되고 있다.

[0005] 대표적 유기전계발광소자는 1969년 구르니(Gurnee)에 의해서 공지(US 3,172,862, US 3,173,050)된 이래로 그 성능상의 한계로 인하여 다양한 용도에의 사용이 제한되어 왔으나, 1987년 이스트만 코닥사(Eastman Kodak co.)의 다층 구조의 유기전계발광소자 발표(C.W. Tang et al., Appl. Phys. Lett., 51, 913(1987); J. Appl. Phys., 65, 3610(1989)) 이후 기존의 문제점을 극복하면서 빠른 속도로 발전하여 왔다. 현재 유기전계발광소자는 플라즈마 디스플레이 패널이나 무기 전계발광소자 디스플레이에 비해 낮은 구동전압(예, 10V 이하), 넓은 시야각, 고속 응답성, 고 콘트라스트(contrast) 등의 뛰어난 특징을 갖게 됨으로서, 그래픽 디스플레이의 픽셀(pixel), 텔레비전 영상 디스플레이나 표면광원(surface light source)의 픽셀로서 사용될 수 있으며, 플렉서블(flexible)한 투명 플라스틱 기판 위에도 소자를 형성할 수 있고, 매우 얇고 가볍게 만들 수 있으며, 색감이 좋기 때문에 차세대 평면 디스플레이(flat panel display; FPD)에 적합한 소자로 부상하고 있다.

[0006] 이러한 유기전계발광소자는 정공 주입 전극인 애노드와 전자 주입 전극인 캐소드 사이에 형성된 발광층에 각각 전자와 정공을 주입하면 전자와 정공이 결합하여 쌍을 이루어 생성된 엑시톤(exiton)이 여기 상태에서부터 기저 상태로 떨어지면서 소멸하여 발광하는 소자로서, 최근에는 풀 컬러(full color) 디스플레이에의 응용이 기대되고 있다. 이처럼 풀 컬러를 구현하기 위해서는, 녹색(green), 적색(red), 청색(blue)의 3원색의 발광을 나타내는 화소를 패널 위에 배열할 필요가 있는데, 그 방식으로는 i) 청색, 녹색, 적색의 발광을 나타내는 3종류의 유기발광소자를 배열하는 방법, ii) RGB의 혼색인 백색발광을 나타내는 소자로부터의 발광을 컬러 필터를 통해 3원색으로 분리하는 방법 및 iii) 청색발광을 나타내는 유기발광소자로부터의 발광을 형광발광원으로 이용하여 녹색 및 적색의 발광으로 변환시키는 방법 등이 제안되고 있는데, 어느 경우라도 청색 발광은 필수적이며 고휘도, 고효율 및 고색순도의 청색발광물질에 대한 필요성이 절실해지고 있다. 이러한 맥락에서, 1965년에 헬프리치(Helfrich)와 포프(Pope)는 안트라센의 단결정을 이용한 청색 유기전계발광 현상을 처음으로 발표하였다. 그러나, 안트라센 단결정을 이용한 발광에는 고전압이 필요하였으며 이 때문에 유기전계발광소자의 수명이 짧아져서 실용화하기에는 많은 어려움이 있었다.

[0007] 상술한 바와 같이, 유기전계발광소자에 대한 많은 연구가 이루어지고 있지만, 현재까지는 요구되는 휘도, 구동 안정성 및 수명 등의 특성을 충분히 만족시키지 못하고 있는 실정이며, 따라서 이를 해결하기 위한 다양한 기술 개발이 시급한 실정이다. 특히, 발광층 호스트(host)에 도펀트(dopant)를 도핑하는 에너지 이동 원리를 기본으로 하는 호스트-게스트 시스템에 있어서, 발광층 호스트 물질로서 새로운 화합물에 대한 많은 연구가 필요한 상황이다.

발명의 내용

해결 하고자하는 과제

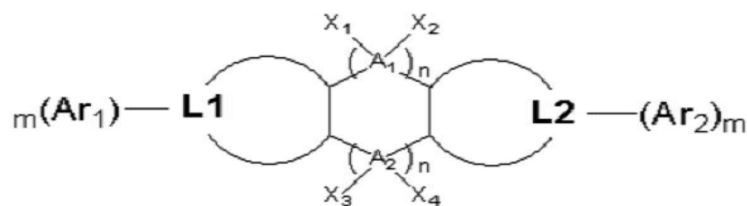
[0008] 따라서, 본 발명이 이루고자 하는 첫 번째 기술적 과제는 휘도가 우수하며, 장수명을 갖는 발광 화합물을 제공하는 것이다.

[0009] 또한, 본 발명이 이루고자 하는 두 번째 기술적 과제는 상기 발광 화합물을 포함하는 유기전계발광소자를 제공하는 것이다.

과제 해결수단

[0010] 상기 기술적 과제를 달성하기 위해서, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 발광 화합물을 제공한다.

화학식 1



[0011]

[0012] (상기 식에서,

[0013] X_1 내지 X_4 는 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 실릴기, 니트로기, 하이드록시기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 아미노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 술폰산기, 할로젠, 중수소, 수소 및 탄소수 3 내지 19의 치환 또는 비치환된 아릴기, 헤테로아릴기, 헤테로 사이클기로 이루어진 군으로부터 선택되며;

[0014] A_1 및 A_2 는 각각 독립적으로 C, N, S, O, Si 및 Ge로 구성된 군으로부터 선택되며, 이때, n 은 0 내지 10의 정수이고;

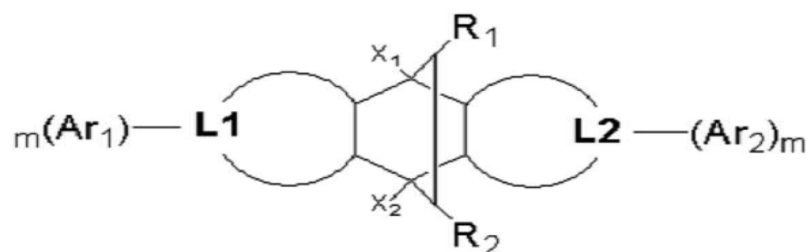
[0015] L1 및 L2는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로사이클기로 구성된 군으로부터 선택되며;

[0016] Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로사이클기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이때 Ar_1 과 Ar_2 는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있으며, m 은 0 내지 4의 정수이고;

[0017] 상기 X_1 내지 X_4 , L1 및 L2, Ar_1 및 Ar_2 의 치환기는 탄소수 1 내지 19의 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 알킬실릴기, 할로젠기, 탄소수 3 내지 19의 아릴기, 탄소수 3 내지 19의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 19의 헤테로사이클기, 탄소수 3 내지 19의 아릴옥시기, 탄소수 3 내지 19의 아릴실릴기 및 중수소로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기이고, 이때 인접한 치환기는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있음)

[0018] 또한, 본 발명은 하기 식 (2)로 표시되는 발광 화합물을 제공한다.

화학식 2



[0019]

[0020] (상기 식에서,

[0021] X_1 및 X_2 는 각각이 독립적으로 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 실릴기, 니트로기, 하이드록시기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 아미노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 술폰산기, 할로젠, 중수소, 수소 및 탄소수 3 내지 19의 치환 또는 비치환된 아릴기, 헤테로아릴기, 헤테로 사이클기로 이루어진 군으로부터 선택되며;

[0022] R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비

치환된 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 실릴기, 니트로기, 하이드록시기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 아미노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 술폰산기, 할로젠, 중수소, 수소 및 탄소수 3 내지 19의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 헤테로 사이클기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이때, R_1 및 R_2 는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있으며;

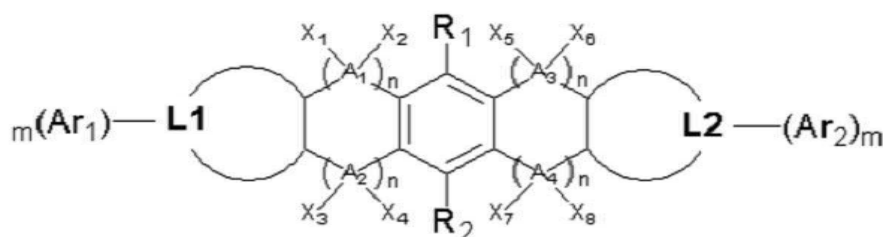
[0023] L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로사이클기로 구성된 군으로부터 선택되며;

[0024] Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로사이클기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이때 인접한 치환기는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있고, m 은 0 내지 4의 정수이며;

[0025] 상기 X_1 및 X_2 , R_1 및 R_2 , L_1 및 L_2 , Ar_1 및 Ar_2 의 치환기는 탄소수 1 내지 19의 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 알킬실릴기, 할로젠기, 탄소수 3 내지 19의 아릴기, 탄소수 3 내지 19의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 19의 헤테로사이클기, 탄소수 3 내지 19의 아릴옥시기, 탄소수 3 내지 19의 아릴실릴기 및 중수소로 이루어진 군으로부터 하나 이상 선택되고, 이때 인접한 치환기는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있음)

[0026] 또한 본 발명은 하기 식 (3)으로 표시되는 발광 화합물을 제공한다.

화학식 3



[0027]

[0028] (상기 식에서,

[0029] X_1 내지 X_8 은 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 실릴기, 니트로기, 하이드록시기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 아미노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 술폰산기, 할로젠, 중수소, 수소 및 탄소수 3 내지 19의 치환 또는 비치환된 아릴기, 헤테로아릴기, 헤테로 사이클기로 이루어진 군으로부터 선택되며;

[0030] A_1 내지 A_4 는 각각이 독립적으로 C, N, S, O, Si 및 Ge로 구성된 군으로부터

[0031] 선택되고, n 은 0 내지 10의 정수이며;

[0032] R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 실릴기, 니트로기, 하이드록시기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 아미노기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 술폰산기, 할로젠, 중수소, 수소 및 탄소수 3 내지 19의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 1 내지 19의 치환 또는 비치환된 헤테로 사이클기로 이루어진 군으로부터 선택되고, R_1 및 R_2 는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있으며;

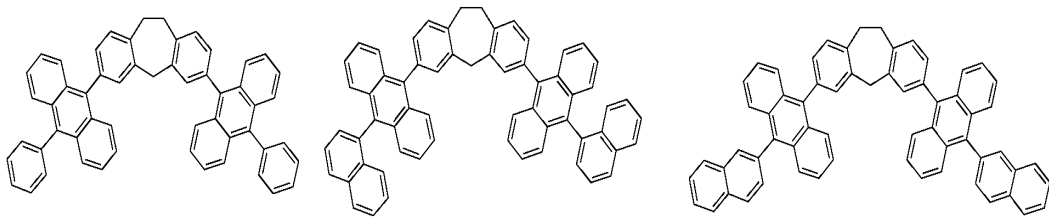
[0033] L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로사이클기로 구성된 군으로부터 선택되

며;

[0034] Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 헤테로사이클기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이때 인접한 치환기는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있으며, m 은 0 내지 4의 정수이고;

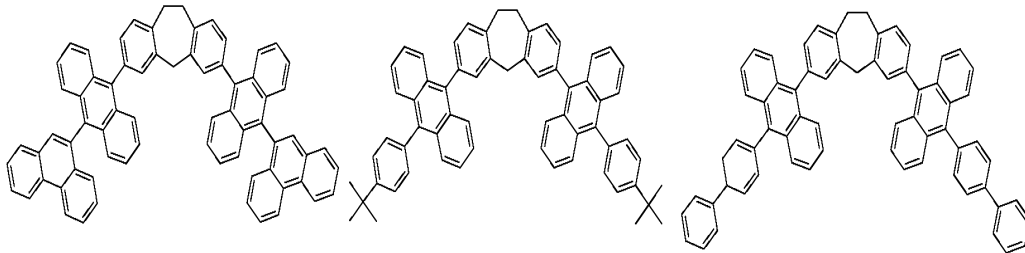
[0035] 상기 X_1 및 X_8 , R_1 및 R_2 , L_1 및 L_2 , Ar_1 및 Ar_2 의 치환기는 탄소수 1 내지 19의 알킬기, 탄소수 1 내지 19의 알콕시기, 시아노기, 탄소수 1 내지 19의 알킬실릴기, 할로젠기, 탄소수 3 내지 19의 아릴기, 탄소수 3 내지 19의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 19의 헤테로사이클기, 탄소수 3 내지 19의 아릴옥시기, 탄소수 3 내지 19의 아릴실릴기 및 중수소로 이루어진 군으로부터 하나 이상 선택되며, 이때 인접한 치환기는 서로 연결된 환(fused ring)을 형성할 수 있음)

[0036] 본 발명의 일실시예에 의하면, 상기 구조를 갖는 발광 화합물의 구체적인 예로는, 하기 화학식 SSH001 내지 SSH132로 표시되는 화합물 군으로부터 선택된 어느 하나의 화합물을 들 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다:



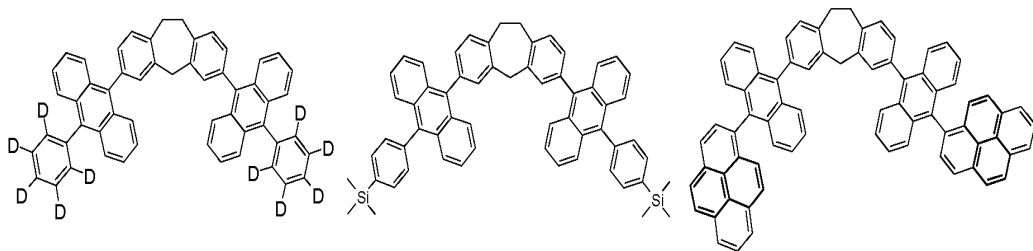
[0037]

[0038] SSH001 SSH002 SSH003



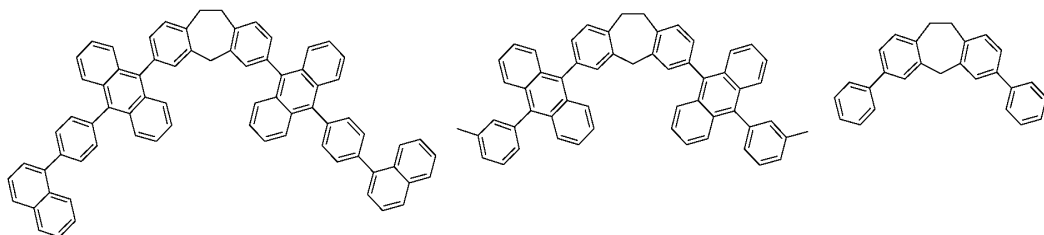
[0039]

[0040] SSH004 SSH005 SSH006



[0041]

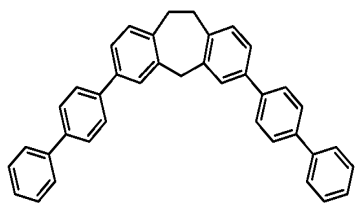
[0042] SSH007 SSH008 SSH009



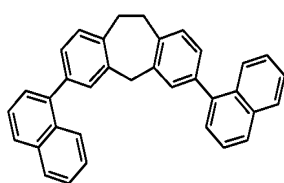
[0043]

[0044]

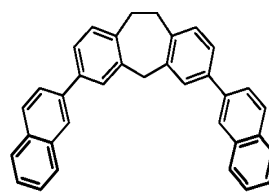
SSH010



SSH011



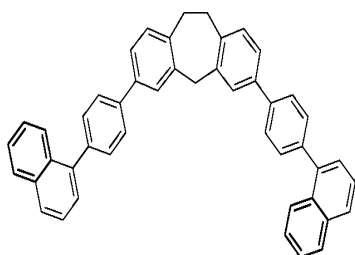
SSH012



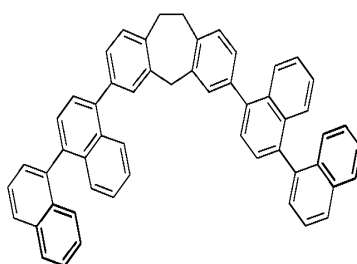
[0045]

[0046]

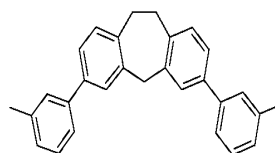
SSH013



SSH014



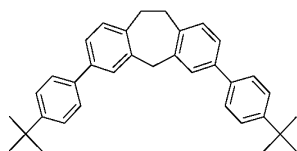
SSH015



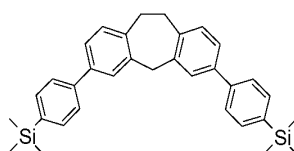
[0047]

[0048]

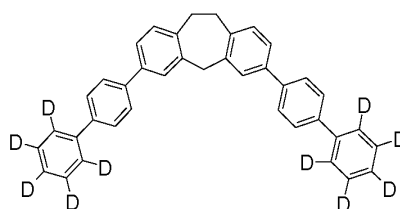
SSH016



SSH017



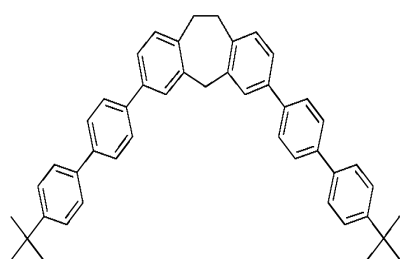
SSH018



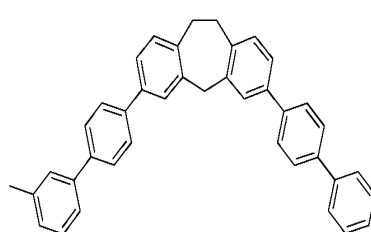
[0049]

[0050]

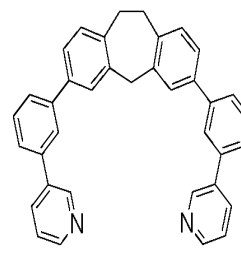
SSH019



SSH020



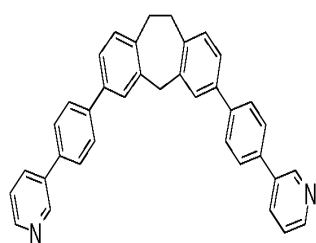
SSH021



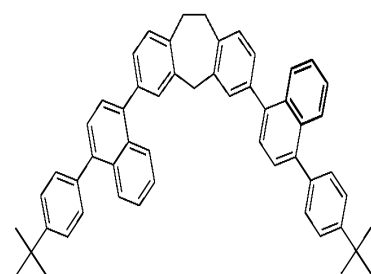
[0051]

[0052]

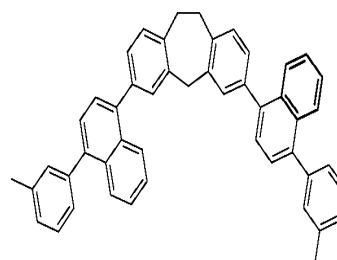
SSH022



SSH023



SSH024



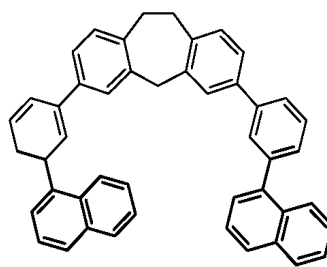
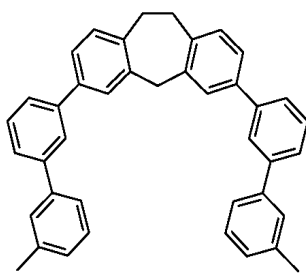
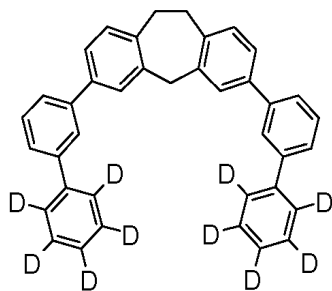
[0053]

[0054]

SSH025

SSH026

SSH027



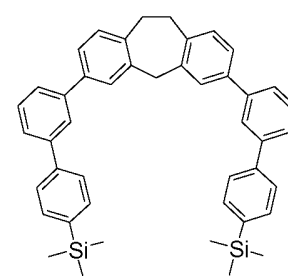
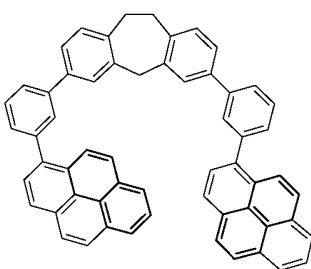
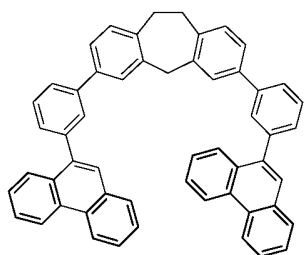
[0055]

[0056]

SSH028

SSH029

SSH030



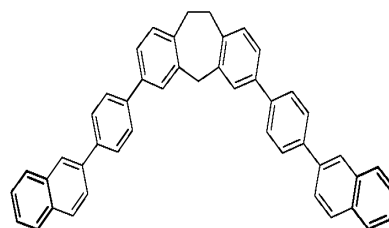
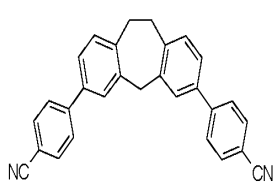
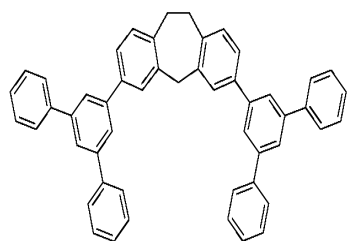
[0057]

[0058]

SSH031

SSH032

SSH033



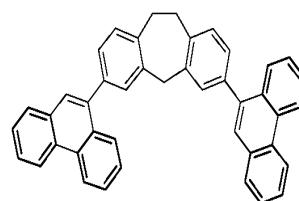
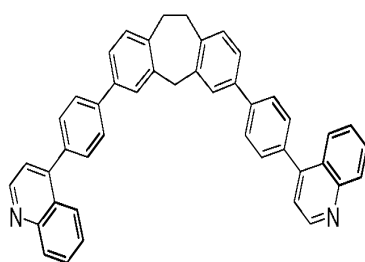
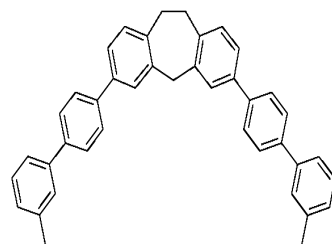
[0059]

[0060]

SSH034

SSH035

SSH036



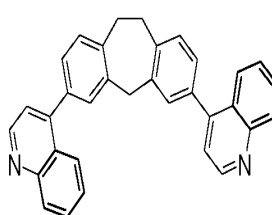
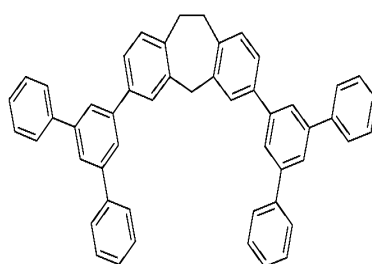
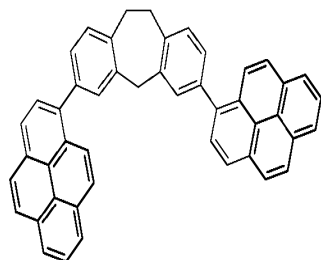
[0061]

[0062]

SSH037

SSH038

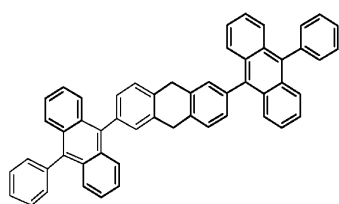
SSH039



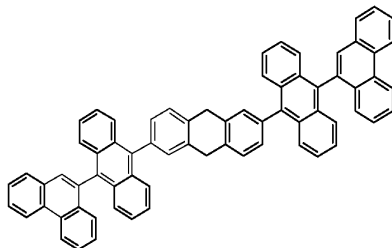
[0063]

[0064]

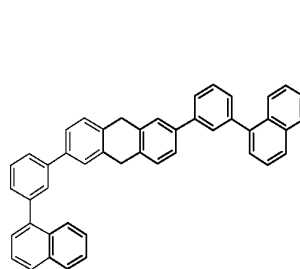
SSH040



SSH041



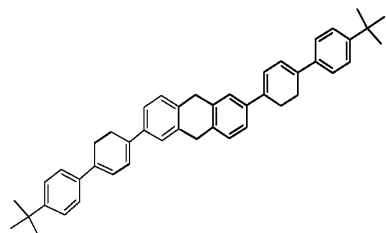
SSH042



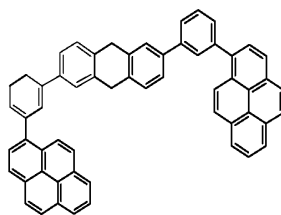
[0065]

[0066]

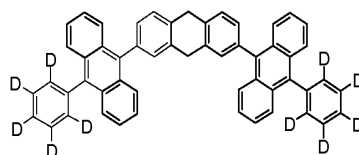
SSH043



SSH044



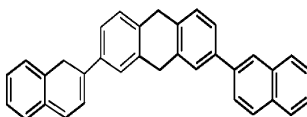
SSH045



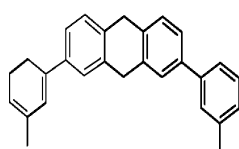
[0067]

[0068]

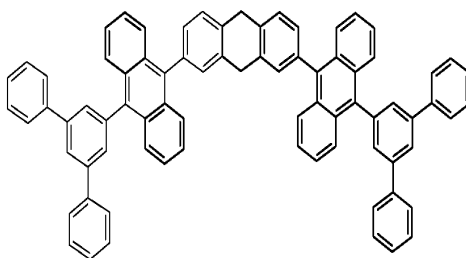
SSH046



SSH047



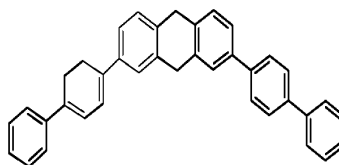
SSH048



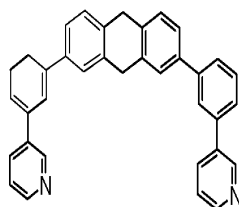
[0069]

[0070]

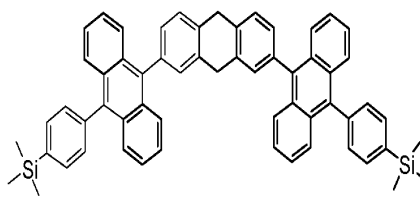
SSH049



SSH050



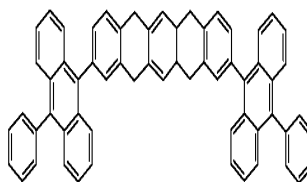
SSH051



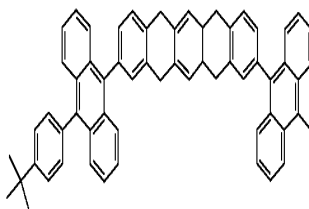
[0071]

[0072]

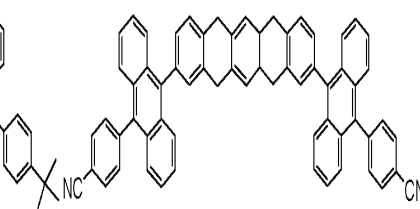
SSH052



SSH053



SSH054



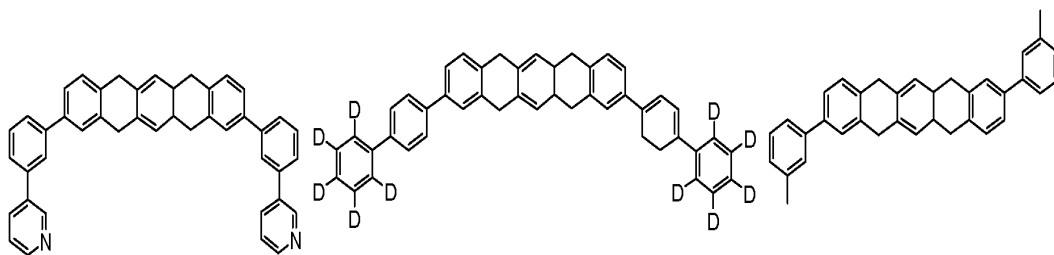
[0073]

[0074]

SSH055

SSH056

SSH057



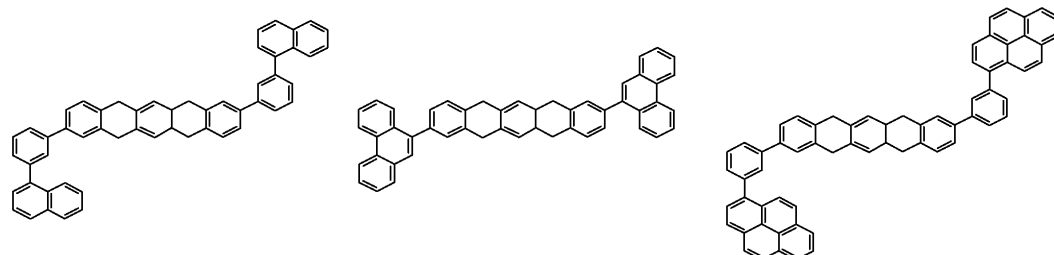
[0075]

[0076]

SSH058

SSH059

SSH060



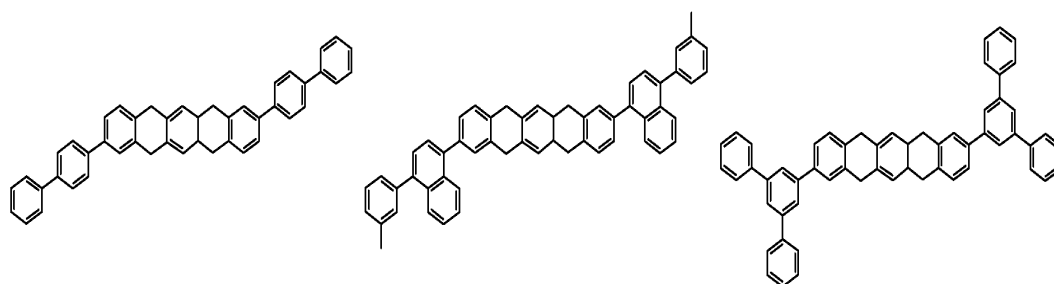
[0077]

[0078]

SSH061

SSH062

SSH063



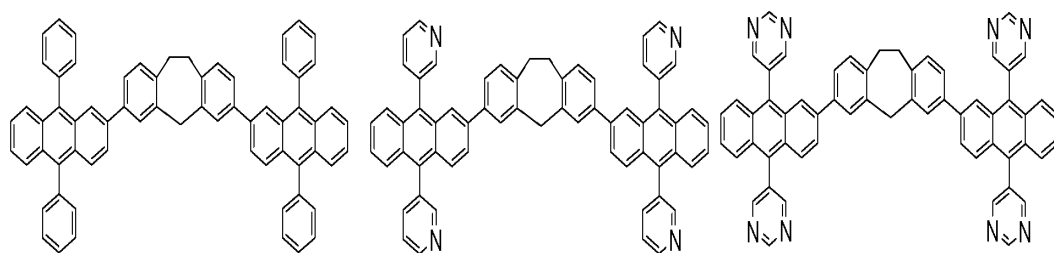
[0079]

[0080]

SSH064

SSH065

SSH066



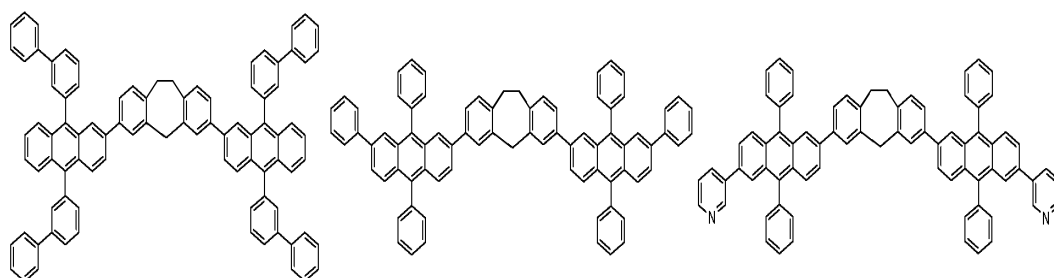
[0081]

[0082]

SSH067

SSH068

SSH069



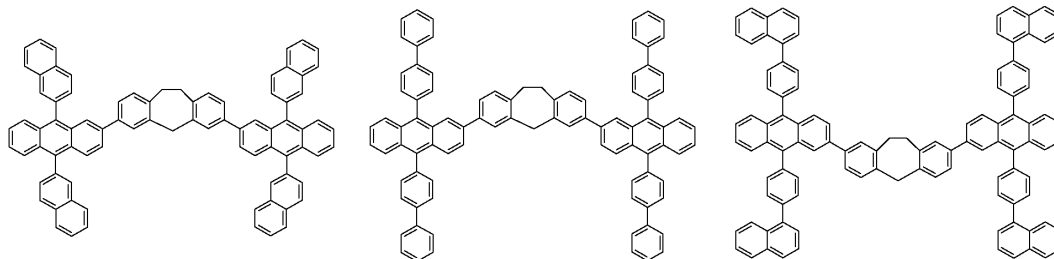
[0083]

[0084]

SSH070

SSH071

SSH072



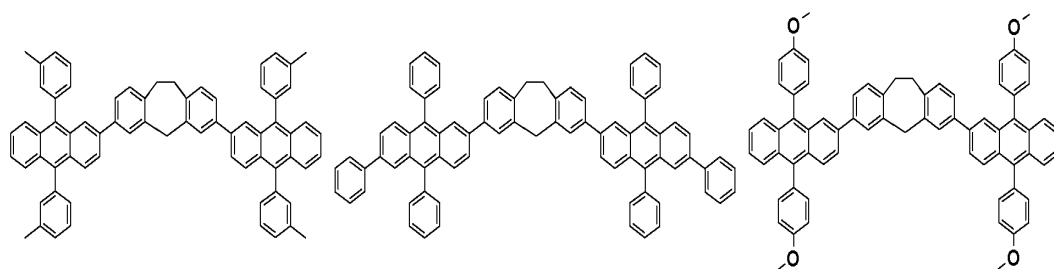
[0085]

[0086]

SSH073

SSH074

SSH075



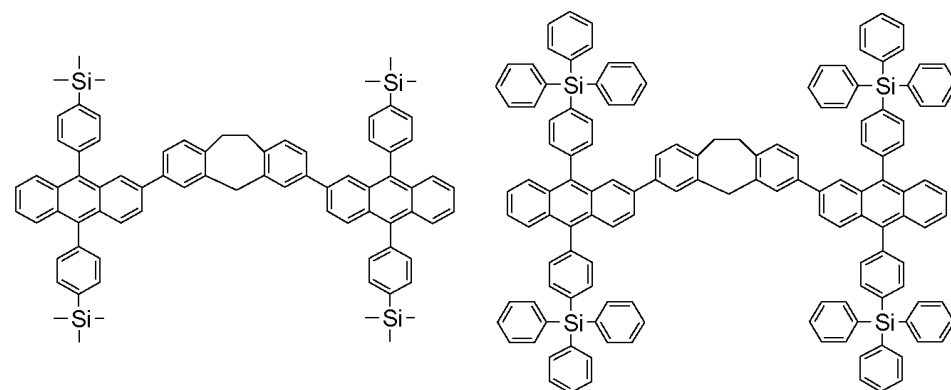
[0087]

[0088]

SSH076

SSH077

SSH078

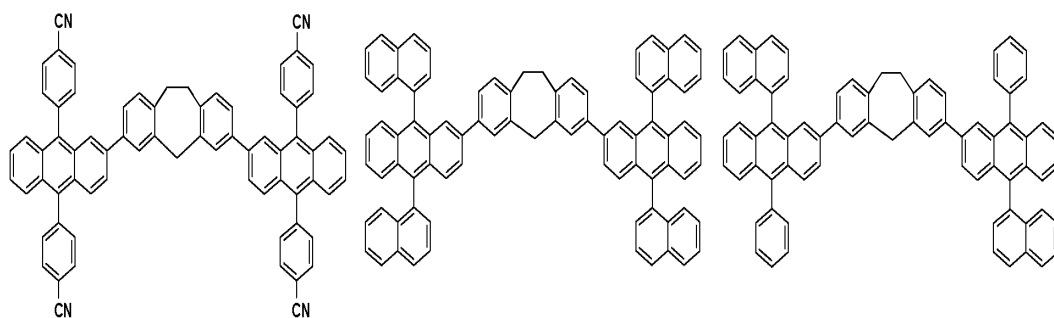


[0089]

[0090]

SSH079

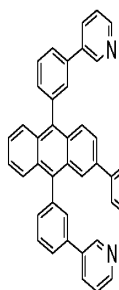
SSH080



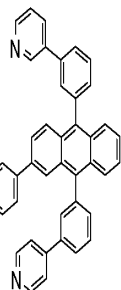
[0091]

[0092]

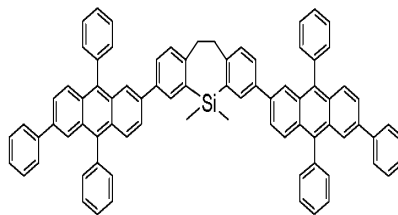
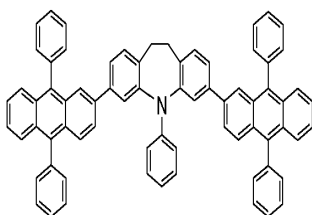
SSH081



SSH082



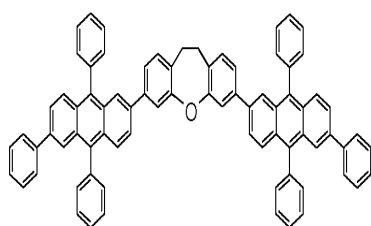
SSH083



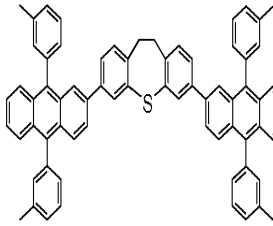
[0093]

[0094]

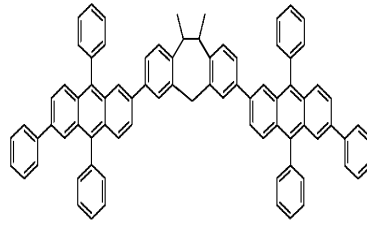
SSH084



SSH085



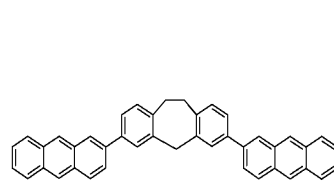
SSH086



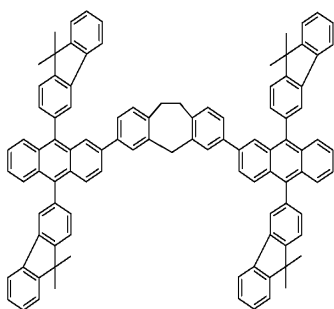
[0095]

[0096]

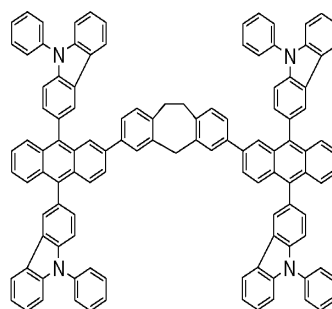
SSH087



SSH088



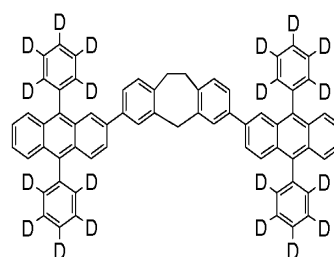
SSH089



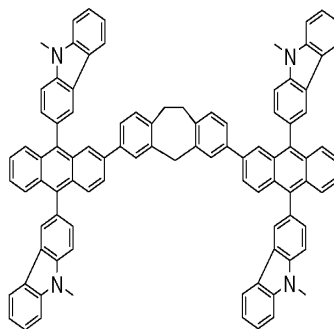
[0097]

[0098]

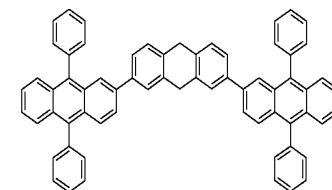
SSH090



SSH091



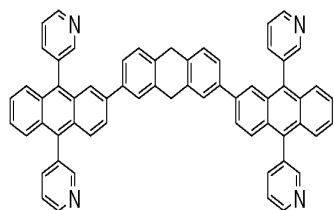
SSH092



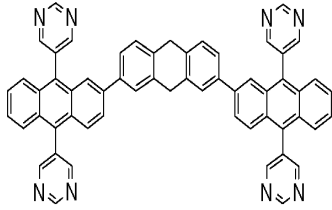
[0099]

[0100]

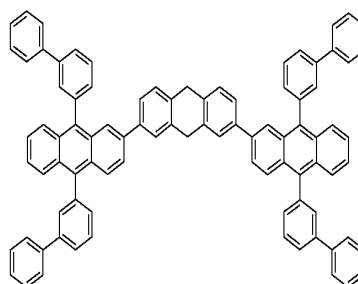
SSH093



SSH094



SSH095



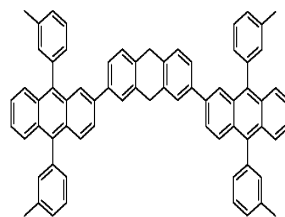
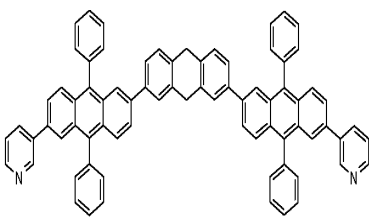
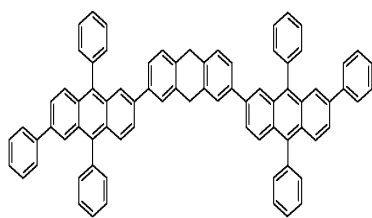
[0101]

[0102]

SSH096

SSH097

SSH098



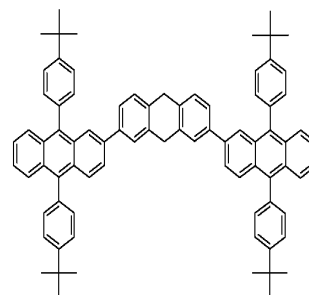
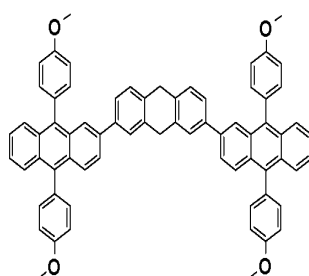
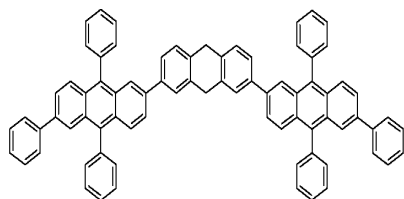
[0103]

[0104]

SSH099

SSH100

SSH101



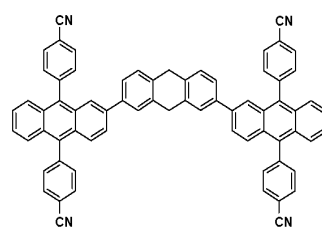
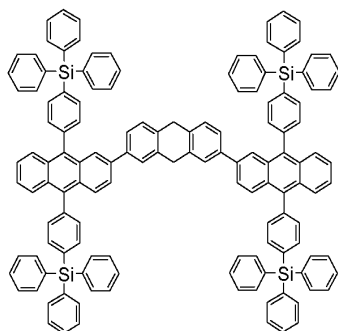
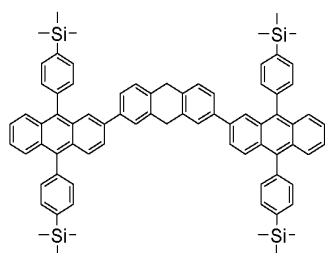
[0105]

[0106]

SSH102

SSH103

SSH104



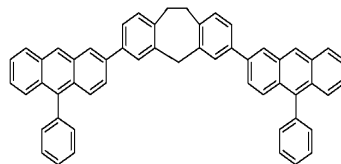
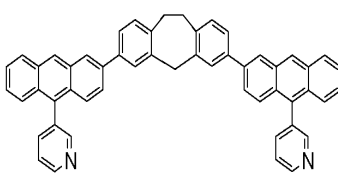
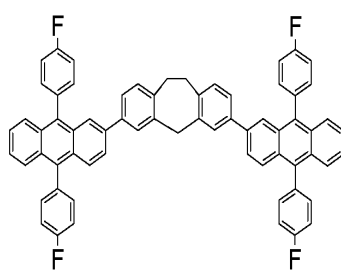
[0107]

[0108]

SSH105

SSH106

SSH107



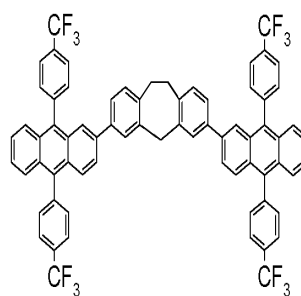
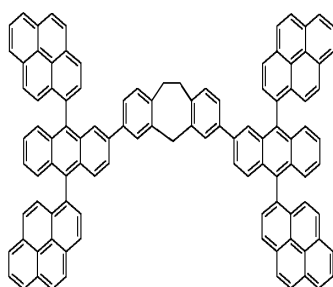
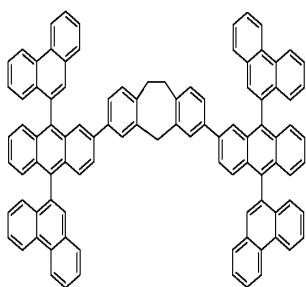
[0109]

[0110]

SSH108

SSH109

SSH110



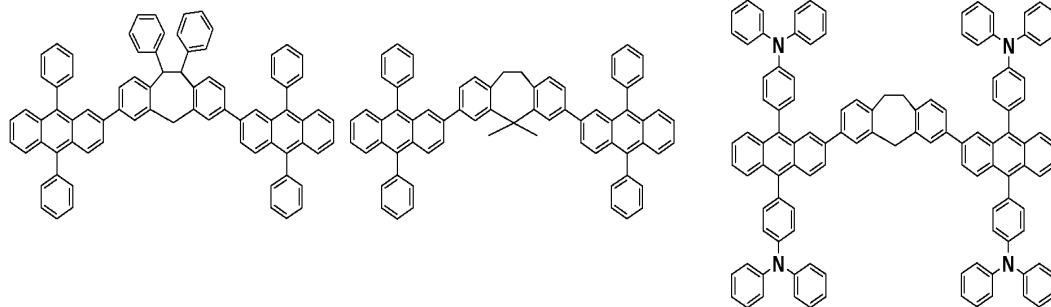
[0111]

[0112]

SSH111

SSH112

SSH113



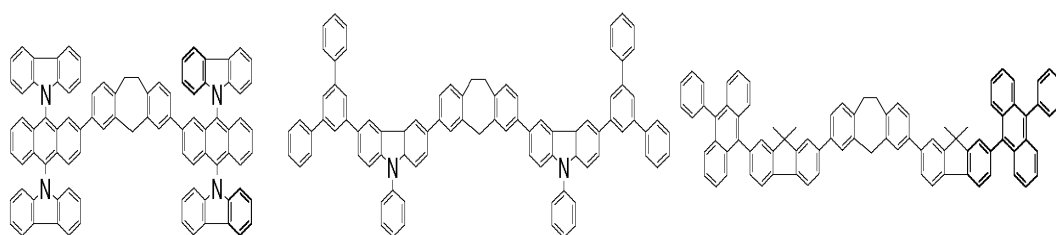
[0113]

[0114]

SSH114

SSH115

SSH116



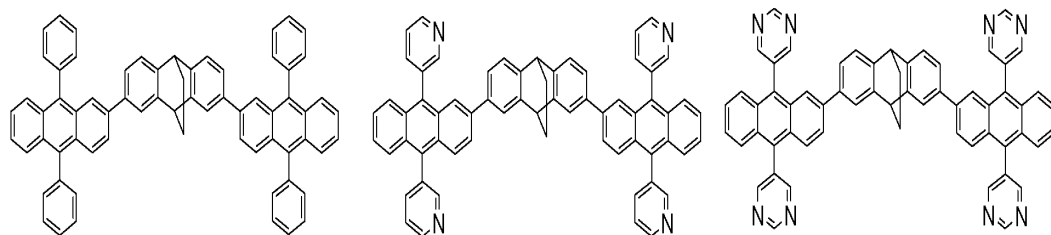
[0115]

[0116]

SSH117

SSH118

SSH119



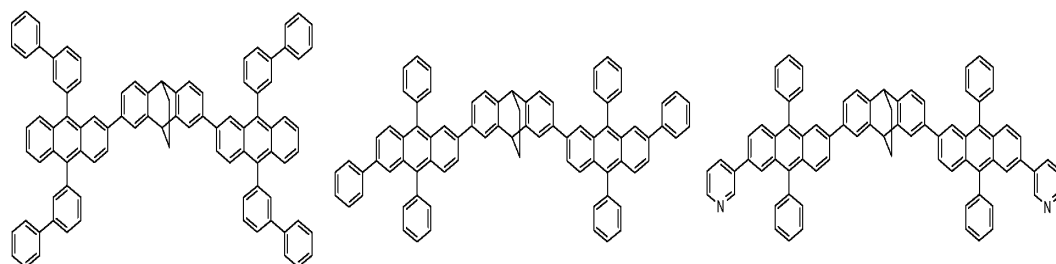
[0117]

[0118]

SSH120

SSH121

SSH122



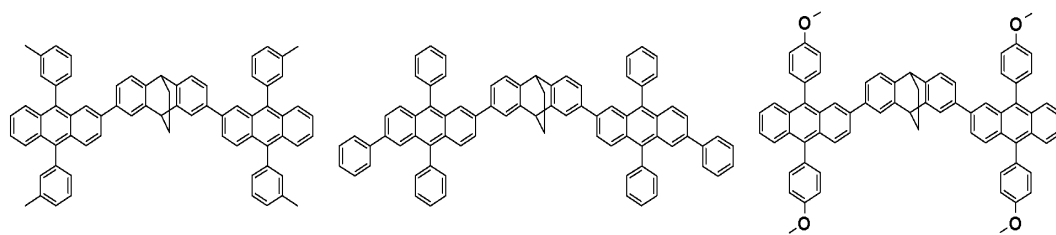
[0119]

[0120]

SSH123

SSH124

SSH125



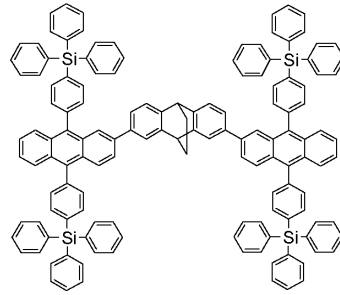
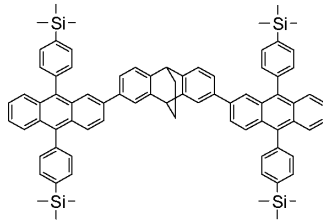
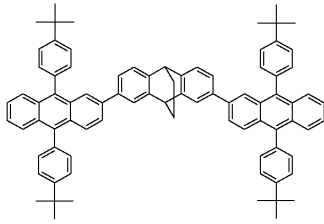
[0121]

[0122]

SSH126

SSH127

SSH128



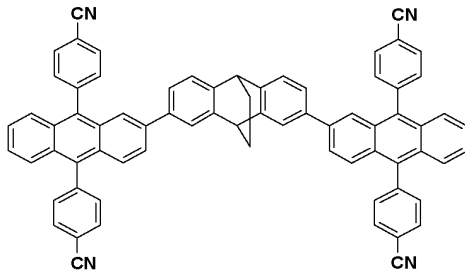
[0123]

[0124]

SSH129

SSH130

SSH131



[0125]

[0126]

SSH132

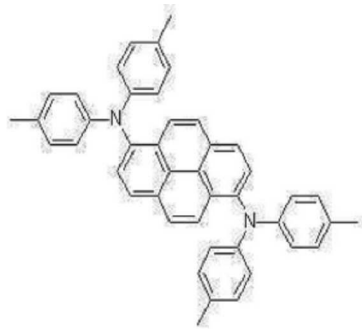
[0127]

또한, 본 발명은 상기 두 번째 기술적 과제를 달성하기 위해서, 애노드; 캐소드; 및 상기 애노드 및 캐소드 사이에 개재된 상기 화학식 (1) 내지 (3)으로 표시되는 발광 화합물을 포함하는 층을 구비한 유기전계발광소자를 제공한다. 또한 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 상기 애노드 및 캐소드 사이에 정공주입층, 정공수송층, 정공저지층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자저지층으로 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함하며, 상기 발광 화합물은 상기 애노드 및 캐소드 사이의 발광층 중에 포함되며, 상기 발광층의 두께는 0.5nm 내지 500nm의 범위를 갖는다.

[0128]

또한 본 발명의 다른 일실시예에 의하면, 상기 발광층은 게스트 화합물로서 하기 화학식 4의 화합물을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자를 제공한다.

[0129]



(4)

효 과

[0130]

본 발명에 따른 발광 화합물은 유기전계발광소자 특히 발광층에 호스트 물질로 사용되는 경우, 유기전계발광소자의 휘도를 향상시키고, 또한 사용 수명을 향상시키므로, 매우 경제적이다.

발명의 실시를 위한 구체적인 내용

[0131]

상술한 바와 같이, 본 발명에 따른 발광 화합물은 아릴기, 헤테로아릴기, 헤테로사이클기 및 아미노기로 구성된 균으로부터 선택된 치환기와 아릴기, 헤테로아릴기 및 헤테로사이클기로 구성된 균으로부터 선택된 치환기가 대칭 형태로 연결된 구조이다.

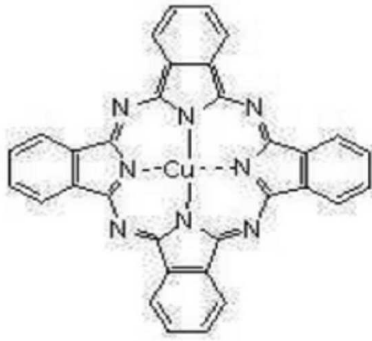
[0132]

특히 본 발명은 상기 양측 대칭을 이루는 작용기가 C, N, S, O, Si 및 Ge로 구성된 균으로부터 선택된 원자단에

의해 연결되어 발광층의 호스트 물질로서 매우 우수한 발광효율, 전력효율, 휘도를 갖는 유기전계발광소자가 가능하며, 더 나아가 사용 수명 또한 길어진다.

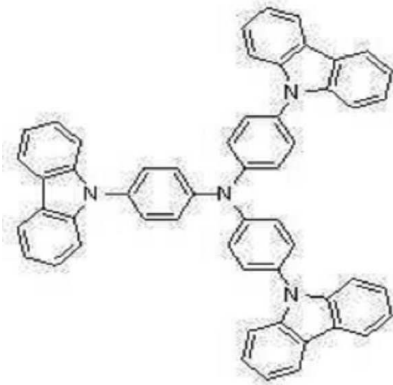
- [0133] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 아릴기는 하나 이상의 고리를 포함하는 카보시클릭 방향족 시스템을 의미하며, 상기 고리들은 펜던트 방법으로 함께 부착되거나 또는 융합(fused)될 수 있다. 아릴기의 구체적인 예로는 페닐, 나프틸, 테트라히드로나프틸 등과 같은 방향족 그룹을 들 수 있고, 상기 아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 실릴기 (이 경우 "알킬실릴기"라 함), 아미노기 ($-NH_2$, $-NH(R)$, $-N(R')(R'')$), R' 과 R'' 은 서로 독립적으로 탄소수 1 내지 10의 알킬기이며, 이 경우 "알킬아미노기"라 함), 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기, 술폰산기, 인산기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로겐화된 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알케닐기, 탄소수 1 내지 24의 알키닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴알킬기로 치환될 수 있다.
- [0134] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 헤테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1, 2 또는 3개의 헤테로 원자를 포함하고, 나머지 고리 원자가 탄소인 탄소수 2 내지 24의 고리 방향족 시스템을 의미하며, 상기 고리들은 펜던트 방법으로 함께 부착되거나 또는 융합(fused)될 수 있다. 그리고 상기 헤테로아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.
- [0135] 본 발명에서 사용되는 치환기인 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있고, 상기 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.
- [0136] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 사이클로알킬기는 탄소수 3 내지 24의 1가 모노사이클릭 시스템을 의미한다. 상기 사이클로알킬기 중 적어도 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.
- [0137] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 알콕시기의 구체적인 예로는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소부틸옥시, sec-부틸옥시, 펜틸옥시, iso-아밀옥시, 헥실옥시 등을 들 수 있고, 상기 알콕시기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.
- [0138] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 실릴기의 구체적인 예로는 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리페닐실릴, 트리메톡시실릴, 디메톡시페닐실릴, 디페닐메틸실릴, 실릴, 디페닐비닐실릴, 메틸사이클로부틸실릴, 디메틸퓨릴실릴 등을 들 수 있고, 상기 실릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.
- [0139] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 아릴옥시기의 구체적인 예로는 페녹시, 나프톡시, 페난트록시, 피록시, 비페녹시 등을 들 수 있고, 상기 아릴옥시기의 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.
- [0140] 또한, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 애노드; 캐소드; 및 상기 애노드 및 캐소드 사이에 개재된 상기 화학식 (1) 내지 (3)으로 표시되는 발광 화합물을 포함하는 층을 구비하는 것이 특징이다. 더 나아가 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 상기 애노드 및 캐소드 사이에 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함할 수도 있는데, 상기 정공주입층, 정공수송층, 전자수송층 및 전자주입층은 정공 또는 전자들을 발광 고분자로 효율적으로 전달시켜 줌으로써 발광 고분자 내에서 발광 결합의 확률을 높이는 역할을 한다.
- [0141] 정공주입층 및 정공수송층은 애노드로부터 정공이 주입되고, 주입된 정공이
- [0142] 수송되는 것을 용이하게 하기 위해서 적층되는 것으로서, 이러한 정공수송층용 물질로는 이온화 포텐셜이 작은 전자공여성 분자들이 사용되는데, 주로 트리페닐아민을 기본골격으로 하는 디아민, 트리아민 또는 테트라아민 유도체가 많이 사용되고 있다. 본 발명에서도, 상기 정공수송층의 재료로서 당업계에 통상적으로 사용되는 것인 한, 다양한 물질을 제한 없이 사용할 수 있으며, 예를 들어, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD) 또는 N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐 벤지딘(a-NPD) 등을 사용할 수 있다. 또한, 상기 정공수송층의 하부에는 정공주입층을 추가적으로 더 적층할 수 있는데, 상기 정공주입층 재료 역시 당업계에서 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있으며, 예를 들어 하기 화학식에 열거된 CuPc (화학식 5) 또는 스타버스트(Starburst)형 아민류인 TCTA (화학식 6), m-MTDATA (화학식 7), IDE406

(이데미쯔사 재료) 등을 사용할 수 있다.



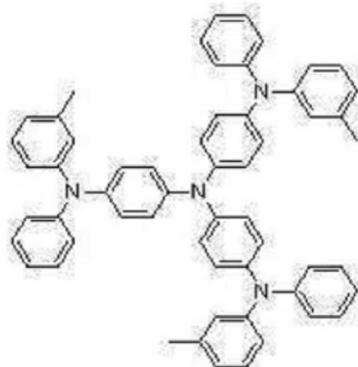
[0143]

(5)



[0144]

(6)



[0145]

(7)

[0146] 한편, 상기 전자수송층은 캐소드로부터 공급된 전자를 발광층으로 원활히 수송하고 상기 발광층에서 결합하지 못한 정공의 이동을 억제함으로써 발광층 내에서 재결합할 수 있는 기회를 증가시키는 역할을 한다. 이러한 전자수송층 재료로는 당업계에서 사용되는 물질인 한 특별히 제한되지 않으며, 예를 들어, 8-히드록시퀴놀린 알루미늄 (Alq₃), PBD(2-(4-비페닐일)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-

[0147] 옥사디아졸), TNF(2,4,7-트리니트로 플루오레논), BMD, BND 등을 사용할 수 있다.

[0148] 한편, 상기 전자수송층의 상부에는 캐소드로부터의 전자 주입을 용이하게 해주어 궁극적으로 파워효율을 개선시키는 기능을 수행하는 전자주입층 (EIL: Electron Injecting Layer)을 더 적층시킬 수도 있는데, 상기 전자주입층 재료 역시 당업계에서 통상적으로 사용되는 것이면 특별한 제한 없이 사용될 수 있으며, 예를 들어, LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO 등의 물질을 이용할 수 있다.

[0149] 더 나아가, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 상기 언급한 정공주입층, 정공수송층, 전자수송층, 발광층 및 전자주입층 이외에도, 정공저지층 또는 전자저지층 등과 같은 부가적 기능성 적층 구조들을 더 포함할 수도 있다. 이때, 정공저지층은 정공이 유기발광층을 통과하여 캐소드로 유입되는 경우에는 소자의 수명과 효율이 감소되기 때문에 HOMO 레벨이 매우 낮은 물질을 사용함으로써 이러한 문제를 방지하는 역할을 한다. 정공저지층을 이루는 물질은 특별히 제한되지는 않으나, 전자수송능력을 가지면서 발광 화합물보다 높은 이온화 포텐셜을 가

저야 하며, 대표적으로 비스(2-메틸-8-퀴놀라토)-(p-페닐페놀라토)-알루미늄(BAlq), 바쏘큐프

[0150] 로인(BCP), 트리스(N-아렌벤지미다졸)(TPBI) 등을 사용할 수 있다.

[0151] 보다 구체적으로, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 다양한 형태의 적층 구조를 갖을 수 있다. 애노드/정공주입층/발광층/캐소드 순으로 적층된 구조를 가질 수 있고, 애노드/정공주입층/발광층/전자주입층/캐소드 순으로 적층된 구조를 가질 수 있다. 또한, 애노드/정공주입층/정공수송층/발광층/캐소드 순으로 적층된 구조를 가질 수 있고, 애노드/정공주입층/정공수송층/발광층/전자주입층/캐소드 순으로 적층된 구조를 가질 수 있다. 마지막으로, 애노드/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/캐소드 순으로 적층된 구조를 가질 수 있다.

[0152] 한편, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 상기 발광 화합물을, 애노드 및 캐소드 사이에 개재되는 다양한 적층 구조 내에 포함할 수 있지만, 바람직하게는, 상기 발광 화합물은 애노드 및 캐소드 사이의 발광층 중에 포함되어, 발광층 호스트 물질로 채용될 수 있다.

[0153] 또한, 상기 발광 화합물을 포함하는 발광층의 두께는 0.5 nm 내지 500 nm일 수 있는데, 두께가 0.5 nm미만인 경우에는 발광 효율이 저하되고, 500 nm를 초과하는 경우에는 구동 전압이 상승되어 바람직하지 못하다.

[0154] 상기 발광층은 호스트 물질로 사용되는 상기 발광 화합물 외에 게스트 물질을 더 포함할 수 있다. 상기 게스트 물질의 구체적인 예로는 피렌계 화합물, 아릴아민, 페릴계 화합물, 피롤계 화합물, 히드라존계 화합물, 카바졸계 화합물, 스틸벤계 화합물, 스타버스트계 화합물, 옥사디아졸계 화합물, 쿠마린(coumarine) 등을 들 수 있는데, 본 발명은 이에 의해 제한되지 아니하며, 상기 화학식 4의 피렌계 화합물을 포함하는 것이 바람직하다.

[0155] 상기 게스트 물질의 함량은 일반적으로 총 유기발광층 형성 재료(호스트 물질 및 게스트 물질) 100 중량부 당 0.1 내지 20 중량부 수준으로 도핑하는 것이 바람직하다. 만약 게스트 물질의 함량이 상기 범위를 벗어나면 EL 소자의 발광 특성이 저하되어 바람직하지 못하다.

[0156] 상기 발광 화합물의 광흡수 파장은 상기 피렌 유도체의 광흡수파장보다 단파장측에 존재하며, 상기 발광 화합물의 주발광파장은 상기 피렌 유도체의 광흡수 파장과 거의 일치하기 때문에, 양자가 상기 유기발광층 내에 함께 존재하게 되면 호스트 물질은 여기 에너지를 게스트 물질로 전달시키면서 자체적으로 발광하지 않고 기저상태로 돌아가고, 여기 상태가 된 게스트 물질만이 여기 에너지를 청색광으로 발광하기 때문에 청색광의 발광효율이 우수해질 수 있다.

[0157] 또한, 일반적으로 박막 중에 발광 분자 사이에서 상호작용이 일어나고 농도소광 이라고 불리우는 발광 효율 저하 현상이 발생할 수 있게 되지만, 상기 유기발광층 내에 호스트 물질과 게스트 물질을 함께 사용하게 되면 게스트 물질이 비교적 저농도로 분산될 수 있으므로 상기와 같은 농도소광 현상을 효과적으로 억제할 수 있다.

[0158] 이하, 본 발명에 따른 유기전계발광소자를 제조하는 방법을 설명하기로 한다.

[0159] 먼저, 기판 상부에 애노드용 물질을 코팅한다. 기판으로는 통상적인 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용하는데, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 또한, 애노드 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석 (Indium Tin Oxide ; ITO, 이하 ITO라 함.), 산화인듐아연 (Indium Zinc Oxide ; IZO, 이하 IZO라 함.), 산화주석 (SnO₂) 또는 산화아연 (ZnO) 등의 당업계에 통상적으로 사용되고 있는 물질들이 사용될 수 있다. 상기 애노드 상부로는 정공주입층이 진공 열증착 또는 스퍼코팅 등의 방법에 의해서 선택적으로 적층되며, 그 다음으로 상기 정공주입층 상부에 정공수송층을 진공 열증착 또는 스퍼코팅 등의 방법에 의해서 형성된다.

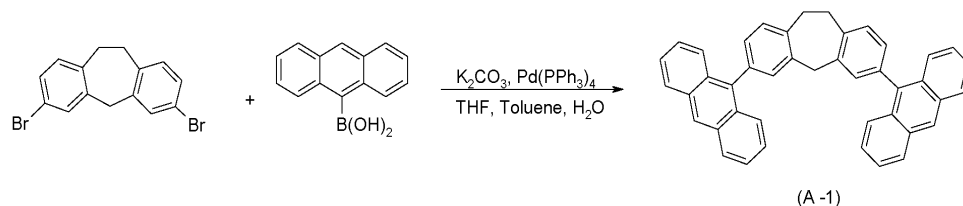
[0160] 다음으로는, 상기 정공수송층 상부에 발광층을 적층한 후, 그 위에 선택적으

[0161] 로 정공저지층을 진공 열증착 또는 스퍼코팅 방법에 의해서 형성한다. 마지막으로, 이러한 정공저지층 위에 전자수송층을 진공 열증착 또는 스퍼코팅 방법을 통해 증착한 후에 전자주입층을 선택적으로 형성하고, 상기 전자주입층 상부에 캐소드 형성용 금속을 진공 열증착함으로써 본 발명에 따른 유기전계발광소자를 제조할 수 있게 된다. 한편, 캐소드 형성용 금속으로는, 리튬 (Li), 마그네슘 (Mg), 알루미늄 (Al), 알루미늄-리튬 (Al-Li), 칼슘 (Ca), 마그네슘-인듐 (Mg-In), 마그네슘-은 (Mg-Ag) 등을 사용할 수 있으며, 전면발광소자를 얻기 위해서는 ITO, IZO를 사용한 투과형 캐소드를 사용할 수도 있다.

[0162] 이하, 본 발명을 하기 합성 를 통하여 본 발명을 보다 상세하게 설명하고자 하나, 하기의 합성 는 단지 설명의 목적을 위한 것으로 본 발명을 제한하기 위한 것은 아니다.

[0163] 합성예 1. SSH004의 합성

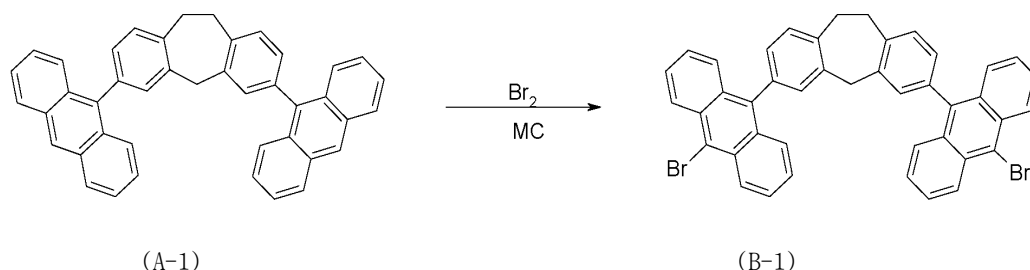
[0164] 합성예 1-(1): 2,7-디(9'-안트라센닐)디벤조수베란의 합성



[0165]

[0166] 2L 둥근 바닥 플라스크에 다이브로모디벤조수베란 10.0g (0.028mol), 안트라센보론산 15.8g(0.071mol), Pd(PPh₃)₄ 1.6g (0.001mol), K₂CO₃ 9.81g (0.071mmol), 톨루엔 200ml, 테트라하이드로퓨란(THF) 50ml, 물 50ml을 모두 넣고 교반하면서 하루 동안 환류시켰다. 반응이 종결된 후 메탄올을 넣어 고체를 생성시켰다. 생성된 고체를 여과하여, 톨루엔으로 재결정하였다. 그 결과 7.5g (0.014mol, 수율 48.3%)의 황토색 고체를 얻었다.

[0167] 합성예 1-(2): 2,7-디(10'-브로모-9'-안트라세닐)디벤조수베란의 합성

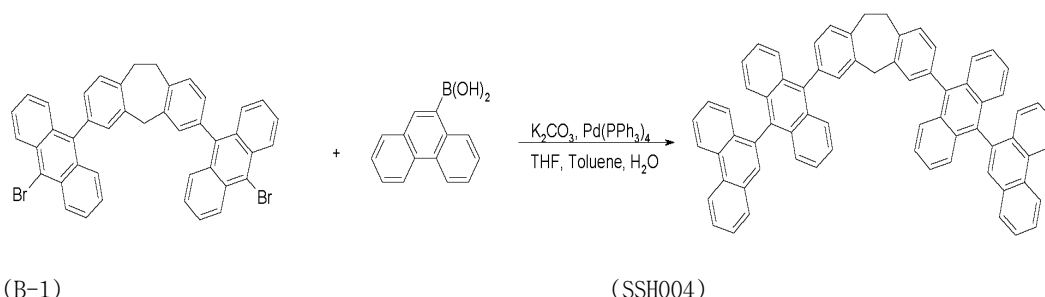


[0168]

[0169]

[0170] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성 1-1 에서 제조한 화합물 (A-1) 5.0g (0.009mol)과 디클로로메탄 (MC) 50ml를 넣고 교반하였다. 온도를 0℃이하로 낮춘 후 디클로로메탄 25ml에 녹인 브롬 3.2g (0.020mol)을 아주 천천히 적가하였다. 10분동안 교반한 후 상온에서 하루 동안 교반시켰다. 반응이 종결된 후, 물을 넣어 추출하였고, 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하였다. 생성된 고체를 실리카겔크로마토그래피를 사용하여 정제하였고, 그 결과 3.0g (0.004mol, 수율 46.68%)의 연노란색 고체를 얻었다.

[0171] 합성예 1-(3): 2,7-디(9'-(5''-페안트세닐)-10'-안트라세닐)디벤조수베란의 합성



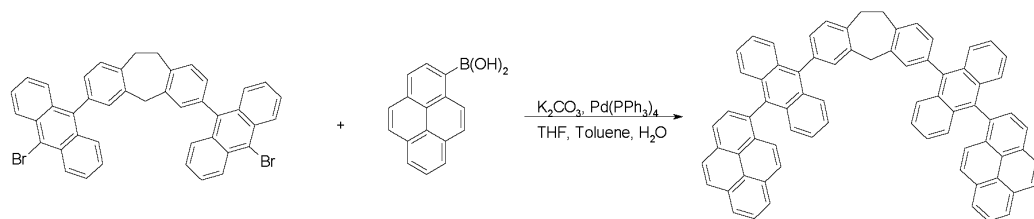
[0172]

[0173]

[0174] 100ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성 1-2에서 제조한 화합물 (B-1) 4.0g (0.006mol), Phenanthrene boronic acid 3.2g (0.014mol), Pd(PPh₃)₄ 0.3g (0.3mmol), K₂CO₃ 4.72g (0.034mmol), 톨루엔 40ml, 테트라하이드로퓨란 (THF) 10ml, 물 10ml을 모두 넣고 교반하면서 하루 동안 환류시켰다. 반응이 종결된 후 메탄올을 넣어 고체를 생성시켰다. 생성된 고체를 여과하여, 디클로로벤젠으로 재결정하였다. 그 결과 2.0g (0.002mol, 수율 39.07%)의 연노란색 고체를 얻었다.

[0175] 합성예 2: SSH009의 합성

[0176] 합성예 2-(1): 2,7-디(9'-(1''-피레닐)-10'-안트라센닐)디벤조수베란의 합성



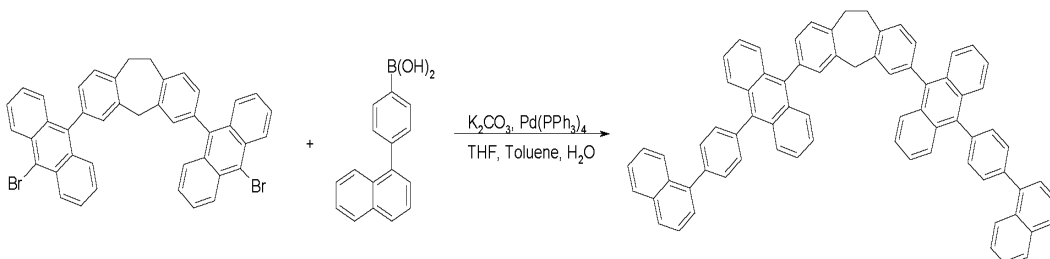
[0177]

[0178] (B-1) (SSH009)

[0179] 100ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성 1-2에서 제조한 화합물 (B-1) 3.0g (0.004mol), 피렌보론산 2.6g (0.011mol), Pd(PPh₃)₄ 0.2g (0.2mmol), K₂CO₃ 3.54g (0.026mmol), 톨루엔 (Toluene) 60ml, THF 15ml, 물 15ml 을 모두 넣고 교반하면서 하루동안 환류시켰다. 반응이 종결된 후 메탄올을 넣어 고체를 생성시켰다. 생성된 고체를 여과하여, 디클로로벤젠으로 재결정하였다. 그 결과 1.0g (0.001mol, 수율 24.68%)의 연노란색 고체를 얻었다.

[0180] 합성예 3: SSH010의 합성

[0181] 합성예 3-(1): 2,7-디(9'-(4''-(1'''-나프틸)페닐)-10'-안트라센닐)디벤조수베란의 합성



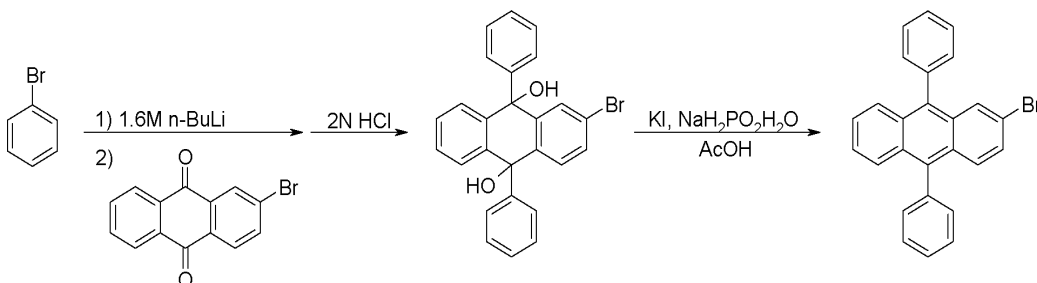
[0182]

[0183] (B-1) (SSH010)

[0184] 100ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성 1-2에서 제조한 화합물 (B-1) 3.0g (0.004mol), 4-나프틸벤젠-1-보론산 2.7g (0.011mol), Pd(PPh₃)₄ 0.2g (0.2mmol), K₂CO₃ 3.54g (0.026mmol), 톨루엔 60ml, THF 15ml, 물 15ml을 모두 넣고 교반하면서 하루 동안 환류시켰다. 반응이 종결된 후 메탄올을 넣어 고체를 생성시켰다. 생성된 고체를 여과하여, 톨루엔으로 재결정하였다. 그 결과 2.0g (0.002mol, 수율 49.21%)의 연노란색 고체를 얻었다.

[0185] 합성예 4: SSH067의 합성

[0186] 합성예 4-(1): 2-브로모-9,10-디페닐안트라센의 합성



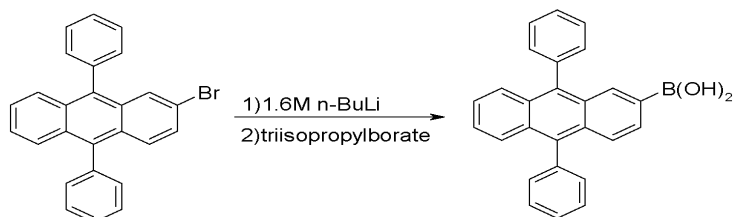
[0187]

[0188] (C-1)

[0189] 2L 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 브로모벤젠 164.1g (1.045 mol)과 (THF) 700ml를 넣었다. 온도를 -78℃까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 227.5ml (1.045mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분 동안 교반을 하고, 2-브로모안트라퀴논 100g (0.348mol)을 THF 300ml에 녹여 빠른속도로 넣어주었다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 2N 염산 200ml을 넣어 산성으로 맞추고, 농축시켰다. 농축한 반응물을 2L 둥근 바닥 플라스크에 넣어 KI 173.45g (1.045mol), NaH₂PO₂H₂O 221.50g (2.090mol), 초산 1000ml

과 함께 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 실온으로 낮추고, 생성된 고체를 여과하여 메탄올로 씻어주며, 톨루엔으로 재결정하였다. 그 결과 40.0g (0.097mol, 수율 27.94%)의 황토색 고체를 얻었다.

[0190] 합성예 4-(2): 9,10-디페닐-2-안트라센닐보론산의 합성



[0191]

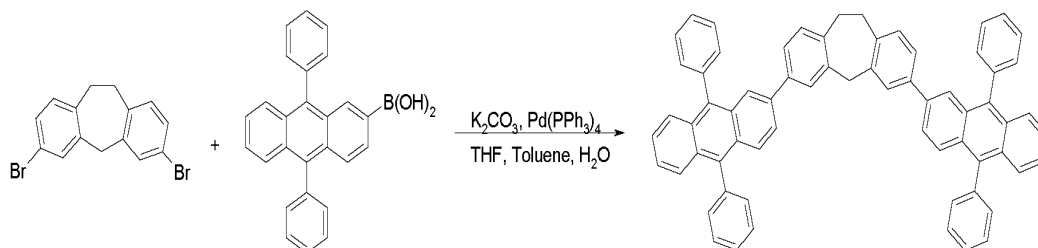
[0192]

[0193]

250ml 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 상기 합성 4-1에서 제조한 화합물 (C-1) 40.00g (0.098mol)과 THF 400ml를 넣었다. 온도를 -78℃까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 67.18ml(0.107mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분동안 교반을 하고, 트리이소프로필보레이트 33.70g (0.147 mol)를 적가하였다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응 종결되면, 2N 염산 100ml을 넣어 산성으로 맞추고, 에틸아세테이트와 물로 추출하고, MgSO₄로 물을 제거한 후, 농축하였다. 농축한 용액을 헥산으로 재결정하였다. 그 결과 20.0g (0.05mol, 수율 54.7%)의 하얀색 고체를 얻었다.

[0194]

합성예 4-(3): 2,7-디(9'-10'-디페닐-2'-안트라센닐)디벤조수베란의 합성



[0195]

[0196]

[0197]

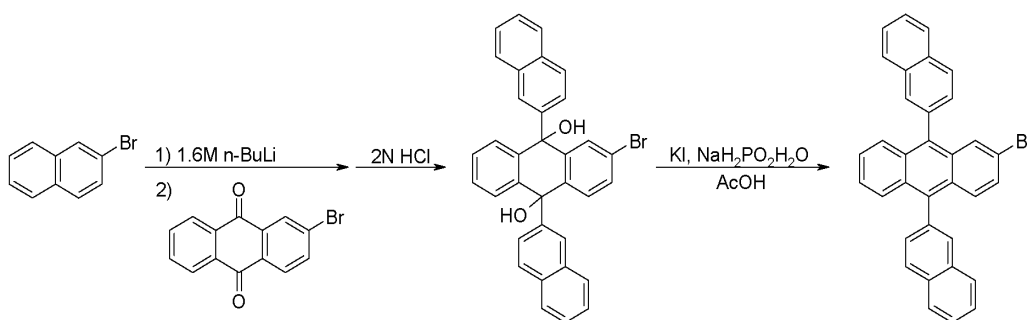
250ml 둥근 바닥 플라스크에 다이브로모디벤조수베란 3.00g (9mmol), 상기 합성 4-2에서 제조한 화합물 (D-1) 9.57g (26mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.39g (0.3 mmol), K₂CO₃ 4.71g (34mmol), THF 30ml, 톨루엔 (Toluene) 60ml, 물 15 ml을 모두 넣고 교반하면서 하루 동안 환류시켰다. 반응이 종결 된 후 고체를 여과 하고, 여액을 톨루엔과 물로 추출하였다. 추출한 후 MgSO₄로 제거한 후, 농축하였다. 메탄올로 고체를 생성시키고, 생성된 고체는 실리카겔 크로마토그래피를 사용하여 정제하고, 톨루엔으로 재결정하여 상기 반응순서도의 구조를 가지며 연노란색의 고체 화합물 2.0g (2.74mmol, 수율 27.6 %)을 얻었다.

[0198]

합성예 5: SSH073의 합성

[0199]

합성 5-(1): 2-브로모-9,10-디(2'-나프틸)안트라센의 합성



[0200]

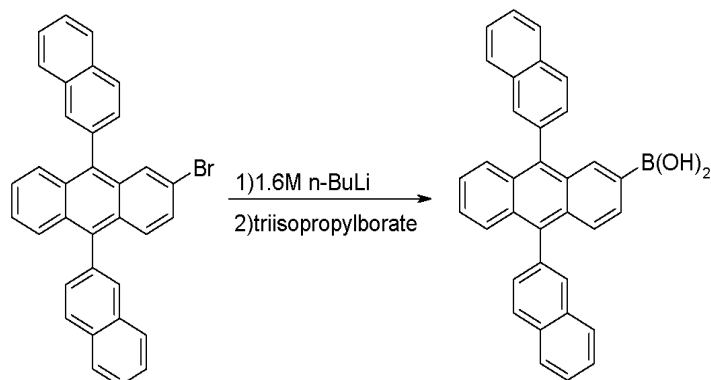
[0201]

(E-1)

[0202] 500ml 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 2-나프틸벤젠 43.3g (0.209

[0203] mol)과 THF 100ml를 넣었다. 온도를 -78℃까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 9.1ml (0.209mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분 동안 교반을 하고, 2-브로모안트라퀴논 20 g (0.070 mol)을 티에이치 에프 100ml에 녹여 빠른속도로 넣어주었다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 2N 염산 100ml을 넣어 산성으로 맞추고, 농축시켰다. 농축한 반응물을 500ml 둥근 바닥 플라스크에 넣어 KI 34.69g (0.209mol), NaH₂PO₂·H₂O 44.30g (0.418mol), 초산 200ml 과 함께 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 실온으로 낮추고, 생성된 고체를 여과하여 메탄올로 씻어주며, 톨루엔으로 재결정하였다. 그 결과 18.0g (0.043mol, 수율 61.6%)의 황토색 고체를 얻었다.

[0204] 합성예 5-(2): 9,10-디(2'-나프틸)-2-안트라센닐보론산의 합성

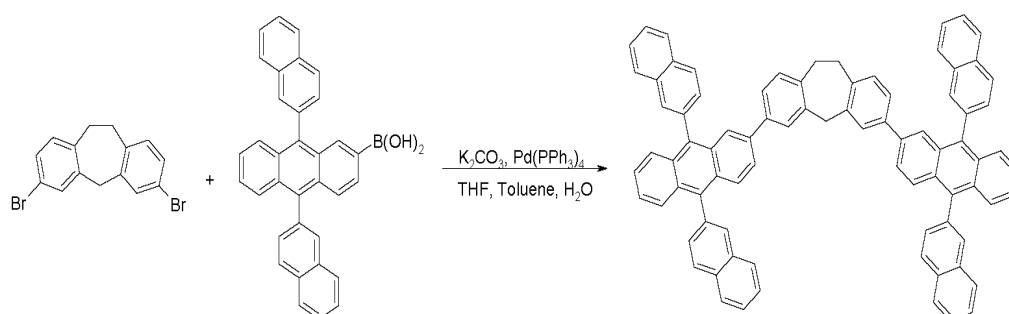


[0205]

[0206]

[0207] 250ml 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 상기 합성 5-1에서 제조한 화합물 (E-1) 21.60g (0.042 mol)과 THF 216ml를 넣었다. 온도를 -78℃까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 29.15ml(0.047mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분동안 교반을 하고, 트리이소프로필보레이트 14.62g (0.064mol)를 적가하였다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 2N 염산 100ml을 넣어 산성으로 맞추고, 에틸아세테이트와 물로 추출하고, MgSO₄로 물을 제거한 후, 농축하였다. 농축한 용액을 헥산으로 재결정하였다. 그 결과 12.3g (0.03mol, 수율 61.2%)의 하얀색 고체를 얻었다.

[0208] 합성예 5-(3): 2,7-디(9'-10'-디(2'''-나프틸)-2'-안트라센닐)디벤조수베란의 합성



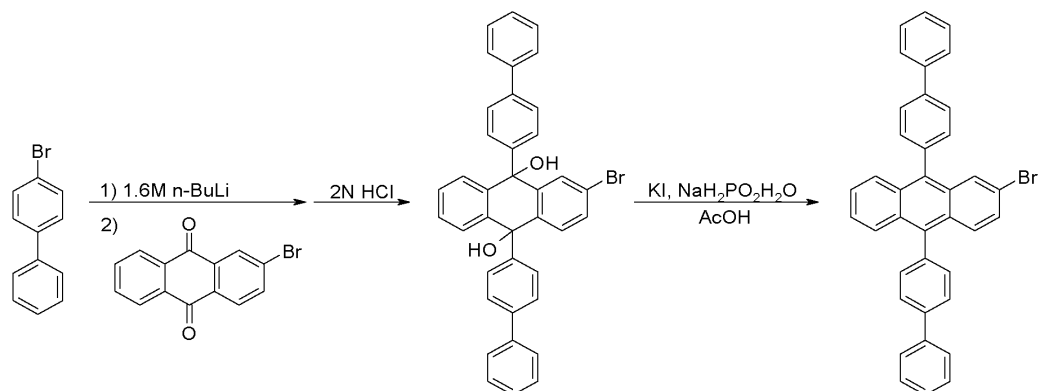
[0209]

[0210]

[0211] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 다이브로모디벤조수베란 3.00g (9mmol), 상기 합성 5-2에서 제조한 화합물 (F-1) 12.13g (26mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.39g (0.3 mmol), K₂CO₃ 4.71g (34mmol), THF 30ml, 톨루엔 (Toluene) 60ml, 물 15 ml을 모두 넣고 교반하면서 하루 동안 환류시켰다. 반응이 종결 된 후 고체를 여과 하고, 여액을 톨루엔과 물로 추출하였다. 추출한 후 MgSO₄로 제거한 후, 농축하였다. 메탄올로 고체를 생성시키고, 생성된 고체는 실리카겔크로마토그래피를 사용하여 정제하고, 톨루엔으로 재결정하여 상기 반응순서도의 구조를 가지며 연노란색의 고체 화합물 2.8g (3.00mmol, 수율 37.7%)을 얻었다.

[0212] 합성예 6: SSH074의 합성

[0213] 합성예 6-(1): 2-브로모-9,10-디(4'-비페닐)안트라센의 합성



(G-1)

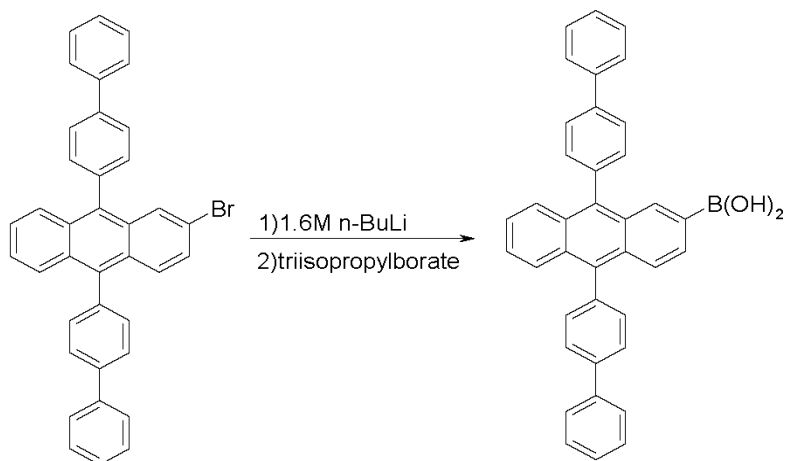
[0214]

[0215]

[0216] 500ml 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 4-브로모비페닐 73.1g

[0217] (0.313 mol)과 THF 200ml를 넣었다. 온도를 -78℃까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 20.5ml(0.313mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분 동안 교반을 하고, 2-브로모안트라퀴논 30.0g (0.104mol)을 THF 100ml 에 녹여 빠른속도로 넣어주었다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 2N 염산 150ml을 넣어 산성으로 맞추고, 농축시켰다. 농축한 반응물을 500ml 둥근 바닥 플라스크에 넣어 KI 52.04g (0.313mol), NaH₂PO₂·H₂O 66.45g (0.627mol), 초산 300ml 과 함께 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 실온으로 낮추고, 생성된 고체를 여과하여 메탄올로 씻어주며, 톨루엔으로 재결정하였다. 그 결과 40.0g (0.071mol, 수율 68.2%)의 황토색 고체를 얻었다.

[0218] 합성예 6-(2): 9,10-디(4'-비페닐)-2-안트라센닐보론산의 합성



(G-1)

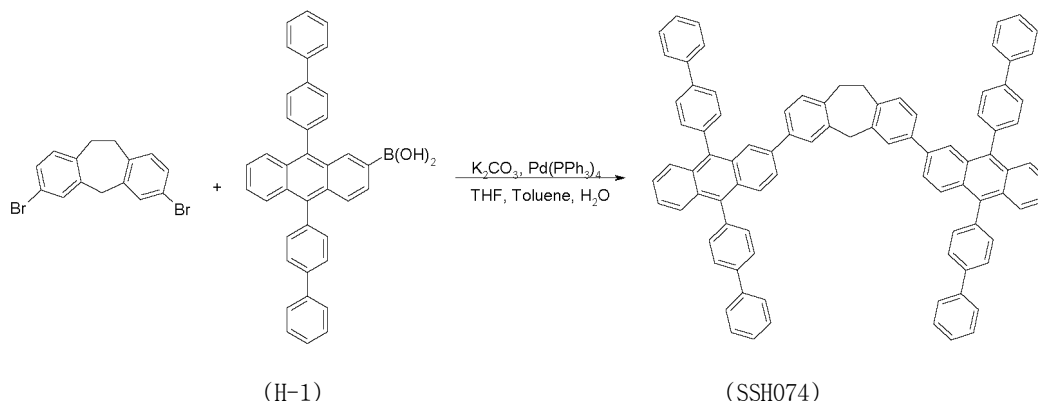
(H-1)

[0219]

[0220]

[0221] 1L 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 상기 합성 6-1에서 제조한 화합물 (G-1) 40.00g (0.071mol)과 THF 400ml를 넣었다. 온도를 -78℃까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 49.0 ml (0.078mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분동안 교반을 하고, 트리이소프로필보레이트 24.6 g (0.107 mol)를 적가하였다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 2N 염산 150ml을 넣어 산성으로 맞추고, 에틸아세테이트와 물로 추출하고, MgSO₄로 물을 제거한 후, 농축하였다. 농축한 용액을 헥산으로 재결정하였다. 그 결과 26.0g (0.05mol, 수율 69.3%)의 하얀색 고체를 얻었다.

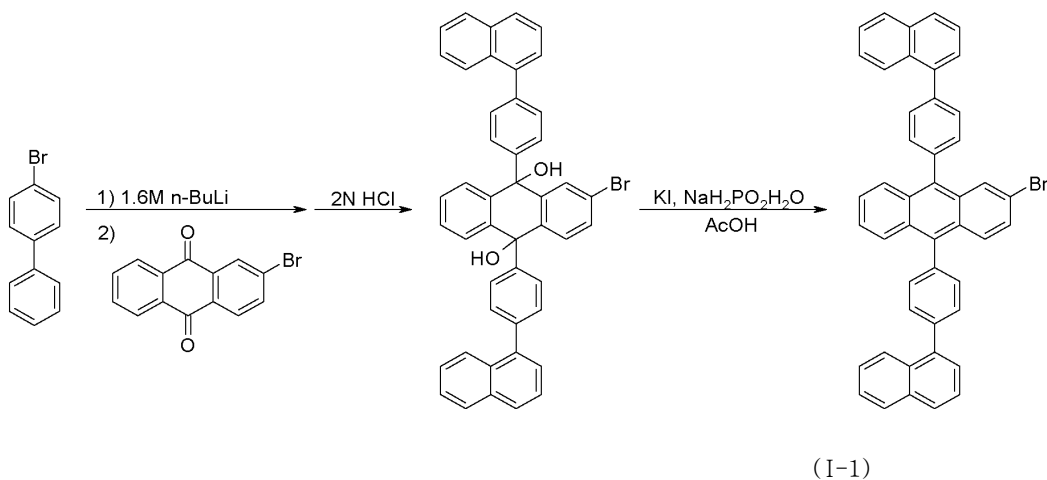
[0222] 합성예 6-(3): 2,7-디(9'-10'-디(4'''-비페닐)-2'-안트라센닐)디벤조수베란의 합성



[0225] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 다이브로모디벤조수베란 3.00g (9 mmol), 상기 합성 6-2에서 제조한 화합물 (H-1) 13.46g (26mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.39g (0.3mmol), K₂CO₃ 4.71g (34mmol), THF 30ml, 톨루엔 (Toluene) 60ml, 물 15ml을 모두 넣고 교반하면서 하루 동안 환류시켰다. 반응이 종결 된 후 고체를 여과하고, 여액을 톨루엔과 물로 추출하였다. 추출한 후 MgSO₄로 제거한 후, 농축하였다. 메탄올로 고체를 생성시키고, 생성된 고체는 실리카 겔크로마토그래피를 사용하여 정제하고, 톨루엔으로 재결정하여 상기 반응순서도의 구조를 가지며 연노란색의 고체 화합물 3.1g (4.00mmol, 수율 41.8%)을 얻었다.

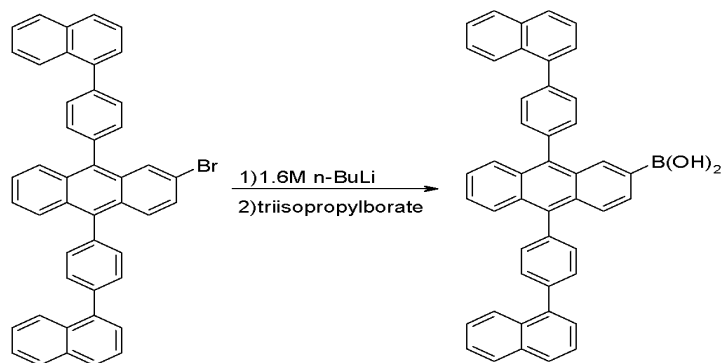
[0226] 합성예 7: SSH075의 합성

[0227] 합성예 7-(1): 2-브로모-9,10-디(4'-(1'-나프틸)페닐)안트라센의 합성



[0230] 1L 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 1-브로모-4-(1'-나프틸)벤젠 88.8g (0.313 mol)과 THF 200ml를 넣었다. 온도를 -78℃까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 20.5ml(0.313mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분 동안 교반을 하고, 2-브로모안트라퀴논 30.0g (0.104mol)을 THF 100 ml 에 녹여 빠른속도로 넣어주었다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 2N 염산 150ml을 넣어 산성으로 맞추고, 농축시켰다. 농축한 반응물을 500ml 둥근 바닥 플라스크에 넣어 KI 52.04g (0.313mol), NaH₂PO₂·H₂O 66.45g (0.627mol), 초산 300ml 과 함께 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 실온으로 낮추고, 생성된 고체를 여과하여 메탄올로 씻어주며, 톨루엔으로 결정하였다. 그 결과 41.6g (0.063mol, 수율 60.2%)의 황토색 고체를 얻었다.

[0231] 합성예 7-(2): 9,10-디(4'-(1'''-나프틸)페닐)-2-안트라센닐보론산의 합성



(I-1)

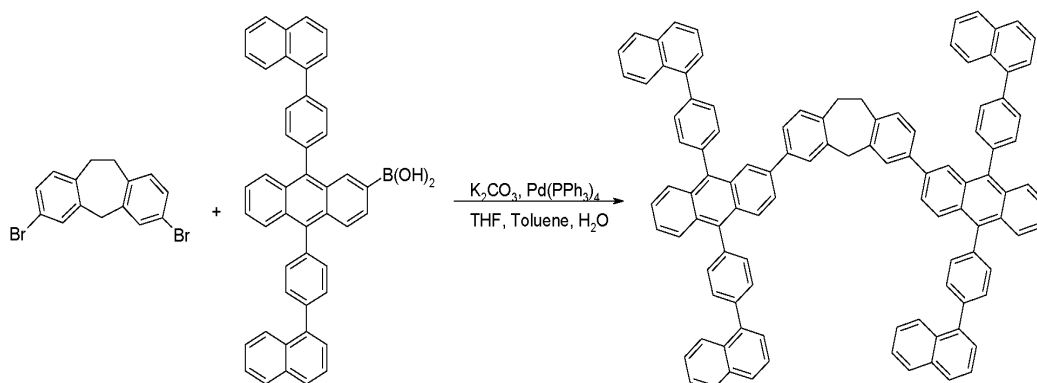
(J-1)

[0232]

[0233]

[0234] 1L 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 상기 합성 7-1에서 제조한 화합물 (I-1) 41.60g (0.063mol)과 THF 416ml를 넣었다. 온도를 -78℃까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 43.23ml(0.069mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분동안 교반을 하고, 트리이소프로필보레이트 21.68g (0.094 mol)를 적가하였다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 2N 염산 200ml을 넣어 산성으로 맞추고, 에틸아세테이트와 물로 추출하고, MgSO₄로 물을 제거한 후, 농축하였다. 농축한 용액을 헥산으로 결정하였다. 그 결과 26.0g (0.04mol, 수율 66.00%)의 하얀색 고체를 얻었다.

[0235] 합성예 7-(3): 2,7-디(9'-10'-디(4'-(1'''-나프틸)페닐)-2'-안트라센닐)디벤조수베란의 합성



(J-1)

(SSH075)

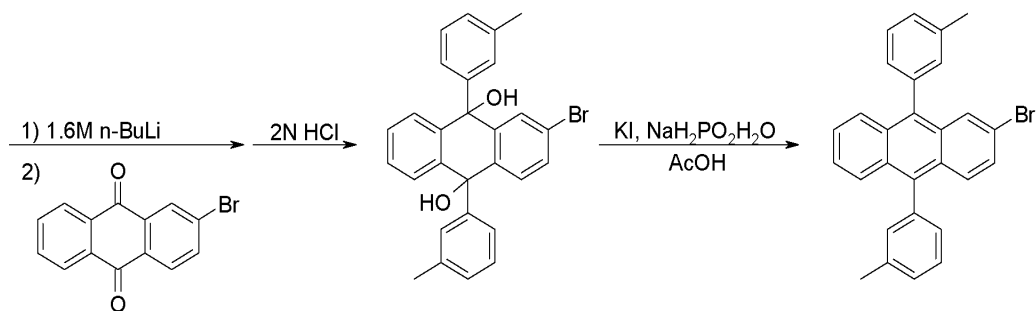
[0236]

[0237]

[0238] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 다이브로모디벤조수베란 3.00g (9mmol), 상기 합성 7-2에서 제조한 화합물 (J-1) 16.02g (26mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.39g (0.3mmol), K₂CO₃ 4.71g (34mmol), THF 30ml, 톨루엔 (Toluene) 60ml, 물 15ml을 모두 넣고 교반하면서 하루 동안 환류시켰다. 반응이 종결 된 후 고체를 여과하고, 여액을 톨루엔과 물로 추출하였다. 추출한 후 MgSO₄로 제거한 후, 농축하였다. 메탄올로 고체를 생성시키고, 생성된 고체는 실리카 겔크로마토그래피를 사용하여 정제하고, 톨루엔으로 재결정하여 상기 반응순서도의 구조를 가지며 연노란색의 고체 화합물 5.5g (4.00mmol, 수율 47.61%)을 얻었다.

[0239] 합성예 8: SSH076의 합성

[0240] 합성예 8-(1): 2-브로모-9,10-디(3'-메틸페닐)안트라센의 합성



[0241]

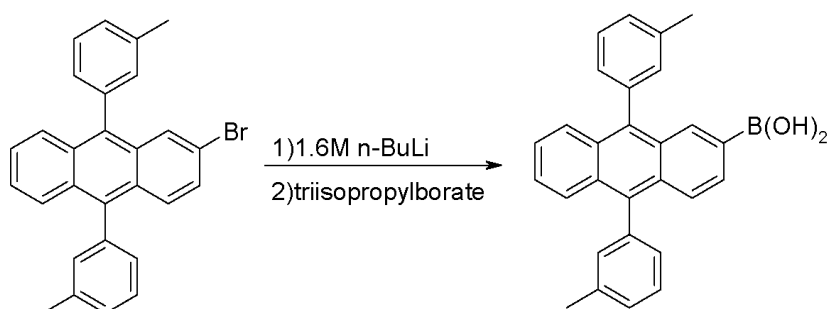
[0242]

(K-1)

[0243]

1L 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 3-브로모톨루엔 53.6g (0.313 mol)과 THF 200ml를 넣었다. 온도를 -78℃까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 20.5ml(0.313mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분 동안 교반을 하고, 2-브로모안트라퀴논 30.0g (0.104mol)을 THF 100 ml에 녹여 빠른속도로 넣어주었다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 2N 염산 150ml을 넣어 산성으로 맞추고, 농축시켰다. 농축한 반응 물을 500ml 둥근 바닥 플라스크에 넣어 KI 52.04g (0.313mol), NaH₂PO₂·H₂O 66.45g (0.627mol), 초산 300ml과 함께 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 실온으로 낮추고, 생성된 고체를 여과하여 메탄올로 씻어주며, 톨루엔으로 재결정하였다. 그 결과 31.7g (0.073mol, 수율 69.4%)의 황토색 고체를 얻었다.

[0244] 합성예 8-(2): 9,10-디(3'-메틸페닐)-2-안트라센닐보론산의 합성



[0245]

[0246]

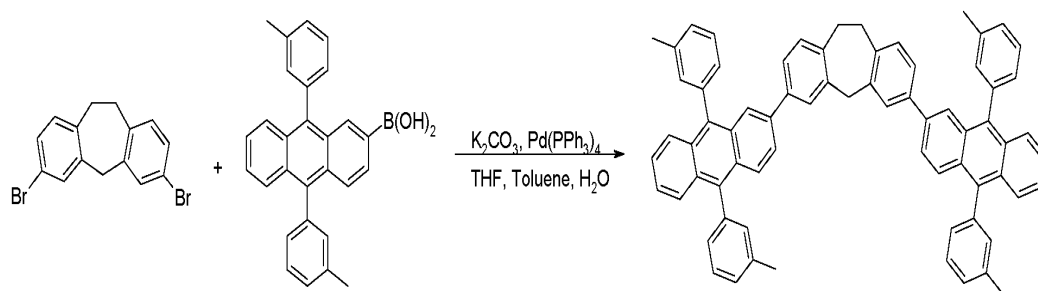
(K-1)

(L-1)

[0247]

1L 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 상기 합성 8-1에서 제조한 화합물 (K-1) 31.70g (0.063mol)과 THF 317ml를 넣었다. 온도를 -78℃까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 49.83ml (0.080mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분동안 교반을 하고, 트리이소프로필보레이트 25.00g (0.109mol)를 적가하였다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 2N 염산 200ml을 넣어 산성으로 맞추고, 에틸아세테이트와 물로 추출하고, MgSO₄로 물을 제거한 후, 농축하였다. 농축한 용액을 헥산으로 재결정하였다. 그 결과 12.9g (0.03mol, 수율 44.2%)의 하얀색 고체를 얻었다.

[0248] 합성예 8-(3). 2,7-디(9'-10'-디(3''-메틸페닐)-2'-안트라센닐)디벤조수베란의 합성



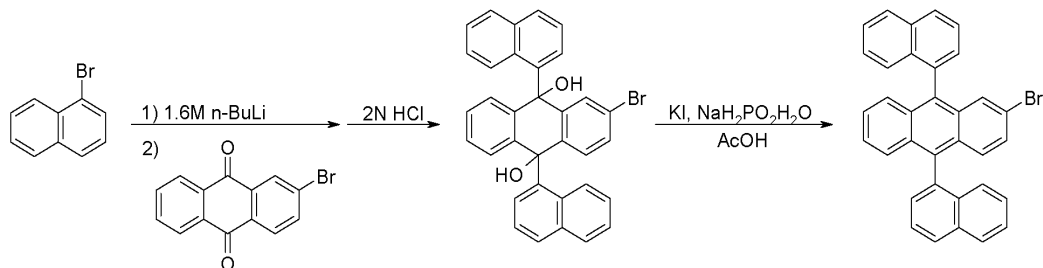
[0249]

[0250] (L-1) (SSH076)

[0251] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 다이브로모디벤조수베란 3.00g (9 mmol), 상기 합성 8-2에서 제조한 화합물 (L-1) 10.28g (26mmol), $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 0.39g (0.3mmol), K_2CO_3 4.71g (34mmol), THF 30ml, 톨루엔 (Toluene) 60ml, 물 15ml을 모두 넣고 교반하면서 하루 동안 환류시켰다. 반응이 종결 된 후 고체를 여과하고, 여액을 톨루엔과 물로 추출하였다. 추출한 후 MgSO_4 로 제거한 후, 농축하였다. 메탄올로 고체를 생성시키고, 생성된 고체는 실리카 겔 크로마토그래피를 사용하여 정제하고, 톨루엔으로 재결정하여 상기 반응순서도의 구조를 가지며 연노란색의 고체 화합물 4.1g (5.00mmol, 수율 53.0%)을 얻었다.

[0252] 합성예 9: SSH082의 합성

[0253] 합성예 9-(1): 2-브로모-9,10-디(1'-나프틸)안트라센의 합성

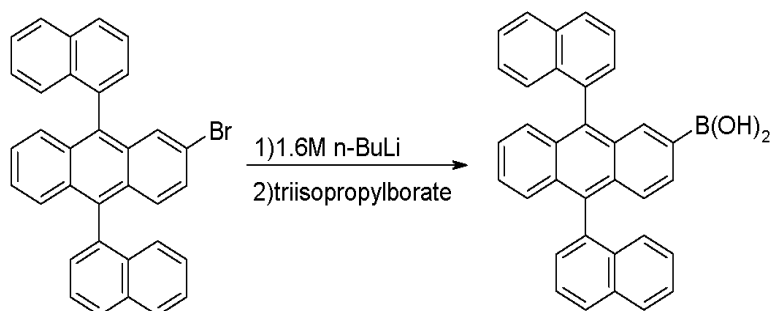


[0254]

[0255] (M-1)

[0256] 500ml 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 1-나프틸벤젠 43.3g (0.209mol)과 (THF) 100ml를 넣었다. 온도를 -78°C 까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 9.1ml(0.209mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분 동안 교반을 하고, 2-브로모안트라퀴논 20g (0.070mol)을 THF 100ml에 녹여 빠른속도로 넣어주었다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응 이 종결되면, 2N 염산 100ml을 넣어 산성으로 맞추고, 농축시켰다. 농축한 반응물을 500ml 둥근 바닥 플라스크에 넣어 KI 34.69g (0.209mol), $\text{NaH}_2\text{PO}_2\cdot\text{H}_2\text{O}$ 44.30g (0.418mol), 초산 200ml과 함께 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 실온으로 낮추고, 생성된 고체를 여과하여 메탄올로 씻어주며, 톨루엔으로 재결정하였다. 그 결과 25.0g (0.049mol, 수율 70.5%)의 황토색 고체를 얻었다.

[0257] 합성예 9-(2): 9,10-디(1'-나프틸)-2-안트라센닐보론산의 합성

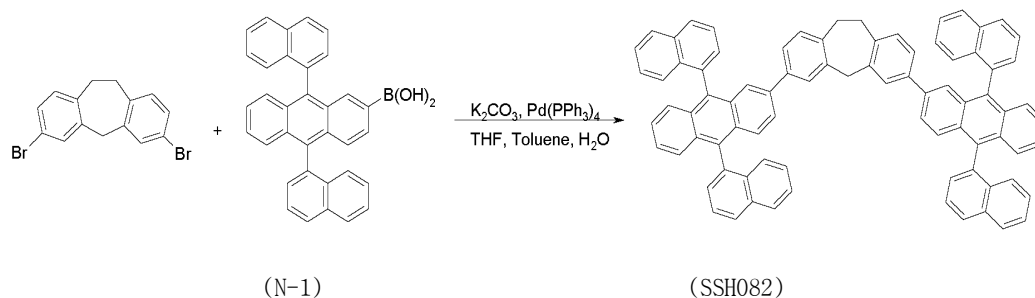


[0258]

[0259] (M-1) (N-1)

[0260] 500ml 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 상기 합성 9-1에서 제조한 화합물 (M-1) 25.00g (0.049mol)과 (THF) 250ml를 넣었다. 온도를 -78°C 까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 33.7 ml (0.054mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분동안 교반을 하고, 트리이소프로필보레이트 16.93g (0.074mol)를 적가하였다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 2N 염산 100ml을 넣어 산성으로 맞추고, 에틸아세테이트와 물로 추출하고, MgSO_4 로 물을 제거한 후, 농축하였다. 농축한 용액을 헥산으로 재결정하였다. 그 결과 15.4g (0.03mol, 수율 66.2%)의 하얀색 고체를 얻었다.

[0261] 합성예 9-(3): 2,7-디(9'-10'-디(1'''-나프틸)-2'-안트라센닐)디벤조수베란의 합성



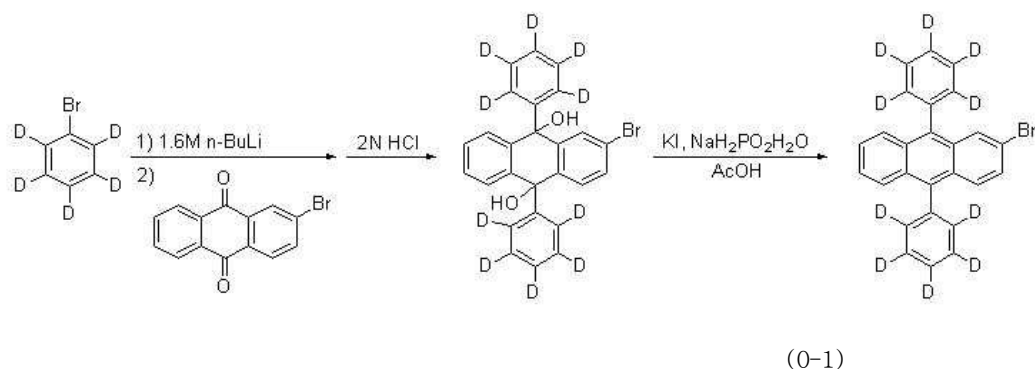
[0262]

[0263]

[0264] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 다이브로모디벤조수베란 3.00g (9mmol), 상기 합성 9-2에서 제조한 화합물 (N-1) 12.13g (26mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.39g (0.3 mmol), K₂CO₃ , 4.71g (34mmol), THF 30ml, 톨루엔 (Toluene) 60ml, 물 15 ml을 모두 넣고 교반하면서 하루 동안 환류시켰다. 반응이 종결 된 후 고체를 여과 하고, 여액을 톨루엔 과 물로 추출하였다. 추출한 후 MgSO₄로 제거한 후, 농축하였다. 메탄올로 고체를 생성시키고, 생성된 고체는 실리카겔크로마토그래피를 사용하여 정제하여, 상기 반응순서도의 구조를 가지며 연노란색의 고체 화합물 3.4g (4.00mmol, 수율 45.80%)을 얻었다.

[0265]

[0266] 합성예 10-(1): 2-브로모-9,10-디(페닐-d5)안트라센의 합성



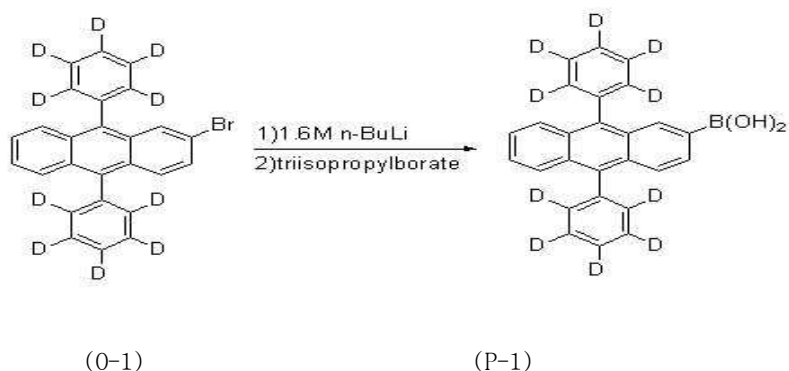
[0267]

[0268]

[0269] 500ml 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 브로모벤젠디치환체 33.9g (0.209mol)과 THF 100ml를 넣었다. 온도를 -78℃까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 9.1ml (0.209mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분동안 교반을 하고, 2-브로모안트라퀴논 20g (0.070mol)을 THF 100ml에 녹여 빠른속도로 넣어주었다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 2N 염산 100ml을 넣어 산성으로 맞추고, 농축시켰다. 농축한 반응물을 500ml 둥근 바닥 플라스크에 넣어 KI 34.69g (0.209mol), NaH₂PO₂·H₂O 44.30g (0.418mol), 초산 200ml 과 함께 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 실온으로 낮추고, 생성된 고체를 여과하여 메탄올로 씻어주며, 톨루엔으로 재결정하였다. 그 결과 18.0g (0.043mol, 수율 61.6 %)의 황토색 고체를 얻었다.

[0270]

합성예 10-(2): 9,10-디(페닐-d5)-2-안트라센닐보론산의 합성

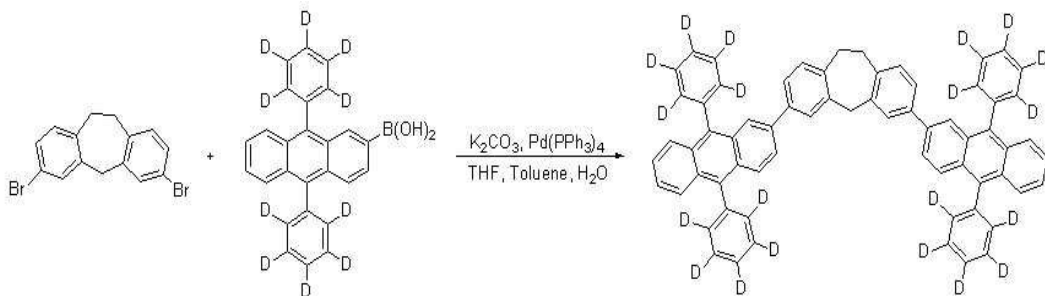


[0271]

[0272]

[0273] 250 ml 둥근 바닥 플라스크를 교반하는 상태에서 상기 합성 10-1에서 제조한 화합물 (0-1) 18.00g (0.043mol)과 THF 180ml를 넣었다. 온도를 -78°C 까지 떨어뜨린 후 n-BuLi 9.51ml (0.047 mol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 1시간 30분동안 교반을 하고, 트리이소프로필보레이트 14.8g (0.064 mol)를 적가하였다. 10분간 방치 후 실온에서 하루 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 2N 염산 100ml을 넣어 산성으로 맞추고, 에틸아세테이트와 물로 추출하고, MgSO_4 로 물을 제거한 후, 농축하였다. 농축한 용액을 헥산으로 재결정하였다. 그 결과 10.0g (0.03mol, 수율 60.63%)의 하얀색 고체를 얻었다.

[0274] 합성예 10-(3): 2,7-디(9'-10'-디(페닐-d5)-2'-안트라센닐)디벤조수베란의 합성



[0275] (P-1)

[0276] (SSH093)

[0277] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 다이브로모디벤조수베란 3.00g (9 mmol), 상기 합성 10-2에서 제조한 화합물 (P-1) 9.82g (26mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 0.39g (0.3mmol), K_2CO_3 4.71g (34mmol), THF 30ml, 톨루엔(Toluene), 60ml, 물 15ml을 모두 넣고 교반하면서 하루 동안 환류시켰다. 반응이 종결 된 후 고체를 여과하고, 여액을 톨루엔과 물로 추출하였다. 추출한 후 MgSO_4 로 제거한 후, 농축하였다. 메탄올로 고체를 생성시키고, 생성된 고체는 실리카 겔크로마토그래피를 사용하여 정제하고, 톨루엔으로 재결정하여 상기 반응순서도의 구조를 가지며 연노란색의 고체 화합물 3.0 g (3.00 mmol, 수율 40.4 %)을 얻었다.

[0278] 실시예: 본 발명에 따른 유기전계발광소자의 제조

[0279] 실시예 1

[0280] ITO 글라스의 발광 면적이 $2\text{mm} \times 2\text{mm}$ 가 되도록 기판 상에 패터닝한 다음 세정하였다. 상기 기판을 진공 챔버에 장착한 후, 베이스 압력이 1×10^{-6} torr가 되도록 한 다음, 공지의 방법을 사용하여, 상기 ITO 글라스 상에 CuPC (200Å), NPD (400Å), (합성예 1 + 화학식 4) (250Å), Alq_3 (350Å), LiF (5Å), Al (1000Å)의 순서로 성막하였다. 제조된 유기전계발광소자의 발광특성은 0.4 mA에서 465 Cd/m^2 (5.06 V)를 나타내었다.

[0281] 실시예 2

[0282] 실시예 1의 합성예 1의 화합물 대신에 상기 합성예 2에서 제조된 화합물을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법에 따라서 유기전계발광소자를 제조하였다. 제조된 유기전계발광소자의 발광특성은 0.4 mA에서 488 Cd/m^2 (5.14 V)를 나타내었다.

[0283] 실시예 3

[0284] 실시예 1의 합성예 1의 화합물 대신에 상기 합성예 3에서 제조된 화합물을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법에 따라서 유기전계발광소자를 제조하였다. 제조된 유기전계발광소자의 발광특성은 0.4 mA에서 546 Cd/m^2 (5.67 V)를 나타내었다.

[0285] 실시예 4

[0286] 실시예 1의 합성예 1의 화합물 대신에 상기 합성예 4에서 제조된 화합물을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법에 따라서 유기전계발광소자를 제조하였다. 제조된 유기전계발광소자의 발광특성은 0.4 mA에서 562 Cd/m^2 (5.69 V)를 나타내었다.

[0287] 실시예 5

[0288] 실시예 1의 합성에 1의 화합물 대신에 상기 합성에 5 에서 제조된 화합물을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법에 따라서 유기전계발광소자를 제조하였다. 제조된 유기전계발광소자의 발광특성은 0.4 mA에서 410 Cd/m^2 (4.98 V)를 나타내었다.

[0289] 실시예 6

[0290] 실시예 1의 합성에 1의 화합물 대신에 상기 합성에 6 에서 제조된 화합물을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법에 따라서 유기전계발광소자를 제조하였다. 제조된 유기전계발광소자의 발광특성은 0.4 mA에서 422 Cd/m^2 (4.93 V)를 나타내었다.

[0291] 실시예 7

[0292] 실시예 1의 합성에 1의 화합물 대신에 상기 합성에 7 에서 제조된 화합물을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법에 따라서 유기전계발광소자를 제조하였다. 제조된 유기전계발광소자의 발광특성은 0.4 mA에서 609 Cd/m^2 (5.83 V)를 나타내었다.

[0293] 실시예 8

[0294] 실시예 1의 합성에 1의 화합물 대신에 상기 합성에 8 에서 제조된 화합물을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법에 따라서 유기전계발광소자를 제조하였다. 제조된 유기전계발광소자의 발광특성은 0.4 mA에서 626 Cd/m^2 (5.82 V)를 나타내었다.

[0295] 실시예 9

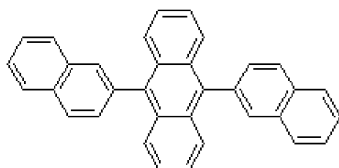
[0296] 실시예 1의 합성에 1의 화합물 대신에 상기 합성에 9 에서 제조된 화합물을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법에 따라서 유기전계발광소자를 제조하였다. 제조된 유기전계발광소자의 발광특성은 0.4 mA에서 584 Cd/m^2 (5.68 V)를 나타내었다.

[0297] 실시예 10

[0298] 실시예 1의 합성에 1의 화합물 대신에 상기 합성에 10 에서 제조된 화합물을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법에 따라서 유기전계발광소자를 제조하였다. 제조된 유기전계발광소자의 발광특성은 0.4 mA에서 563 Cd/m^2 (5.60 V)를 나타내었다.

[0299] 비교예 1. 종래기술에 따른 유기전계발광소자의 제조

[0300] 실시예 1의 합성에 1의 화합물 대신에 화학식 8을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성 1과 동일한 방법에 따라서 유기전계발광소자를 제조하였다. 제조된 유기전계발광소자의 발광특성은 0.4 mA에서 272 Cd/m^2 (5.58 V)를 나타내었다.



[0301]

[0302] <화학식 8>

[0303] 하기 표 1에는 실시예 1~10 및 비교예 1에 따른 유기전계발광소자의 다양한 특성들을 정리하였다.

표 1

분류	구동 전압 (V)	효율 (Cd/A)	전력 효율(1m/W)	색좌표 CIE (x, y)
실시예 1	5.06	4.65	2.9	0.14, 0.17
실시예 2	5.14	4.88	3.0	0.14, 0.17
실시예 3	5.67	5.46	3.0	0.13, 0.15
실시예 4	5.69	5.62	3.1	0.13, 0.15

[0304]

실시예 5	4.98	4.10	2.6	0.13, 0.15
실시예 6	4.93	4.22	2.7	0.14, 0.17
실시예 7	5.83	6.09	3.3	0.14, 0.16
실시예 8	5.82	6.26	3.4	0.13, 0.15
실시예 9	5.68	5.84	3.2	0.13, 0.15
실시예 10	5.60	5.63	3.2	0.13, 0.15
비교예 1	5.58	2.72	1.5	0.13, 0.14

[0305] 표 1을 참조하면, 실시예 1-10에 따른 유기전계발광소자가 비교예 1에 따른 유기전계발광소자에 비해서 전력효율 및 발광효율이 우수하다는 사실을 알 수 있다.

专利名称(译)	发光化合物和含有它们的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020100021367A	公开(公告)日	2010-02-24
申请号	KR1020090073540	申请日	2009-08-10
[标]申请(专利权)人(译)	SFC股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	에스에프씨주식회사		
当前申请(专利权)人(译)	에스에프씨주식회사		
[标]发明人	JE JONG TAE 제종태 HWANG SUG KWANG 황석광 CHOI AH RAM 최아람 KIM SUNG HOON 김성훈		
发明人	제종태 황석광 최아람 김성훈		
IPC分类号	C09K11/06 C07D203/26 H05B33/14 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/5092 H01L51/5088 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/0035 H01L51/006 H01L51/0059 H01L2251/558		
优先权	1020080080008 2008-08-14 KR		
其他公开文献	KR101553561B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及由下式 (1) 表示的发光化合物和包含该发光化合物的有机电致发光器件。根据本发明的发光化合物可以提供具有优异亮度和长寿命的有机电致发光器件。 (1)

