



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2012년12월12일
(11) 등록번호 10-1211475
(24) 등록일자 2012년12월06일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2010-0065262
(22) 출원일자 2010년07월07일
심사청구일자 2010년07월07일
(65) 공개번호 10-2012-0004654
(43) 공개일자 2012년01월13일
(56) 선행기술조사문헌
KR1020080064114 A
KR100938524 B1
US20070262704 A1

(73) 특허권자
단국대학교 산학협력단
경기도 용인시 수지구 죽전동 126 단국대학교 내
(72) 발명자
이준엽
경기도 성남시 분당구 정자일로 55, 분당두산위브
아파트 105동 304호 (금곡동)
전순옥
서울특별시 양천구 목동남로4길 6-23, 207동 207
호 (신정동, 목동2차우성아파트)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
이수열

전체 청구항 수 : 총 7 항

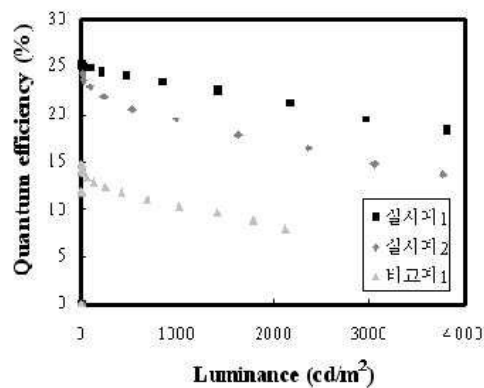
심사관 : 오세주

(54) 발명의 명칭 **고효율 유기전계 발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계 발광소자**

(57) 요약

본 발명은 고효율 유기전계 발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계 발광소자에 관한 발명으로서, 본 발명의 고효율 유기전계 발광소자용 화합물은 가운데 코어단위를 포함하며, 상기 코어단위에 서로 다른 HOMO와 LUMO의 에너지 준위를 갖는 두 종류의 사이드단위를 포함함으로써, 독립적인 에너지 준위에 의한 특성 구현을 통하여 전하주입 특성을 개선하고 발광층에서의 전하균형을 조절하여 고효율을 구현할 수 있는 호스트 물질로서 적용할 수 있다.

대표도 - 도2



(72) 발명자

손효석

경기도 성남시 분당구 구미로 16, 407호 (구미동,
성우스타우즈오피스텔)

육경수

경기도 용인시 수지구 용구대로2771번길 68, 벽산
1단지아파트 105동 502호 (죽전동)

장상익

서울특별시 송파구 동남로 193, 쌍용아파트 303동
2401호 (가락동)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 GRRC Dankook 2010-B01

부처명 경기도

연구사업명 GRRC

연구과제명 고효율 유기 고체 조명 소자용 소재 개발

주관기관 단국대학교

연구기간 2010년 07월 01일~ 2011년 06월 30일

특허청구의 범위

청구항 1

화학식 1로 표시되는 유기전계 발광소자용 화합물.

[화학식 1]

A-C-B

상기 화학식 1에서

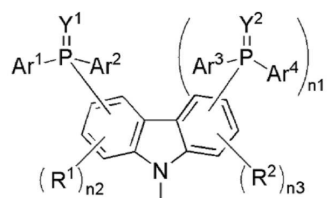
A 단위와 B 단위는 서로 동일하지 않고,

A 단위와 B 단위의 호모(HOMO) 에너지 준위와 루모(LUMO) 에너지 준위는 동일하지 않게 서로 교차되고,

A 단위, B 단위 및 C 단위는 공액구조를 포함하며 서로 연결되어 공액구조가 확장되고,

상기 화학식 1에서 A 단위는 화학식 2로 표시되고,

[화학식 2]



상기 화학식 2에서, Y¹ 및 Y²는 각각 독립적으로 산소, 황 또는 셀레늄 원자이며,

Ar¹ 내지 Ar⁴는 각각 동일하거나 상이한 치환기로서, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기이며,

R¹ 및 R²는 각각 독립적으로 일부 또는 전부가 수소 원자이거나, 각각 동일하거나 상이한 치환기로서 할로겐원자, 시아노기, 나이트로기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 티오기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 실릴기이며,

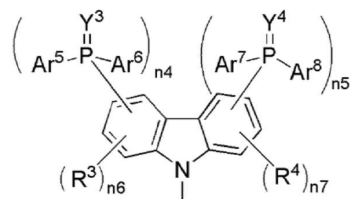
상기 Ar¹ 내지 Ar⁴, R¹, 또는 R²에서의 치환에 해당하는 기는 할로겐 원자, 시아노기, 나이트로기, 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기, 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 탄소수 3 내지 50의 알킬환기, 탄소수 1 내지 50의 티오기, 또는 탄소수 1 내지 50의 실릴기이며,

n1은 0 또는 1이며,

n2 및 n3은 각각 독립적으로 0 또는 1이고,

상기 화학식 1에서 B 단위는 화학식 3으로 표시되고,

[화학식 3]



상기 화학식 3에서, Y^3 및 Y^4 는 각각 독립적으로 산소, 황 또는 셀레늄 원자이며,

Ar^5 내지 Ar^8 는 각각 동일하거나 상이한 치환기로서, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기이며,

R^3 및 R^4 는 각각 독립적으로 일부 또는 전부가 수소 원자이거나, 각각 동일하거나 상이한 치환기로서 할로겐원자, 시아노기, 나이트로기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 티오기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 실릴기이며,

상기 Ar^5 내지 Ar^8 , R^3 또는 R^4 에서의 “치환”에 해당하는 기는 할로겐 원자, 시아노기, 나이트로기, 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기, 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 탄소수 3 내지 50의 알킬환기, 탄소수 1 내지 50의 티오기, 또는 탄소수 1 내지 50의 실릴기이며,

$n4$ 및 $n5$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1이며,

$n6$ 및 $n7$ 은 각각 독립적으로 0 또는 1이고,

상기 화학식 1에서 C 단위는 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기이며,

상기 C 단위의 치환에 해당하는 기는 할로겐 원자, 시아노기, 나이트로기, 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기, 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 탄소수 3 내지 50의 알킬환기, 탄소수 1 내지 50의 티오기, 또는 탄소수 1 내지 50의 실릴기이다.

청구항 2

제1항에 있어서, 화학식 1에서 A 단위, B 단위 및 C 단위의 삼중항 에너지는 각각 2.8eV 이상인 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자용 화합물.

청구항 3

삭제

청구항 4

삭제

청구항 5

삭제

청구항 6

제1전극; 제2전극; 및 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트와 도펀트를 포함하는 유기전계 발광소자에 있어서,

상기 호스트는 제1항의 유기전계 발광소자용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

청구항 7

제6항에 있어서, 상기 유기전계 발광소자는 전자수송층 및 정공수송층 중 1종 이상을 추가로 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

청구항 8

제7항에 있어서, 정공수송층 또는 전자수송층은 제1항의 유기전계 발광소자용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

청구항 9

제1전극; 제2전극; 발광층; 전자수송층 및 정공수송층을 포함하는 유기전계 발광소자에 있어서,

상기 전자수송층 또는 정공수송층은 제1항 또는 제2항의 유기전계 발광소자용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

청구항 10

제9항에 있어서, 유기전계 발광소자는 정공주입층 및 전자주입층 중에서 선택된 1종 이상의 층을 추가로 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 기존 유기전계 발광소자의 낮은 효율 특성, 특히 순청색 인광 유기전계 발광소자에서의 낮은 효율 특성을 개선하기 위한, 고효율 유기전계 발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계 발광소자에 관한 발명이다.

배경기술

[0002] 유기전계 발광소자는 기존 액정 표시 장치(LCD), 플라즈마 디스플레이 패널(PDP) 그리고 전계 방출 디스플레이(FED)등의 타 평판 표시 소자에 비해 구조가 간단하고, 제조 공정상 다양한 장점이 있으며 높은 휘도 및 시야각 특성이 우수하며, 응답속도가 빠르고 구동전압이 낮아 벽걸이 TV등의 평판 디스플레이 또는 디스플레이의 배면광, 조명, 광고판 등의 광원으로 사용되도록 활발하게 개발이 진행되고 있다.

[0003] 유기전계 발광소자는 일반적으로 직류 전압을 인가하였을 때 양극으로부터 주입된 정공과 음극으로부터 주입된 전자가 재결합하여 전자-정공 쌍인 엑시톤을 형성하며 이 엑시톤이 안정한 바닥 상태로 돌아오면서 그에 해당하는 에너지를 발광 재료에 전달함에 의해 빛으로 변환된다.

[0004] 유기전계 발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위해 이스트만 코닥사의 탕(C. W. Tang) 등에 의해 두 개의 반대 전극 사이에 적층형 유기물 박막을 구성하여 저전압 구동 유기전계 발광소자가 보고(C. W. Tang, S. A. Vanslyke, Applied Physics Letters, 51권 913페이지, 1987년)된 이래, 다층 박막 구조형 유기전계 발광소자용 유기 재료에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. 이러한 적층형 유기전계 발광소자의 수명은 박막 및 재료의 안정성과 관련이 깊다. 예컨대, 재료의 열안정성이 떨어질 경우 고온 또는 구동온도에서 재료의 결정화가 이루어져 소자의 수명을 단축시키는 원인이 되고 있다.

[0005] 기존의 유기전계 발광소자의 호스트 물질로서는 다양한 구조의 화합물이 알려져 있다. 트리아진계 화합물, 옥사다리아졸계 화합물, 벤즈이미다졸계 화합물, 페닐 피리딘계 화합물 및 실리콘계 화합물 등이 알려져 있다. 그러나 이러한 화합물들은 유기전계 발광소자에서 우수한 효율 특성을 구현하지 못하는 문제점이 있으며, 청색 인광 소자에서 우수한 특성을 구현할 수 있는 호스트 물질은 매우 제한되어 있다. 따라서 이를 개선하기 위한 새로운 화합물의 개발이 요구되고 있다.

[0006] 새로운 호스트 물질로서 포스핀 옥사이드 계열의 새로운 화합물이 보고된 바 있으나, 이 화합물의 경우에도 높은 효율의 구현이 어려운 문제점이 있었다.

[0007] 한국 공개특허 제10-2006-0109524에서 아릴 포스핀 옥사이드계 화합물, 아릴포스핀 설파이드계 화합물 또는 아릴 포스핀 셀레나이드계 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광소자가 개시되었으나 순청색 인광소자에서 높은 효율을 구현할 수 없는 문제점이 있다.

[0008] 어플라이드 피직스 레터(Appl. Phys. Lett. 92, 083308, 2008년)에서 플로렌 구조를 도입한 포스핀 옥사이드 화합물을 이용한 청색 인광소자를 개시하였으나 양자 효율이 9% 정도이어서 소자 효율이 낮은 문제점이 있다.

[0009] 기존의 유기발광소자는 고효율 구현을 위하여 다양한 유기재료를 이용하여 소자를 구성하였으며, 고효율 구현을 위하여 전자와 정공의 균형을 맞출 수 있도록 정공수송단위와 전자수송단위를 포함하는 유기화합물을 개발하여 사용하였다. 이를 위하여 분자내에 정공수송단위와 전자수송단위를 동시에 포함하는 유기화합물을 합성하였으며, 이를 통하여 전하의 균형을 조절하였다. 그러나 이러한 경우 전자 및 정공의 한가지 특성이 지배

적으로 나타나게 되어 전하의 균형을 조절하기 어려운 단점이 있었다. 특히 이러한 화합물이 단순한 연결단위로 연결될 경우 한 특성이 지배적으로 나타나게 되어 유기전계 발광소자의 특성 조절이 어려운 문제점이 있었다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0010] 본 발명은 기존 호스트 물질의 높은 구동전압 및 낮은 효율의 문제점을 해결하기 위하여, 가운데 코어단위를 포함하며, 상기 코어단위에 서로 다른 HOMO와 LUMO의 에너지 준위를 갖는 두 종류의 사이드단위를 포함함으로써, 독립적인 에너지 준위에 의한 특성 구현을 통하여 전하주입 특성을 개선하고 발광층에서의 전하균형을 조절하여 고효율을 구현할 수 있는 화합물 및 이를 포함하는 유기전계 발광소자를 제공할 수 있다.

과제의 해결 수단

[0011] 본 발명은 화학식 1로 표시되는 유기전계 발광소자용 화합물을 제공한다.

[0012] [화학식 1]

[0013] A-C-B

[0014] 상기 화학식 1에서

[0015] A 단위와 B 단위는 서로 동일하지 않고,

[0016] A 단위와 B 단위의 호모(HOMO) 에너지 준위와 루모(LUMO) 에너지 준위는 동일하지 않게 서로 교차되고,

[0017] A 단위, B 단위 및 C 단위는 공액구조를 포함하며 서로 연결되어 공액구조가 확장된다.

[0018] 본 발명은 제1전극; 제2전극; 및 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트와 도펀트를 포함하는 유기전계 발광소자에 있어서, 상기 호스트는 화학식 1의 유기전계 발광소자용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자를 제공한다.

[0019] 본 발명은 제1전극; 제2전극; 발광층; 전자수송층; 및 정공수송층을 포함하는 유기전계 발광소자에 있어서, 상기 정공수송층 또는 전자수송층은 화학식 1의 유기전계 발광소자용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자를 제공한다.

발명의 효과

[0020] 본 발명의 고효율 유기전계 발광소자용 화합물은 가운데 코어단위를 포함하며, 상기 코어단위에 서로 다른 HOMO와 LUMO의 에너지 준위를 갖는 두 종류의 사이드단위를 포함함으로써, 독립적인 에너지 준위에 의한 특성 구현을 통하여 전하주입 특성을 개선하고 발광층에서의 전하균형을 조절하여 고효율을 구현할 수 있는 호스트 물질로서 적용할 수 있다.

[0021] 본 발명의 유기전계 발광소자는 본 발명의 고효율 유기전계 발광소자용 화합물을 사용함으로써 적색 내지 청색 인광소자, 특히 순청색 인광소자에서 우수한 효율 특성을 구현할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0022] 도 1은 본 발명에 따른 유기전계 발광소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

도 2는 본 발명의 실시예와 비교예의 양자효율 그래프이다.

도 3은 본 발명의 실시예와 비교예의 전력효율 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0023] 이하, 본 발명에 따른 고효율 유기전계 발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계 발광소자의 바람직한 실시예를 화학식 또는 첨부도면을 참조하여 상세히 설명하기로 한다.

[0024] 본 발명은 화학식 1로 표시되는 유기전계 발광소자용 화합물을 제공한다.

[0025] [화학식 1]

[0026] A-C-B

[0027] 상기 화학식 1에서

[0028] A 단위와 B 단위는 서로 동일하지 않고,

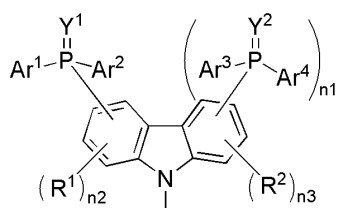
[0029] A 단위와 B 단위의 호모(HOMO) 에너지 준위와 루모(LUMO) 에너지 준위는 동일하지 않게 서로 교차되고,

[0030] A 단위, B 단위 및 C 단위는 공액구조를 포함하며 서로 연결되어 공액구조가 확장된다.

[0031] 본 발명에 따르면, 화학식 1에서 A 단위, B 단위 및 C 단위의 삼중항 에너지는 각각 2.8eV 이상인 것이 바람직하다.

[0032] 본 발명에 따르면, 화학식 1에서 A 단위는 화학식 2로 표시되는 것임을 특징으로 하는 유기전계 발광소자용 화합물이 제공될 수 있다.

[0033] [화학식 2]



[0034]

[0035] 상기 화학식 2에서, Y¹ 및 Y²는 각각 독립적으로 산소, 황 또는 셀레늄 원자이며,

[0036] Ar¹ 내지 Ar⁴는 각각 동일하거나 상이한 치환기로서, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기이며,

[0037] R¹ 및 R²는 각각 독립적으로 일부 또는 전부가 수소 원자이거나, 각각 동일하거나 상이한 치환기로서 할로겐원자, 시아노기, 나이트로기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 티오기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 실릴기이며,

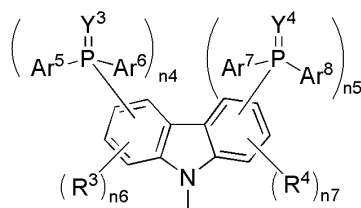
[0038] 상기 Ar¹ 내지 Ar⁴, R¹ 또는 R²에서의 치환에 해당하는 기는 할로겐 원자, 시아노기, 나이트로기, 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기, 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 탄소수 3 내지 50의 알킬환기, 탄소수 1 내지 50의 티오기, 또는 탄소수 1 내지 50의 실릴기이며,

[0039] n₁은 0 또는 1이며,

[0040] n₂ 및 n₃은 각각 독립적으로 0 또는 1이다.

[0041] 본 발명에 따르면, 화학식 1에서 B 단위는 화학식 3으로 표시되는 것임을 특징으로 하는 유기전계 발광소자용 화합물이 제공될 수 있다.

[0042] [화학식 3]



[0043]

[0044] 상기 화학식 3에서, Y³ 및 Y⁴는 각각 독립적으로 산소, 황 또는 셀레늄 원자이며,

[0045] Ar⁵ 내지 Ar⁸는 각각 동일하거나 상이한 치환기로서, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 또는

치환 또는 비치환된 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기이며,

- [0046] R^3 및 R^4 는 각각 독립적으로 일부 또는 전부가 수소 원자이거나, 각각 동일하거나 상이한 치환기로서 할로젠원자, 시아노기, 나이트로기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 티오기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 실릴기이며,
- [0047] 상기 Ar^5 내지 Ar^8 , R^3 또는 R^4 에서의 “치환”에 해당하는 기는 할로젠 원자, 시아노기, 나이트로기, 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기, 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 탄소수 3 내지 50의 알킬환기, 탄소수 1 내지 50의 티오기, 또는 탄소수 1 내지 50의 실릴기이며,
- [0048] n_4 및 n_5 는 각각 독립적으로 0 또는 1이며,
- [0049] n_6 및 n_7 는 각각 독립적으로 0 또는 1이다.
- [0050] 본 발명에 따르면, 화학식 1에서 C 단위는 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기이며,
- [0051] 상기 치환에 해당하는 기는 할로젠 원자, 시아노기, 나이트로기, 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 핵 원자수 5 내지 50의 헤테로 아릴기, 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 탄소수 3 내지 50의 알킬환기, 탄소수 1 내지 50의 티오기, 또는 탄소수 1 내지 50의 실릴기일 수 있다.
- [0052] 상기 C, Ar^1 내지 Ar^8 , 및 상기 R^1 내지 R^4 에서 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 6 내지 50의 아릴기로서의 구체적인 예로서는, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 1-페난트릴기, 2-페난트릴기, 3-페난트릴기, 4-페난트릴기, 9-페난트릴기, 1-나프타센일기, 2-나프타센일기, 9-나프타센일기, 1-피렌일기, 2-피렌일기, 4-피렌일기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, *p*-터페닐-4-일기, *p*-터페닐-3-일기, *p*-터페닐-2-일기, *m*-터페닐-4-일기, *m*-터페닐-3-일기, *m*-터페닐-2-일기, *o*-톨릴기, *m*-톨릴기, *p*-톨릴기, *p*-*tert*-뷰틸페닐기, *p*-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4-메틸바이페닐일기 또는 4-*tert*-뷰틸-*p*-터페닐-4-일기 등을 들 수 있다.
- [0053] 상기 C, Ar^1 내지 Ar^8 , 및 상기 R^1 내지 R^4 에서 핵 원자수 5 내지 50의 방향족 헤테로환기의 구체적인 예로서는 1-피롤릴기, 2-피롤릴기, 3-피롤릴기, 피라진일기, 피리미딜기, 피리다질기, 2-피리딘일기, 3-피리딘일기, 4-피리딘일기, 1-인돌릴기, 2-인돌릴기, 3-인돌릴기, 4-인돌릴기, 5-인돌릴기, 6-인돌릴기, 7-인돌릴기, 1-아이소인돌릴기, 2-아이소인돌릴기, 3-아이소인돌릴기, 4-아이소인돌릴기, 5-아이소인돌릴기, 6-아이소인돌릴기, 7-아이소인돌릴기, 2-퓨릴기, 3-퓨릴기, 2-벤조퓨란일기, 3-벤조퓨란일기, 4-벤조퓨란일기, 5-벤조퓨란일기, 6-벤조퓨란일기, 7-벤조퓨란일기, 1-아이소벤조퓨란일기, 3-아이소벤조퓨란일기, 4-아이소벤조퓨란일기, 5-아이소벤조퓨란일기, 6-아이소벤조퓨란일기, 7-아이소벤조퓨란일기, 1-다이벤조퓨란일기, 2-다이벤조퓨란일기, 3-다이벤조퓨란일기, 6-다이벤조퓨란일기, 7-다이벤조퓨란일기, 8-다이벤조퓨란일기, 9-다이벤조퓨란일기, 2-벤조사이오펜, 3-벤조사이오펜, 4-벤조사이오펜, 5-벤조사이오펜, 6-벤조사이오펜, 7-벤조사이오펜, 1-다이벤조사이오펜, 2-다이벤조사이오펜, 3-다이벤조사이오펜, 4-다이벤조사이오펜, 6-다이벤조사이오펜, 7-다이벤조사이오펜, 8-다이벤조사이오펜, 9-다이벤조사이오펜, 2-벤조포스폴, 3-벤조포스폴, 4-벤조포스폴, 5-벤조포스폴, 6-벤조포스폴, 7-벤조포스폴, 1-다이벤조포스폴, 2-다이벤조포스폴, 3-다이벤조포스폴, 4-이벤조포스폴, 6-이벤조포스폴, 7-다이벤조포스폴, 8-다이벤조포스폴, 9-이벤조포스폴, 2-벤조포스폴옥사이드, 3-벤조포스폴옥사이드, 4-벤조포스폴옥사이드, 5-벤조포스폴옥사이드, 6-벤조포스폴옥사이드, 7-벤조포스폴옥사이드, 1-다이벤조포스폴옥사이드, 2-다이벤조포스폴옥사이드, 3-다이벤조포스폴옥사이드, 4-다이벤조포스폴옥사이드, 6-다이벤조포스폴옥사이드, 7-다이벤조포스폴옥사이드, 8-다이벤조포스폴옥사이드, 9-다이벤조포스폴옥사이드, 퀴놀릴기, 3-퀴놀릴기, 4-퀴놀릴기, 5-퀴놀릴기, 6-퀴놀릴기, 7-퀴놀릴기, 8-퀴놀릴기, 1-아이소퀴놀릴기, 3-아이소퀴놀릴기, 4-아이소퀴놀릴기, 5-아이소퀴놀릴기, 6-아이소퀴놀릴기, 7-아이소퀴놀릴기, 8-아이소퀴놀릴기, 2-퀴녹살린일기, 5-퀴녹살린일기, 6-퀴녹살린일기, 1-페난트리딘일기, 2-페난트리딘일기, 3-페난트리딘일기, 4-페난트리딘일기, 6-페난트리딘일기, 7-페난트리딘일기, 8-페난트리딘일기, 9-페난트리딘일기, 10-페난트리딘일기, 1-아크리딘일기, 2-아크리딘일기, 3-아크리딘일기, 4-아크리딘일기, 9-아크리딘일기, 1,7-페난트롤린-2-일기, 1,7-페난트롤린-3-일기, 1,7-페난트롤린-4-일기, 1,7-페난트롤린-5-일기, 1,7-페난트롤린-6-일기, 1,7-페난트롤린-8-일기, 1,7-페난트롤린-9-일기, 1,7-페난트롤린-10-일기, 1,8-페난트롤린-2-일기, 1,8-페난트롤린-3-일

기, 1,8-페난트롤린-4-일기, 1,8-페난트롤린-5-일기, 1,8-페난트롤린-6-일기, 1,8-페난트롤린-7-일기, 1,8-페난트롤린-9-일기, 1,8-페난트롤린-10-일기, 1,9-페난트롤린-2-일기, 1,9-페난트롤린-3-일기, 1,9-페난트롤린-4-일기, 1,9-페난트롤린-5-일기, 1,9-페난트롤린-6-일기, 1,9-페난트롤린-7-일기, 1,9-페난트롤린-8-일기, 1,9-페난트롤린-10-일기, 1,10-페난트롤린-2-일기, 1,10-페난트롤린-3-일기, 1,10-페난트롤린-4-일기, 1,10-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-1-일기, 2,9-페난트롤린-3-일기, 2,9-페난트롤린-4-일기, 2,9-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-6-일기, 2,9-페난트롤린-7-일기, 2,9-페난트롤린-8-일기, 2,9-페난트롤린-10-일기, 2,8-페난트롤린-1-일기, 2,8-페난트롤린-3-일기, 2,8-페난트롤린-4-일기, 2,8-페난트롤린-5-일기, 2,8-페난트롤린-6-일기, 2,8-페난트롤린-7-일기, 2,8-페난트롤린-9-일기, 2,8-페난트롤린일기, 2,7-페난트롤린-1-일기, 2,7-페난트롤린-3-일기, 2,7-페난트롤린-4-일기, 2,7-페난트롤린-5-일기, 2,7-페난트롤린-6-일기, 2,7-페난트롤린-8-일기, 2,7-페난트롤린-9-일기, 2,7-페난트롤린-10-일기, 1-페나진일기, 2-페나진일기, 1-페노싸이아진일기, 2-페노싸이아진일기, 3-페노싸이아진일기, 4-페노싸이아진일기, 10-페노싸이아진일기, 1-페녹사진일기, 2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 10-페녹사진일기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사다이아졸릴기, 5-옥사다이아졸릴기, 3-푸라잔일기, 2-싸이엔일기, 3-싸이엔일기, 2-메틸피롤-1-일기, 2-메틸피롤-3-일기, 2-메틸피롤-4-일기, 2-메틸피롤-5-일기, 3-메틸피롤-1-일기, 3-메틸피롤-2-일기, 3-메틸피롤-4-일기, 3-메틸피롤-5-일기, 2-*tert*-뷰틸피롤-4-일기, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일기, 2-메틸-1-인돌릴기, 4-메틸-1-인돌릴기, 2-메틸-3-인돌릴기, 4-메틸-3-인돌릴기, 2-*tert*-뷰틸-1-인돌릴기, 4-*tert*-뷰틸-1-인돌릴기, 2-*tert*-뷰틸-3-인돌릴기 또는 4-*tert*-뷰틸-3-인돌릴기 등을 들 수 있다.

[0054]

상기 R^1 내지 R^4 에서, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 알킬환기의 구체적인 예로서는 메틸, 에틸, *n*-프로필, *n*-펜틸기, *n*-뷰틸, *n*-헥실기, *n*-헵틸기, *n*-옥틸기, *n*-데카닐, *n*-에이코사닐 아이소프로필기, *sec*-뷰틸기, 아이소뷰틸기, *tert*-뷰틸기, 하이드록시메틸기, 1-하이드록시에틸기, 2-하이드록시에틸기, 2-하이드록시아이소뷰틸기, 1,2-다이하이드록시에틸기, 1,3-다이하이드록시아이소프로필기, 2,3-다이하이드록시-*tert*-뷰틸기, 1,2,3-트라이하이드록시프로필기, 클로로메틸기, 1-클로로에틸기, 2-클로로에틸기, 2-클로로아이소뷰틸기, 1,2-다이클로로에틸기, 1,3-다이클로로아이소프로필기, 2,3-다이클로로-*tert*-뷰틸기, 1,2,3-트라이클로로프로필기, 브로모메틸기, 1-브로모에틸기, 2-브로모에틸기, 2-브로모아이소뷰틸기, 1,2-다이브로모에틸기, 1,3-다이브로모아이소프로필기, 2,3-다이브로모-*tert*-뷰틸기, 1,2,3-트라이브로모프로필기, 아이오도메틸기, 1-아이오도에틸기, 2-아이오도에틸기, 2-아이오도아이소뷰틸기, 1,2-다이아이오도에틸기, 1,3-다이아이오도아이소프로필기, 2,3-다이아이오도-*tert*-뷰틸기, 1,2,3-트라이아이오도프로필기, 아미노메틸기, 1-아미노에틸기, 2-아미노에틸기, 2-아미노아이소뷰틸기, 1,2-다이아미노에틸기, 1,3-다이아미노아이소프로필기, 2,3-다이아미노-*tert*-뷰틸기, 1,2,3-트라이아미노프로필기, 사이아노메틸기, 1-사이아노에틸기, 2-사이아노에틸기, 2-사이아노아이소뷰틸기, 1,2-다이사이아노에틸기, 1,3-다이사이아노아이소프로필기, 2,3-다이사이아노-*tert*-뷰틸기, 1,2,3-트라이사이아노프로필기, 나이트로메틸기, 1-나이트로에틸기, 2-나이트로에틸기, 2-나이트로아이소뷰틸기, 1,2-다이나이트로에틸기, 1,3-다이나이트로아이소프로필기, 2,3-다이나이트로-*tert*-뷰틸기, 1,2,3-트라이나이트로프로필기, 페닐메틸, 다이페닐메틸, 트리페닐메틸, 1-페닐에틸, 2-페닐에틸, 1,1-다이페닐에틸, 1,2-다이페닐에틸, 2,2-다이페닐에틸, 2,2,2-트리페닐에틸, 1,2,2,-트리페닐에틸, 1,1,2-트리페닐에틸, 1-페닐-*n*-프로필, 2-페닐-*n*-프로필, 3-페닐-*n*-프로필, 1,1-다이페닐-*n*-프로필, 2,2-다이페닐-*n*-프로필, 3,3-다이페닐-*n*-프로필, 1,2-다이페닐-*n*-프로필, 1,3-다이페닐-*n*-프로필, 2,3-다이페닐-*n*-프로필, 3,3,3-트리페닐-*n*-프로필, 1,1,2-트리페닐-*n*-프로필, 1,2,2-트리페닐-*n*-프로필, 1,3,3-트리페닐-*n*-프로필, 1,1,3-트리페닐-*n*-프로필, 1-페닐-이소프로필, 2-페닐-이소프로필, 1,1-다이페닐-이소프로필, 2,2-다이페닐-이소프로필, 1,2-다이페닐-이소프로필, 1,3-다이페닐-이소프로필, 2,3-다이페닐-이소프로필, 1,1,1-트리페닐-이소프로필, 1,1,2-트리페닐-이소프로필, 1,1,3-트리페닐-이소프로필, 1-페닐-*n*-부틸, 2-페닐-*n*-부틸, 3-페닐-*n*-부틸, 4-페닐-*n*-부틸, 1,1-다이페닐-*n*-부틸, 2,2-다이페닐-*n*-부틸, 3,3-다이페닐-*n*-부틸, 4,4-다이페닐-*n*-부틸, 1,2-다이페닐-*n*-부틸, 1,3-다이페닐-*n*-부틸, 2,3-다이페닐-*n*-부틸, 4,4,4-트리페닐-*n*-부틸, 1,1,2-트리페닐-*n*-부틸, 1,2,2-트리페닐-*n*-부틸, 1,3,3-트리페닐-*n*-부틸, 1,1,3-트리페닐-*n*-부틸, 1-페닐-*tert*-부틸, 1,1-다이페닐-*tert*-프로필, 1,1,1-트리페닐-*tert*-부틸기, 사이클로프로필기, 사이클로뷰틸기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 4-메틸사이클로헥실기, 1-아다만틸기, 2-아다만틸기, 1-노보닐기, 2-노보닐기 등을 들 수 있다.

[0055]

상기 R^1 내지 R^4 에서, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 티오기의 구체적인 예로, 메틸티오, 에틸티오, 프로필티오, 뷰틸티오, 펜틸티오, 헥실티오, 트라이(아이소프로필)티오, 트라이(아이소뷰틸)티오, 트라이(*tert*-뷰틸)티오, 트라이(2-뷰틸)티오, 페닐티오, 나프틸티오, 바이페닐티오, (3-메틸페닐)티오, (4-메틸나프틸)티오,

(2-메틸바이페닐)티오기 등을 들 수 있다.

[0056] 상기 R^1 내지 R^4 에서, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 실릴기의 구체적인 예로, 트라이메틸실릴, 트라이에틸실릴, 트라이부틸실릴, 트라이(아이소프로필)실릴, 트라이(아이소부틸)실릴, 트라이(*tert*-부틸)실릴, 트라이(2-부틸)실릴, 트라이페닐실릴, 트라이나프틸실릴, 트라이바이페닐실릴, 트라이(3-메틸페닐)실릴, 트라이(4-메틸나프틸)실릴, 트라이(2-메틸바이페닐)실릴, 페닐메틸실릴, 페닐에틸실릴, 나프틸메틸실릴, 나프틸에틸실릴, 바이페닐메틸실릴, 3-메틸-페닐메틸실릴, 페닐(아이소프로필)실릴, 나프틸(아이소프로필)실릴 또는 바이페닐(아이소프로필)실릴기 등을 들 수 있다.

[0057] 상기한 바와 같이, 본 발명에서는 교차되는 에너지 준위를 갖는 두 단위를 포함하는 화합물을 이용하여 전하주입 특성을 개선하였다. 두 단위의 에너지 준위가 교차되도록 구성함으로써 정공주입에 유리한 에너지 준위를 갖는 단위를 통하여 정공이 원활히 주입되고 전자주입에 유리한 에너지 준위를 갖는 단위를 통하여 전자가 원활히 주입되게 하였다. 따라서 이를 통하여 정공과 전자의 주입이 원활한 구조를 구현할 수 있었다.

[0058] 이때 에너지 준위가 교차되는 두 단위를 연결하는 연결단위는 코어 구조로서 각 단위와 공액구조가 확장될 수 있는 구조로 구성했다. 가운데 구조가 공액구조가 확장되지 못하는 구조를 사용할 경우 두 단위가 고립되어 전하 주입 및 이동 특성이 개선되지 못하는 단점이 있을 수 있으므로 두 단위의 연결단위는 공액구조를 깨뜨리지 않는 단위를 적어도 하나 포함하도록 구성하였다. 특히 청색 인광소자 적용을 위해서는 코어 구조의 삼중항 에너지가 2.8 eV 이상이며, 에너지 준위가 교차되는 두 단위의 삼중항 에너지도 2.8 eV 이상으로 구성하여 분자 자체의 삼중항 에너지가 2.8 eV 이상이 되도록 구성했다.

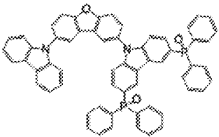
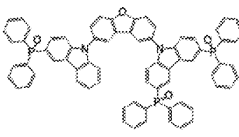
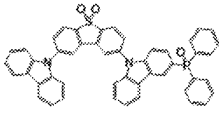
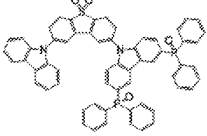
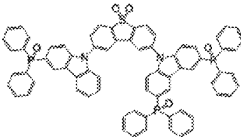
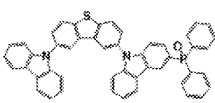
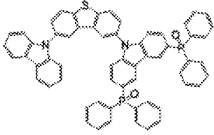
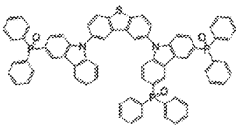
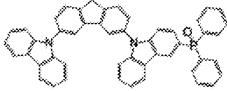
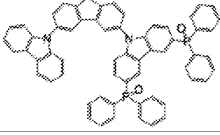
[0059] 이하에서, 본 발명의 유기전계 발광소자용 화합물의 1 내지 27의 구조식을 표 1 내지 표 3에 예시하지만, 본 발명이 이들 화합물로 한정되는 것은 아니다.

표 1

화합물	화학식	화합물	화학식
1		2	
3		4	
5		6	
7		8	
9		10	

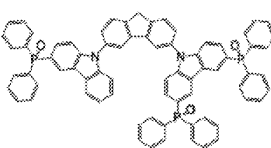
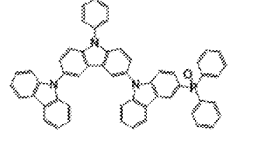
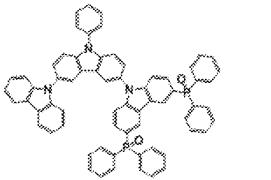
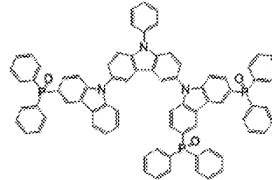
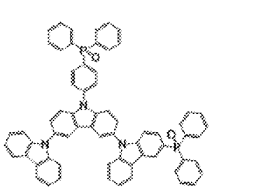
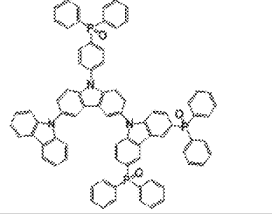
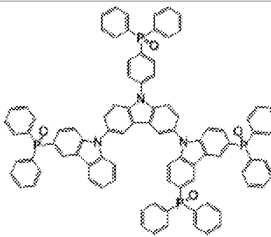
[0060]

표 2

화합물	화학식	화합물	화학식
11		12	
13		14	
15		16	
17		18	
19		20	

[0061]

표 3

화합물	화학식	화합물	화학식
21		22	
23		24	
25		26	
27			

[0062]

[0063]

본 발명에 따른 유기전계 발광소자를 첨부도면을 참조하여 설명하기로 한다. 도 1은 본 발명의 유기전계 발광소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다. 상기한 화학식 1로 표시되는 유기전계 발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계 발광소자는 다양한 구조로 실현될 수 있다.

[0064]

본 발명의 일구현예에 따른 유기전계 발광소자는 제1전극(110); 제2전극(150); 및 발광층(130)을 포함하고, 상기 발광층은 호스트와 도펀트를 포함하는 유기전계 발광소자에 있어서, 상기 호스트는 본 발명의 유기전계 발광소자용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.

[0065]

본 발명에 따르면, 상기 유기전계 발광소자는 전자수송층(140); 및 정공수송층(120) 중 1종 이상을 추가로 포함할 수 있다.

[0066]

본 발명에서, 상기 전자수송층(140) 또는 정공수송층(120)은 본 발명의 유기전계 발광소자용 화합물을 포함할 수 있다.

[0067]

본 발명의 유기전계 발광소자는 제1전극(110); 제2전극(150); 발광층(130); 전자수송층(140) 및 정공수송층(120)을 포함하는 유기전계 발광소자에 있어서, 상기 정공수송층(120) 또는 전자수송층(140)은 본 발명의 유기전계 발광소자용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.

[0068]

본 발명에서, 본 발명의 유기전계 발광소자는 정공주입층 및 전자주입층 중에서 선택된 1종 이상의 층을 추가로 포함하여 발광효율을 향상시킬 수 있다.

[0069]

유기전계 발광소자는 바람직하게는 투명기판에 의하여 지지된다. 투명기판의 재료로는 양호한 기계적 강도, 열안정성 및 투명성을 갖는 한 특별한 제한은 없다. 구체적인 예를 들면, 유리, 투명 플라스틱 필름 등을 사용할 수 있다.

[0070]

본 발명의 유기전계 발광소자의 양극재료로서는 4eV 이상의 일함수를 갖는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 또는 이의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적으로는 금속인 Au 또는 CuI, ITO(인듐 주석 산화물), SnO₂ 및 ZnO와 같은

투명 전도성 재료를 들 수 있다. 양극 필름의 두께는 10 내지 200nm 가 바람직하다.

[0071] 본 발명의 유기전계 발광소자의 음극 재료로서는 4eV 미만의 일함수를 갖는 금속, 합금, 전기 전도성 화합물 또는 이의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적으로는, Na, Na-K 합금, 칼슘, 마그네슘, 리튬, 리튬 합금, 인듐, 알루미늄, 마그네슘 합금, 알루미늄 합금을 들 수 있다. 이외에, 알루미늄/ AlO_2 , 알루미늄/리튬, 마그네슘/은 또는 마그네슘/인듐 등도 사용될 수 있다. 음극필름의 두께는 10 내지 200nm 가 바람직하다. 유기 EL 소자의 발광 효율을 높이기 위해서는 하나 이상의 전극은 바람직하게는 10% 이상의 광투과율을 가져야 한다. 전극의 쉬트저항은 바람직하게는 수백 Ω/mm 이하이다. 전극의 두께는 10nm 내지 $1\mu m$, 바람직하게는 10 내지 400nm 이다. 이러한 전극은 화학적 기상증착(CVD), 물리적 기상증착(PVD) 등의 기상증착법 또는 스퍼터링법을 통하여 상기한 전극 재료를 박막으로 형성하여 제조할 수 있다.

[0072] 상기 본 발명의 화학식 1의 화합물 이외에 정공 수송 물질 및 정공 주입 물질로서는 광전도성 재료 중에서 정공 수송 물질로서 통상적으로 사용되는 재료 및 유기 EL 소자의 정공 수송층 또는 정공 주입층의 형성에 사용되는 공지된 재료로부터 임의로 선택하여 사용할 수 있다. 예를 들면, N,N-dicarbazolyl-3,5-benzene(mCP), poly(3,4-ethylenedioxythiophene):polystyrenesulfonate (PEDOT:PSS), N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine(NPD), N,N'-디페닐-N,N'-디(3-메틸페닐)-4,4'-디아미노비페닐(TPD), N,N'-디페닐-N,N'-디나프틸-4,4'-디아미노비페닐, N,N,N,N'-테트라-p-톨릴-4,4'-디아미노비페닐, N,N,N,N'-테트라페닐-4,4'-디아미노비페닐, 코퍼(II)1,10,15,20-테트라페닐-21H,23H-포피린 등과 같은 포피린(porphyrin)화합물 유도체, 주쇄 또는 측쇄내에 방향족 3차아민을 갖는 중합체, 1,1-비스(4-디-p-톨릴아미노페닐)시클로헥산, N,N,N-트리(p-톨릴)아민, 4, 4', 4'-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트리페닐아민과 같은 트리아릴아민 유도체, N-페닐카르바졸 및 폴리비닐카르바졸과 같은 카르바졸 유도체, 무금속 프탈로시아닌, 구리프탈로시아닌과 같은 프탈로시아닌 유도체, 스타버스트 아민 유도체, 엔아민스티벤계 유도체, 방향족 삼급아민과 스티릴 아민 화합물의 유도체, 및 폴리실란 등을 들 수 있다.

[0073] 전자 수송층에는 공지의 전자 수송 물질, 예를 들면 diphenylphosphine oxide-4-(triphenylsilyl)phenyl (TSP01), AlQ_3 , 2,5-디아릴 실롤 유도체(PyPySPyPy), 퍼플루오리네이트드 화합물(PF-6P), Octasubstituted cyclooctatetraene 화합물(COTs) 등이 혼합될 수 있다.

[0074] 본 발명의 유기전계 발광소자에 있어서, 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 주입층 및 정공 수송층은 상기한 화합물의 하나 이상의 종류를 함유하는 단일 층으로 형성되거나, 또는 상호 적층된, 상이한 종류의 화합물을 함유하는 복수의 층으로 구성될 수 있다.

[0075] 본 발명의 유기전계 발광소자에 사용되는 다른 발광 재료로서는 공지된 발광재료, 예를 들면 측광 형광재료, 형광증백제, 레이저 색소, 유기 신틸레이터 및 형광 분석용 시약을 사용할 수 있다. 구체적으로는, 카바졸계 화합물, 포스핀옥사이드계 화합물, 카바졸계 포스핀옥사이드 화합물, bis((3,5-difluoro-4-cyanophenyl)pyridine) iridium picolinate(FCNIRpic), tris(8-hydroxyquinoline) aluminum(AlQ_3), 안트라센, 페난트렌, 피렌, 크리센, 페틸렌, 코로넨, 루브렌 및 퀴나크리돈과 같은 폴리아로마틱 화합물, 쿼터페닐과 같은 올리고페닐렌 화합물, 1,4-비스 (2-메틸스티릴)벤젠, 1,4-비스(4-메틸스티릴)벤젠, 1,4-비스(4-메틸-5-페닐-2-옥사졸릴)벤젠, 1,4-비스(5-페닐-2-옥사졸릴)벤젠, 2,5-비스(5-t-부틸-2-벤즈옥사졸릴)사이오펜, 1,4-디페닐-1,3-부타디엔, 1,6-디페닐-1,3,5-헥사트리엔, 1,1,4,4-테트라페닐-1,3-부타디엔과 같은 액체신틸레이션용 신틸레이터, 옥신 유도체의 금속착체, 쿠마린 색소, 디시아노메틸렌피란 색소, 디시아노메틸렌사이오피란 색소, 폴리메틴 색소, 옥소벤즈안트라센 색소, 크산텐 색소, 카르보스티릴 색소, 페틸렌 색소, 옥사진 화합물, 스티벤 유도체, 스피로 화합물, 옥사디아졸 화합물 등을 들 수 있다.

[0076] 본 발명의 유기 EL 소자를 구성하는 각 층은 진공 증착, 스핀 코팅 또는 캐스팅과 같은 공지된 방법을 통하여 박막으로 형성시키거나, 각 층에서 사용되는 재료를 이용하여 제조할 수 있다. 이들 각층의 막두께에 대해서는 특별한 제한은 없으며, 재료의 특성에 따라 알맞게 선택할 수 있으나, 보통 2nm 내지 5000nm의 범위에서 결정될 수 있다.

[0077] 본 발명의 따른 화학식 1의 화합물은 진공 증착법에 의하여 형성될 수 있으므로, 박막 형성 공정이 간편하고, 핀홀(pin hole)이 거의 없는 균질한 박막으로 용이하게 얻을 수 있는 장점이 있다.

[0078] 이하, 실시예를 통하여 본 발명에 따른 유기전계 발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계 발광소자의 제

조방법을 더욱 구체적으로 설명한다. 그러나 이는 예시를 위한 것으로서 이에 의하여 본 발명의 범위가 한정되는 것이 아니다.

[0079] [실시예]

[0080] 본 발명에서 유기전계 발광소자용 화합물을 제조하였고, 이 화합물을 사용하여 유기전계 발광소자를 제조하였다. 하기 제조예 및 실시예는 본 발명을 구체적으로 예시하기 위한 것으로, 이로써 본 발명이 제한되어서는 안 된다.

[0081] 본 발명에서는 상기의 화합물을 이용하여 청색 인광 발광소자를 제작하여 유기화합물의 특성을 평가하였다.

[0082] 제조예 1. 중간체의 합성

[0083] 카바졸 4g, 1-브로모-3-아이오도벤젠 8.08g 와 탄산칼륨 13.2g, 구리파우더 3.08g 그리고 다이벤조-18-크라운-6 0.63g을 o-다이클로로벤젠 30mL 에 넣고 녹인 후에 온도를 100℃로 유지시키며 환류 시켜 주었다. 반응이 끝난 후 다이클로로메탄과 증류수를 이용하여 추출 후, 용매를 건조시켜 주었다. 이 고체를 여과 정제하여 중간체 9-(3-브로모페닐)-9H-카바졸 화합물을 얻을 수 있었다.

[0084] 제조예 2. 중간체의 합성

[0085] 9-(3-브로모페닐)-9H-카바졸 0.31g, 3-브로모-9-카바졸 0.2g와 탄산칼륨 0.44g, 구리파우더 0.1g 그리고 다이벤조-18-크라운-6 0.02g을 o-다이클로로벤젠 10 mL에 넣고 녹인 후에 온도를 100℃로 유지시키며 환류시켜 주었다. 반응이 끝난 후 다이클로로메탄과 증류수를 이용하여 추출 후, 용매를 건조시켜 주었다. 이 고체를 여과 정제하여 중간체 9-(3-(9H-카바졸-9-일)페닐)-3-브로모-9H-카바졸 화합물을 얻을 수 있었다.

[0086] 제조예 3. 중간체의 합성

[0087] 3-브로모-9H-카바졸 6.56g, 1,3-다이아이오도벤젠 4g와 탄산칼륨 13.4g, 구리파우더 3.08g 그리고 다이벤조-18-크라운-6 0.64g을 o-다이클로로벤젠 45mL에 넣고 녹인 후에 온도를 100℃로 유지시키며 환류시켜 주었다. 반응이 끝난 후 다이클로로메탄과 증류수를 이용하여 추출 후, 용매를 건조시켜 주었다. 이 고체를 여과 정제하여 중간체 1,3-비스(3-브로모-9H-카바졸-9-일)벤젠 화합물을 얻을 수 있었다.

[0088] 제조예 4. 중간체의 합성

[0089] 9-(3-브로모페닐)-9H-카바졸 4.75g, 3,6-다이브로모-9-카바졸 4g 와 탄산칼륨 6.8g, 구리파우더 1.56g 그리고 다이벤조-18-크라운-6 0.97g 을 o-다이클로로벤젠 40 mL에 넣고 녹인 후에 온도를 100℃로 유지시키며 환류시켜 주었다. 반응이 끝난 후 다이클로로메탄과 증류수를 이용하여 추출 후, 용매를 건조시켜주었다. 이 고체를 여과 정제하여 중간체 9-(3-(9H-카바졸-9-일)페닐)-3,6-다이브로모-9H-카바졸 화합물을 얻을 수 있었다.

[0090] 제조예 5. 중간체의 합성

[0091] 1,3,5-트리브로모벤젠 1g을 테트라하이드로퓨란 20 mL을 넣고 온도를 -78℃로 만들어 주었다. 그 후에 부틸리튬 1.65 mL 천천히 적가 시켜주었다. 온도를 유지시켜 주며 2시간 동안 교반시켜 주었고 클로로트리메틸실란을 0.45g 을 다시 천천히 적가한 후 상온으로 올려주었다. 반응이 종결한 후, 트리메틸아민과 메탄올을 넣고 교반하였고, 추출 후에 용매를 건조하였다. 이 고체를 여과 정제하여 중간체 (3,5-다이브로모페닐)트리메틸실란 화합물을 얻을 수 있었다.

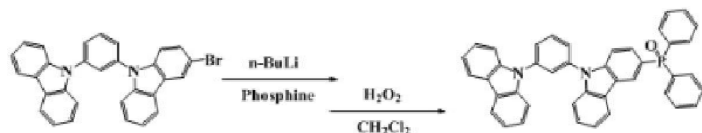
[0092] 제조예 6. 중간체의 합성

[0093] 9H-카바졸 1.19g, (3,5-다이브로모페닐)트리메틸실란 1g와 탄산칼륨 3.57g, 구리파우더 0.82g 그리고 다이벤조-18-크라운-6 0.17g 을 o-다이클로로벤젠 20 mL 에 넣고 녹인 후에 온도를 100℃ 로 유지시키며 환류시켜 주었다. 반응이 끝난 후 다이클로로메탄과 증류수를 이용하여 추출 후, 용매를 건조시켜 주었다. 이 고체를 여과 정제하여 중간체 9,9'-(5-(트리메틸실릴)-1,3-페닐렌)비스(9H-카바졸) 화합물을 얻을 수 있었다.

[0094] 제조예 7. 중간체의 합성

[0095] 9,9'-(5-(트리메틸실릴)-1,3-페닐렌)비스(9H-카바졸) 1g 과 N-브로모석신이미드 0.40 g을 다이메틸포르아마이드 20 mL 에 넣고 녹인후 상온으로 반응을 시켜 주었다. 반응이 끝난후 다이클로로메탄과 증류수를 이용하여 추출 후, 용매를 저조 시켜주었다. 이 고체를 여과정제하여 중간체 9,9'-(5-브로모-1,3-페닐렌)비스(9H-카바졸) 화합물을 얻을 수 있었다.

[0096] 제조예 8. 화합물 1의 합성



[0097]

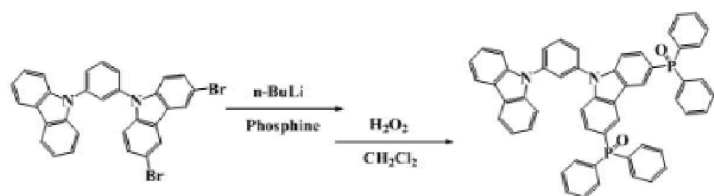
[0098] 9-(3-(9H-카바졸-9-일)페닐)-3-브로모-9H-카바졸 2g에 테트라하이드로퓨란 30 mL을 넣고 온도를 -78℃로 만들어 주었다. 그 후에 부틸리튬 2.13 mL 천천히 적가 시켜주었다. 온도를 유지시켜주며 2시간 동안 교반시켜주었고 클로로다이페닐포스핀을 1.17g 을 다시 천천히 적가한 후 상온으로 올려주었다. 반응이 종결한 후, 메탄올을 넣고 교반하였고, 추출 후에 용매를 건조하였다. 이 고체에 다이클로로메탄을 넣고 교반하면서, 소량의 과산화수소를 넣어 흰색의 포스핀산화물인 9-(3-(9H-카바졸-9-일)페닐)-3-(다이페닐포스포닐)-9H-카바졸 (화합물 1이라 한다)을 얻을 수 있었다.

[0099] 핵자기 공명분석과 질량분석을 하여 얻은 분석자료는 아래와 같았다.

[0100] NMR-1H (200 MHz, CDC13) : δ 8.61-8.55 (d, 2H), 8.17-8.09 (dd, 3H), 7.91-7.64 (m, 10H), 7.58-7.39 (m, 9H), 7.36-7.31 (m, 3H), 7.27-7.25 (d, 2H).

[0101] MS (FAB) m/z 608 [(M + 1)⁺].

[0102] 제조예 9. 화합물 2의 합성



[0103]

[0104] 9-(3-(9H-카바졸-9-일)페닐)-3,6-다이브로모-9H-카바졸 2.06g에 테트라하이드로퓨란 30 mL을 넣고 온도를 -78℃로 만들어 주었다. 그 후에 부틸리튬 3.63 mL 천천히 적가 시켜주었다. 온도를 유지시켜주며 2시간 동안 교반시켜주었고 클로로다이페닐포스핀을 2.00g 을 다시 천천히 적가한 후 상온으로 올려주었다. 반응이 종결한 후, 메탄올을 넣고 교반하였고, 추출 후에 용매를 건조하였다. 이 고체에 다이클로로메탄을 넣고 교반하면서, 소량의 과산화수소를 넣어 흰색의 포스핀산화물인 상기 대표예 화합물의 구조를 갖는 9-(3-(9H-카바졸-9-일)페닐)-3,6-비스(다이페닐포스포닐)-9H-카바졸 (화합물 2라 한다)을 얻을 수 있었다.

[0105] 핵자기 공명분석과 질량분석을 하여 얻은 분석자료는 아래와 같았다.

[0106] NMR-1H (200 MHz, CDC13) : δ 8.50-8.44 (d, 2H), 8.16-8.12 (d, 2H), 7.92-7.64 (m, 14H), 7.60-7.38 (m, 18H), 7.34-7.30 (dd, 2H).

[0107] MS (FAB) m/z 808 [(M + 1)⁺].

[0108] 실시예 1

[0109] 본 발명에서 합성한 코어구조로서 페닐을 갖고 에너지 준위가 다른 두 단위로서 카바졸 단위와 다이페닐포스핀 옥사이드가 치환된 카바졸 단위를 갖는 화합물 1을 청색 도펀트로서 알려져 있는 FCNIrpic를 이용하여 청색 인광 소자를 구성하였다.

[0110] 본 화합물은 3.00 eV의 삼중항 에너지를 보였으며, 호모(HOMO) 에너지 준위는 두 개의 에너지 준위 6.13 eV 와 6.21 eV, 루모(LUMO) 에너지 준위는 2.56 eV와 2.64 eV를 나타내었다. 6.13 eV와 2.56 eV는 페닐카바졸 단위 에 의하여 나타났으며, 6.21 eV와 2.64 eV는 다이페닐포스핀옥사이드가 포함된 카바졸 단위에 의하여 나타났다.

[0111] 소자의 구조는 ITO/폴리(3,4-에틸렌다이옥시)사이오렌:폴리스티렌술포네이트(PEDOT:PSS, 60nm)/N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine(NPD, 20nm)/mCP(10nm)/화합물1:bis((3,5-difluoro-4-cyanophenyl)pyridine) iridium picolinate(FCNIrpic,30nm, 3%)/diphenylphosphine oxide-4-(triphenylsilyl)phenyl(TSP01,20nm)/LiF/Al이었다.

[0112] 소자의 제작은 다음과 같은 방법으로 수행하였다. ITO 기판은 순수와 이소프로필 알코올을 이용하여 초음파에서 30분간 세정한 후 ITO 기판을 단파장의 자외선을 이용하여 표면처리한 후 1×10^{-6} torr의 압력하에서 유기물을 진공 증착하였다. PEDOT:PSS는 스핀코팅 방법을 이용하여 코팅하였으며, NPD, mCP, TSP01은 0.1 nm/s의 속도로 증착하여 각 두께에 해당하는 막을 형성하였고, 화합물 1은 FCNIrpic 도펀트와 진공증착하였으며, 이때 증착속도는 화합물 1은 0.1 nm/s, FCNIr은 0.003 nm/s였다. LiF는 0.01 nm/s의 속도로 1 nm의 두께로 형성하였고, Al은 0.5nm/sec의 증착속도로 100 nm의 두께로 형성하였다. 소자 형성후 CaO 흡습제와 유리 커버 글라스를 이용하여 소자를 밀봉하였다.

[0113] 실시예 1, 2, 비교예 1의 양자효율은 Forrest 논문(G. Gu and S. R. Forrest, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, Vol. 4, No. 1, January / February 1998, p. 83 - 99)에 기재된 바에 따라 측정하였다.

[0114] 실시예 1, 2, 비교예 1의 전력효율은 Forrest 논문(S.R.Forrest, D.D.C.Bradley, M.E.Thompson, Advanced materials 2003, 15, pp.1043)방법으로 측정하였다.

[0115] 본 발명에서 제작한 청색 유기 전계 발광 소자는 $1,000 \text{ cd/m}^2$ 기준 구동 전압 6.7 V, 전력 효율 14.8 lm/W 및 최대 양자 효율 25.1 %를 보였다.

[0116] 실시예 2

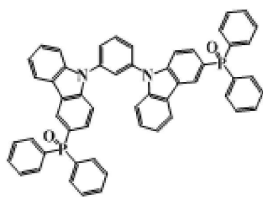
[0117] 본 발명에서 합성한 코어구조로서 페닐을 갖고 에너지 준위가 다른 두 단위로서 카바졸 단위와 다이페닐포스핀 옥사이드가 2개 치환된 카바졸 단위를 갖는 화합물 2를 청색 도펀트로서 알려져 있는 FCNIr를 이용하여 청색 인광 소자를 구성하였다.

[0118] 본 화합물은 3.00 eV의 삼중항 에너지를 보였으며, 호모(HOMO) 에너지 준위는 두 개의 에너지 준위 6.13 eV와 6.35 eV, 루모(LUMO) 에너지 준위는 2.55 eV와 2.77 eV를 나타내었다. 6.13 eV와 2.55 eV는 페닐카바졸 단위 에 의하여 나타났으며, 6.35 eV와 2.77 eV는 다이페닐포스핀옥사이드가 2개 포함된 카바졸 단위에 의하여 나타났다.

[0119] 소자의 구조는 ITO/PEDOT:PSS(60nm)/NPD(20nm)/mCP(10nm)/화합물2:FCNIrpic(30nm, 3%)/TSP01(20nm)/LiF/Al이었다. 소자의 제작은 화합물 1 대신 화합물 2를 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 수행하였다.

[0120] 본 발명에서 제작한 청색 유기 전계 발광 소자는 $1,000 \text{ cd/m}^2$ 기준 구동 전압 6.5 V, 전력 효율 13.4 lm/W 및 최대 양자 효율 24.3 %를 보였다.

[0121] 비교예 1



[0122]

[0123] 비교화합물 1

[0124] 기존의 화합물과 유사하게 전자수송단위와 전자수송단위를 모두 포함하는 일반 구조의 비교화합물 1을 청색 도펀트로서 알려져 있는 FCNIr를 이용하여 청색 인광 소자를 구성하였다. 본 화합물은 3.00 eV의 삼중항 에너지를 보였으며, 호모(HOMO) 에너지 준위 6.25 eV, 루모(LUMO) 에너지 준위 2.69 eV를 나타내었다.

[0125] 비교예로서 소자의 구조는 ITO/PEDOT:PSS(60nm)/NPD(20nm)/mCP(10nm)/비교화합물 1:FCNIrpic(30nm, 3%)/TSP01(20nm)/LiF/Al이었다.

[0126] 소자의 제작은 발광층의 호스트 재료로서 화합물 1을 사용하지 않고 대신에 비교화합물 1을 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 같은 방법으로 수행하였다.

[0127] 본 발명에서 제작한 청색 유기 전계 발광 소자는 $1,000 \text{ cd/m}^2$ 기준 구동 전압 9.5 V, 전력 효율 4.7 lm/W 및

최대 양자 효율 14.7 %를 보였다.

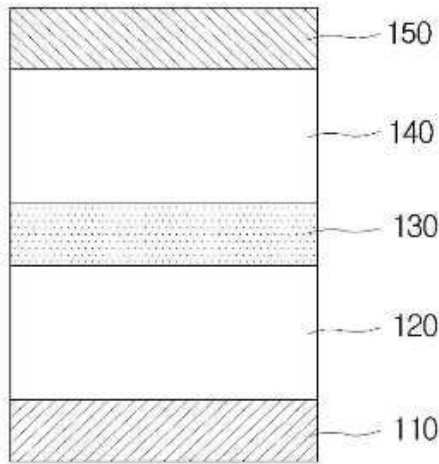
[0128]

표 4

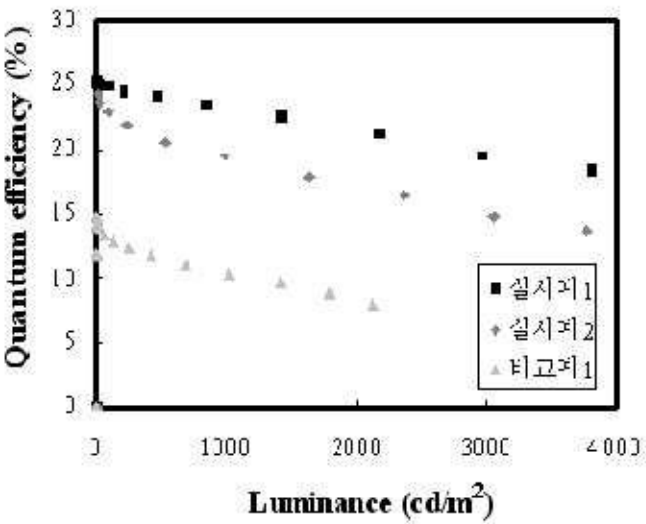
	실시예 1	실시예 2	비교예 1
양자효율 (%)	25.1	24.3	14.2
구동전압(V)	6.7	6.5	9.5
전력효율(lm/W)	14.8	13.4	4.7

도면

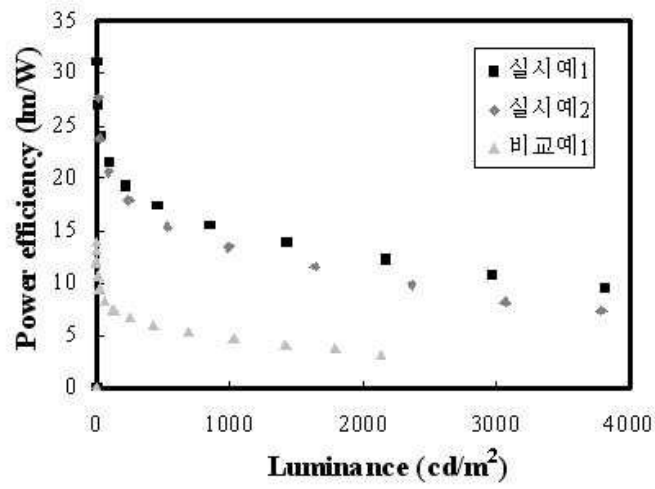
도면1



도면2



도면3



专利名称(译)	用于高效有机电致发光器件的化合物和含有该化合物的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR101211475B1	公开(公告)日	2012-12-12
申请号	KR1020100065262	申请日	2010-07-07
[标]申请(专利权)人(译)	檀国大学校产学协力团		
申请(专利权)人(译)	檀国大学学术合作		
当前申请(专利权)人(译)	檀国大学学术合作		
[标]发明人	LEE JUN YEOB 이준엽 JEON SOON OK 전순옥 SON HYO SUK 손효석 YOOK KYOUNG SOO 육경수 JANG SANG EOK 장상억		
发明人	이준엽 전순옥 손효석 육경수 장상억		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0072 H01L51/5056 H01L51/5072 C07F9/5325 H05B33/20 H01L51/0071 H01L51/5028		
代理人(译)	Yisuyeol		
其他公开文献	KR1020120004654A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

用途：提供高效有机电致发光器件的化合物，通过体现独立能级的特性提高电子注入性能，并通过控制电致发光层中的电荷平衡来提高效率。

组成：高效有机电致发光的化合物装置的化学式为1：ACB。在化学式1中，A单元和B单元彼此不同，A单元和B单元的HOMO能级和LUMO能级彼此不同地相互交叉。A单元，B单元和C单元包括共轭结构，并且共轭结构通过彼此连接而膨胀。有机电致发光器件包括第一电极，第二电极和电致发光层。电致发光层包含主体和掺杂剂。主体包含化合物。

