



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2009년06월09일
(11) 등록번호 10-0901888
(24) 등록일자 2009년06월02일

(51) Int. Cl.

C09K 11/06 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2008-0112855

(22) 출원일자 2008년11월13일

심사청구일자 2008년11월13일

(56) 선행기술조사문헌

KR1020050122943 A

KR1020060043941 A

JP평성07048385 A

(73) 특허권자

(주)그라셀

서울특별시 성동구 성수동2가 284-25

(72) 발명자

김현

서울시 노원구 하계2동 273

권혁주

서울시 동대문구 장안동 삼성래미안2차 224-2001

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

권오식, 박창희

전체 청구항 수 : 총 12 항

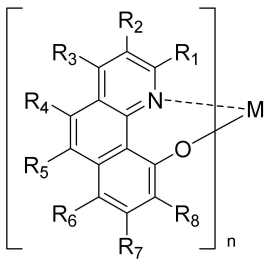
심사관 : 정명주

(54) 신규한 전기발광용 유기금속 화합물 및 이를 발광재료로 채용하고 있는 전기발광소자

(57) 요약

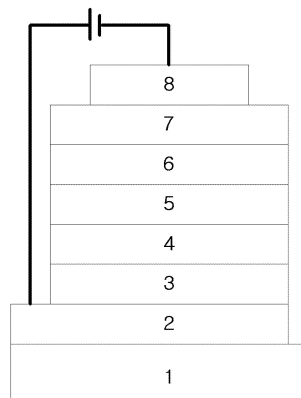
본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 전기 발광 화합물 및 이를 호스트 재료로 함유하는 전기 발광 소자에 관한 것이다.

[화학식 1]



본 발명에 따른 전기 발광 화합물은 OLED 소자에서 전기 발광 재료의 호스트 재료로 사용되어 기존 호스트 재료에 비해 적색 발광효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 양호한 OLED를 제조할 수 있는 장점이 있다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

김봉옥

서울시 강남구 삼성동 4번지 한솔아파트 101-1108

김성민

서울시 양천구 목1동 917 목동파라곤 109동 902호

윤승수

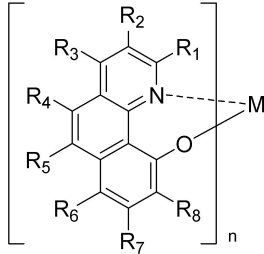
서울시 강남구 수서동 삼익아파트 405-1409

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 전기 발광 화합물.

[화학식 1]



[M은 2가 금속 또는 3가 금속이며;

n은 M의 양이온 가이고;

R₁ 내지 R₈은 서로 독립적으로 수소, (C1-C30)알킬, 할로젠, 시아노, (C3-C30)시클로알킬, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 5원 내지 6원의 헤테로시클로알킬, 아다만틸, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C6-C30)아릴, (C1-C30)알콕시, (C6-C30)아릴옥시, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 (C3-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아릴티오, (C1-C30)알킬카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C6-C30)아릴보라닐, 디(C1-C30)알킬보라닐, 나이트로 또는 하이드록시이고;

상기 R₁ 내지 R₈의 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아다만틸, 알케닐, 알키닐, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 헤테로아릴, 아릴티오, 알킬카보닐, 아릴카보닐, 알킬아미노, 아릴아미노, 트리알킬실릴, 디알킬아릴실릴, 트리아릴실릴, 디아릴보라닐 또는 디알킬보라닐은 (C1-C30)알킬, 할로젠, 시아노, (C3-C30)시클로알킬, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 5원 내지 6원의 헤테로시클로알킬, (C7-C30)바이시클로알킬, 아다만틸, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C6-C30)아릴, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C6-C30)아릴옥시, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 (C3-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아릴티오, (C1-C30)알콕시카보닐, (C1-C30)알킬카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 카르복실, 나이트로 및 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기가 더 치환될 수 있으며;

단, R₁ 내지 R₈이 모두 수소인 경우는 제외한다.]

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 R₁ 내지 R₈은 서로 독립적으로 수소, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르에틸, 퍼플루오르부틸, 염소, 플루오르, 시아노, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 피롤리디닐, 이미다졸리디닐, 피라졸리디닐, 피페리디닐, 피페라지닐, 모폴리닐, 티오모폴리닐, 피리달, 퓨릴, 티에닐, 피롤릴, 피라졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 이미다졸릴, 옥사디아졸릴, 티아디아졸릴, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 벤조옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이미다졸릴, 카바졸릴, 페난트리디닐, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 아다만틸, 에테닐, 메틸에테닐, 페닐에테닐, 에틸닐, 메틸에틸닐, 페닐에틸닐, 페닐, 비페닐, 나프틸, 9,9-디메틸플루오레닐, 9,9-디페닐플루오레닐, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, t-부톡시, 헥실옥시, 페닐옥시, 페닐티오, 메틸카보닐, 에틸카보닐, 부틸카보닐, 페닐카보닐, 나프틸카보닐, 디메틸아미노, 디에틸아미노, 디페닐아미노, 트리메틸실릴, 트리페닐실릴, t-부틸디메틸실릴, 디페닐보라닐, 디메틸보라닐, 나이트로 또는 하이드록시이고;

상기 R₁ 내지 R₈의 피롤리디닐, 이미다졸리디닐, 피라졸리디닐, 피페리디닐, 피페라지닐, 모폴리닐, 티오모폴리닐, 피리딜, 퓨릴, 티에닐, 피롤릴, 피라졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 이미다졸릴, 옥사디아졸릴, 티아디아졸릴, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 벤조옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이미다졸릴, 카바졸릴, 페난트리디닐, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 페닐, 비페닐, 나프틸, 플루오레닐, 디페닐보라닐 또는 디메틸보라닐은 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르메틸, 퍼플루오르부틸, 염소, 플루오르, 시아노, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 피롤리디닐, 이미다졸리디닐, 피라졸리디닐, 피페리디닐, 피페라지닐, 모폴리닐, 티오모폴리닐, 피리딜, 퓨릴, 티에닐, 피롤릴, 피라졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 이미다졸릴, 옥사디아졸릴, 티아디아졸릴, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 벤조옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이미다졸릴, 카바졸릴, 페난트리디닐, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 아다만틸, 에테닐, 메틸에테닐, 페닐에테닐, 에티닐, 메틸에티닐, 페닐에티닐, 페닐, 비페닐, 나프틸, 9,9-디메틸플루오레닐, 9,9-디페닐플루오레닐, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, t-부톡시, 헥실옥시, 메틸티오, 페닐옥시, 페닐티오, 메톡시카보닐, 부톡시카보닐, 메틸카보닐, 에틸카보닐, 부틸카보닐, 페닐카보닐, 나프틸카보닐, 디메틸아미노, 디에틸아미노, 디페닐아미노, 트리메틸실릴, 트리페닐실릴, t-부틸디메틸실릴, 카르복실, 나이트로 및 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있는 것을 특징으로 하는 전기 발광 화합물.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 M은 Be, Zn, Mg, Ca, Cu 및 Ni로 이루어진 군에서 선택되는 2가 금속인 것을 특징으로 하는 전기 발광 화합물.

청구항 4

제 2 항에 있어서,

상기 M은 Al, In, Co, Ga 및 B 로 이루어진 군에서 선택되는 3가 금속인 것을 특징으로 하는 전기 발광 화합물.

청구항 5

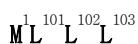
제 1항 내지 제 4항에서 선택되는 어느 한 항에 따른 전기 발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 전기 발광 소자.

청구항 6

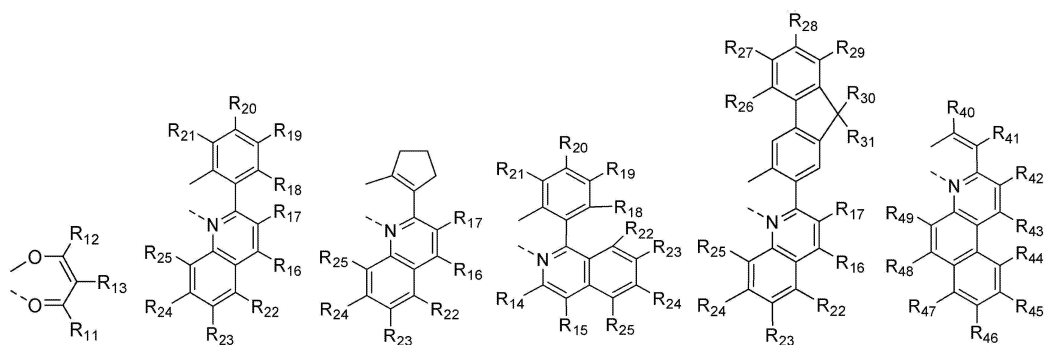
제 5항에 있어서,

상기 전기 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어져 있으며, 상기 유기물층은 상기 전기발광화합물 하나 이상과 하기 화학식 2로 표시되는 도판트 하나 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 전기 발광 소자.

[화학식 2]



여기서 M¹은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 리간드 L¹⁰¹, L¹⁰² 및 L¹⁰³는 서로 독립적으로 하기 구조로부터 선택되어진다.



[R₁₁ 내지 R₁₃은 서로 독립적으로 수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C30)아릴 또는 할로젠이고;

R₁₄ 내지 R₂₉는 서로 독립적으로 수소, (C1-C30)알킬, (C1-C30)알콕시, (C3-C30)시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C6-C30)아릴, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, SF₅, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 시아노 또는 할로젠이고, 상기 R₁₄ 내지 R₂₉의 알킬, 시클로알킬, 알케닐 또는 아릴은 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴 또는 할로젠으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있으며;

R₃₀ 및 R₃₁는 서로 독립적으로 수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬 또는 (C1-C30)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C30)아릴이고;

R₄₀ 및 R₄₁는 서로 독립적으로 수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C20)알킬, (C6-C20)아릴, 할로젠, 시아노, 트리(C1-C20)알킬실릴, 디(C1-C20)알킬(C6-C20)아릴실릴, 트리(C6-C20)아릴실릴, (C1-C20)알콕시, (C1-C20)알킬카보닐, (C6-C20)아릴카보닐, 디(C1-C20)알킬아미노 또는 디(C6-C20)아릴아미노이거나, R₄₀과 R₄₁는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C12)알킬렌 또는 (C3-C12)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하며;

상기 R₄₀ 및 R₄₁의 알킬, 아릴 또는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C12)알킬렌 또는 (C3-C12)알케닐렌으로 연결되어 형성된 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리는 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C20)알킬, 할로젠, 시아노, 트리(C1-C20)알킬실릴, 디(C1-C20)알킬(C6-C20)아릴실릴, 트리(C6-C20)아릴실릴, (C1-C20)알콕시, (C1-C20)알킬카보닐, (C6-C20)아릴카보닐, 디(C1-C20)알킬아미노, 디(C6-C20)아릴아미노, 페닐, 나프틸, 안트릴, 플루오레닐, 스피로바이플루오레닐 또는 로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있거나, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C20)알킬, 할로젠, 시아노, 트리(C1-C20)알킬실릴, 디(C1-C20)알킬(C6-C20)아릴실릴, 트리(C6-C20)아릴실릴, (C1-C20)알콕시, (C1-C20)알킬카보닐, (C6-C20)아릴카보닐, 디(C1-C20)알킬아미노, 디(C6-C20)아릴아미노, 페닐, 나프틸, 안트릴, 플루오레닐, 스피로바이플루오레닐 또는 로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기가 치환된 페닐 또는 플루오레닐로 더 치환될 수 있고;

R₄₂ 내지 R₄₉은 서로 독립적으로 수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은(C1-C20)알킬, (C1-C20)알콕시, (C3-C12)시클로알킬, 할로젠, 시아노, (C6-C20)아릴, (C4-C20)헤테로아릴, 트리(C1-C20)알킬실릴, 디(C1-C20)알킬(C6-C20)아릴실릴 또는 트리(C6-C20)아릴실릴이다.]

청구항 7

제6항에 있어서,

상기 유기물층에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 전기 발광 소자.

청구항 8

제6항에 있어서,

상기 유기물층에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으

로부터 선택되는 하나 이상의 금속을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 전기 발광 소자.

청구항 9

제6항에 있어서,

상기 유기물층에 상기 전기 발광 화합물과 녹색 또는 청색 발광을 하는 유기 화합물 또는 유기금속화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 전기 발광 소자.

청구항 10

제6항에 있어서,

상기 유기물층은 발광층 및 전하생성층을 포함하는 것을 특징으로 하는 전기 발광 소자.

청구항 11

제6항에 있어서,

한 쌍의 전극중 하나 이상의 내측표면에 환원성 도판트(dopant)와 유기물의 혼합 영역, 또는 산화성 도판트와 유기물의 혼합 영역이 배치되는 것을 특징으로 하는 전기 발광 소자.

청구항 12

제 1항 내지 제 4항에서 선택되는 어느 한 항에 따른 전기 발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 태양 전지.

명세서

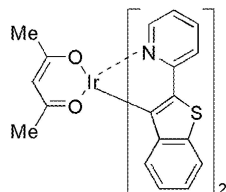
발명의 상세한 설명

기술분야

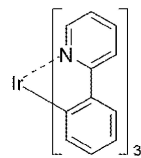
- <1> 본 발명은 전기전도특성이 뛰어나고, 고효율의 발광특성을 보이는 금속착물로 이루어진 전기 발광 화합물 및 이를 호스트 재료로 함유하는 전기발광소자에 관한 것이다.

배경기술

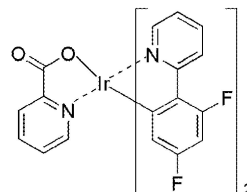
- <2> OLED에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재까지 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 전기발광의 메커니즘 상 인광 재료의 개발은 이론적으로 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있는 가장 좋은 방법 중 하나이다.
- <3> 현재까지 이리듐(III)착물 계열이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 각 RGB 별로 (acac)Ir(btp)₂, Ir(ppy)₃ 및 Firpic 등의 재료가 알려져 있다. 특히, 최근 일본, 구미에서 많은 인광 재료들이 연구되어지고 있다.



(acac)Ir(btp)₂



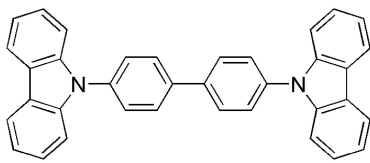
Ir(ppy)₃



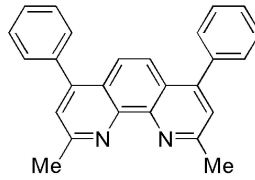
Firpic

<4>

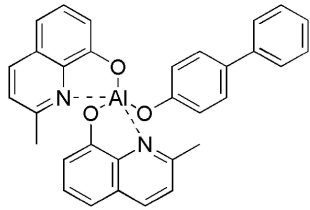
- <5> 인광 발광체의 호스트 재료로는 현재까지 CBP가 가장 널리 알려져 있으며, BCP 및 BA1q 등의 정공차단층을 적용한 고효율의 OLED가 공지되어 있으며, 일본의 파이오니어 등에서는 BA1q 유도체를 호스트로 이용한 고성능의 OLED가 공지되어 있다.



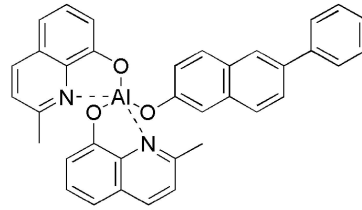
CBP



BCP



BAlq



BAlq 유도체

그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 매우 좋지 않아서, 진공 하에서 고온 증착 공정을 거칠 때, 물질이 변하는 등 단점을 갖고 있다. OLED에서 전력효율 = $(\pi/\text{전압}) \times \text{전류효율}$ 이므로, 전력효율은 전압에 반비례하는데, OLED의 소비 전력이 낮으려면 전력 효율이 높아야한다. 실제 인광 발광 재료를 사용한 OLED는 형광 발광 재료를 사용한 OLED에 비해 전류 효율(cd/A)이 상당히 높으나, 인광 발광 재료의 호스트로 BAlq 나 CBP 등 종래의 재료를 사용할 경우, 형광재료를 사용한 OLED에 비해 구동 전압이 높아서 전력 효율(lm/w)면에서 큰 이점이 없었다.

또한, OLED 소자에서의 수명 측면에서도 결코 만족할만한 수준이 되질 못하여 더욱 안정되고, 더욱 성능이 뛰어난 호스트 재료의 개발이 요구되고 있다.

기존의 이러한 부류의 착물은 이미 청색 등의 발광 재료로 1990년대 중반부터 많은 연구가 진행되어져 왔다. 그러나, 이들 재료는 단순히 발광 재료로만 적용되었을 뿐, 호스트 재료로 적용되는 예는 거의 알려져 있지 않았다.

발명의 내용

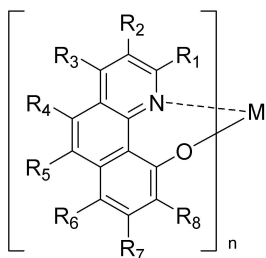
해결 하고자하는 과제

본 발명의 목적은 상기한 문제점들을 해결하기 위하여 기존의 유기물 호스트 재료에 비하여 발광 특성 및 물성 측면에서 매우 우수한 신규한 리간드 금속 착물을 골격으로 하는 전기 발광 화합물을 제공하는 것이며, 또 다른 목적으로서 제조된 전기 발광 화합물을 호스트 재료로 함유하는 전기 발광 소자를 제공하는 것이다. 또한, 본 발명의 또 다른 목적은 상기 전기 발광 화합물을 포함하는 유기 태양 전지를 제공하는 것이다.

과제 해결수단

본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 전기 발광 화합물 및 이를 호스트 재료로 함유하는 전기 발광 소자에 관한 것이다.

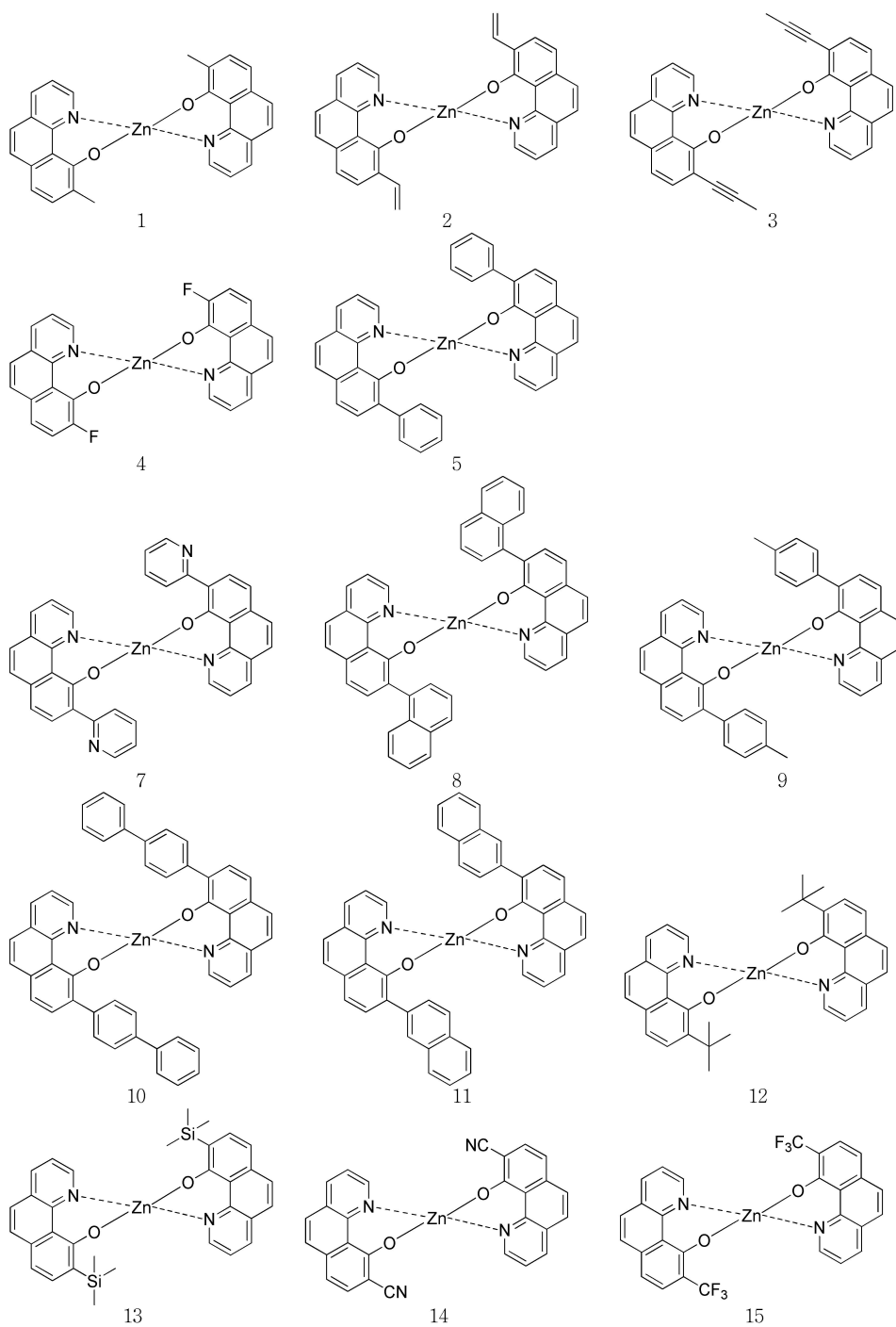
[화학식 1]

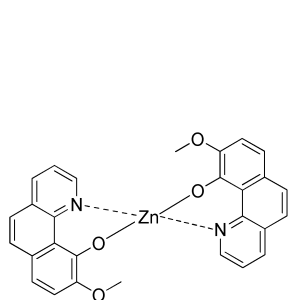


[M은 2가 금속 또는 3가 금속이며;

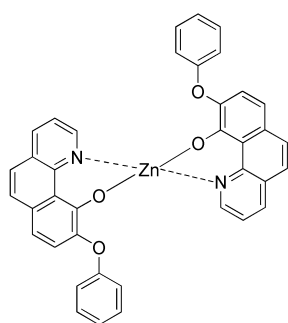
- <16> n은 M의 양이온 가이고;
- <17> R₁ 내지 R₈은 서로 독립적으로 수소, (C1-C60)알킬, 할로젠, 시아노, (C3-C60)시클로알킬, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 5원 내지 6원의 헤테로시클로알킬, (C7-C60)바이시클로알킬, 아다만틸, (C2-C60)알케닐, (C2-C60)알키닐, (C6-C60)아릴, (C1-C60)알콕시, (C1-C60)알킬티오, (C6-C60)아릴옥시, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 (C3-C60)헤테로아릴, (C6-C60)아릴티오, (C1-C60)알콕시카보닐, (C1-C60)알킬카보닐, (C6-C60)아릴카보닐, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C6-C60)아릴보라닐, 디(C1-C60)알킬보라닐, 카르복실, 나이트로 또는 하이드록시이고;
- <18> 상기 R₁ 내지 R₈의 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 바이시클로알킬, 아다만틸, 알케닐, 알키닐, 아릴, 알콕시, 알킬티오, 아릴옥시, 헤테로아릴, 아릴티오, 알콕시카보닐, 알킬카보닐, 아릴카보닐, 알킬아미노, 아릴아미노, 트리알킬실릴, 디알킬아릴실릴, 트리아릴실릴, 디아릴보라닐 또는 디알킬보라닐은 (C1-C60)알킬, 할로젠, 시아노, (C3-C60)시클로알킬, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 5원 내지 6원의 헤테로시클로알킬, (C7-C60)바이시클로알킬, 아다만틸, (C2-C60)알케닐, (C2-C60)알키닐, (C6-C60)아릴, (C1-C60)알콕시, (C1-C60)알킬티오, (C6-C60)아릴옥시, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 (C3-C60)헤테로아릴, (C6-C60)아릴티오, (C1-C60)알콕시카보닐, (C1-C60)알킬카보닐, (C6-C60)아릴카보닐, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 카르복실, 나이트로 및 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기가 더 치환될 수 있으며;
- <19> 단, R₁ 내지 R₈이 모두 수소인 경우는 제외한다.]
- <20> 본 발명에 기재된 “알킬”, “알콕시” 및 그 외 “알킬” 부분을 포함하는 치환체는 직쇄 또는 분쇄 형태를 모두 포함한다.
- <21> 본 발명에 기재된 「아릴」은 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로, 각 고리에 적절하게는 4 내지 7개, 바람직하게는 5 또는 6개의 고리원자를 포함하는 단일 또는 융합고리계를 포함한다. 구체적인 예로 페닐, 나프틸, 비페닐, 안트릴, 인데닐(indenyl), 플루오레닐, 페난트릴, 트라이페닐레닐, 피렌일, 페틸렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란텐일 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다. 상기 나프틸은 1-나프틸 및 2-나프틸을 포함하며, 안트릴은 1-안트릴, 2-안트릴 및 9-안트릴을 포함하며, 플루오레닐은 1-플루오레닐, 2-플루오레닐, 3-플루오레닐, 4-플루오레닐 및 9-플루오레닐을 모두 포함한다.
- <22> 본 발명에 기재된 「헤테로아릴」은 방향족 고리 골격 원자로서 N, O, S 및 Si로부터 선택되는 1 내지 4개의 헤테로원자를 포함하고, 나머지 방향족 고리 골격 원자가 탄소인 아릴 그룹을 의미하는 것으로, 5 내지 6원 단환 헤테로아릴, 및 하나 이상의 벤젠 환과 축합된 다환식 헤테로아릴이며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 상기 헤테로아릴기는 고리내 헤테로원자가 산화되거나 사원화되어, 예를 들어 N-옥사이드 또는 4차 염을 형성하는 2가 아릴 그룹을 포함한다. 구체적인 예로 퓨릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 퓨라진일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단환 헤테로아릴, 벤조퓨란일, 벤조티오펜일, 이소벤조퓨란일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴 등의 다환식 헤테로아릴 및 이들의 상응하는 N-옥사이드(예를 들어, 피리딜 N-옥사이드, 퀴놀릴 N-옥사이드), 이들의 4차 염 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다.
- <23> 또한, 본 발명에 기재되어 있는 “(C1-C60)알킬” 부분이 포함되어 있는 치환체들은 1 내지 60개의 탄소수를 가질 수도 있고, 1 내지 20개의 탄소수를 가질 수도 있고, 1 내지 10개의 탄소수를 가질 수도 있다. “(C6-C60)아릴” 부분이 포함되어 있는 치환체들은 6 내지 60개의 탄소수를 가질 수도 있고, 6 내지 20개의 탄소수를 가질 수도 있고, 6 내지 12개의 탄소수를 가질 수도 있다. “(C3-C60)헤테로아릴” 부분이 포함되어 있는 치환체들은 3 내지 60개의 탄소수를 가질 수도 있고, 4 내지 20개의 탄소수를 가질 수도 있고, 4 내지 12개의 탄소수를 가질 수도 있다. “(C3-C60)시클로알킬” 부분이 포함되어 있는 치환체들은 3 내지 60개의 탄소수를 가질 수도 있고, 3 내지 20개의 탄소수를 가질 수도 있고, 3 내지 7개의 탄소수를 가질 수도 있다. “(C2-C60)알케닐 또는 알키닐” 부분이 포함되어 있는 치환체들은 2 내지 60개의 탄소수를 가질 수도 있고, 2 내지 20개의 탄소수를 가질 수도 있고, 2 내지 10개의 탄소수를 가질 수도 있다.

- <24> 상기 R_1 내지 R_8 은 서로 독립적으로 수소, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르메틸, 퍼플루오르부틸, 염소, 플루오르, 시아노, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 피롤리딘, 이미다졸리딘, 피라졸리딘, 피페리딘, 피페라지닐, 모폴리닐, 티오모폴리닐, 피리딜, 퓨릴, 티에닐, 피롤릴, 피라졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 이미다졸릴, 옥사디아졸릴, 티아디아졸릴, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 벤조옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이미다졸릴, 카바졸릴, 페난트리디닐, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 아다만틸, 에테닐, 메틸에테닐, 페닐에테닐, 에티닐, 메틸에티닐, 페닐에티닐, 페닐, 비페닐, 나프틸, 9,9-디메틸플루오레닐, 9,9-디페닐플루오레닐, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, t-부톡시, 헥실옥시, 메틸티오, 페닐옥시, 페닐티오, 메톡시카보닐, 부톡시카보닐, 메틸카보닐, 에틸카보닐, 부틸카보닐, 페닐카보닐, 나프틸카보닐, 디메틸아미노, 디에틸아미노, 디페닐아미노, 트리메틸실릴, 트리페닐실릴, t-부틸디메틸실릴, 디페닐보라닐, 디메틸보라닐, 카르복실, 나이트로 또는 하이드록시이고;
- <25> 상기 R_1 내지 R_8 의 피롤리딘, 이미다졸리딘, 피라졸리딘, 피페리딘, 피페라지닐, 모폴리닐, 티오모폴리닐, 피리딜, 퓨릴, 티에닐, 피롤릴, 피라졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 이미다졸릴, 옥사디아졸릴, 티아디아졸릴, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 벤조옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이미다졸릴, 카바졸릴, 페난트리디닐, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 페닐, 비페닐, 나프틸, 플루오레닐, 디페닐보라닐 또는 디메틸보라닐은 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르메틸, 퍼플루오르부틸, 염소, 플루오르, 시아노, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 피롤리딘, 이미다졸리딘, 피라졸리딘, 피페리딘, 피페라지닐, 모폴리닐, 티오모폴리닐, 피리딜, 퓨릴, 티에닐, 피롤릴, 피라졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 이미다졸릴, 옥사디아졸릴, 티아디아졸릴, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 벤조옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이미다졸릴, 카바졸릴, 페난트리디닐, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 아다만틸, 에테닐, 메틸에테닐, 페닐에테닐, 에티닐, 메틸에티닐, 페닐에티닐, 페닐, 비페닐, 나프틸, 9,9-디메틸플루오레닐, 9,9-디페닐플루오레닐, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, t-부톡시, 헥실옥시, 메틸티오, 페닐옥시, 페닐티오, 메톡시카보닐, 부톡시카보닐, 메틸카보닐, 에틸카보닐, 부틸카보닐, 페닐카보닐, 나프틸카보닐, 디메틸아미노, 디에틸아미노, 디페닐아미노, 트리메틸실릴, 트리페닐실릴, t-부틸디메틸실릴, 카르복실, 나이트로 및 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.
- <26> 상기 화학식 1에서 M은 Be, Zn, Mg, Ca, Cu 및 Ni로 이루어진 군에서 선택되는 2가 금속이거나 Al, In, Co, Ga 및 B로 이루어진 군에서 선택되는 3가 금속이다.
- <27> 본 발명에 따른 상기 화학식 1의 전기 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 하기 화합물이 본 발명을 한정하는 것은 아니다.

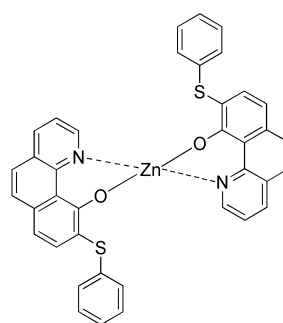




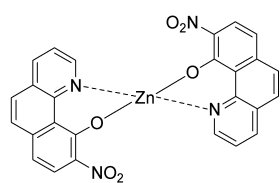
16



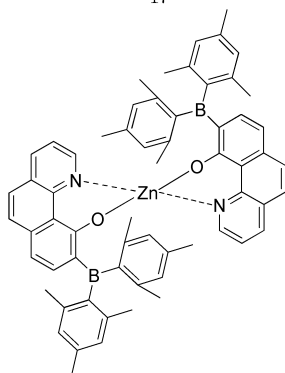
17



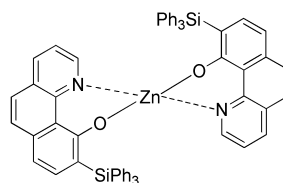
18



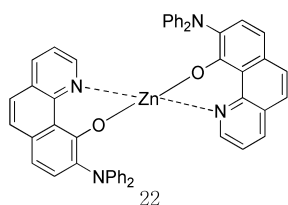
19



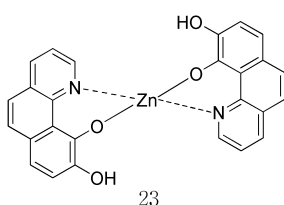
20



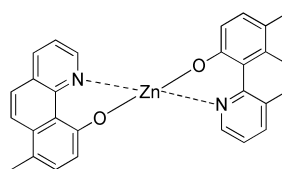
21



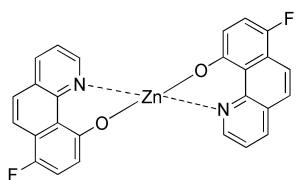
22



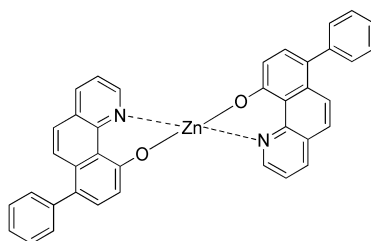
23



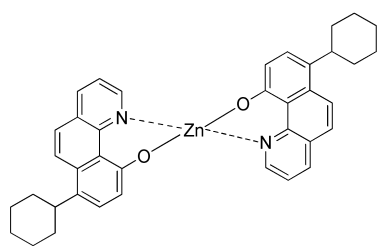
24



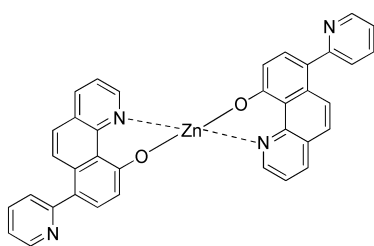
25



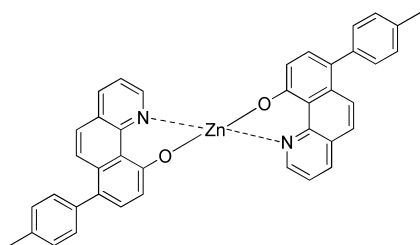
26



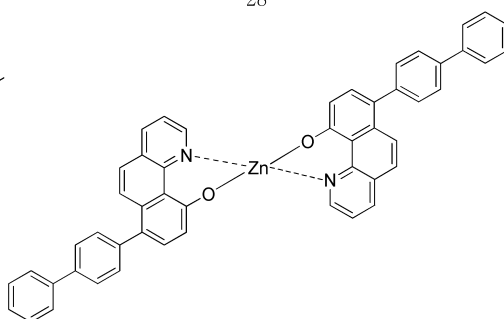
27



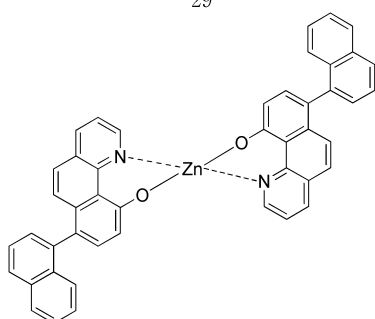
28



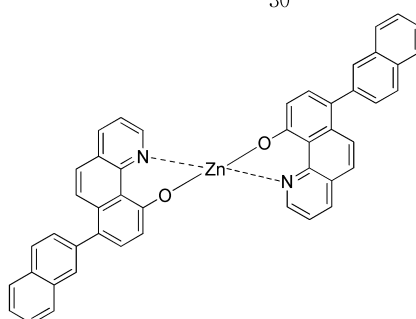
29



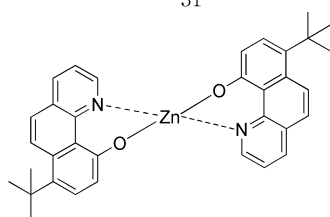
30



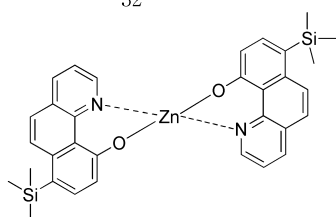
31



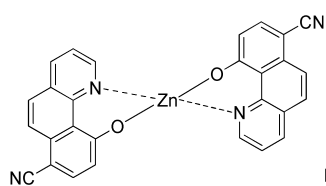
32



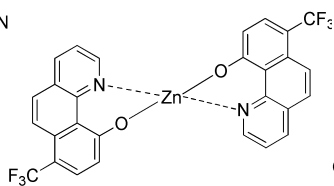
33



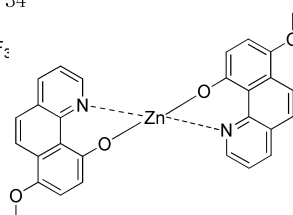
34



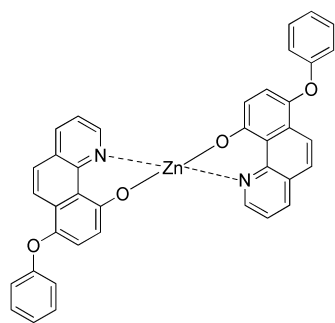
35



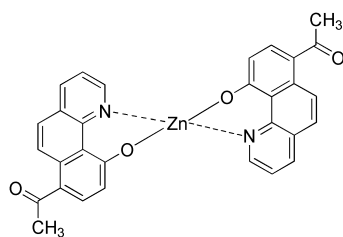
36



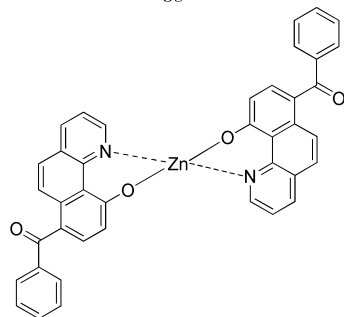
37



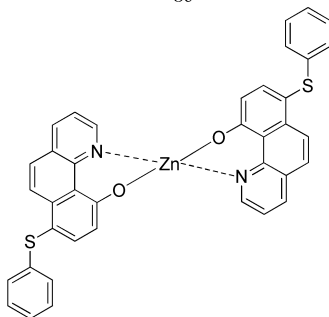
38



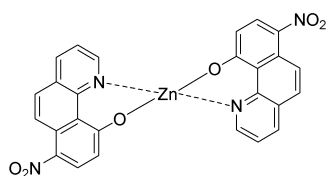
39



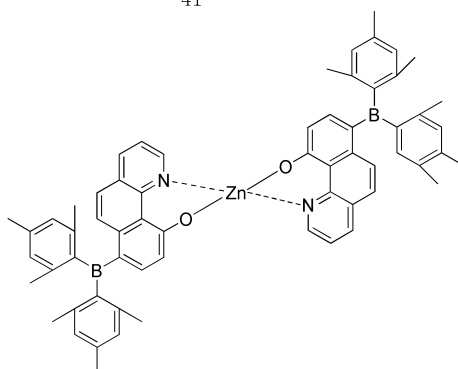
40



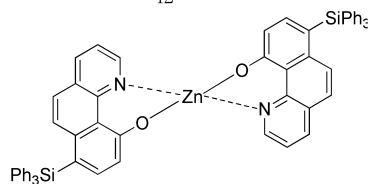
41



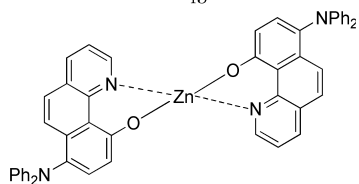
42



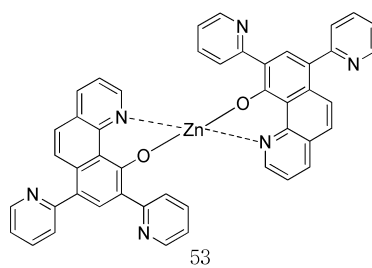
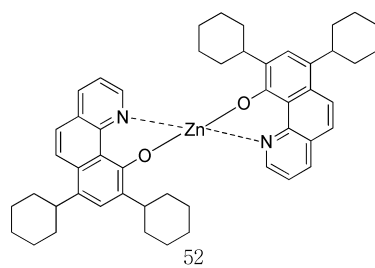
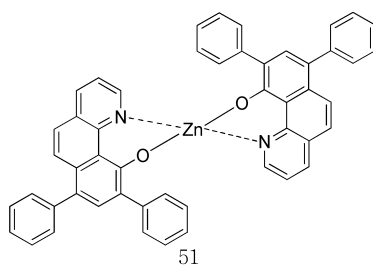
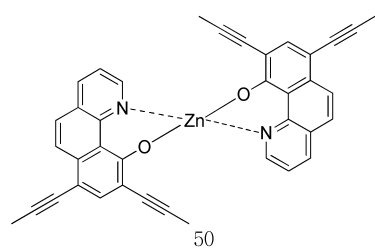
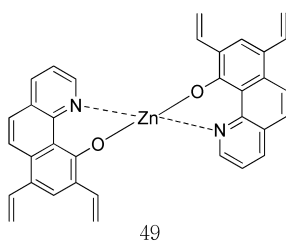
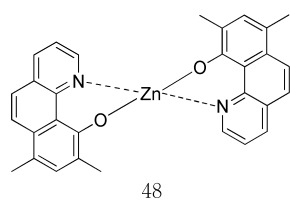
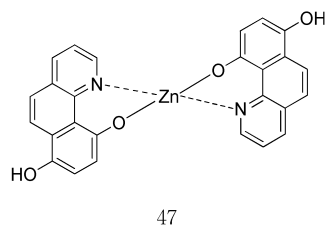
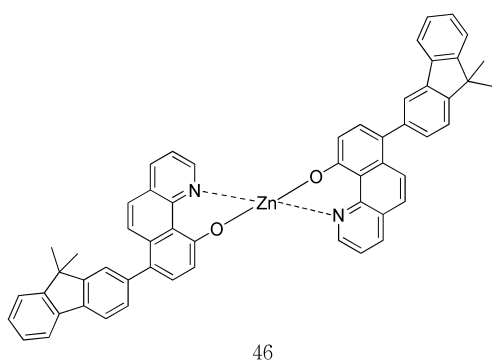
43

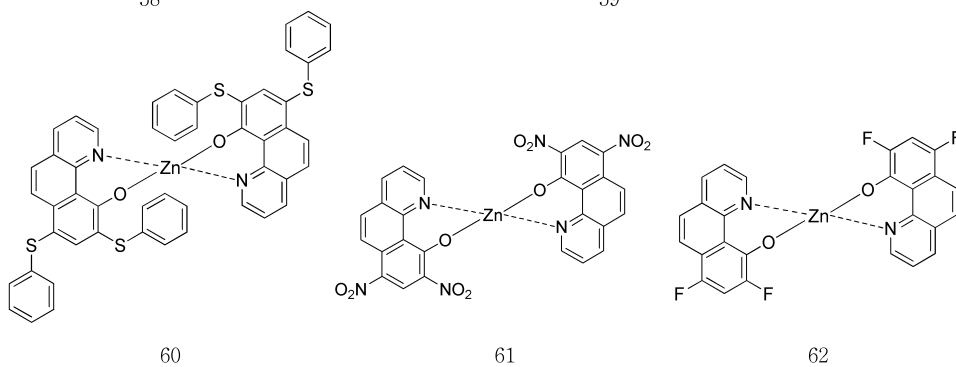
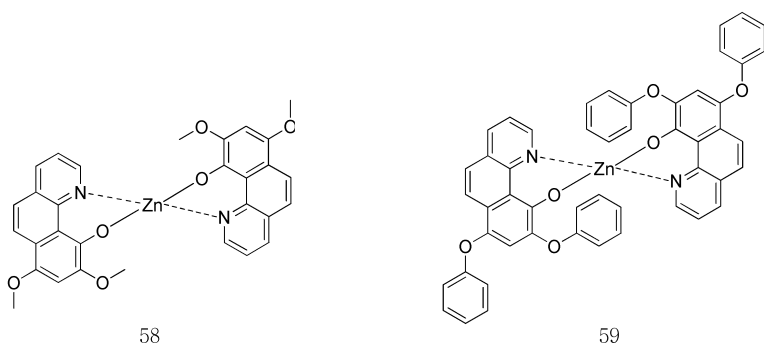
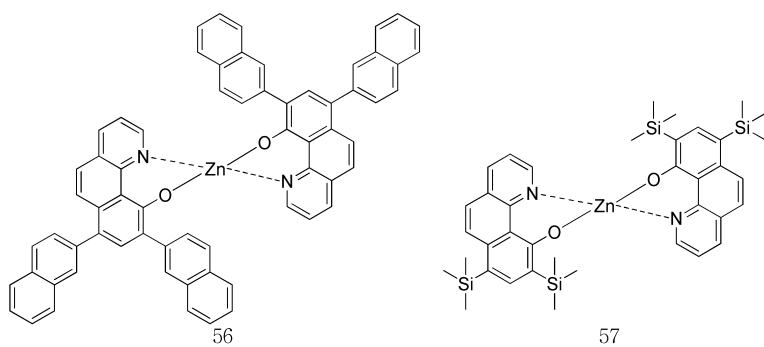
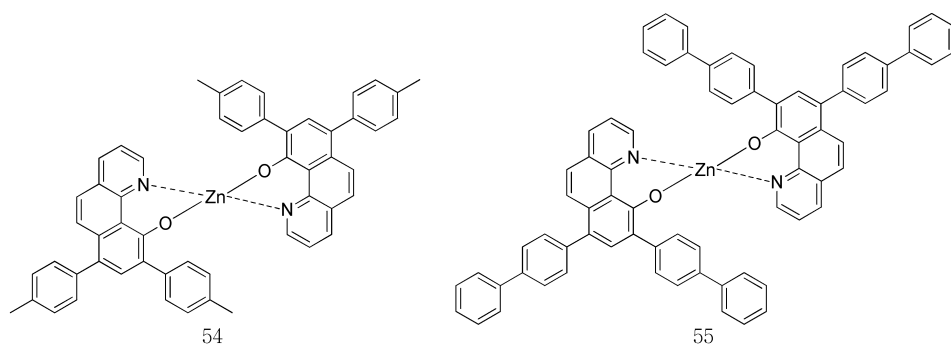


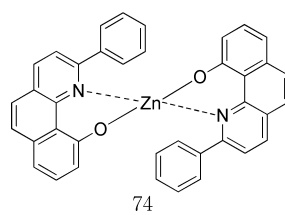
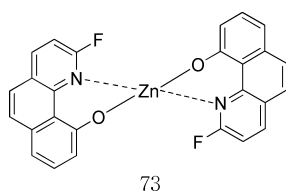
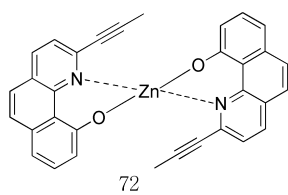
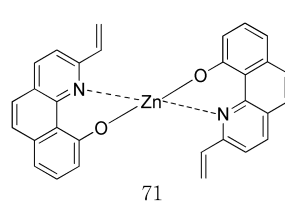
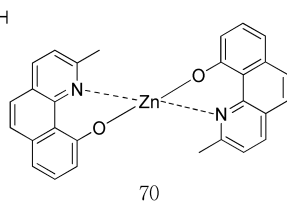
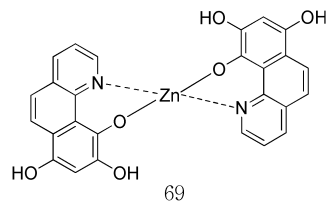
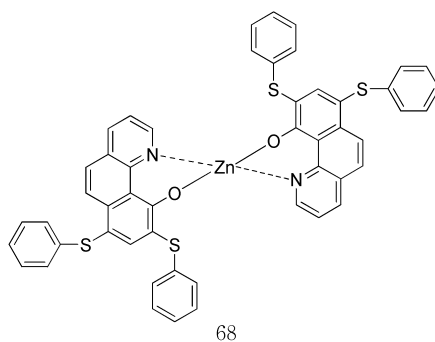
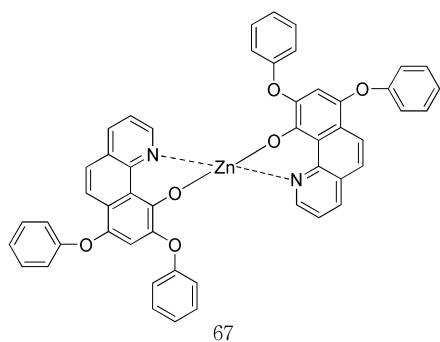
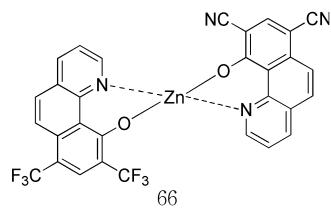
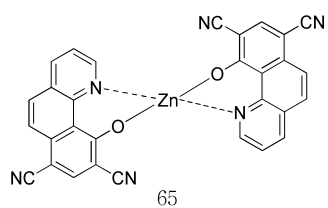
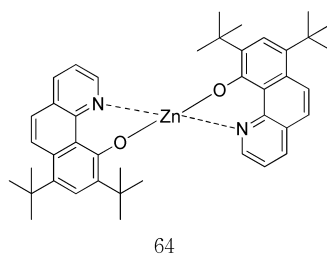
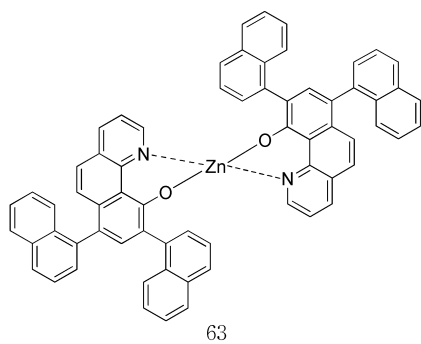
44

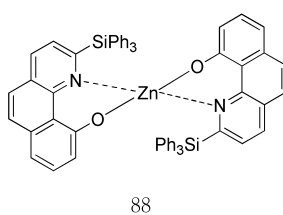
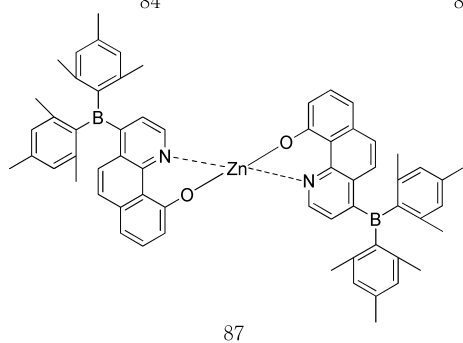
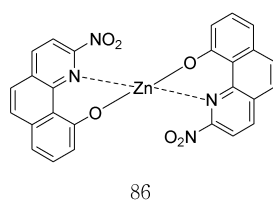
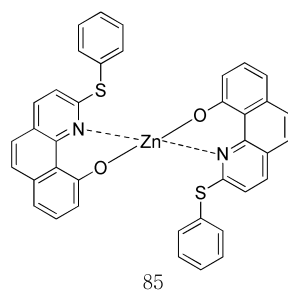
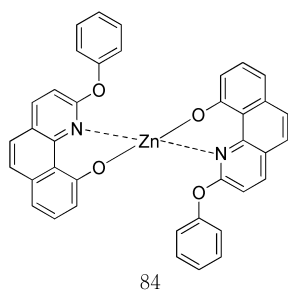
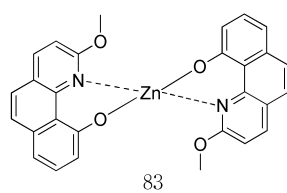
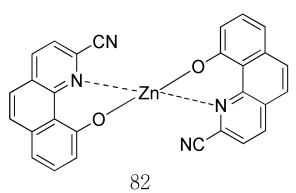
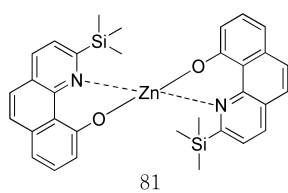
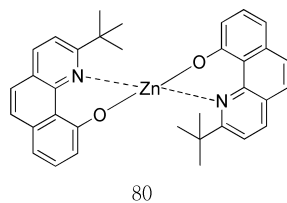
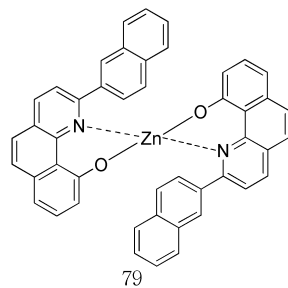
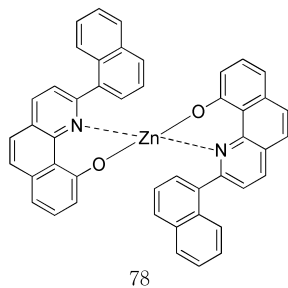
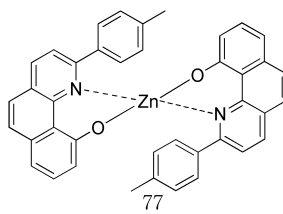
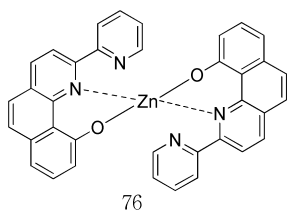
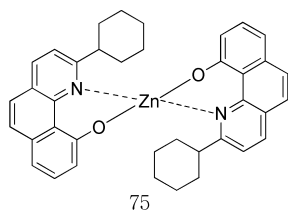


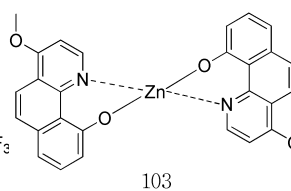
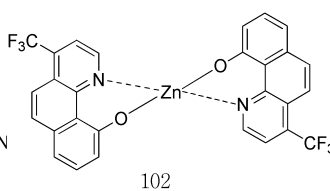
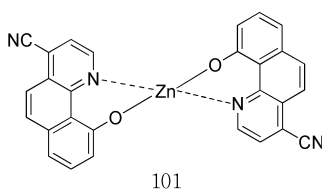
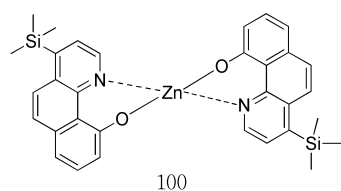
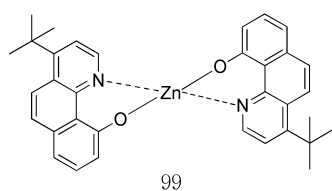
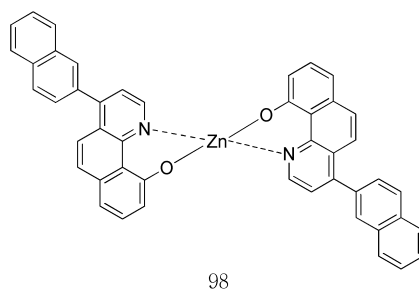
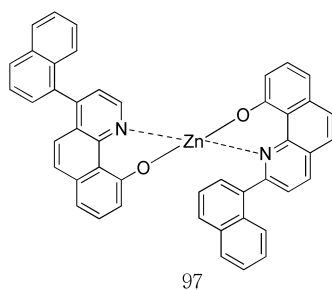
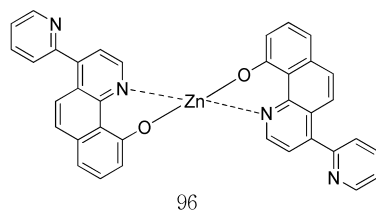
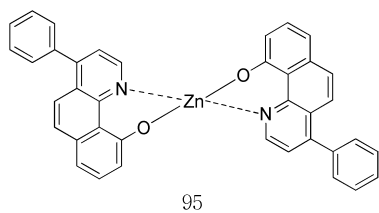
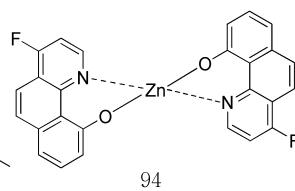
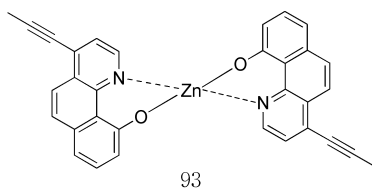
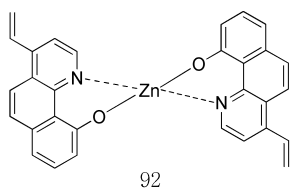
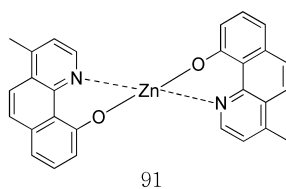
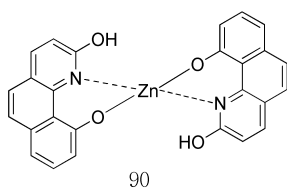
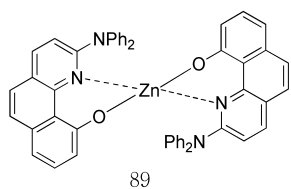
45

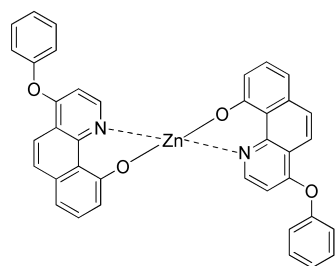




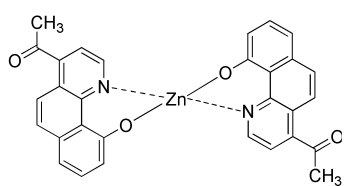




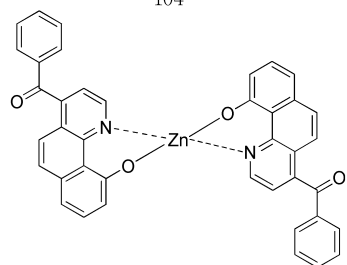




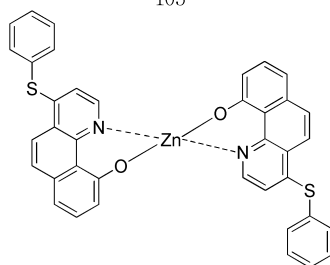
104



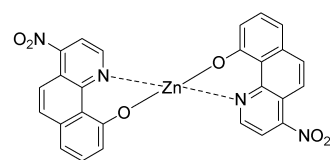
105



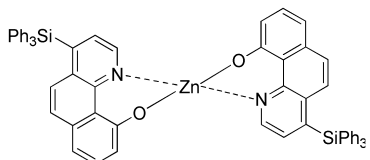
106



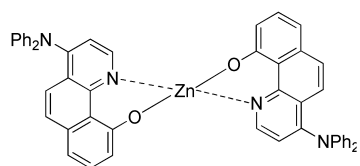
107



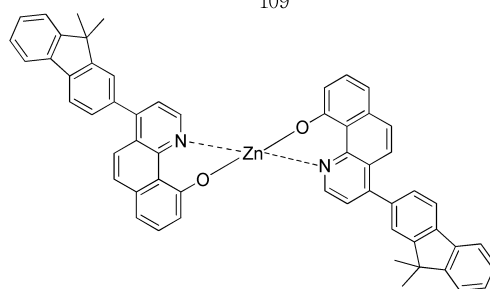
108



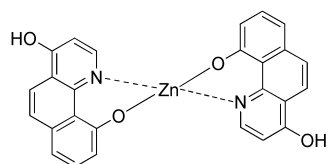
109



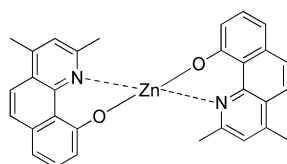
110



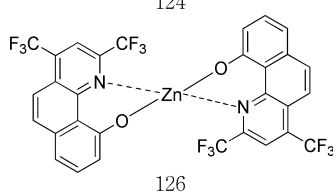
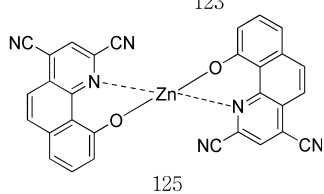
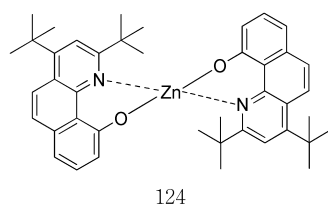
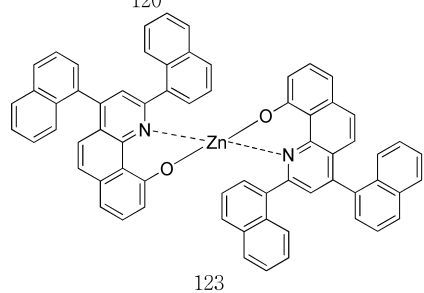
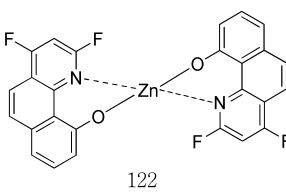
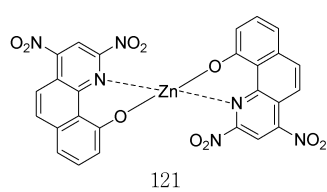
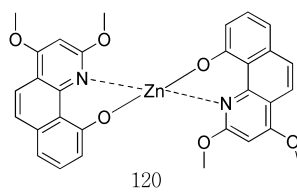
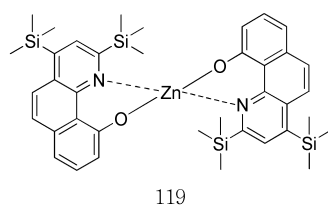
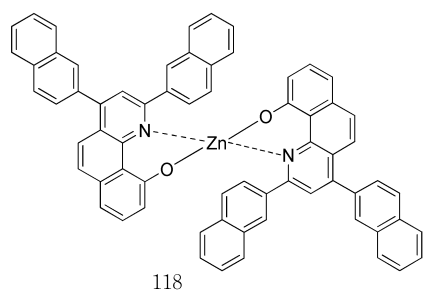
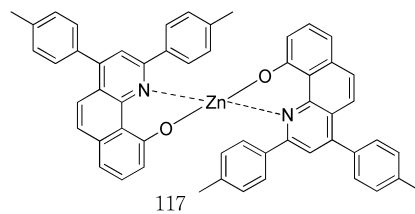
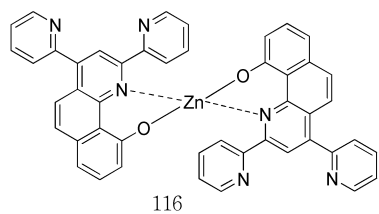
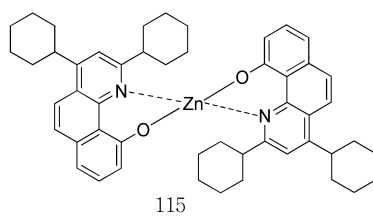
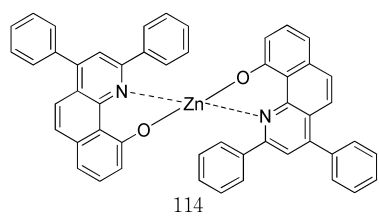
111

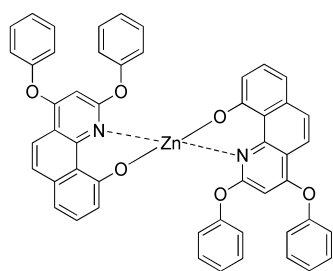


112

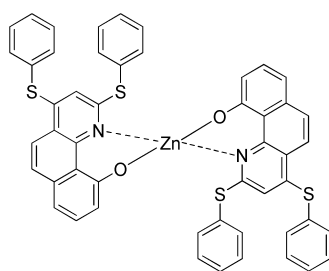


113

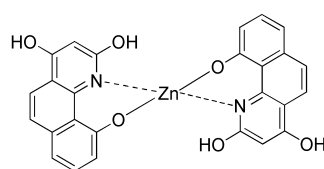




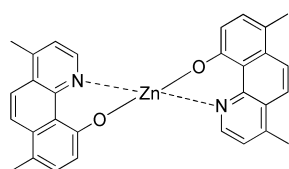
127



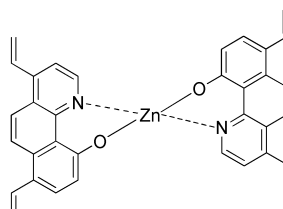
128



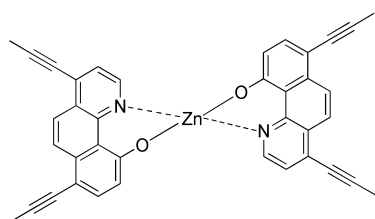
129



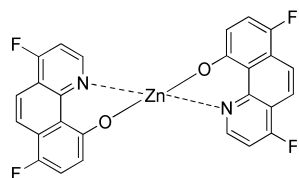
130



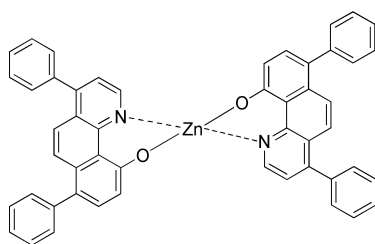
131



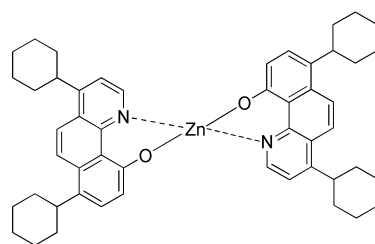
132



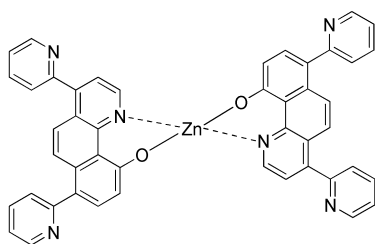
133



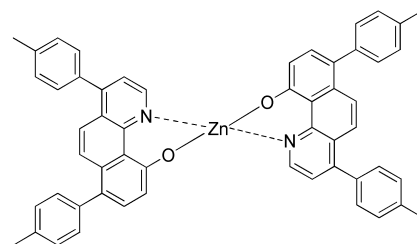
134



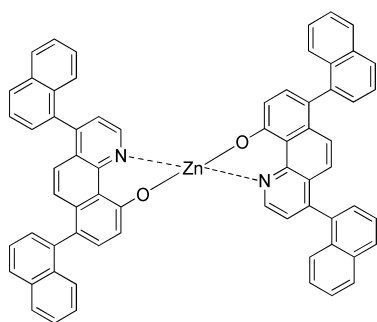
135



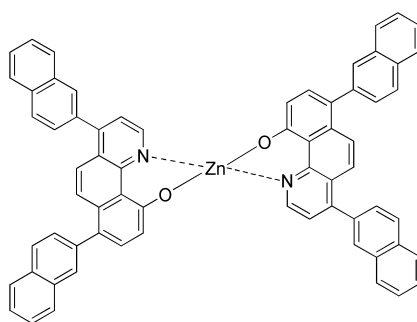
136



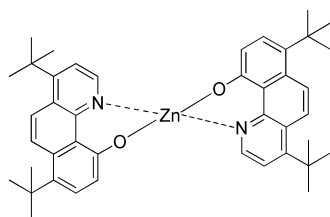
137



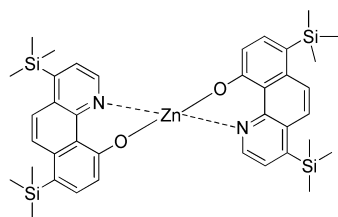
138



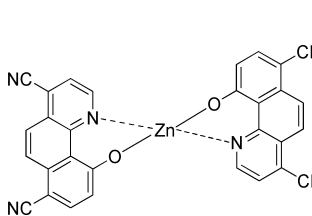
139



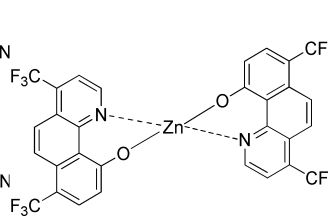
140



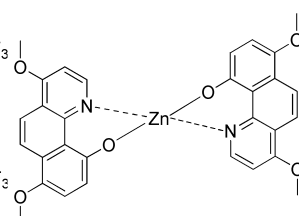
141



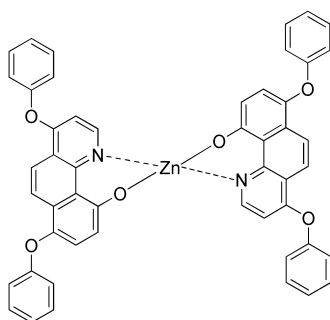
142



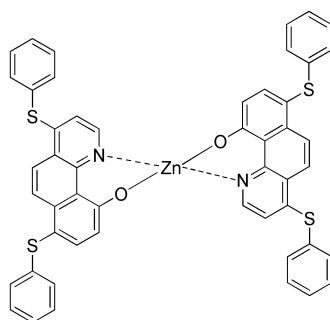
143



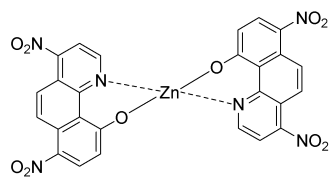
144



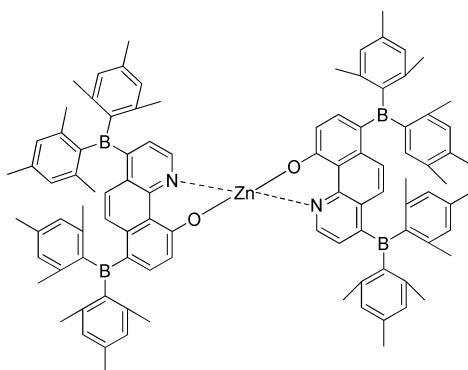
145



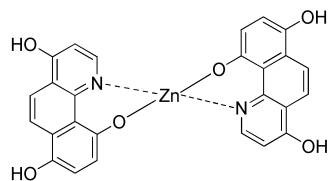
146



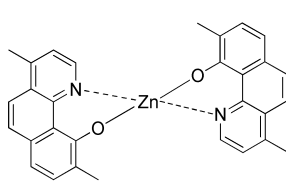
147



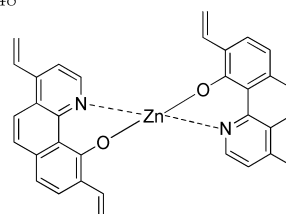
148



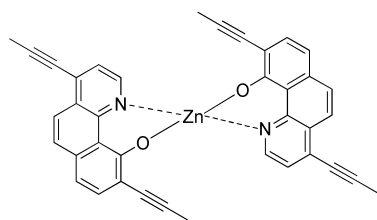
149



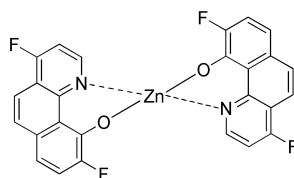
150



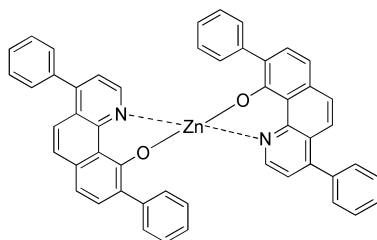
151



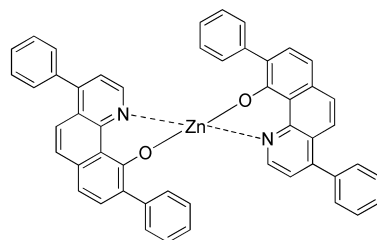
152



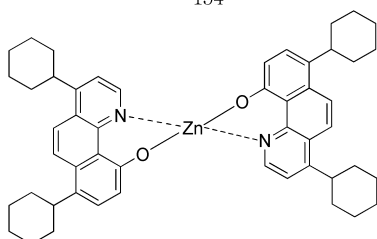
153



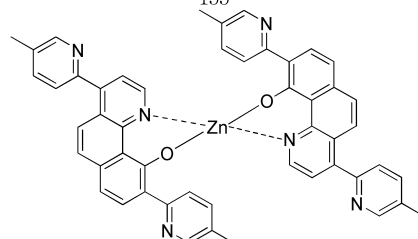
154



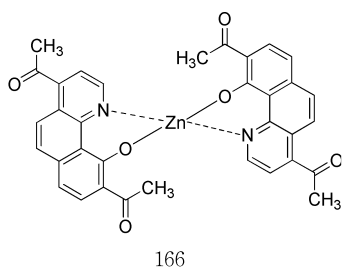
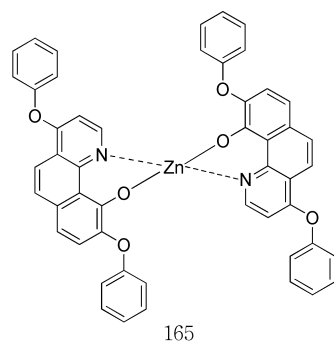
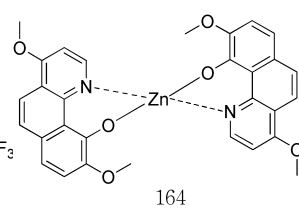
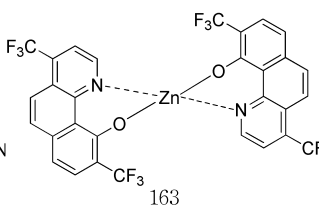
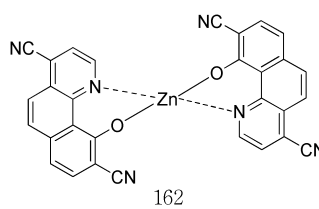
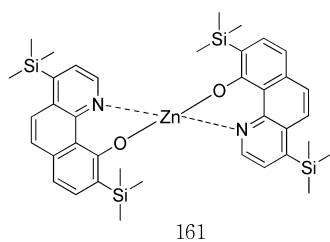
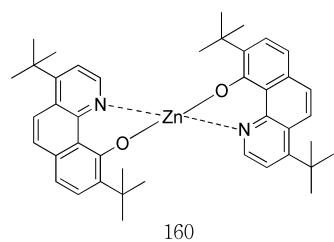
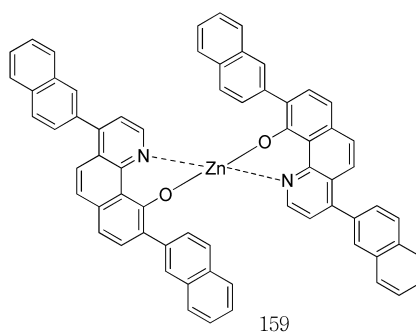
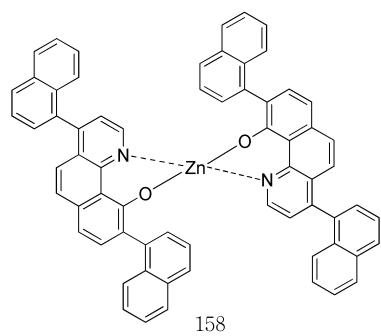
155

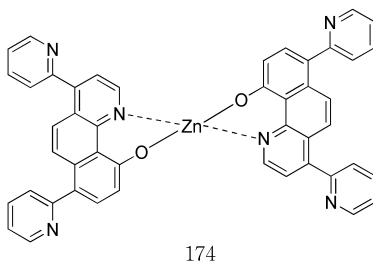
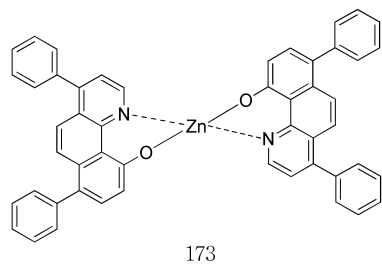
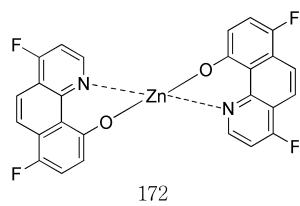
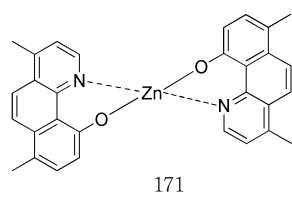
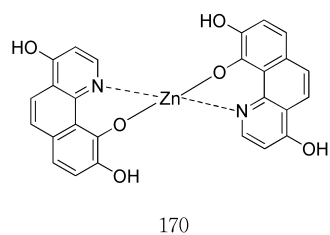
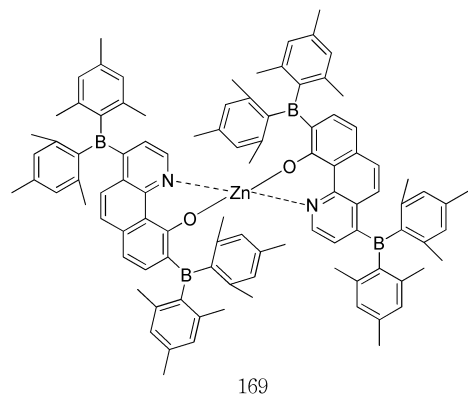
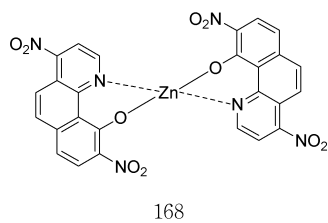
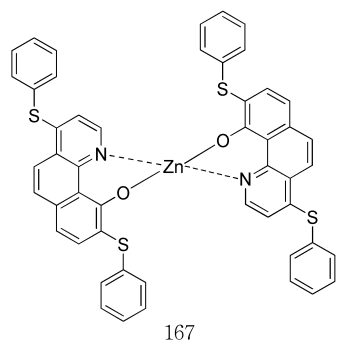


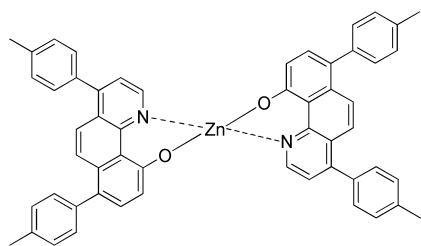
156



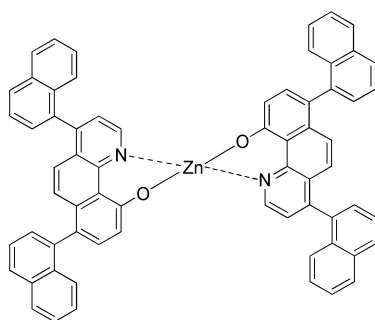
157



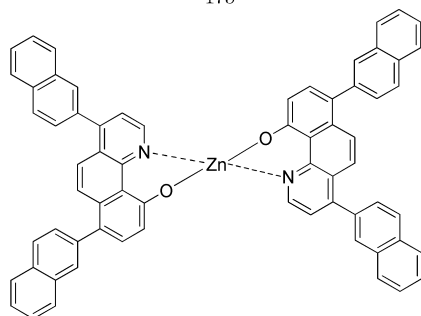




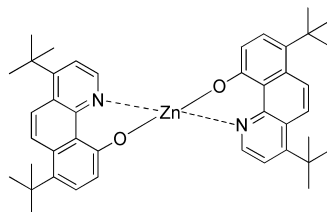
175



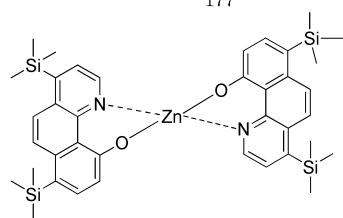
176



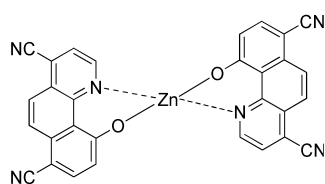
177



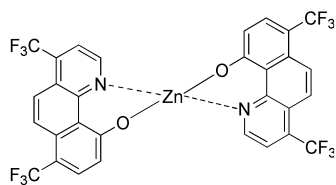
178



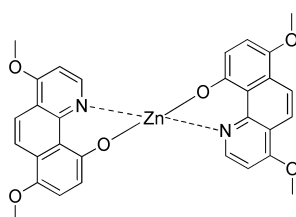
179



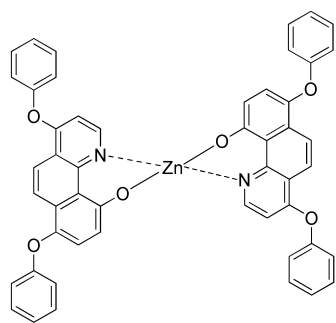
180



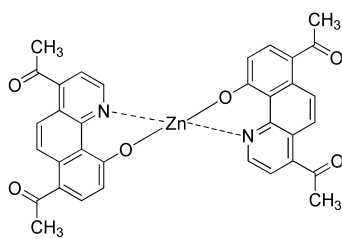
181



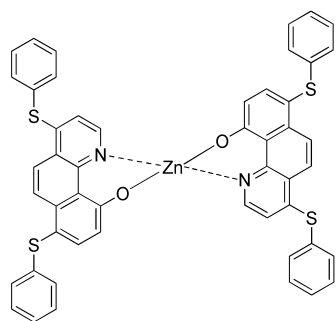
182



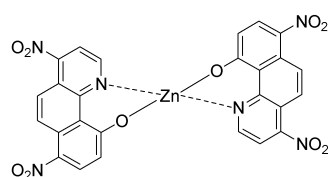
183



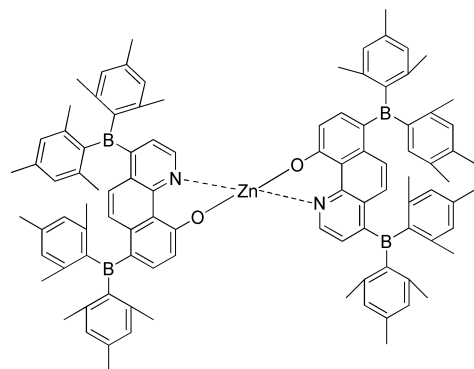
184



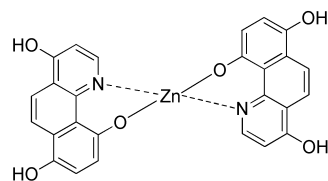
185



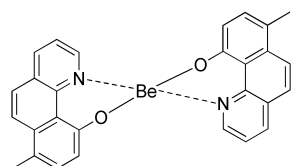
186



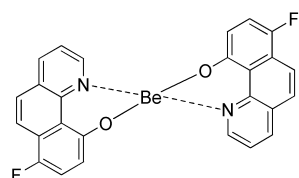
187



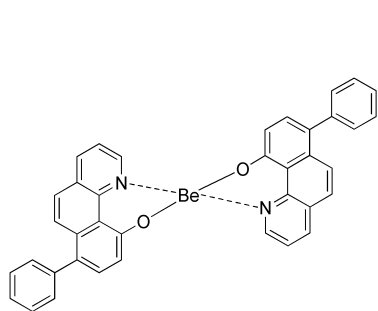
188



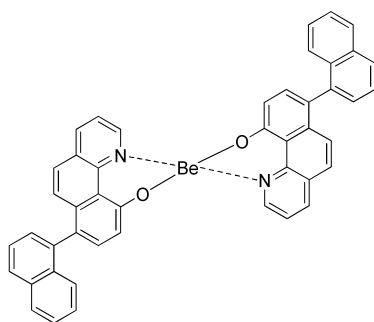
189



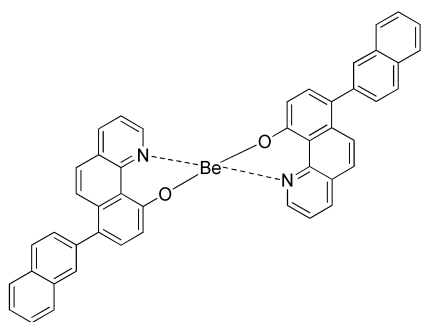
190



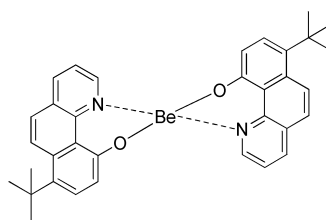
191



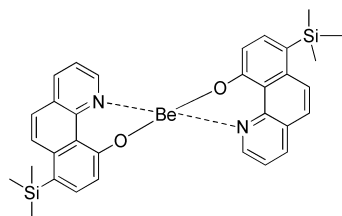
192



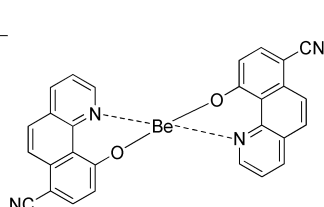
193



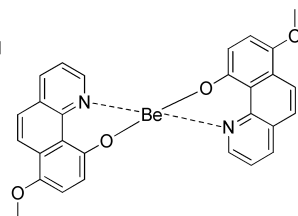
194



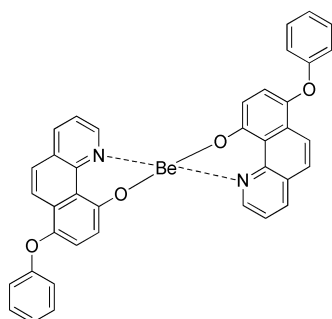
195



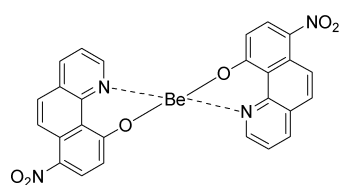
196



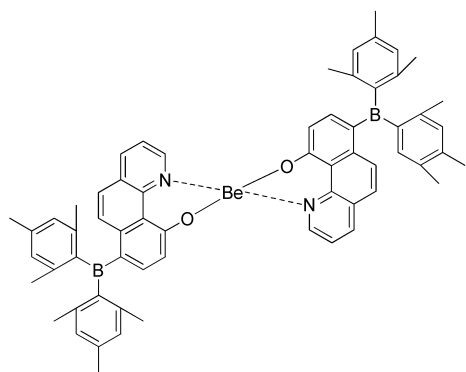
197



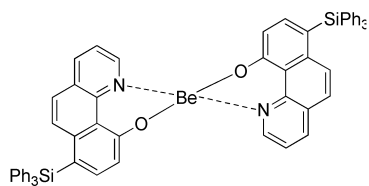
198



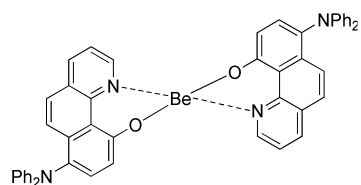
199



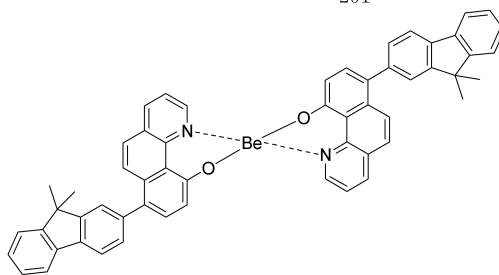
200



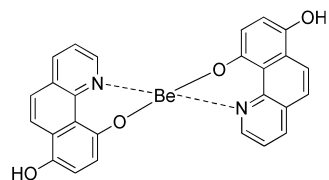
201



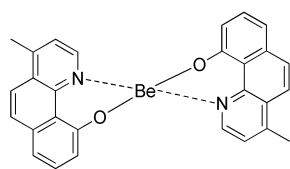
202



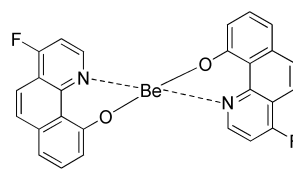
203



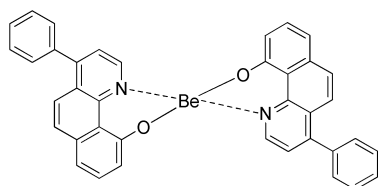
204



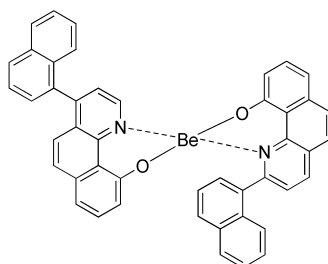
205



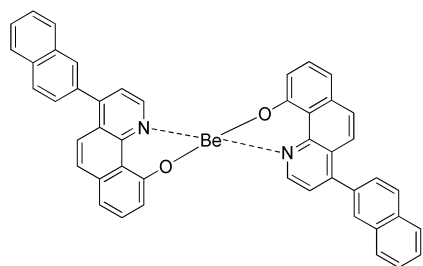
206



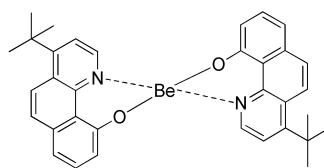
207



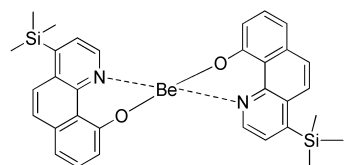
208



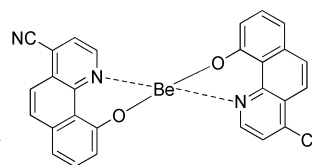
209



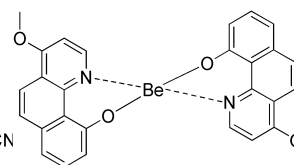
210



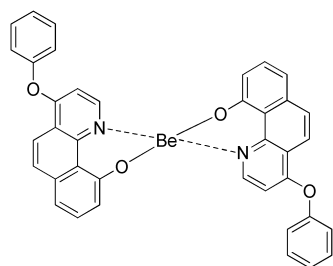
211



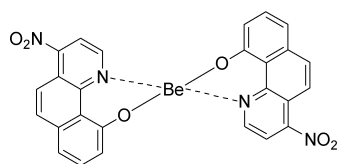
212



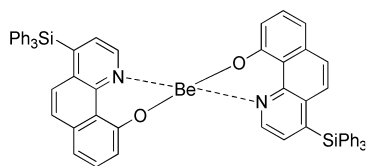
213



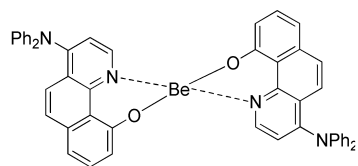
214



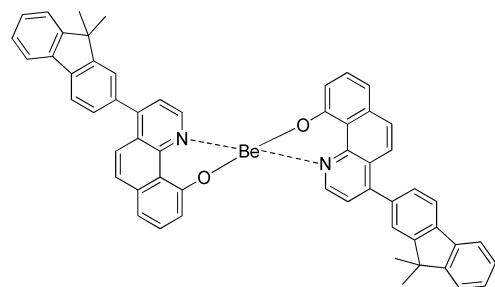
215



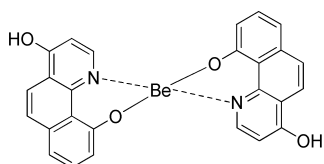
216



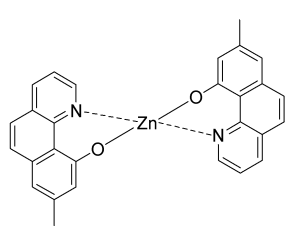
217



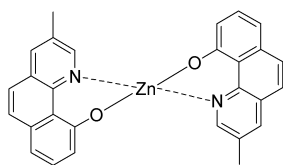
218



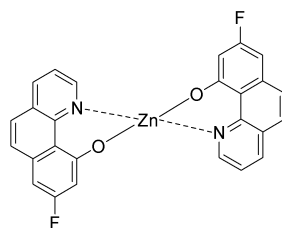
219



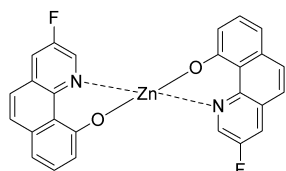
220



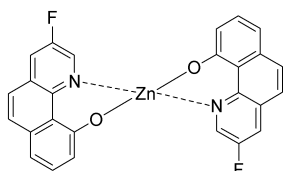
221



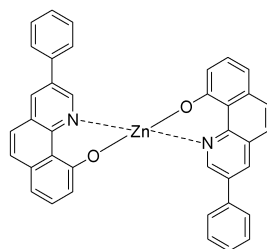
222



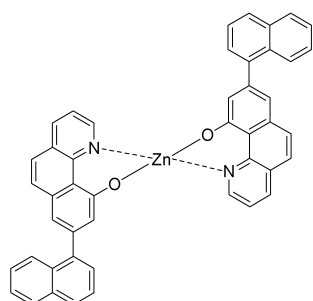
223



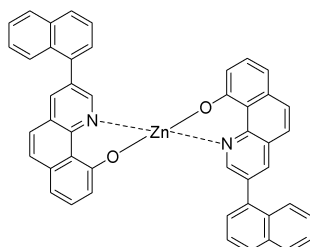
224



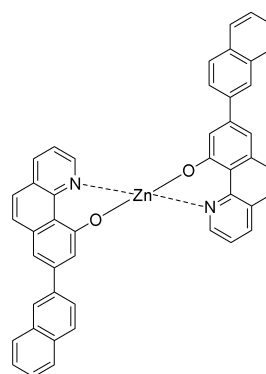
225



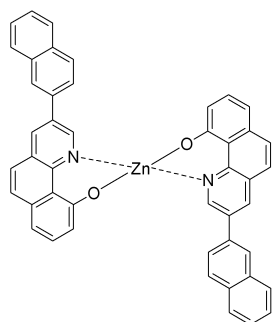
226



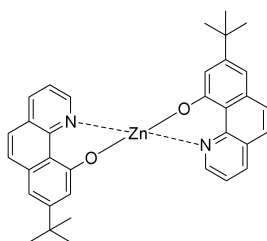
227



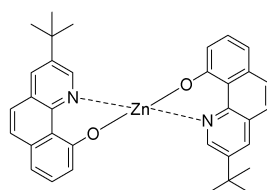
228



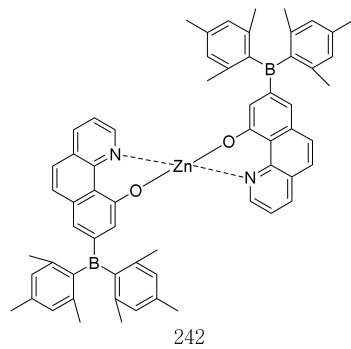
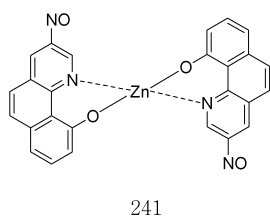
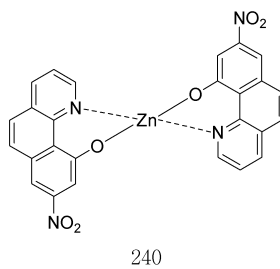
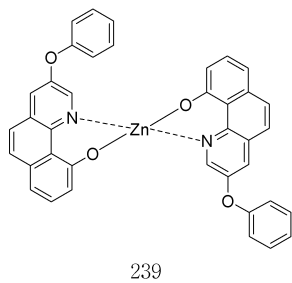
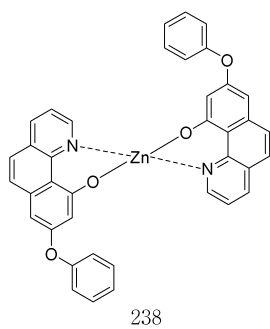
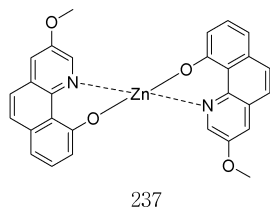
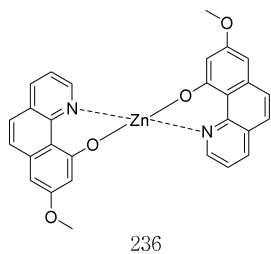
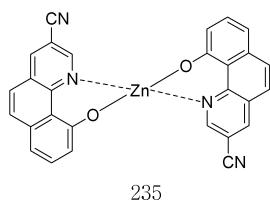
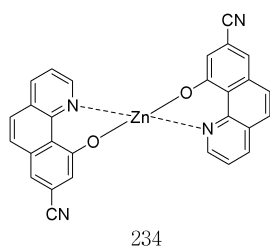
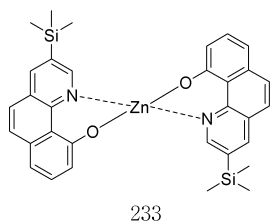
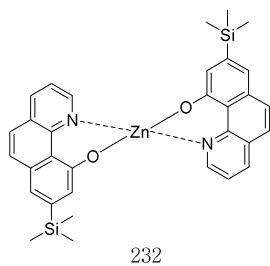
229

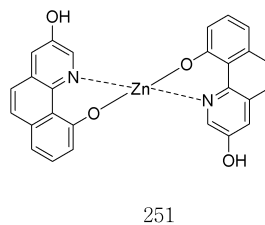
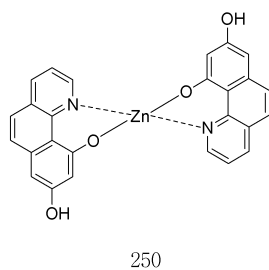
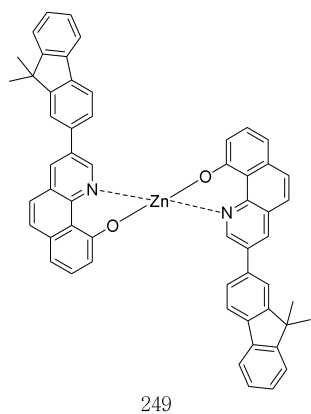
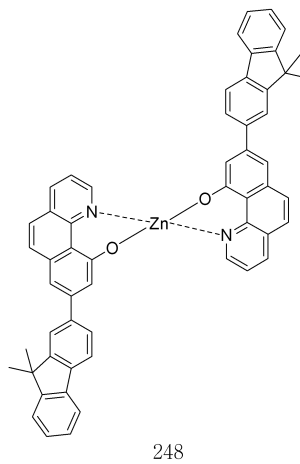
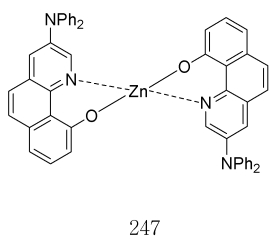
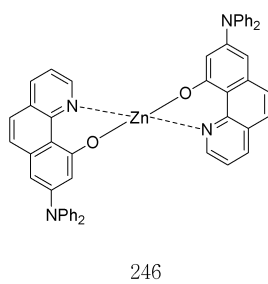
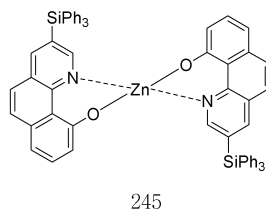
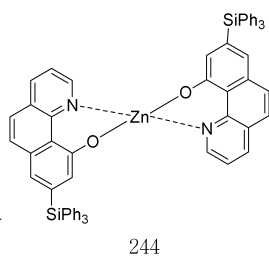
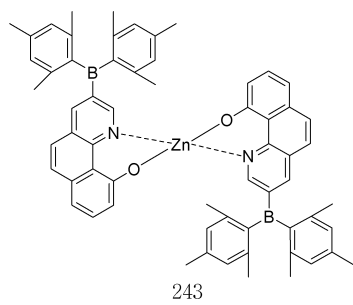


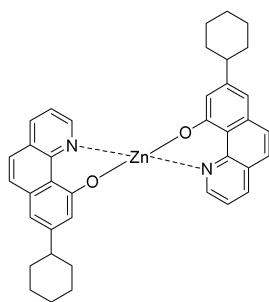
230



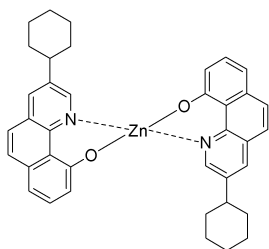
231



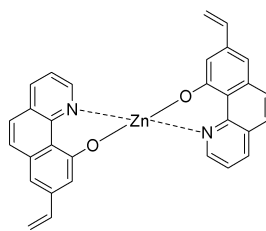




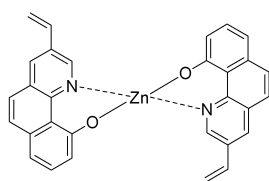
252



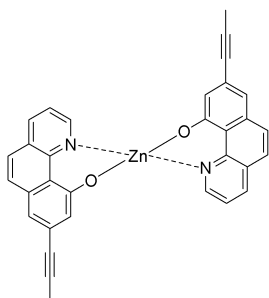
253



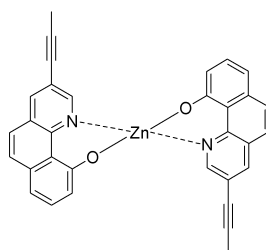
254



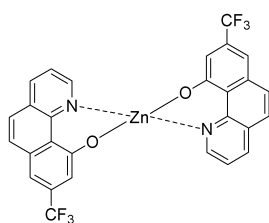
255



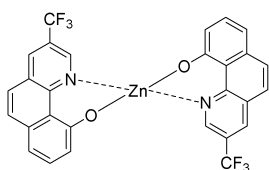
256



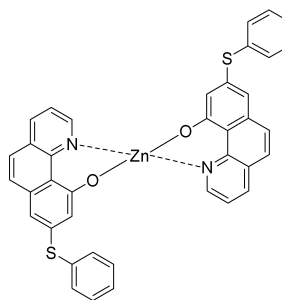
257



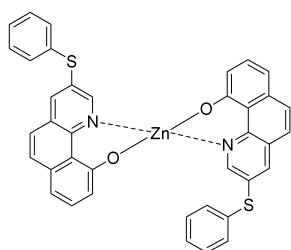
258



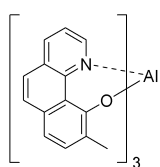
259



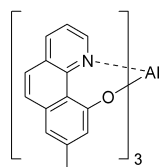
260



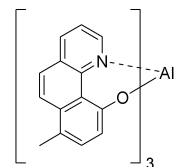
261



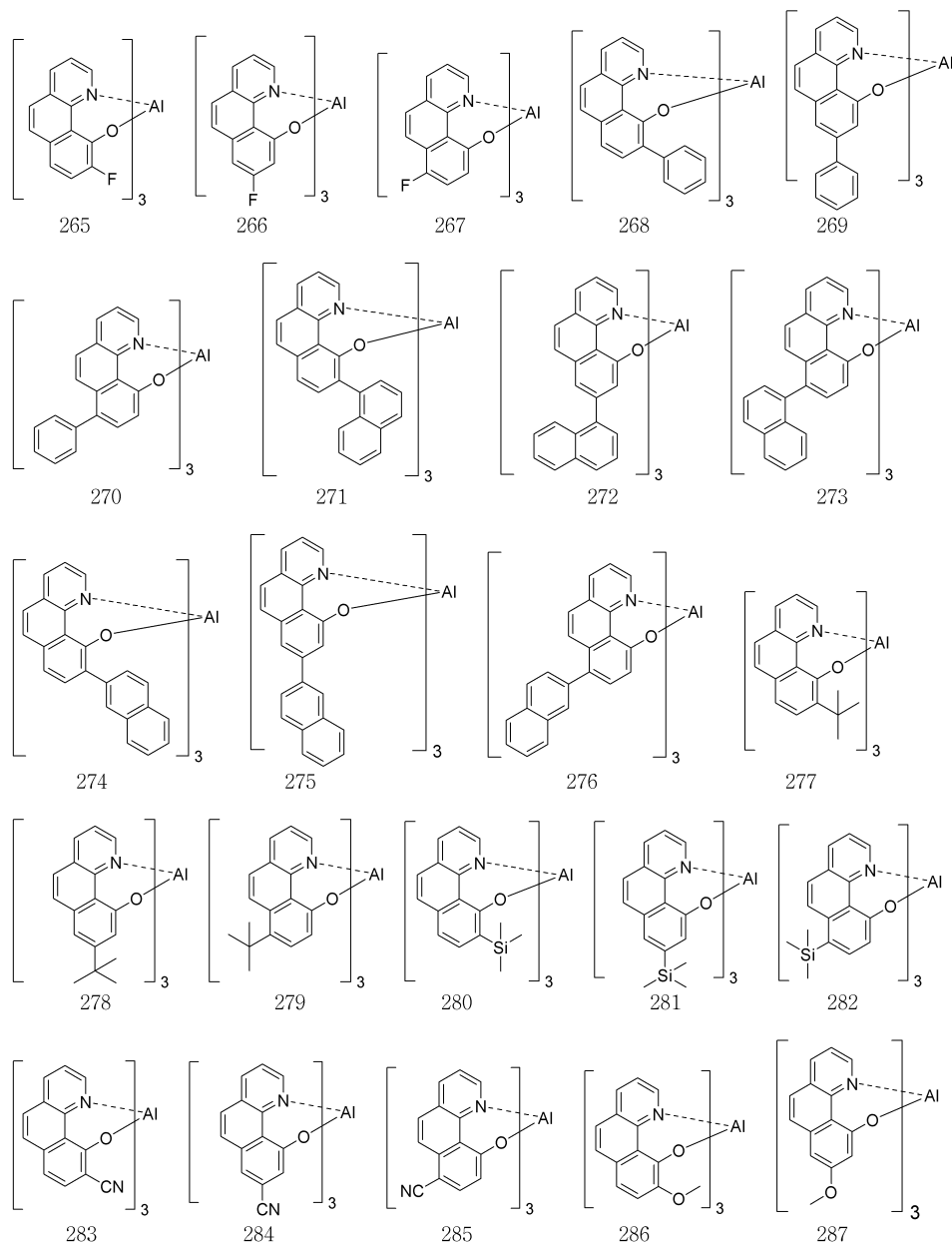
262

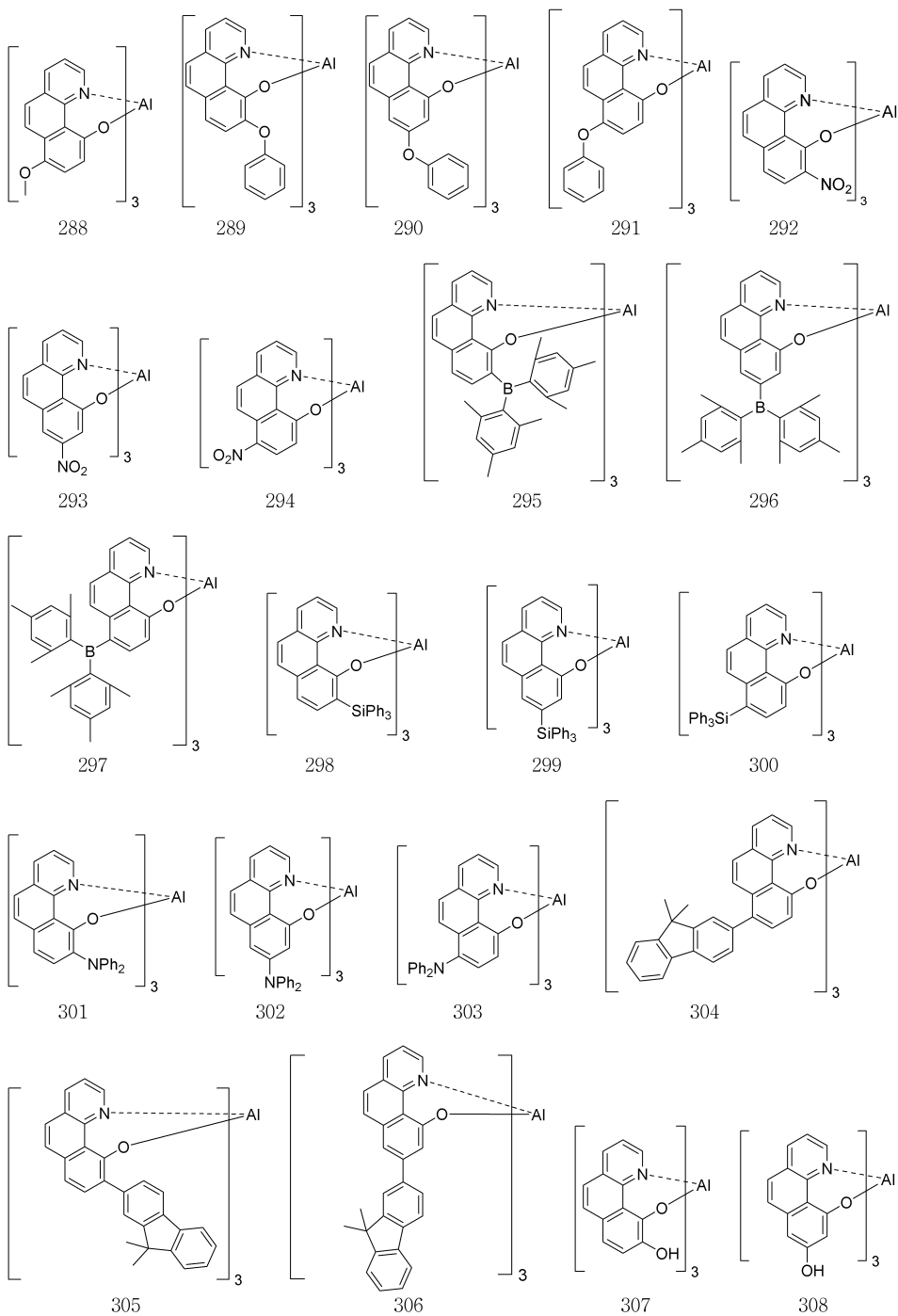


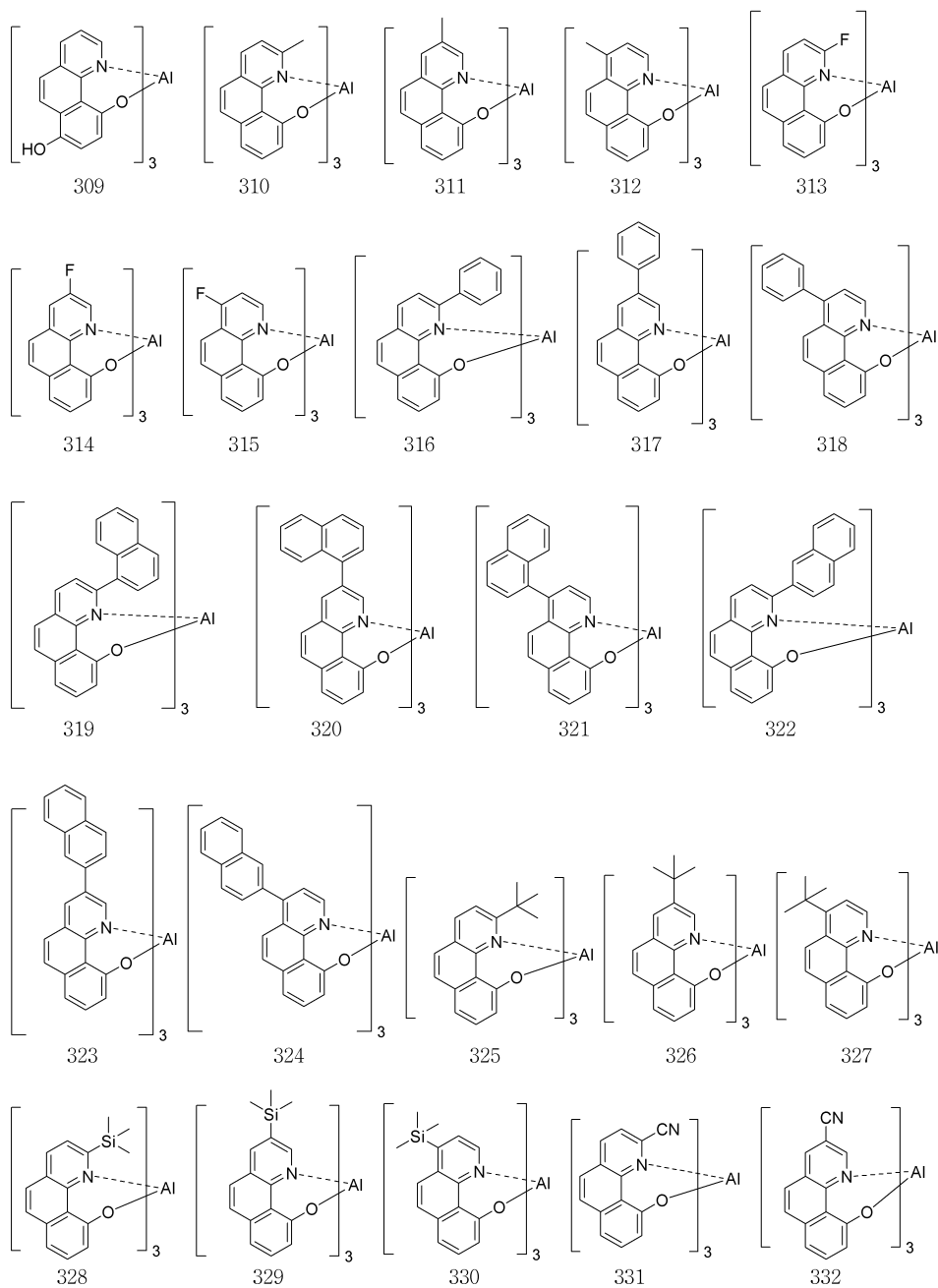
263

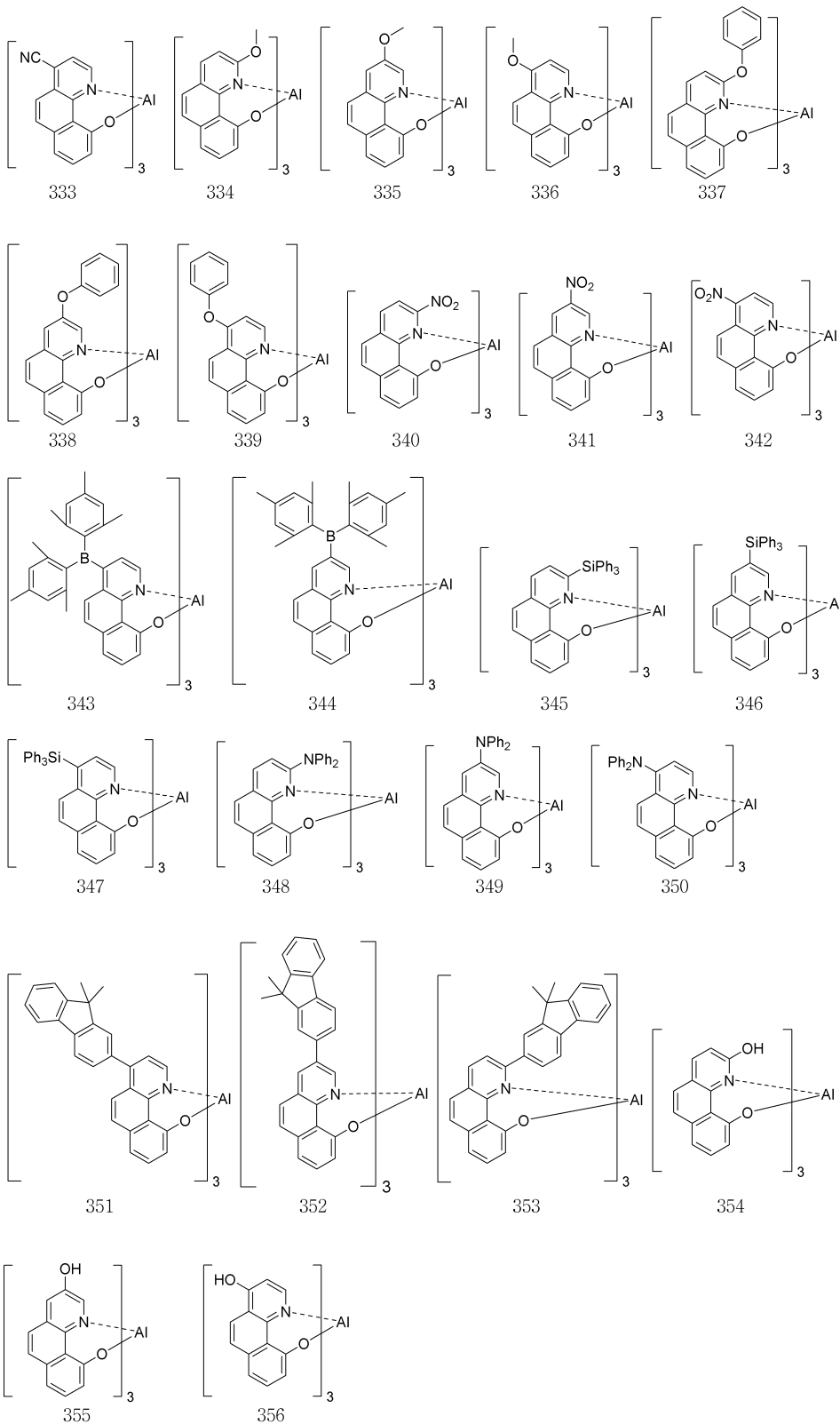


264









<56>

<57>

<58> 또한 본 발명은 유기 태양 전지를 제공하며, 본 발명에 따른 유기 태양 전지는 상기 화학식 1의 전기 발광 화합물을 하나 이상 포함하는 것을 특징으로 한다.

<59> 또한 본 발명은 전기 발광 소자를 제공하며, 본 발명에 따른 전기 발광 소자는 제 1전극; 제 2전극 ; 및 상기 제 1전극 및 제 2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어진 전기 발광 소자에 있어서, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 전기 발광 화합물을 하나 이상 포함하는 것을 특징으로 한다.

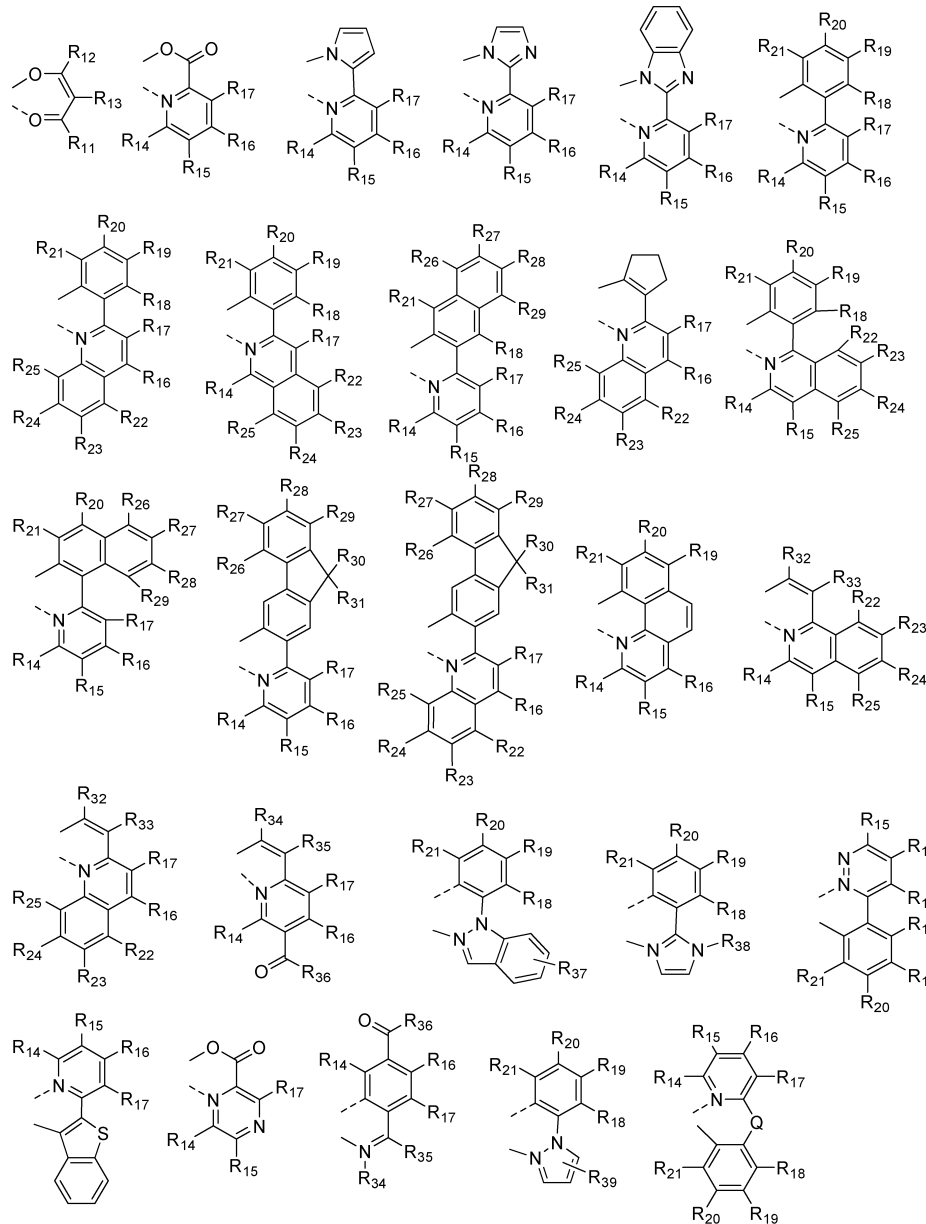
<60> 또한, 본 발명에 따른 전기 발광 소자는 상기 유기물층이 발광층을 포함하며, 상기 발광층은 상기 화학식 1의

하나 이상의 전기 발광 화합물을 발광 호스트로 하여 하나 이상의 발광 도판트를 포함하는 것을 특징으로 하며, 본 발명의 전기 발광 소자에 적용되는 발광 도판트는 특별히 제한되지 않으나, 하기 화학식 2의 화합물로 예시될 수 있다.

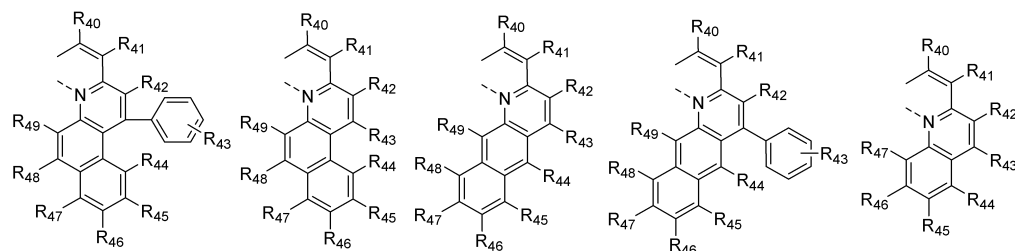
<61> [화학식 2]

<62>
$$M^1 L^{101} L^{102} L^{103}$$

<63> 여기서 M^1 은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 리간드 L^{101} , L^{102} 및 L^{103} 는 서로 독립적으로 하기 구조로부터 선택되어진다.

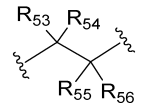
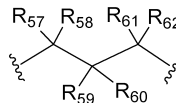


<64>



<65>

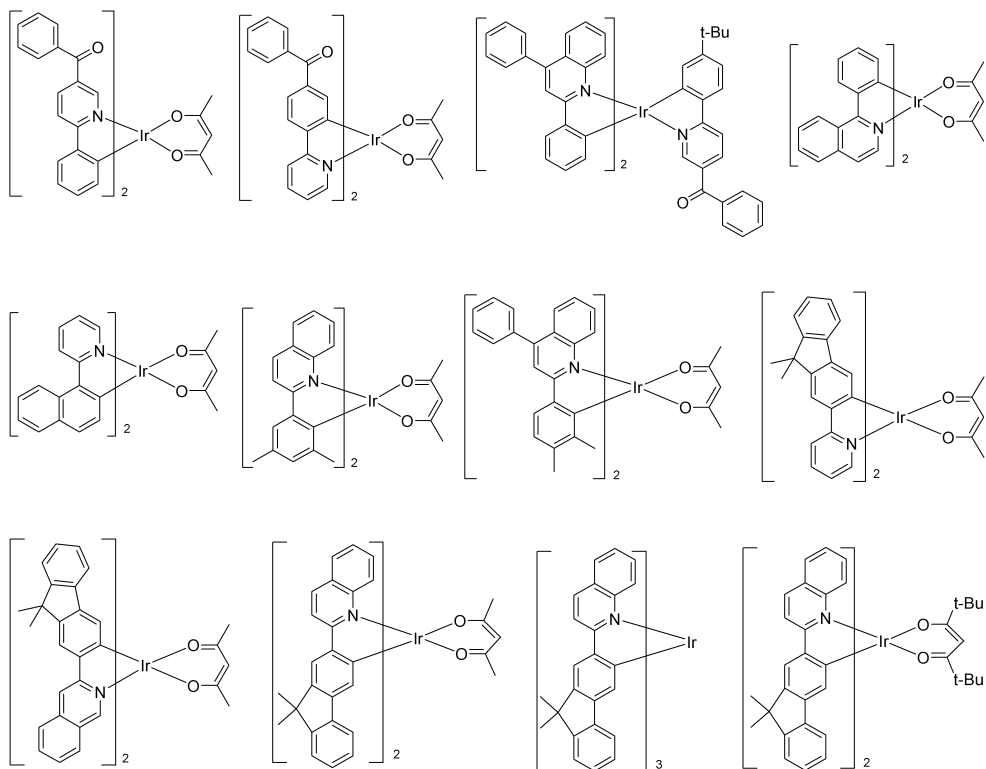
- <66> [R₁₁ 내지 R₁₃은 서로 독립적으로 수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C60)알킬, (C1-C60)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C60)아릴 또는 할로젠이고;
- <67> R₁₄ 내지 R₂₉는 서로 독립적으로 수소, (C1-C60)알킬, (C1-C30)알콕시, (C3-C60)시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C6-C60)아릴, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, SF₅, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 시아노 또는 할로젠이고, 상기 R₁₄ 내지 R₂₉의 알킬, 시클로알킬, 알케닐 또는 아릴은 (C1-C60)알킬, (C6-C60)아릴 또는 할로젠으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있으며;
- <68> R₃₀ 내지 R₃₃는 서로 독립적으로 수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C60)알킬 또는 (C1-C60)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C60)아릴이고;
- <69> R₃₄ 및 R₃₅는 서로 독립적으로 수소, (C1-C60)알킬, (C6-C60)아릴 또는 할로젠이거나, R₃₄와 R₃₅는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C12)알킬렌 또는 (C3-C12)알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하며, 상기 R₃₄ 및 R₃₅의 알킬, 아릴 또는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C12)알킬렌 또는 (C3-C12)알케닐렌으로 연결되어 형성된 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리는 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C60)알킬, (C1-C30)알콕시, 할로젠, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴 및 (C6-C60)아릴로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있으며;
- <70> R₃₆은 (C1-C60)알킬, (C6-C60)아릴, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 (C5-C60)헤테로아릴 또는 할로젠이고;
- <71> R₃₇ 내지 R₃₉는 서로 독립적으로 수소, (C1-C60)알킬, (C6-C60)아릴 또는 할로젠이고, 상기 R₃₆ 내지 R₃₉의 알킬 및 아릴은 할로젠 또는 (C1-C60)알킬로 더 치환될 수 있으며;
- <72> R₄₀ 및 R₄₁는 서로 독립적으로 수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C20)알킬, (C6-C20)아릴, 할로젠, 시아노, 트리(C1-C20)알킬실릴, 디(C1-C20)알킬(C6-C20)아릴실릴, 트리(C6-C20)아릴실릴, (C1-C20)알콕시, (C1-C20)알킬카보닐, (C6-C20)아릴카보닐, 디(C1-C20)알킬아미노 또는 디(C6-C20)아릴아미노이거나, R₄₀과 R₄₁는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C12)알킬렌 또는 (C3-C12)알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하며;
- <73> 상기 R₄₀ 및 R₄₁의 알킬, 아릴 또는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C12)알킬렌 또는 (C3-C12)알케닐렌으로 연결되어 형성된 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리는 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C20)알킬, 할로젠, 시아노, 트리(C1-C20)알킬실릴, 디(C1-C20)알킬(C6-C20)아릴실릴, 트리(C6-C20)아릴실릴, (C1-C20)알콕시, (C1-C20)알킬카보닐, (C6-C20)아릴카보닐, 디(C1-C20)알킬아미노, 디(C6-C20)아릴아미노, 페닐, 나프틸, 안트릴, 플루오레닐, 스피로바이플루오레닐 또는 로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있거나, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C20)알킬, 할로젠, 시아노, 트리(C1-C20)알킬실릴, 디(C1-C20)알킬(C6-C20)아릴실릴, 트리(C6-C20)아릴실릴, (C1-C20)알콕시, (C1-C20)알킬카보닐, (C6-C20)아릴카보닐, 디(C1-C20)알킬아미노, 디(C6-C20)아릴아미노, 페닐, 나프틸, 안트릴, 플루오레닐, 스피로바이플루오레닐 또는 로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기가 치환된 페닐 또는 플루오레닐로 더 치환될 수 있고;
- <74> R₄₂ 내지 R₄₉은 서로 독립적으로 수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은(C1-C20)알킬, (C1-C20)알콕시, (C3-C12)시클로알킬, 할로젠, 시아노, (C6-C20)아릴, (C4-C20)헤테로아릴, 트리(C1-C20)알킬실릴, 디(C1-C20)알킬(C6-C20)아릴실릴 또는 트리(C6-C20)아릴실릴이고;

- <75> Q는 ,  또는  이며, R₅₁ 내지 R₆₂는 서로 독립적으로 수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C60)알킬, (C1-C30)알콕시, 할로젠, (C6-C60)아릴, 시아노, (C5-C60)시클로알킬이거나, R₅₁ 내지 R₆₂는 서로 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 (C5-C7)스피로고리 또는 (C5-C9)융합고리를 형성하거나, R₁₇ 또는 R₁₈과 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 (C5-C7)융합고리를 형성할 수 있

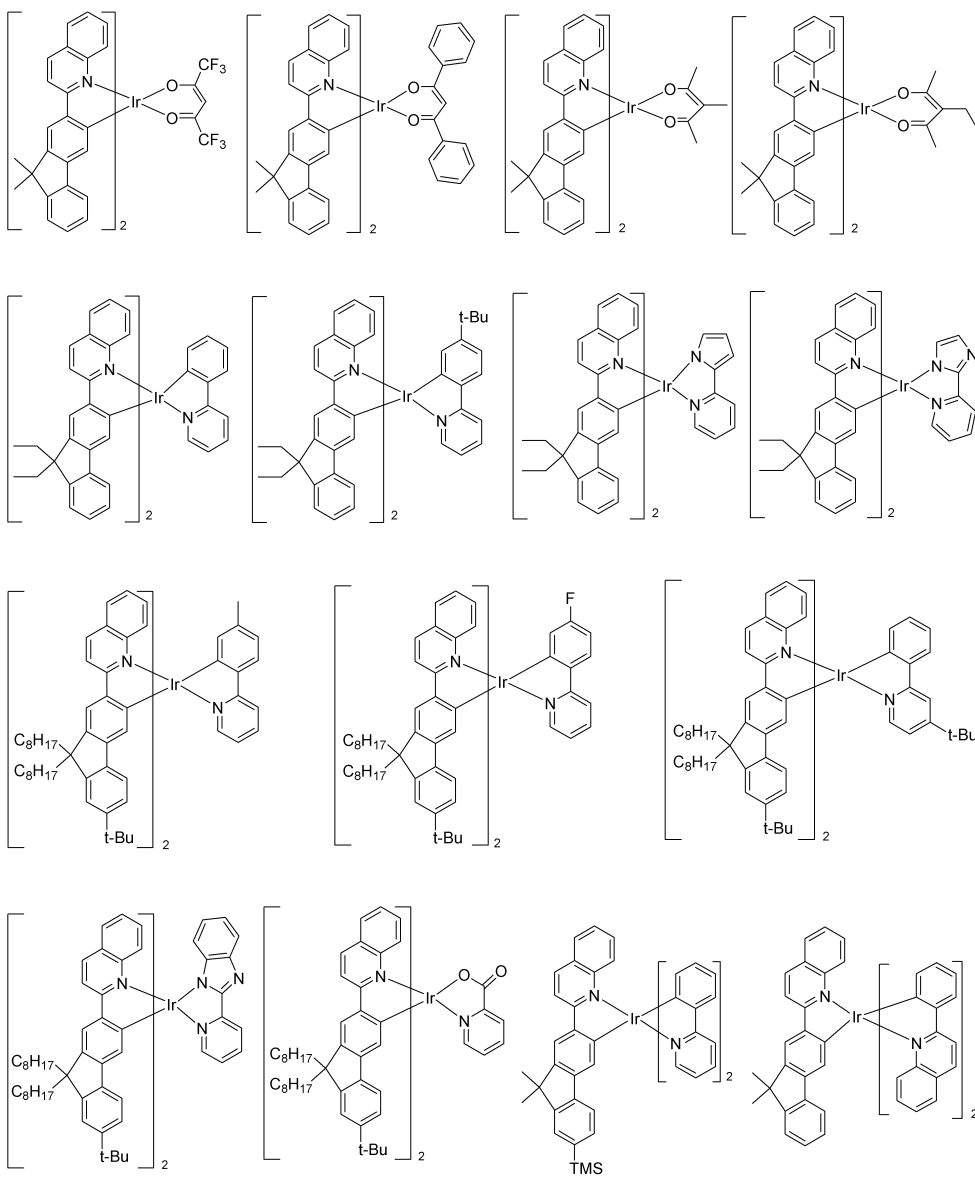
다.]

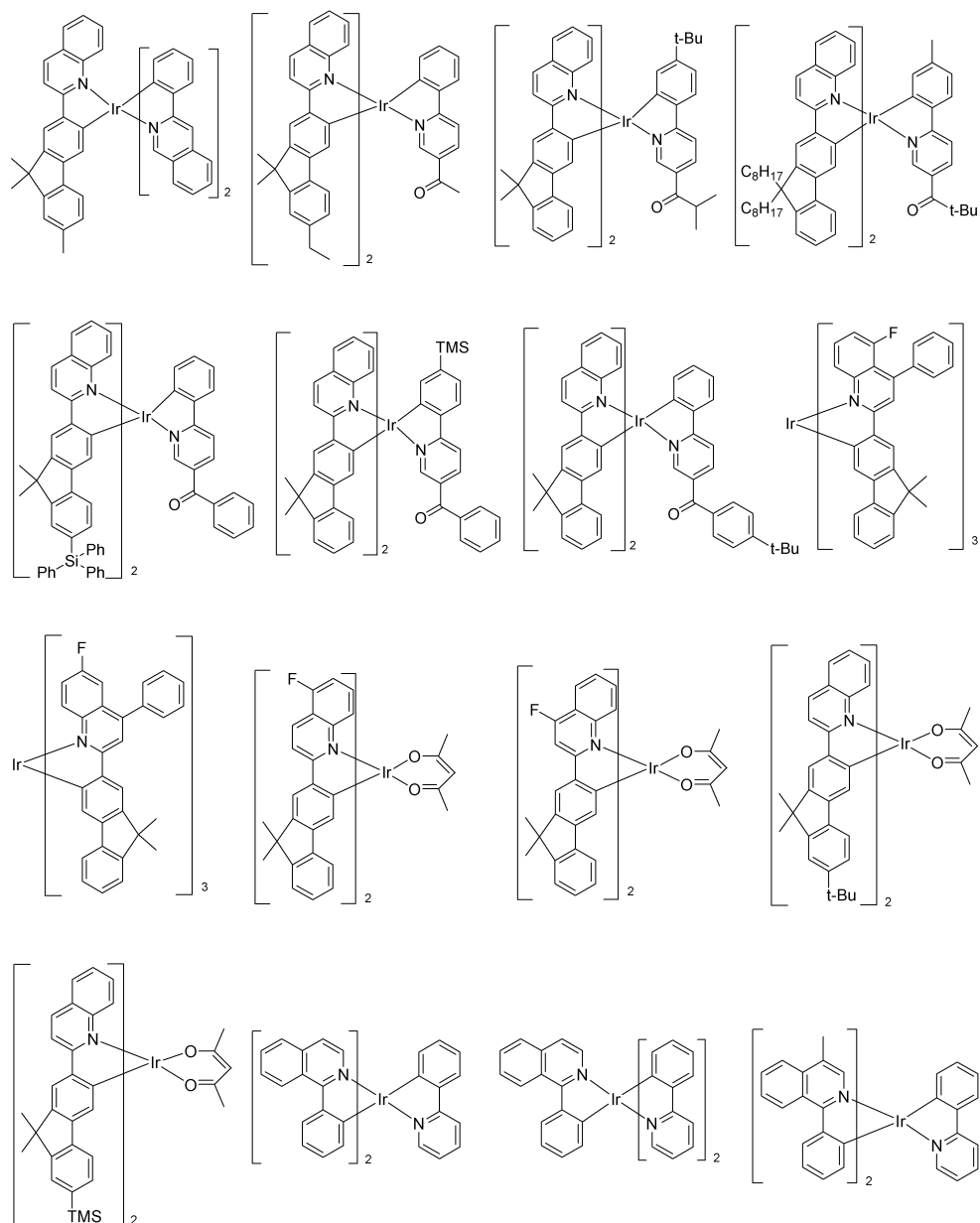
<76>

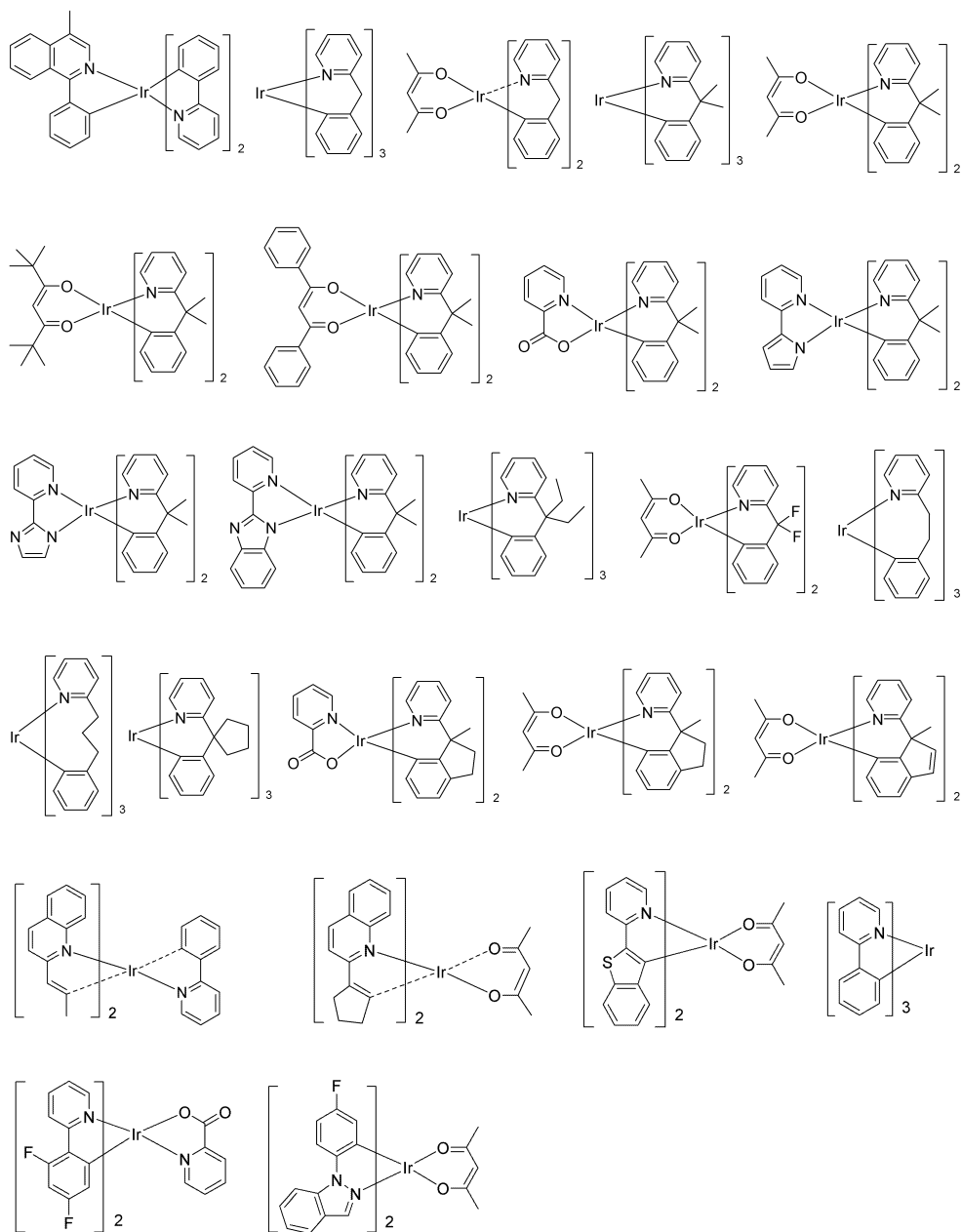
상기 M^1 은 Ir, Pt, Pd, Rh, Re, Os, Tl, Pb, Bi, In, Sn, Sb, Te, Au 및 Ag로부터 선택되며, 상기 화학식 2의 화합물은 구체적으로 하기 구조의 화합물로 예시될 수 있으나, 이를 한정하는 것은 아니다.

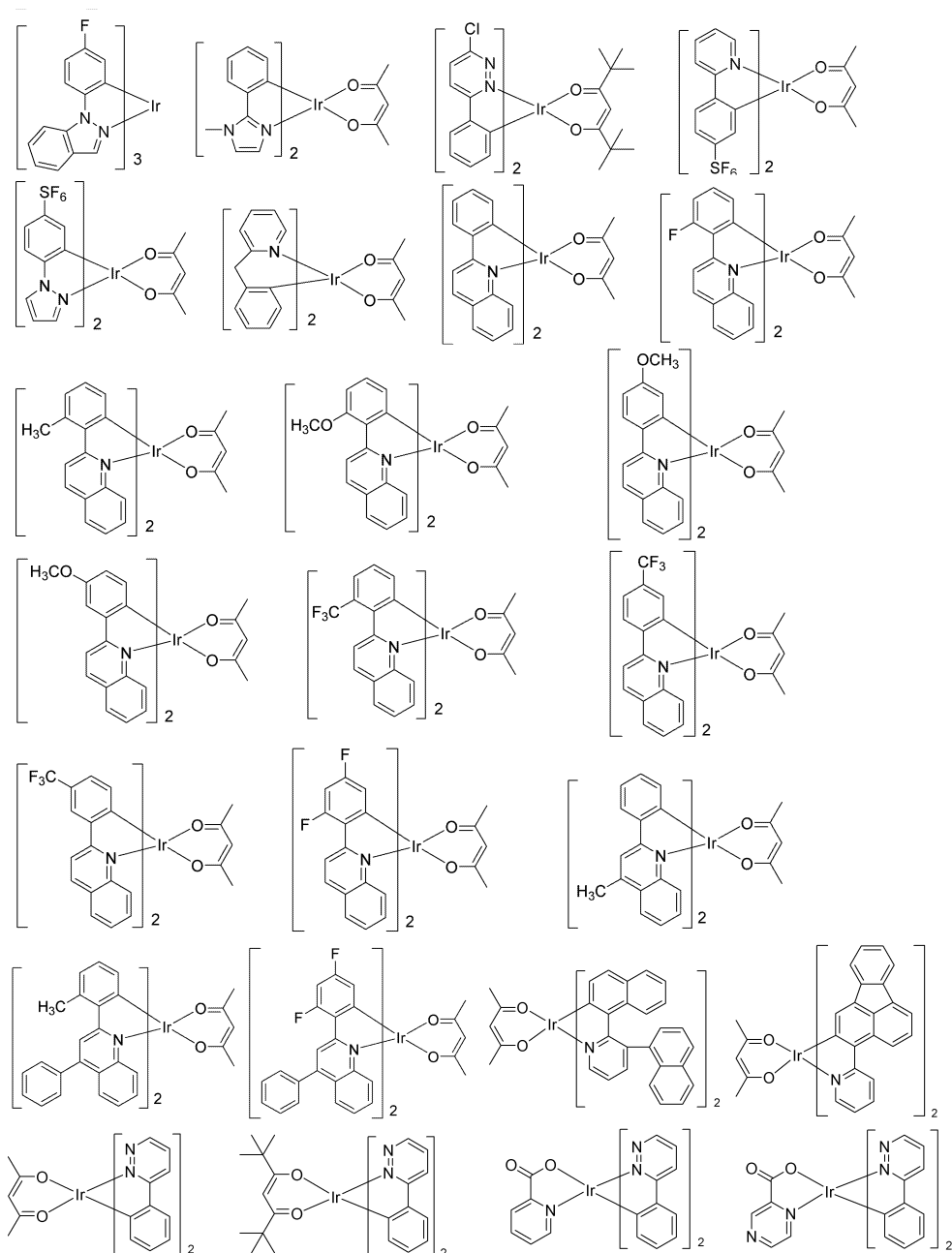


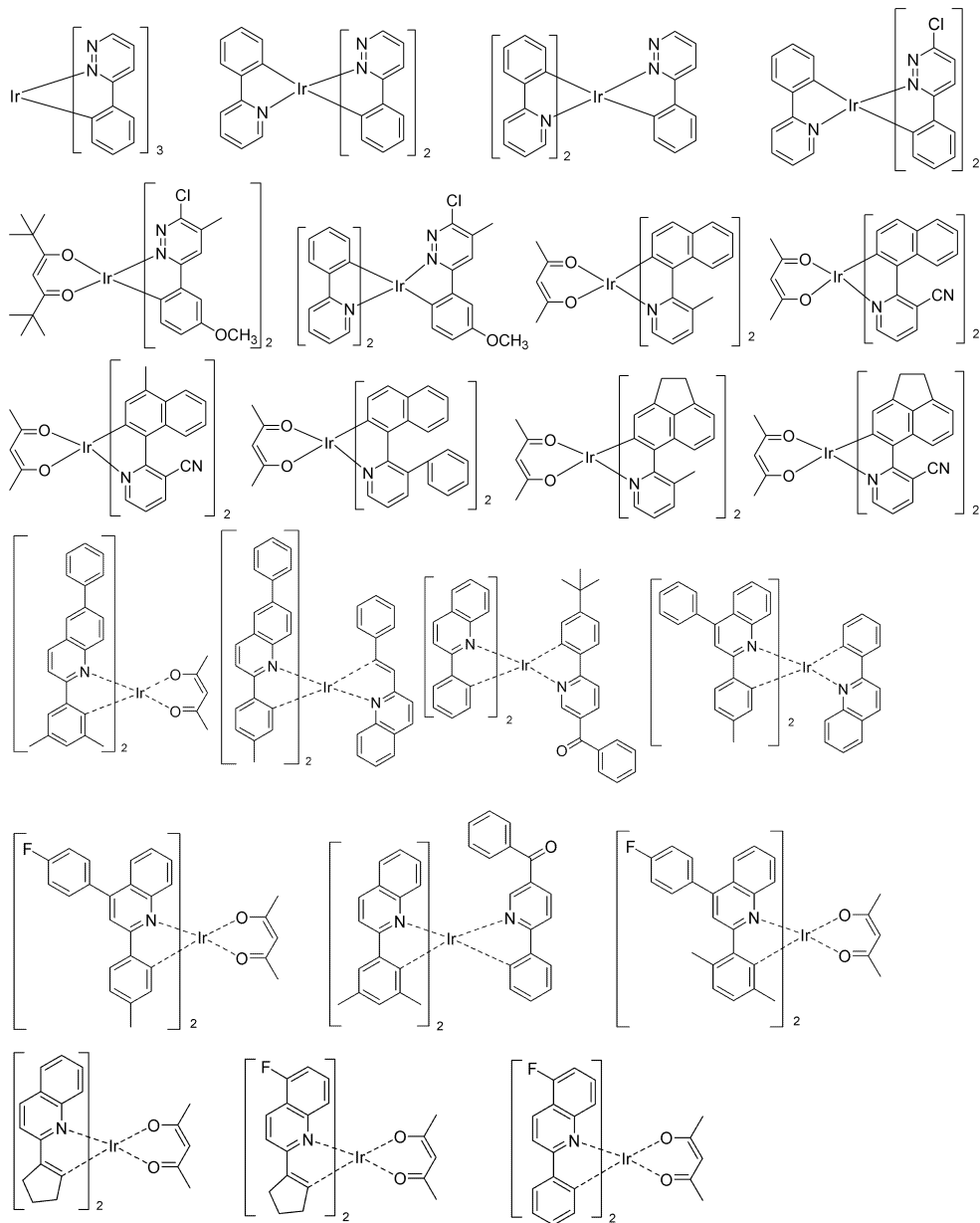
<77>



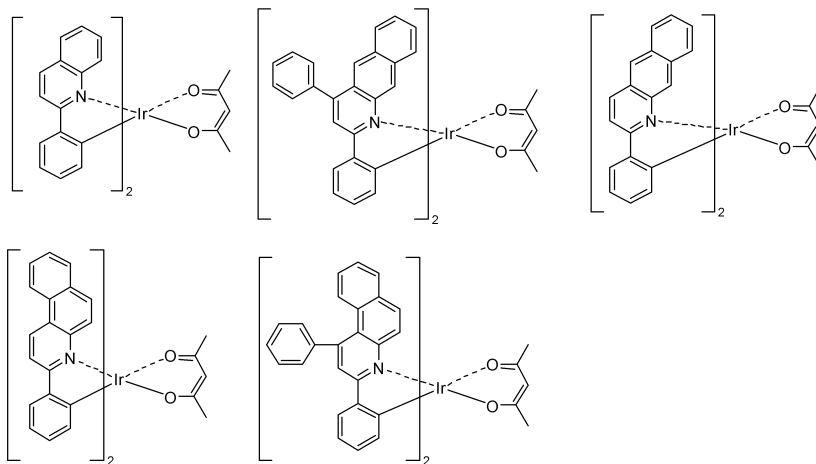








<82>

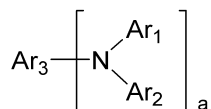


<83>

<84>

본 발명의 전기 발광 소자에 있어서, 화학식 1의 전기 발광 화합물을 포함하고, 동시에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있으며, 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물의 예로 하기의 화학식 3의 화합물이 있으나, 이에 한정되는 것을 아니다.

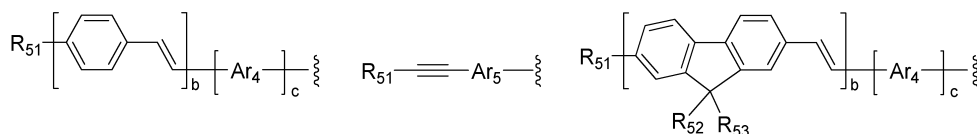
<85> [화학적식 3]



<86>

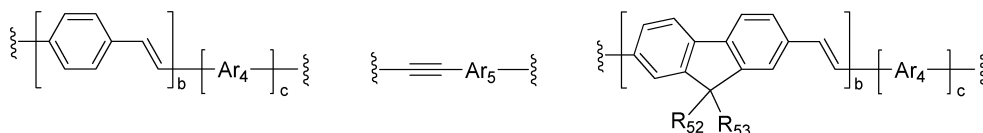
<87> [상기 화학식 3에서, Ar₁ 및 Ar₂는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, (C1-C60)알킬, (C6-C60)아릴, (C4-C60)헤테로아릴, (C6-C60)아릴아미노, (C1-C60)알킬아미노, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 5원 내지 6원의 헤테로시클로알킬 또는 (C3-C60)시클로알킬이고, Ar₁ 및 Ar₂는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C60)알킬렌 또는 (C3-C60)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하고;

<88> a가 1인 경우 Ar₃은 (C6-C60)아릴 또는 (C4-C60)헤테로아릴 또는 하기 구조의 치환기이고;



<89>

<90> a가 2인 경우 Ar₃는 (C6-C60)아릴렌, (C4-C60)헤테로아릴렌 또는 하기 구조의 치환기이고;



<91>

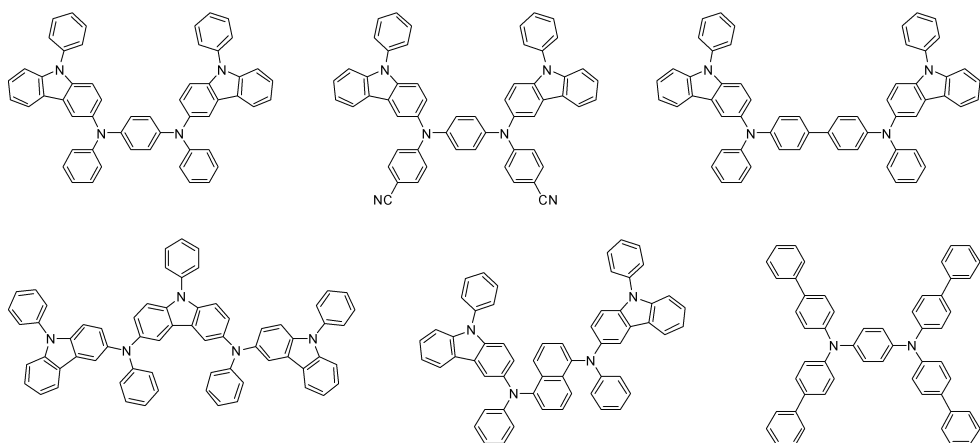
<92> Ar₄ 및 Ar₅는 서로 독립적으로 (C6-C60)아릴렌 또는 (C4-C60)헤테로아릴렌이고;

<93> R₅₁, R₅₂ 및 R₅₃은 서로 독립적으로 수소, 할로젠, 중수소, (C1-C60)알킬 또는 (C6-C60)아릴이고;

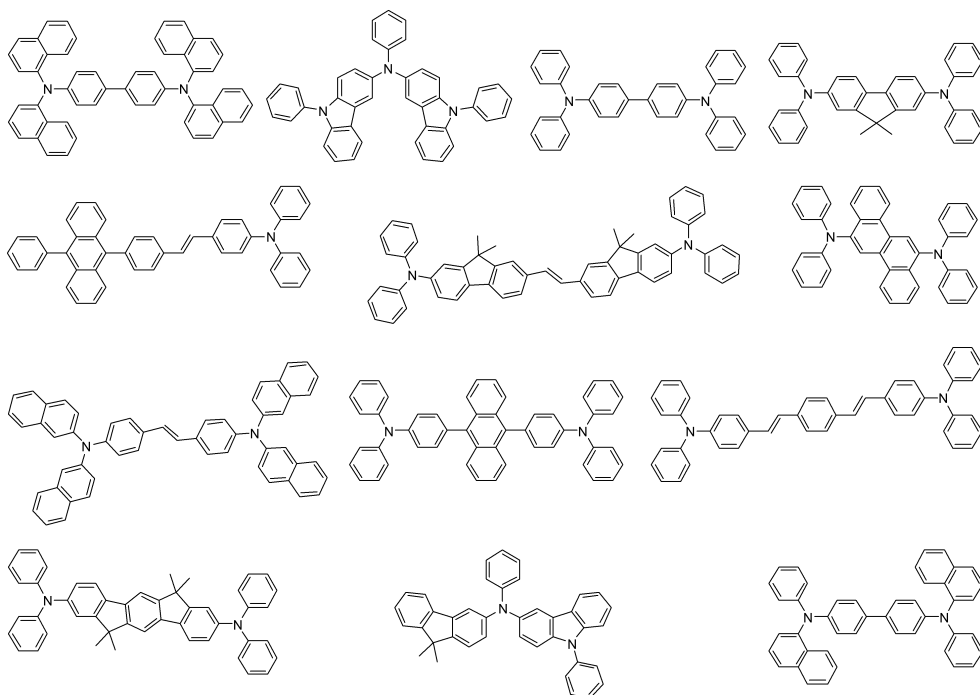
<94> b는 1 내지 4의 정수이며, c는 0 또는 1의 정수이고,

<95> 상기 Ar₁ 및 Ar₂의 알킬, 아릴, 헤테로아릴, 아릴아미노, 알킬아미노, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 또는 상기 Ar₃의 아릴, 헤테로아릴, 아릴렌 또는 헤테로아릴렌, 또는 상기 Ar₄ 및 Ar₅의 아릴렌 및 헤테로아릴렌, 또는 R₅₁ 내지 R₅₃의 알킬 또는 아릴은 중수소, 할로젠, (C1-C60)알킬, (C6-C60)아릴, (C4-C60)헤테로아릴, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 5원 내지 6원의 헤테로시클로알킬, (C3-C60)시클로알킬, 트리(C1-C60)알킬실릴, 디(C1-C60)알킬(C6-C60)아릴실릴, 트리(C6-C60)아릴실릴, 아다만틸, (C7-C60)바이시클로알킬, (C2-C60)알케닐, (C2-C60)알키닐, 시아노, (C1-C60)알킬아미노, (C6-C60)아릴아미노, (C6-C60)아르(C1-C60)알킬, (C6-C60)아릴옥시, (C1-C60)알킬옥시, (C6-C60)아릴티오, (C1-C60)알킬티오, (C1-C60)알콕시카보닐, (C1-C60)알킬카보닐, (C6-C60)아릴카보닐, 카르복실, 나이트로, 하이드록시로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기가 더 치환될 수 있다.]

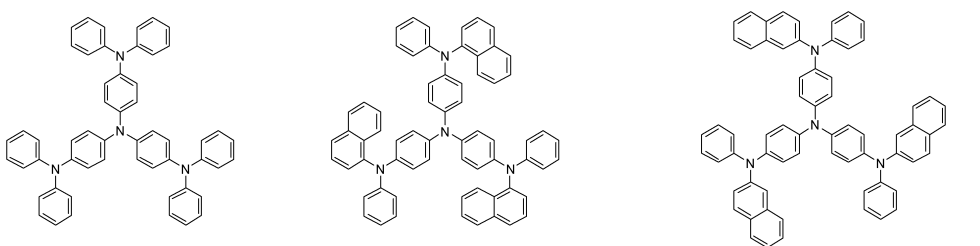
<96> 상기 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 하기 화합물로 한정되는 것은 아니다.



<97>



<98>



<99>

<100>

또한, 본 발명의 전기 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1의 전기 발광 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속을 더 포함할 수도 있고, 상기 유기물층은 발광층 및 전하생성층을 포함할 수 있다.

<101>

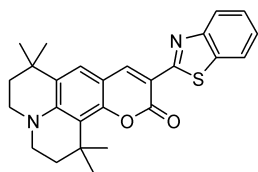
본 발명의 화학식 1의 전기 발광 화합물을 포함하는 전기 발광 소자를 서브픽셀로 하고, Ir, Pt, Pd, Rh, Re, Os, Tl, Pb, Bi, In, Sn, Sb, Te, Au 및 Ag로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 금속화합물을 포함하는 서브픽셀 하나 이상을 동시에 병렬로 패터닝한 독립발광방식의 픽셀구조를 가진 전기 발광 소자를 구현할 수도 있다.

<102>

또한, 상기 유기물층에 상기 전기 발광 화합물 이외에 녹색 또는 청색 발광을 하는 유기 화합물 또는 유기금속 화합물로부터 선택되는 하나 이상을 동시에 포함하여 유기 디스플레이를 형성할 수 있으며, 녹색 또는 청색 발광을 하는 유기화합물 또는 유기금속화합물은 하기 화학식 4 내지 화학식 8로 예시될 수 있으나, 이에 한정되는

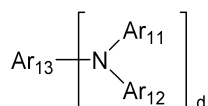
것은 아니다.

<103> [화학식 4]



<104>

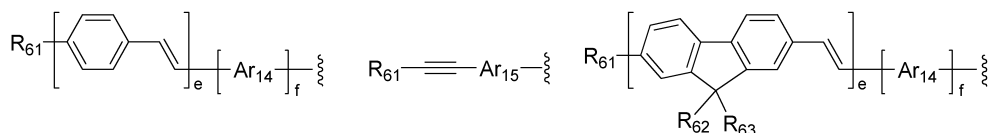
<105> [화학식 5]



<106>

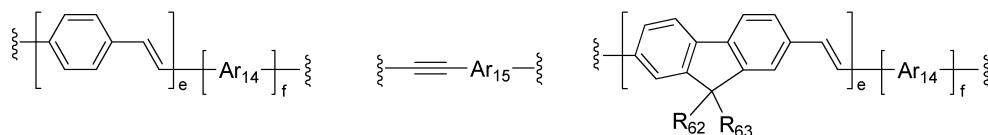
<107> [상기 화학식 5에서, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 서로 독립적으로 (C1-C60)알킬, (C6-C60)아릴, (C4-C60)헤테로아릴, (C6-C60)아릴아미노, (C1-C60)알킬아미노, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 5원 내지 6원의 헤테로시클로알킬 또는 (C3-C60)시클로알킬이고, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C60)알킬렌 또는 (C3-C60)알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하고;

<108> d가 1인 경우 Ar₁₃은 (C6-C60)아릴 또는 (C4-C60)헤테로아릴 또는 하기 구조에서 선택되는 치환기이고;



<109>

<110> d가 2인 경우 Ar₁₃는 (C6-C60)아릴렌, (C4-C60)헤테로아릴렌 또는 하기 구조에서 선택되는 치환기이고;



<111>

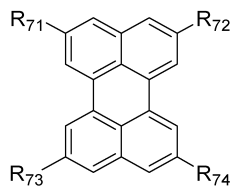
<112> Ar₁₄ 및 Ar₁₅는 서로 독립적으로 (C6-C60)아릴렌 또는 (C4-C60)헤테로아릴렌이고;

<113> R₆₁, R₆₂ 및 R₆₃은 서로 독립적으로 수소, 중수소, (C1-C60)알킬 또는 (C6-C60)아릴이고;

<114> e는 1 내지 4의 정수이며, f는 0 또는 1의 정수이고,

<115> 상기 Ar₁₁ 및 Ar₁₂의 알킬, 아릴, 헤테로아릴, 아릴아미노, 알킬아미노, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 또는 상기 Ar₁₃의 아릴, 헤테로아릴, 아릴렌 또는 헤테로아릴렌, 또는 상기 Ar₁₄ 및 Ar₁₅의 아릴렌 및 헤테로아릴렌, 또는 R₆₁ 내지 R₆₃의 알킬 또는 아릴은 중수소, 할로젠, (C1-C60)알킬, (C6-C60)아릴, (C4-C60)헤테로아릴, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 5원 내지 6원의 헤테로시클로알킬, (C3-C60)시클로알킬, 트리(C1-C60)알킬실릴, 디(C1-C60)알킬(C6-C60)아릴실릴, 트리(C6-C60)아릴실릴, 아다만틸, (C7-C60)바이시클로알킬, (C2-C60)알케닐, (C2-C60)알키닐, 시아노, (C1-C60)알킬아미노, (C6-C60)아릴아미노, (C6-C60)아르(C1-C60)알킬, (C6-C60)아릴옥시, (C1-C60)알킬옥시, (C6-C60)아릴티오, (C1-C60)알킬티오, (C1-C60)알콕시카보닐, (C1-C60)알킬카보닐, (C6-C60)아릴카보닐, 카르복실, 나이트로, 하이드록시로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기가 더 치환될 수 있다.]

<116> [화학식 6]



<117>

<118> [상기 화학식 6에서 R_{71} 내지 R_{74} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, (C1-C60)알킬, (C6-C60)아릴, (C4-C60)헤테로아릴, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 5원 내지 6원의 헤테로시클로알킬, (C3-C60)시클로알킬, 트리(C1-C60)알킬실릴, 디(C1-C60)알킬(C6-C60)아릴실릴, 트리(C6-C60)아릴실릴, 아다만틸, (C7-C60)바이시클로알킬, (C2-C60)알케닐, (C2-C60)알키닐, 시아노, (C1-C60)알킬아미노, (C6-C60)아릴아미노, (C6-C60)아르(C1-C60)알킬, (C1-C60)알킬옥시, (C1-C60)알킬티오, (C6-C60)아릴옥시, (C6-C60)아릴티오, (C1-C60)알콕시카보닐, (C1-C60)알킬카보닐, (C6-C60)아릴카보닐, 카르복실, 나이트로 또는 하이드록시이거나, R_{71} 내지 R_{74} 는 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C60)알킬렌 또는 (C3-C60)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고,

<119> 상기 R_{71} 내지 R_{74} 의 알킬, 알케닐, 알키닐, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 아릴실릴, 알킬실릴, 알킬아미노, 아릴아미노 및 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C60)알킬렌 또는 (C3-C60)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리는 중수소, 할로젠, (C1-C60)알킬, (C6-C60)아릴, (C4-C60)헤테로아릴, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 5원 내지 6원의 헤테로시클로알킬, (C3-C60)시클로알킬, 트리(C1-C60)알킬실릴, 디(C1-C60)알킬(C6-C60)아릴실릴, 트리(C6-C60)아릴실릴, 아다만틸, (C7-C60)바이시클로알킬, (C2-C60)알케닐, (C2-C60)알키닐, 시아노, (C1-C60)알킬아미노, (C6-C60)아릴아미노, (C6-C60)아르(C1-C60)알킬, (C1-C60)알킬옥시, (C1-C60)알킬티오, (C6-C60)아릴옥시, (C6-C60)아릴티오, (C1-C60)알콕시카보닐, (C1-C60)알킬카보닐, (C6-C60)아릴카보닐, 카르복실, 나이트로 또는 하이드록시로부터 선택된 하나 이상이 더 치환될 수 있다.]

<120> [화학식 7]

<121> $(Ar_{21})_g-L_{11}-(Ar_{22})_h$

<122> [화학식 8]

<123> $(Ar_{23})_i-L_{12}-(Ar_{24})_j$

<124> [상기 화학식 7 및 화학식 8에서,

<125> L_{11} 는 (C6-C60)아릴렌 또는 (C4-C60)헤테로아릴렌이고;

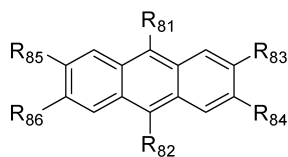
<126> L_{12} 는 안트라세닐렌이며;

<127> Ar_{21} 내지 Ar_{24} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, (C1-C60)알킬, (C1-C60)알콕시, 할로젠, (C4-C60)헤테로아릴, (C5-C60)시클로알킬 또는 (C6-C60)아릴로부터 선택되고, 상기 Ar_{21} 내지 Ar_{24} 의 시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴은 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C60)알킬, (C1-C60)알콕시, (C3-C60)시클로알킬, 할로젠, 시아노, 트리(C1-C60)알킬실릴, 디(C1-C60)알킬(C6-C60)아릴실릴 또는 트리(C6-C60)아릴실릴로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C60)아릴 또는 (C4-C60)헤테로아릴, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C60)알킬, (C1-C60)알콕시, (C3-C60)시클로알킬, 할로젠, 시아노, 트리(C1-C60)알킬실릴, 디(C1-C60)알킬(C6-C60)아릴실릴 또는 트리(C6-C60)아릴실릴로 이루어지는 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기가 더 치환될 수 있고;

<128> g, h, i 및 j는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수이다.]

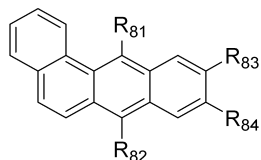
<129> 상기 화학식 7 및 화학식 8의 화학식은 화학식 9 내지 화학식 11로 표시되는 안트라센 유도체 또는 벤즈[a]안트라센 유도체로 예시될 수 있다.

<130> [화학식 9]



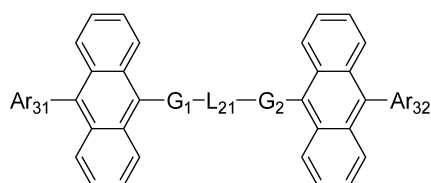
<131>

<132> [화학식 10]



<133>

<134> [화학식 11]



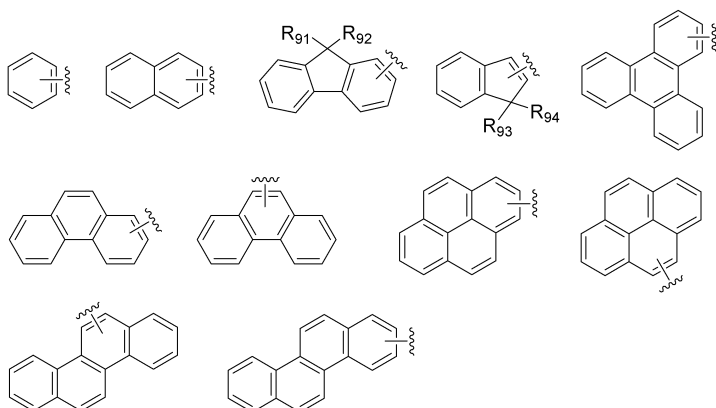
<135>

<136> [상기 화학식 9 내지 화학식 11에서, R₈₁ 및 R₈₂는 서로 독립적으로 (C6-C60)아릴, (C4-C60)헤테로아릴, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 5원 내지 6원의 헤테로시클로알킬 또는 (C3-C60)시클로알킬이며, 상기 R₈₁ 및 R₈₂의 아릴 또는 헤테로아릴은 중수소, (C1-C60)알킬, 할로(C1-C60)알킬, (C1-C60)알콕시, (C3-C60)시클로알킬, (C6-C60)아릴, (C4-C60)헤테로아릴, 할로젠, 시아노, 트리(C1-C60)알킬실릴, 디(C1-C60)알킬(C6-C60)아릴실릴 또는 트리(C6-C60)아릴실릴로 이루어지는 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기가 더 치환될 수 있으며;

<137> R₈₃ 내지 R₈₆은 서로 독립적으로 수소, 중수소, (C1-C60)알킬, (C1-C60)알콕시, 할로젠, (C4-C60)헤테로아릴, (C5-C60)시클로알킬 또는 (C6-C60)아릴이며, 상기 R₈₃ 내지 R₈₆의 헤테로아릴, 시클로알킬 또는 아릴은 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C60)알킬, (C1-C60)알콕시, (C3-C60)시클로알킬, 할로젠, 시아노, 트리(C1-C60)알킬실릴, 디(C1-C60)알킬(C6-C60)아릴실릴 또는 트리(C6-C60)아릴실릴로 이루어지는 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기가 더 치환될 수 있고;

<138> G₁ 및 G₂는 서로 독립적으로 화합결합이거나 (C1-C60)알킬, (C1-C60)알콕시, (C6-C60)아릴, (C4-C60)헤테로아릴 또는 할로젠으로부터 선택된 하나 이상이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C60)아릴렌이며, ;

<139> Ar₃₁ 및 Ar₃₂는 (C4-C60)헤테로아릴 또는 하기 구조에서 선택되는 아릴이며,

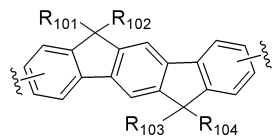


<140>

<141> 상기 Ar₃₁ 및 Ar₃₂의 아릴 또는 헤테로아릴은 중수소, (C1-C60)알킬, (C1-C60)알콕시, (C6-C60)아릴 또는 (C4-

C60)헤테로아릴로부터 선택된 치환기가 하나이상 치환될 수 있고;

<142> L₂₁는 (C6-C60)아릴렌, (C4-C60)헤테로아릴렌 또는 하기 구조의 화합물이며,



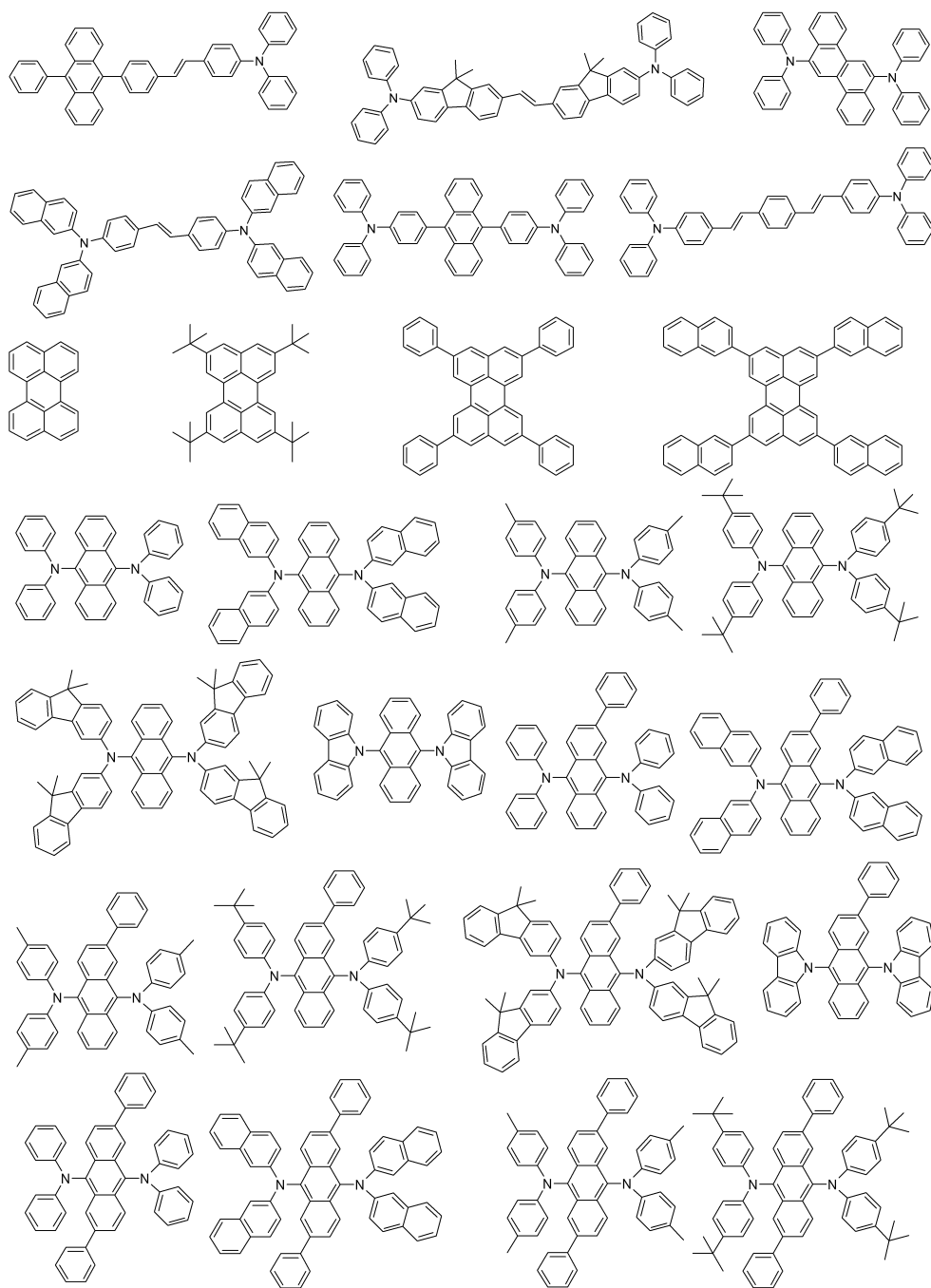
<143>

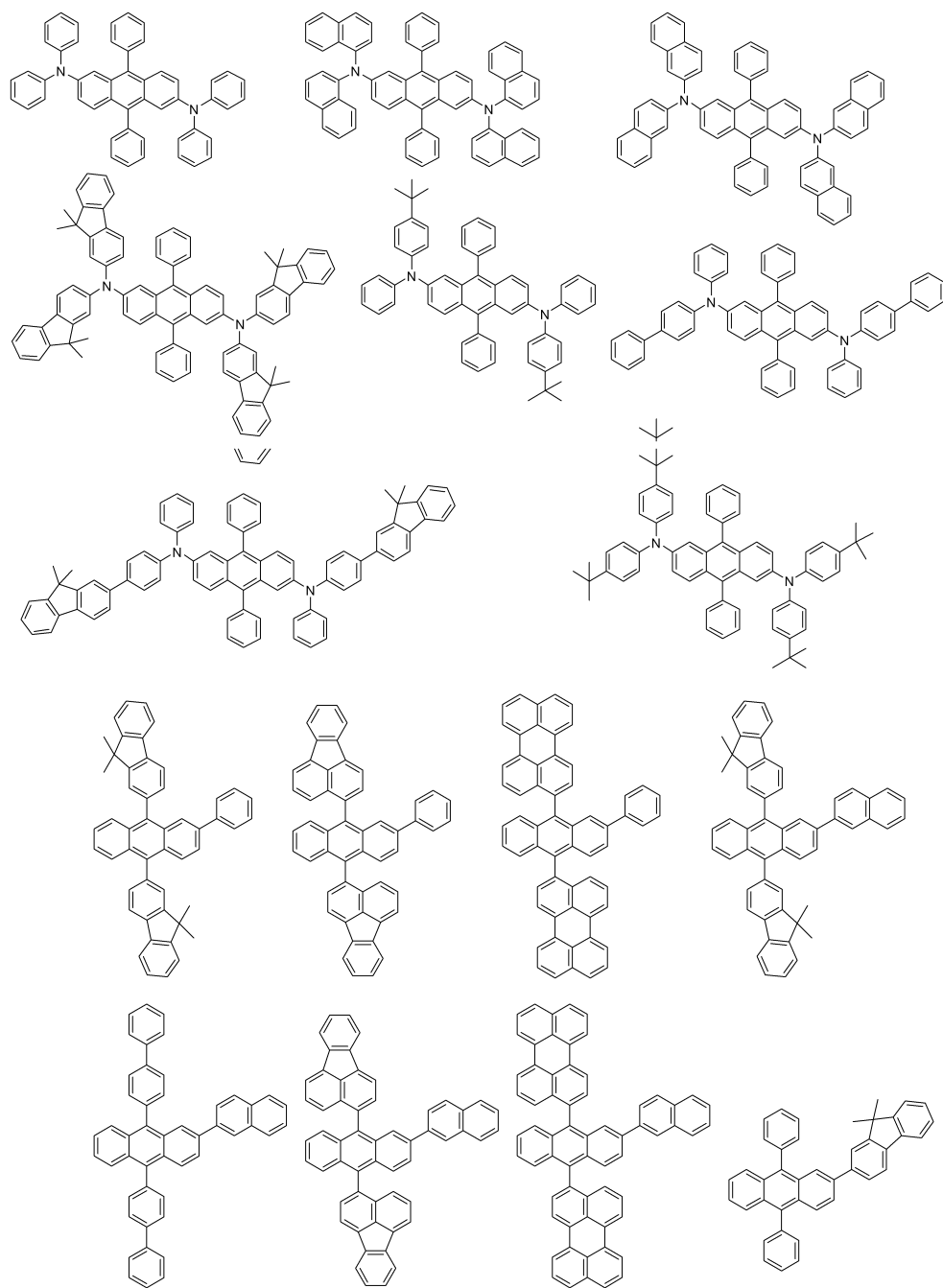
<144> 상기 L₂₁의 아릴렌 또는 헤테로아릴렌은 중수소, (C1-C60)알킬, (C1-C60)알콕시, (C6-C60)아릴, (C4-C60)헤테로아릴 또는 할로겐으로부터 선택된 하나 이상이 치환될 수 있으며;

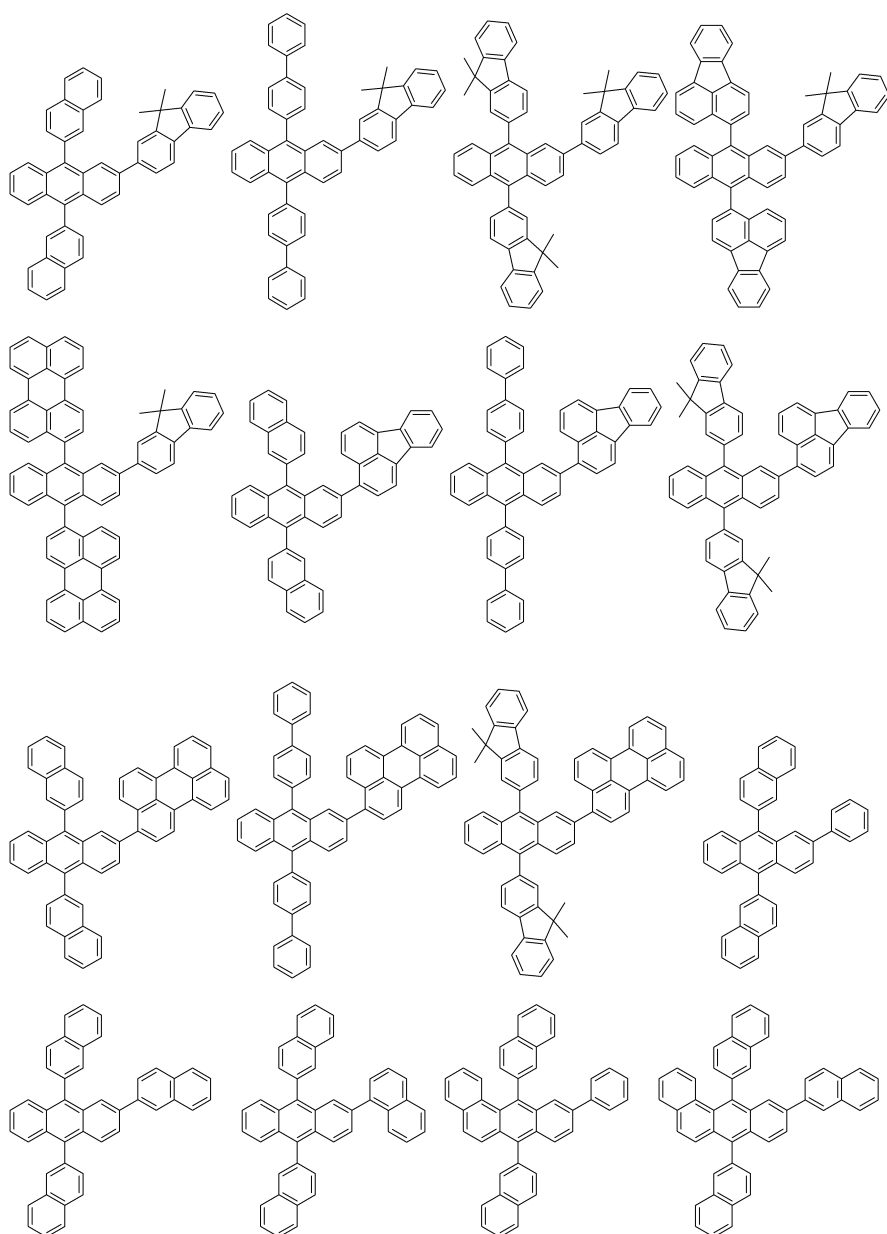
<145> R₉₁, R₉₂, R₉₃ 및 R₉₄는 서로 독립적으로 수소, 중수소, (C1-C60)알킬 또는 (C6-C60)아릴이거나, 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C60)알킬렌 또는 (C3-C60)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며,

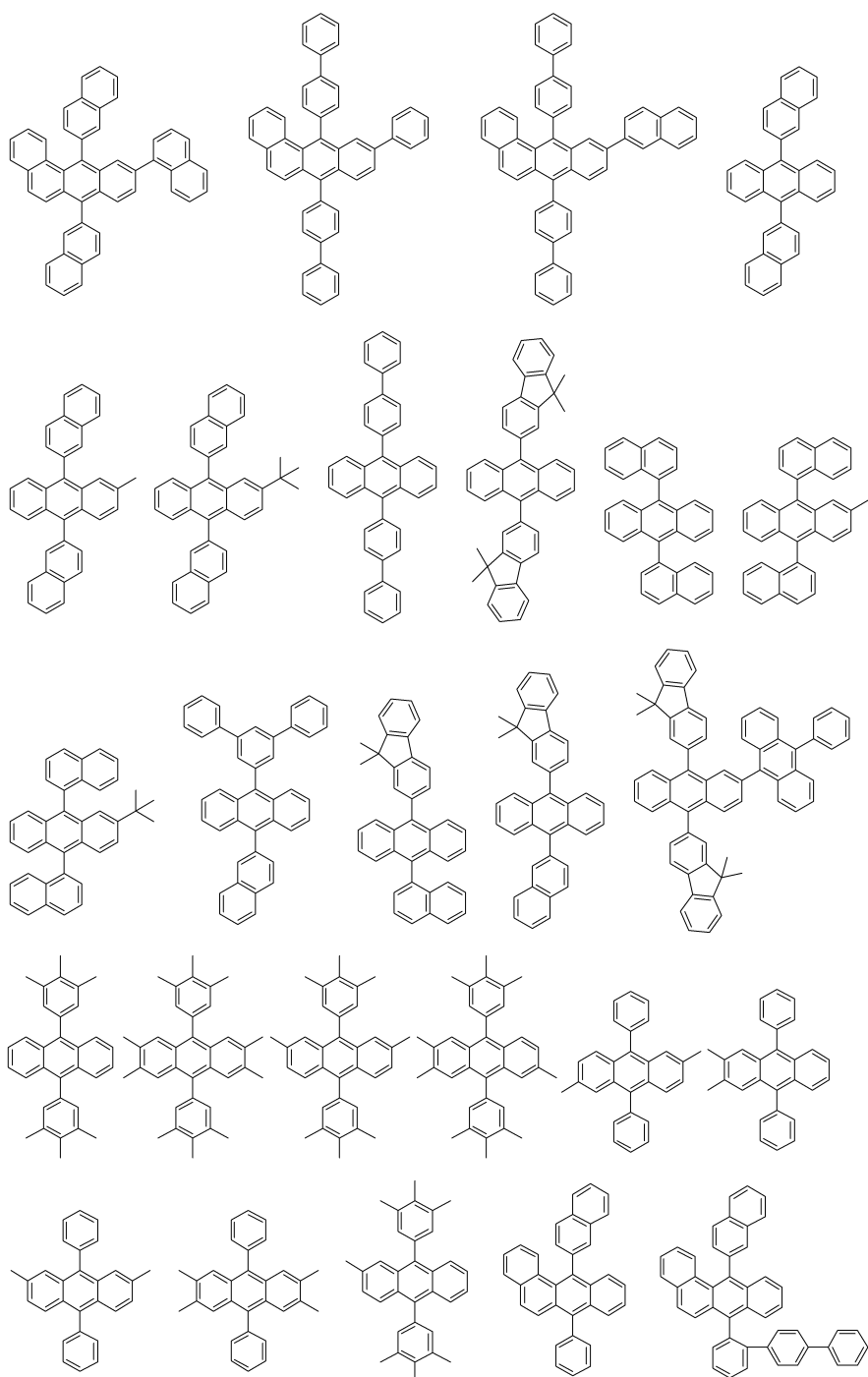
<146> R₁₀₁, R₁₀₂, R₁₀₃ 및 R₁₀₄는 서로 독립적으로 수소, 중수소, (C1-C60)알킬, (C1-C60)알콕시, (C6-C60)아릴, (C4-C60)헤테로아릴 또는 할로겐이거나, 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C60)알킬렌 또는 (C3-C60)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있다.]

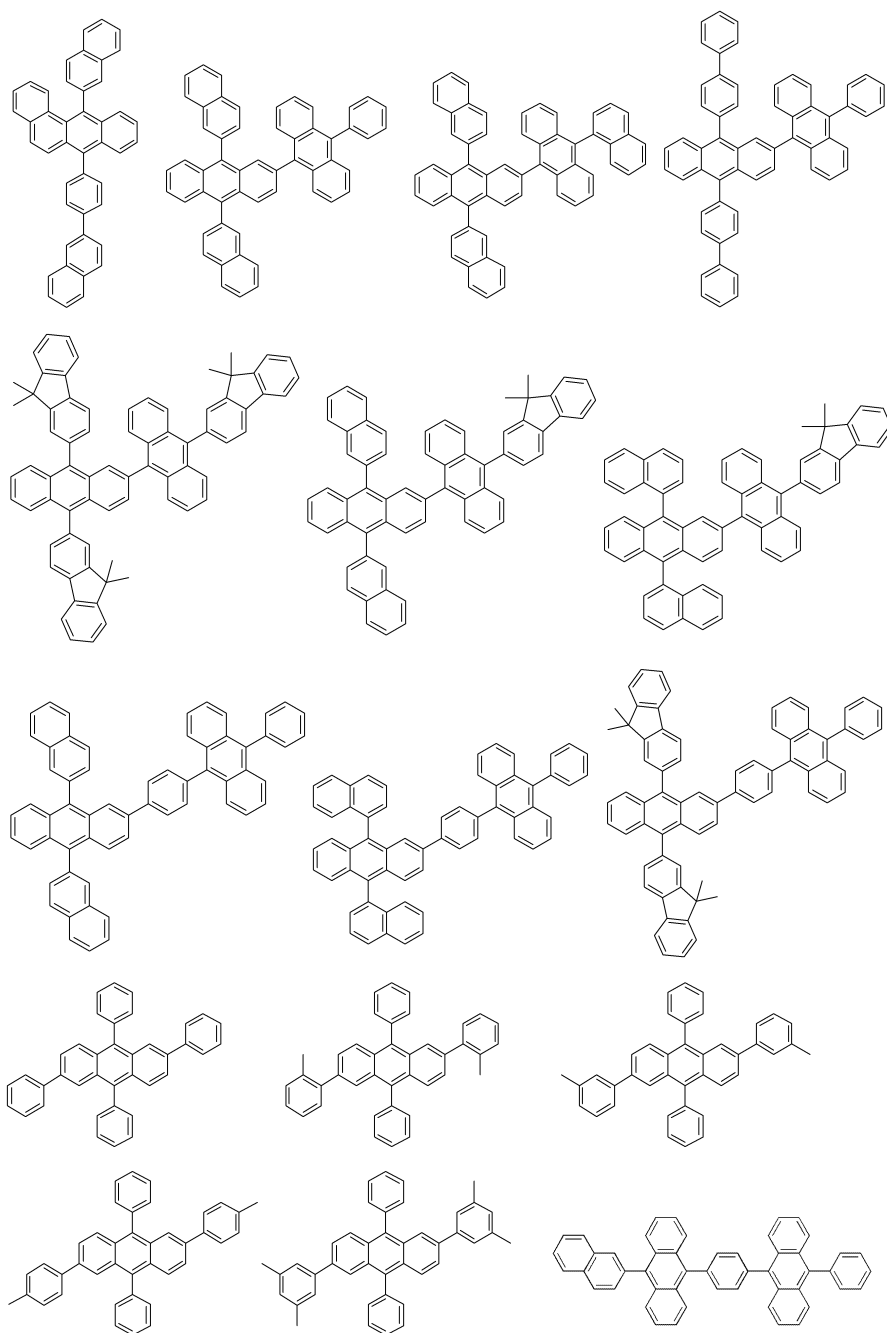
<147> 상기 녹색 또는 청색 발광을 하는 유기화합물 또는 유기금속화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 하기 화합물로 한정되는 것은 아니다.

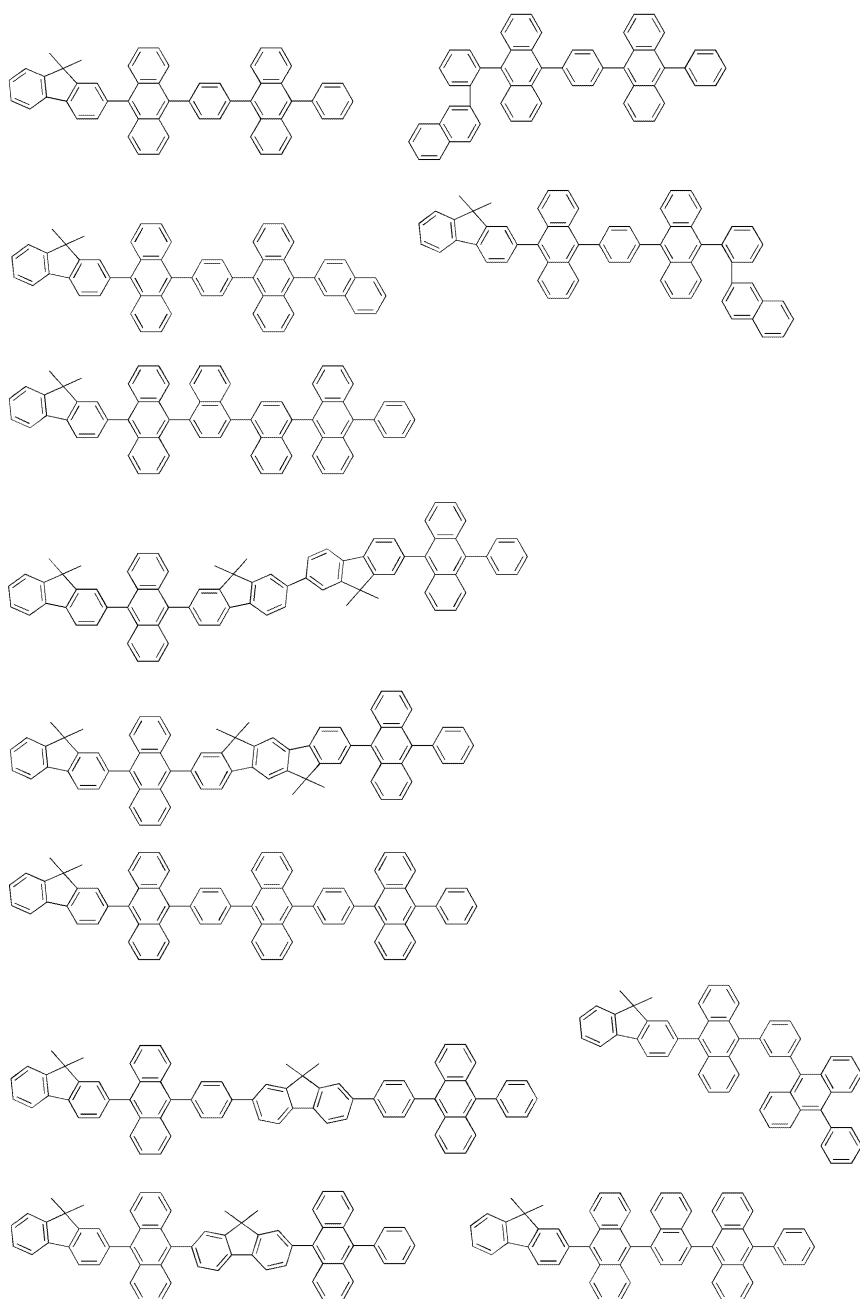


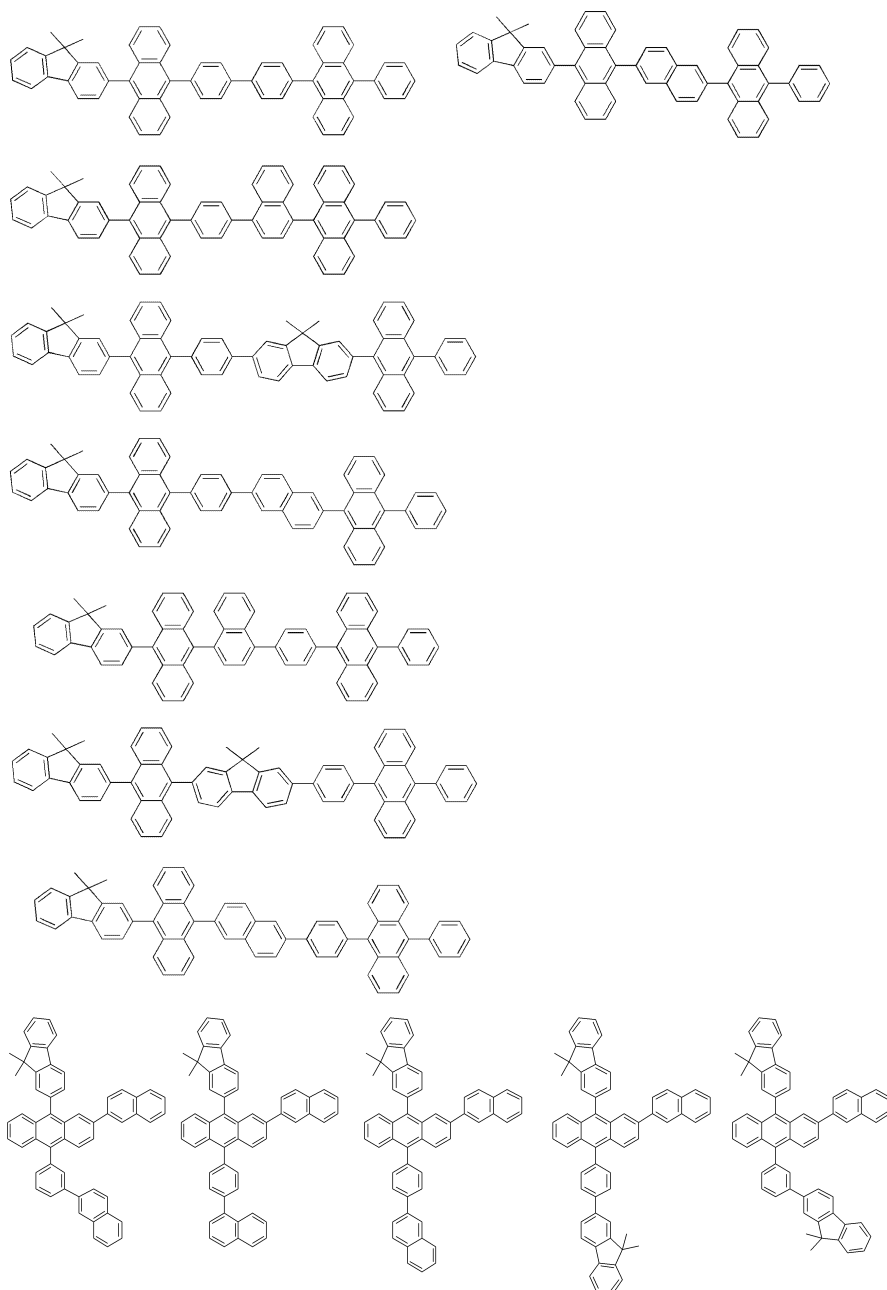


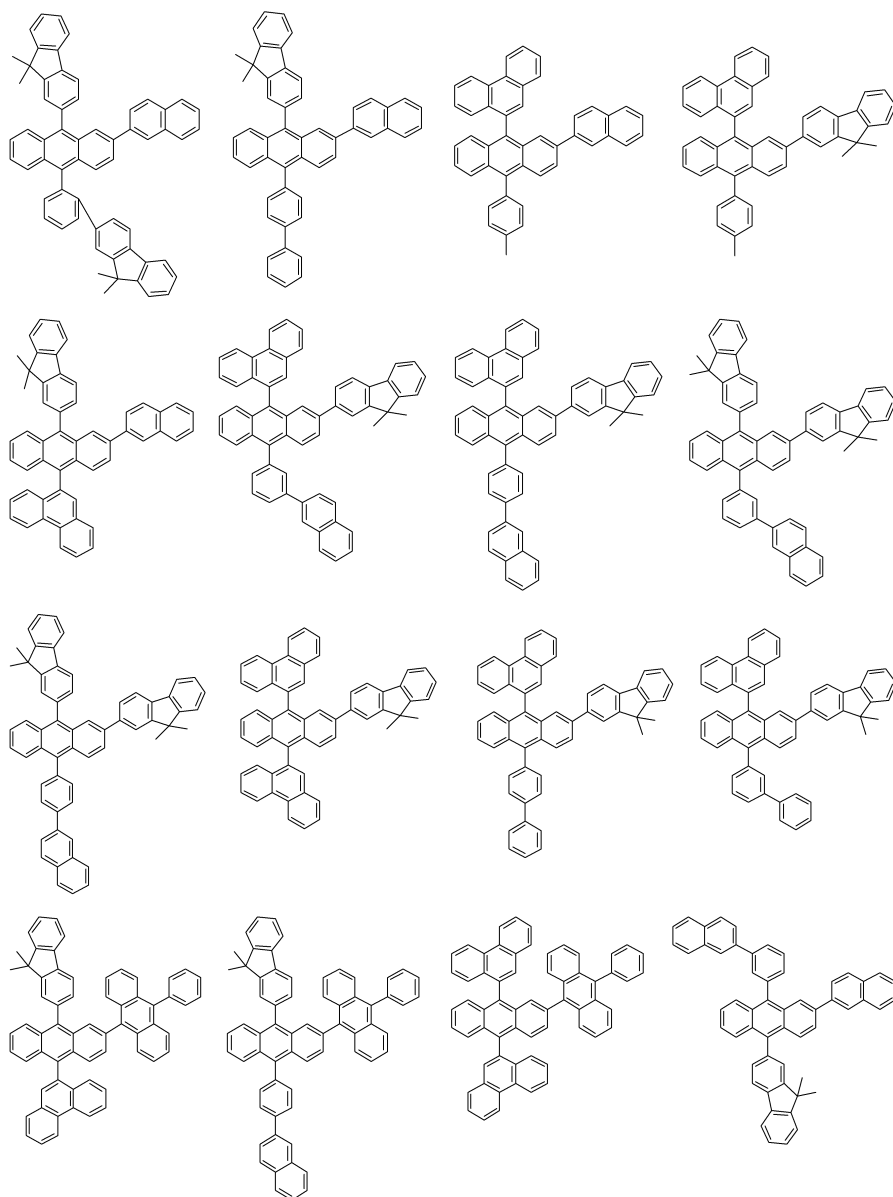




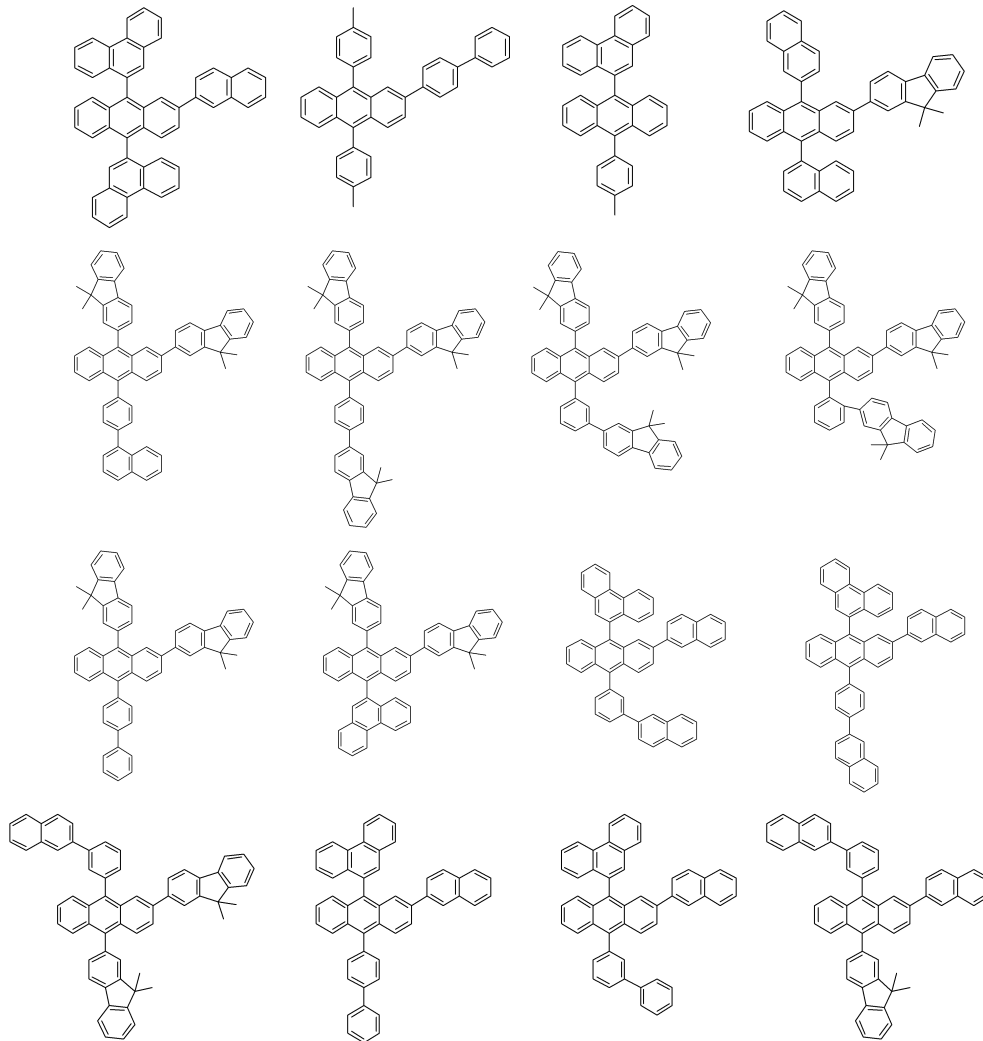








<155>



<156>

<157>

본 발명의 유기 전자 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 일층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함) 이상을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 금속의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광매체층 측의 음극 표면에 할로젠화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 이것에 의해, 구동의 안정화를 얻을 수 있다.

<158>

상기 칼코제나이드로서는 예컨대 SiO_x ($1 \leq x \leq 2$), AlO_x ($1 \leq x \leq 1.5$), SiON , SiAlON 등을 바람직하게 들 수 있으며, 할로젠화 금속으로서는 예컨대 LiF , MgF_2 , CaF_2 , 불화 희토류 금속 등을 바람직하게 들 수 있으며, 금속 산화물로서는 예컨대 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등을 바람직하게 들 수 있다.

<159>

또한, 본 발명의 전기 전자 소자에 있어서, 이렇게 제작된 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식으로, 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있다. 바람직한 환원성 도판트로서는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다.

효과

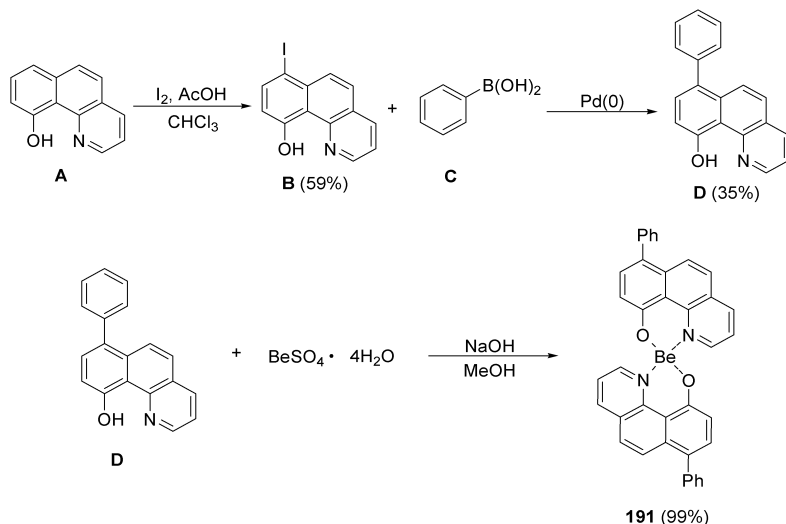
<160>

본 발명에 따른 전기 발광 화합물은 OLED 소자에서 전기 발광 재료의 호스트 재료로 사용되어 기존 호스트 재료에 비해 적색 발광효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 양호한 OLED를 제조할 수 있는 장점이 있다.

발명의 실시를 위한 구체적인 내용

<161> 이하, 본 발명을 제조에 및 실시예에 의거하여 본 발명에 따른 신규한 전기 발광 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광특성을 예시하나, 하기의 실시예들은 본 발명에 대한 이해를 돕기 위한 것으로서, 본 발명의 범위가 하기의 실시예에 한정되는 것은 아니다.

<162> [제조예 1] 화합물 191의 제조



<163>

화합물 B의 제조

<165> 화합물 A (10 g, 51.2 mmol)가 들어있는 5리터 둥근 플라스크에 클로로포름 (1 L)과 아세트산 (205 mL)을 넣는다. 메탄올 (1 L)에 아이오딘 (11.7 g, 46.1 mmol)을 녹인 후 화합물 A의 혼합물에 천천히 가하고 70℃에서 6시간동안 교반하였다. 그리고 그 반응혼합물을 실온으로 식힌 다음 중화시켰다. 물과 티오황산나트륨(Sodium thiosulfate)으로 씻고 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 실리카겔럼을 통하여 정제 후 건조하여 화합물 B (9.7 g, 59%)를 얻었다.

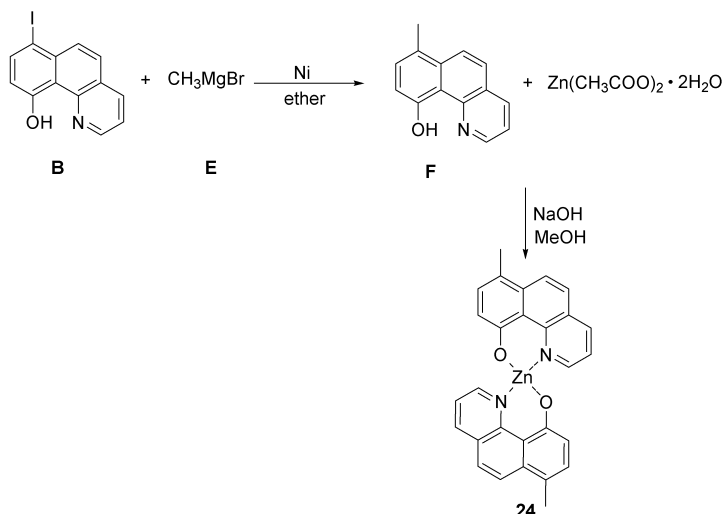
화합물 C의 제조

<167> 화합물 B (9.2 g, 28.7 mmol)가 들어있는 500 mL 플라스크에 화합물 C (4.2 g, 34.4 mmol)와 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐 (994 mg, 0.86 mmol)을 넣고 아르곤 가스를 채운다. 여기에 톨루엔 (100 mL)과 에탄올 (50 mL), 2M 포타슘카보네이트 (50 mL)를 넣고 2시간동안 환류시켰다. 실온으로 식힌 후 물로 씻고 에틸아세테이트로 추출하여 실리카겔럼을 통하여 정제 후 건조하여 화합물 D (2.7 g, 35%)를 얻었다.

화합물 191의 제조

<169> 화합물 D (2.7 g, 9.95 mmol)가 들어있는 500 mL 플라스크에 수산화나트륨 (398 mg, 9.95 mmol)과 메탄올 (180 mL)을 넣고 교반시켰다. 여기에 베릴륨 설페이트 테트라하이드레이트(Beryllium Sulfate Tetrahydrate) (980 mg, 5.53 mmol)을 넣고 12시간동안 교반시켰다. 고체를 필터하고 물과 에탄올로 씻고 건조하여 화합물 191 (2.7 g, 99%)을 얻었다.

<170> [제조예 2] 화합물 24의 제조



<171>

<172> **화합물 F의 제조**

<173> 500 mL 플라스크에 니켈 (1.84 g, 2.8 mmol)을 가하고 아르곤 가스를 채우고 에테르 (50 mL)를 가하였다. 그리고 화합물 E (14.1 mL, 42.15 mmol)을 가하고 실온에서 30분동안 교반시켰다. 그리고 여기에 화합물 B (5.0 g, 14.0 mmol)를 에테르에 녹여서 가하고 48시간동안 환류교반시켰다. 이를 실온으로 식히고 포화된 암모늄클로라이드에 붓었다. 이를 물로 씻고 에틸아세테이트로 추출하여 실리카겔럼을 통하여 정제 후 건조하여 화합물 F (2.0 g, 69%)를 얻었다.

<174> **화합물 24의 제조**

<175> 화합물 F (2.0 g, 9.6 mmol)가 들어있는 500 mL 플라스크에 수산화나트륨 (384 mg, 9.6 mmol)와 메탄올 (180 mL)를 넣고 교반시켰다. 여기에 징크아세테이트 (1.2 g, 5.33 mmol)을 넣고 12시간동안 교반시켰다. 고체를 필터하고 물과 에탄올로 씻고 건조하여 화합물 24 (2.0 g, 86%)를 얻었다.

<176>

<177> 상기 제조예 1 및 2의 방법을 이용하여 전기 발광 화합물 1 내지 화합물 356 을 제조하였으며, 하기 표 1에 제조된 화합물의 ^1H NMR 및 MS/FAB를 나타내었다.

<178>

[표 1]

화합물 번호	¹ H NMR(CDCl ₃ , 200 MHz)	MS/FAB
1	δ = 2.26(6H, s), 6.93(2H, m), 7.58(2H, m), 7.66(2H, m), 7.81(2H, m), 8.06(2H, m), 8.38(2H, m), 8.82(2H, m)	481.88
5	δ = 7.41(2H, m), 7.51~7.52(8H, m), 7.58(2H, m), 7.78~7.81(6H, m), 8.06(2H, m), 8.38(2H, m), 8.82(2H, m)	606.02
9	δ = 2.34(6H, s), 7.29~7.33(8H, m), 7.58(2H, m), 7.78~7.81(6H, m), 8.06(2H, m), 8.38(2H, m), 8.82(2H, m)	634.07
14	δ = 7.42(2H, m), 7.58(2H, m), 7.81(2H, m), 7.9(2H, m), 8.06(2H, m), 8.38(2H, m), 8.82(2H, m)	503.85
25	δ = 6.63(2H, m), 6.88(2H, m), 7.58(2H, m), 7.81(2H, m), 8.06(2H, m), 8.38(2H, m), 8.82(2H, m)	489.81
32	δ = 6.71(2H, m), 7.58~7.59(8H, m), 7.73(2H, m), 7.8~7.81(4H, m), 7.92(2H, m), 8(4H, m), 8.06(2H, m), 8.38(2H, m), 8.82(2H, m)	706.14
38	δ = 6.5(4H, m), 7.14~7.17(6H, m), 7.41(4H, m), 7.58(2H, m), 7.81(2H, m), 8.06(2H, m), 8.38(2H, m), 8.82(2H, m)	638.02
43	δ = 2.34(36H, s), 6.65(2H, m), 6.91(6H, m), 6.98(1H, s), 7(1H, s), 7.45(2H, m), 7.58(2H, m), 7.81(2H, m), 8.06(2H, m), 8.38(2H, m), 8.82(2H, m)	950.17
46	δ = 1.72(12H, s), 6.71(2H, m), 7.28(2H, m), 7.38(2H, m), 7.53~7.63(7H, m), 7.77~7.81(5H, m), 7.87~7.93(3H, m), 8.06(3H, m), 8.38(2H, m), 8.82(2H, m)	838.34
52	δ = 1.48(24H, m), 1.73~1.75(16H, m), 2.72(4H, m), 6.81(2H, s), 7.58(2H, m), 7.81(2H, m), 8.06(2H, m), 8.38(2H, m), 8.82(2H, m)	782.40

<179>

58	$\delta = 3.83(12H, s), 6.21(2H, s), 7.58(2H, m), 7.81(2H, m), 8.06(2H, m), 8.38(2H, m), 8.82(2H, m)$	573.93
63	$\delta = 7.55\sim 7.58(10H, m), 7.61(6H, s), 7.61(0H, m), 7.81(2H, m), 8.04\sim 8.08(10H, m), 8.38\sim 8.42(6H, m), 8.55(4H, m), 8.82(2H, m)$	958.45
71	$\delta = 5.45(2H, m), 6.22(2H, m), 6.65(2H, m), 6.84(2H, m), 7.4(2H, m), 7.57(2H, m), 7.72(2H, m), 7.81(2H, m), 8.06(2H, m), 8.24(2H, m)$	505.90
78	$\delta = 6.65(2H, m), 7.35\sim 7.4(4H, m), 7.55(4H, m), 7.64(2H, m), 7.72(2H, m), 7.81(2H, m), 8.06\sim 8.1(8H, m), 8.46(2H, m), 8.55(2H, m)$	706.14
84	$\delta = 6.65(2H, m), 6.95\sim 7.01(6H, m), 7.11(2H, m), 7.28(4H, m), 7.4(2H, m), 7.7\sim 7.72(4H, m), 8.02(2H, m), 8.33(2H, m)$	638.02
96	$\delta = 6.65(2H, m), 7.32\sim 7.4(6H, m), 7.72(2H, m), 7.81\sim 7.85(4H, m), 8.06(2H, m), 8.19(2H, m), 8.59(2H, m), 8.91(2H, m)$	608.00
102	$\delta = 6.65(2H, m), 7.4(2H, m), 7.72(2H, m), 8.1(2H, m), 8.26(2H, m), 8.58(2H, m), 8.97(2H, m)$	589.82
109	$\delta = 6.65(2H, m), 7.37\sim 7.46(26H, m), 7.55(6H, m), 7.72\sim 7.74(4H, m), 7.81(2H, m), 8.06(2H, m), 8.92(2H, m)$	970.61
117	$\delta = 2.34(12H, s), 6.65(2H, m), 7.29\sim 7.33(12H, m), 7.4(2H, m), 7.72(2H, m), 7.81(2H, m), 7.84(2H, s), 8.06(2H, m), 8.18(4H, m)$	814.32
128	$\delta = 6.65(2H, m), 7.23(4H, m), 7.24(2H, s), 7.29(8H, m), 7.39\sim 7.4(10H, m), 7.72(2H, m), 7.81(2H, m), 8.06(2H, m)$	886.47
136	$\delta = 6.74(2H, m), 7(2H, m), 7.26(2H, m), 7.32\sim 7.36(4H, m), 7.51(2H, m), 7.81\sim 7.85(4H, m), 8.06(2H, m), 8.19(2H, m), 8.31(2H, m), 8.5(2H, m), 8.59(2H, m), 8.91(2H, m)$	762.16
149	$\delta = 5.35(4H, s), 6.5(4H, m), 7.52(2H, m), 7.87(2H, m), 8.47(2H, m), 8.67(2H, m)$	517.83
158	$\delta = 7.55(8H, m), 7.61(4H, m), 7.68(2H, m), 7.78\sim 7.81(6H, m), 8.04\sim 8.08(10H, m), 8.42(4H, m), 8.55(4H, m), 8.88(2H, m)$	958.45
166	$\delta = 2.5(12H, s), 7.42(2H, m), 7.52(2H, m), 7.94(2H, m), 8.19(2H, m), 8.75(2H, m), 9.14(2H, m)$	621.97
178	$\delta = 1.35(18H, s), 1.48(18H, s), 6.52(2H, m), 6.85(2H, m), 7.37(2H, m), 7.8(2H, m), 8.16(2H, m), 8.69(2H, m)$	742.55
186	$\delta = 6.94(2H, m), 7.81\sim 7.84(4H, m), 8.01\sim 8.06(4H, m), 9.11(2H, m)$	569.82
196	$\delta = 6.77(2H, m), 7.58(2H, m), 7.65(2H, m), 7.81(2H, m), 8.06(2H, m), 8.38(2H, m), 8.82(2H, m)$	447.45

203	$\delta = 1.72(12\text{H, s}), 6.71(2\text{H, m}), 7.28(2\text{H, m}), 7.38(2\text{H, m}), 7.53\sim 7.63(7\text{H, m}), 7.77\sim 7.81(5\text{H, m}), 7.87\sim 7.93(3\text{H, m}), 8.06(3\text{H, m}), 8.38(2\text{H, m}), 8.82(2\text{H, m})$	781.94
217	$\delta = 6.44(2\text{H, m}), 6.63\sim 6.65(10\text{H, m}), 6.81(4\text{H, m}), 7.2(8\text{H, m}), 7.4(2\text{H, m}), 7.72(2\text{H, m}), 7.8(2\text{H, m}), 8.05(2\text{H, m}), 8.65(2\text{H, m})$	731.84
222	$\delta = 6.35(2\text{H, m}), 7.02(2\text{H, m}), 7.58(2\text{H, m}), 7.81(2\text{H, m}), 8.06(2\text{H, m}), 8.38(2\text{H, m}), 8.82(2\text{H, m})$	489.81
234	$\delta = 6.89(2\text{H, m}), 7.56\sim 7.58(4\text{H, m}), 7.81(2\text{H, m}), 8.06(2\text{H, m}), 8.38(2\text{H, m}), 8.82(2\text{H, m})$	503.85
242	$\delta = 2.34(36\text{H, s}), 6.91\sim 6.92(10\text{H, m}), 7.58\sim 7.59(4\text{H, m}), 7.81(2\text{H, m}), 8.06(2\text{H, m}), 8.38(2\text{H, m}), 8.82(2\text{H, m})$	950.17
255	$\delta = 5.18(2\text{H, m}), 5.61(2\text{H, m}), 6.63\sim 6.65(4\text{H, m}), 7.4(2\text{H, m}), 7.72(2\text{H, m}), 7.81(2\text{H, m}), 8.06(2\text{H, m}), 8.38(2\text{H, m}), 8.86(2\text{H, m})$	505.90
261	$\delta = 6.65(2\text{H, m}), 7.23\sim 7.29(6\text{H, m}), 7.39\sim 7.4(6\text{H, m}), 7.72(2\text{H, m}), 7.81(2\text{H, m}), 8.06(2\text{H, m}), 8.14(2\text{H, m}), 8.76(2\text{H, m})$	670.15
271	$\delta = 7.55\sim 7.61(4\text{H, m}), 7.78\sim 7.81(3\text{H, m}), 8.04\sim 8.08(3\text{H, m}), 8.38\sim 8.42(2\text{H, m}), 8.55(1\text{H, m}), 8.82(1\text{H, m})$	347.34
284	$\delta = 6.89(1\text{H, m}), 7.56\sim 7.58(2\text{H, m}), 7.81(1\text{H, m}), 8.06(1\text{H, m}), 8.38(1\text{H, m}), 8.82(1\text{H, m})$	246.20
292	$\delta = 7.58(1\text{H, m}), 7.81\sim 7.84(2\text{H, m}), 8.01\sim 8.06(2\text{H, m}), 8.38(1\text{H, m}), 8.82(1\text{H, m})$	250.19
305	$\delta = 1.72(6\text{H, s}), 7.28(1\text{H, m}), 7.38(1\text{H, m}), 7.55\sim 7.63(3\text{H, m}), 7.77\sim 7.81(4\text{H, m}), 7.87\sim 7.93(2\text{H, m}), 8.06(1\text{H, m}), 8.38(1\text{H, m}), 8.82(1\text{H, m})$	413.45
314	$\delta = 6.65(1\text{H, m}), 7.4(1\text{H, m}), 7.72(1\text{H, m}), 7.81(1\text{H, m}), 7.91(1\text{H, m}), 8.06(1\text{H, m}), 8.53(1\text{H, m})$	239.18
326	$\delta = 1.35(9\text{H, s}), 6.65(1\text{H, m}), 7.4(1\text{H, m}), 7.72(1\text{H, m}), 7.8(1\text{H, m}), 7.98\sim 8.03(2\text{H, m}), 8.68(1\text{H, m})$	277.30
332	$\delta = 6.65(1\text{H, m}), 7.4(1\text{H, m}), 7.72(1\text{H, m}), 7.81(1\text{H, m}), 8.06(1\text{H, m}), 9.11(1\text{H, m}), 9.45(1\text{H, m})$	246.20
346	$\delta = 6.65(1\text{H, m}), 7.37\sim 7.46(13\text{H, m}), 7.55(3\text{H, m}), 7.72(1\text{H, m}), 7.81(1\text{H, m}), 8.06(1\text{H, m}), 8.48(1\text{H, m}), 9.1(1\text{H, m})$	479.58
354	$\delta = 6.65(1\text{H, m}), 7.11(1\text{H, m}), 7.4(1\text{H, m}), 7.7\sim 7.72(2\text{H, m}), 8.02(1\text{H, m}), 8.33(1\text{H, m}), 11.53(1\text{H, s})$	237.19

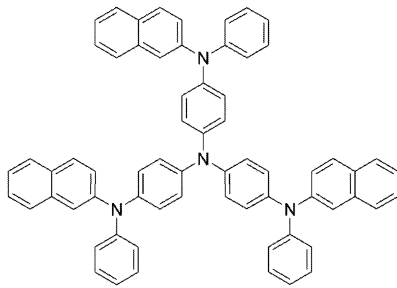
<181>

<182> [실시에 1-9] 본 발명에 따른 전기 발광 화합물을 이용한 OLED 소자의 제조

<183> 본 발명의 전기발광화합물을 호스트 재료로 사용하여 OLED 소자를 제작하였다. OLED 소자의 단면도는 도1 과 같다.

<184> 우선, OLED용 글래스(1)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막(15 $\Omega/\square$, 삼성-코닝사 제조, 2)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다.

<185> 다음으로, 진공 증착 장비의 기관 폴더에 ITO 기관을 설치하고, 진공 증착 장비 내의 셀에 4,4',4"-tris(N,N-(2-naphthyl)-phenylamino)triphenylamine (2-TNATA)을 넣고, 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 2-TNATA를 증발시켜 ITO 기관 상에 60 nm 두께의 정공주입층(3)을 증착하였다.

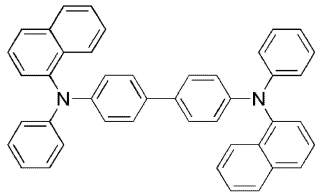


2-TNATA

<186>

<187>

이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 N,N'-bis(α -naphthyl)-N,N'-diphenyl-4,4'-diamine (NPB)을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 NPB를 증발시켜 정공주입층 위에 20 nm 두께의 정공전달층(4)을 증착하였다.

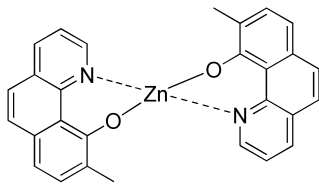


NPB

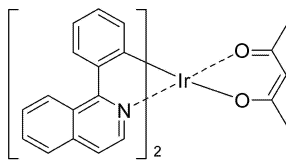
<188>

<189>

진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트 재료로 10^{-6} torr하에서 진공 승화 정제된 본 발명에 따른 화합물(예 : 화합물 1)을 넣고, 다른쪽 셀에는 발광 도판트(예 : 화합물 (piq)₂Ir(acac))를 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 4 내지 10mol%로 도핑함으로써 상기 정공 전달층 위에 30 nm 두께의 발광층(5)을 증착하였다.



화합물 1

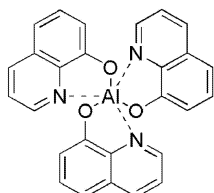


(piq)₂Ir(acac)

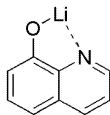
<190>

<191>

이어서 전자전달층(6)으로써 tris(8-hydroxyquinoline)-aluminum(III) (Alq)을 20 nm 두께로 증착하였다. 다음으로 전자주입층(7)으로 lithium quinolate (Liq)를 1 내지 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극(8)을 150 nm의 두께로 증착하여 OLED를 제작하였다.



Alq



Liq

<192>

<193>

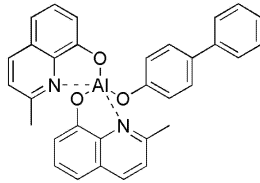
재료 별로 각 화합물은 10^{-6} torr 하에서 진공 승화 정제하여 OLED 발광재료로 사용하였다.

<194>

[비교예 1] 종래의 발광재료를 이용한 OLED 소자의 제조

<195>

진공 증착 장비 내의 다른 셀에 발광 호스트 재료로서 본 발명에 따른 전기발광 화합물 대신에 Bis(2-methyl-8-quinolinato)(*p*-phenylphenolato)aluminum(III) (BALq)을 넣은 것 이외에는 실시예 1과 동일하게 OLED 소자를 제작하였다.



BAIq

[실험예 1] 제조된 OLED 소자의 특성 확인

본 발명에 따른 전기 발광 화합물을 함유하는 실시예 1-9의 OLED 소자와 비교예 1에서 제조된 종래의 발광 화합물을 함유하는 OLED 소자의 구동전압 및 전력효율을 1,000 cd/m²에서 측정하여 하기 표 2에 나타내었다.

본 발명에서 개발한 전기 발광 화합물들의 발광 특성들이 나타난 하기의 표 2로부터, 본 발명에서 개발한 전기 발광 화합물들이 성능 측면에서 종래의 재료 대비 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있다.

[丑 2]

	호스트 재료	도판트	구동전압(V) @1,000 cd/m ²	전력효율(lm/W) @1,000 cd/m ²	발광색
실시예1	1	(piq) ₂ lr(acac)	4.6	4.9	적색
실시예2	5	(piq) ₂ lr(acac)	4.5	5.3	적색
실시예3	31	(piq) ₂ lr(acac)	4.4	6.5	적색
실시예4	48	(piq) ₂ lr(acac)	4.8	4.7	적색
실시예5	77	(piq) ₂ lr(acac)	5.0	4.5	적색
실시예6	189	(piq) ₂ lr(acac)	5.1	5.8	적색
실시예7	193	(piq) ₂ lr(acac)	4.7	6.2	적색
실시예8	201	(piq) ₂ lr(acac)	4.5	6.3	적색
실시예9	203	(piq) ₂ lr(acac)	4.9	4.8	적색
비교예1	BAIq	(piq) ₂ lr(acac)	7.5	2.6	적색

상기 표 2로부터 본 발명에서 개발한 착물들의 발광 특성이 종래의 재료 대비 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있다. 종래의 재료인 비교예 1의 소자에 비해 우수한 전류특성을 가져 2V 이상 낮아진 구동전압을 나타냈으며, 우수한 발광특성으로 인해 비교예 1의 소자에 비해 2.6배 이상의 월등히 높은 전력효율 특성을 나타냈다. 특히, 실시예 3의 경우 비교예1의 소자에 비해 3.1V 낮은 전압에서 구동 되었으며, 실시예 8의 소자의 경우 4.5V의 구동전압 및 1000 cd/m²에서 6.3 lm/W의 전력효율을 나타내었다.

따라서, 본 발명에 따른 전기 발광 화합물을 호스트 재료로 사용한 소자는 발광특성이 뛰어나며, 또한 구동전압을 강하시켜줌으로써 1.9~3.9 lm/W의 전력효율의 상승을 유도하여 소비전력을 개선시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

도 1 -OLED 소자의 단면도

<도면 부호에 대한 부호의 설명>

1 - 클래스 2 - 투명전극

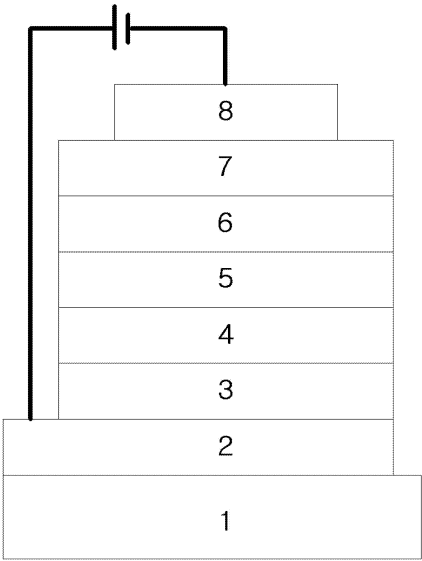
3 - 정공주입층 4 - 정공전달층

5 - 발광층

7 - 전자주입층 8 - Al 음극

도면

도면1



专利名称(译)	用于电致发光的有机金属化合物和使用它作为发光材料的电致发光器件		
公开(公告)号	KR100901888B1	公开(公告)日	2009-06-09
申请号	KR1020080112855	申请日	2008-11-13
申请(专利权)人(译)	宇预支給显示器材料有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	宇预支給显示器材料有限公司		
[标]发明人	KIM HYUN 김현 KWON HYUCK JOO 권혁주 KIM BONG OK 김봉옥 KIM SUNG MIN 김성민 YOON SEUNG SOO 윤승수		
发明人	김현 권혁주 김봉옥 김성민 윤승수		
IPC分类号	C09K11/06		
CPC分类号	C07F7/0814 C07F5/027 H05B33/14 H01L51/0092 C09K2211/18 C07D221/08 C07D215/26 C09K11/06 Y02E10/549 H01L51/5016		
代理人(译)	昌熙园		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

提供一种用于电致发光的有机金属化合物，以获得与常规主体材料相比具有优异的红光发射效率的OLED，优异的铆接耐久性和寿命特性。用于电致发光的有机金属化合物具有由化学式1表示的结构。在化学式1中，M是二价或三价金属；n是M的阳离子价；R₁-R₈各自独立地为氢，(C₁-C₃₀)烷基，卤素，氰基，(C₃-C₃₀)环烷基，5或6元杂环烷基，包括选自N，O和S中的至少一种。

