



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호

10-2014-0079306

(43) 공개일자

2014년06월26일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01)

C07D 495/04 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

(21) 출원번호

10-2013-0156404

(22) 출원일자

2013년12월16일

심사청구일자

없음

(30) 우선권주장

1020120148582

2012년12월18일

대한민국(KR)

(71) 출원인

에스에프씨 주식회사

충청북도 청원군 오창읍 과학산업5로 89

(72) 발명자

박지희

경상남도 창원시 진해구 태백서로45번길 3 101동 805호 (태백동, 원창시인의마을)

심소영

대전 동구 대전로 646, 106동 1302호 (효동, 효동현대아파트)

유세진

경북 경산시 백자로10길 57, 109동 1105호 (사동, 사동휴먼시아1단지)

(74) 대리인

특허법인충현

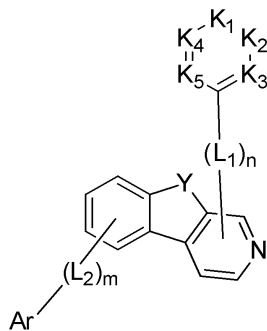
전체 청구항 수 : 총 12 항

(54) 발명의 명칭 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

(57) 요약

본 발명은 하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 발광 효율 및 재료의 수명 특성이 우수하여 발광효율이 우수하면서 동시에 전력효율 및 장수명 특성을 갖는 유기전계발광소자를 제조할 수 있다.

[화학식 1]



대표도 - 도1

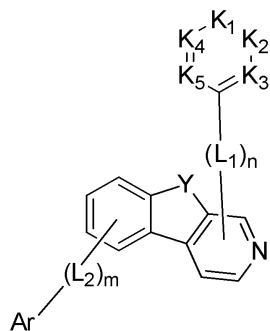
80
70
60
50
40
30
20
10

특허청구의 범위

청구항 1

하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물:

[화학식 1]



상기 [화학식 1]에서,

K₁ 내지 K₅는 각각 독립적으로 CR₁ 또는 N이고, 상기 R₁이 복수 개인 경우 서로 동일하거나 상이하며, 인접하는 R₁은 서로 연결되어 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고,

Y는 NR₂, S, O, P(=O)(R₃), SiR₄R₅, PR₆ 및 CR₇R₈ 중에서 선택되는 어느 하나이며,

L₁ 및 L₂는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 화학결합이거나, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬렌, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐렌, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알킬렌, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬렌, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하고 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로시클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴렌 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴렌으로 이루어진 군으로부터 선택되며, 상기 n 및 m은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

Ar은 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기 중에서 선택되며,

상기 R₁ 내지 R₈은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 히드록실기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기 중에서 선택되고,

상기 L₁ 및 L₂, R₁ 내지 R₈ 및 Ar은 서로 또는 인접한 치환기와 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 L₁ 및 L₂, Ar 및 R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 1종 이상의 치환기로 더 치환되고, 상기 1종 이상의 치환기는 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠기, 니트로기, 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 탄소수 1 내지 30의 아릴아미노기, 탄소수

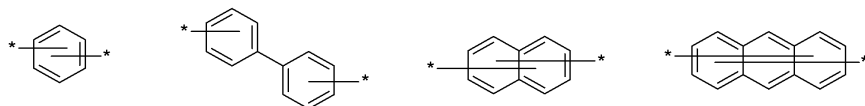
1 내지 30의 알콕시기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기 및 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 중에서 선택되는 것을 특징으로 하며,

상기 L_1 및 L_2 , R_1 내지 R_8 , Ar 및 이들의 치환기는 각각 서로 또는 인접한 치환기와 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

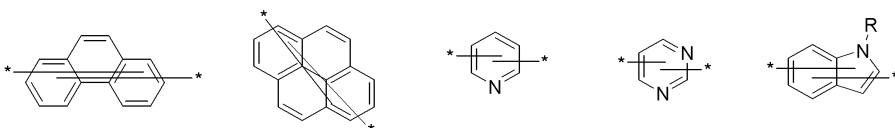
청구항 3

제1항에 있어서,

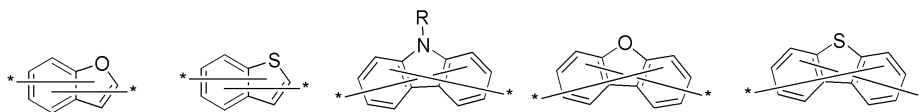
상기 L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 하기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C14] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:



[구조식 C1] [구조식 C2] [구조식 C3] [구조식 C4]



[구조식 C5] [구조식 C6] [구조식 C7] [구조식 C8] [구조식 C9]



[구조식 C10] [구조식 C11] [구조식 C12] [구조식 C13] [구조식 C14]

상기 [구조식C1] 내지 [구조식 C14]에서,

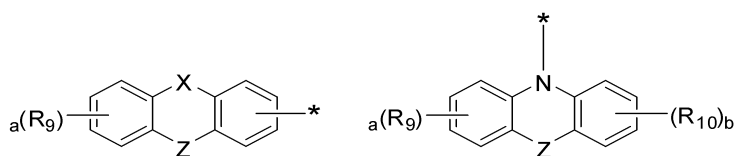
각 구조식 내 고리의 탄소자리에는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있으며, 상기 R은 상기 [화학식 1]에서의 R_1 내지 R_8 의 정의와 동일하다.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 Ar-*은 하기 [구조식 1]로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

[구조식 1]



상기 [구조식 1]에서,

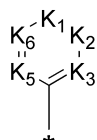
X 및 Z는 각각 독립적으로 NR_{11} , S, O, $P(=O)(R_{12})$, $SiR_{13}R_{14}$, PR_{15} 및 $CR_{16}R_{17}$ 중에서 선택되고,

상기 R_9 내지 R_{17} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 히드록실기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60

의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기 중에서 선택되고, 서로 또는 인접한 치환기와 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있으며, a 및 b는 0 내지 4의 정수이다.

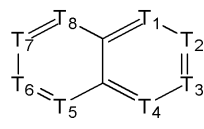
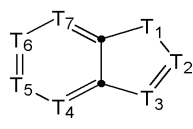
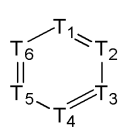
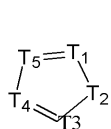
청구항 5

제1항에 있어서,



상기 L₁에 연결되는 * 은 하기 [구조식 1] 내지 [구조식 10] 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물:

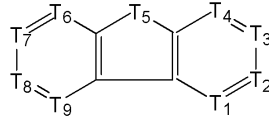
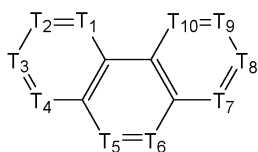
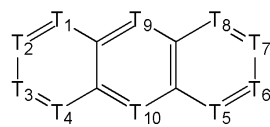
[구조식 1] [구조식 2] [구조식 3] [구조식 4]



[구조식 5]

[구조식 6]

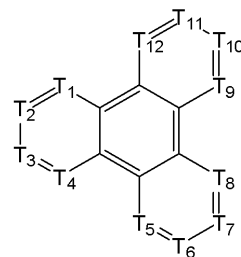
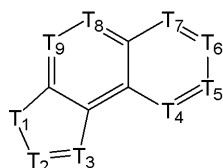
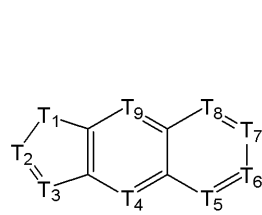
[구조식 7]



[구조식 8]

[구조식 9]

[구조식 10]



상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]에서,

T₁ 내지 T₁₂은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로, C(R₄₁), C(R₄₂)(R₄₃), N, N(R₄₄), O 및 S 중에서 선택되며,

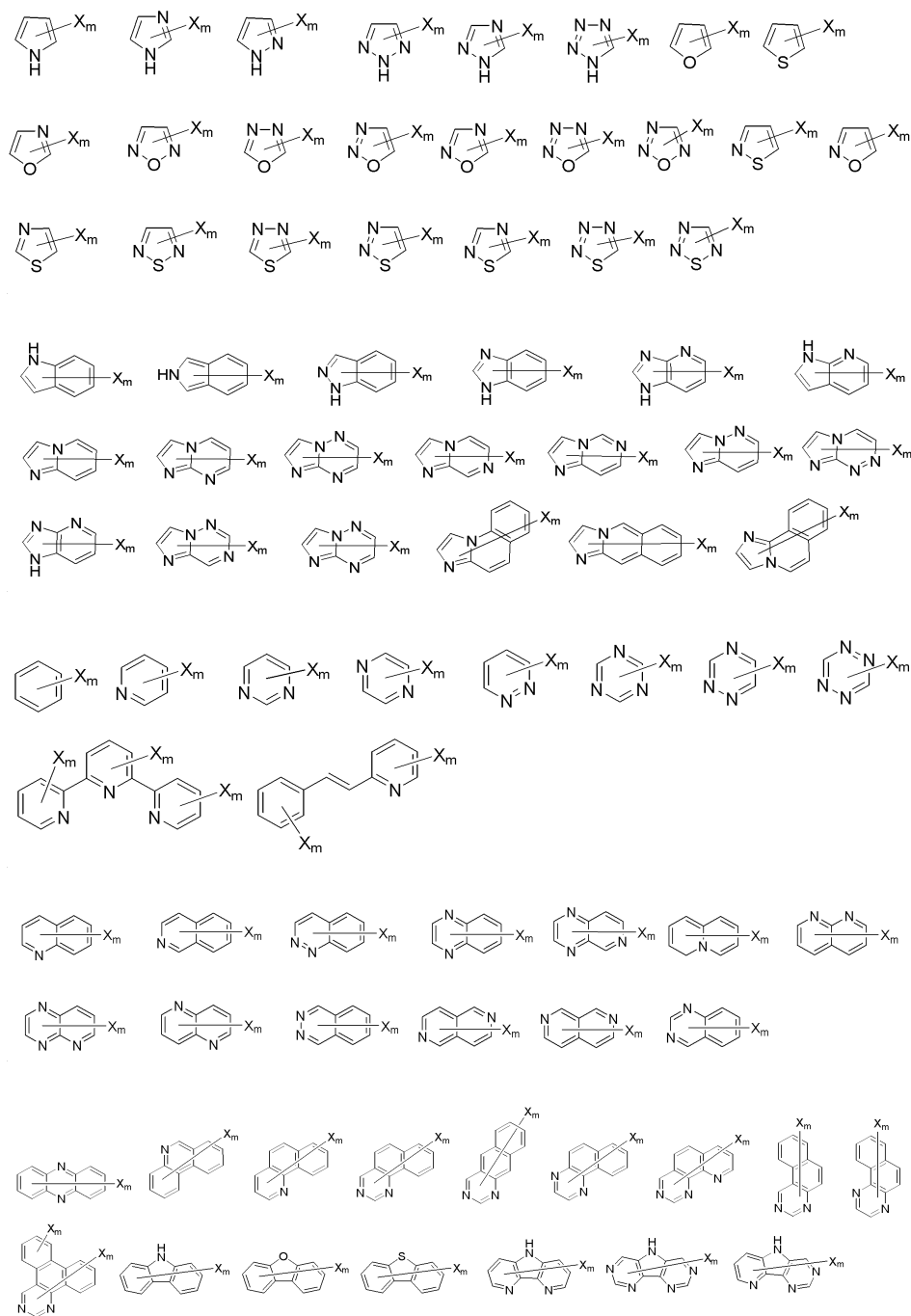
상기 R₄₁ 내지 R₄₄은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기 및 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택된다.

청구항 6

제5항에 있어서,

상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]은 하기 [구조식 11] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물:

[구조식 11]



상기 [구조식 11]에서,

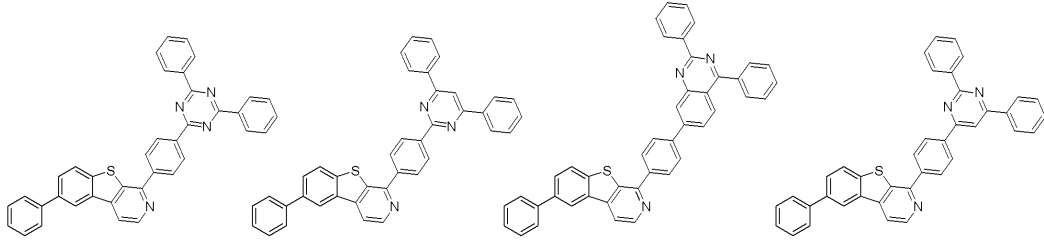
X는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 시아노기, 니트로기 및 할로젠기로 중에서 선택되고,

m 은 1 내지 11의 정수이며, m이 2 이상인 경우 복수 개의 X는 서로 동일하거나 상이하다.

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 [화학식 1]은 하기 [화학식 2] 내지 [화학식 185]로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

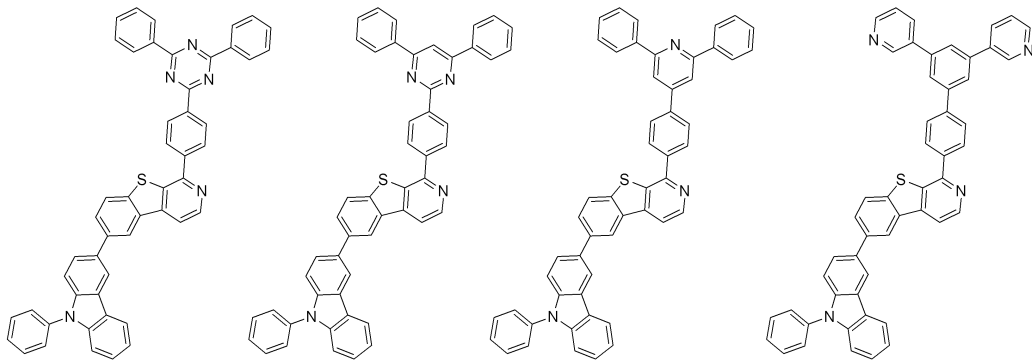


[화학식2]

[화학식3]

[화학식4]

[화학식5]

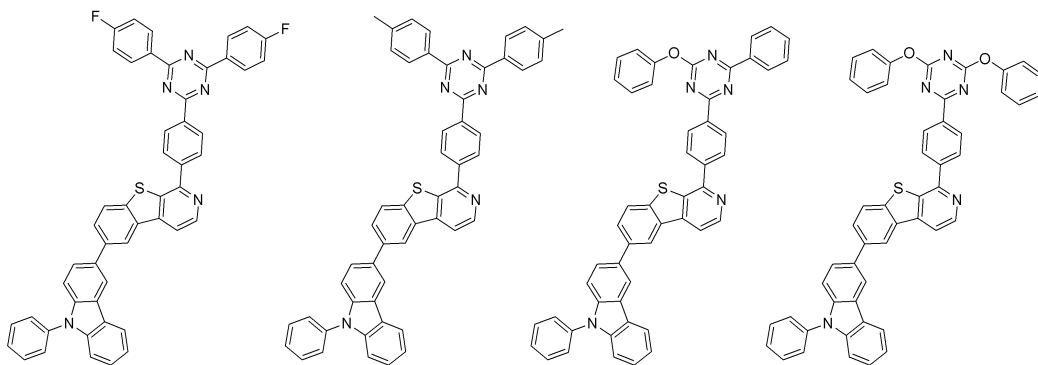


[화학식6]

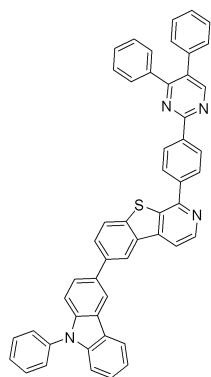
[화학식7]

[화학식8]

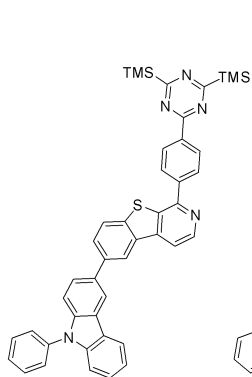
[화학식9]



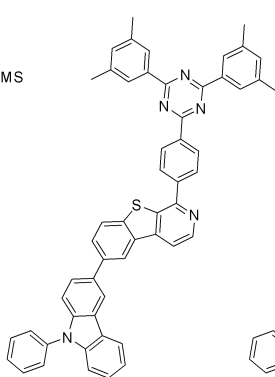
[화학식10]



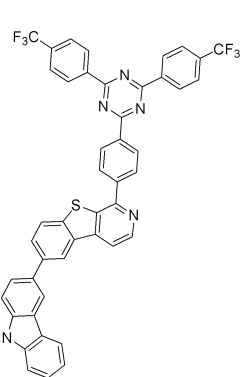
[화학식11]



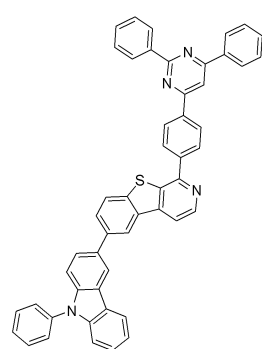
[화학식12]



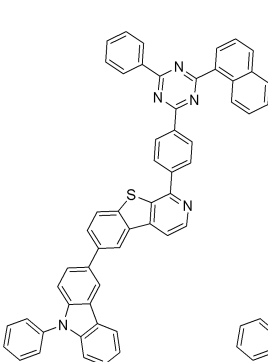
[화학식13]



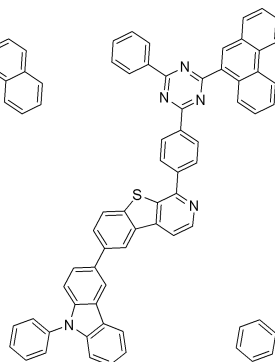
[화학식14]



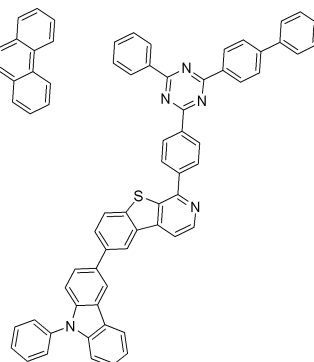
[화학식15]



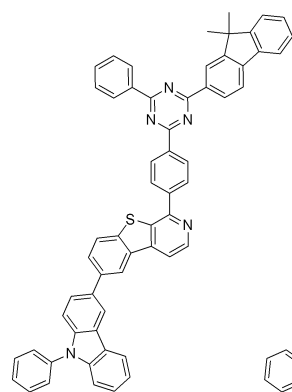
[화학식16]



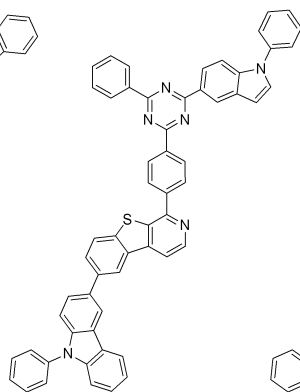
[화학식17]



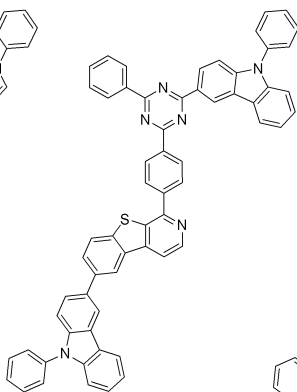
[화학식18]



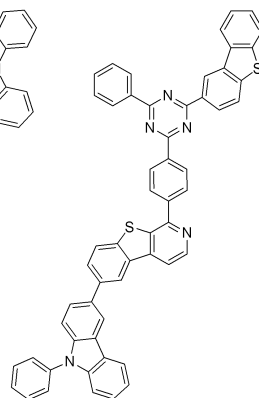
[화학식19]



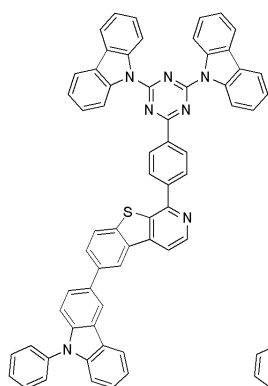
[화학식20]



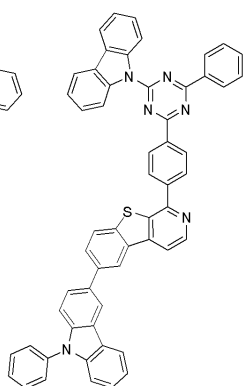
[화학식21]



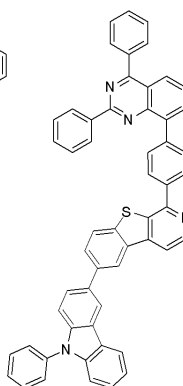
[화학식22]



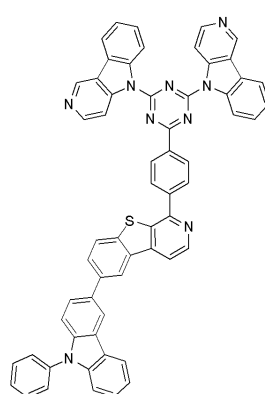
[화학식23]



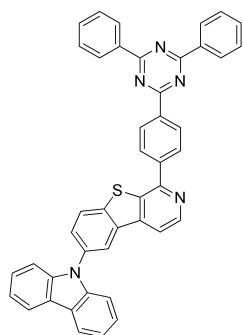
[화학식24]



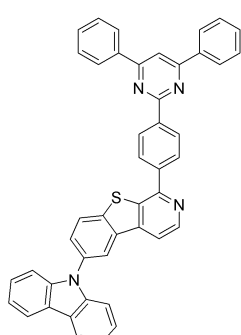
[화학식25]



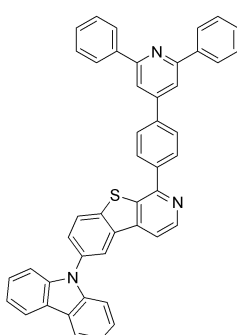
[화학식26]



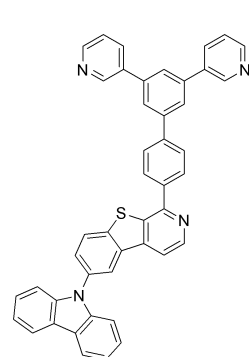
[화학식27]



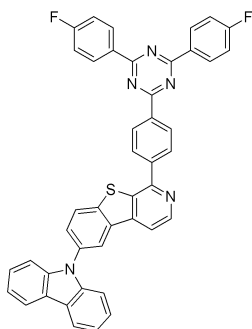
[화학식28]



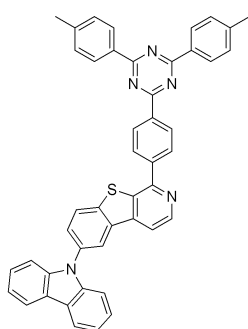
[화학식29]



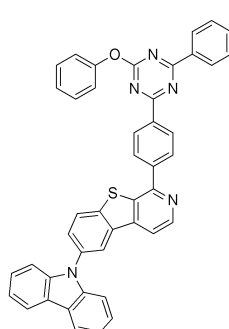
[화학식30]



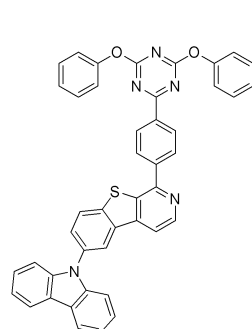
[화학식31]



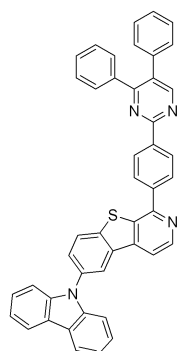
[화학식32]



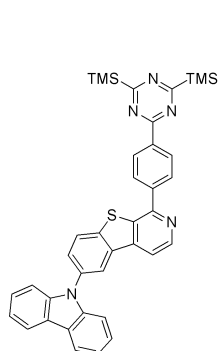
[화학식33]



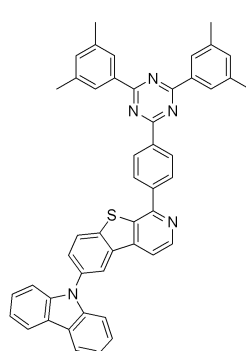
[화학식34]



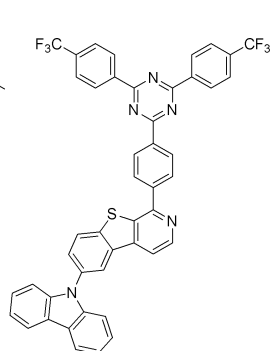
[화학식35]



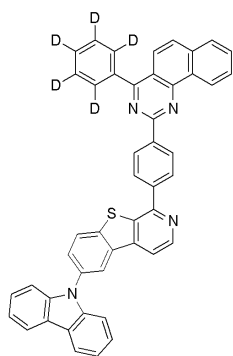
[화학식36]



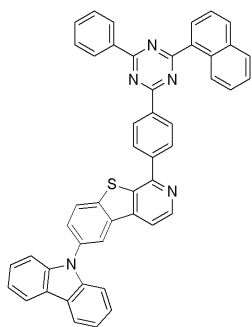
[화학식37]



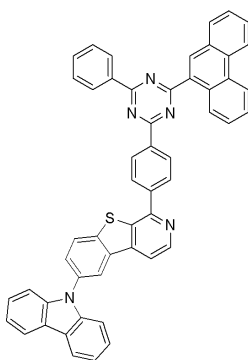
[화학식38]



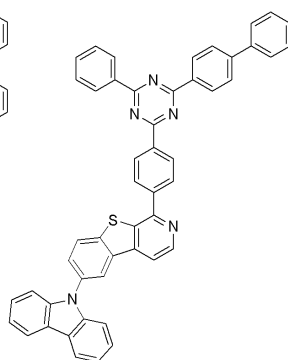
[화학식39]



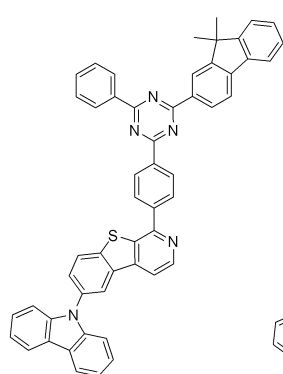
[화학식40]



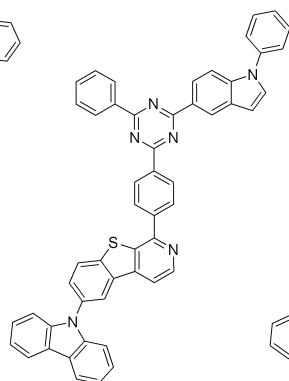
[화학식41]



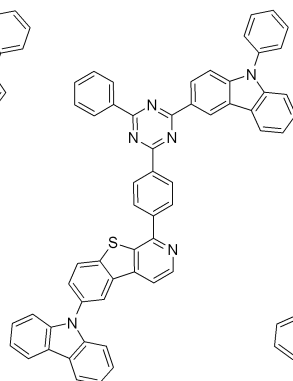
[화학식42]



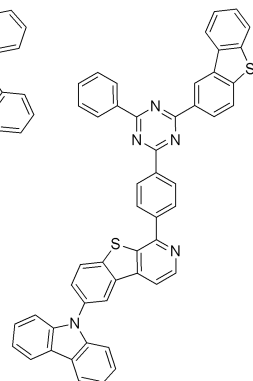
[화학식43]



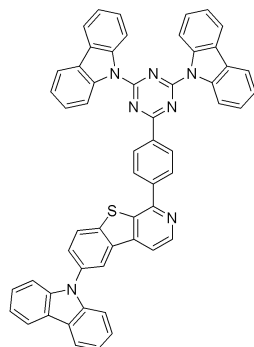
[화학식44]



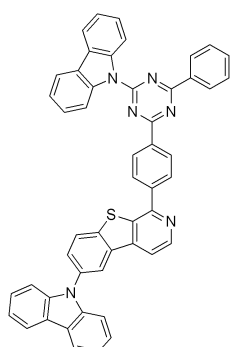
[화학식45]



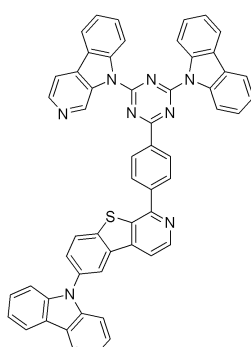
[화학식46]



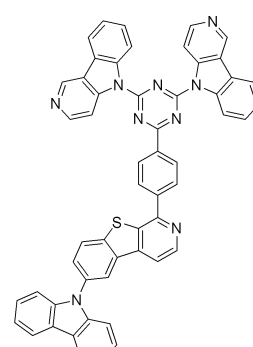
[화학식47]



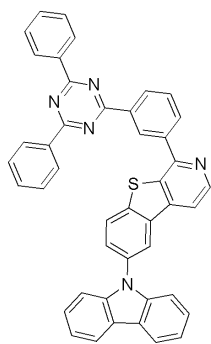
[화학식48]



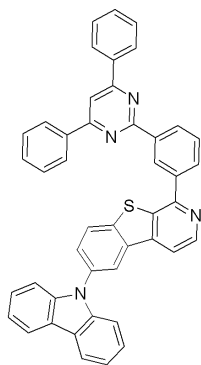
[화학식49]



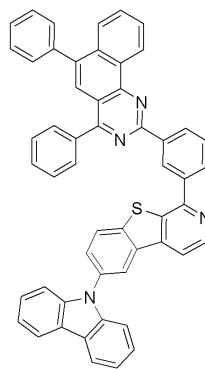
[화학식50]



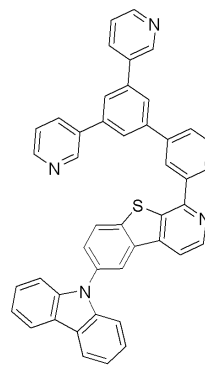
[화학식51]



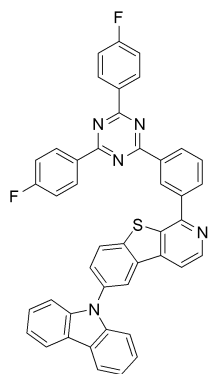
[화학식52]



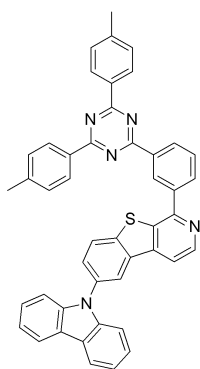
[화학식53]



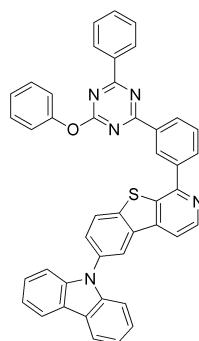
[화학식54]



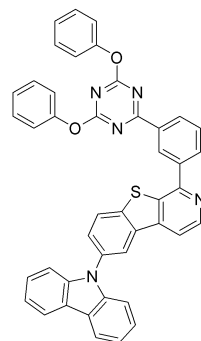
[화학식55]



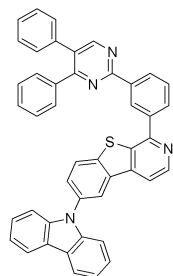
[화학식56]



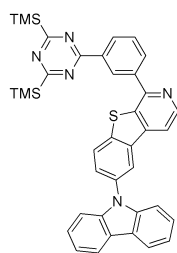
[화학식57]



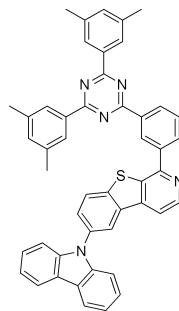
[화학식58]



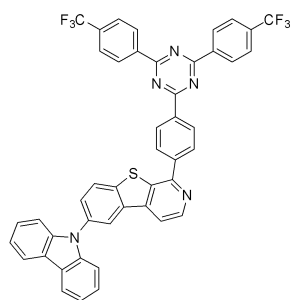
[화학식59]



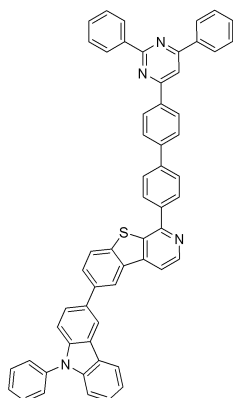
[화학식60]



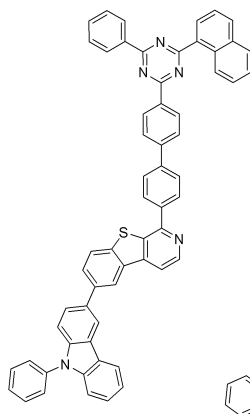
[화학식61]



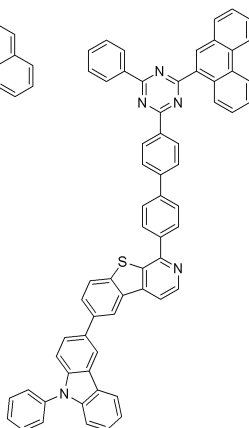
[화학식62]



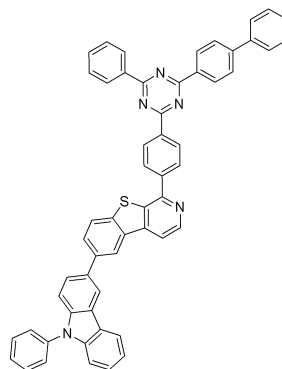
[화학식63]



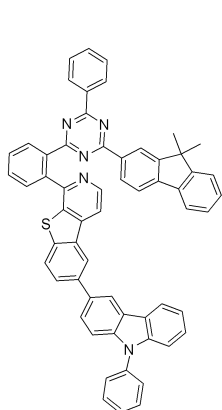
[화학식64]



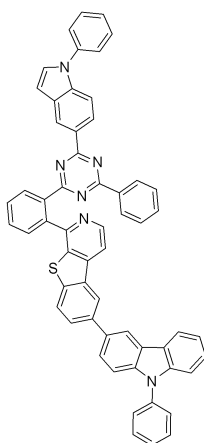
[화학식65]



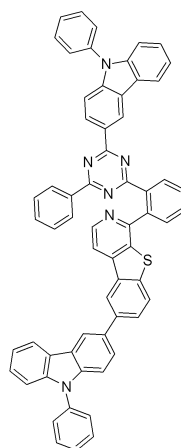
[화학식66]



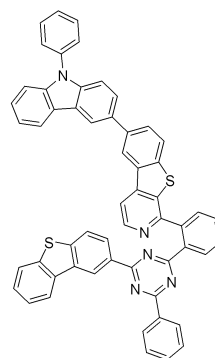
[화학식67]



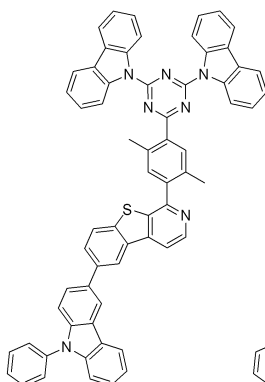
[화학식68]



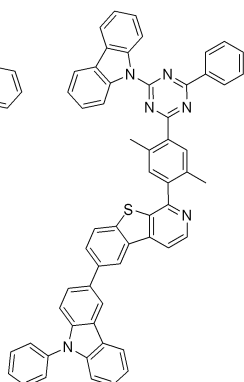
[화학식69]



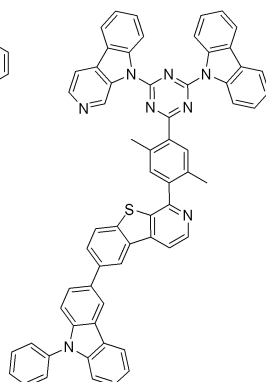
[화학식70]



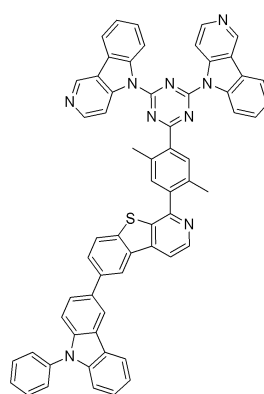
[화학식71]



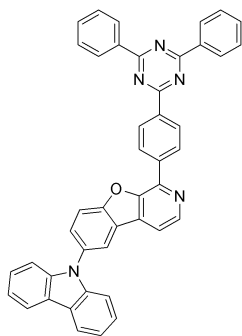
[화학식72]



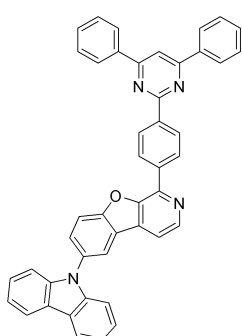
[화학식73]



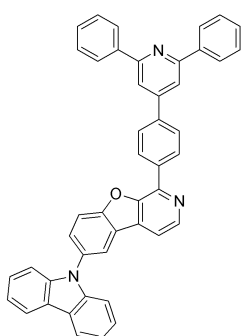
[화학식74]



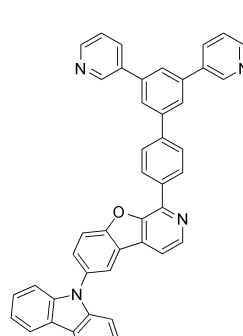
[화학식75]



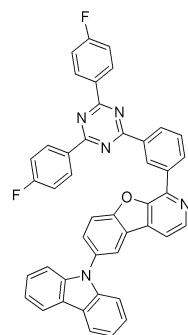
[화학식76]



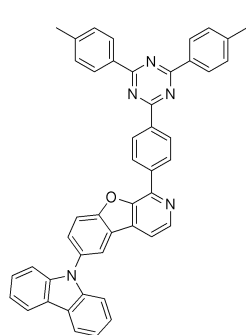
[화학식77]



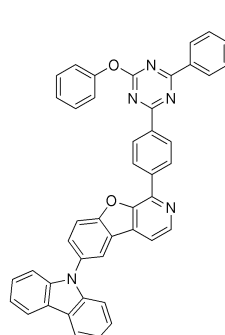
[화학식78]



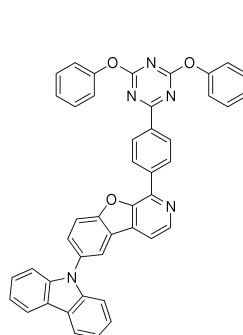
[화학식79]



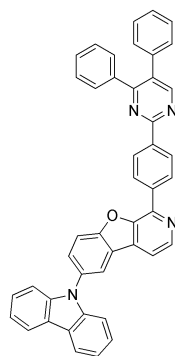
[화학식80]



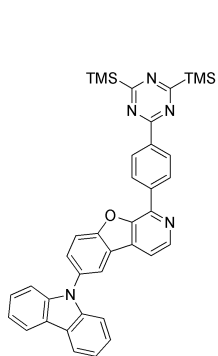
[화학식81]



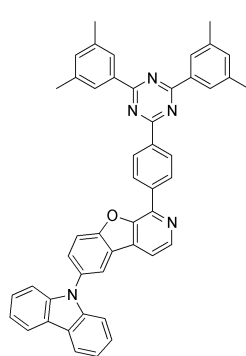
[화학식82]



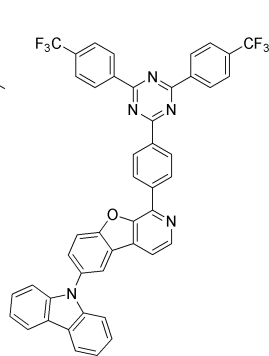
[화학식83]



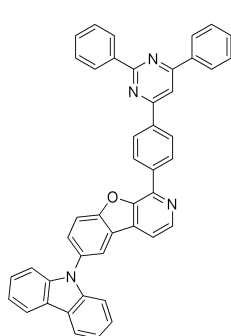
[화학식84]



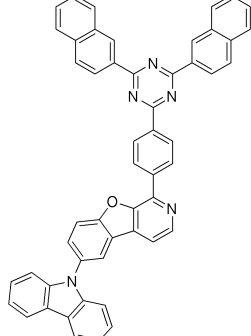
[화학식85]



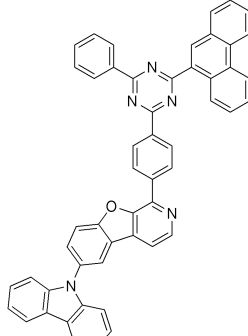
[화학식86]



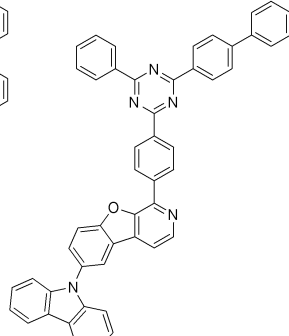
[화학식87]



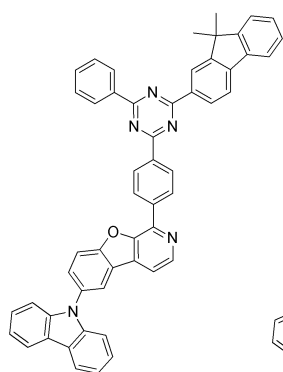
[화학식88]



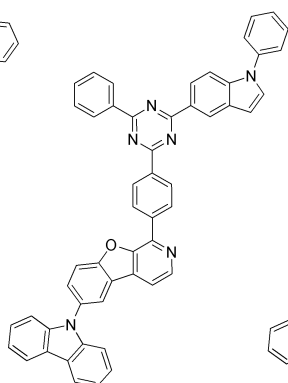
[화학식89]



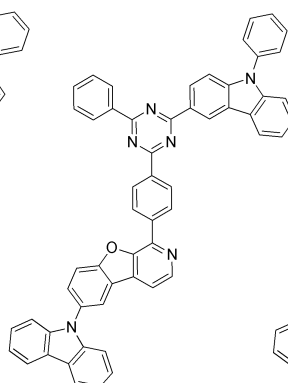
[화학식90]



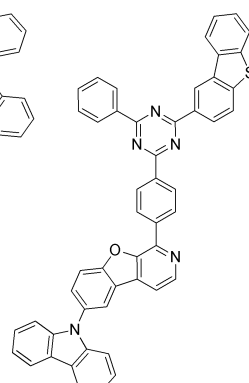
[화학식91]



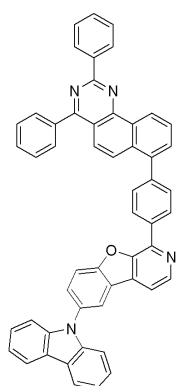
[화학식92]



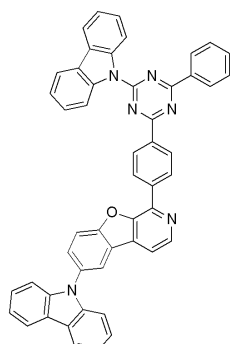
[화학식93]



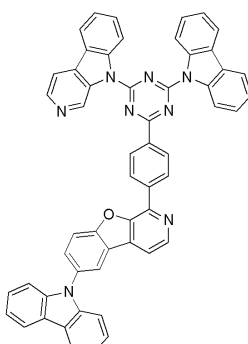
[화학식94]



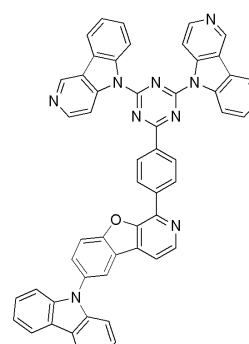
[화학식95]



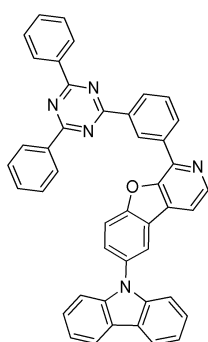
[화학식96]



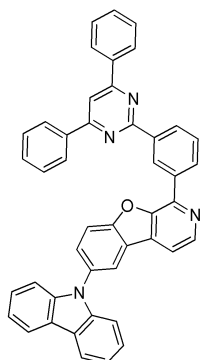
[화학식97]



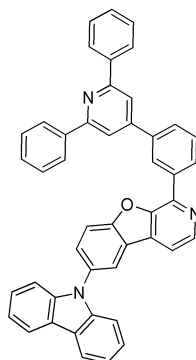
[화학식98]



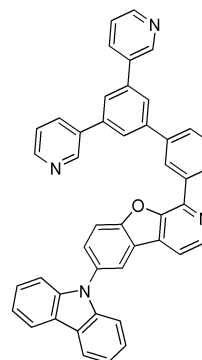
[화학식99]



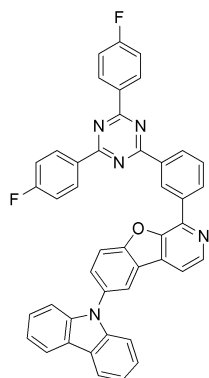
[화학식100]



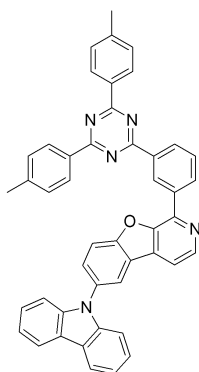
[화학식101]



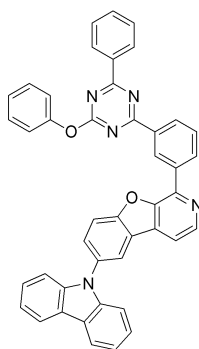
[화학식102]



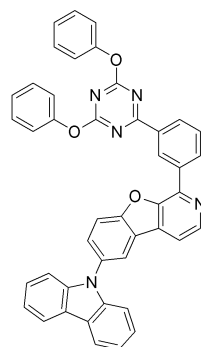
[화학식103]



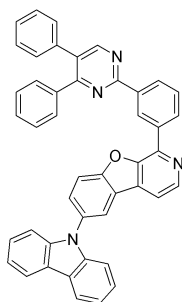
[화학식104]



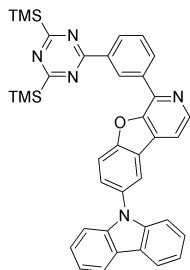
[화학식105]



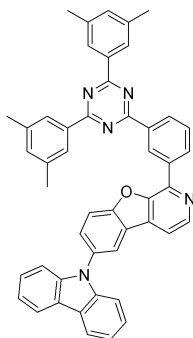
[화학식106]



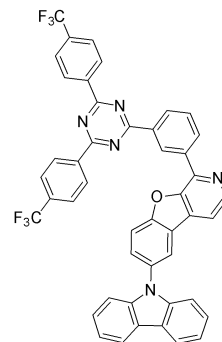
[화학식107]



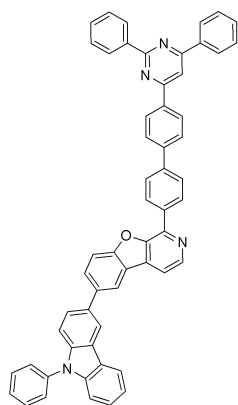
[화학식108]



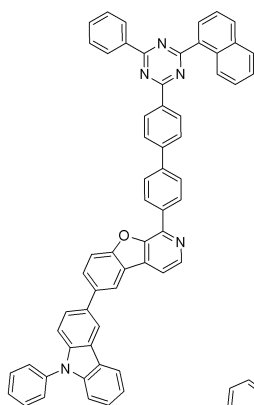
[화학식109]



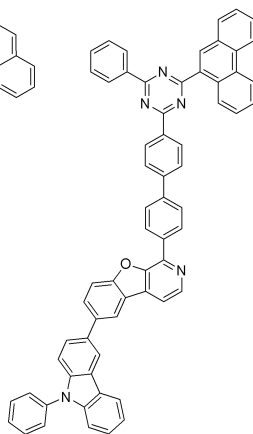
[화학식110]



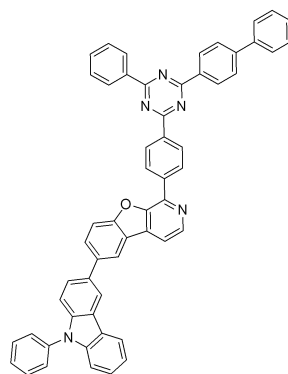
[화학식111]



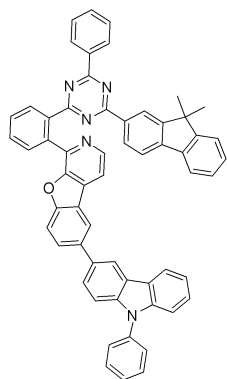
[화학식112]



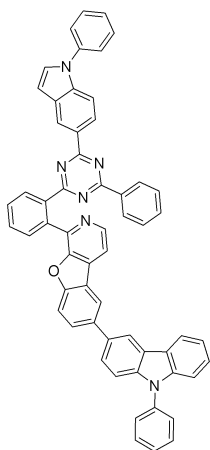
[화학식113]



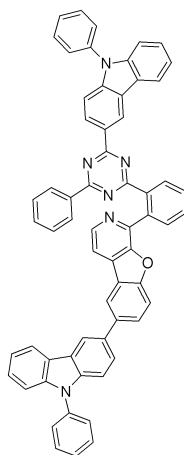
[화학식114]



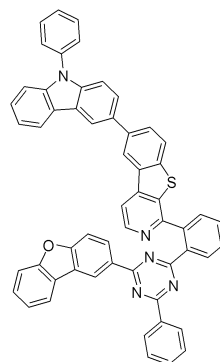
[화학식115]



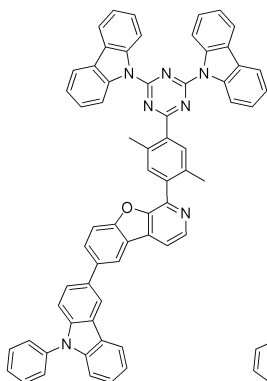
[화학식116]



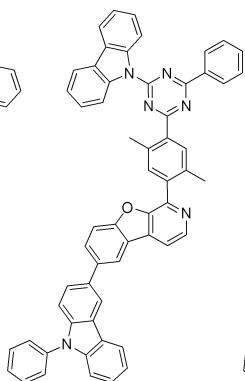
[화학식117]



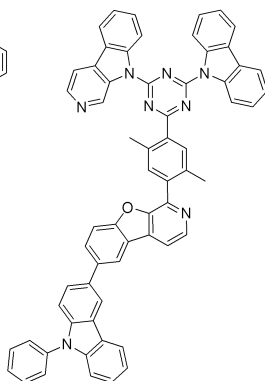
[화학식118]



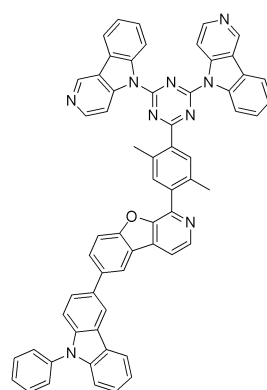
[화학식119]



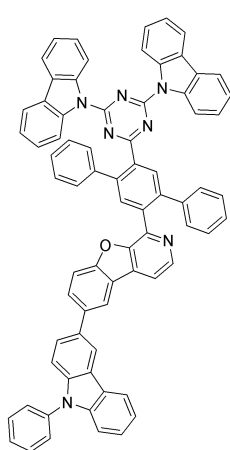
[화학식120]



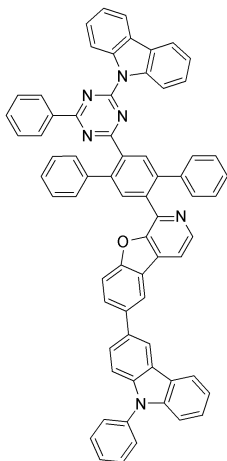
[화학식121]



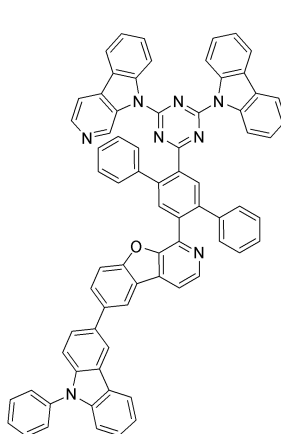
[화학식122]



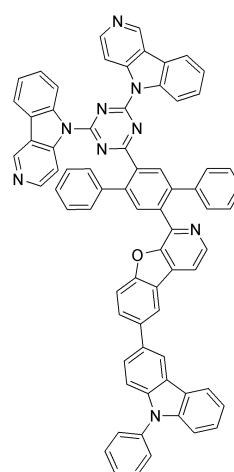
[화학식123]



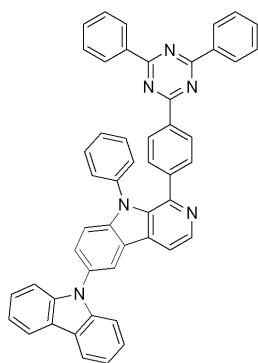
[화학식124]



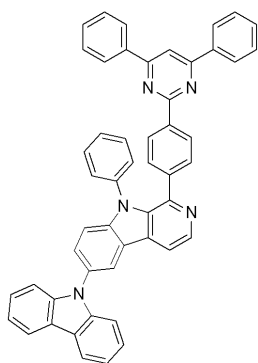
[화학식125]



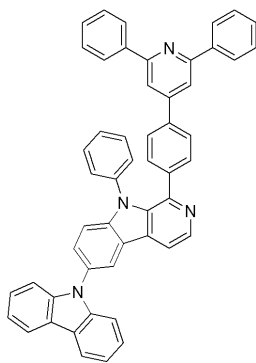
[화학식126]



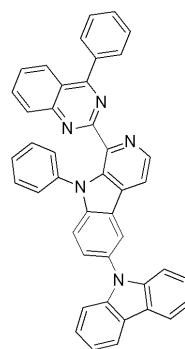
[화학식127]



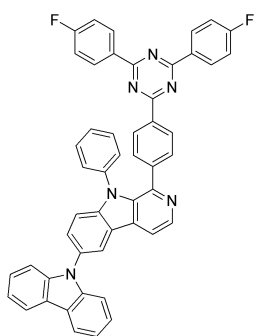
[화학식128]



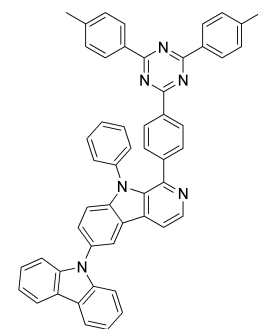
[화학식129]



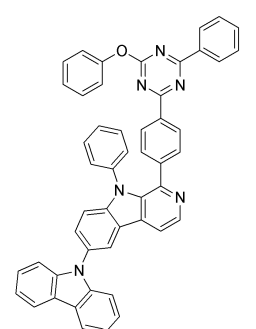
[화학식130]



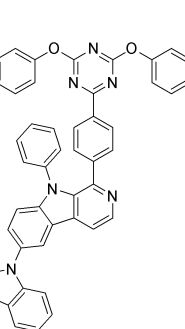
[화학식131]



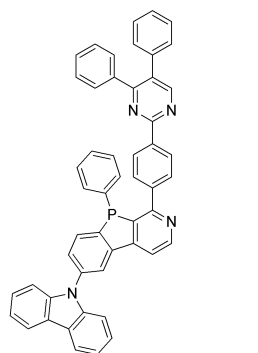
[화학식132]



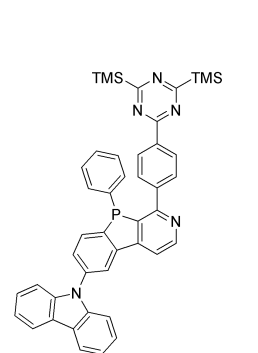
[화학식133]



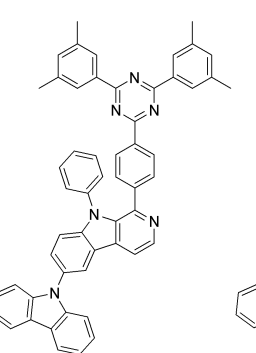
[화학식134]



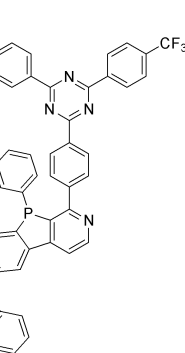
[화학식135]



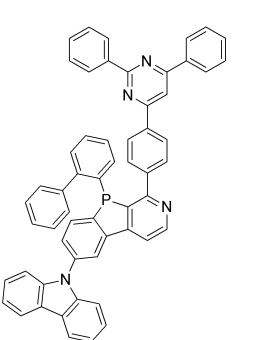
[화학식136]



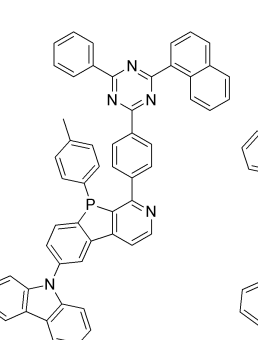
[화학식137]



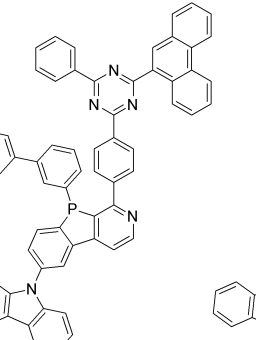
[화학식138]



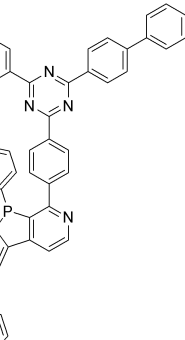
[화학식139]



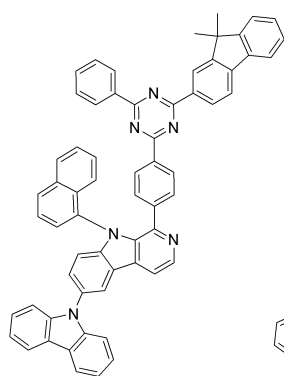
[화학식140]



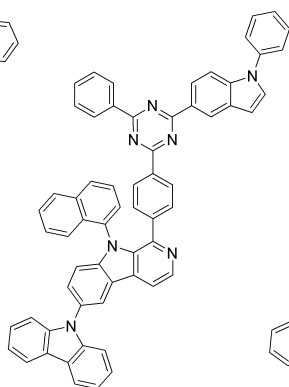
[화학식141]



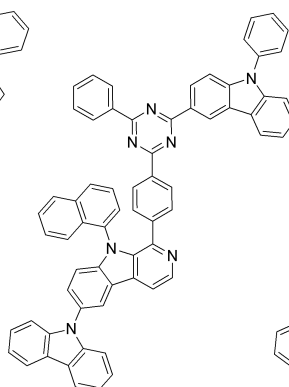
[화학식142]



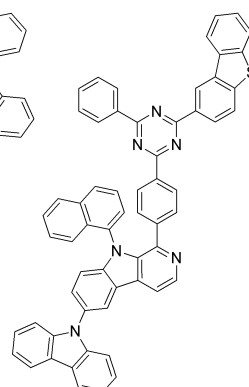
[화학식143]



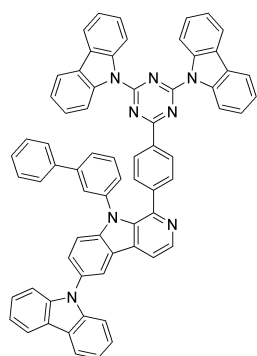
[화학식144]



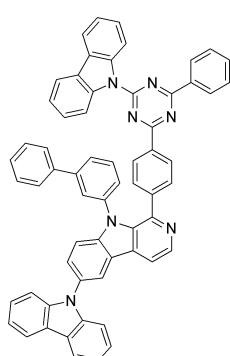
[화학식145]



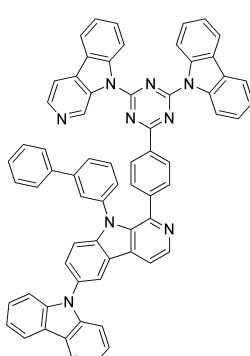
[화학식146]



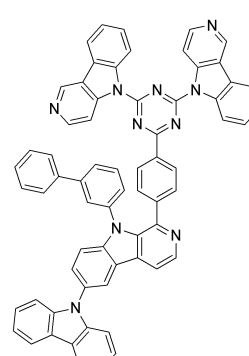
[화학식147]



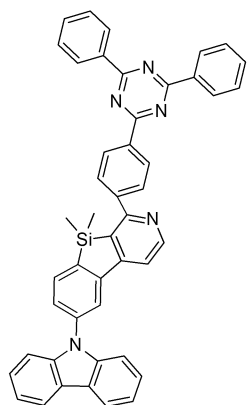
[화학식148]



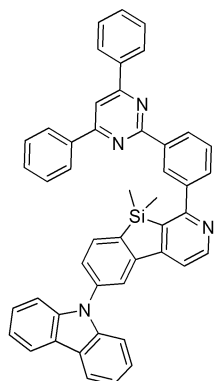
[화학식149]



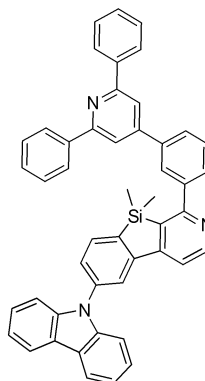
[화학식150]



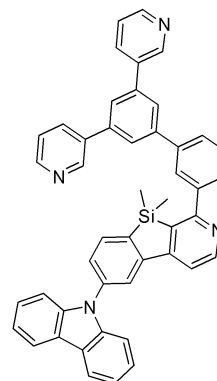
[화학식151]



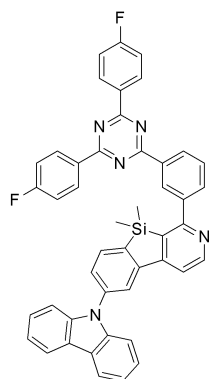
[화학식152]



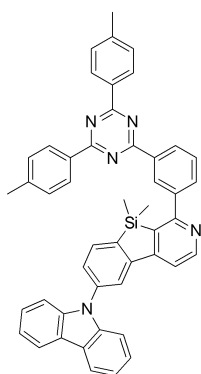
[화학식153]



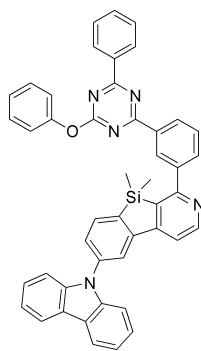
[화학식154]



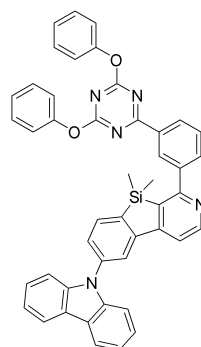
[화학식155]



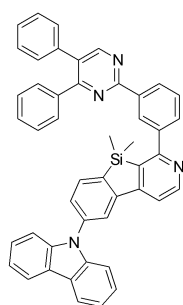
[화학식156]



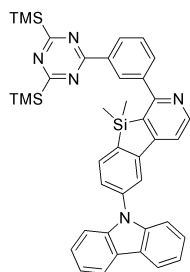
[화학식157]



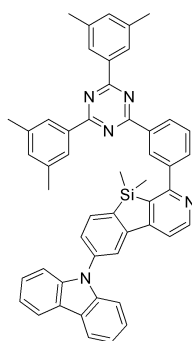
[화학식158]



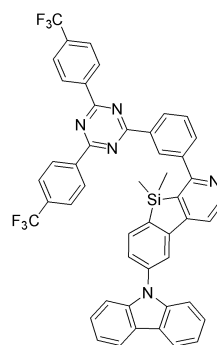
[화학식159]



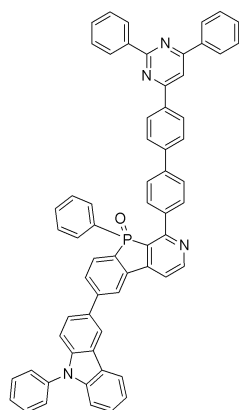
[화학식160]



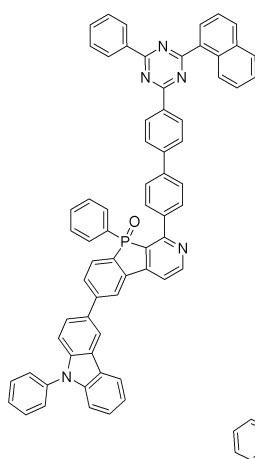
[화학식161]



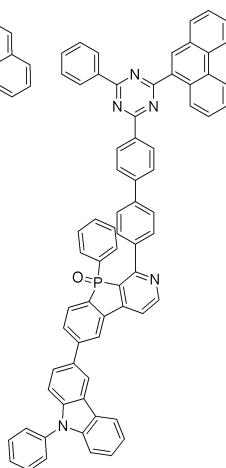
[화학식162]



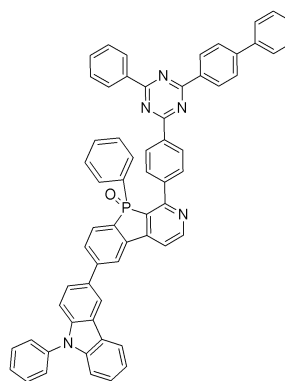
[화학식163]



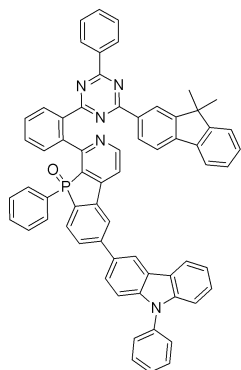
[화학식164]



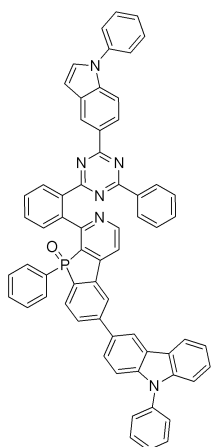
[화학식165]



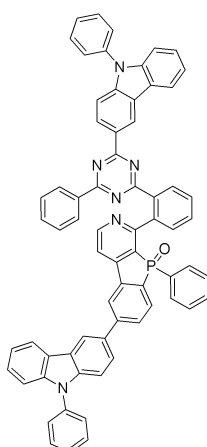
[화학식166]



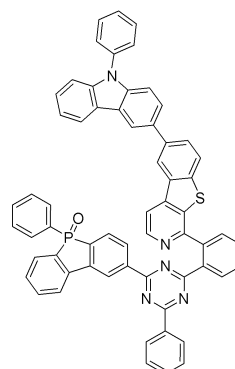
[화학식167]



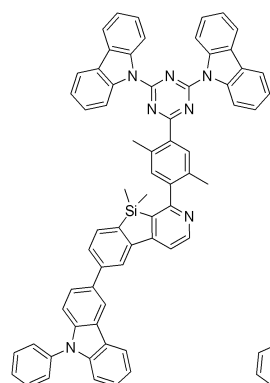
[화학식168]



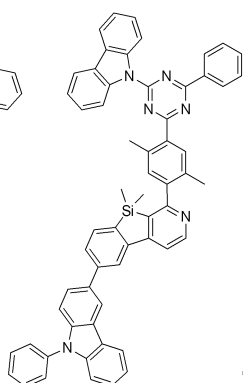
[화학식169]



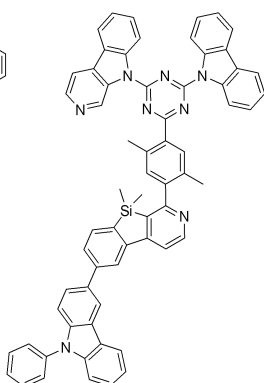
[화학식170]



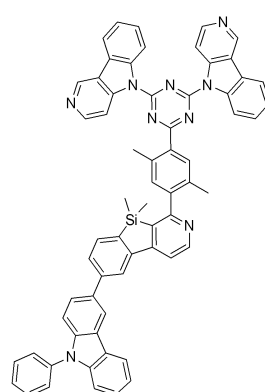
[화학식171]



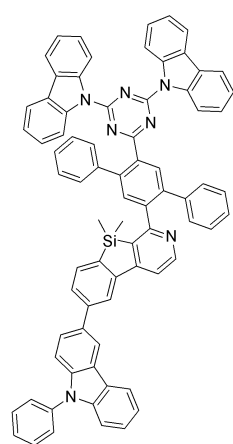
[화학식172]



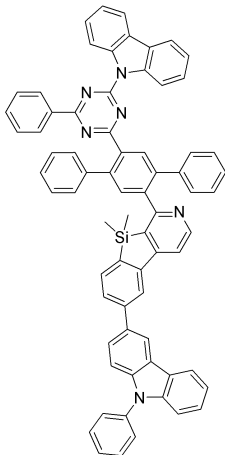
[화학식173]



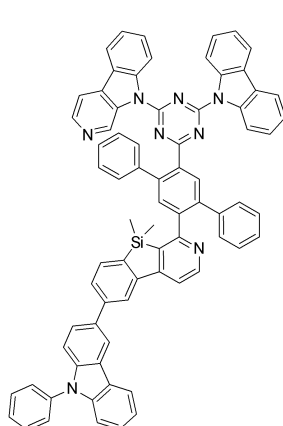
[화학식174]



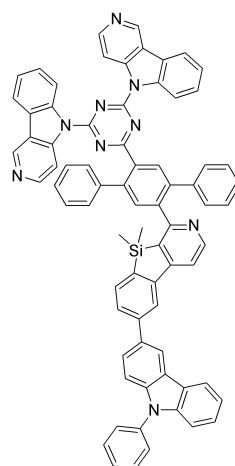
[화학식175]



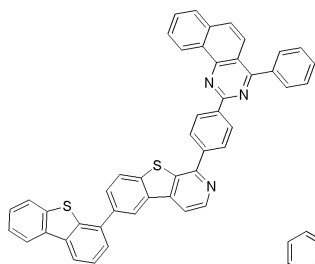
[화학식176]



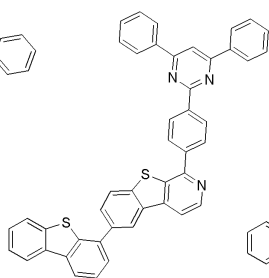
[화학식177]



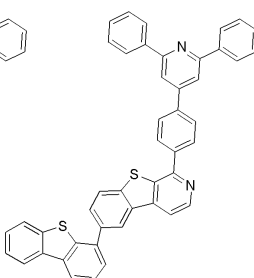
[화학식178]



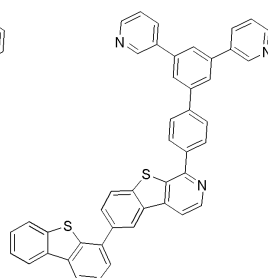
[화학식179]



[화학식180]



[화학식181]



[화학식182]

[화학식183]

[화학식184]

[화학식185]

청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 최소한 1개 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자용 유기 박막층.

청구항 9

제8항에 있어서,

상기 유기 박막층은 상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 호스트로하고, 도펀트 화합물을 최소한 1개 이상 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기박막층.

청구항 10

애노드; 상기 애노드에 대향되는 캐소드; 및 상기 애노드 및 캐소드 사이에 개재되는 제8항에 따른 유기 박막층;을 포함하는 유기전계발광소자.

청구항 11

제10항에 있어서,

상기 유기전계발광소자는 애노드와 캐소드 사이에 발광층, 정공주입층, 정공수송층, 정공저지층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자저지층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함하고,

상기 발광층, 정공주입층, 정공수송층, 정공저지층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자저지층 중의 하나가 제8항에 따른 유기 박막층인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 12

제11항에 있어서,

상기 유기전계발광소자는 청색, 적색 또는 녹색 발광을 하는 유기발광층을 하나 더 이상 포함하여 백색 발광을 하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경기술

[0002] 최근 자체 발광형으로 저전압 구동이 가능한 유기전계발광소자는 평판 표시 소자의 주류인 액정디스플레이에 비해, 시야각, 대조비 등이 우수하고 백라이트가 불필요하며 경량 및 박형이 가능하고 소비전력 측면에서도 유리하며 색 재현 범위가 넓어 차세대 표시소자로서 주목받고 있다.

[0003] 유기전계발광소자는 전자 주입 전극(음극)과 정공 주입 전극(양극) 사이에 형성된 유기 발광층에 전하를 주입하

면 전자와 정공이 쌍을 이룬 후 소멸하면서 빛을 내는 소자이다.

[0004] 유기전계발광소자는 플라스틱 같이 휘 수 있는 투명 기판 위에도 소자를 형성할 수 있을 뿐 아니라, 플라즈마 디스플레이 패널이나 무기전계 발광 디스플레이에 비해 10 V 이하의 낮은 전압에서 구동이 가능하고, 전력 소모가 비교적 적으며, 색감이 뛰어나다는 장점이 있다. 또한, 유기 전계발광소자는 녹색, 청색, 적색의 3 가지 색을 나타낼 수가 있어 차세대 풍부한 색 디스플레이 소자로 많은 관심의 대상이 되고 있다.

[0005] 유기전계발광소자에서 발광효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 발광 메커니즘 상 인광 재료의 개발이 이론적으로 발광 효율을 보다 개선시킬 수 있는 방법 중의 하나이고, 이에 따라 현재까지 다양한 인광 재료에 대해서 개발이 이루어지고 있으며, 특히 인광 발광 호스트 재료로는 현재까지 CBP가 가장 널리 알려져 있고, BALq 유도체를 호스트로 이용한 유기전계발광소자가 공지되어 있다.

[0006] 그러나, 인광 발광 재료를 사용한 유기전계발광소자는 형광 발광 재료를 사용한 소자에 비해 전류 효율이 상당히 높으나, 인광 발광 재료의 호스트로 BALq, CBP 등의 재료를 사용할 경우, 형광재료를 사용한 소자에 비해 구동 전압이 높아서 전력 효율면에서 큰 이점이 없고, 또한, 소자의 수명 측면에서도 만족할만한 수준이 되질 못하여 더욱 안정적이고, 고성능의 호스트 재료의 개발이 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

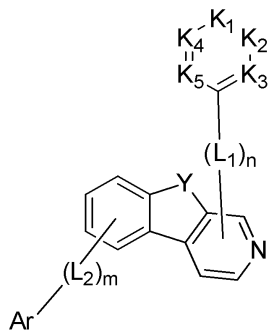
[0007] 따라서, 본 발명이 해결하고자 하는 과제는 상기 문제점을 해결하고자 하는 것으로서, 종래 재료보다 발광 효율이 우수하면서도 동시에 향상된 전력효율과 장수명 특성을 갖는 유기발광 화합물을 제공하는 것이다.

[0008] 또한, 본 발명은 상기 유기발광 화합물을 발광 재료로 채용하여 고효율 및 장수명의 유기전계발광소자를 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0009] 본 발명은 상기 과제를 해결하기 위하여, 하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 제공한다.

[0010] [화학식 1]



[0011] 각 치환기 또는 골격 원자에 대한 정의는 후술하기로 한다.

[0013] 또한, 본 발명은 상기 [화학식 1] 또는 [화학식 2]로 구현되는 유기전계 발광 화합물을 최소한 1개 이상 포함하는 유기전계발광소자용 유기 박막층 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.

발명의 효과

[0014] 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 발광 효율 및 재료의 수명 특성이 우수하여 발광효율이 우수하면서 동시에 전력효율 및 장수명 특성을 갖는 유기전계발광소자를 제조할 수 있다.

도면의 간단한 설명

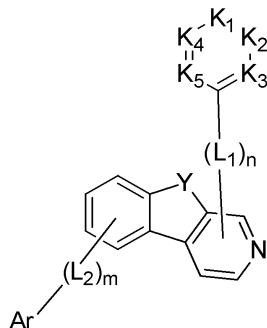
[0015] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 개략도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0016] 이하, 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다.

[0017] 본 발명의 일 측면은 하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물에 관한 것이다.

[0018] [화학식 1]



[0019]

[0020] 상기 [화학식 1]에서,

[0021] K_1 내지 K_5 는 각각 독립적으로 CR_1 또는 N이고, 상기 R_1 이 복수 개인 경우 서로 동일하거나 상이하며, 인접하는 R_1 은 서로 연결되어 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[0022] Y는 NR_2 , S, O, $P(=O)(R_3)$, SiR_4R_5 , PR_6 및 CR_7R_8 중에서 선택되는 어느 하나이다.

[0023] L_1 및 L_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 화학결합이거나, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬렌, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐렌, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알킬렌, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬렌, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하고 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로시클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴렌 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴렌으로 이루어진 군으로부터 선택되며, 상기 n 및 m은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이다.

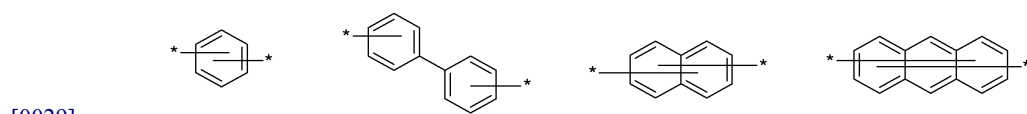
[0024] Ar은 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기 중에서 선택된다.

[0025] 상기 R_1 내지 R_8 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 히드록실기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기 중에서 선택되고, 상기 L_1 및 L_2 , R_1 내지 R_8 및 Ar은 서로 또는 인접한 치환기와 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

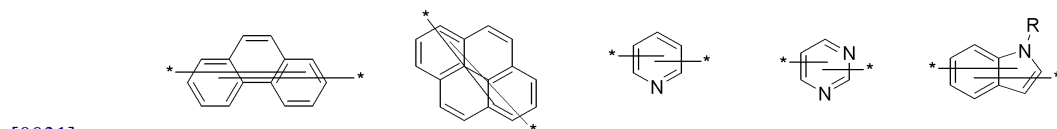
[0026] 상기 '치환 또는 비치환된'에서 '치환'은 상기 L_1 및 L_2 , Ar 및 R_1 내지 R_8 등이 각각 독립적으로 1종 이상의 치환기로 더 치환되는 것을 의미하고, 상기 1종 이상의 치환기는 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠기, 니트로기, 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 탄소수 1 내지 30의 아릴아미노기, 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기 및 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 중에서 선택될 수 있다. 또한, 상기 L_1 및 L_2 , R_1 내지 R_8 , Ar 및 이들의 치환기는 각각 서로 또는 인접한 치환기와 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[0027] 본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기 L_1 및 L_2 는 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬렌, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상을 포함하는 탄소수 2 내지 60의 헤테로시클로알킬렌, 탄소수 6 내지 50의 아릴렌 및 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴렌으로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있고, 보다 바람직하게는 상기 L_1 및 L_2 가 아릴렌기인 경우에는 페닐렌기, 바이페닐렌기, 터페닐렌기, 쿼터페닐렌기, 나프틸렌기, 안트라센일렌기, 페난트릴렌기, 크라이센일렌기, 피렌일렌기, 페틸렌일렌기, 플루오렌일렌기 등일 수 있으며, 더 바람직하게는 페닐렌기, 바이페닐렌기, 터페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트릴렌기 또는 플루오렌일렌기일 수 있다. 또한, 상기 L_1 및 L_2 가 헤테로아릴렌기인 경우에 피롤렌기, 퓨란일렌기, 싸이오페닐렌기, 실롤렌기, 피리딘일렌기, 이미다졸일렌기, 피리미딘일렌기, 카바졸일렌기, 셀레노페닐렌기, 옥사디아아졸일렌기, 트리아아졸일렌기 등일 수 있으며, 이러한 아릴렌기, 헤테로아릴렌기가 복수 개로 각각 동일하게 또는 상이하게 연결될 수 있다.

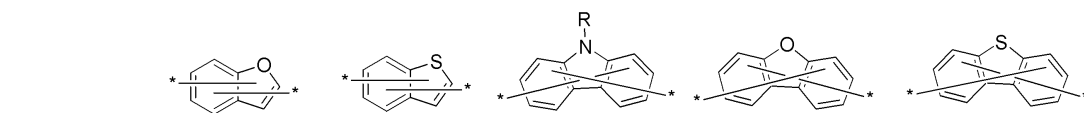
[0028] 또한, 본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기 L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 하기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C14] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.



[0030] [구조식 C1] [구조식 C2] [구조식 C3] [구조식 C4]



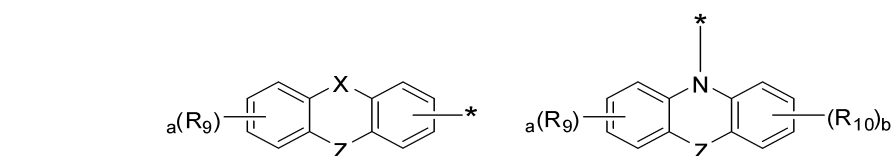
[0032] [구조식 C5] [구조식 C6] [구조식 C7] [구조식 C8] [구조식 C9]



[0034] [구조식 C10] [구조식 C11] [구조식 C12] [구조식 C13] [구조식 C14]

[0035] 상기 [구조식C1] 내지 [구조식 C14]에서, 각 구조식 내 고리의 탄소자리에는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있으며, 상기 R은 상기 [화학식 1]에서의 R_1 내지 R_8 의 정의와 동일하다.

[0036] 본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기 [화학식 1]에서의 상기 Ar-*은 하기 [구조식 1]로 표시되는 것일 수 있다.



[0038] 상기 [구조식 1]에서,

[0039] X 및 Z는 각각 독립적으로 NR_{11} , S, O, $P(=O)(R_{12})$, $SiR_{13}R_{14}$, PR_{15} 및 $CR_{16}R_{17}$ 중에서 선택된다.

[0040] 상기 R_9 내지 R_{17} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 히드록실기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60

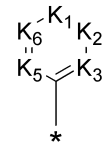
의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기 중에서 선택되고, 서로 또는 인접한 치환기와 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있으며, a 및 b는 0 내지 4의 정수이다.

[0041] 한편, 본 발명에 따른 유기발광 화합물에 포함된 아릴기는 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로서, 5 내지 7원, 바람직하게는 5 또는 6원을 포함하는 단일 또는 융합 고리계를 포함하며, 또한 상기 아릴기에 치환기가 있는 경우 이웃하는 치환기와 서로 융합 (fused)되어 고리를 추가로 형성할 수 있다.

[0042] 상기 아릴기의 구체적인 예로 페닐기, 2-메틸페닐기, 3-메틸페닐기, 4-메틸페닐기, 4-에틸페닐기, o-비페닐기, m-비페닐기, p-비페닐기, 4-메틸비페닐기, 4-에틸비페닐기, o-터페닐기, m-터페닐기, p-터페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-메틸나프틸기, 2-메틸나프틸기, 안트라닐기, 페난트라닐기, 피레닐기, 인데닐, 플루오렌틸기, 테트라히드로나프틸기, 피렌일, 페릴렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란텐일 등과 같은 방향족 그룹을 들 수 있다.

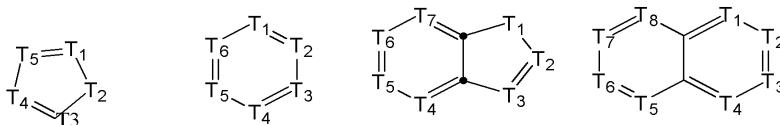
[0043] 상기 아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 실릴기, 아미노기 ($-NH_2$, $-NH(R)$, $-N(R')(R'')$, R'과 R''은 서로 독립적으로 탄소수 1 내지 10의 알킬기이며, 이 경우 "알킬아미노기"라 함), 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기, 술폰산기, 인산기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로젠화된 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알케닐기, 탄소수 1 내지 24의 알키닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴알킬기로 치환될 수 있다.

[0044] 한편, 본 발명에 따른 유기발광 화합물에 포함된 헤테로아릴기는 하기 [구조식 1] 내지 [구조식 10] 중에서 선택될 수 있고, 특히, 본 발명에 따른 [화학식 1]에서 상기 L_1 에 연결되는

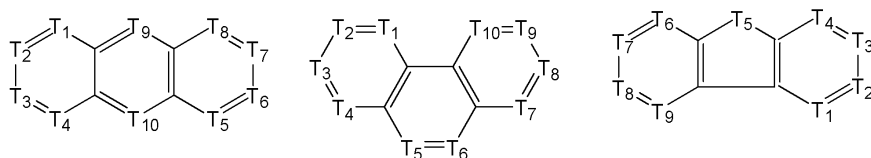


은 하기 [구조식 1] 내지 [구조식 10] 중에서 선택되는 것일 수 있다.

[0045] [구조식 1] [구조식 2] [구조식 3] [구조식 4]

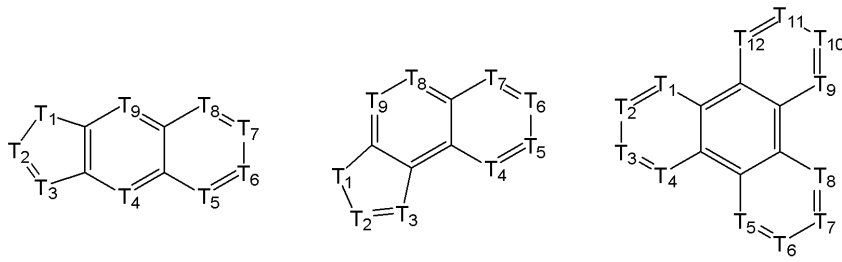


[0046] [구조식 5] [구조식 6] [구조식 7]



[0048]

[0049] [구조식 8] [구조식 9] [구조식 10]



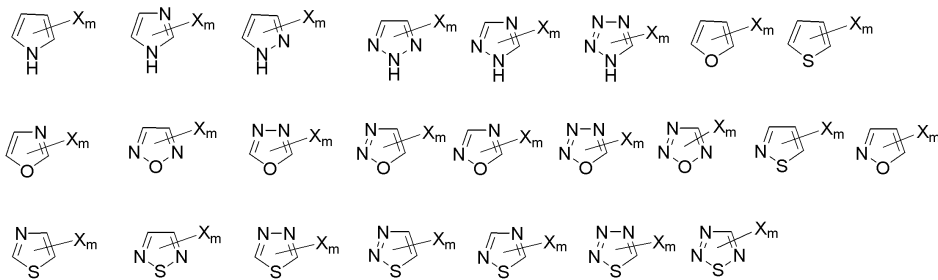
[0050]

[0051] 상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]에서,

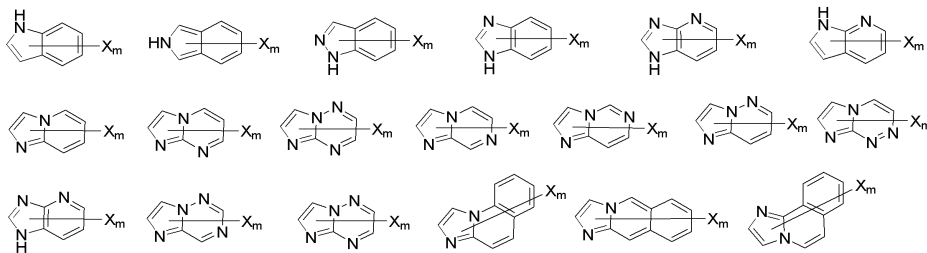
[0052] T₁ 내지 T₁₂은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로, C(R₄₁), C(R₄₂)(R₄₃), N, N(R₄₄), O 및 S 중에서 선택되며, 상기 R₄₁ 내지 R₄₄은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기 및 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택된다.

[0053] 본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]은 하기 [구조식 11] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

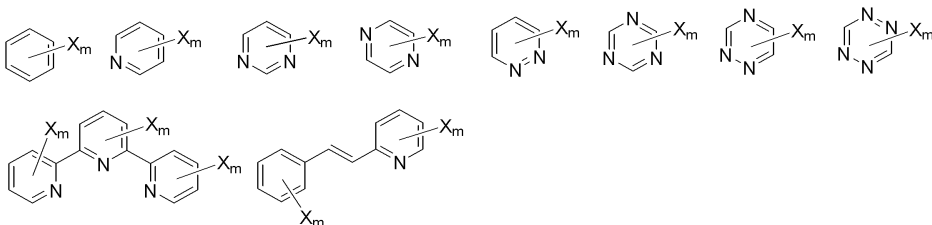
[0054] [구조식 11]



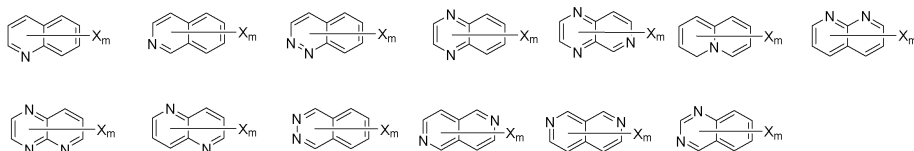
[0055]



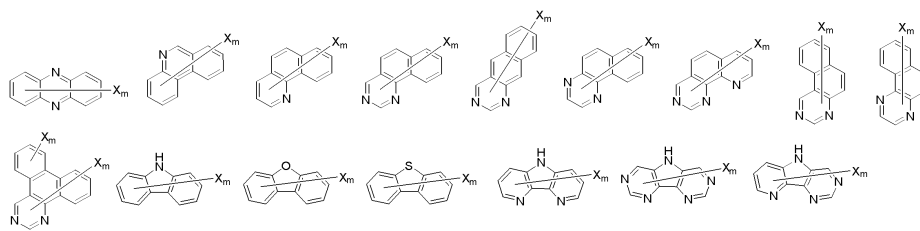
[0056]



[0057]



[0058]



[0059]

[0060]

상기 [구조식 11]에서,

[0061]

X는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 시아노기, 니트로기 및 할로젠기로 중에서 선택되고, m 은 1 내지 11의 정수이며, m이 2 이상인 경우 복수 개의 X는 서로 동일하거나 상이하다.

[0062]

본 발명에서 사용되는 치환기인 알킬기의 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 헵틸기, 옥틸기, 스테아릴기, 트리클로로메틸기, 트리플루오르메틸기 등을 들 수 있으며, 상기 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 트리플루오르메틸기, 실릴기(이 경우 "알킬실릴기"라 함), 치환 또는 비치환된 아미노기(-NH₂, -NH(R), -N(R')(R'')), 여기서 R, R' 및 R''은 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 24의 알킬기임(이 경우 "알킬아미노기"라 함)), 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기, 술폰산기, 인산기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로겐화된 알킬기, 탄소수 2 내지 24의 알케닐기, 탄소수 2 내지 24의 알키닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 5 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 3 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 3 내지 24의 헤테로아릴알킬기로 치환될 수 있다.

[0063]

본 발명에서 사용되는 치환기인 알콕시기의 구체적인 예로는 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 이소부틸옥시기, sec-부틸옥시기, 펜틸옥시기, iso-아밀옥시기, 헥실옥시기 등을 들 수 있으며, 상기 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

[0064]

본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 할로젠기의 구체적인 예로는 플루오르(F), 클로린(Cl), 브롬(Br) 등을 들 수 있다.

[0065]

본 발명에 사용되는 치환기인 아릴옥시기는 -O- 아릴 라디칼을 의미하며, 이때 아릴기는 상기에서 정의된 바와 같고, 구체적인 예로서 페녹시, 나프톡시, 안트라세닐옥시, 페난트레닐옥시, 플루오레닐옥시, 인데닐옥시 등을 들 수 있고, 아릴옥시기에 포함되어 있는 하나 이상의 수소 원자는 추가로 치환가능하다.

[0066]

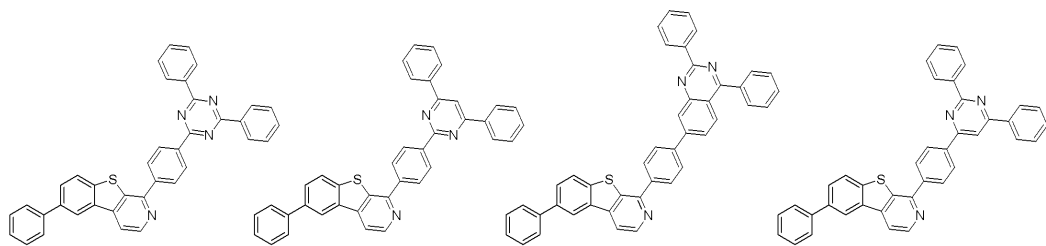
본 발명에 사용되는 치환기인 실릴기의 구체적인 예로는 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리페닐실릴, 트리메톡시실릴, 디메톡시페닐실릴, 디페닐메틸실릴, 디페닐비닐실릴, 메틸사이클로뷰틸실릴, 디메틸퓨릴실릴 등을 들 수 있다.

[0067]

본 발명에 사용되는 알케닐기의 구체적인 예로는 직쇄상 또는 분지쇄상의 알케닐기를 나타내고, 3-펜테닐기, 4-헥세닐기, 5-헵테닐기, 4-메틸-3-펜테닐기, 2,4-디메틸-펜테닐기, 6-메틸-5-헵테닐기, 2,6-디메틸-5-헵테닐기 등을 들 수 있다.

[0068]

본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기 [화학식 1]은 하기 [화학식 2] 내지 [화학식 185]로 표시되는 화합물 중에서 선택될 수 있다.



[0069]

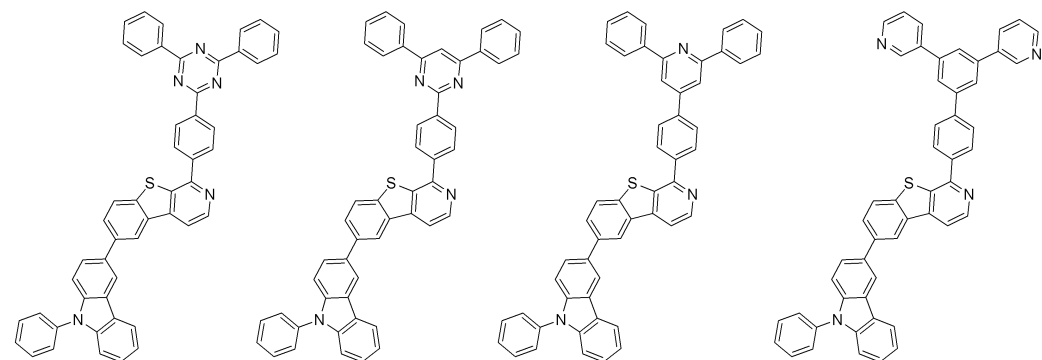
[0070]

[화학식2]

[화학식3]

[화학식4]

[화학식5]



[0071]

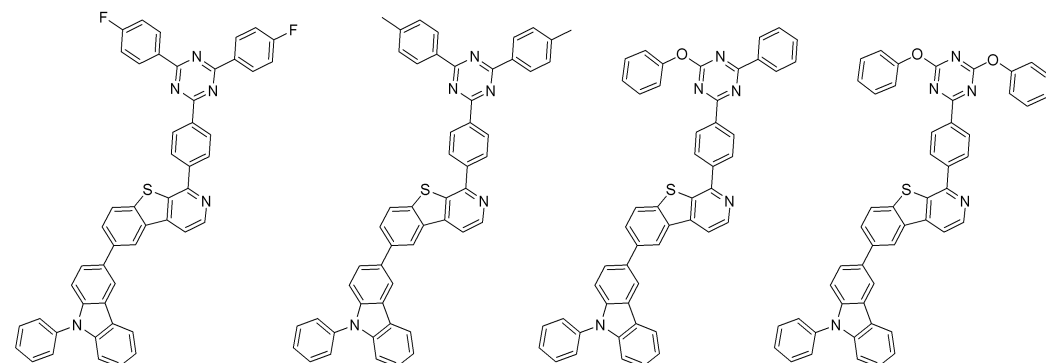
[0072]

[화학식6]

[화학식7]

[화학식8]

[화학식9]



[0073]

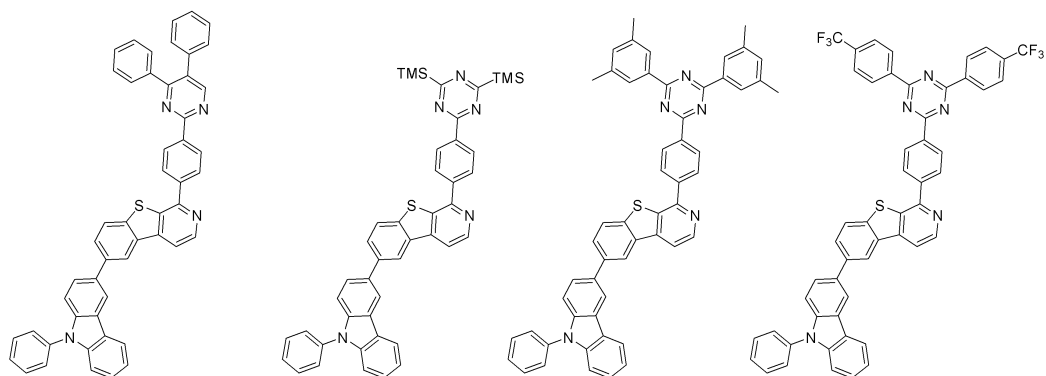
[0074]

[화학식10]

[화학식11]

[화학식12]

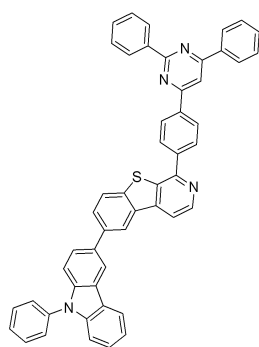
[화학식13]



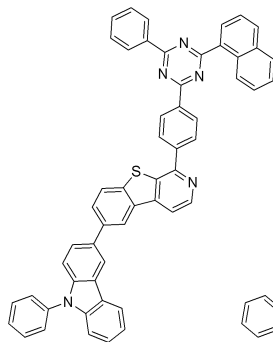
[0075]

[0076]

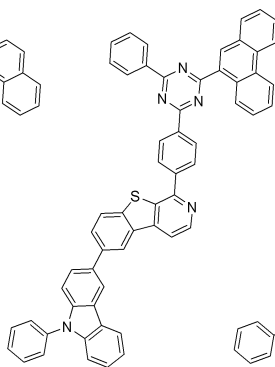
[화학식14]



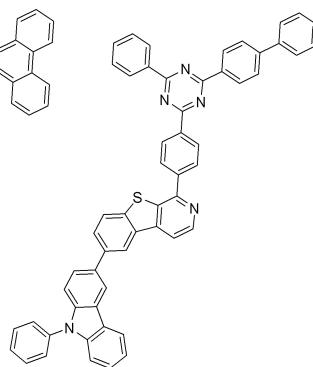
[화학식15]



[화학식16]



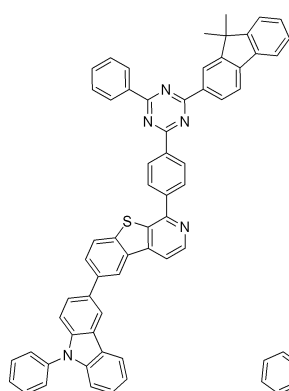
[화학식17]



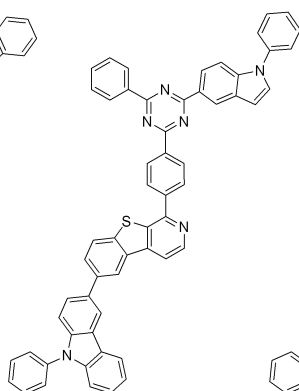
[0077]

[0078]

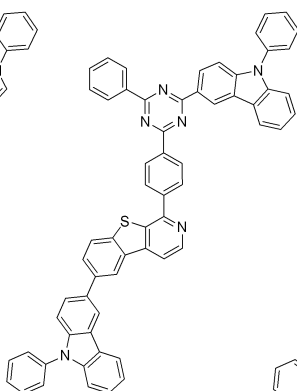
[화학식18]



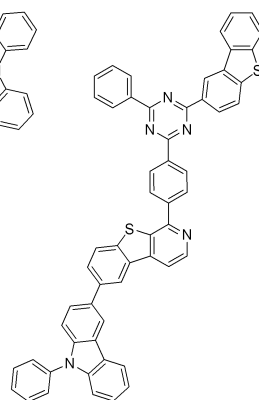
[화학식19]



[화학식20]



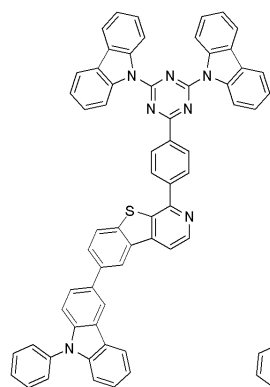
[화학식21]



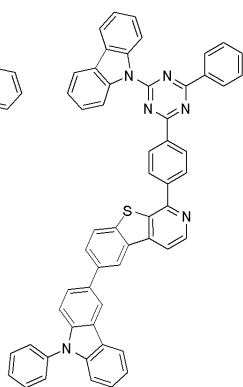
[0079]

[0080]

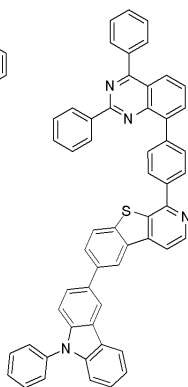
[화학식22]



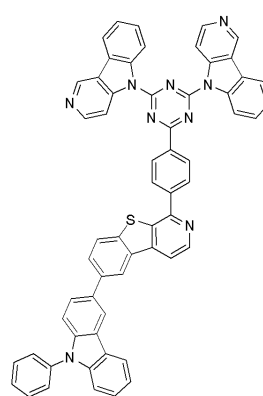
[화학식23]



[화학식24]



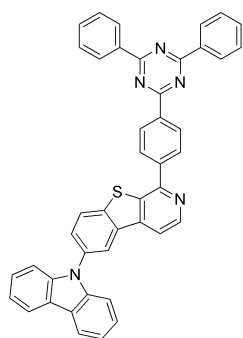
[화학식25]



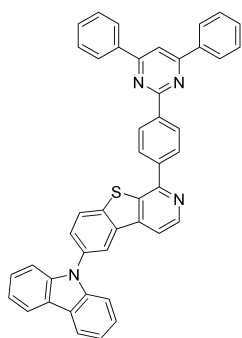
[0081]

[0082]

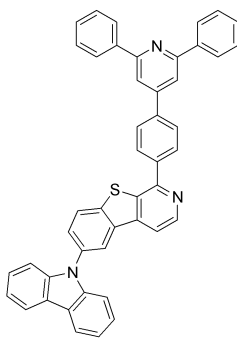
[화학식26]



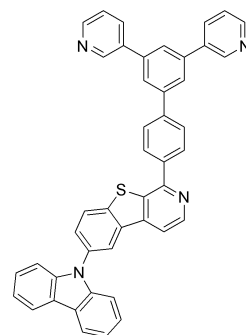
[화학식27]



[화학식28]



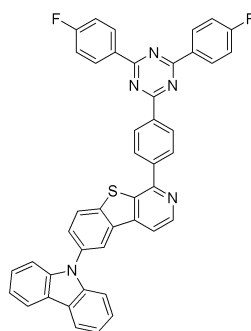
[화학식29]



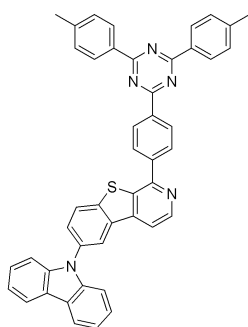
[0083]

[0084]

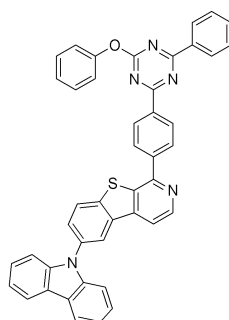
[화학식30]



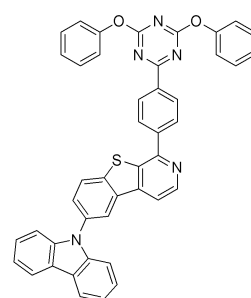
[화학식31]



[화학식32]



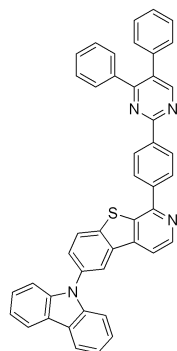
[화학식33]



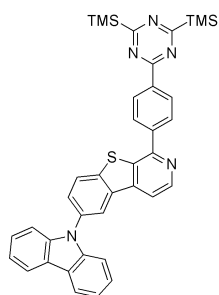
[0085]

[0086]

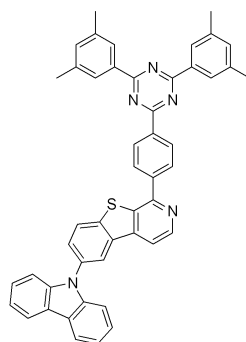
[화학식34]



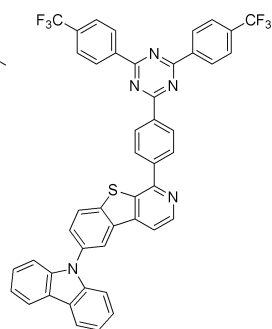
[화학식35]



[화학식36]



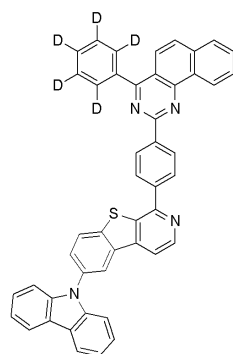
[화학식37]



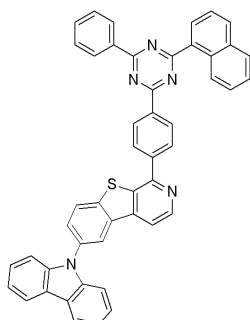
[0087]

[0088]

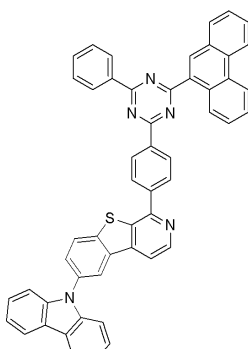
[화학식38]



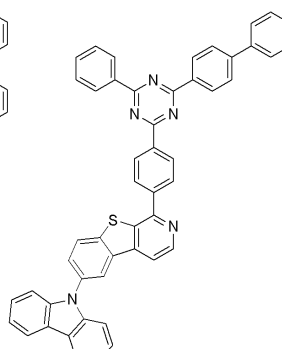
[화학식39]



[화학식40]



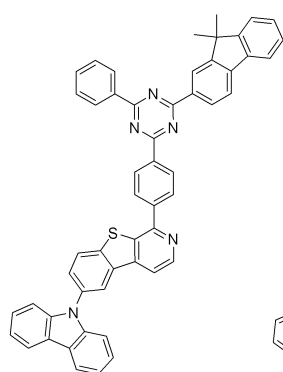
[화학식41]



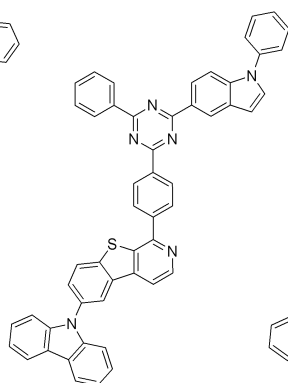
[0089]

[0090]

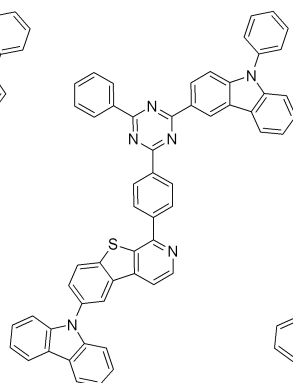
[화학식42]



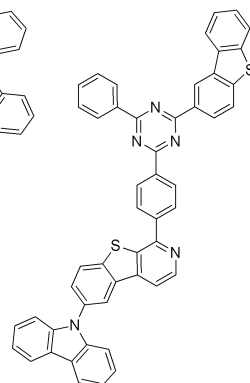
[화학식43]



[화학식44]



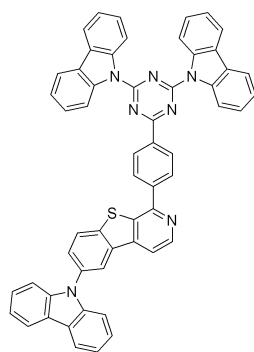
[화학식45]



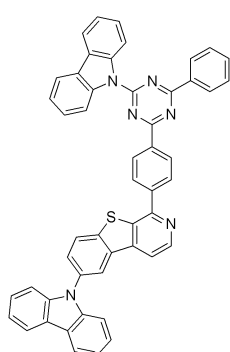
[0091]

[0092]

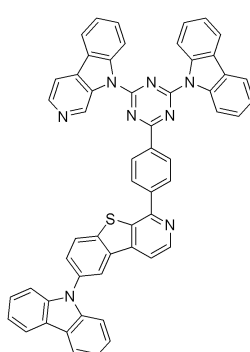
[화학식46]



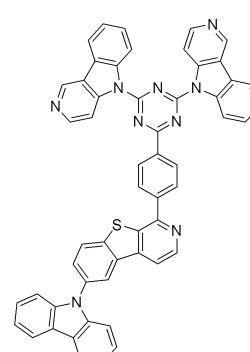
[화학식47]



[화학식48]

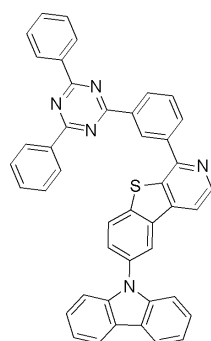


[화학식49]

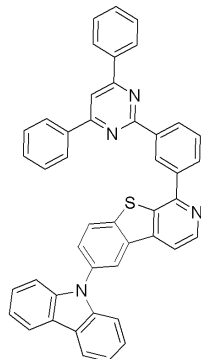


[0093]

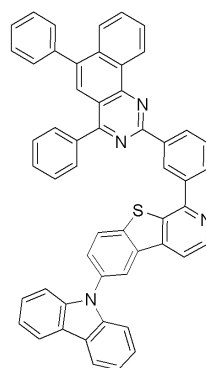
[화학식50]



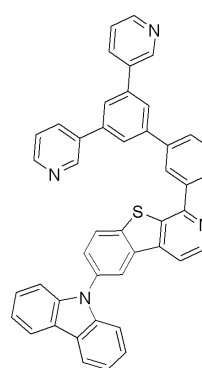
[화학식51]



[화학식52]



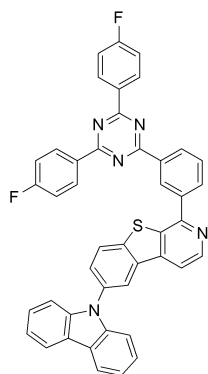
[화학식53]



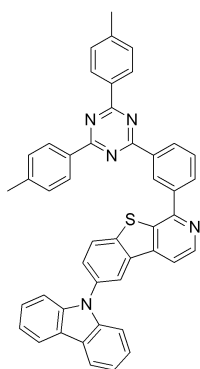
[0094]

[0095]

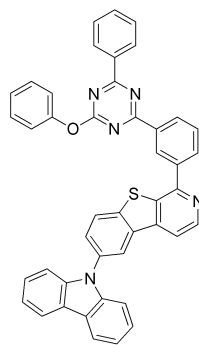
[화학식54]



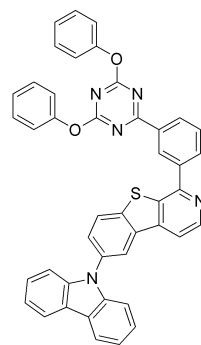
[화학식55]



[화학식56]



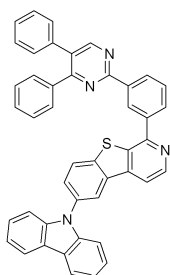
[화학식57]



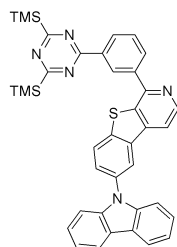
[0096]

[0097]

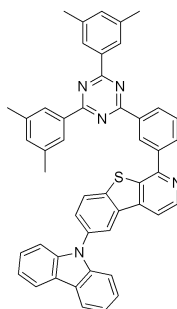
[화학식58]



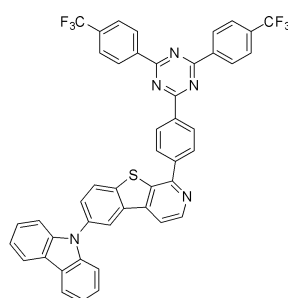
[화학식59]



[화학식60]



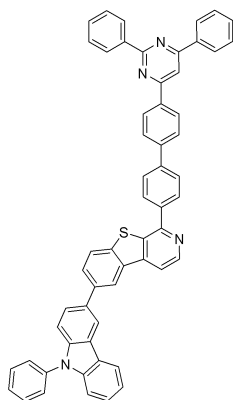
[화학식61]



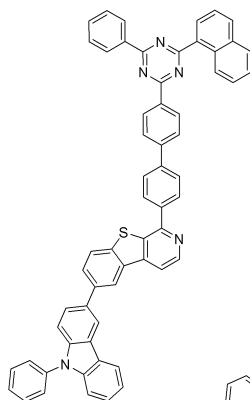
[0098]

[0099]

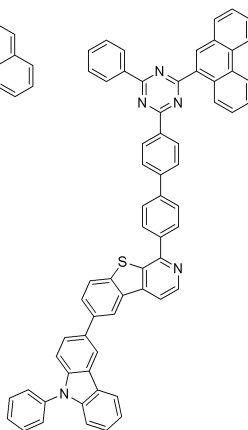
[화학식62]



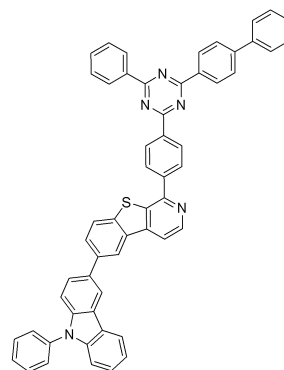
[화학식63]



[화학식64]



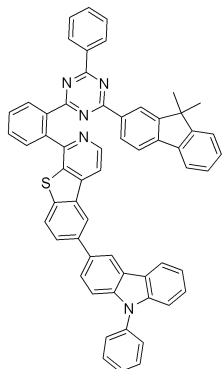
[화학식65]



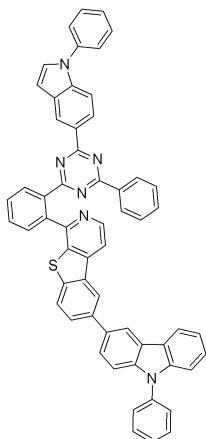
[0100]

[0101]

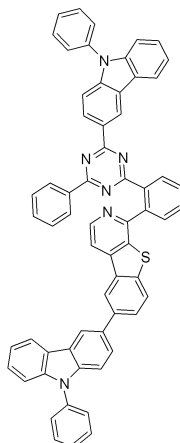
[화학식66]



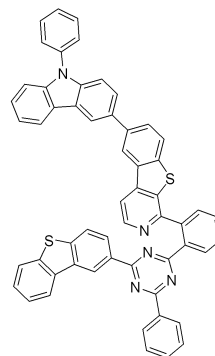
[화학식67]



[화학식68]



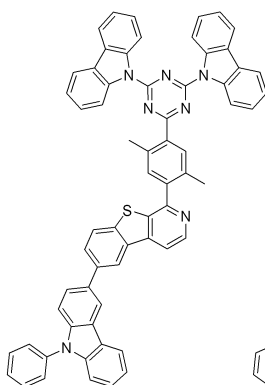
[화학식69]



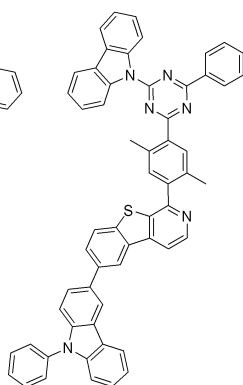
[0102]

[0103]

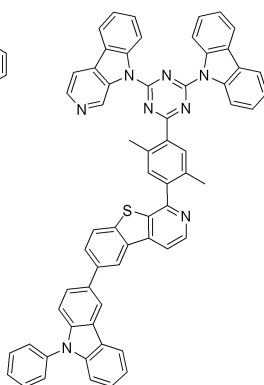
[화학식70]



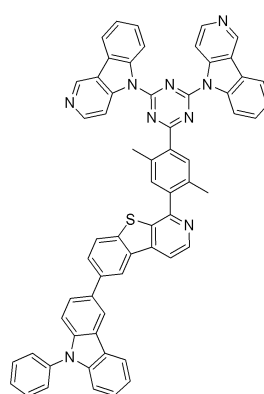
[화학식71]



[화학식72]



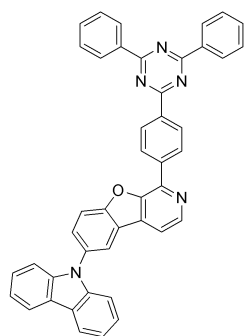
[화학식73]



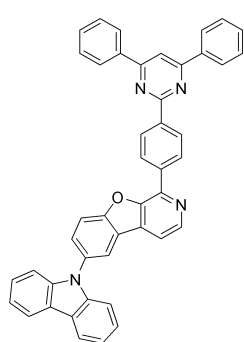
[0104]

[0105]

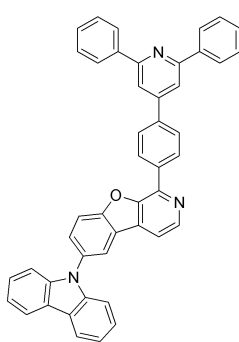
[화학식74]



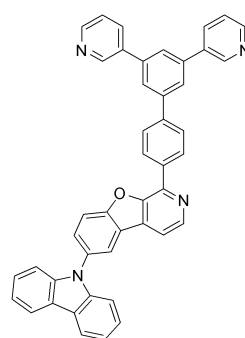
[화학식75]



[화학식76]



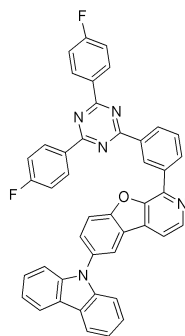
[화학식77]



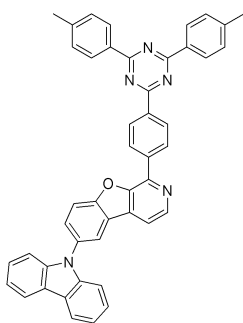
[0106]

[0107]

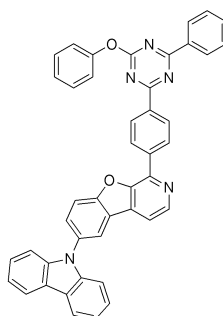
[화학식78]



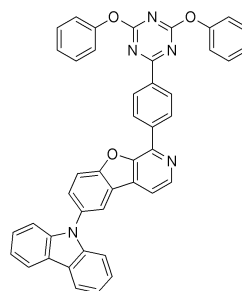
[화학식79]



[화학식80]



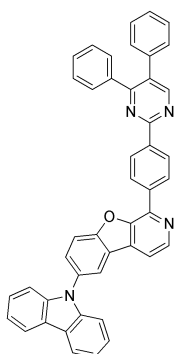
[화학식81]



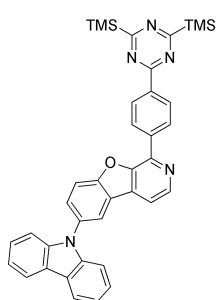
[0108]

[0109]

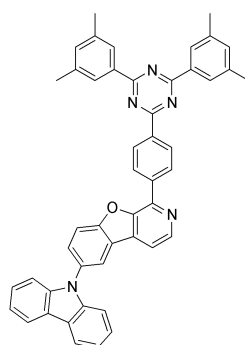
[화학식82]



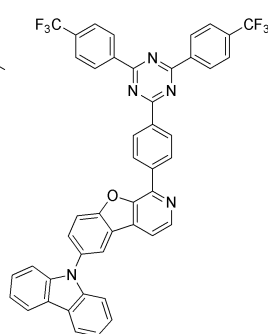
[화학식83]



[화학식84]



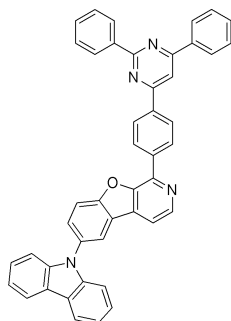
[화학식85]



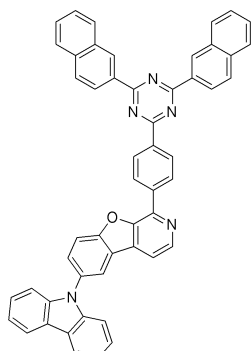
[0110]

[0111]

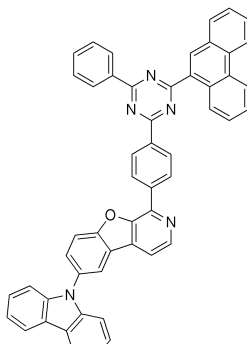
[화학식86]



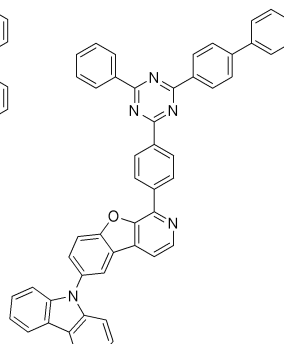
[화학식87]



[화학식88]

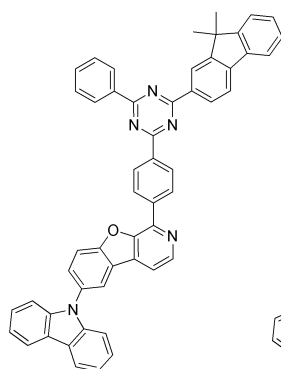


[화학식89]

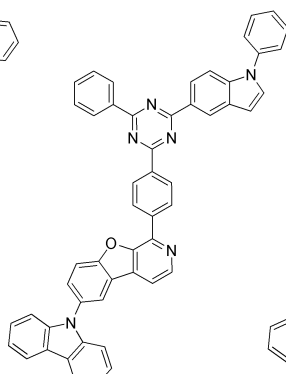


[0112]

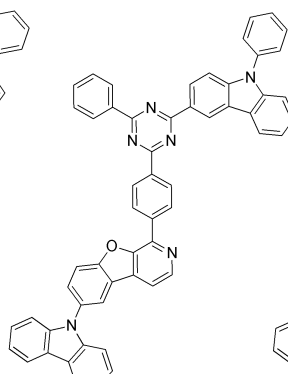
[화학식90]



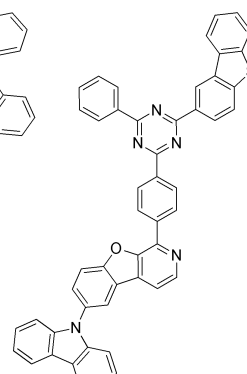
[화학식91]



[화학식92]



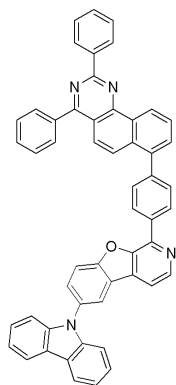
[화학식93]



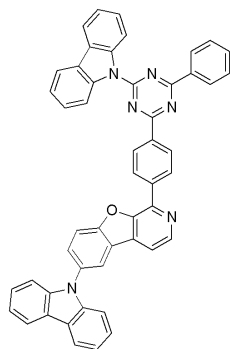
[0113]

[0114]

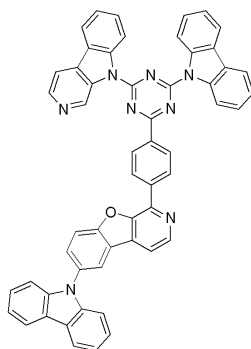
[화학식94]



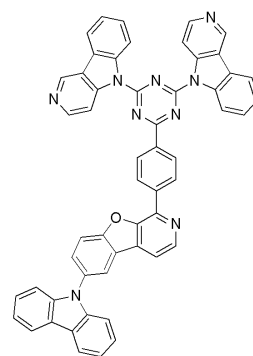
[화학식95]



[화학식96]



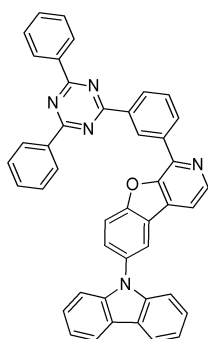
[화학식97]



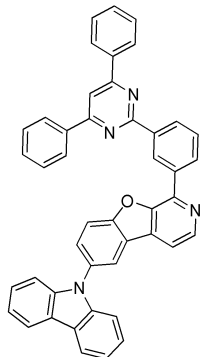
[0115]

[0116]

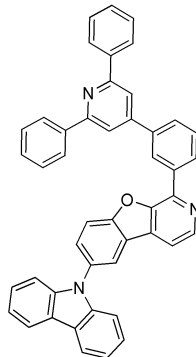
[화학식98]



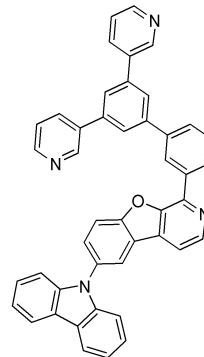
[화학식99]



[화학식100]



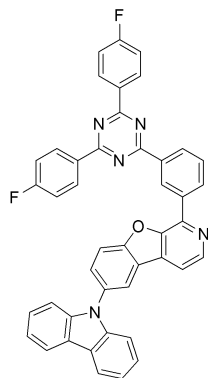
[화학식101]



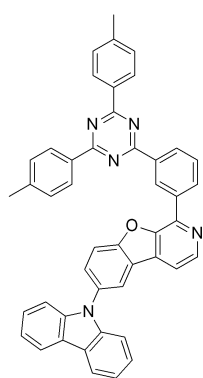
[0117]

[0118]

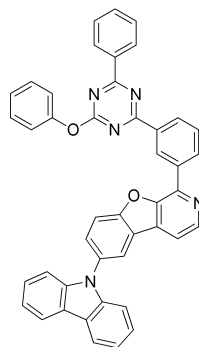
[화학식102]



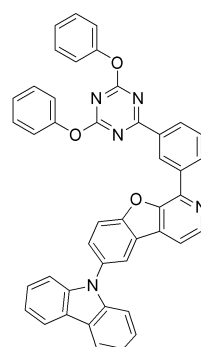
[화학식103]



[화학식104]



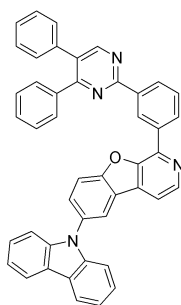
[화학식105]



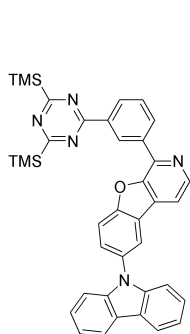
[0119]

[0120]

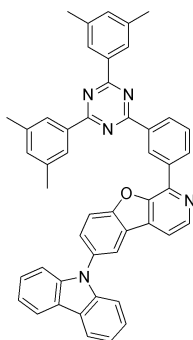
[화학식106]



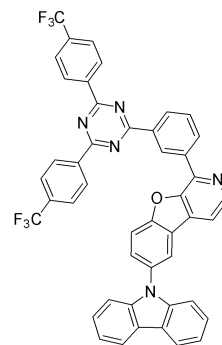
[화학식107]



[화학식108]



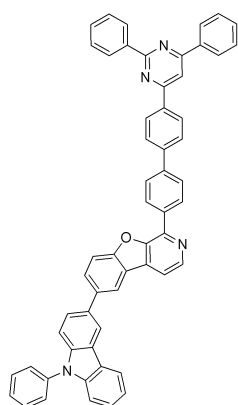
[화학식109]



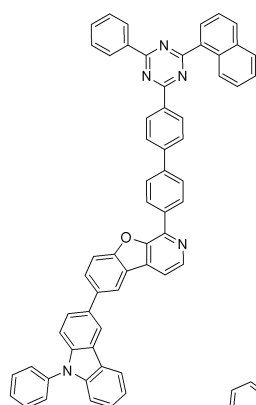
[0121]

[0122]

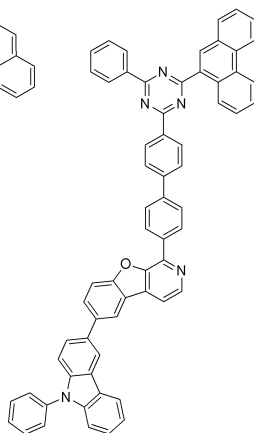
[화학식110]



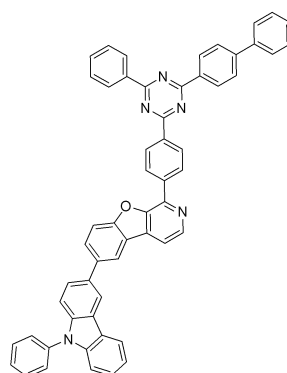
[화학식111]



[화학식112]



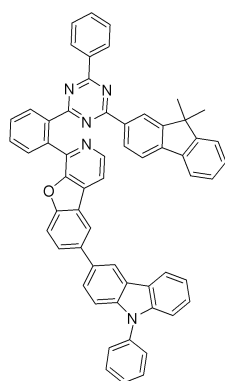
[화학식113]



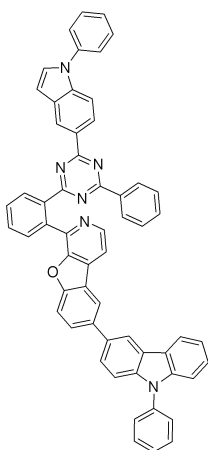
[0123]

[0124]

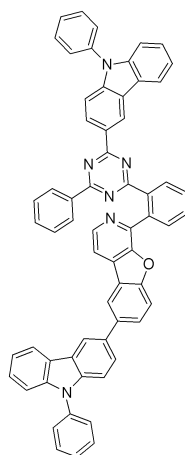
[화학식114]



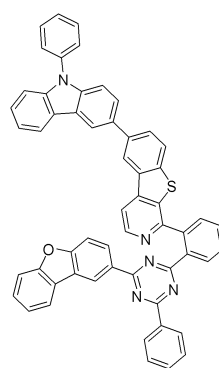
[화학식115]



[화학식116]



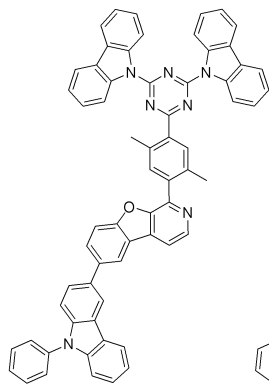
[화학식117]



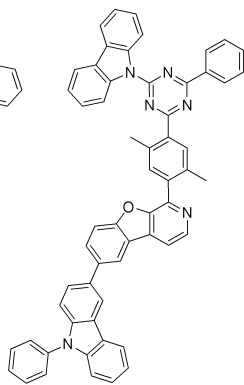
[0125]

[0126]

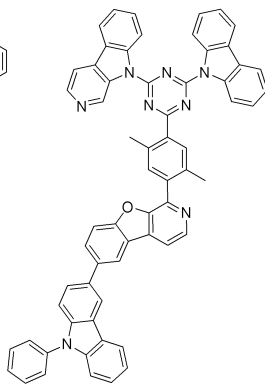
[화학식118]



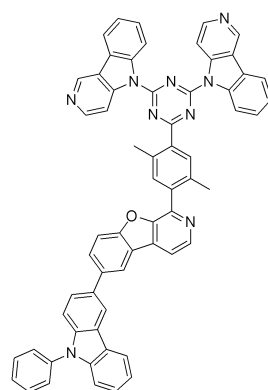
[화학식119]



[화학식120]

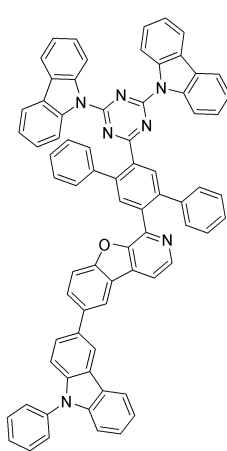


[화학식121]

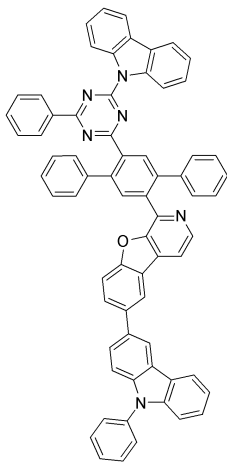


[0127]

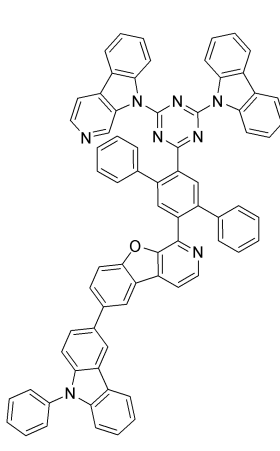
[화학식122]



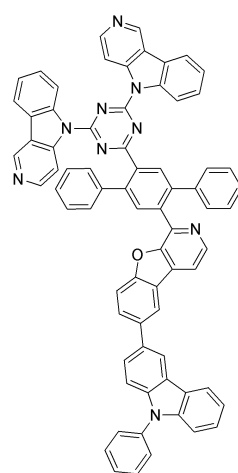
[화학식123]



[화학식124]



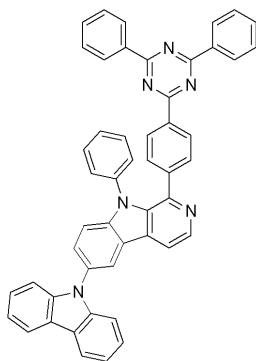
[화학식125]



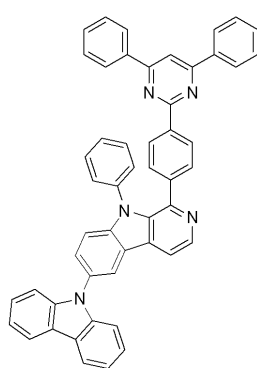
[0128]

[0129]

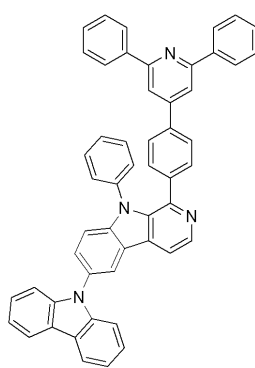
[화학식126]



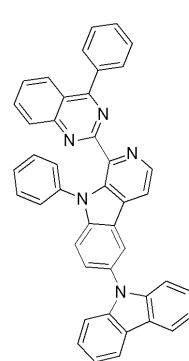
[화학식127]



[화학식128]



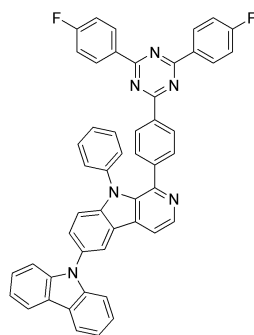
[화학식129]



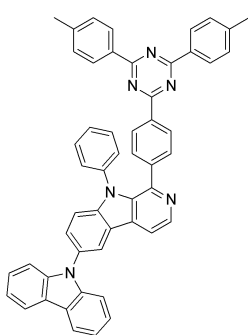
[0130]

[0131]

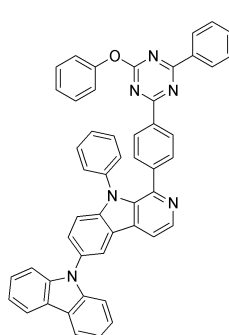
[화학식130]



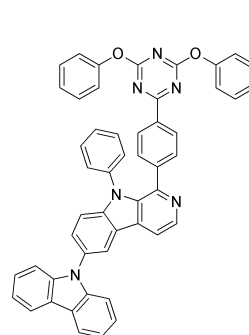
[화학식131]



[화학식132]



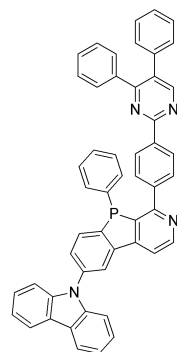
[화학식133]



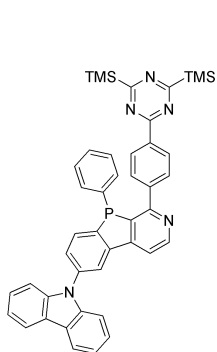
[0132]

[0133]

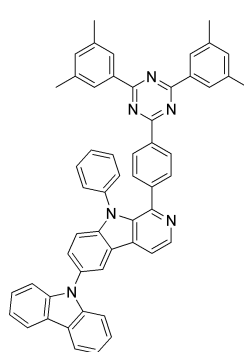
[화학식134]



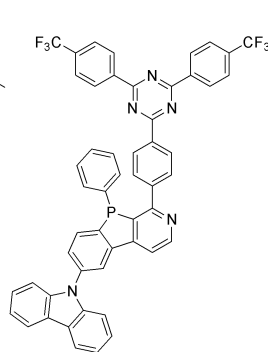
[화학식135]



[화학식136]



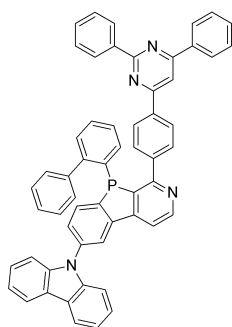
[화학식137]



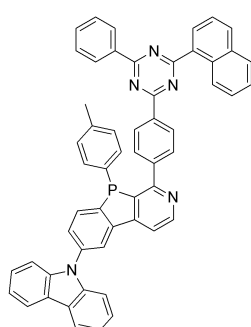
[0134]

[0135]

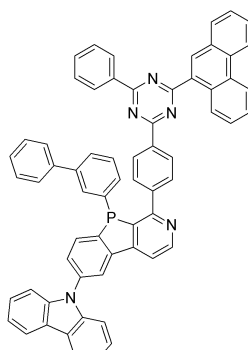
[화학식138]



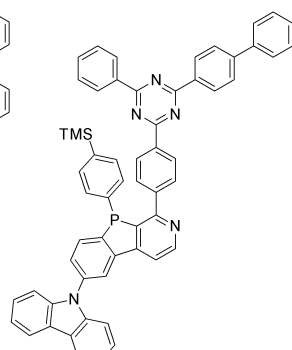
[화학식139]



[화학식140]



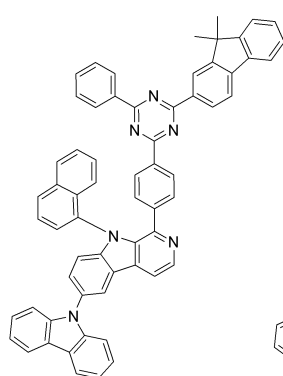
[화학식141]



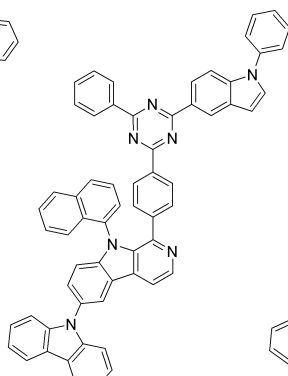
[0136]

[0137]

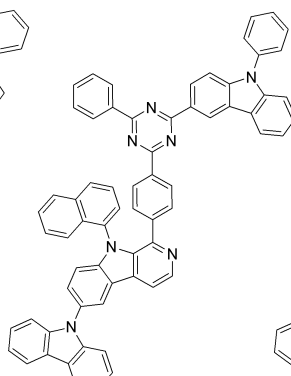
[화학식142]



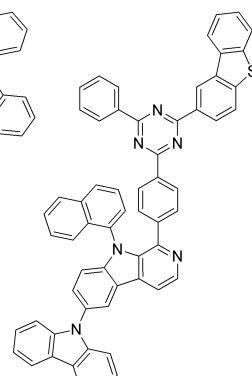
[화학식143]



[화학식144]



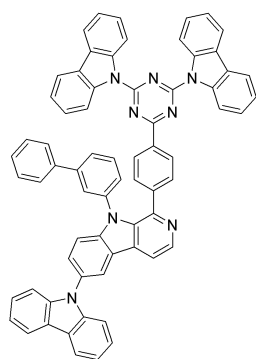
[화학식145]



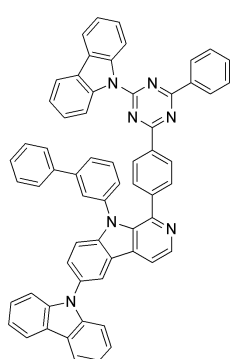
[0138]

[0139]

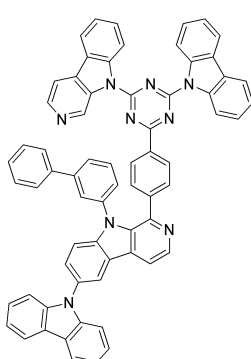
[화학식146]



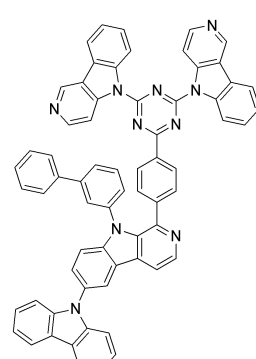
[화학식147]



[화학식148]



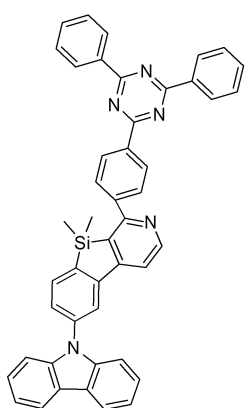
[화학식149]



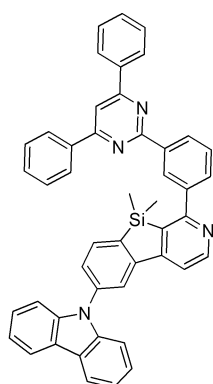
[0140]

[0141]

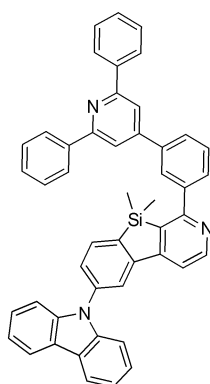
[화학식150]



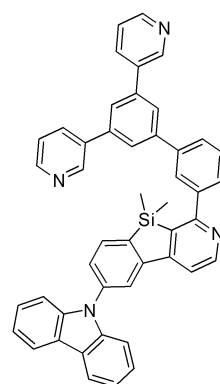
[화학식151]



[화학식152]



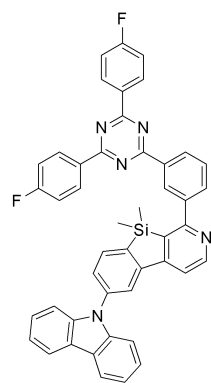
[화학식153]



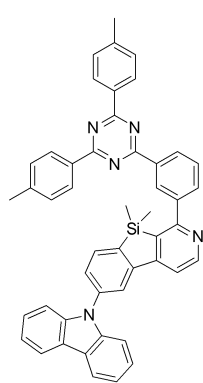
[0142]

[0143]

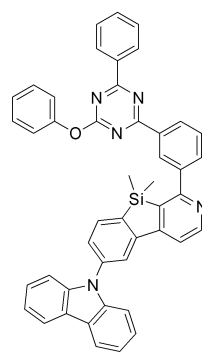
[화학식154]



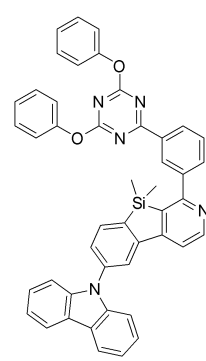
[화학식155]



[화학식156]



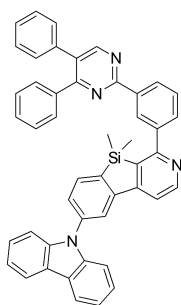
[화학식157]



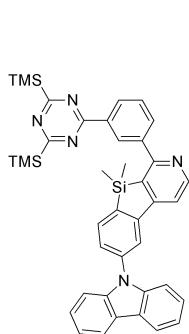
[0144]

[0145]

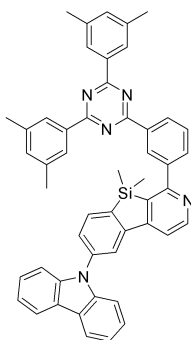
[화학식158]



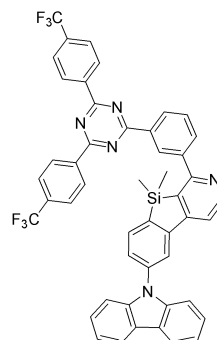
[화학식159]



[화학식160]



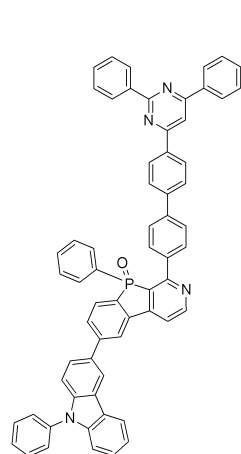
[화학식161]



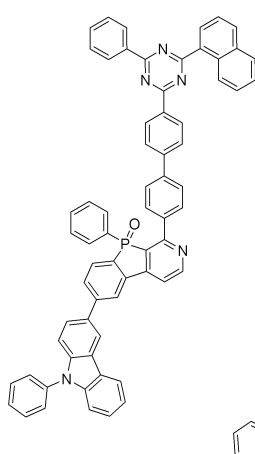
[0146]

[0147]

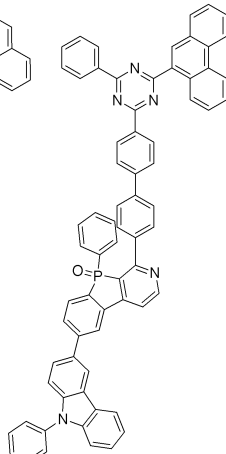
[화학식162]



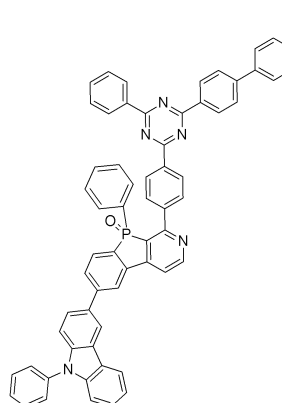
[화학식163]



[화학식164]



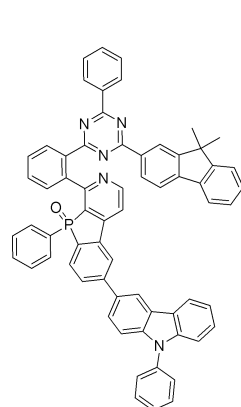
[화학식165]



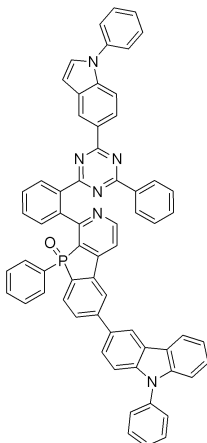
[0148]

[0149]

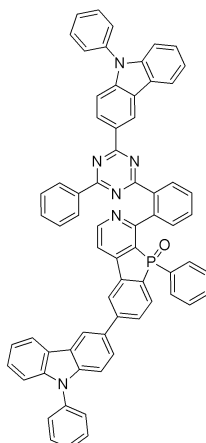
[화학식166]



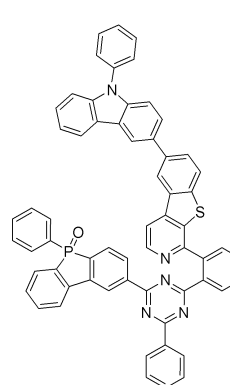
[화학식167]



[화학식168]



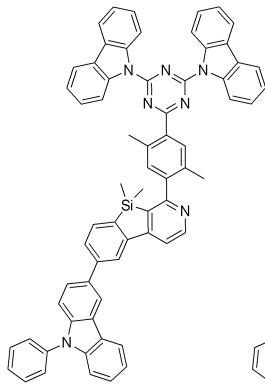
[화학식169]



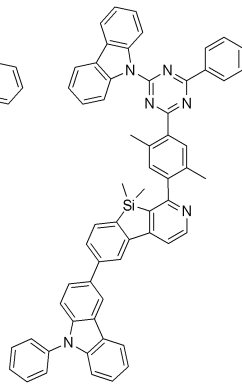
[0150]

[0151]

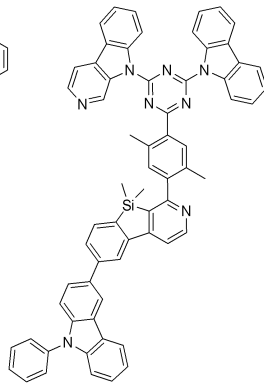
[화학식170]



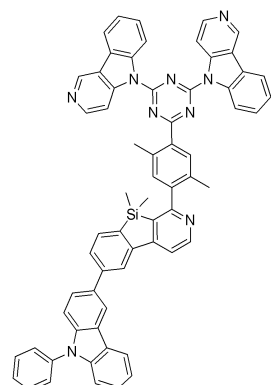
[화학식171]



[화학식172]



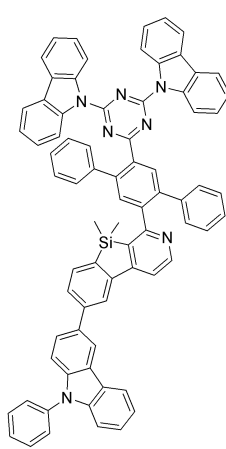
[화학식173]



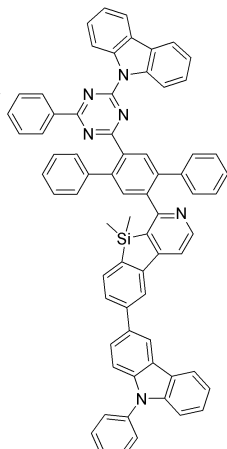
[0152]

[0153]

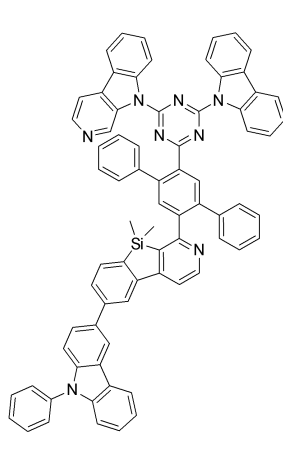
[화학식174]



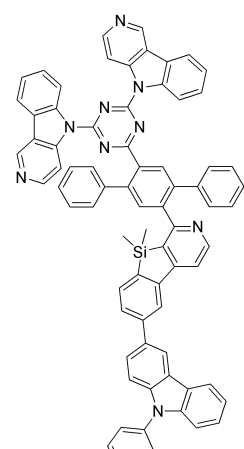
[화학식175]



[화학식176]



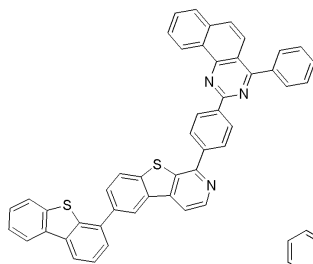
[화학식177]



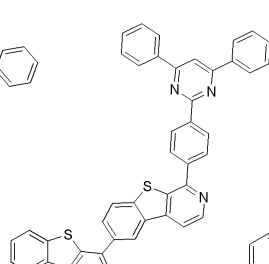
[0154]

[0155]

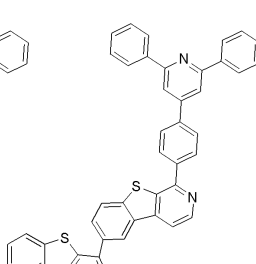
[화학식178]



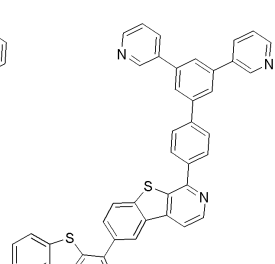
[화학식179]



[화학식180]



[화학식181]



[0156]

[0157]

[화학식182]

[화학식183]

[화학식184]

[화학식185]

[0158]

본 발명의 또 다른 측면은 본 발명의 [화학식 1]에 따른 화합물을 최소한 1개 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 유기 박막층에 관한 것이다.

[0159]

본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 유기 박막층은 하기 [화학식 A-1] 내지 [화학식 J-1]로 표시되는 화합물을 최소한 1개 이상을 더 포함하는 것을 특징으로 한다.

[0160]

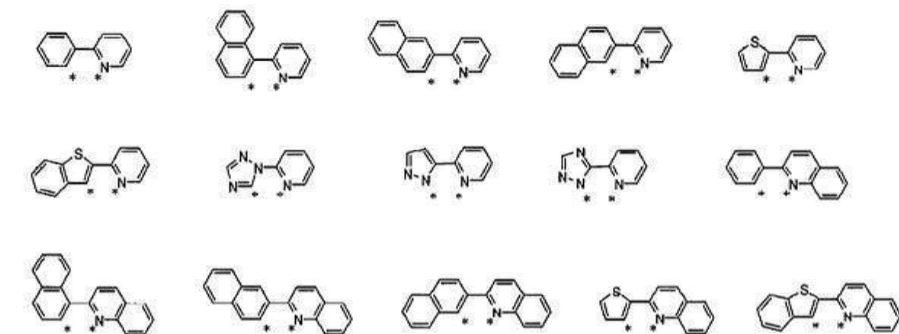
[일반식 A-1]

[0161]

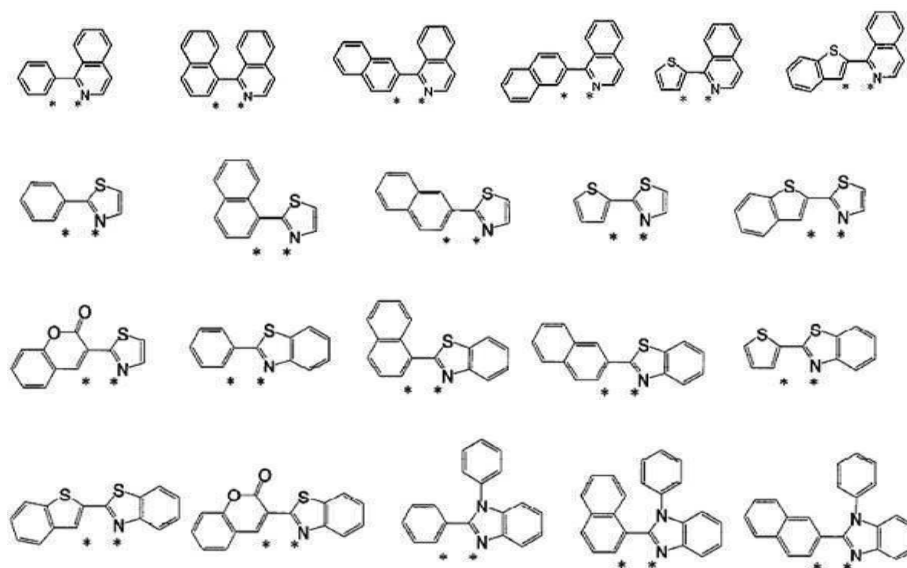
$ML_1L_2L_3$

[0162] 상기 M은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 바람직하게는 Ir, Pt, Pd, Rh, Re, Os, Tl, Pb, Bi, In, Sn, Sb, Te, Au 및 Ag로부터 선택된다. 또한, 상기 L₁, L₂ 및 L₃는 리간드로 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 하기 [구조식 D]에서 선택되는 어느 하나를 들 수 있지만, 이에 한정되는 것은 아니다. 또한, 하기 [구조식 D]내 *은 금속 이온 M에 결합하는 사이트(site)를 표현한다.

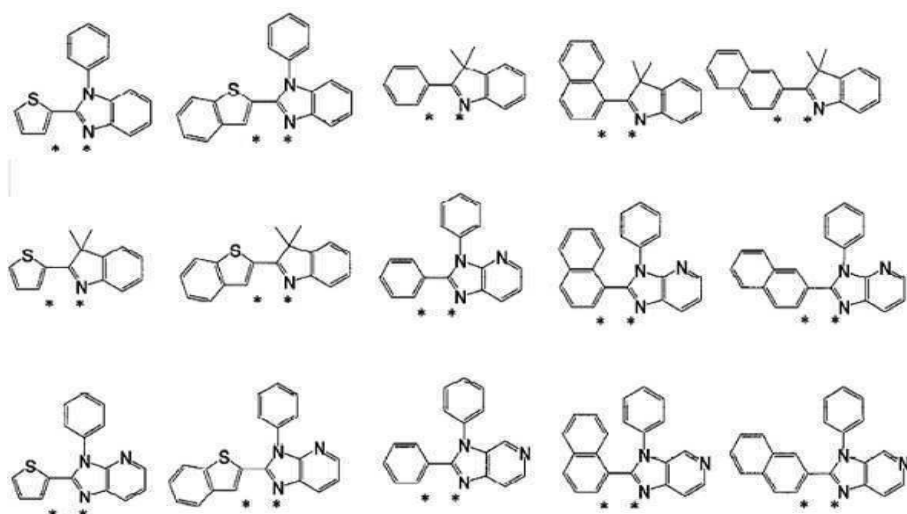
[0163] [구조식 D]



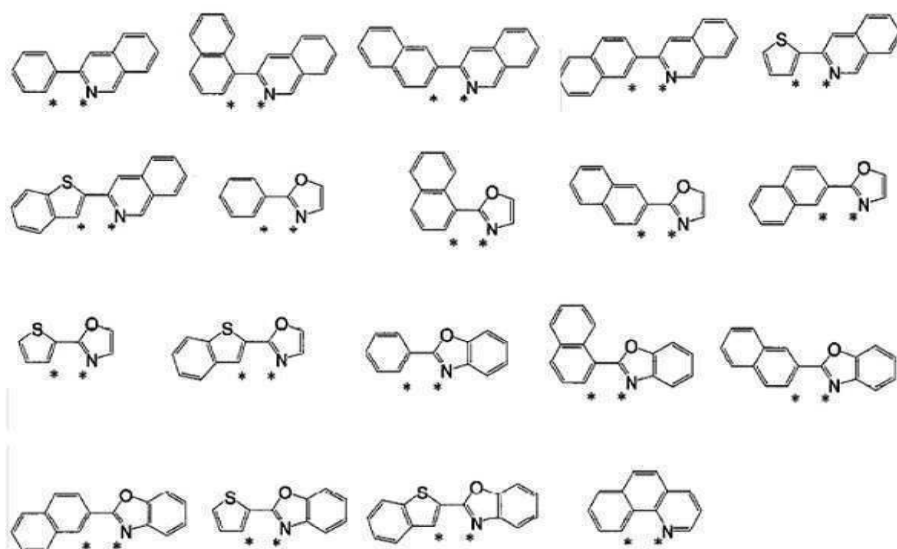
[0164]



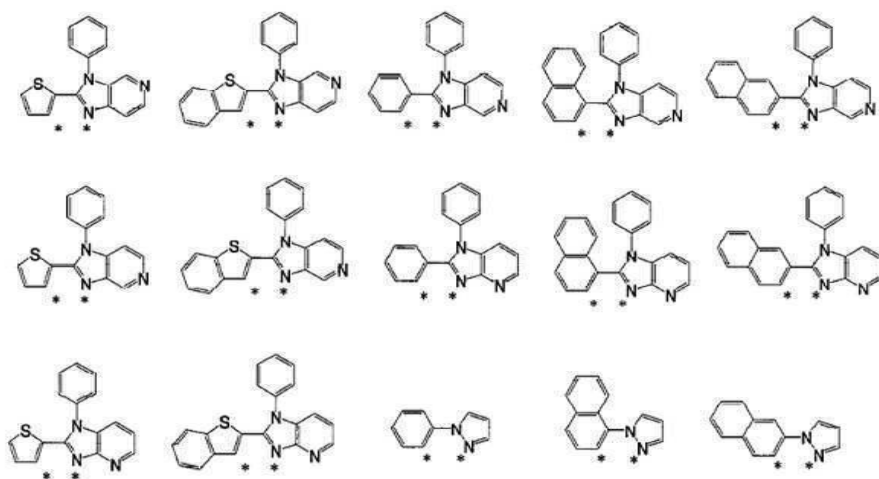
[0165]



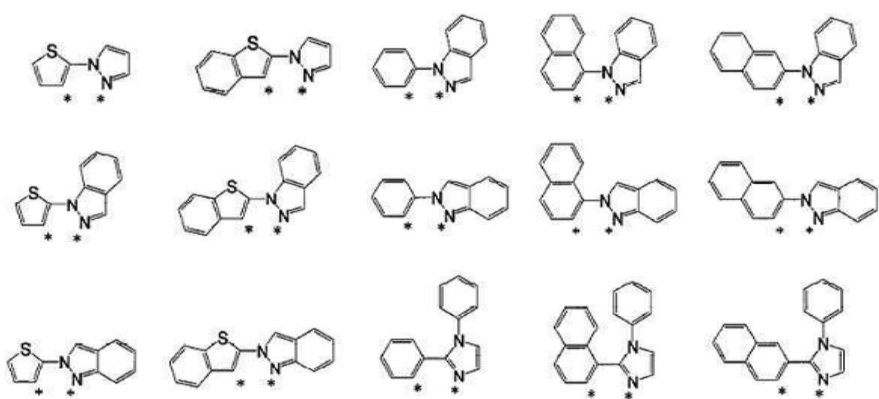
[0166]



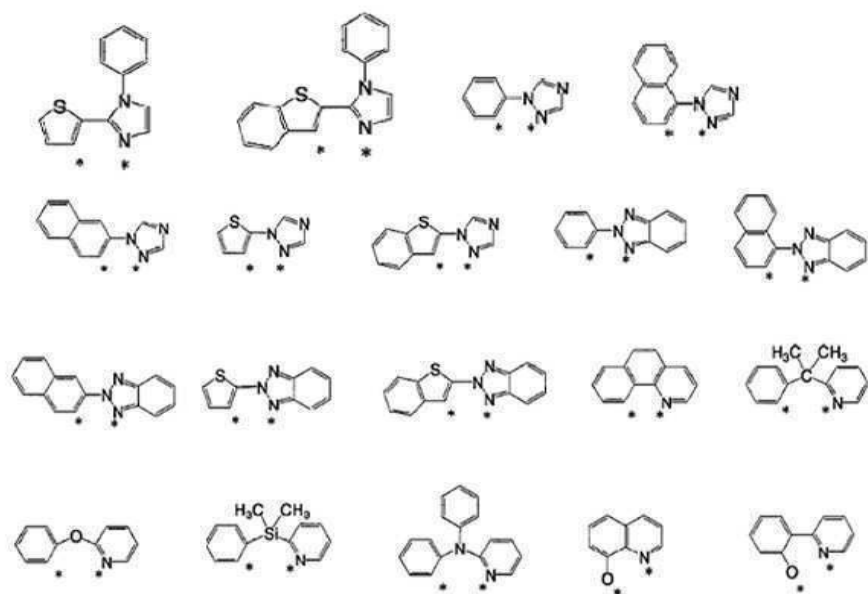
[0167]



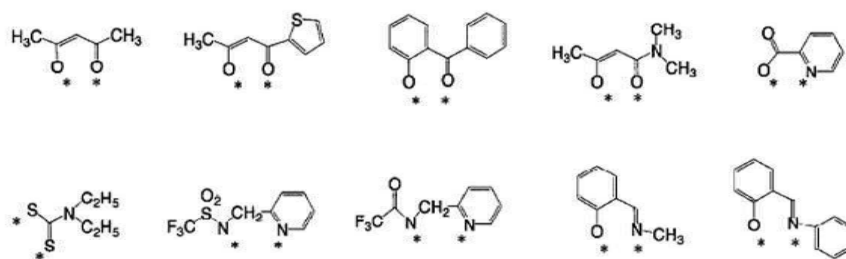
[0168]



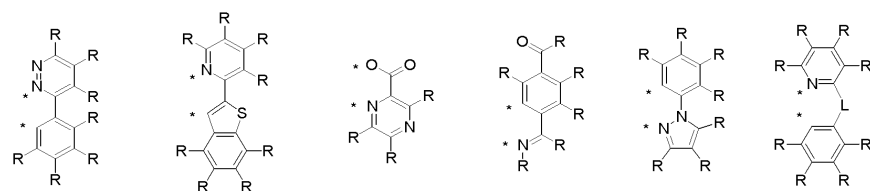
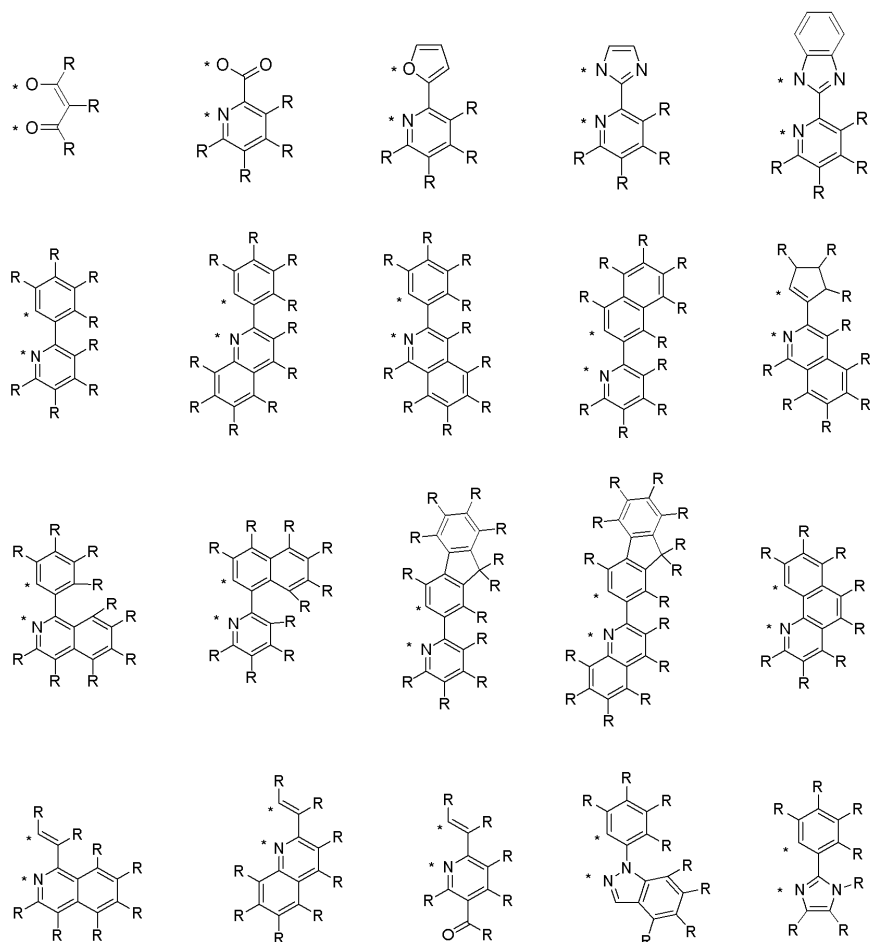
[0169]



[0170]



[0171]



[0174] 상기 [구조식 D]에서,

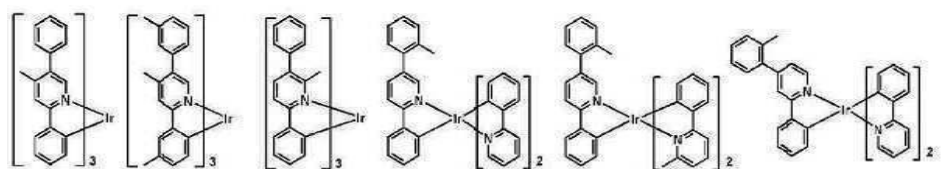
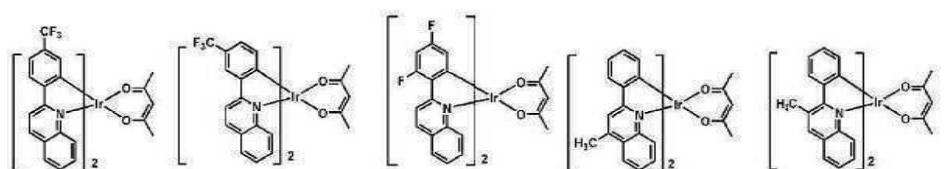
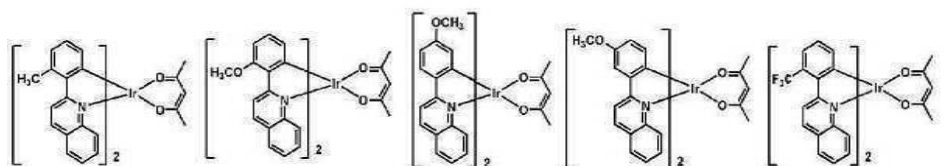
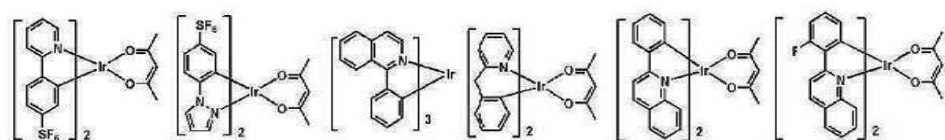
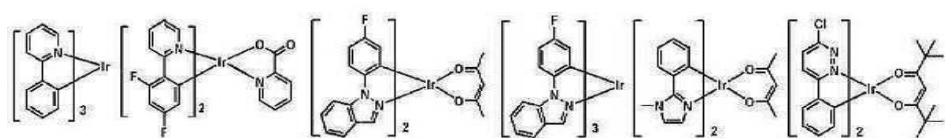
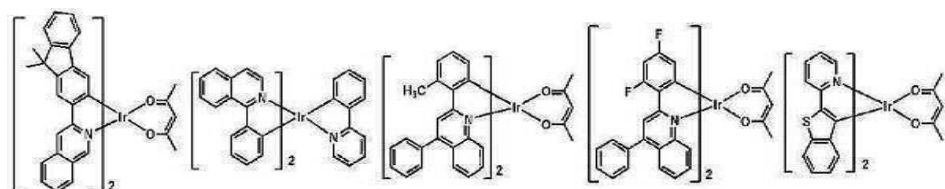
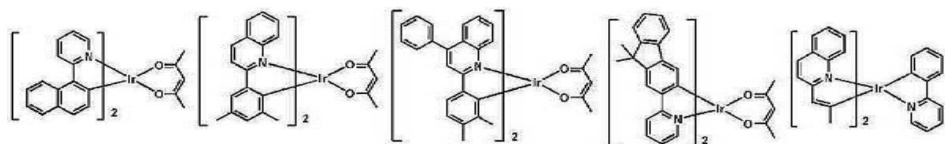
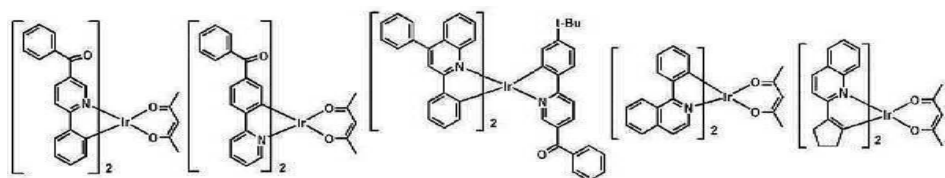
[0175] 상기 R은 서로 상이하거나 동일하며 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

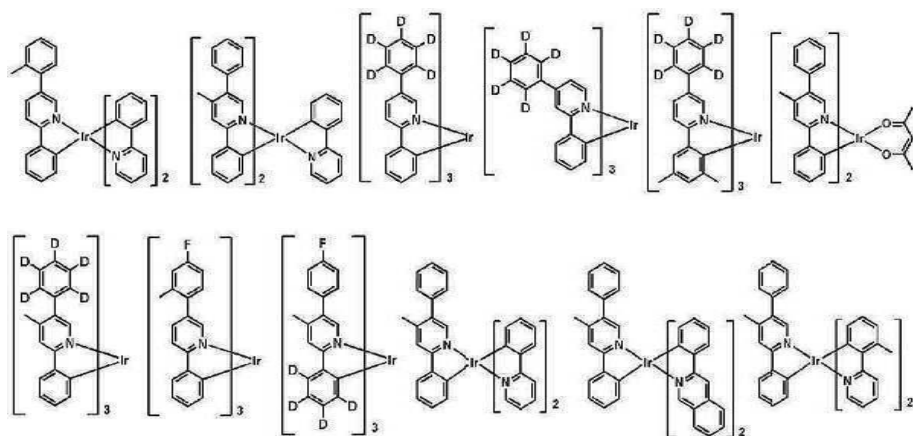
[0176] 상기 R은 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기, 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 헤테로아릴기, 시아노기, 할로젠기, 중수소 및 수소 중에서 선택되는 1종 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.

[0177] 또한, 상기 R은 각각의 인접한 치환기와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있다.

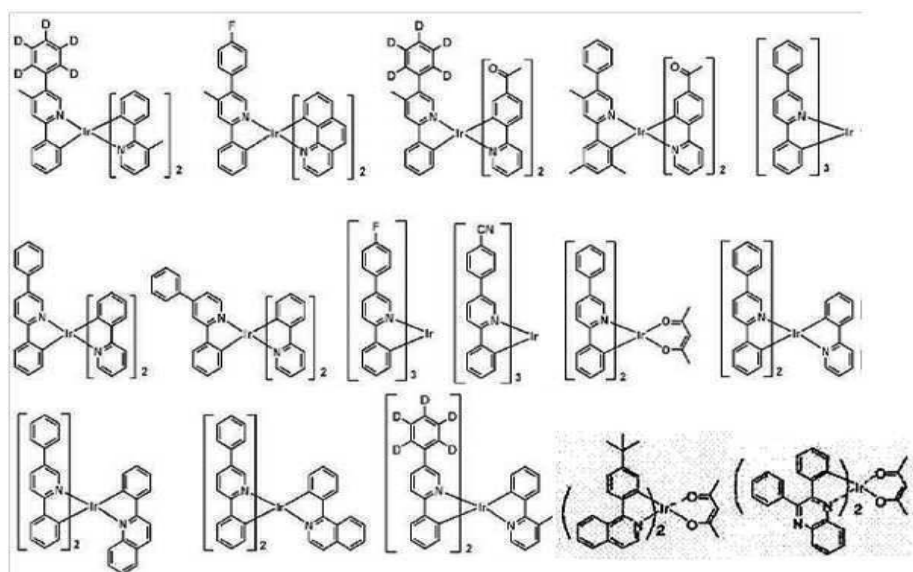
[0178] 상기 L은 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로 고리 또는 융합 고리를 형성할 수 있다.

[0179] 구체적인 일 예로서, 상기 [일반식 A-1]으로 표시되는 도펀트는 하기 화합물 중에서 선택된 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

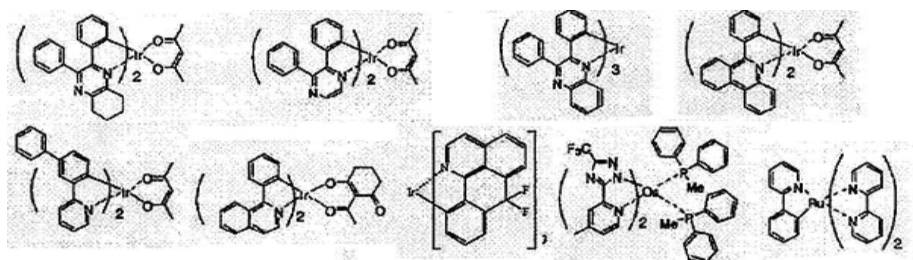




[0183]



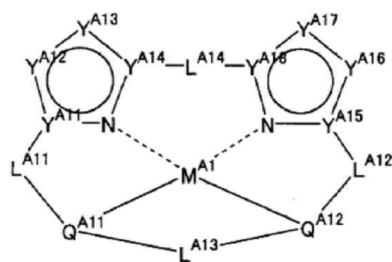
[0184]



[0185]

[0186]

[일반식 B-1]



[0187]

[0188]

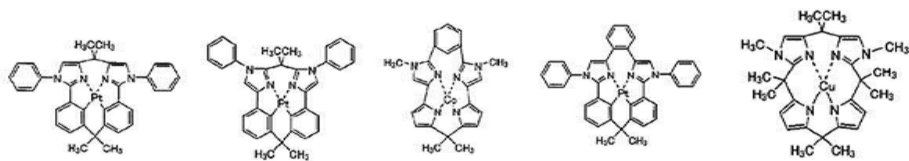
상기 [일반식 B-1]에서,

[0189]

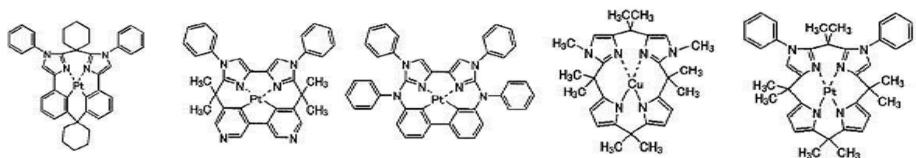
M^{A1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, 또한, Y^{A11} , Y^{A14} , Y^{A15} 및 Y^{A18} 은 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내며, Y^{A12} , Y^{A13} , Y^{A16} 및 Y^{A17} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소

원자, 치환 또는 비치환된 질소원자, 산소원자, 황원자를 나타내고, L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} , L^{A14} 는 각각 앞서 정의한 바와 같은 연결기를 나타내며, Q^{A11} , Q^{A12} 는 M^{A1} 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

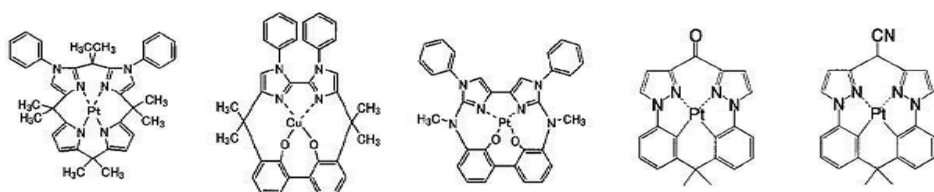
[0190] 상기 [일반식 B-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0191]

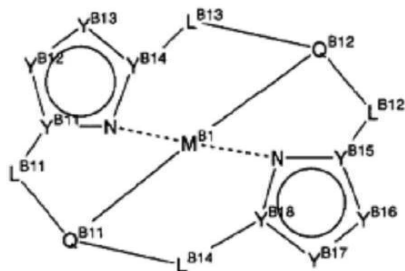


[0192]



[0193]

[일반식 C-1]



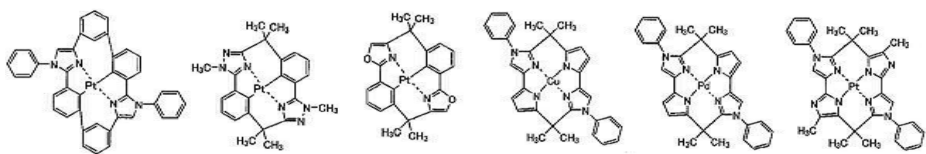
[0195]

상기 [일반식 C-1]에서,

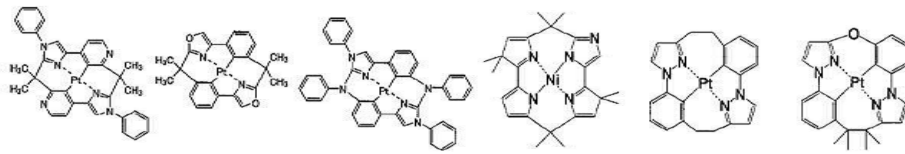
[0196]

M^{B1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, Y^{B11} , Y^{B14} , Y^{B15} 및 Y^{B18} 은 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고, Y^{B12} , Y^{B13} , Y^{B16} 및 Y^{B17} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환의 탄소 원자, 치환 또는 비치환의 질소원자, 산소원자, 황원자를 나타내며, L^{B11} , L^{B12} , L^{B13} , L^{B14} 는 연결기를 나타내고, Q^{B11} , Q^{B12} 는 M^{B1} 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

[0198] 상기 [일반식 C-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



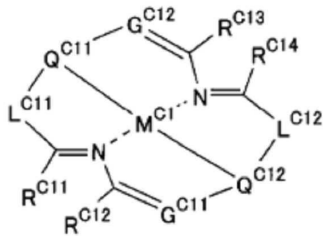
[0199]



[0200]

[0201]

[일반식 D-1]



[0202]

[0203]

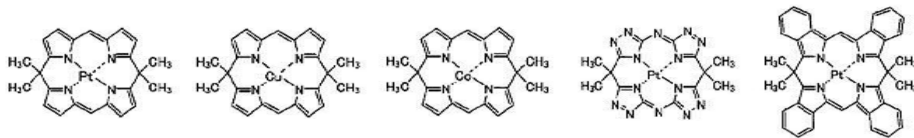
상기 [일반식 D-1]에서,

[0204]

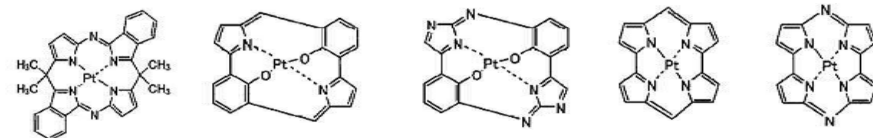
M^{C1} 은 금속 이온을 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, R^{C11} , R^{C12} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 서로 연결하고 5 원 고리를 형성하는 치환기, 서로 연결하는 것의 없는 치환기를 나타내며, R^{C13} , R^{C14} 는 각각 독립에 수소 원자, 서로 연결하고 5 원 고리를 형성하는 치환기, 서로 연결하는 것의 것이 없는 치환기를 나타내며, G^{C11} , G^{C12} 는 각각 독립에 질소 원자, 치환 또는 비치환의 탄소 원자를 나타내며, L^{C11} , L^{C12} 는 연결기를 나타내며, Q^{C11} , Q^{C12} 는 M^{C1} 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

[0205]

상기 [일반식 D-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



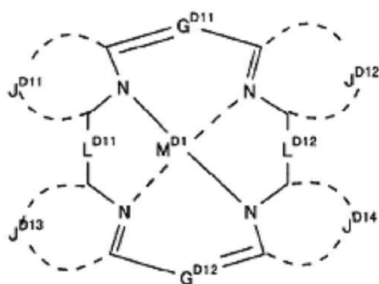
[0206]



[0207]

[0208]

[일반식 E-1]



[0209]

[0210]

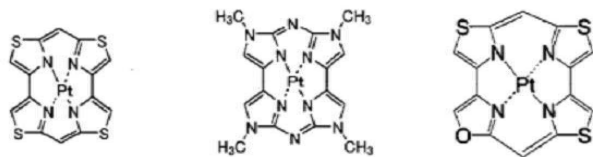
상기 [일반식 E-1]에서,

[0211]

M^{D1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, G^{D11} , G^{D12} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치

환 또는 비치환된 탄소 원자를 나타내며, J^{D11} , J^{D12} , J^{D13} 및 J^{D14} 는 각각 독립에 5 원 고리를 형성하는데도 필요한 원자군을 나타내며, L^{D11} , L^{D12} 는 연결기를 나타낸다.

[0212] 상기 [일반식 E-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0213]

[0214] [일반식 F-1]

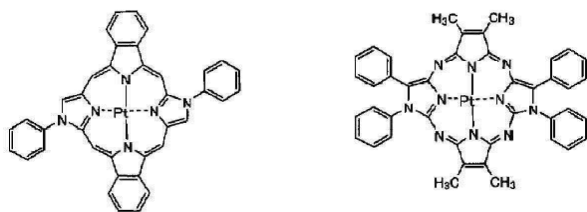


[0215]

[0216] 상기 [일반식 F-1]에서,

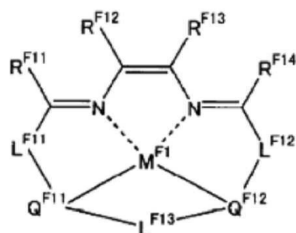
[0217] M^{E1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, J^{E11} , J^{E12} 는 각각 독립적으로 5 원 고리를 형성하는데도 필요한 원자군을 나타내며, G^{E11} , G^{E12} , G^{E13} 및 G^{E14} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소 원자를 나타내며, Y^{E11} , Y^{E12} , Y^{E13} 및 Y^{E14} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소원자를 나타낸다.

[0218] 상기 [일반식 F-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0219]

[0220] [일반식 G-1]



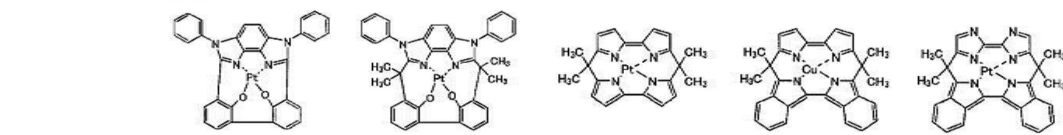
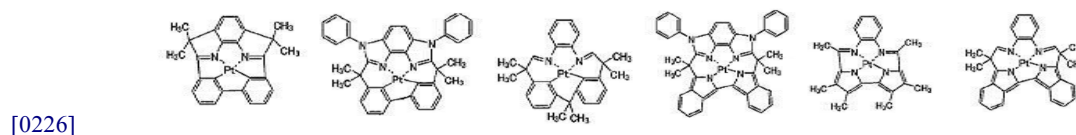
[0221]

[0222] 상기 [일반식 G-1]에서,

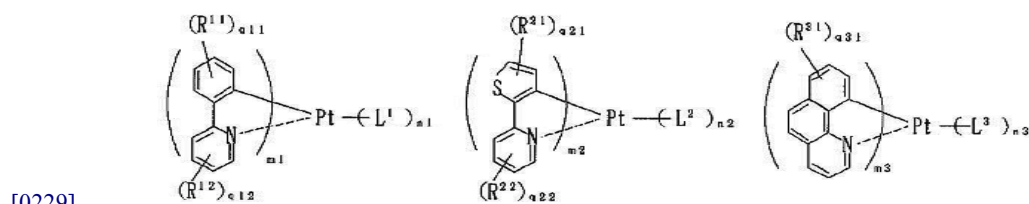
[0223] M^{F1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타낸다.

[0224] L^{F11} , L^{F12} 및 L^{F13} 은 연결기를 나타내며, R^{F11} , R^{F12} , R^{F13} 및 R^{F14} 는 치환기를 나타내고, R^{F11} 과 R^{F12} , R^{F12} 와 R^{F13} , R^{F13} 과 R^{F14} 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 이때 R^{F1} 과 R^{F12} , R^{F13} 과 R^{F14} 가 형성하는 고리는 5 원환이다. 또한 Q^{F11} , Q^{F12} 는 M^{F1} 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

[0225] 상기 [일반식 G-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0228] [일반식 H-1] [일반식 H-2] [일반식 H-3]



[0230] 상기 [일반식 H-1] 내지 [일반식 H-3]에서,

[0231] R^{11} , R^{12} 는 알킬, 아릴 또는 헤테로아릴의 치환기이며; 또한 서로 인접한 치환기와 융합고리를 형성할 수 있고, q_{11} , q_{12} 는 0 내지 4의 정수로서, 바람직하게는 0 내지 2가 될 수 있다.

[0232] 또한, q_{11} , q_{12} 가 2 내지 4인 경우, 복수 개의 R_{11} 및 R_{12} 는 각각 동일하거나 상이할 수 있다.

[0233] L^1 은 백금에 결합하는 리간드로서, 오르토 메탈(ortho metal)화 백금 착체를 형성할수 있는 리간드, 함질소헤테로환 리간드, 디케톤 리간드, 할로겐 리간드가 바람직하고, 보다 바람직하게는 오르토 메탈(ortho metal)화 백금 착체를 형성하는 리간드, 비피리딜 리간드 또는 페난트로린 리간드이다.

[0234] n^1 은 0 내지 3의 정수이며, 바람직하게는 0이고, m^1 은 1 또는 2이고 바람직하게는 2이다.

[0235] 또한, 상기 n^1 , m^1 은 상기 일반식 H-1로 나타나는 금속 착체가 중성 착체가 되도록 하는 것이 바람직하다.

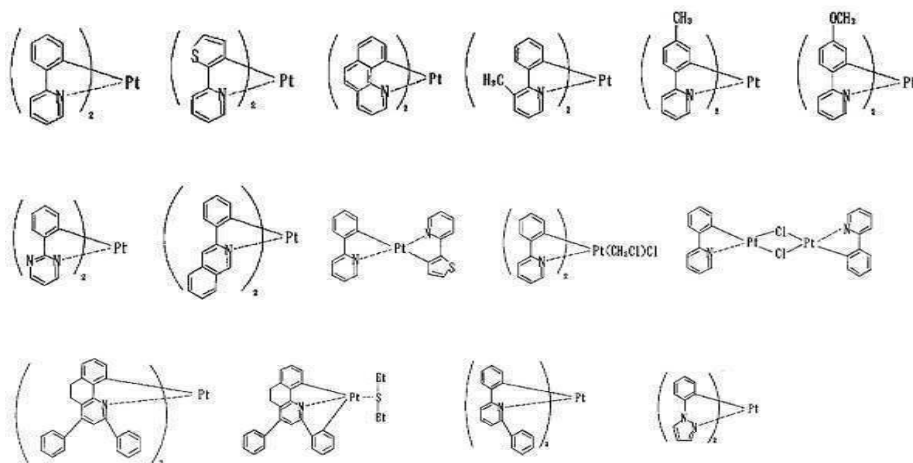
[0236] 상기 [일반식 H-2]에서,

[0237] R^{21} , R^{22} , n^2 , m^2 , q^{22} , L^2 는 각각 상기 R^{11} , R^{12} , n^1 , m^1 , q^{12} , L^1 과 동일하고, q^{21} 은 0 내지 2의 정수이며, 0이 바람직하다.

[0238] 상기 [일반식 H-3]에서,

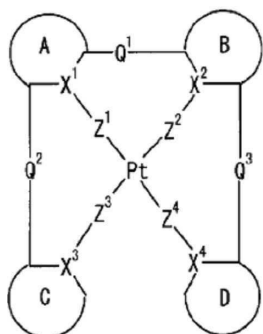
[0239] R^{31} , n^3 , m^3 , L^3 은 각각 상기 R^{11} , n^1 , m^1 , L^1 과 동일하고, q^{31} 은 0 내지 8의 정수를 나타내고, 0 내지 2가 바람직하고, 0이 보다 바람직하다.

[0240] 상기 [일반식 H-1] 내지 [일반식 H-3]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0241]

[0242] [일반식 I-1]

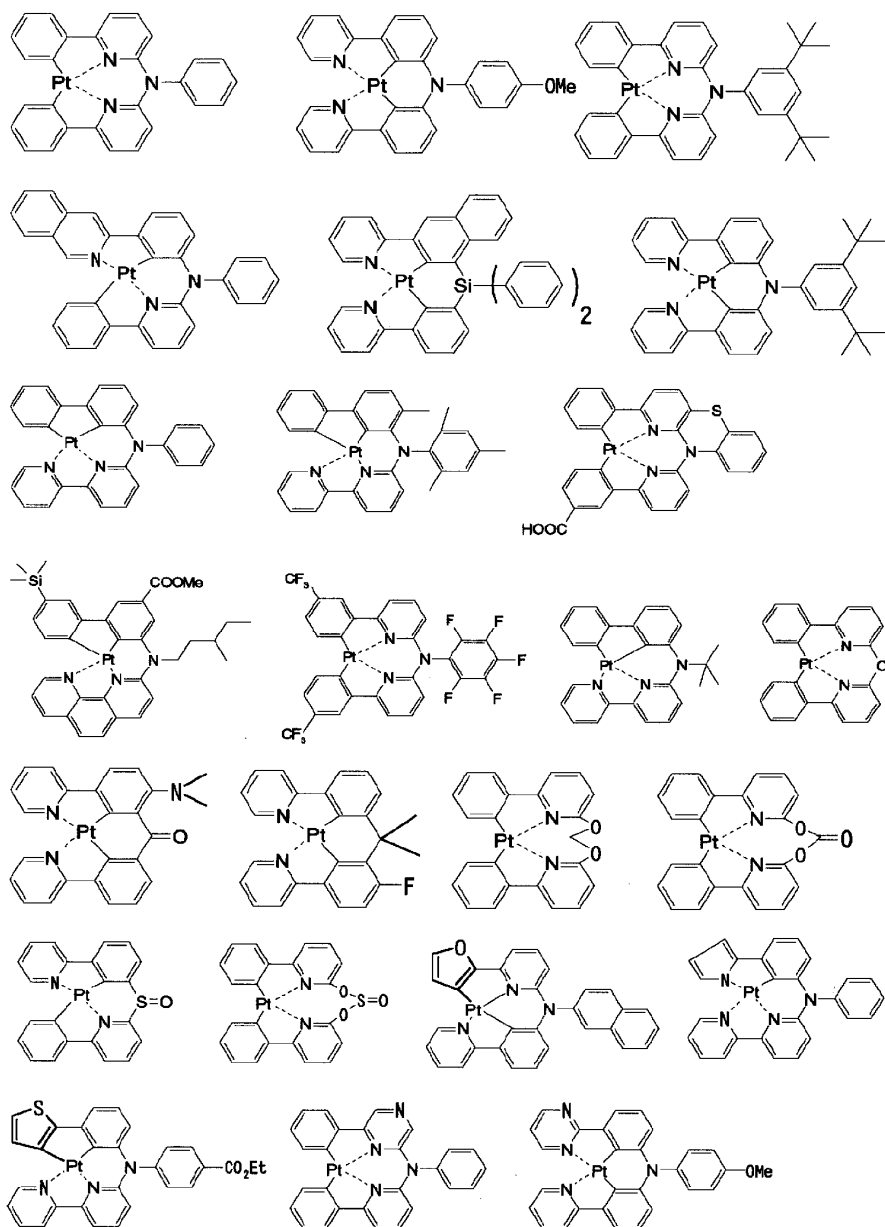


[0243]

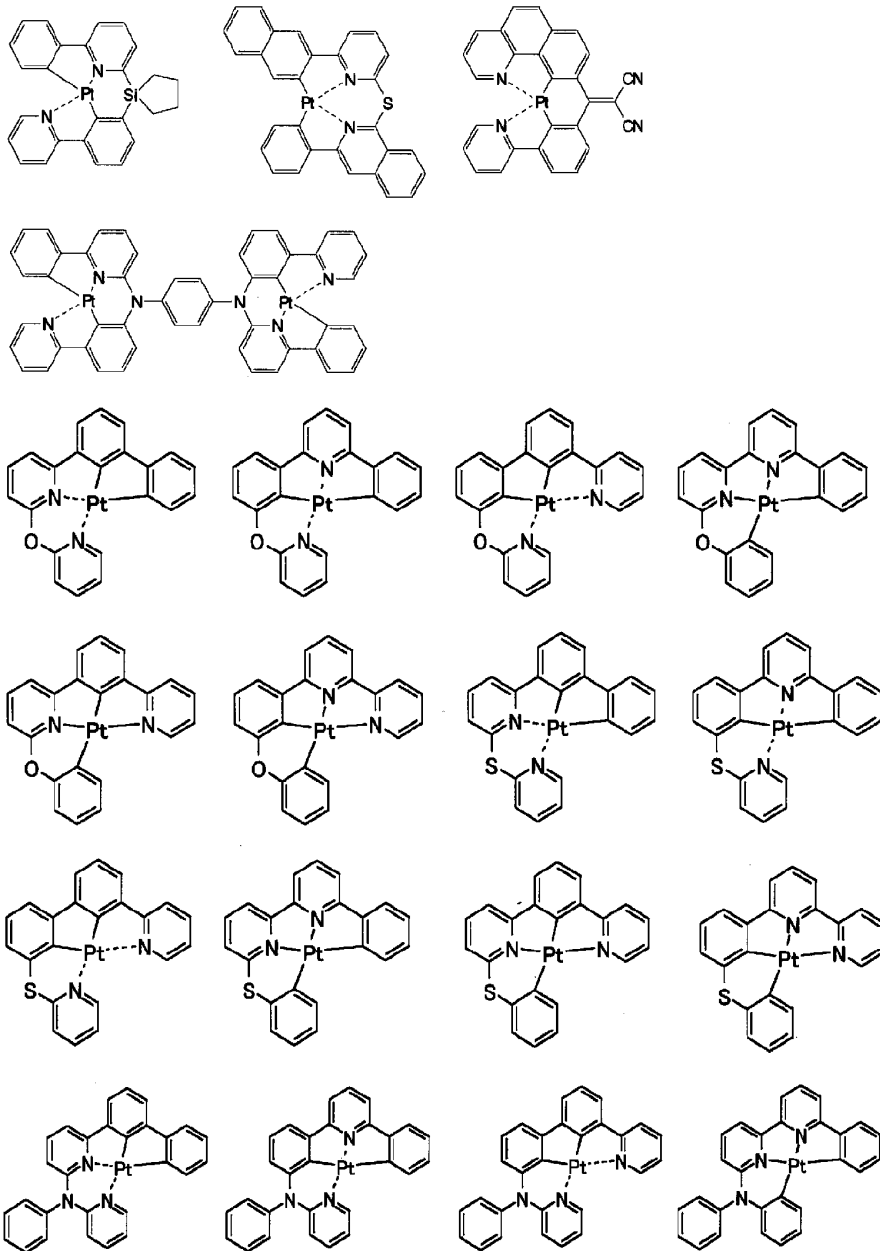
[0244] 상기 [일반식 I-1]에서,

[0245] 고리A, 고리B, 고리C 및 고리D는 상기 고리 A내지 D중의 어느 2개의 고리는 치환기를 가질 수 있는 질소 함유 헤테로고리를 나타내고, 나머지 2개의 환은 고리는 치환기를 가질 수 있는 아릴고리 또는 헤테로아릴고리를 나타내고, 나타내며, 고리A와 고리B, 고리A와 고리C 및/또는 고리B와 고리D로 축합환을 형성할 수 있다. X^1 , X^2 , X^3 및 X^4 는 이 중의 어느 2개가 백금원자에 배위결합하는 질소원자를 나타내고, 나머지 2개는 탄소원자 또는 질소원자를 나타낸다. Q^1 , Q^2 및 Q^3 은 각각 독립적으로 2개의 원자(단) 또는 결합을 나타내지만, Q^1 , Q^2 및 Q^3 이 동시에 결합을 나타내지는 않는다. Z^1 , Z^2 , Z^3 및 Z^4 는 어느 2개가 배위결합을 나타내고, 나머지 2개는 공유결합, 산소원자 또는 황원자를 나타낸다.

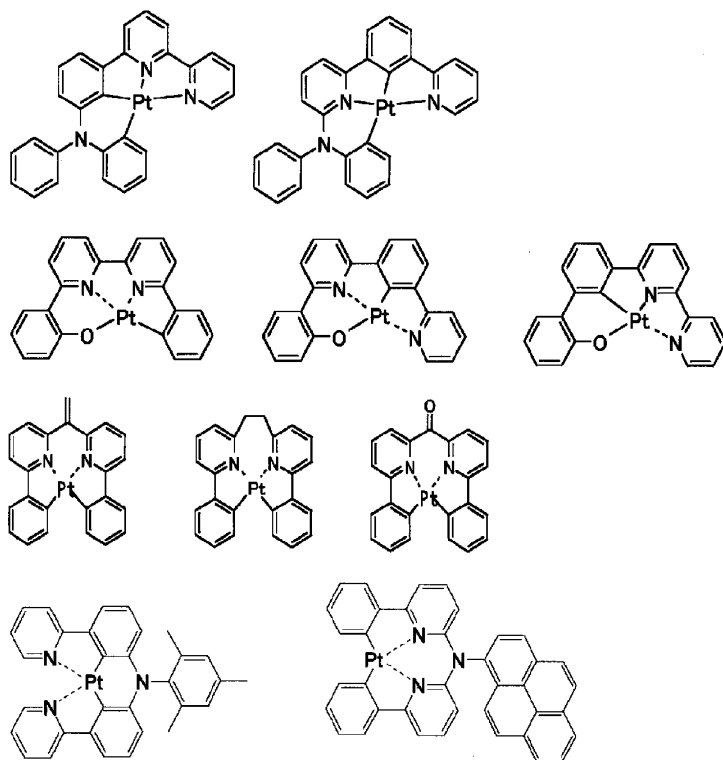
[0246] 상기 [일반식 I-1]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0247]



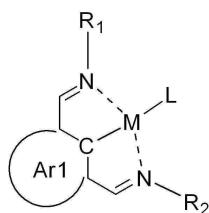
[0248]



[0249]

[0250]

[일반식 J-1]



[0251]

[0252]

상기 [일반식 J-1]에 있어서,

[0253]

M은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, Ar1은 치환 또는 비치환의 고리구조를 표현하고, 상기 M에 결합하는 2개의 아조메틴(azomethine) 결합($-C=N-$)에 있어서, 질소원자(N)는 각각 상기 M에 결합하고, 전체로서 상기 M에 3좌에서 결합되는 3좌 배위자를 형성하고 있다.

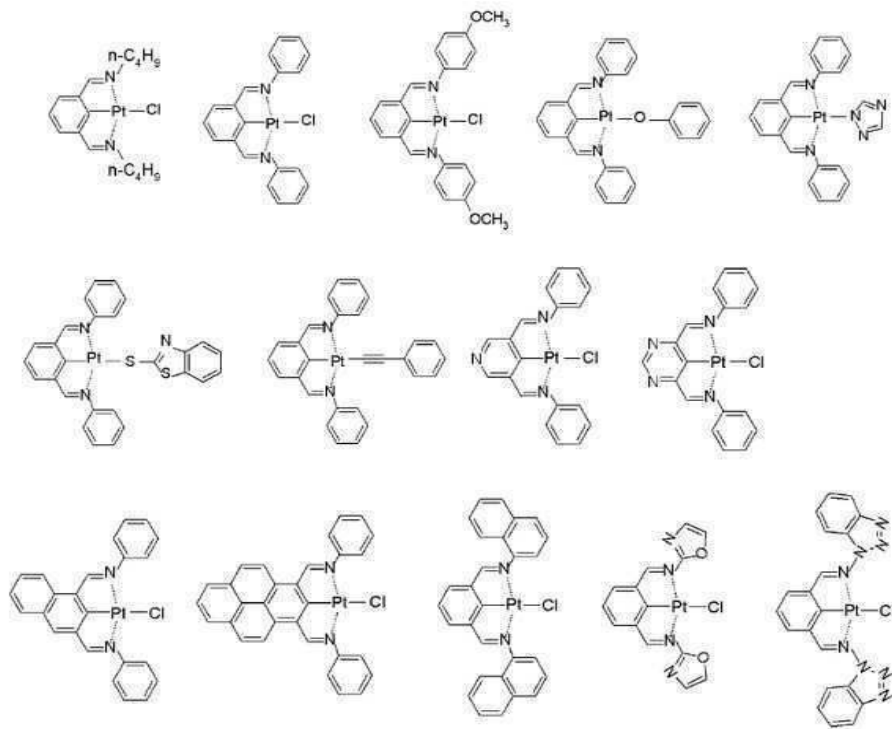
[0254]

또한, Ar1에 있어서 C는 Ar1으로 표시되는 고리구조를 구성하는 탄소원자를 나타낸다. 또한 상기 R1 및 R2는, 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 각각 치환 또는 비치환의 알킬기 또는 아릴기를 나타내며, L은 1좌 배위자를 표현한다.

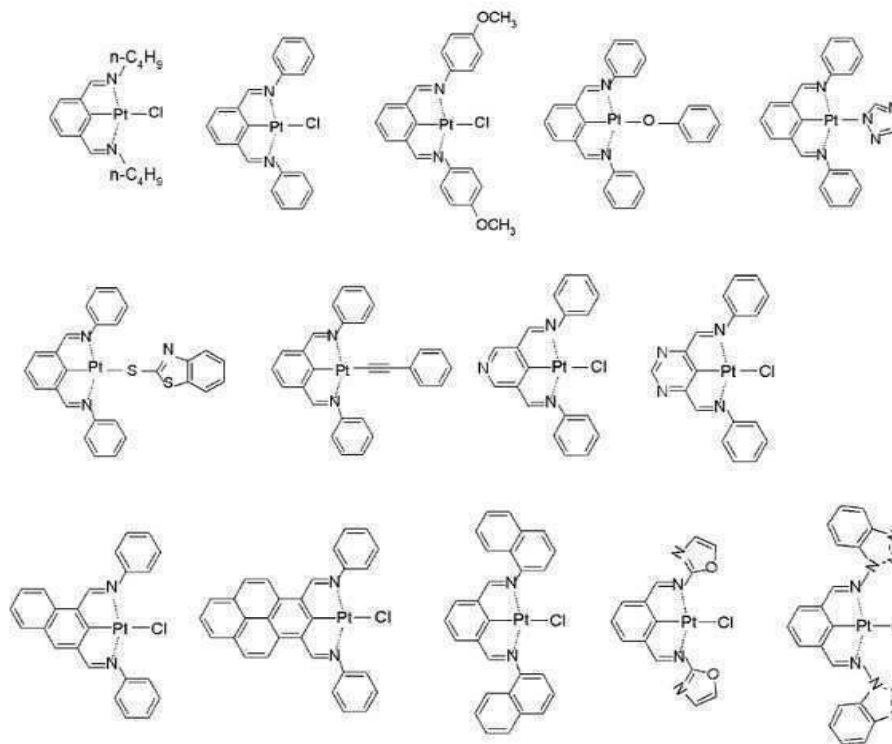
[0255]

상기 [일반식J-1]에 있어서, 상기 M은 Pt인 것이 바람직하다. 또한, 상기 Ar1으로서는, 5원환, 6원환 및 이들의 축합환기부터 선택되는 것이 바람직하다.

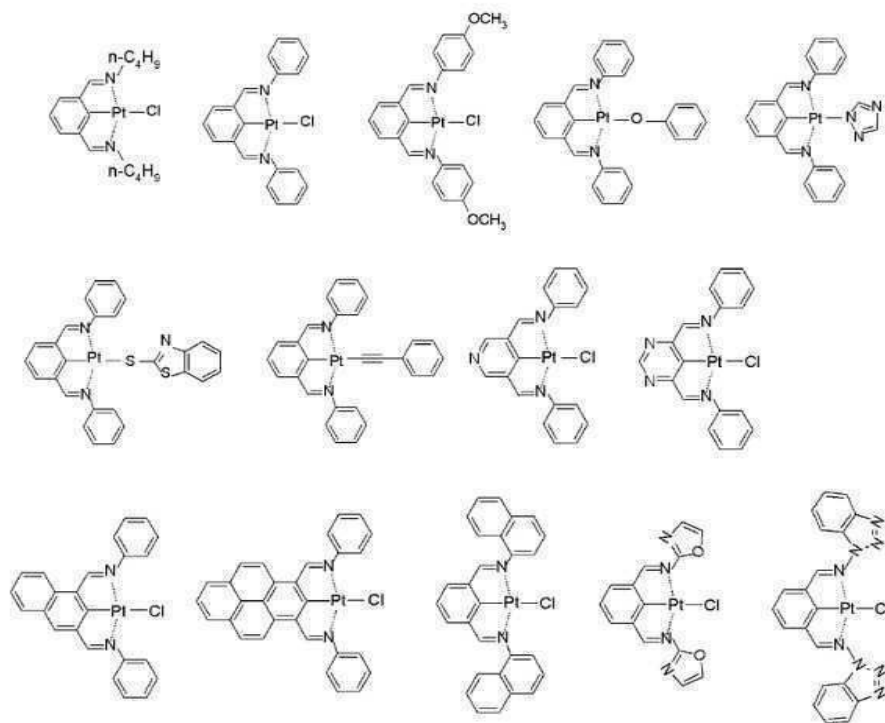
[0256] 상기 [일반식 J-1]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0257]



[0258]



[0259]

[0260]

또한, 상기 유기 박막층은 본 발명에 따른 유기전계발광 화합물과 상기 도판트 화합물 이외에도 다양한 호스트 화합물과 다양한 도판트 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0261]

본 발명의 또 다른 측면은 상기 유기 박막층을 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로서, 상기 유기전계발광 소자 음극과 양극 사이에 발광층을 포함하는 1 이상의 유기 박막층이 협지되어 있고, 유기 박막층의 적어도 한 층이 본 발명에 따른 [화학식 1]의 유기발광 화합물을 단독 또는 혼합물의 성분으로 포함하고, 추가로 상기 예시된 도판트 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0262]

본 발명에 따른 유기전계발광소자는 발광층 외에 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함할 수 있고, 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 발광층 외에, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층, 전자 수송층에 이용할 수도 있다.

[0263]

구체적인 예로서, 정공수송층(HTL, Hole Transport Layer)이 추가로 적층되어 있고, 상기 캐소드와 상기 유기발광층 사이에 전자수송층(ETL, Electron Transport Layer)이 추가로 적층되어 있는 것일 수 있는데, 상기 정공수송층은 애노드로부터 정공을 주입하기 쉽게 하기 위하여 적층되는 것으로서, 상기 정공수송층의 재료로는 이온화 포텐셜이 작은 전자공여성 분자가 사용되는데, 주로 트리페닐아민을 기본 골격으로 하는 디아민, 트리아민 또는 테트라아민 유도체가 많이 사용되고 있다.

[0264]

본 발명에서도 상기 정공수송층의 재료로서 당업계에서 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히 제한되지 않으며, 예를 들어, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD) 또는 N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐 벤지딘(α -NPD) 등을 사용할 수 있다.

[0265]

상기 정공수송층의 하부에는 정공주입층(HIL, Hole Injecting Layer)을 추가적으로 더 적층할 수 있는데, 상기 정공주입층 재료 역시 당업계에서 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있으며, 예를 들어 CuPc(copper phthalocyanine) 또는 스타버스트(Starburst)형 아민류인 TCTA(4,4',4"-tri(N-carbazolyl)triphenyl-amine), m-MTDATA(4,4',4"-tris-(3-methylphenylphenylamino)triphenylamine)등을 사용할 수 있다.

[0266]

또한, 본 발명에 따른 유기전계발광소자에 사용되는 상기 전자수송층은 캐소드로부터 공급된 전자를 유기발광층으로 원활히 수송하고 상기 유기발광층에서 결합하지 못한 정공의 이동을 억제함으로써 발광층 내에서 재결합할 수 있는 기회를 증가시키는 역할을 한다.

[0267]

상기 전자수송층 재료로는 당 기술분야에서 통상적으로 사용되는 것이면 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있음

은 물론이며, 예를 들어 옥사디아졸 유도체인 PBD, BMD, BND 또는 Alq3 등을 사용할 수 있다.

[0268] 한편, 상기 전자수송층의 상부에는 캐소드로부터의 전자 주입을 용이하게 해주어 궁극적으로 파워효율을 개선시키는 기능을 수행하는 전자주입층(EIL, Electron Injecting Layer)을 더 적층시킬 수도 있는데, 상기 전자주입층 재료 역시 당 기술분야에서 통상적으로 사용되는 것이면 특별한 제한없이 사용할 수 있으며, 예를 들어, LiF, NaCl, CsF, Li2O, BaO 등의 물질을 이용할 수 있다.

[0269] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 표시소자, 디스플레이 소자 및 단색 또는 백색 조명용 소자 등에 사용될 수 있다.

[0270] 도 1은 본 발명의 유기전계발광소자의 구조를 나타내는 단면도이다. 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 애노드(20), 정공수송층(40), 유기발광층(50), 전자수송층(60) 및 캐소드(80)를 포함하며, 필요에 따라 정공주입층(30)과 전자주입층(70)을 더 포함할 수 있으며, 그 이외에도 1층 또는 2층의 중간층을 더 형성하는 것도 가능하며, 정공저지층 또는 전자저지층을 더 형성시킬 수도 있다.

[0271] 도 1을 참조하여 본 발명의 유기전계발광소자 및 그 제조방법에 대하여 살펴보면 다음과 같다. 먼저 기판(10) 상부에 애노드 전극용 물질을 코팅하여 애노드(20)를 형성한다. 여기에서 기판(10)으로는 통상적인 유기 EL 소자에서 사용되는 기판을 사용하는데 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유기 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 그리고, 애노드 전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO2), 산화아연(ZnO) 등을 사용한다.

[0272] 상기 애노드(20) 전극 상부에 정공 주입층 물질을 진공열 증착, 또는 스핀 코팅하여 정공주입층(30)을 형성한다. 그 다음으로 상기 정공주입층(30)의 상부에 정공수송층 물질을 진공 열증착 또는 스핀 코팅하여 정공수송층(40)을 형성한다.

[0273] 이어서, 상기 정공수송층(40)의 상부에 유기발광층(50)을 적층하고 상기 유기발광층(50)의 상부에 선택적으로 정공저지층(미도시)을 진공 증착 방법, 또는 스핀 코팅 방법으로서 박막을 형성할 수 있다. 상기 정공저지층은 정공이 유기발광층을 통과하여 캐소드로 유입되는 경우에는 소자의 수명과 효율이 감소되기 때문에 HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital) 레벨이 매우 낮은 물질을 사용함으로써 이러한 문제를 방지하는 역할을 한다. 이 때, 사용되는 정공 저지 물질은 특별히 제한되지는 않으나 전자수송능력을 가지면서 발광 화합물보다 높은 이온화 포텐셜을 가져야 하며 대표적으로 BAlq, BCP, TPBI 등이 사용될 수 있다.

[0274] 이러한 정공저지층 위에 전자수송층(60)을 진공 증착 방법, 또는 스핀 코팅 방법을 통해 증착한 후에 전자주입층(70)을 형성하고 상기 전자주입층(70)의 상부에 캐소드 형성용 금속을 진공 열증착하여 캐소드(80) 전극을 형성함으로써 유기 EL 소자가 완성된다. 여기에서 캐소드 형성용 금속으로는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 사용할 수 있으며, 전면 발광 소자를 얻기 위해서는 ITO, IZO를 사용한 투과형 캐소드를 사용할 수 있다.

[0275] 또한, 본 발명의 다른 일실시예에 의하면, 상기 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로부터 선택된 하나 이상의 층은 단분자 증착방식 또는 용액공정에 의하여 형성될 수 있으며, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 표시소자, 디스플레이 소자 및 단색 또는 백색 조명용 소자에 사용될 수 있다.

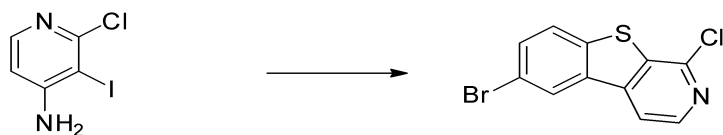
[0276] 이하, 바람직한 실시예를 들어 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다. 그러나, 이들 실시예는 본 발명을 보다 구체적으로 설명하기 위한 것으로, 본 발명의 범위가 이에 의하여 제한되지 않고, 본 발명의 범주 및 기술사상 범위 내에서 다양한 변경 및 수정이 가능함은 당업계의 통상의 지식을 가진 자에게 자명할 것이다.

[0277] <화학식 2>의 합성

[0278] 1-(1) 1-a의 합성

[0279] 하기 반응식 1에 의하여 <1-a>를 합성하였다.

[0280] [반응식 1]



[0281]

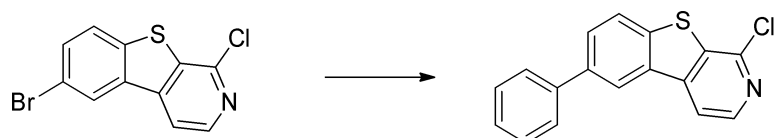
[0282] <1-a>

[0283] 1000 mL의 둥근바닥 플라스크에 2-클로로-3-요오드-4-아미노피리딘(15 g, 58.5 mmol), 4-브로모티오페놀(10.5 g, 51 mmol), 요오드화구리(0.8 g, 4 mmol), 에틸렌글리콜(7.8 g, 156 mmol)을 이소프로판올 500 mL에 희석한 후 상온에서 30 분간 교반해준 후 탄산칼륨(21.6 g, 148 mmol)을 넣고 질소분위기 하에서 24 시간 동안 환류하여 반응하였다. 반응 종료 후 용매를 제거한 후 아세트산 500 mL에 희석한 후 t-부틸 나이트라이트 (11.5 g, 110 mmol)을 넣고 밤새 교반 해준다. 반응종료 후 반응액을 물에 부어준 후 생성된 고체를 걸름 정제하여 목적물 9 g(수율 51%)을 얻었다.

[0284] 1-(2) 1-b의 합성

[0285] 하기 반응식 2에 의하여 <1-b>를 합성하였다.

[0286] [반응식 2]



[0287]

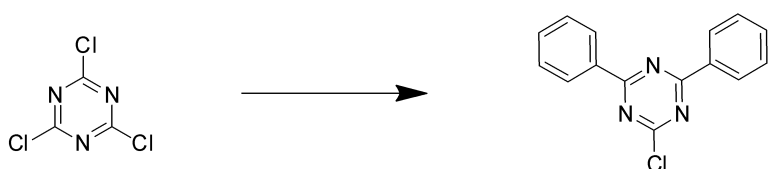
[0288] <1-b>

[0289] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 반응식 1로부터 얻은 <1-a> (10 g, 33 mmol), 페닐보론산 (4.08 g, 33 mmol), 탄산칼륨 (9.26 g, 66 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 (1.94 g, 1 mmol), 물 60 mL, 톨루엔 150 mL 및 테트라하이드로퓨란 150 mL를 투입하고 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면, 반응의 결과물을 층 분리하여 수층을 제거하고 유기층을 분리하여 감압농축한 후, 메탄올을 이용해 결정을 석출시키고 여과하여 목적물 5.2 g (수율 51%)을 얻었다.

[0290] 1-(3) 1-c의 합성

[0291] 하기 반응식 3에 의하여 <1-c>를 합성하였다.

[0292] [반응식 3]



[0293]

[0294] <1-c>

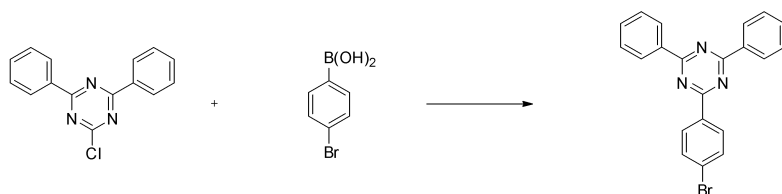
[0295] 1000 mL의 둥근 바닥 플라스크에 마그네슘(24.3 g, 0.935 mol), 요오드 1 g, 에테르 150 mL를 넣고 녹인 후 브로모벤젠(155.3 g, 0.985 mol)을 넣어준 후 2시간 동안 환류하여 용액1을 준비한다. 1 L의 둥근 바닥 플라스크에 사이아누릭 클로라이드 (70 g, 0.38 mol)을 에테르 300 mL에 녹인 후 10 ℃로 냉각한 후 용액 1을 1시간 동안 천천히 넣어준 후 4시간 동안 환류한다. 반응종료 후 고체를 걸러낸 후 여액을 감압증류 한 후 헥산으로 재결정

하여 목적물 46.1g (수율 45%)이다.

[0296] 1-(4) 1-d의 합성

[0297] 하기 반응식 4에 의하여 <1-d>를 합성하였다.

[0298] [반응식 4]



[0299]

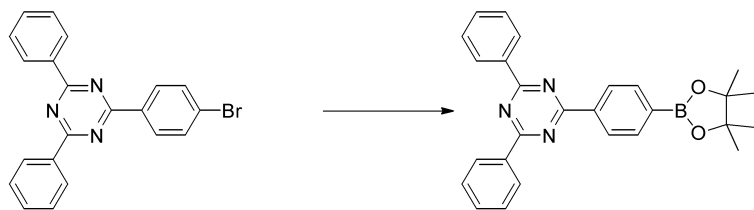
[0300] <1-d>

[0301] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 반응식 3로부터 얻은 <1-c> (10 g, 37 mmol), 브로모페닐보론산 (7.5 g, 37mmol), 탄산칼륨 (10.33 g, 75 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 (0.86 g, 1 mmol), 물 60 mL, 톨루엔 100 mL 및 테트라하이드로퓨란 100 mL를 투입하고 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 상온으로 냉각한 후 메탄올을 이용해 결정을 석출시키고 여과하여 목적물 14 g(수율 96.5%)을 얻었다.

[0302] 1-(5) 1-e의 합성

[0303] 하기 반응식 5에 의하여 <1-e>를 합성하였다.

[0304] [반응식 5]



[0305]

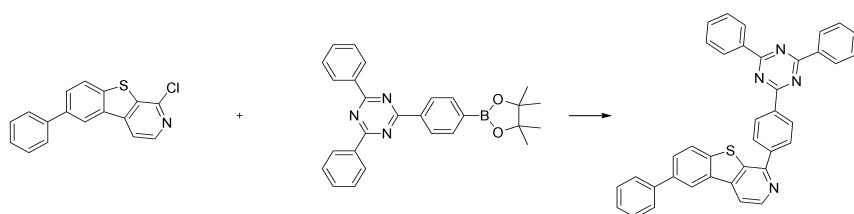
[0306] <1-e>

[0307] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 반응식 4로부터 얻은 <1-d> (14 g, 36 mmol), 비스피나콜라토 디보론 (11 g, 43 mmol), 팔라듐(II) 염화-1,1'-비스(다이페닐포스포노)페로센 (0.9 g, 1 mmol), 칼륨아세테이트 (7.1 g, 72 mmol), 톨루엔 150 mL를 넣고 5시간 동안 환류한다. 반응종료 후 고체를 걸러낸 후 여액을 감압하여 농축한 후 컬럼분리하여 목적물 12 g(수율 76.4%)를 얻었다.

[0308] 1-(6) <화학식 2>의 합성

[0309] 하기 반응식 6에 의하여 <화학식 2>를 합성하였다.

[0310] [반응식 6]



[0311]

[0312] <화학식 2>

[0313] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 반응식 2로부터 얻은 <1-b> (5g, 17mmol), 반응식 4로부터 얻은 <1-d> (8.22g, 20mmol), 탄산칼륨 (4.67g, 34mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 (0.39g, 1mmol) 물 60 mL, 톨루엔 100 mL 및 테트라하이드로퓨란 100 mL를 투입하고 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 상온으로 냉각한 후 메탄올을 이용해 결정을 석출시키고 여과하여 목적물 5.3g (수율 55.1%)을 얻었다.

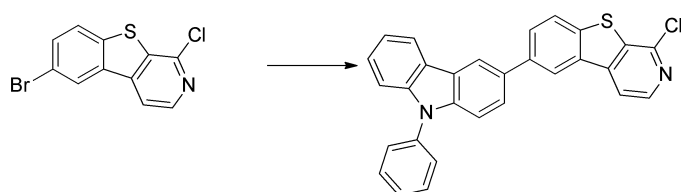
[0314] MS(MALDI-TOF) : m/z 568.17 [M]⁺ Anal. Calc. for C₃₈H₂₄N₄S C, 80.26; H, 4.25; N, 9.85; S, 5.64 Found C, 80.27; H, 4.23; N, 9.84; S, 5.64

[0315] <화학식 6>의 합성

[0316] 2-(1) 2-a의 합성

[0317] 하기 반응식 7에 의하여 <1-a>를 합성하였다.

[0318] [반응식 7]



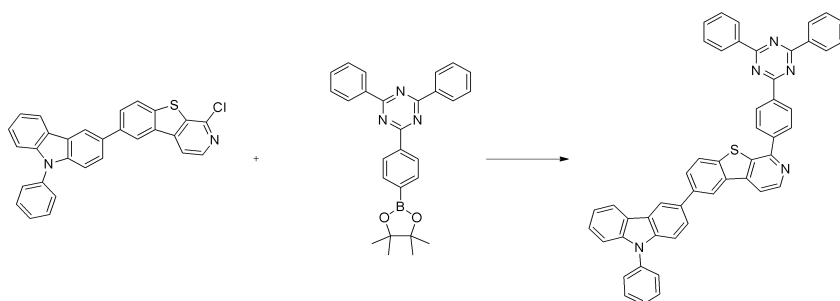
[0319] <2-a>

[0321] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 반응식 1로부터 얻은 <1-a> (10 g, 33 mmol), 페닐카바졸 보론산 (9.47 g, 33 mmol), 탄산칼륨 (9.26 g, 66 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 (1.94 g, 1 mmol) 물 60 mL, 톨루엔 150 mL 및 테트라하이드로퓨란 150 mL를 투입하고 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면, 반응의 결과물을 층 분리하여 수층을 제거하고 유기층을 분리하여 감압농축한 후, 메탄올을 이용해 결정을 석출시키고 여과하여 목적물 10.1g (수율 66%)을 얻었다.

[0322] 2-(2) <화학식 6>의 합성

[0323] 하기 반응식 8에 의하여 <화학식 6>를 합성하였다.

[0324] [반응식 8]



[0325] <화학식 6>

[0327] 반응식 6에서 사용된 <1-b> 대신 <2-a>을 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <화학식> 5.17g (수율 65%)을 얻었다.

[0328] MS(MALDI-TOF) : m/z 733.23 [M]⁺ Anal. Calc. for C₅₀H₃₁N₅S C, 81.83; H, 4.26; N, 9.54; S, 4.37 Found

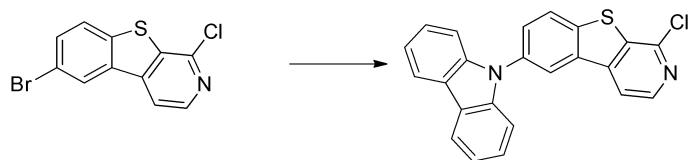
C, 81.85; H, 4.28; N, 9.52; S, 4.35

[0329] <화학식 30>의 합성

[0330] 3-(1) 3-a의 합성

[0331] 하기 반응식 9에 의하여 <3-a>를 합성하였다.

[0332] [반응식 9]



[0333]

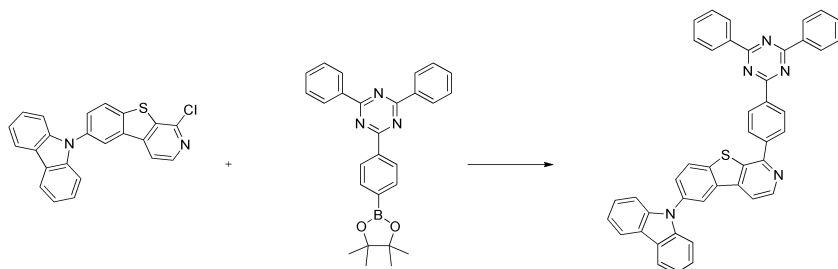
[0334] <3-a>

[0335] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 반응식1로부터 얻은 <1-a> (10 g, 33 mmol), 카르바졸 (16.68 g, 99 mmol), Pd2(dba)3(3.06 g, 3.32 mmol), 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐(5.56 g, 13.34 mmol), 나트륨 t-부톡시드(19.18 g, 200 mmol) 및 600 mL의 자이렌에 희석한 후 질소 분위기 하에서 밤새 환류 교반하였다. 반응종료 후 용매를 감압하여 제거한 후 컬럼분리하여 목적물 5.8g(수율 45%)을 얻었다.

[0336] 3-(2) <화학식 30>의 합성

[0337] 하기 반응식 10에 의하여 <화학식 30>를 합성하였다.

[0338] [반응식 10]



[0339]

[0340] <화학식 30>

[0341] 반응식 6에서 사용된 <1-b> 대신 <3-a>을 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <화학식 30> 8.47g (수율 62%)을 얻었다.

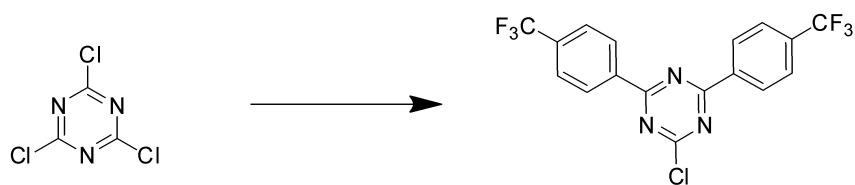
[0342] MS(MALDI-TOF) : m/z 733.23 [M]⁺ Anal. Calc. for C₄₄H₂₇N₅S C, 80.34; H, 4.14; N, 10.65; S, 4.87 Found C, 80.32; H, 4.12; N, 10.67; S, 4.89

[0343] <화학식 65>의 합성

[0344] 4-(1) 4-a의 합성

[0345] 하기 반응식 11에 의하여 <4-a>를 합성하였다.

[0346] [반응식 11]



[0347]

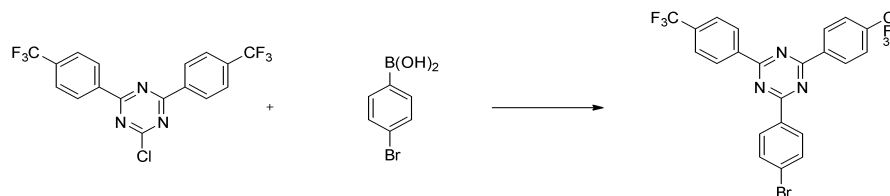
[0348] <4-a>

[0349] 반응식 3에서 사용된 브로모벤젠 대신 1-브로모-4-트리플루오로메틸벤젠을 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 합성하여 목적물 24g (수율 43%)을 얻었다.

[0350] 4-(2) 4-b의 합성

[0351] 하기 반응식 12에 의하여 <4-b>를 합성하였다.

[0352] [반응식 12]



[0353]

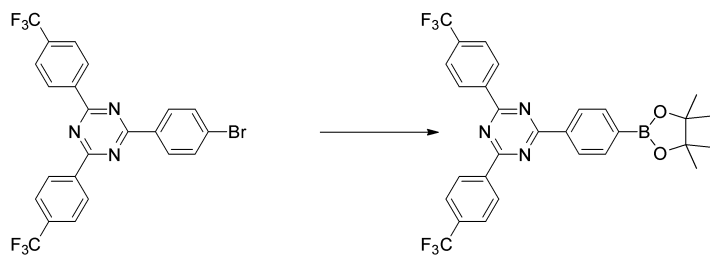
[0354] <4-b>

[0355] 반응식 4에서 사용된 <1-c> 대신 반응식 9에서 합성한 <4-a>를 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 합성하여 목적물 14g<수율 90%>를 얻었다.

[0356] 4-(3) 4-c의 합성

[0357] 하기 반응식 13에 의하여 <4-c>를 합성하였다.

[0358] [반응식 13]



[0359]

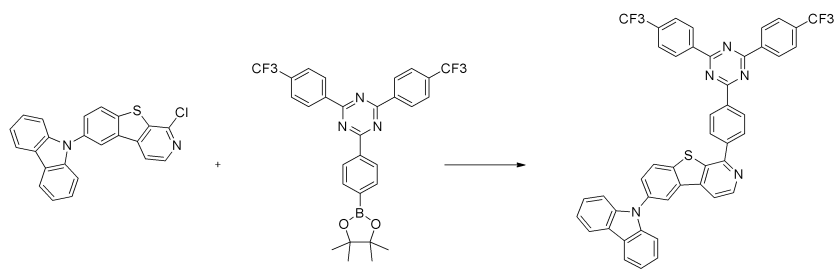
[0360] <4-c>

[0361] 반응식 6에서 사용된 <1-d> 대신 <4-b>를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 목적물 14g (수율 72%)을 얻었다.

[0362] 4-(4) <화학식 65>의 합성

[0363] 하기 반응식 14에 의하여 <화학식 65>를 합성하였다.

[0364] [반응식 14]



[0365]

[0366] <화학식 65>

[0367] 반응식 8에서 사용된 <1-e> 대신 <4-c>을 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <화학식> 5.47g (수율 52%)을 얻었다.

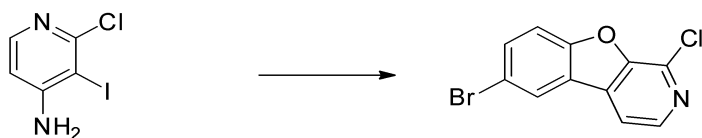
[0368] MS(MALDI-TOF) : m/z 793.17 $[M]^+$ Anal. Calc. for $C_{46}H_{25}F_6N_5S$ C, 69.60; H, 3.17; F, 14.36; N, 8.82; S, 4.04 Found C, 69.59; H, 3.16; F, 14.35; N, 8.84; S, 4.05

[0369] <화학식 82>의 합성

[0370] 5-(1) 5-a의 합성

[0371] 하기 반응식 15에 의하여 <5-a>를 합성하였다.

[0372] [반응식 15]



[0373]

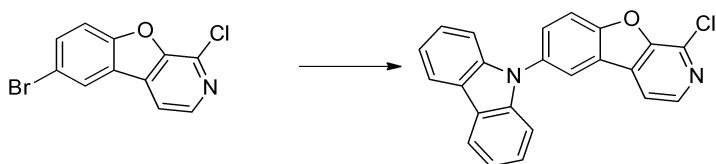
[0374] <5-a>

[0375] 반응식 1에서 사용된 4-브로모티오페놀 대신 4-브로모페놀을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 목적물 6.2g (수율 34%)을 얻었다.

[0376] 5-(2) 5-b의 합성

[0377] 하기 반응식 16에 의하여 <5-b>를 합성하였다.

[0378] [반응식 16]



[0379]

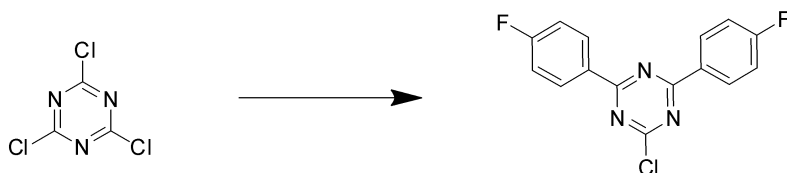
[0380] <5-b>

[0381] 반응식 9에서 사용된 <1-a> 대신 <5-a>를 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 합성하여 목적물 4.5g (수율 52%)을 얻었다.

[0382] 5-(3) 5-c의 합성

[0383] 하기 반응식 17에 의하여 <5-c>를 합성하였다.

[0384] [반응식 17]



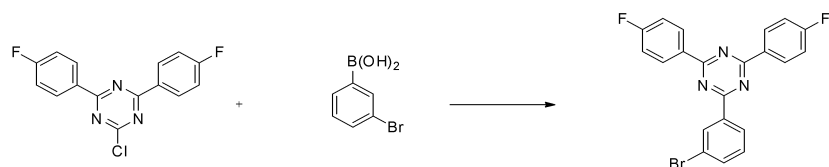
[0385] <5-c>

[0387] 반응식 3에서 사용된 브로모벤젠 대신 1-브로모-4-트리플루오로메틸벤젠을 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 합성하여 목적물 24g (수율 43%)을 얻었다.

[0388] 5-(4) 5-d의 합성

[0389] 하기 반응식 18에 의하여 <5-d>를 합성하였다.

[0390] [반응식 18]



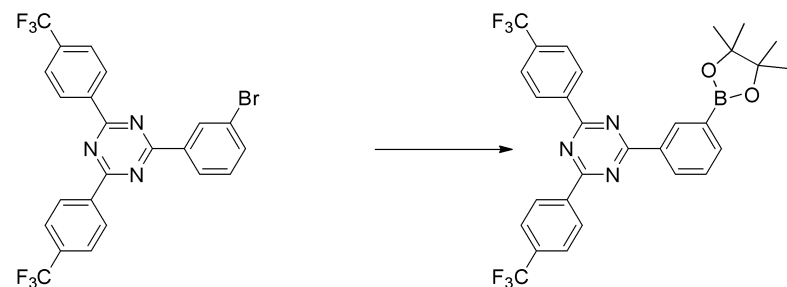
[0391] <5-d>

[0393] 반응식 4에서 사용된 <1-c> 대신 <5-c>를 사용한 것과 4-브로모페닐보론산 대신 3-브로모페닐보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 목적물 12g<수율 90%>를 얻었다.

[0394] 5-(5) 5-e의 합성

[0395] 하기 반응식 19에 의하여 <5-e>를 합성하였다.

[0396] [반응식 19]



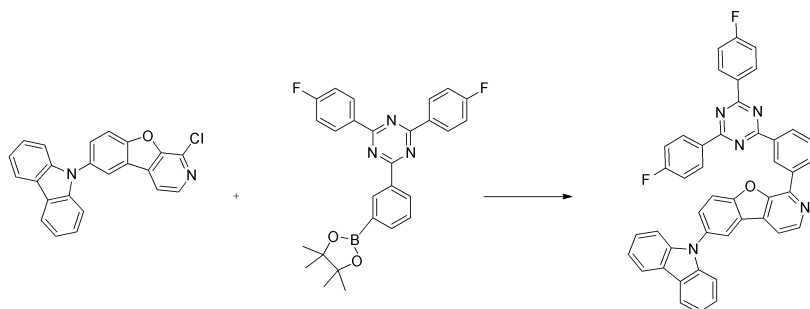
[0397] <5-e>

[0399] 반응식 6에서 사용된 <1-d> 대신 <5-d>를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 목적물 13g (수율 72%)을 얻었다.

[0400] 5-(6) <화학식 82>의 합성

[0401] 하기 반응식 20에 의하여 <화학식 82>를 합성하였다.

[0402] [반응식 20]



[0403]

[0404] <화학식 65>

[0405] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 반응식 16로부터 얻은 <5-b> (5g, 14mmol), 반응식 19로부터 얻은 <5-e> (7.67g, 16mmol), 탄산칼륨 (3.75g, 27mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 (0.31g, 1mmol) 물 60 mL, 톨루엔 100 mL 및 테트라하이드로퓨란 100 mL를 투입하고 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 상온으로 냉각한 후 메탄올을 이용해 결정을 석출 시키고 여과하여 목적물 5.3g (수율 57.3%)을 얻었다.

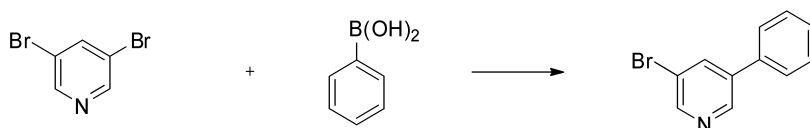
[0406] MS(MALDI-TOF) : m/z 568.17 [M]⁺ Anal. Calc. for C₃₈H₂₄N₄S C, 80.26; H, 4.25; N, 9.85; S, 5.64 Found C, 80.27; H, 4.23; N, 9.84; S, 5.64

[0407] <화학식 91>의 합성

[0408] 6-(1) 6-a의 합성

[0409] 하기 반응식 21에 의하여 <6-a>를 합성하였다.

[0410] [반응식 21]



[0411]

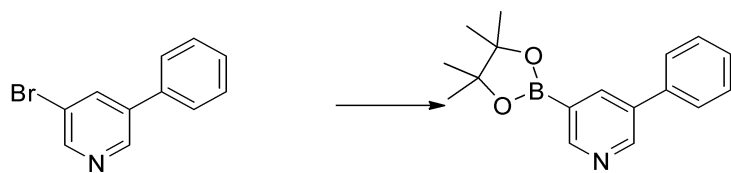
[0412] <6-a>

[0413] 2000 mL의 둥근 바닥 플라스크에 3,5-다이브로모피리딘(30g, 127mmol), 페닐보론산 (18.53g, 152mmol), 탄산칼륨 (35.01g, 253mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 (2.93g, 1mmol) 물 200 mL, 톨루엔 300 mL 및 테트라하이드로퓨란 300 mL를 투입하고 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 상온으로 냉각한 후 메탄올을 이용해 결정을 석출 시키고 여과하여 목적물 20g (수율 67.5%)을 얻었다.

[0414] 6-(2) 6-b의 합성

[0415] 하기 반응식 22에 의하여 <6-b>를 합성하였다.

[0416] [반응식 22]



[0417]

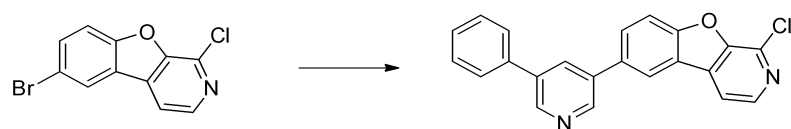
[0418] <6-b>

[0419] 반응식 5에서 사용된 <1-d> 대신 <6-a>을 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 목적물 18.47g (수율 82%)을 얻었다.

[0420] 6-(3) 6-c의 합성

[0421] 하기 반응식 23에 의하여 <6-c>를 합성하였다.

[0422] [반응식 23]



[0423]

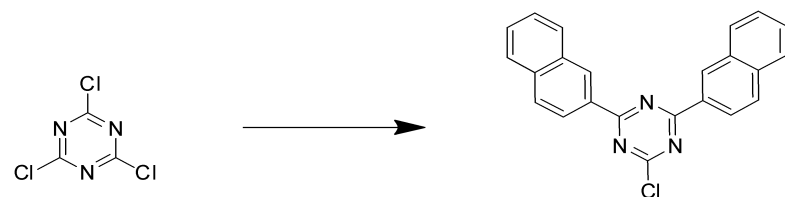
[0424] <6-c>

[0425] 500 mL의 둥근바닥 플라스크에 <5-a> (10 g, 35 mmol), <5-b> (9.95 g, 35 mmol), 탄산칼륨 (9.078 g, 71 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 (0.82 g, 1 mmol) 물 50 mL, 톨루엔 100 mL 및 테트라하이드로퓨란 100 mL를 투입하고 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 상온으로 냉각한 후 메탄올을 이용해 결정을 석출시키고 여과하여 목적물 6.3g (수율 50%)을 얻었다.

[0426] 6-(4) 6-d의 합성

[0427] 하기 반응식 24에 의하여 <6-d>를 합성하였다.

[0428] [반응식 24]



[0429]

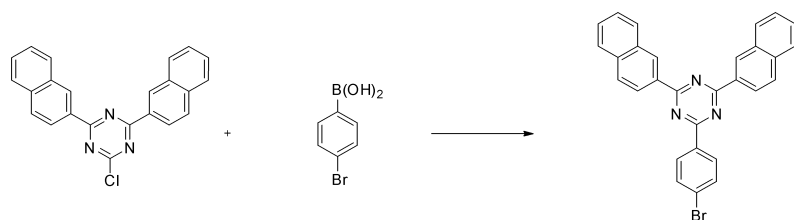
[0430] <6-d>

[0431] 반응식 3에서 사용된 브로모벤젠 대신 2-브로모나프탈렌을 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 합성하여 목적물 15g (수율 44%)을 얻었다.

[0432] 6-(5) 6-e의 합성

[0433] 하기 반응식 25에 의하여 <6-e>를 합성하였다.

[0434] [반응식 25]



[0435]

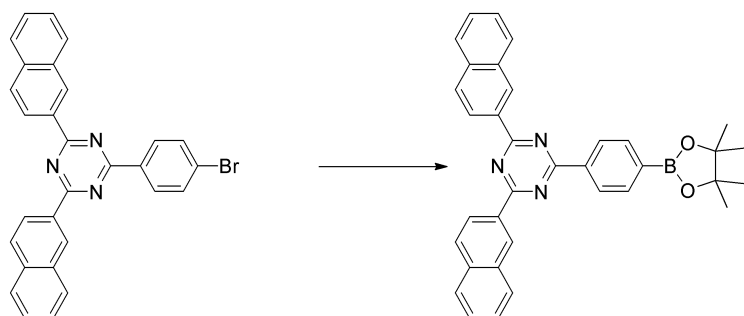
[0436] <6-e>

[0437] 반응식 4에서 사용된 <1-c> 대신 <5-c>를 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 합성하여 목적물 17g(수율 90%)을 얻었다.

[0438] 6-(6) 6-f의 합성

[0439] 하기 반응식 26에 의하여 <6-f>를 합성하였다.

[0440] [반응식 26]



[0441]

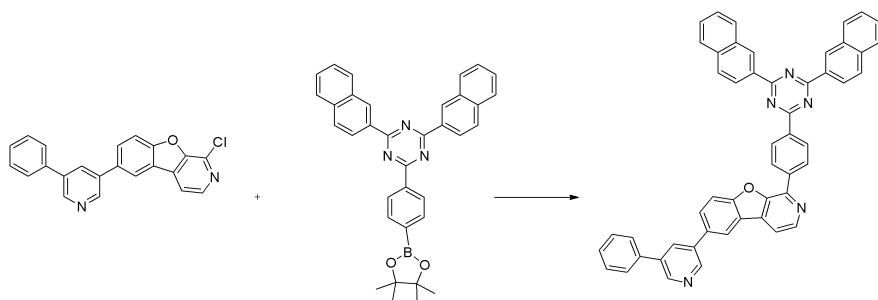
[0442] <6-f>

[0443] 반응식 6에서 사용된 <1-d> 대신 <6-e>을 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 목적물 13g (수율 67%)을 얻었다.

[0444] 6-(7) <화학식 91>의 합성

[0445] 하기 반응식 27에 의하여 <화학식 91>를 합성하였다.

[0446] [반응식 27]



[0447]

[0448] <화학식 91>

[0449] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 반응식 23으로부터 얻은 <6-c> (6 g, 17 mmol), 반응식 26으로부터 얻은 <6-f> (10.8 g, 20 mmol), 탄산칼륨 (4.65 g, 34 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 (0.39 g, 2mmol) 물 20 mL,

톨루엔 100 mL 및 테트라하이드로퓨란 100 mL를 투입하고 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 상온으로 냉각한 후 메탄올을 이용해 결정을 석출시키고 여과하여 목적물 8.4g (수율 68.4%)을 얻었다.

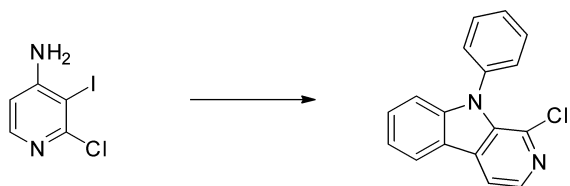
[0450] MS(MALDI-TOF) : m/z 729.25 $[M]^+$ Anal. Calc. for $C_{51}H_{31}N_5O$ C, 83.93; H, 4.28; N, 9.60; O, 2.19 Found C, 83.95; H, 4.30; N, 9.58; O, 2.17

[0451] <화학식 133>의 합성

[0452] 7-(1) 7-a의 합성

[0453] 하기 반응식 28에 의하여 <7-a>를 합성하였다.

[0454] [반응식 28]



[0455]

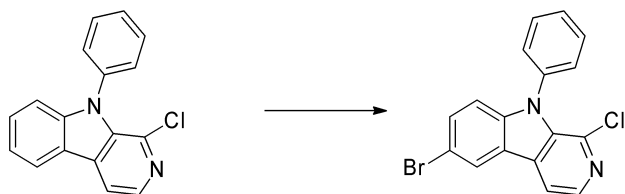
[0456] <7-a>

[0457] 반응식 1에서 사용한 4-브로모티오페놀 대신 다이페닐아민을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 실험하여 목적물 15g(수율 20%)를 얻었다.

[0458] 7-(2) 7-b의 합성

[0459] 하기 반응식 29에 의하여 <7-b>를 합성하였다.

[0460] [반응식 29]



[0461]

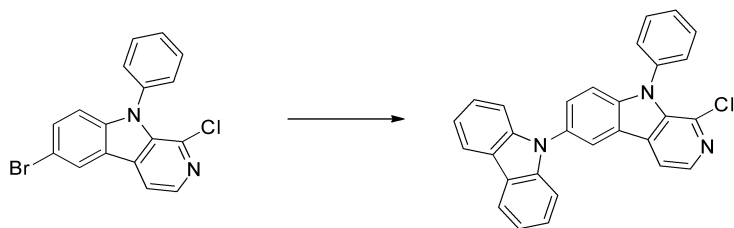
[0462] <7-b>

[0463] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 <7-a> (20g, 72mmol)을 다이메틸포름아마이드 100 mL에 희석한 후 30분간 교반한 후 N-브로모숙신이미드 (12.77, 72mmol)를 다이메틸포름아마이드 60 mL에 희석한 후 20분간 적가한 후 밤새 교반한다. 반응 종료 후 물 1000 mL에 반응액을 붓고 고체를 석출하고 여과하여 목적물 20.52g(수율 80%)를 얻는다.

[0464] 7-(3) 7-c의 합성

[0465] 하기 반응식 30에 의하여 <7-c>를 합성하였다.

[0466] [반응식 30]



[0467]

[0468]

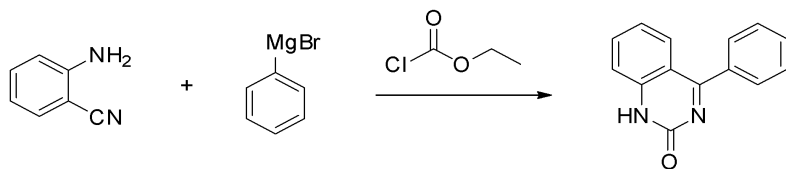
<7-c>

[0469] 반응식 9에서 사용된 <1-a> 대신 반응식 29로부터 얻은 <7-b>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 실험하여 목적물 13g(수율 45%)를 얻었다.

[0470] 7-(4) 7-d의 합성

[0471] 하기 반응식 31에 의하여 <7-d>를 합성하였다.

[0472] [반응식 31]



[0473]

[0474]

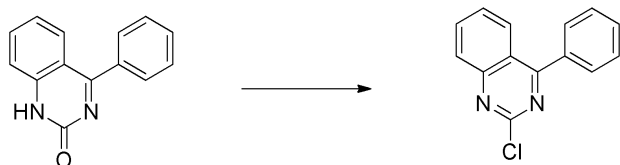
<7-d>

[0475] 건조된 2 L 반응기에 질소를 채워준 후 2-아미노벤조니트릴 (45.0 g, 381 mmol), 테트라하이드로퓨란 405 mL를 넣고 0 °C에서 3 M 페닐마그네슘브로마이드 (279 mL, 838 mmol)를 천천히 적가한 후 3 시간 환류 교반시킨다. 저온으로 낮춘 후 에틸클로로포메이트 (62 g, 0.571 mmol)을 테트라하이드로퓨란 200 mL에 녹인 후 천천히 적가한 후 2 시간 환류교반시킨다. 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 목적물 50 g (수율 58%)을 얻었다.

[0476] 7-(5) 7-e의 합성

[0477] 하기 반응식 32에 의하여 <7-e>를 합성하였다.

[0478] [반응식 32]



[0479]

[0480]

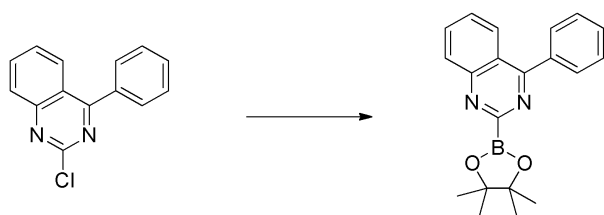
<7-e>

[0481] <7-d> (50 g, 225 mmol), 포스포러스 옥시클로라이드 500 mL에 넣고 5 시간 동안 환류교반시킨다. 반응이 종료되면 온도를 낮춘 물에 천천히 적가한다. 적가가 완료되면 여과한 후 메틸렌클로라이드와 물로 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 목적물 41 g (수율 75%)을 얻었다.

[0482] 7-(6) 7-f의 합성

[0483] 하기 반응식 33에 의하여 <7-f>를 합성하였다.

[0484] [반응식 33]



[0485]

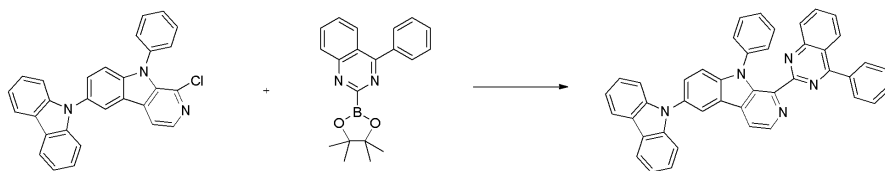
[0486] <7-f>

[0487] 반응식 6에서 사용된 <1-d> 대신 <7-e>을 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 목적물 40g (수율 72%)을 얻었다.

[0488] 7-(7) 화학식 133 합성

[0489] 하기 반응식 34에 의하여 화학식 133을 합성하였다.

[0490] [반응식 34]



[0491]

[0492] <화학식 133>

[0493] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 반응식 30로부터 얻은 <7-c> (5 g, 11 mmol), 반응식 33으로부터 얻은 <7-f> (4.65 g, 14 mmol), 탄산칼륨 (3.11 g, 23 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 (0.26 g, 1 mmol) 물 20 mL, 톨루엔 100 mL 및 테트라하이드로퓨란 100 mL를 투입하고 12시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 상온으로 냉각한 후 메탄올을 이용해 결정을 석출시키고 여과하여 목적물 4.4g (수율 66%)을 얻었다.

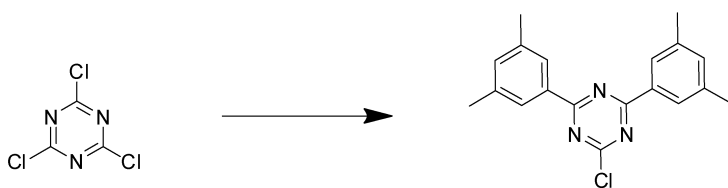
[0494] MS(MALDI-TOF) : m/z 613.23 [M]⁺ Anal. Calc. for C₄₃H₂₇N₅ Elemental Analysis: C, 84.15; H, 4.43; N, 11.41 Found Elemental Analysis: C, 84.14; H, 4.44; N, 11.41

[0495] <화학식 140>의 합성

[0496] 8-(1) 8-a의 합성

[0497] 하기 반응식 35에 의하여 <8-a>를 합성하였다.

[0498] [반응식 35]



[0499]

[0500] <8-a>

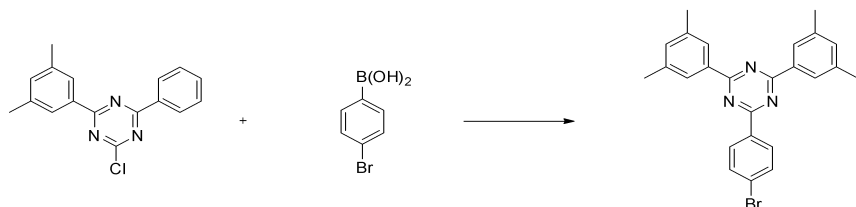
[0501] 반응식 3에서 사용된 브로모벤젠 대신 1-브로모-3,5-다메틸벤젠을 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 합

성하여 목적물 14g (수율 53%)을 얻었다.

[0502] 8-(2) 8-b의 합성

[0503] 하기 반응식 36에 의하여 <8-b>를 합성하였다.

[0504] [반응식 36]



[0505]

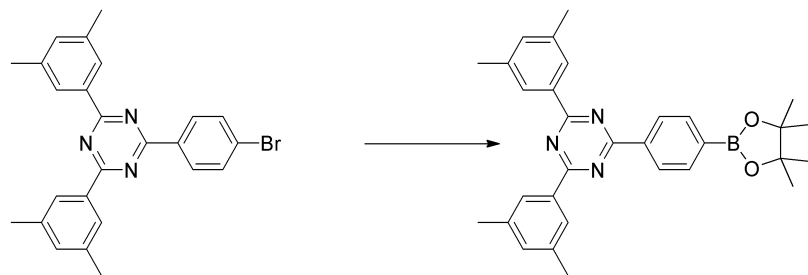
[0506] <8-b>

[0507] 반응식 4에서 사용된 <1-c> 대신 반응식 35에서 합성한 <8-a>를 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 합성하여 목적물 12g<수율 92%>를 얻었다.

[0508] 8-(3) 8-c의 합성

[0509] 하기 반응식 37에 의하여 <8-c>를 합성하였다.

[0510] [반응식 37]



[0511]

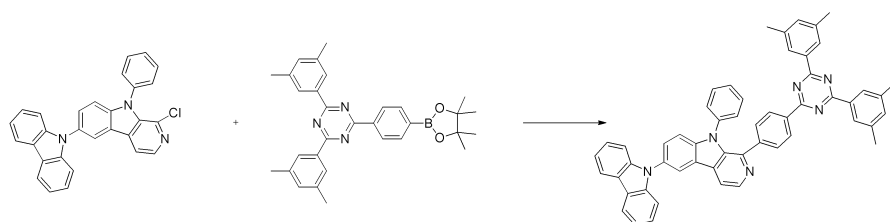
[0512] <8-c>

[0513] 반응식 6에서 사용된 <1-d> 대신 <8-b>를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 목적물 12g (수율 82%)을 얻었다.

[0514] 8-(4) 화학식 140의 합성

[0515] 하기 반응식 38에 의하여 <화학식 140>를 합성하였다.

[0516] [반응식 38]



[0517]

[0518] <화학식 140>

[0519] 반응식 34에서 사용된 <7-f> 대신 반응식 37에서 합성한 <8-c>를 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 합성하여 목적물 4.3g(수율 67%)을 얻었다.

[0520] MS(MALDI-TOF) : m/z 772.94 [M]⁺ Anal. Calc. for C₅₄H₄₀N₆ Elemental Analysis: C, 83.91; H, 5.22; N, 10.87 Found Elemental Analysis: C, 83.93; H, 5.23; N, 10.84

[0521] <화학식 154>의 합성

[0522] 9-(1) 9-a의 합성

[0523] 하기 반응식 39에 의하여 <9-a>를 합성하였다.

[0524] [반응식 39]

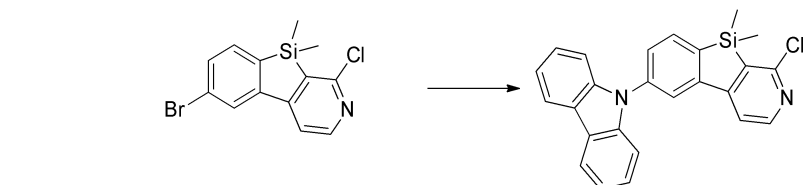


[0527] 반응식 1에서 사용된 4-브로모티오펜올 대신 4-브로모페닐다이메틸실란을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 목적물 9.2g (수율 44%)을 얻었다.

[0528] 9-(2) 9-b의 합성

[0529] 하기 반응식 40에 의하여 <9-b>를 합성하였다.

[0530] [반응식 40]

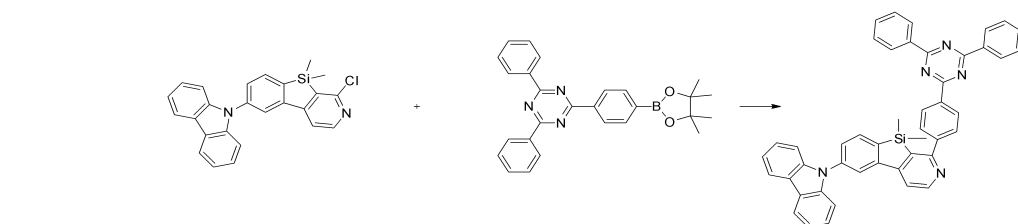


[0533] 반응식 9에서 사용된 <1-a> 대신 반응식 37에서 합성한 <9-a>를 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 합성하여 목적물 3.8g (수율 42%)을 얻었다.

[0534] 9-(3) 화학식 154의 합성

[0535] 하기 반응식 41에 의하여 <화학식 154>를 합성하였다.

[0536] [반응식 41]



[0538] <화학식 154>

[0539] 반응식 2에서 사용된 <1-b> 대신 반응식 40에서 합성한 <9-b>를 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 합성하여 목적물 3.8g (수율 52%)을 얻었다.

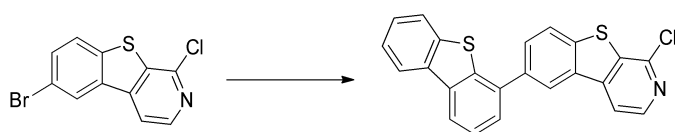
[0540] MS(MALDI-TOF) : m/z 683.25 [M]⁺ Anal. Calc. for C₄₆H₃₃N₅Si Elemental Analysis: C, 80.79; H, 4.86; N, 10.24; Si, 4.11 Found Elemental Analysis: C, 80.78; H, 4.85; N, 10.23; Si, 4.14

[0541] <화학식 182>의 합성

[0542] 10-(1) 10-a의 합성

[0543] 하기 반응식 42에 의하여 <10-a>를 합성하였다.

[0544] [반응식 42]



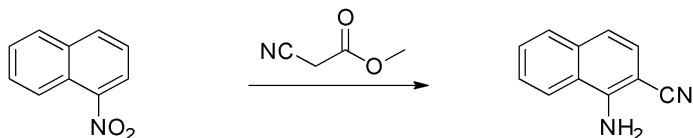
[0545] <10-a>

[0547] 반응식 2에서 사용된 페닐보론산 대신 4-다이벤조사이페닐보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 실험하여 목적물 21g(수율 67%)를 얻었다.

[0548] 10-(2) 10-b의 합성

[0549] 하기 반응식 43에 의하여 <10-b>를 합성하였다.

[0550] [반응식 43]



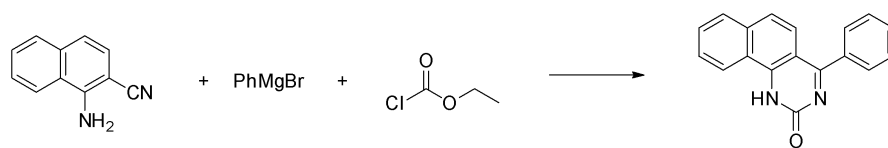
[0551] <10-b>

[0553] 1-니트로나프탈렌 (97 g, 0.56 mol), 메틸시아노아세테이트 (166.5 g, 1.68 mol), 시안화칼륨 (40.1 g, 0.62 mol), 수산화칼륨 (62.9 g, 1.12 mol)을 넣고 교반하였다. 다음 디메틸포름아마이드 970 mL을 넣고 60 ℃에서 밤새 교반하였다. 상온에서 감압농축 하여 용매를 제거한 뒤 10% 수산화나트륨수용액 500 mL을 넣고 약 1시간 동안 환류시켰다. 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 컬럼 크로마토그래피로 분리한 후 톨루엔과 헵탄으로 재결정하여 목적물 50.8 g (수율 75%)을 얻었다.

[0554] 10-(3) 10-c의 합성

[0555] 하기 반응식 44에 의하여 <10-c>를 합성하였다.

[0556] [반응식 44]



[0557]

[0558]

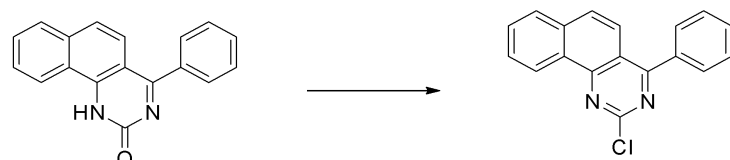
<10-c>

[0559] 반응식 31에서 사용된 2-아미노벤조니트릴 대신 <10-b>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 실험하여 목적물 32.4 g(수율 80%)를 얻었다.

[0560] 10-(4) 10-d의 합성

[0561] 하기 반응식 45에 의하여 <10-d>를 합성하였다.

[0562] [반응식 45]



[0563]

[0564]

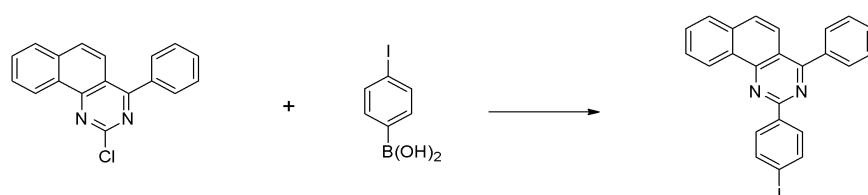
<10-d>

[0565] 반응식 32에서 사용된 <7-d> 대신 <10-c>를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 실험하여 목적물 14.5 g (수율 45%)를 얻었다.

[0566] 10-(5) 10-e의 합성

[0567] 하기 반응식 46에 의하여 <10-e>를 합성하였다.

[0568] [반응식 46]



[0569]

[0570]

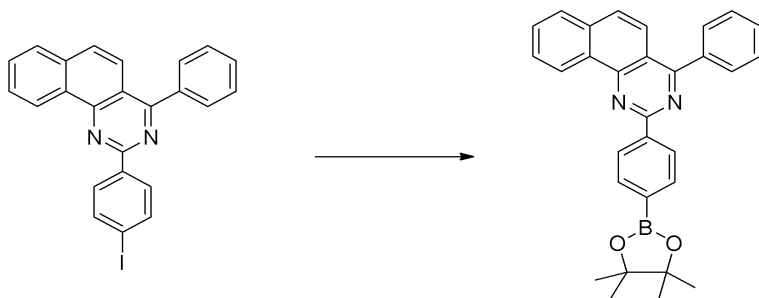
<10-e>

[0571] <10-d> (20 g, 0.07 mol), 4-아이오도페닐 보론산(20.5 g, 0.08 mol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 (4 g, 0.003 mol), 탄산칼륨 (19 g, 0.14 mol), 1,4-다이옥산 100 mL, 톨루엔 100 mL, 증류수 40 mL에 넣고 밤새 환류시켰다. 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 디클로로메탄과 아세톤으로 재결정하여 목적물 19.9 g (수율 80%)을 얻었다.

[0572] 10-(6) 10-f의 합성

[0573] 하기 반응식 47에 의하여 <10-f>를 합성하였다.

[0574] [반응식 47]



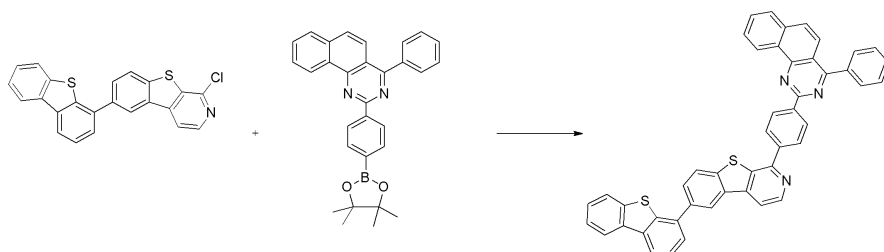
[0575]
[0576] <10-f>

[0577] 반응식 6에서 사용된 <1-d> 대신 <10-e>를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 목적물 14.9 g (수율 75%)을 얻었다.

[0578] 10-(7) 화학식 182의 합성

[0579] 하기 반응식 48에 의하여 <화학식 182>를 합성하였다.

[0580] [반응식 48]



[0581]
[0582] <화학식 182>

[0583] 반응식 34에서 사용된 <7-c> 대신 <10-a>를 사용하고, <7-f> 대신 <10-f>를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <화학식 182> 5.17g (수율 75%)을 얻었다.

[0584] MS(MALDI-TOF) : m/z 697.16 [M]⁺ Anal. Calc. for C₄₇H₂₇N₃S₂ C, 80.89; H, 3.90; N, 6.02; S, 9.19 Found C, 80.89; H, 3.88; N, 6.02; S, 9.21

[0585] **실시예 : 유기 발광다이오드의 제조**

[0586] ITO 글래스의 발광 면적이 2 mm × 2 mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1×10⁻⁶ torr가 되도록 한 후 유기물을 상기 ITO위에 DNTPD(700 Å), NPD(300 Å), 본 발명에 의해 제조된 화합물 + Ir(ppy)₃ (10%)(300 Å), Alq₃ (350 Å), LiF(5 Å), Al(1,000 Å)의 순서로 성막하였으며, 0.4 mA에서 측정을 하였다.

[0587] **비교예**

[0588] 비교예를 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 대신 일반적으로 인광호스트 물질로 많이 사용되고 있는 CBP를 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작하였으며 상기 CBP의 구조는 아래와 같다.

70: 전자주입층

80: 캐소드

도면

도면1

80
70
60
50
40
30
20
10

专利名称(译)	标题：有机发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020140079306A	公开(公告)日	2014-06-26
申请号	KR1020130156404	申请日	2013-12-16
[标]申请(专利权)人(译)	SFC股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	에스에프씨주식회사		
当前申请(专利权)人(译)	에스에프씨주식회사		
[标]发明人	PARK JI HEE 박지희 SHIM SO YOUNG 심소영 YU SE JIN 유세진		
发明人	박지희 심소영 유세진		
IPC分类号	C09K11/06 C07D495/04 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C09K2211/1029 C09K2211/1033 C09K2211/1037 C09K2211/1044 C09K2211/1048 C09K2211/1051 C09K2211/1055 C09K2211/1059 C09K2211/1062 C09K2211/1066 C09K2211/107 H01L51/0071 H01L51/50 H05B33/14		
优先权	1020120148582 2012-12-18 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及由下式 (1) 表示的有机发光化合物和包含该化合物的有机电致发光器件，其中根据本发明的有机电致发光化合物具有优异的发光效率和发光效率。可以制造具有功率效率和长寿命特性的有机电致发光器件。 [化学式1]

80
70
60
50
40
30
20
10