



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2012-0030009
(43) 공개일자 2012년03월27일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
(21) 출원번호 10-2011-0092422
(22) 출원일자 2011년09월14일
심사청구일자 없음
(30) 우선권주장
1020100091545 2010년09월17일 대한민국(KR)

- (71) 출원인
롭엔드하스전자재료코리아유한회사
충남 천안시 백석동 736
(72) 발명자
신효님
경기도 성남시 분당구 동판교로 275, 2단지 더이
지더원 204-701 (삼평동, 봇들마을)
황수진
서울특별시 성북구 길음1동 삼성래미안1차아파트
106-801
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
김종관, 권오식, 박창희

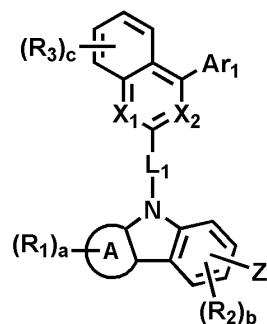
전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 발명의 명칭 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 채용하고 있는 유기 전계 발광 소자

(57) 요 약

본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 포함하고 있는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 상세하게는 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 하기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서, A고리, X₁, X₂, L₁, Ar₁, R₁R₂, R₃Z, a, b 및 c은 각각 발명의 상세한 설명에서 정의한 바와 같다.

본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 기존 재료에 비해 발광 효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동 수명이 매우 우수할 뿐만 아니라 전력효율의 상승을 유도하여 소비전력이 개선된 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

(72) 발명자

김희숙

경기도 수원시 영통구 신동 101호 340-22

윤석근

경기도 수원시 영통구 신동 캐슬 205

이미자

경기도 화성시 병점동 안화동마을주공7단지
703-1402

김남규

경기도 용인시 수지구 죽전2동 동성2차아파트
105-1101

조영준

경기도 성남시 분당구 동판교로 275, 2단지 더이지
더원 204-701 (삼평동, 봇들마을)

권혁주

서울특별시 강남구 삼성동 힐스테이트 105-2003

이경주

서울특별시 마포구 새창로8길 72, 210동 1001호 (
도화동, 현대홈타운)

김봉우

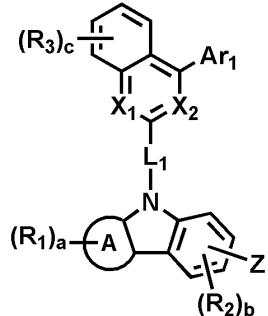
서울특별시 강남구 삼성동 힐스테이트아파트
208-401

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 발광 화합물.

[화학식 1]



[상기 화학식 1에서,

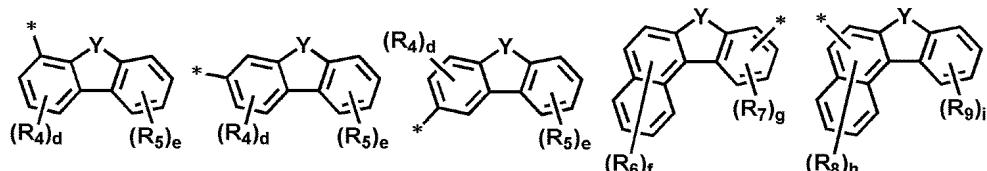
A고리는 단일환 또는 다환의 방향족고리이고;

X₁ 및 X₂는 서로 독립적으로 N 또는 CR'이고;

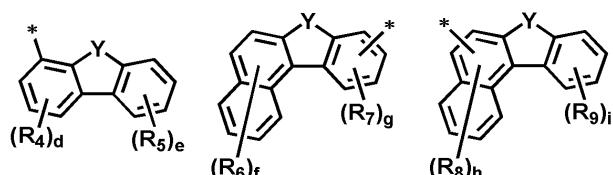
L₁은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이고;

Ar₁은 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴이고;

Z는 각각 독립적으로 하기 구조에서 선택되며;



단 A고리가 단일환 방향족고리일 때 Z는 하기구조에서 선택되고;



Y는 -O-, -S-, -C(R₁₁R₁₂)-, -Si(R₁₃R₁₄)- 또는 -N(R₁₅)-O-며;

R₁ 내지 R₉는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헥테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C3-C30)시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 방향족 고리가 하나 이상 융합된 5원 내지 7원의 헥테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족 고리가 하나 이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬, -NR₁₆R₁₇, -SiR₁₈R₁₉R₂₀, -SR₂₁, -OR₂₂, 시아노, 나이트로 또는 하이드록시이거나, 상기 R₁ 내지 R₉는 각각 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알킬렌 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나

이상의 혜테로원자로 치환될 수 있으며;

R' 및 R_{11} 내지 R_{22} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)혜테로아릴, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 혜테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알킬렌 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 혜테로원자로 치환될 수 있고;

a, c, e 및 i는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a, c, e 및 i가 2이상의 정수인 경우 각각의 R_1 , R_3 , R_5 및 R_9 는 동일하거나 상이할 수 있고;

b, d, g는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, b, d, g가 2이상의 정수인 경우 각각의 R_2 , R_4 및 R_7 는 동일하거나 상이할 수 있으며;

f는 1 내지 6의 정수이고, f가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R_6 는 동일하거나 상이할 수 있고;

h는 1 내지 5의 정수이고, h가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R_8 는 동일하거나 상이할 수 있고;

상기 혜테로방향족고리, 혜테로아릴렌, 혜테로시클로알킬 및 혜테로아릴은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 혜테로원자를 포함한다.]

청구항 2

제 1항에 있어서,

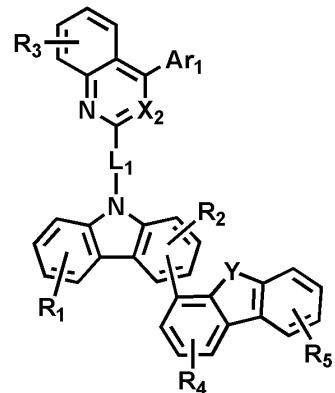
상기 L_1 , Ar_1 , R_1 내지 R_9 , R' 및 R_{11} 내지 R_{22} 에 더 치환되는 치환기는 서로 독립적으로 중수소, 할로겐, 할로겐이 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C6-C30)아릴이 치환 또는 비치환된 (C2-C30)혜테로아릴, 5원 내지 7원의 혜테로시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 혜테로시클로알킬, (C3-C30)시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 (C6-C30)시클로알킬, $R^aR^bR^cSi-$, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알카닐, 시아노, 카바졸릴, $-NR^dR^e$, $-BR^fR^g$, $-PR^hR^i$, $-P(=O)R^jR^k$, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴, R^lT- , $R^mC(=O)-$, $R^nC(=O)O-$, 카르복실, 나이트로 또는 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이고, R^a 내지 R^l 는 서로 독립적으로 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴 또는 (C2-C30)혜테로아릴이고; T는 S 또는 O이고; R^m 는 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알콕시, (C6-C30)아릴 또는 (C6-C30)아릴옥시인 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물.

청구항 3

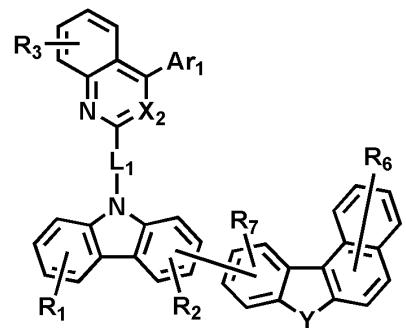
제 1항에 있어서,

하기 화학식 2 내지 9로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물.

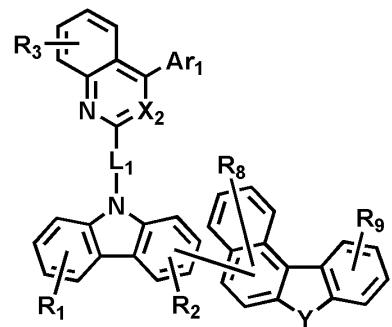
[화학식 2]



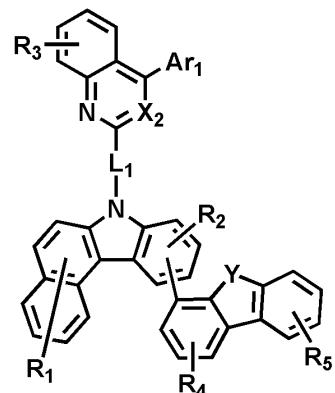
[화학식 3]



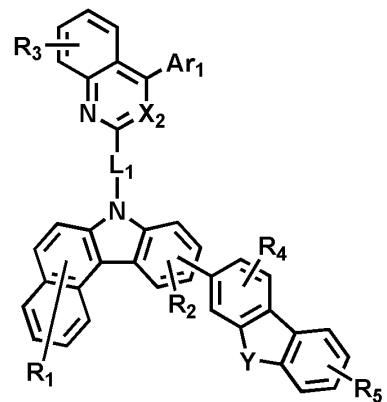
[화학식 4]



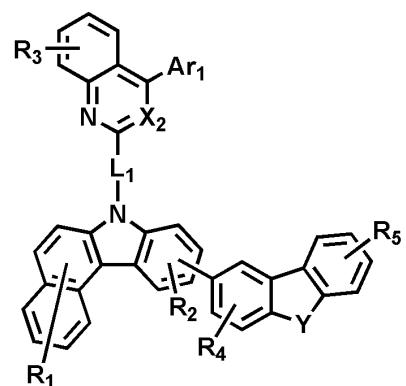
[화학식 5]



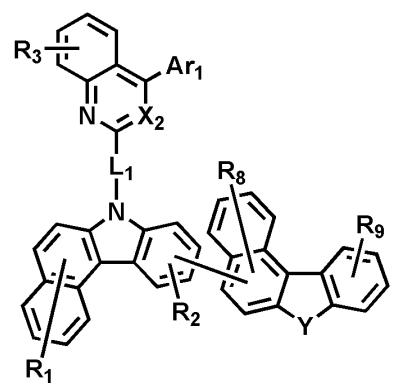
[화학식 6]



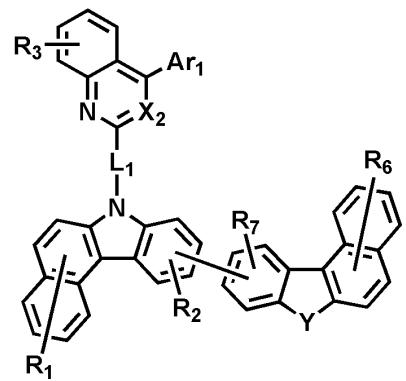
[화학식 7]



[화학식 8]



[화학식 9]



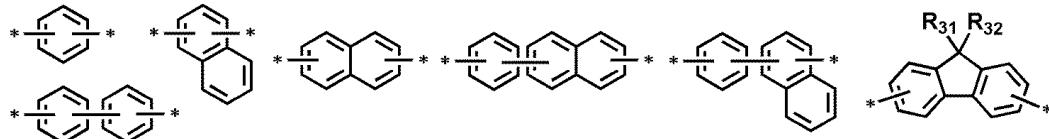
[상기 식에서, X_2 는 N 또는 CH이고; Y는 $-O-$, $-S-$, $-C(R_{11}R_{12})-$ 또는 $-N(R_{15})-$ 이며; L_1 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴렌이고; Ar_1 은 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이거나, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴이고; R_1 내지 R_9 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴, $NR_{16}R_{17}$ 또는 $SiR_{18}R_{19}R_{20}$ 이고; R_{11} , R_{12} , R_{15} 및 R_{16} 내지 R_{20} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴이거나, 상기 R_{16} 과 R_{17} 은 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알킬렌 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헥테로원자로 치환될 수 있다.]

청구항 4

제 3항에 있어서,

상기 X_2 는 N 또는 CH이고; Y는 $-O-$, $-S-$, $-C(R_{11}R_{12})-$ 또는 $-N(R_{15})-$ 이며;

L_1 은 단일결합 또는 하기 구조에서 선택되는 아릴렌이고;



R_{31} 및 R_{32} 는 서로 독립적으로 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, n-펜틸, i-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, n-노닐, 데실, 도데실, 헥사데실, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르에틸, 트리플루오르에틸, 퍼플루오르프로필, 퍼플루오르부틸, 페닐, 나프틸, 피리딜 또는 퀴놀릴이고;

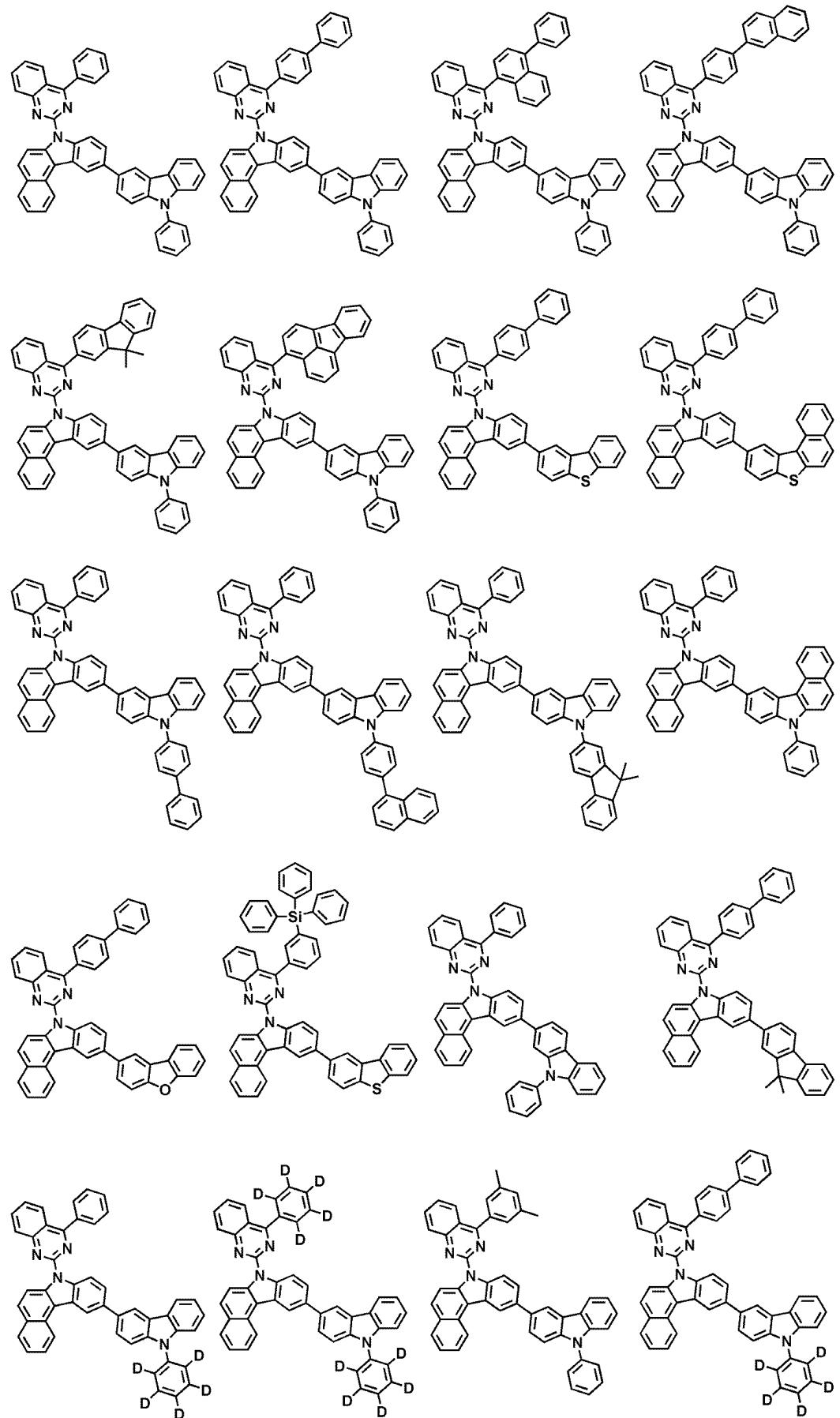
Ar_1 은 수소, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, n-펜틸, i-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, n-노닐, 데실, 도데실, 헥사데실, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르에틸, 트리플루오르에틸, 퍼플루오르프로필, 퍼플루오르부틸, 페닐, 바이페닐, 터페닐, 나프틸, 9,9-다이페닐플루오레닐, 9,9-다이메틸플루오레닐, 플루오란텐일, 피리딜, 다이벤조퓨란일, 다이벤조티오펜일 또는 N-페닐카바졸일이고, 상기 Ar_1 의 페닐, 바이페닐, 터페닐, 나프틸 및 카바졸일은 각각 중수소, 플루오로, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, n-펜틸, i-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, n-노닐, 데실, 도데실, 헥사데실, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르에틸, 트리플루오르에틸, 퍼플루오르프로필, 퍼플루오르부틸, 트리페닐실릴, 트리메틸실릴, 디메틸페닐실릴, 디페닐메틸실릴, 페닐 및 나프틸, 9,9-다이페닐플루오레닐, 9,9-다이메틸플루오레닐, 페닐피리딜, 카바졸일, 플루오란텐일, 다이벤조퓨란일, 다이벤조티오펜일로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환체로 더 치환될 수 있고;

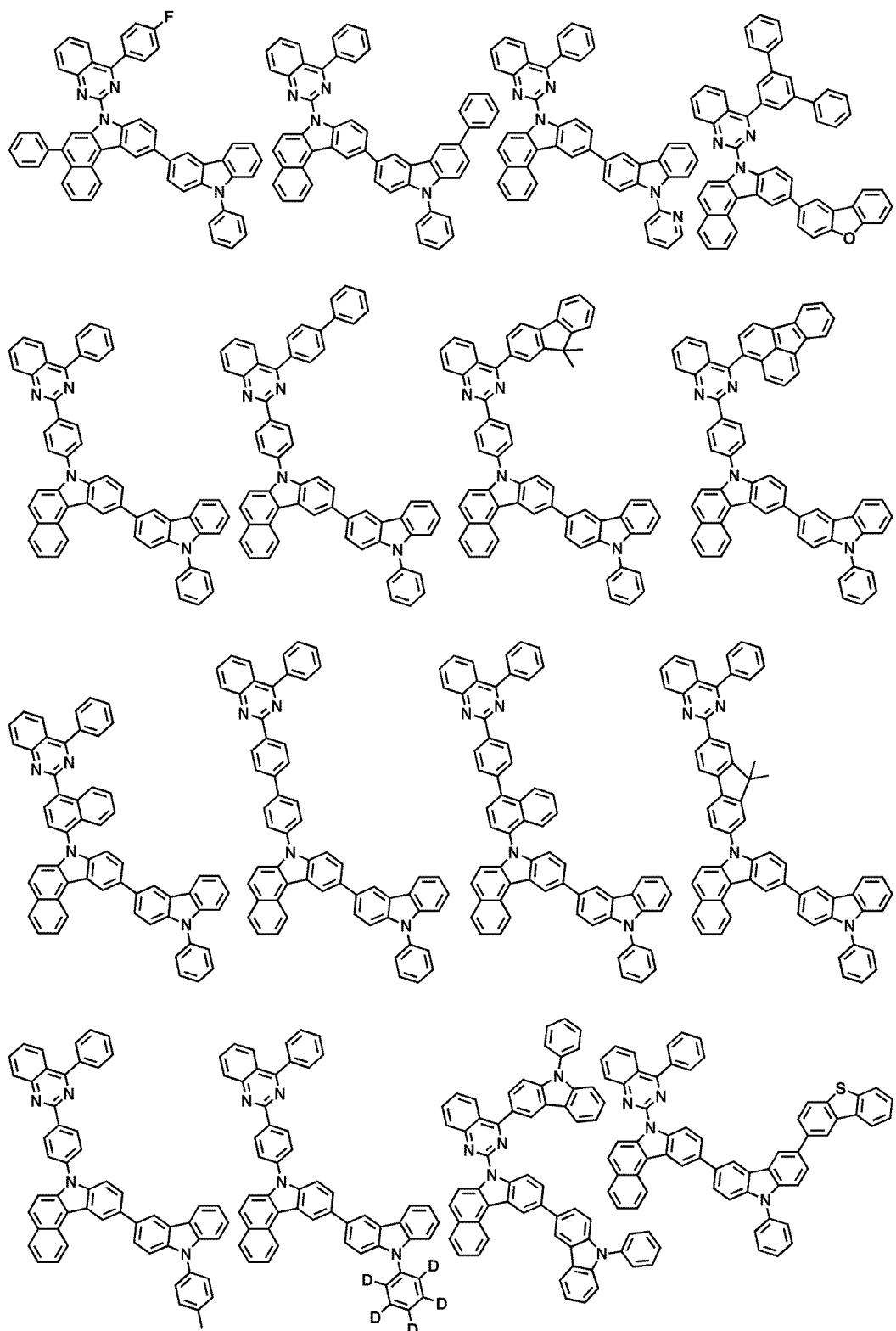
R_1 내지 R_9 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 페닐, 피리딜, 다이벤조퓨란일, 다이벤조티오펜일, 아미노 또는 카바졸일이고; R_{11} , R_{12} 및 R_{15} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, n-펜틸, i-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, n-노닐, 데실, 도데실, 헥사데실, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르에틸, 트리플루오르에틸, 퍼플루오르프로필, 퍼플루오르부틸, 페닐, 바이페닐, 9,9-다이페닐플루오레닐, 9,9-다이메틸플루오레닐, 나프틸, 피리딜, N-페닐카바졸일 또는 퀴놀릴이고, 상기 R_{11} , R_{12} 및 R_{15} 의 페닐은 중수소, 할로겐, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, n-펜틸, i-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, n-노닐, 데실, 도데실, 헥사데실, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르에틸, 트리플루오르에틸, 퍼플루오르프로필, 퍼플루오르부틸, 페닐 및 나프틸로부터 선택되는 하나 이상으로 더 치환될 수 있으며, 상기 R_{11} 과 R_{12} 는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물.

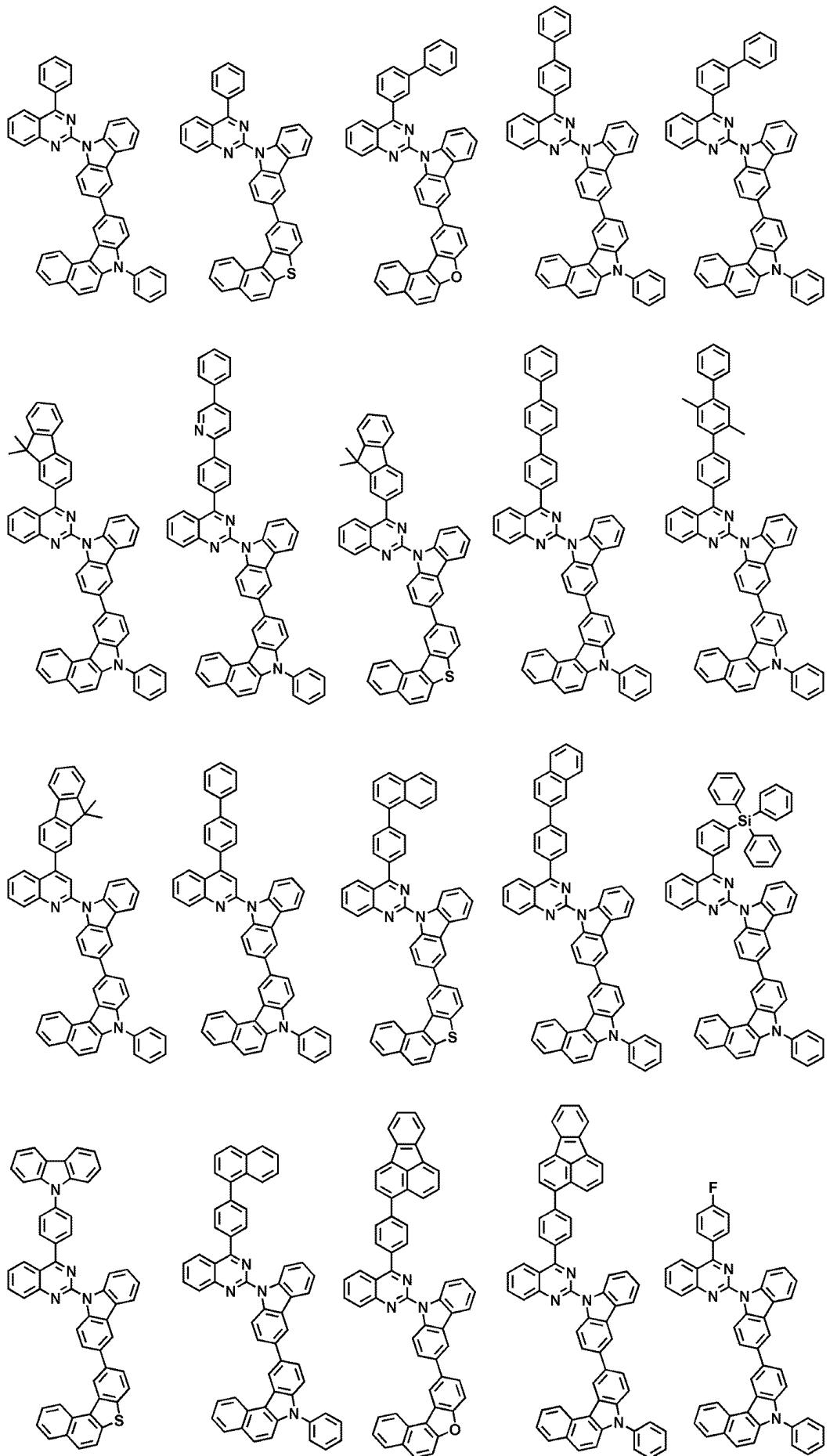
청구항 5

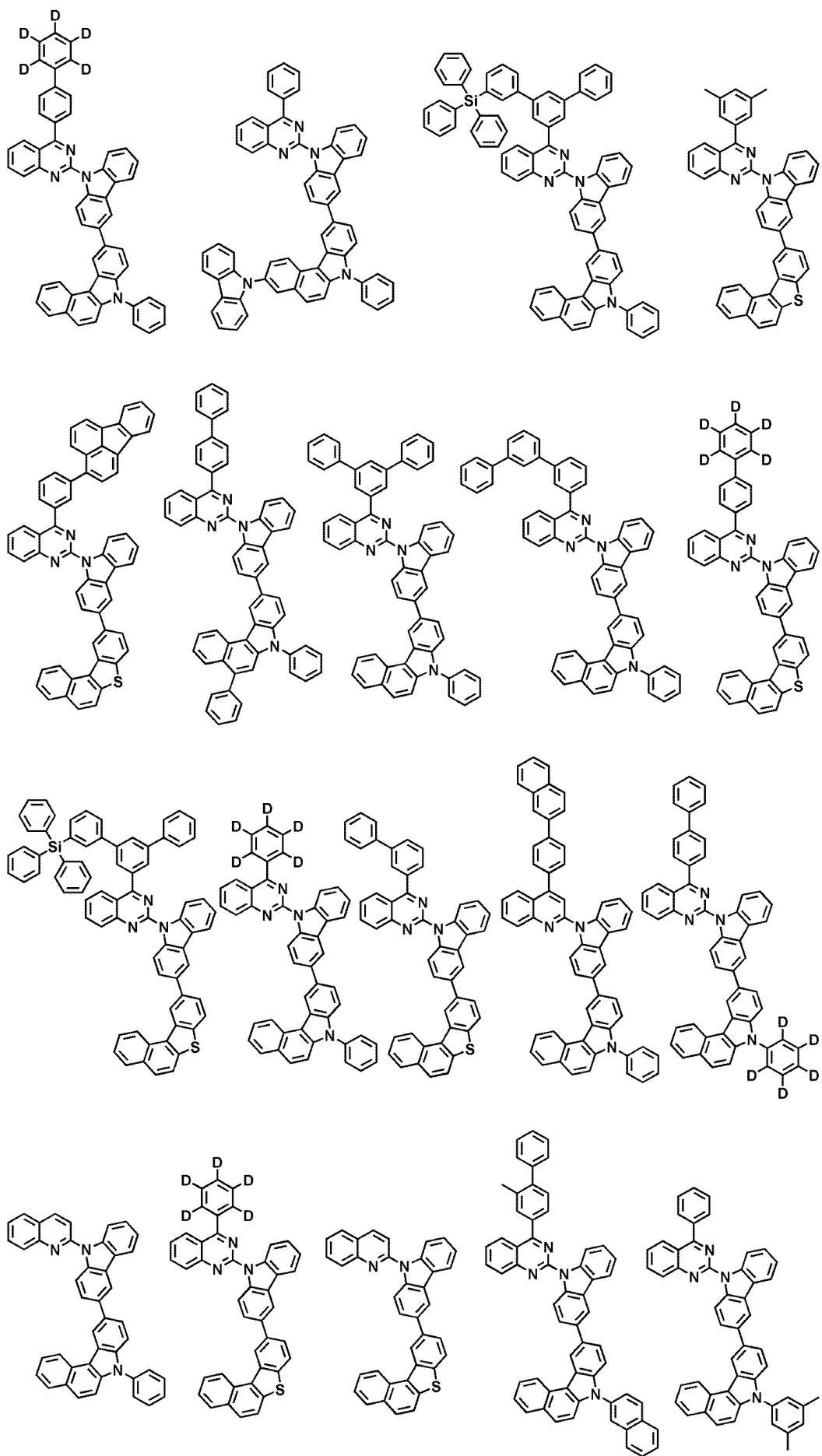
제 4항에 있어서,

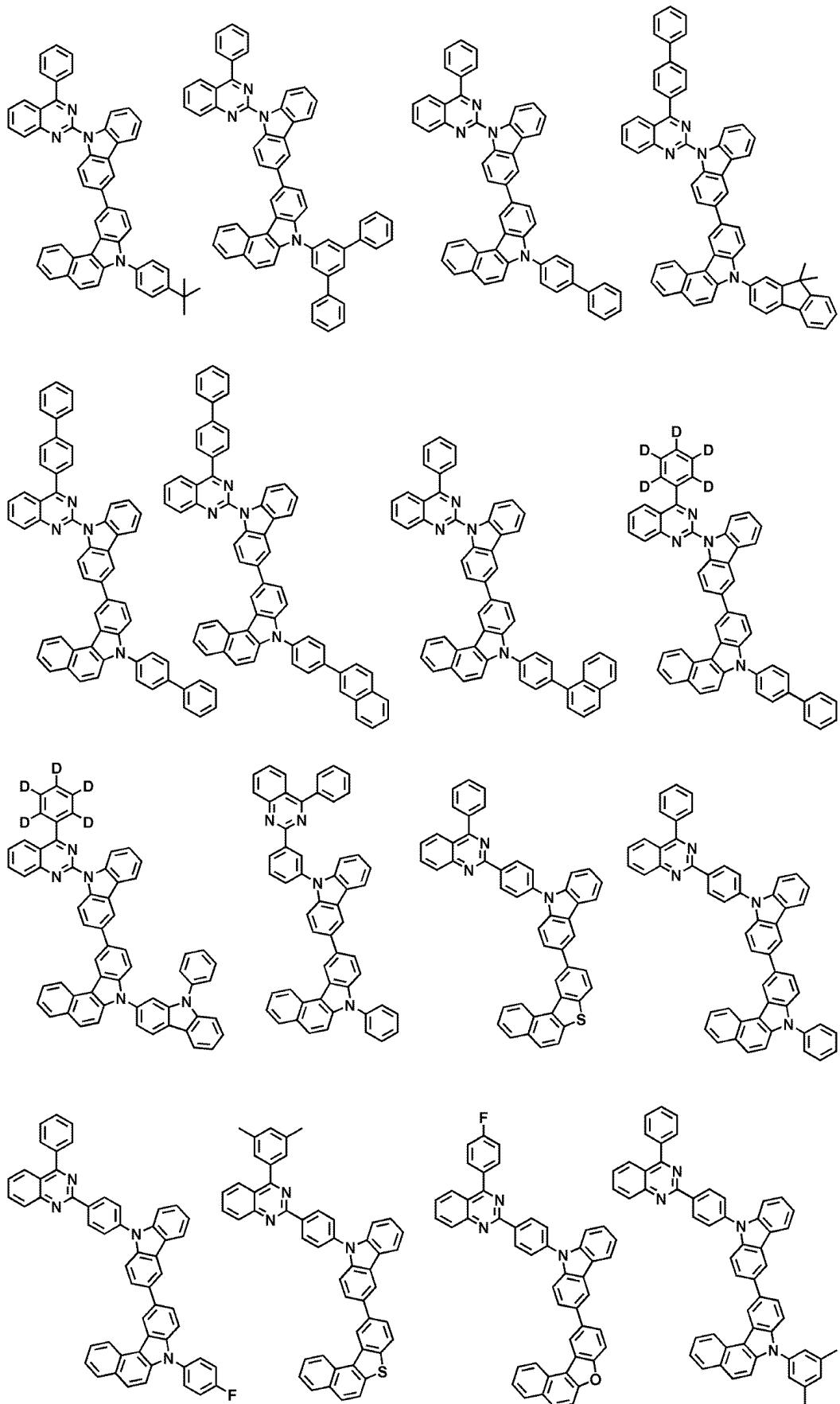
하기 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물.

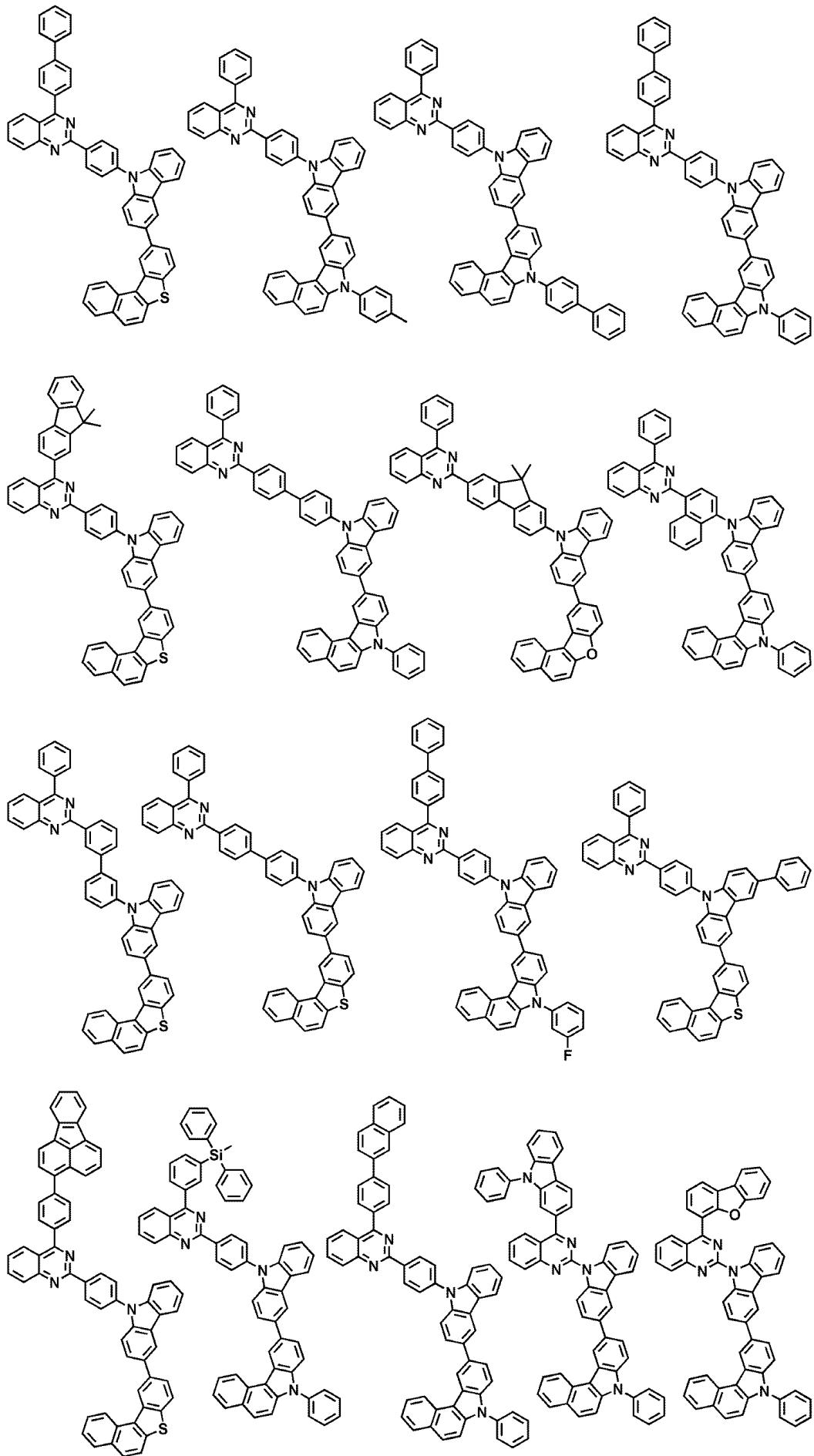


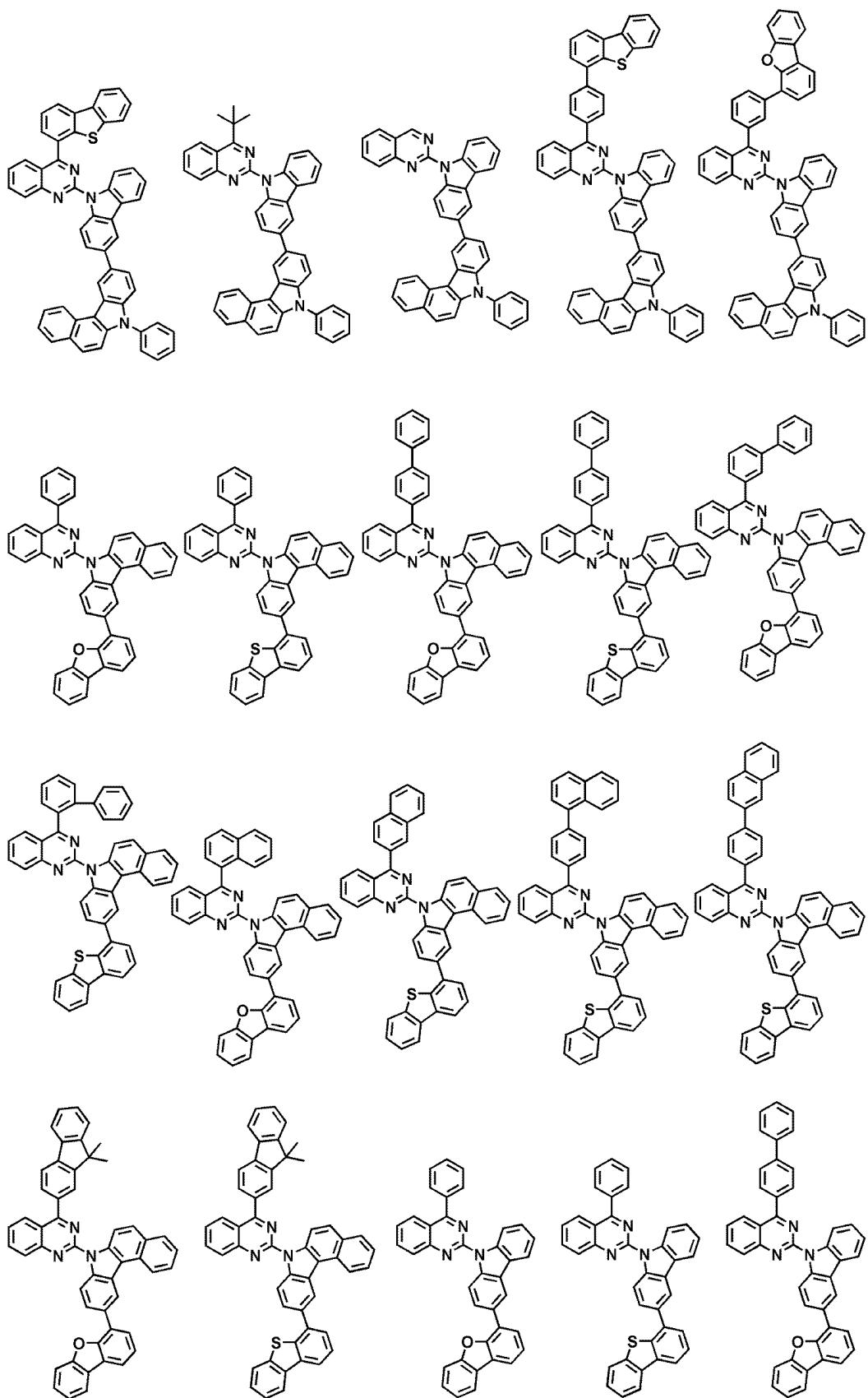


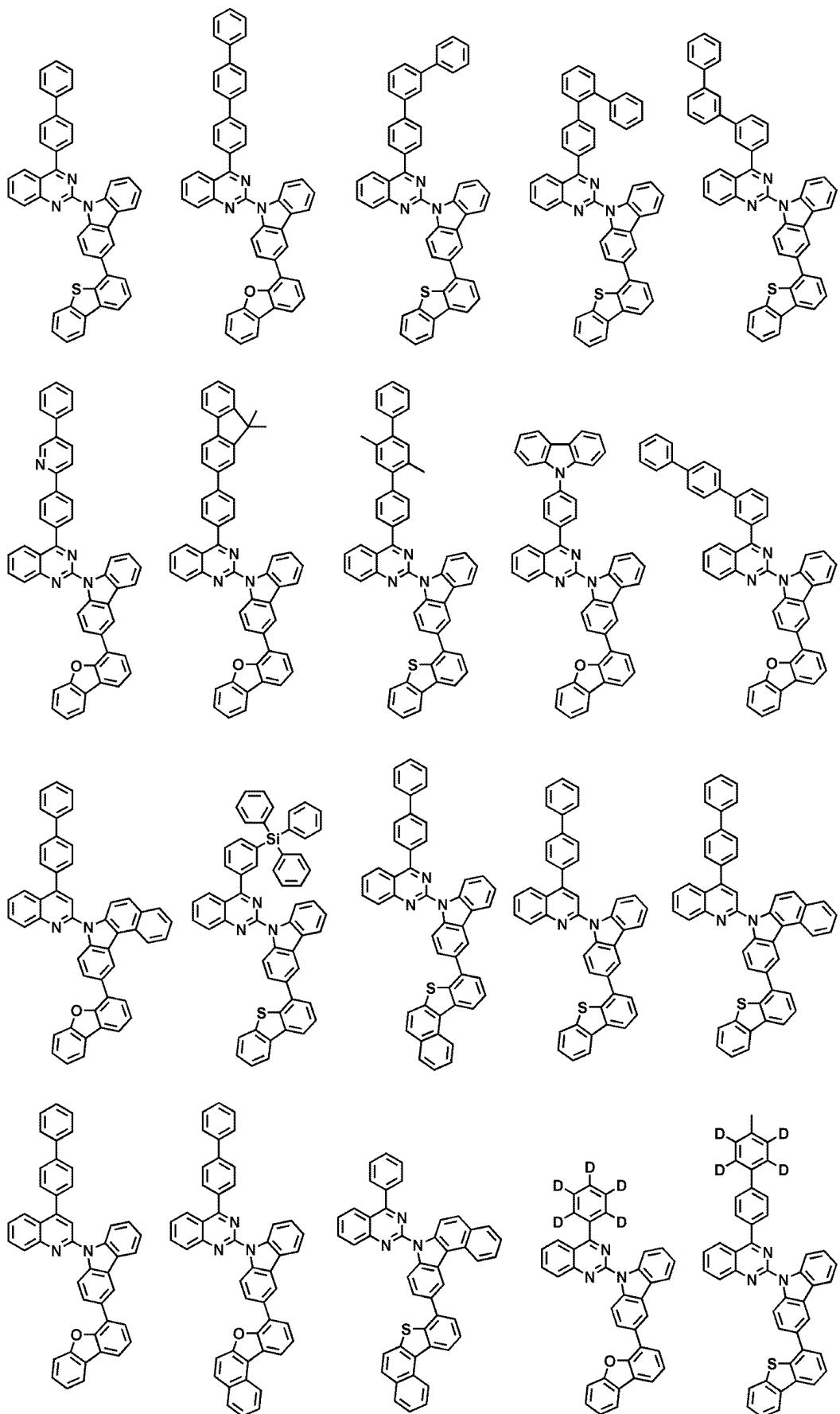


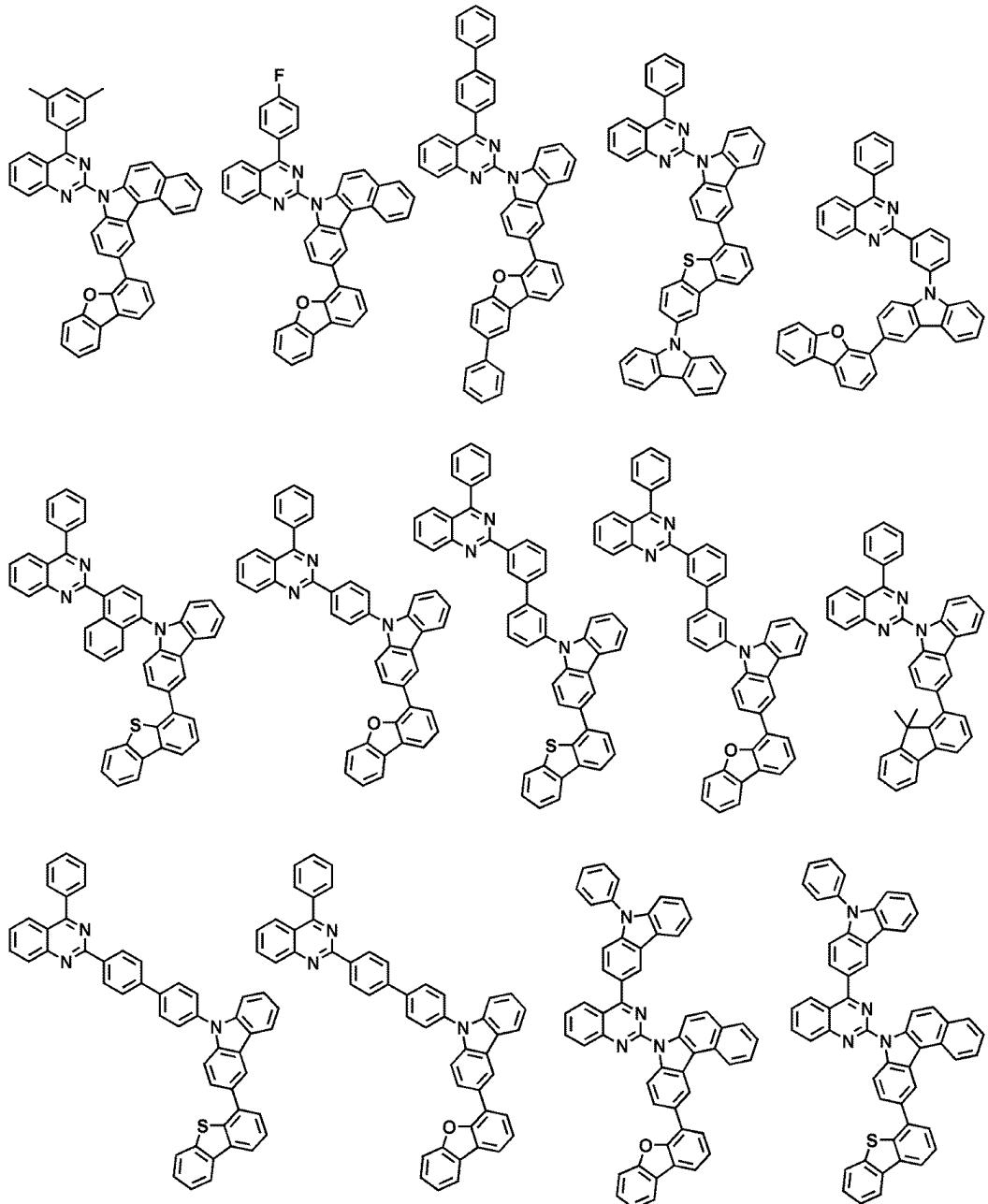


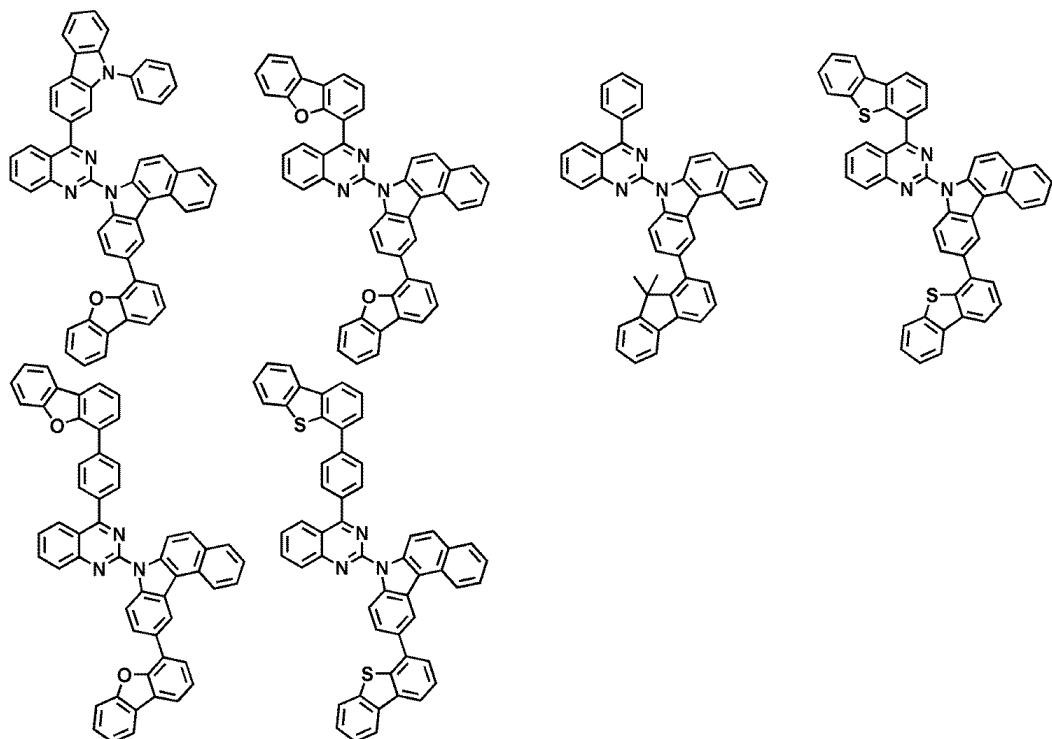










**청구항 6**

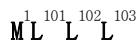
제 1항 내지 제 5항에서 선택되는 어느 한 항에 따른 유기 발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 7

제 6항에 있어서,

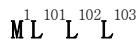
상기 유기 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어져 있으며, 상기 유기물층은 상기 유기 발광 화합물 하나 이상과 하기 화학식 10으로 표시되는 인광도판트 하나 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

[화학식 10]

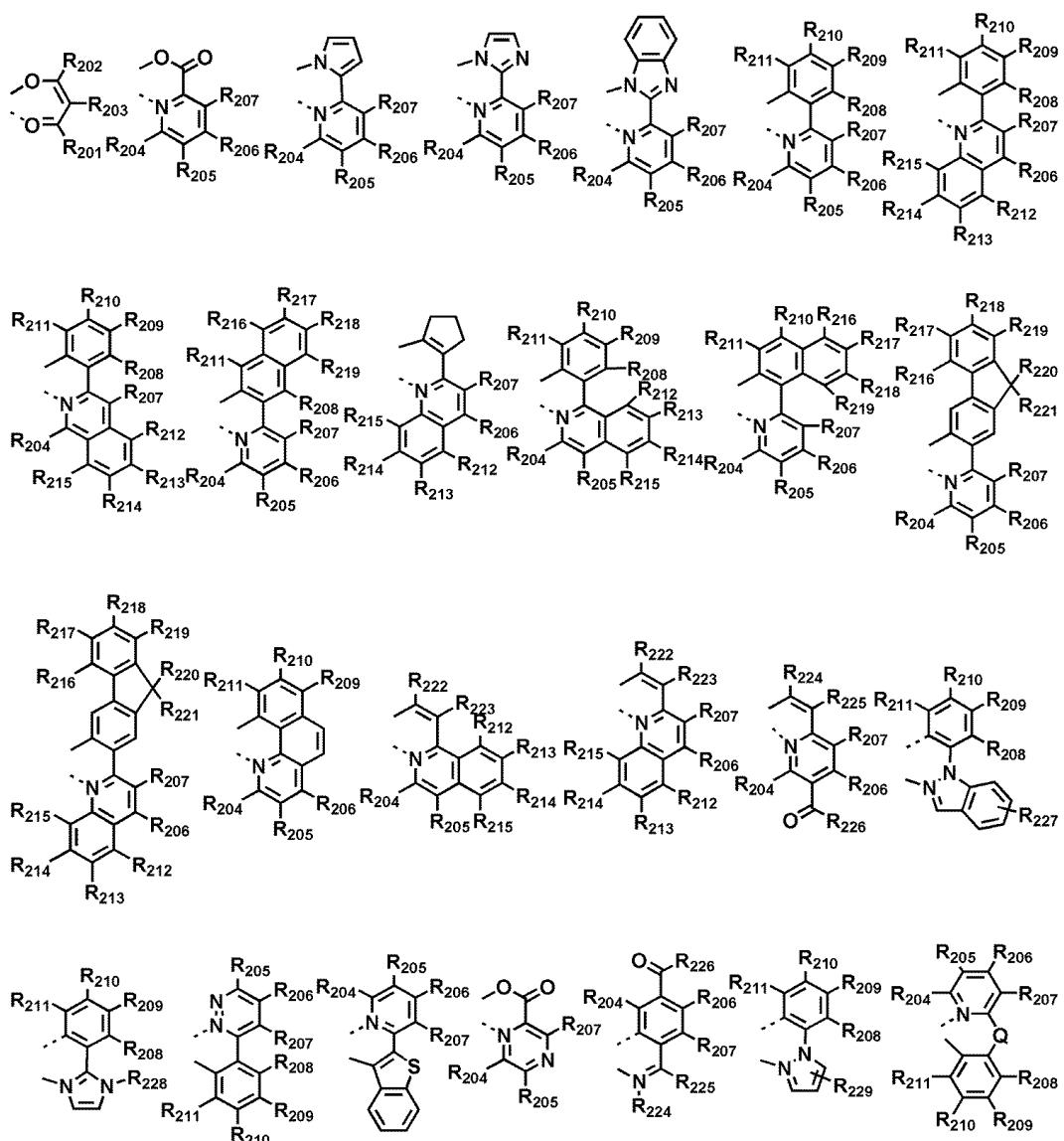


여기서 \mathbf{M}^1 은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 리간드 \mathbf{L}^{101} , \mathbf{L}^{102} 및 \mathbf{L}^{103} 는 서로 독립적으로 하기 구조로부터 선택되어진다.

[화학식 10]



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



R₂₀₁ 내지 R₂₀₃은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C30)아릴 또는 할로겐이고;

R₂₀₄ 내지 R₂₁₉는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 모노 또는 치환 또는 비치환된 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, SF₅, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 시아노 또는 할로겐이고;

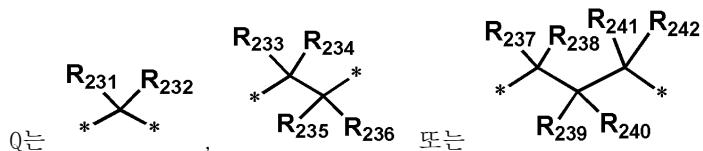
R₂₂₀ 내지 R₂₂₃는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬 또는 (C1-C30)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C30)아릴이고;

R₂₂₄ 및 R₂₂₅는 서서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴 또는 할로겐이거나, R₂₂₄와 R₂₂₅는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C12)알킬렌 또는 (C3-C12)알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하며;

R₂₂₆은 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴 또는 할로겐이고;

R₂₂₇ 내지 R₂₂₉은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-

C30)아릴 또는 할로겐이고;



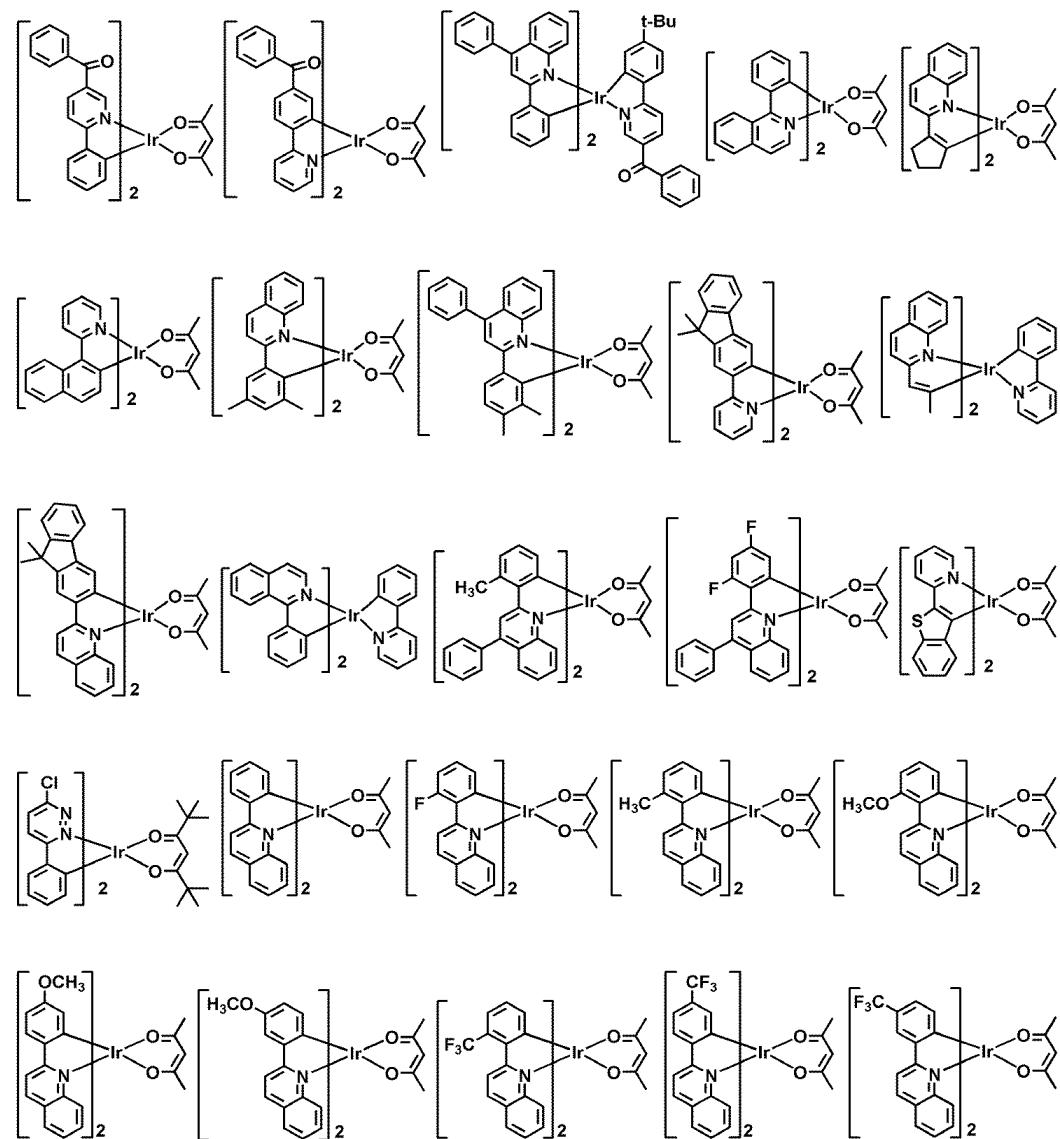
이며, R₂₃₁ 내지 R₂₄₂는 서로 독립적으로 수소, 중

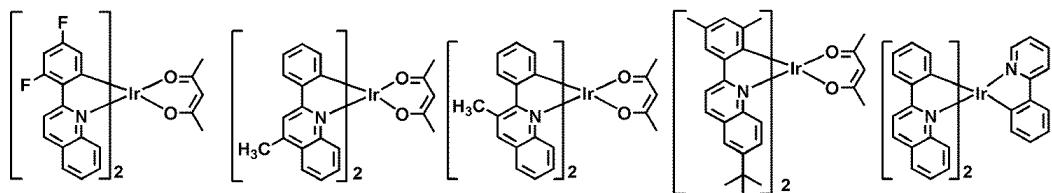
수소, 할로겐이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알콕시, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로 고리 또는 융합고리를 형성할 수 있거나, R₂₀₇ 또는 R₂₀₈과 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 포화 또는 불포화의 융합고리를 형성할 수 있다.]

청구항 8

제 7항에 있어서,

상기 인광 도판트는 하기 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.



**청구항 9**

제 7항에 있어서,

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

청구항 10

제 7항에 있어서,

상기 유기물층에 청색, 적색 또는 녹색 발광을 하는 유기발광층 하나 이상을 더 포함하여 백색 발광을 하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

명세서**기술분야**

[0001]

본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 포함하고 있는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

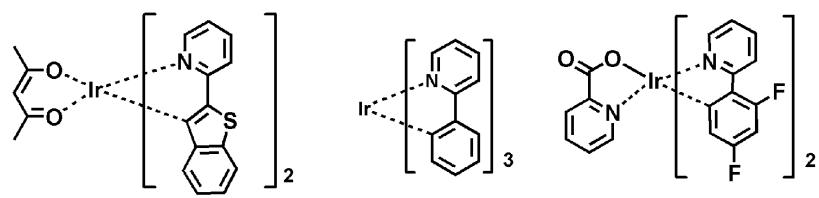
배경기술

[0002]

표시 소자 중, 전기 발광 소자(electroluminescence device: EL device)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003]

OLED에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재까지 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 전기발광의 메커니즘 상 인광 재료의 개발은 이론적으로 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있는 가장 좋은 방법 중 하나이다. 현재까지 이리듐(III)착물 계열이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 각 RGB 별로는 $(acac)Ir(btp)_2$, $Ir(ppy)_3$ 및 Firpic 등의 재료가 알려져 있다. 특히, 최근 일본, 구미에서 많은 인광 재료들이 연구되고 있다.



[0004]

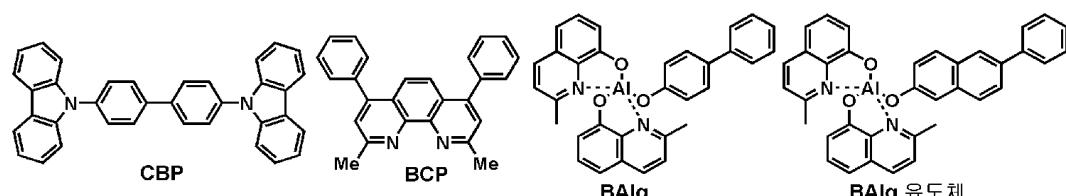
$(acac)Ir(btp)_2$

$Ir(ppy)_3$

Firpic

[0005]

인광 발광체의 호스트 재료로는 현재까지 CBP가 가장 널리 알려져 있고, BCP 및 BA1q 등의 정공차단층을 적용한 고효율의 OLED가 공지되어 있으며, 일본의 파이오니어 등에서는 BA1q 유도체를 호스트로 이용해 고성능의 OLED를 개발한 바 있다.



[0006]

[0007]

그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 매우 좋지 않아서, 진공 하에서 고온 증착 공정을 거칠 때, 물질이 변하는 단점을 갖고 있다. OLED에서 전력효율 = [(π /전압) × 전류효율]의 관계에 있으므로 전력 효율은 전압에 반비례하고, 따라서 OLED의 소비 전력을 낮추려면 전력 효율을 높여야 한다. 실제 인광 발광 재료를 사용한 OLED는 형광 발광 재료를 사용한 OLED에 비해 전류 효율(cd/A)이 상당히 높으나, 인광 발광 재료의 호스트로 사용되던 BA1q 또는 CBP와 같은 종래재료의 경우, 형광재료를 사용한 OLED에 비해 구동 전압이 높아서 전력 효율(lm/w)면에서 큰 이점이 없었다. 또한, OLED 소자에 사용할 경우 수명 측면에서도 만족스럽지 못하였다.

[0008]

한편, 국제특허공보 제WO 2006/049013호에는 축합 이환기를 골격으로 하는 유기 전기 발광 소재용 화합물을 언급하고 있다. 그러나, 상기 문헌에는 방향족 고리가 융합된 헤테로시클로알킬 또는 시클로알킬이 치환된 카바졸골격 및 질소함유 축합이환기를 모두 겸비한 화합물을 구체적으로 개시하고 있지 않다.

선행기술문헌

특허문헌

[0009]

(특허문헌 0001) 국제특허공보 제WO 2006/049013호 (2006.05.11.)

비특허문헌

[0010]

(비)특허문헌 0001) Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987

발명의 내용

해결하려는 과제

[0011]

따라서 본 발명의 목적은 첫째로, 상기한 문제점을 해결하기 위하여 기존의 재료보다 발광 효율 및 소자 수명이 좋으며, 적절한 색좌표를 갖는 우수한 골격의 유기 발광 화합물을 제공하는 것이며 둘째로, 상기 유기 발광 화합물을 발광 재료로서 채용하는 고효율 및 장수명의 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

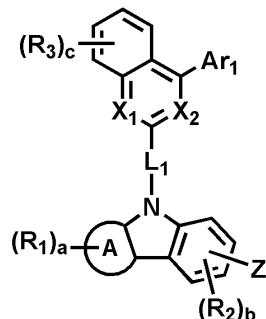
과제의 해결 수단

[0012]

본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 기존 재료에 비해 발광 효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 우수할 뿐만 아니라 전력효율의 상승을 유도하여 소비전력이 개선된 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

[0013]

[화학식 1]



[0014]

[상기 화학식 1에서,

[0015]

A고리는 단일환 또는 다환의 방향족고리이고;

[0016]

X₁ 및 X₂는 서로 독립적으로 N 또는 CR'이고;

X₁ 및 X₂는 서로 독립적으로 N 또는 CR'이고;

- [0018] L_1 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이고;
- [0019] Ar_1 은 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴이고;
- [0020] Z는 각각 독립적으로 하기 구조에서 선택되며;
- [0021]
-
- [0022] 단 A고리가 단일환 방향족고리일 때 Z는 하기구조에서 선택되고;
- [0023]
-
- [0024] Y는 $-O-$, $-S-$, $-C(R_{11}R_{12})-$, $-Si(R_{13}R_{14})-$ 또는 $-N(R_{15})-\circ$ 며;
- [0025] R_1 내지 R_9 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C3-C30)시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 방향족 고리가 하나 이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족 고리가 하나 이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬, $-NR_{16}R_{17}$, $-SiR_{18}R_{19}R_{20}$, $-SR_{21}$, $-OR_{22}$, 시아노, 나이트로 또는 하이드록시이거나, 상기 R_1 내지 R_9 는 각각 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알킬렌 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있으며;
- [0026] R' 및 R_{11} 내지 R_{22} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알킬렌 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있고;
- [0027] a, c, e 및 i는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a, c, e 및 i가 2이상의 정수인 경우 각각의 R_1 , R_3 , R_5 및 R_9 는 동일하거나 상이할 수 있고;
- [0028] b, d, g는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, b, d, g가 2이상의 정수인 경우 각각의 R_2 , R_4 및 R_7 는 동일하거나 상이할수 있으며;
- [0029] f는 1 내지 6의 정수이고, f가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R_6 는 동일하거나 상이할 수 있고;
- [0030] h는 1 내지 5의 정수이고, h가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R_8 는 동일하거나 상이할 수 있고;
- [0031] 상기 헤테로방향족고리, 헤테로아릴렌, 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.]

[0032]

본 발명에 기재된 「알킬」, 「알콕시」 및 그 외 「알킬」 부분을 포함하는 치환체는 직쇄 또는 분쇄 형태를 모두 포함하고, 「시클로알킬」은 단일 고리계 뿐만 아니라 치환 또는 비치환된 아다만틸 또는 치환 또는 비치환된 (C7-C30)바이시클로알킬과 같은 여러 고리계 탄화수소도 포함한다. 본 발명에 기재된 「아릴」은 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로, 각 고리에 적절하게는 4 내지 7개, 바람직하게는 5 또는 6개의 고리원자를 포함하는 단일 또는 융합고리계를 포함하며, 다수개의 아릴이 단일결합으로 연결되어 있는 형태까지 포함한다. 구체적인 예로 페닐, 나프틸, 비페닐, 터페닐, 안트릴, 인데닐(indenyl), 플루오레닐, 페난트릴, 트리페닐레닐, 피렌일, 페닐렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란텐일 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다. 상기 나프틸은 1-나프틸 및 2-나프틸을 포함하며, 안트릴은 1-안트릴, 2-안트릴 및 9-안트릴을 포함하며, 페난트릴은 1-페난트릴, 2-페난트릴, 3-페난트릴, 4-페난트릴, 9-페난트릴을 포함하며, 나프타세닐은 1-나프타세닐, 2-나프타세닐, 9-나프타세닐을 포함하며, 피렌일은 1-피렌일, 2-피렌일, 4-피렌일을 포함하며, 비페닐은 2-비페닐, 3-비페닐, 4-비페닐을 포함하며, 터페닐은 p-터페닐-4-일, p-터페닐-3-일, p-터페닐-2-일, m-터페닐-4-일, m-터페닐-3-일, m-터페닐-2-일을 포함하며, 플루오레닐은 1-플루오레닐, 2-플루오레닐, 3-플루오레닐, 4-플루오레닐 및 9-플루오레닐을 모두 포함한다. 본 발명에 기재된 「헵테로아릴」은 방향족 고리 골격 원자로서 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택되는 1 내지 4개의 헵테로원자를 포함하고, 나머지 방향족 고리 골격 원자가 탄소인 아릴 그룹을 의미하는 것으로, 5 내지 6원 단환 헵테로아릴, 및 하나 이상의 벤젠 환과 축합된 다환식 헵테로아릴이며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본 발명에서의 헵테로아릴은 하나 이상의 헵테로아릴이 단일결합으로 연결된 형태도 포함한다. 상기 헵테로아릴기는 고리내 헵테로원자가 산화되거나 사원화되어, 예를 들어 N-옥사이드 또는 4차 염을 형성하는 2가 아릴 그룹을 포함한다. 구체적인 예로 퓨릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 퓨라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리디진일 등의 단환 헵테로아릴, 벤조퓨란일, 벤조티오펜일, 다이벤조퓨란일, 다이벤조티오페일, 이소벤조퓨란일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 아크리디닐, 페난트롤리닐, 페나지닐, 페노싸이아지닐, 페녹사지닐 등의 다환식 헵테로아릴 및 이들의 상응하는 N-옥사이드(예를 들어, 피리딜 N-옥사이드, 퀴놀릴 N-옥사이드), 이들의 4차 염 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다. 상기 피롤릴은 1-피롤릴, 2-피롤릴, 3-피롤릴을 포함하며, 피리딜은 2-피리딜, 3-피리딜, 4-피리딜을 포함하며, 인돌릴은 1-인돌릴, 2-인돌릴, 3-인돌릴, 4-인돌릴, 5-인돌릴, 6-인돌릴, 7-인돌릴을 포함하며, 이소인돌릴은 1-이소인돌릴, 2-이소인돌릴, 3-이소인돌릴, 4-이소인돌릴, 5-이소인돌릴, 6-이소인돌릴, 7-이소인돌릴을 포함하며, 퓨릴은 2-퓨릴, 3-퓨릴을 포함하며, 벤조퓨란일은 2-벤조퓨란일, 3-벤조퓨란일, 4-벤조퓨란일, 5-벤조퓨란일, 6-벤조퓨란일, 7-벤조퓨란일을 포함하며, 이소벤조퓨란일은 1-이소벤조퓨란일, 3-이소벤조퓨란일, 4-이소벤조퓨란일, 5-이소벤조퓨란일, 6-이소벤조퓨란일, 7-이소벤조퓨란일을 포함하며, 퀴놀릴은 3-퀴놀릴, 4-퀴놀릴, 5-퀴놀릴, 6-퀴놀릴, 7-퀴놀릴, 8-퀴놀릴을 포함하며, 이소퀴놀릴은 1-이소퀴놀릴, 3-이소퀴놀릴, 4-이소퀴놀릴, 5-이소퀴놀릴, 6-이소퀴놀릴, 7-이소퀴놀릴, 8-이소퀴놀릴기를 포함하며, 퀴녹살리닐은 2-퀴녹살리닐, 5-퀴녹살리닐, 6-퀴녹살리닐을 포함하며, 카바졸릴은 1-카바졸릴, 2-카바졸릴, 3-카바졸릴, 4-카바졸릴, 9-카바졸릴을 포함하며, 페난트리딘일은 1-페난트리딘일, 2-페난트리딘일, 3-페난트리딘일, 4-페난트리딘일, 6-페난트리딘일, 7-페난트리딘일, 8-페난트리딘일, 9-페난트리딘일, 10-페난트리딘일을 포함하며, 아크리디닐은 1-아크리디닐, 2-아크리디닐, 3-아크리디닐, 4-아크리디닐, 9-아크리디닐을 포함하며, 페난트롤리닐은 1,7-페난트롤린-2-일, 1,7-페난트롤린-3-일, 1,7-페난트롤린-4-일, 1,7-페난트롤린-5-일, 1,7-페난트롤린-6-일, 1,7-페난트롤린-8-일, 1,7-페난트롤린-9-일, 1,7-페난트롤린-10-일, 1,8-페난트롤린-2-일, 1,8-페난트롤린-3-일, 1,8-페난트롤린-4-일, 1,8-페난트롤린-5-일, 1,8-페난트롤린-6-일, 1,8-페난트롤린-7-일, 1,8-페난트롤린-9-일, 1,8-페난트롤린-10-일, 1,9-페난트롤린-2-일, 1,9-페난트롤린-3-일, 1,9-페난트롤린-4-일, 1,9-페난트롤린-5-일, 1,9-페난트롤린-6-일, 1,9-페난트롤린-7-일, 1,9-페난트롤린-8-일, 1,9-페난트롤린-10-일, 1,10-페난트롤린-2-일, 1,10-페난트롤린-3-일, 1,10-페난트롤린-4-일, 1,10-페난트롤린-5-일, 2,9-페난트롤린-1-일, 2,9-페난트롤린-3-일, 2,9-페난트롤린-4-일, 2,9-페난트롤린-5-일, 2,9-페난트롤린-6-일, 2,9-페난트롤린-7-일, 2,9-페난트롤린-8-일, 2,9-페난트롤린-10-일, 2,8-페난트롤린-1-일, 2,8-페난트롤린-3-일, 2,8-페난트롤린-4-일, 2,8-페난트롤린-5-일, 2,8-페난트롤린-6-일, 2,8-페난트롤린-7-일, 2,8-페난트롤린-9-일, 2,8-페난트롤린-10-일, 2,7-페난트롤린-1-일, 2,7-페난트롤린-3-일, 2,7-페난트롤린-4-일, 2,7-페난트롤린-5-일, 2,7-페난트롤린-6-일, 2,7-페난트롤린-8-일, 2,7-페난트롤린-9-일, 2,7-페난트롤린-10-일을 포함하며, 페나지닐은 1-페나지닐, 2-페나지닐을 포함하며, 페노싸이아지닐은 1-페노싸이아지닐, 2-페노싸이아지닐, 3-페노싸이아지닐, 4-페노싸이아지닐, 10-페노싸이아지닐을 포함하며, 페녹사지닐은 1-페녹사지닐, 2-페녹사지닐, 3-페녹사지닐, 4-페녹사지닐, 10-페녹사지닐을 포함하며, 옥사졸릴은 2-옥사졸릴, 4-옥사졸릴, 5-

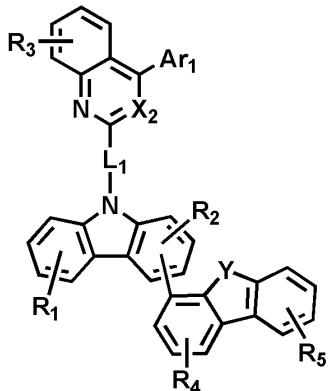
옥사졸릴을 포함하며, 옥사디아졸은 2-옥사디아졸릴, 5-옥사디아졸릴을 포함하며, 퓨라잔일은 3-퓨라잔일을 포함하며, 다이벤조퓨란일은 1-다이벤조퓨란일, 2-다이벤조퓨란일, 3-다이벤조퓨란일, 4-다이벤조퓨란일을 포함하며, 다이벤조싸이오페닐은 1-다이벤조싸이오페닐, 2-다이벤조싸이오페닐, 3-다이오벤조싸이오페닐, 4-다이오벤조싸이오페닐을 모두 포함한다.

[0033] 또한, 본 발명에 기재되어 있는 '(C1-C30)알킬'기는 바람직하게는 (C1-C20)알킬이고, 더 바람직하게는 (C1-C10)알킬이며, '(C6-C30)아릴'기는 바람직하게는 (C6-C20)아릴이다. '(C2-C30)헥테로아릴'기는 바람직하게는 (C2-C20)헥테로아릴이다. '(C3-C30)시클로알킬'기는 바람직하게는 (C3-C20)시클로알킬이고, 더 바람직하게는 (C3-C7)시클로알킬이다. '(C2-C30)알케닐 또는 알키닐'기는 바람직하게는 (C2-C20)알케닐 또는 알키닐이고, 더 바람직하게는 (C2-C10)알케닐 또는 알키닐이다.

[0034] 또한 본 발명에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 '치환'은 비치환된 치환기에 더 치환되는 경우를 뜻하며, 상기 L₁, Ar₁, R₁ 내지 R₉, R' 및 R₁₁ 내지 R₂₂에 더 치환되는 치환기는 서로 독립적으로 중수소, 할로겐, 할로겐이 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C6-C30)아릴이 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴, 5원 내지 7원의 헥테로시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헥테로시클로알킬, (C3-C30)시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 (C6-C30)시클로알킬, R^aR^bSi-, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, 시아노, 카바졸릴, -NR^dR^e, -BR^fR^g, -PR^hRⁱ, -P(=O)R^jR^k, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴, R^lT-, R^mC(=O)-, R^mC(=O)O-, 카르복실, 나이트로 또는 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이고, R^a 내지 R^l는 서로 독립적으로 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴 또는 (C2-C30)헥테로아릴이고; T는 S 또는 O이고; R^m는 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알콕시, (C6-C30)아릴 또는 (C6-C30)아릴옥시인 것을 의미한다.

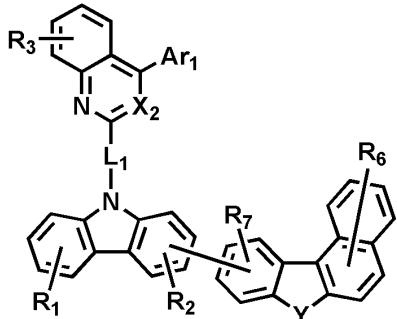
[0035] 상기 유기 발광 화합물은 하기 화학식 2 또는 9로 표시될 수 있다.

[0036] [화학식 2]



[0037]

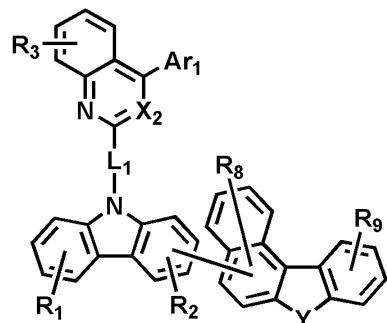
[0038] [화학식 3]



[0039]

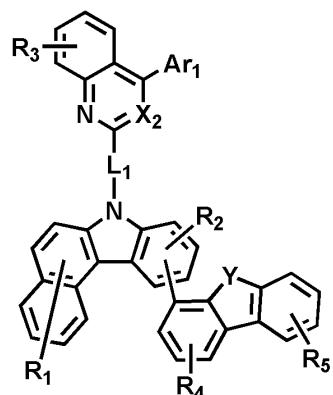
[0040]

[화학식 4]



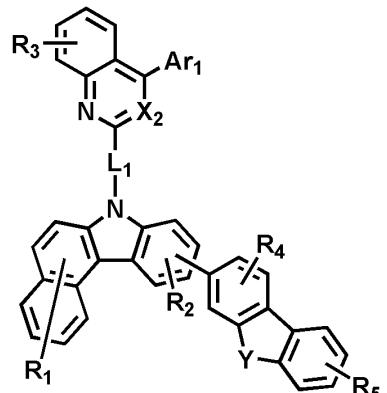
[0041]

[화학식 5]



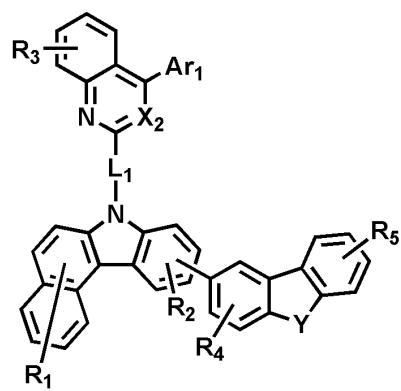
[0043]

[화학식 6]



[0045]

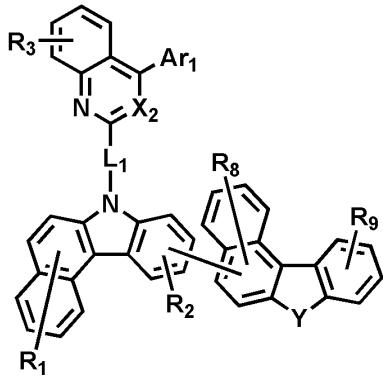
[화학식 7]



[0047]

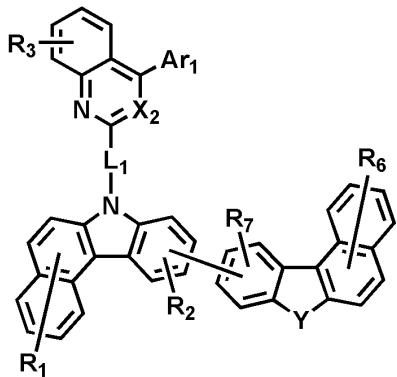
[0048]

[화학식 8]



[0049]

[화학식 9]



[0050]

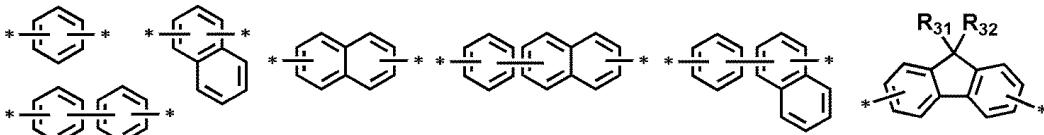
[상기 식에서, X_2 는 N 또는 CH이고; Y는 $-O-$, $-S-$, $-C(R_{11}R_{12})-$ 또는 $-N(R_{15})-$ 이며; L_1 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴렌이고; Ar_1 은 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이거나, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴이고; R_1 내지 R_9 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴, $NR_{16}R_{17}$ 또는 $SiR_{18}R_{19}R_{20}$ 이고; R_{11} , R_{12} , R_{15} 및 R_{16} 내지 R_{20} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴이거나, 상기 R_{16} 과 R_{17} 은 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알킬렌 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헥테로원자로 치환될 수 있다.]

[0053]

더욱 구체적으로, 상기 X_2 는 N 또는 CH이고; Y는 $-O-$, $-S-$, $-C(R_{11}R_{12})-$ 또는 $-N(R_{15})-$ 이며;

[0054]

L_1 은 단일결합 또는 하기 구조에서 선택되는 아릴렌이고;



[0055]

R_{31} 및 R_{32} 는 서로 독립적으로 메틸, 애틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, n-펜틸, i-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, n-노닐, 데실, 도데실, 헥사데실, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르애틸, 트리플루오르애틸, 퍼플루오르프로필, 퍼플루오르부틸, 페닐, 나프틸, 퍼리딜 또는 퀴놀릴이고;

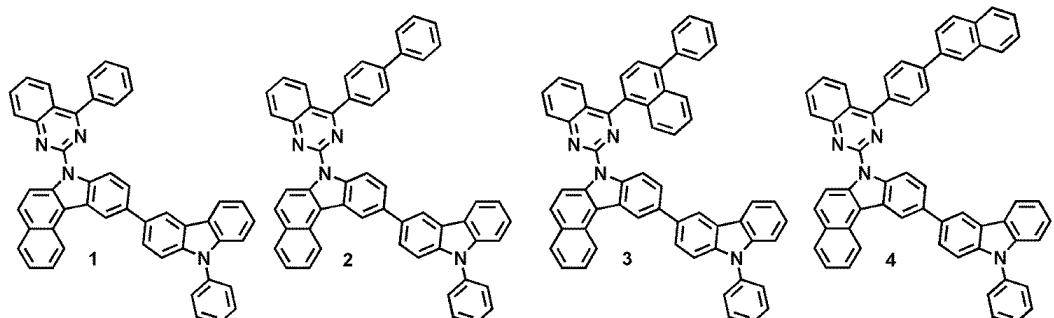
[0057]

Ar_1 은 수소, 메틸, 애틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, n-펜틸, i-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, n-노닐, 데실, 도데실, 헥사데실, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르애틸, 트리플루오르애틸, 퍼플

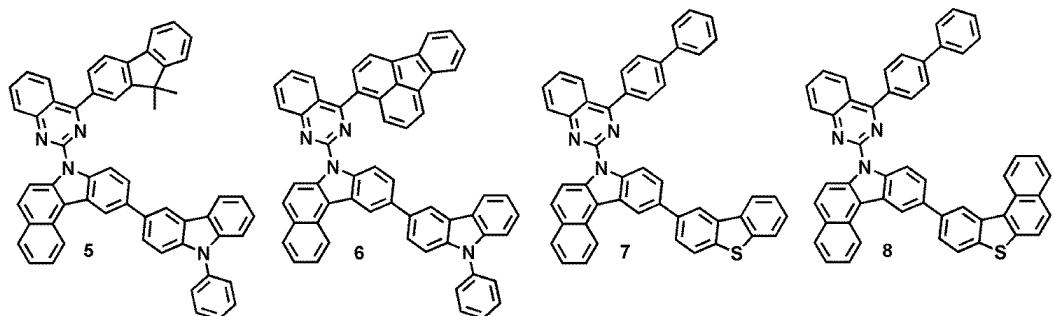
루오르프로필, 퍼플루오르부틸, 페닐, 바이페닐, 터페닐, 나프틸, 9,9-다이페닐플루오레닐, 9,9-다이메틸플루오레닐, 플루오란텐일, 피리딜, 다이벤조퓨란일, 다이벤조티오펜일 또는 N-페닐카바졸일이고, 상기 Ar₁의 페닐, 바이페닐, 터페닐, 나프틸 및 카바졸일은 각각 중수소, 플루오로, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, n-펜틸, i-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, n-노닐, 테실, 도데실, 헥사데실, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르에틸, 트리플루오르프로필, 퍼플루오르부틸, 트리페닐실릴, 트리메틸실릴, 디메틸페닐실릴, 디페닐메틸실릴, 페닐 및 나프틸, 9,9-다이페닐플루오레닐, 9,9-다이메틸플루오레닐, 페닐피리딜, 카바졸일, 플루오란텐일, 다이벤조퓨란일, 다이벤조티오펜일로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환체로 더 치환될 수 있고;

[0058] R₁ 내지 R₉는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 페닐, 피리딜, 다이벤조퓨란일, 다이벤조티오펜일, 아미노 또는 카바졸일이고; R₁₁, R₁₂ 및 R₁₅는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, n-펜틸, i-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, n-노닐, 테실, 도데실, 헥사데실, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르에틸, 트리플루오르에틸, 퍼플루오르프로필, 퍼플루오르부틸, 페닐, 바이페닐, 9,9-다이페닐플루오레닐, 9,9-다이메틸플루오레닐, 나프틸, 피리딜, N-페닐카바졸일 또는 퀴놀린이고, 상기 R₁₁, R₁₂ 및 R₁₅의 페닐은 중수소, 할로겐, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, n-펜틸, i-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, n-노닐, 테실, 도데실, 헥사데실, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르에틸, 트리플루오르에틸, 퍼플루오르프로필, 퍼플루오르부틸, 페닐 및 나프틸로부터 선택되는 하나 이상으로 더 치환될 수 있으며, 상기 R₁₁과 R₁₂은 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

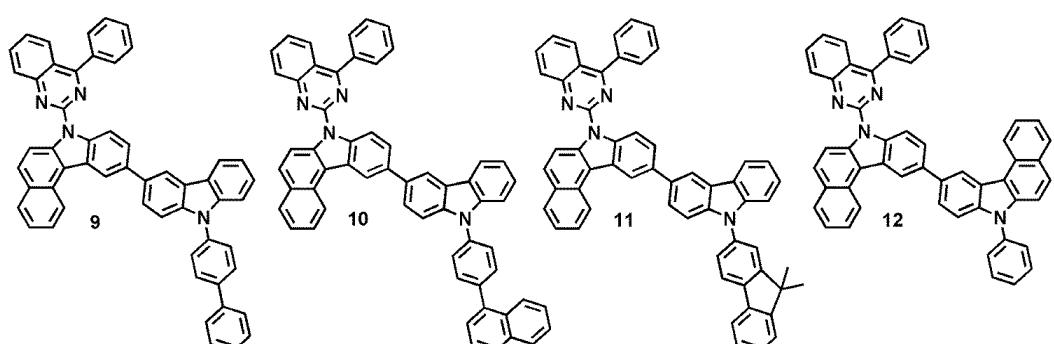
[0059] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 하기 화합물이 본 발명을 한정하는 것은 아니다.



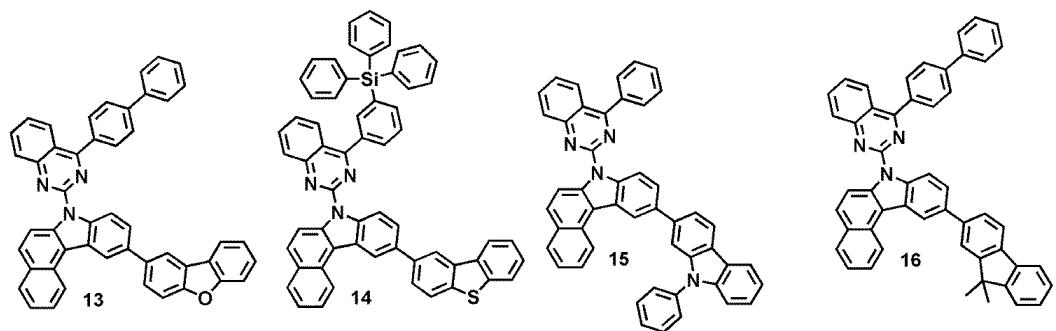
[0060]



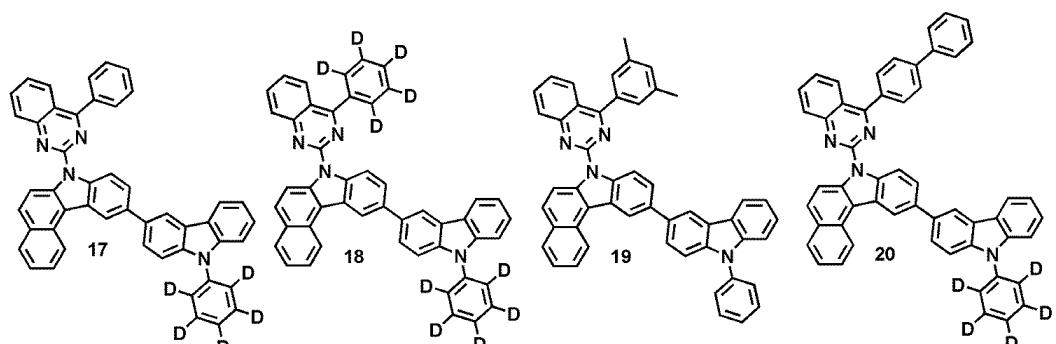
[0061]



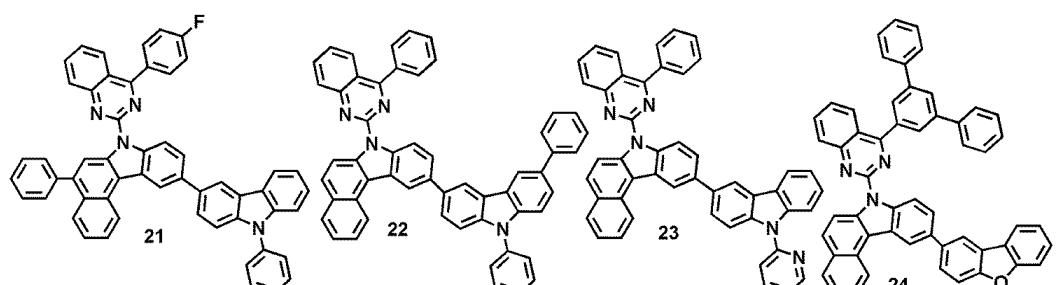
[0062]



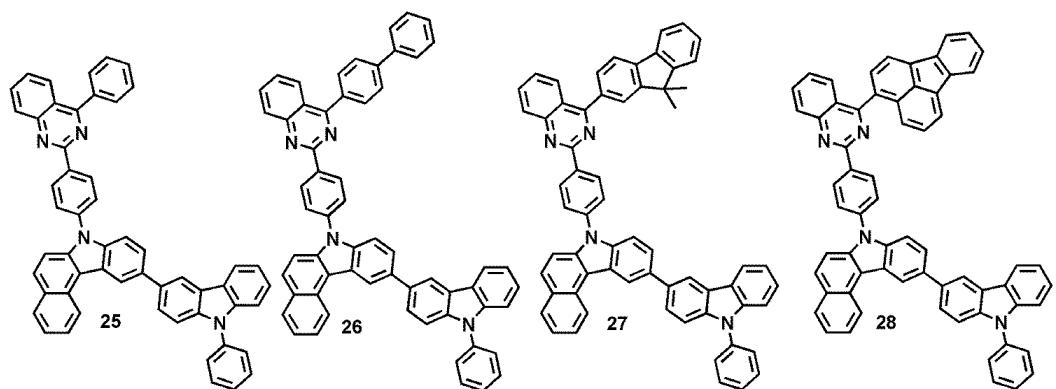
[0063]



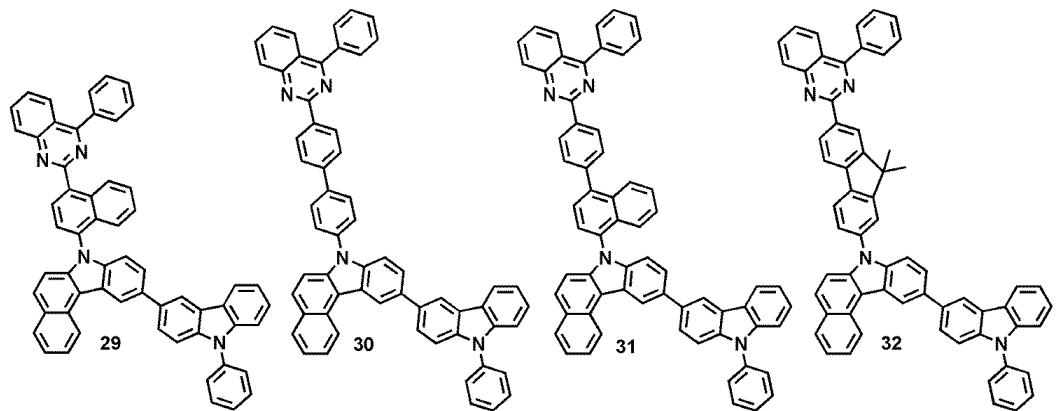
[0064]



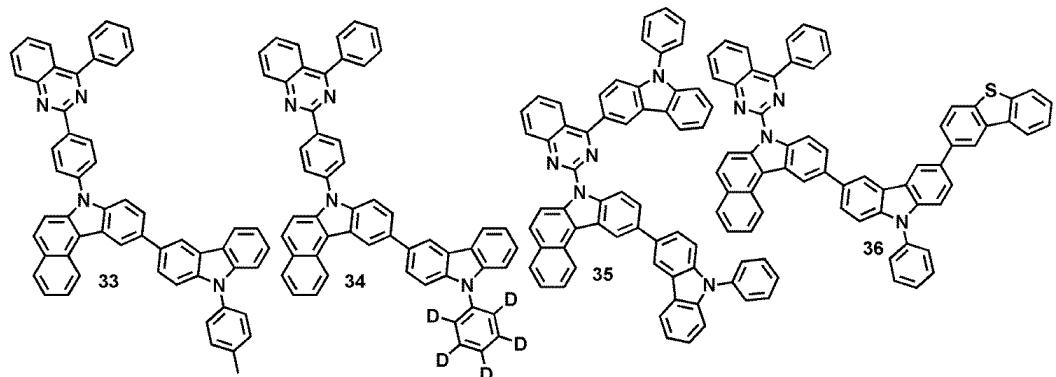
[0065]



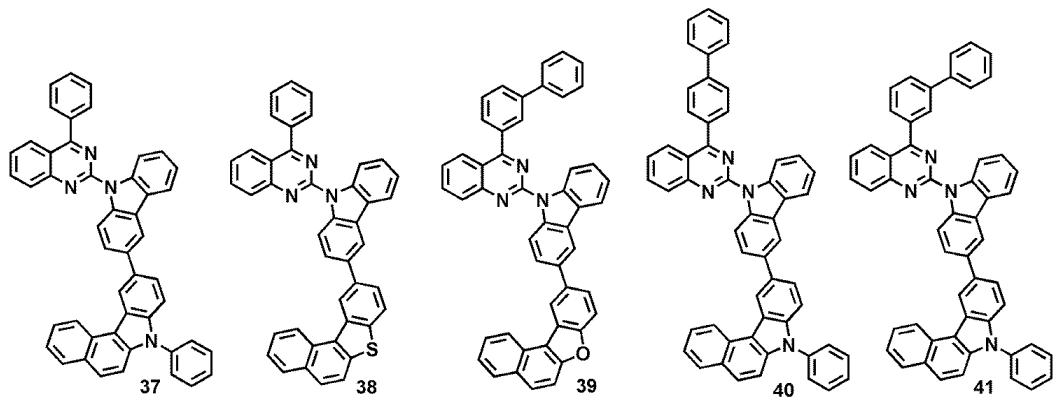
[0066]



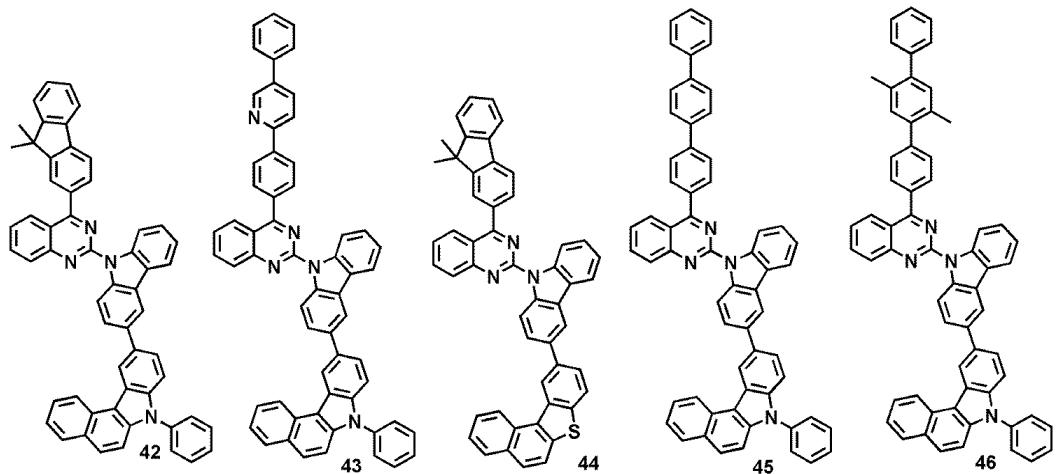
[0067]



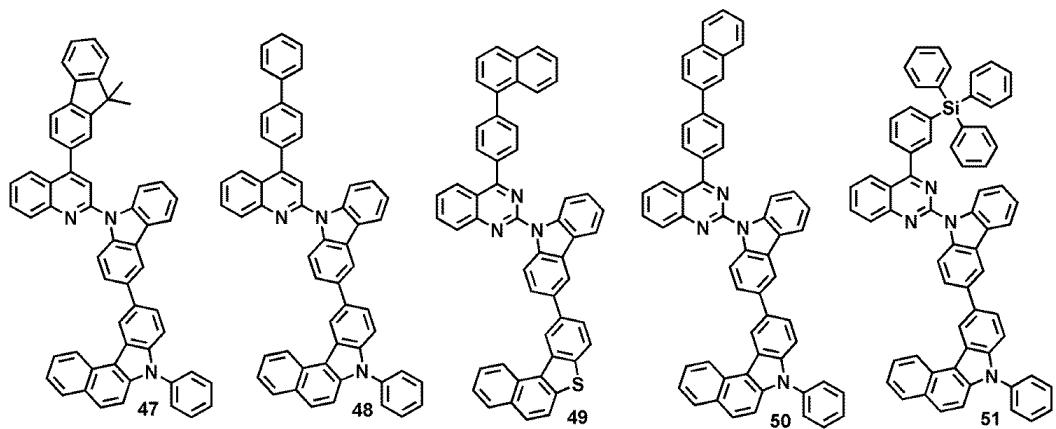
[0068]



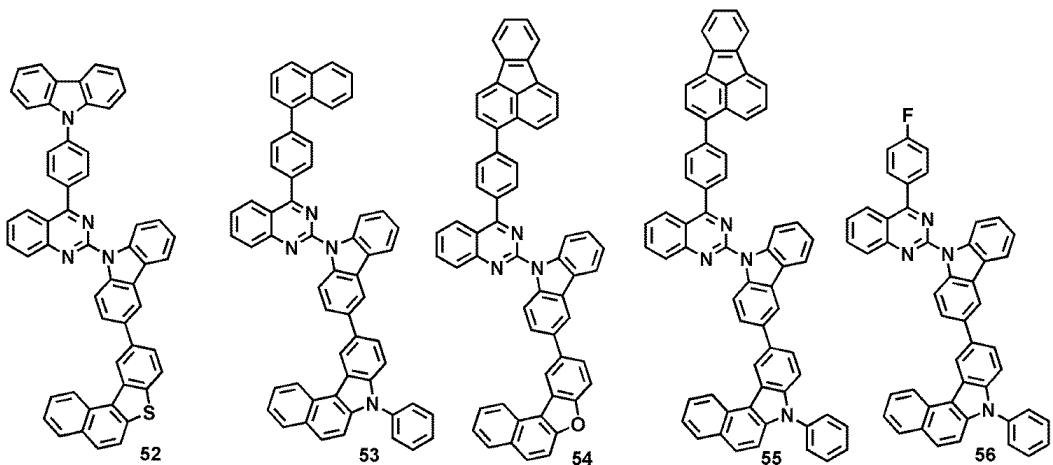
[0069]



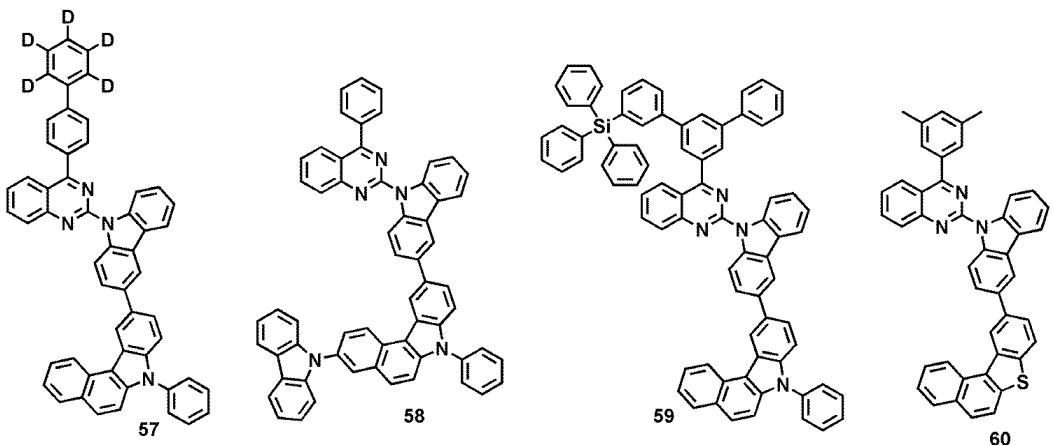
[0070]



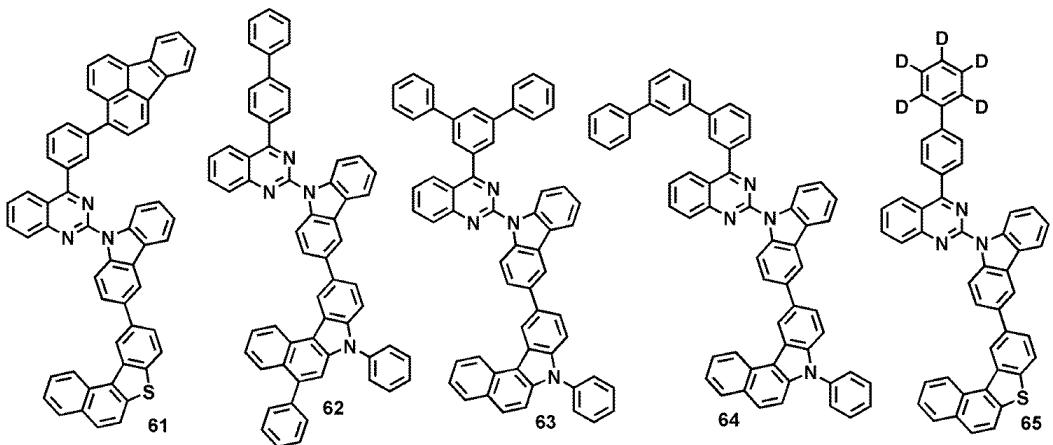
[0071]



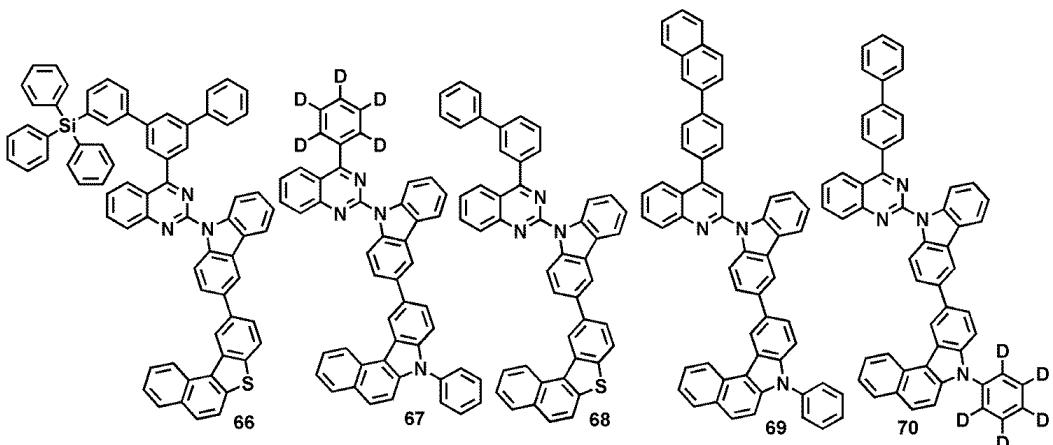
[0072]



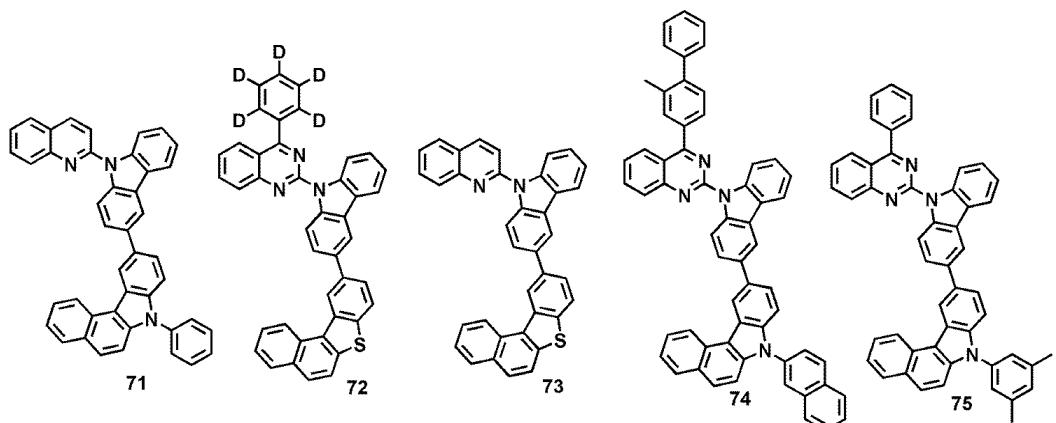
[0073]



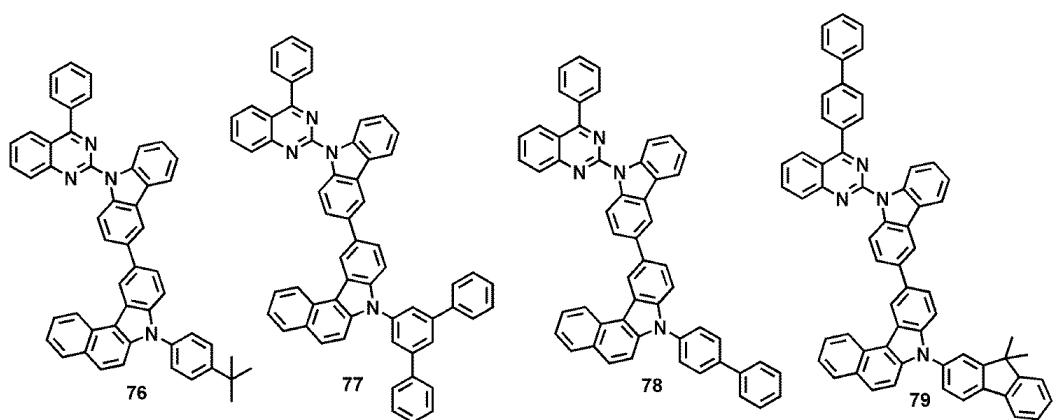
[0074]



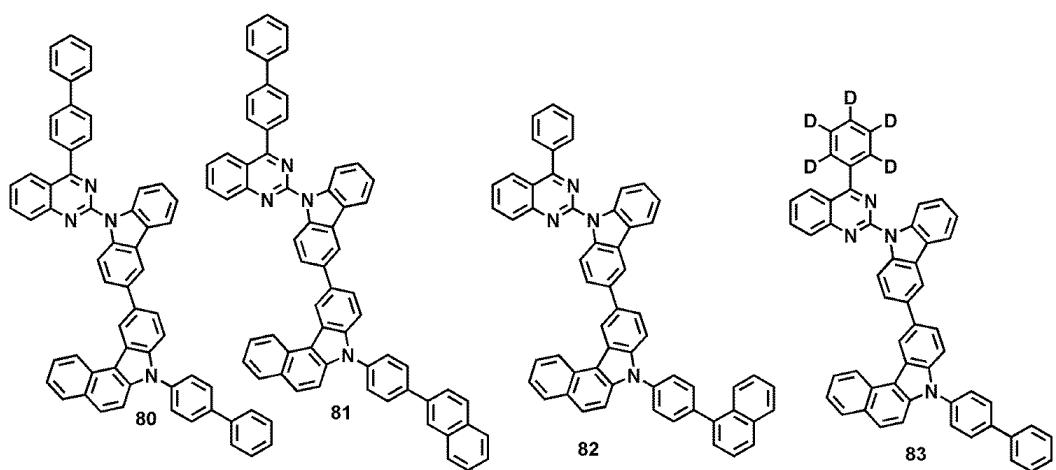
[0075]



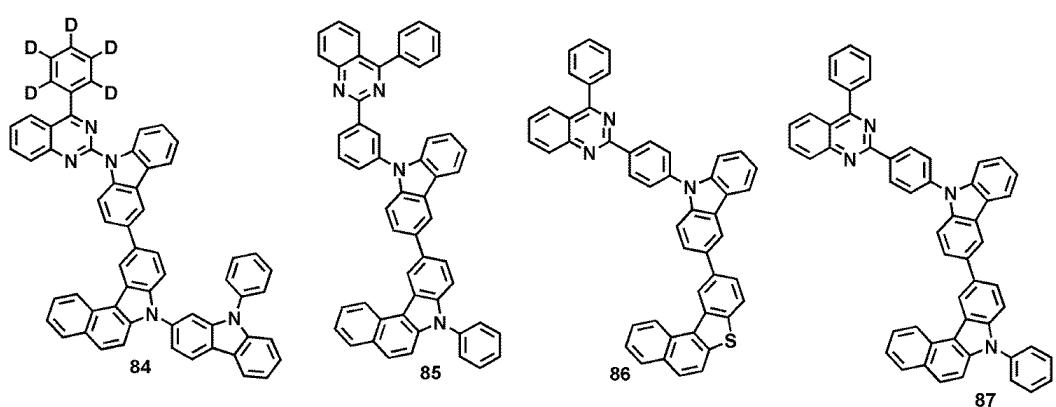
[0076]



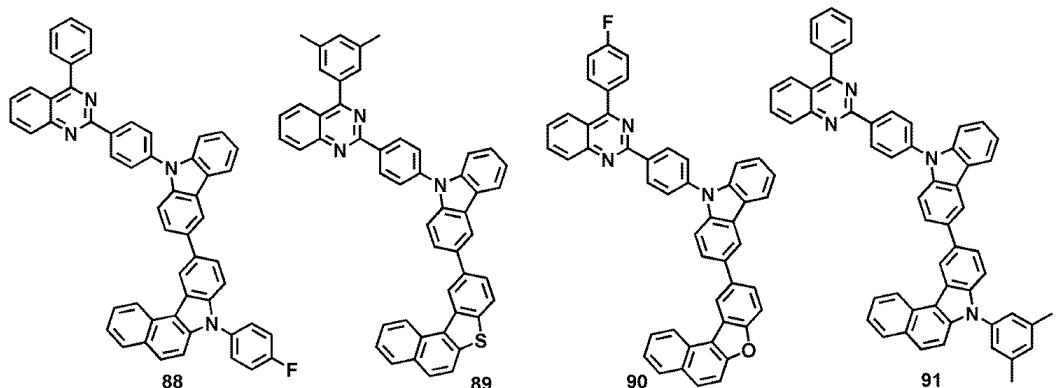
[0077]



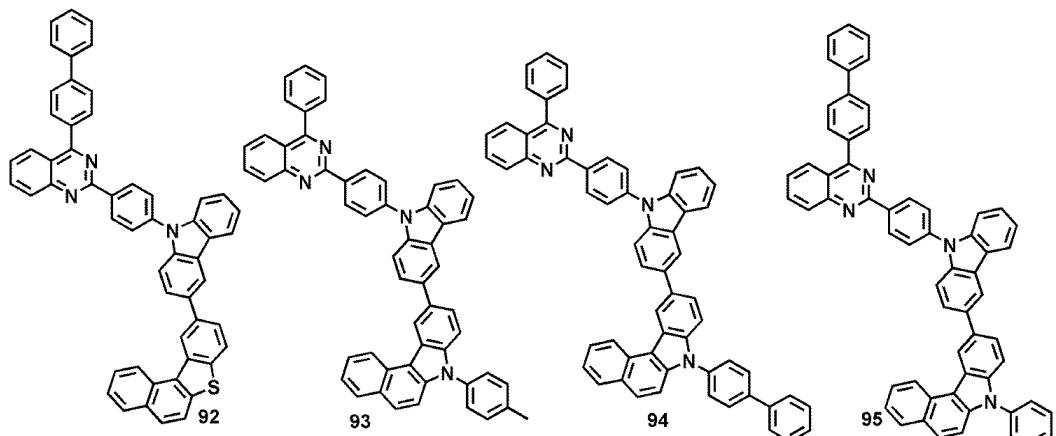
[0078]



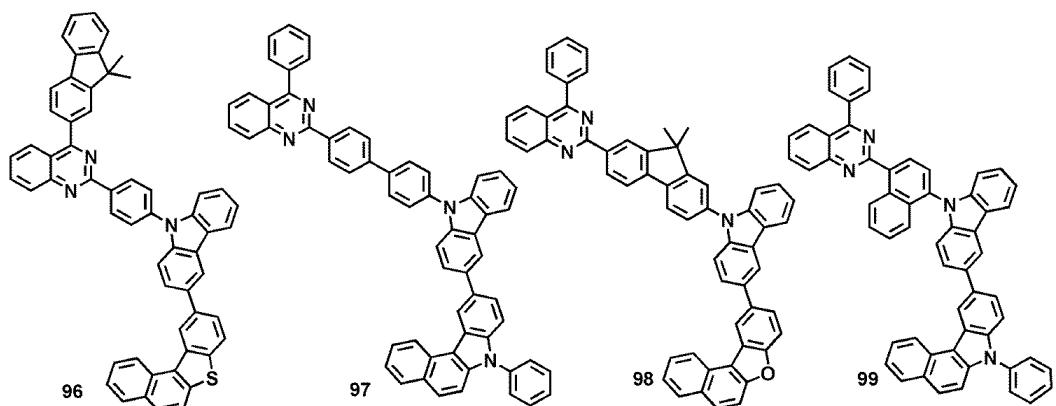
[0079]



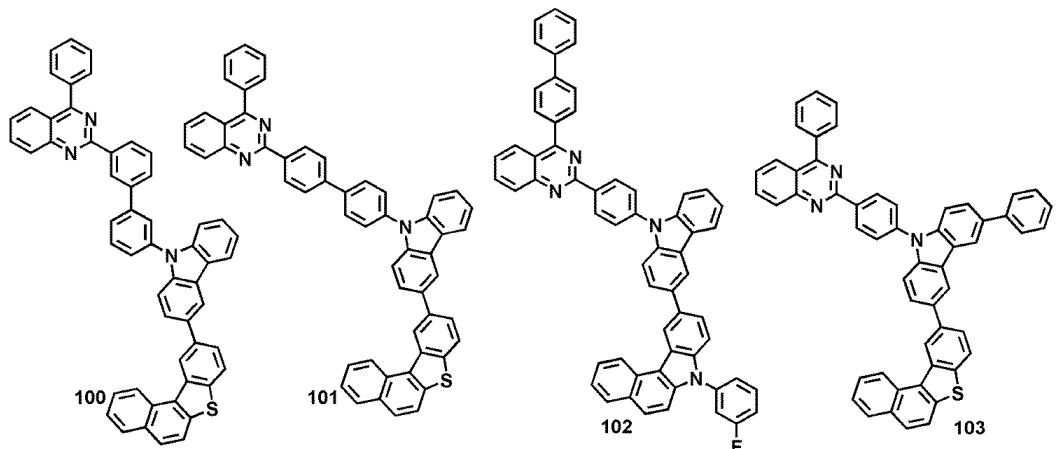
[0080]



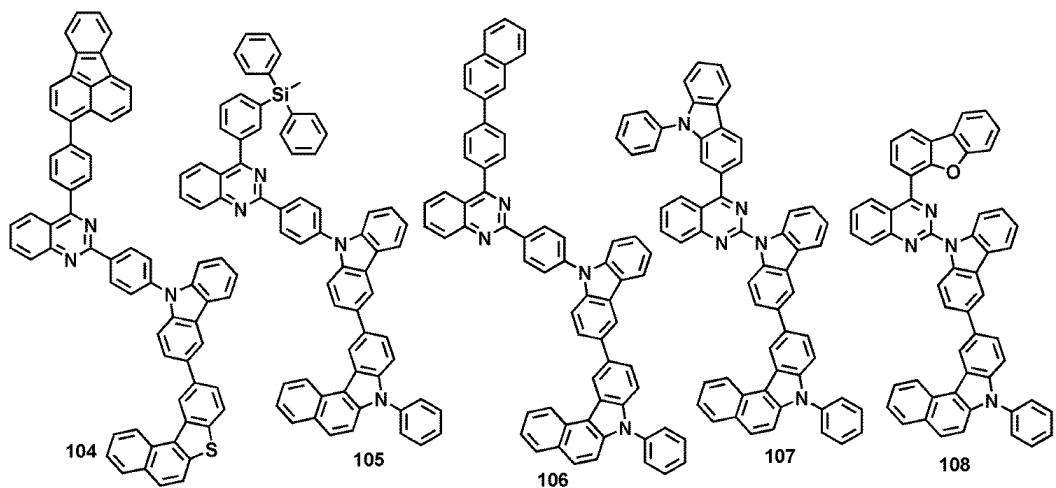
[0081]



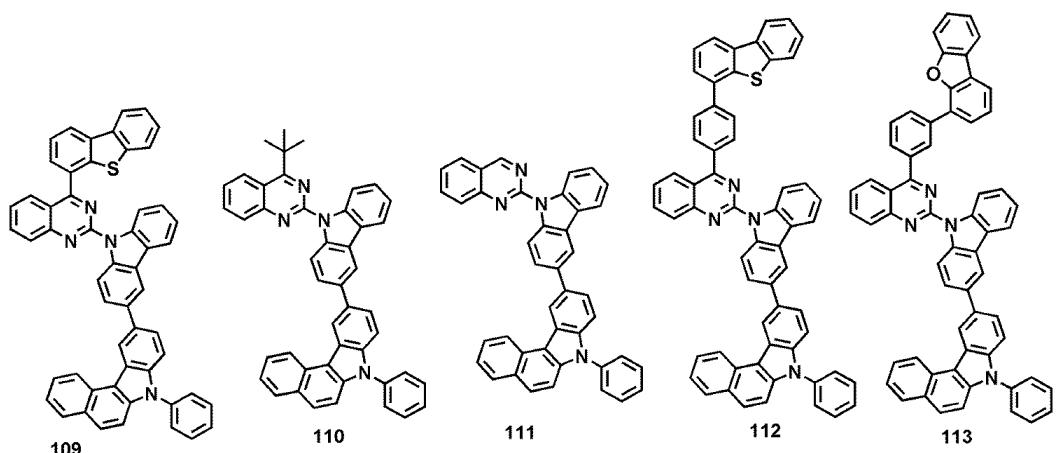
[0082]



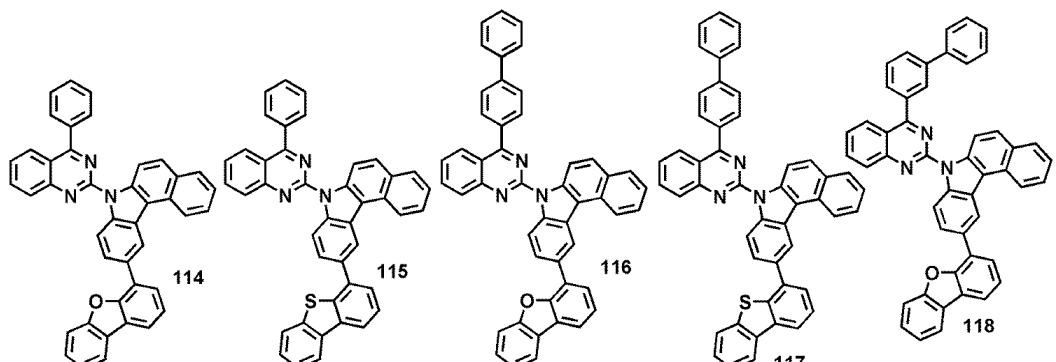
[0083]



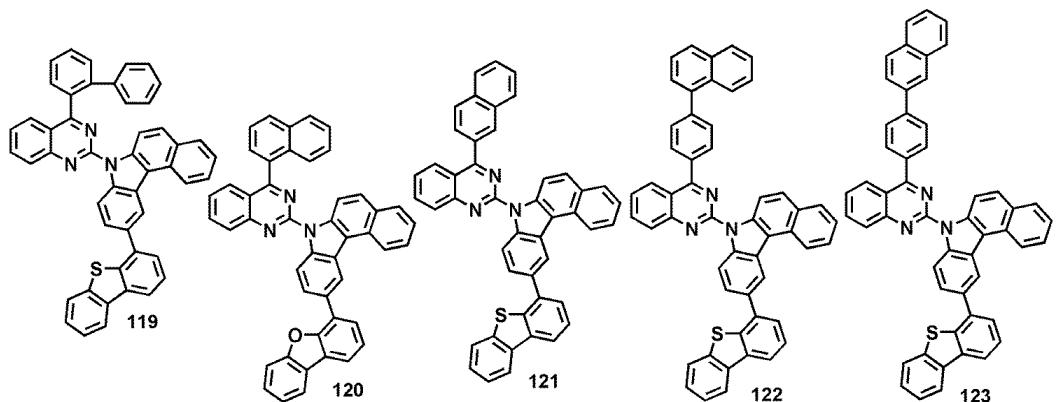
[0084]



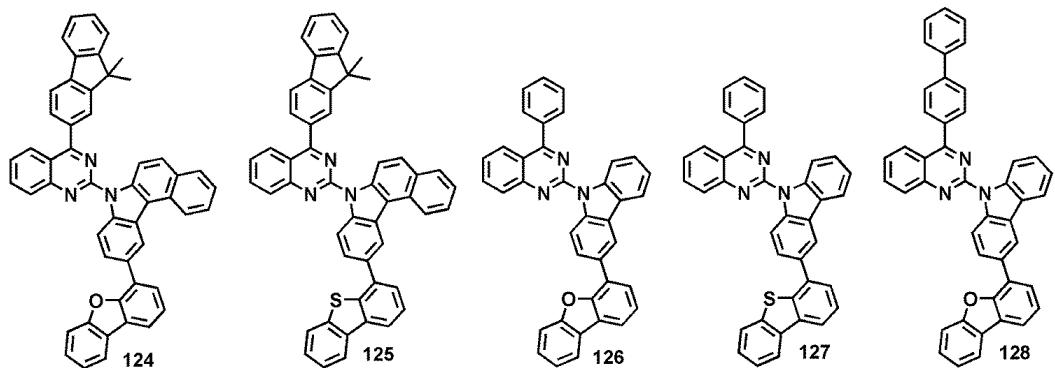
[0085]



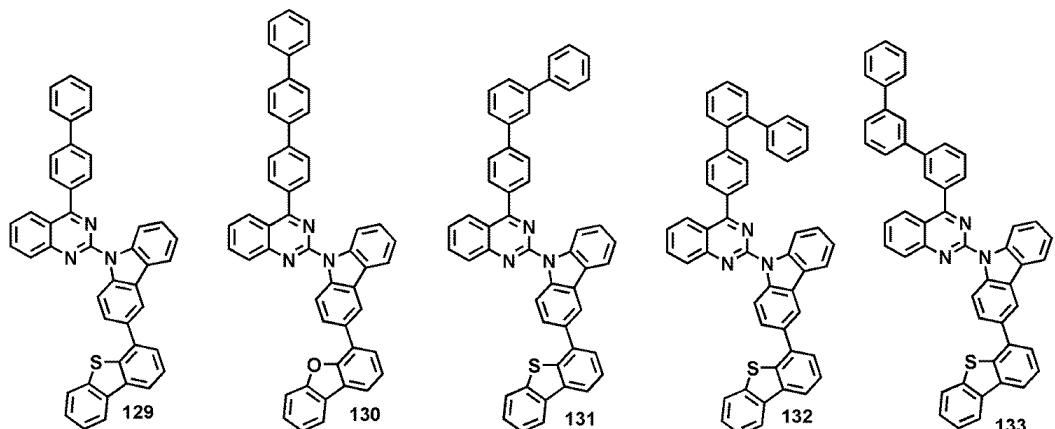
[0086]



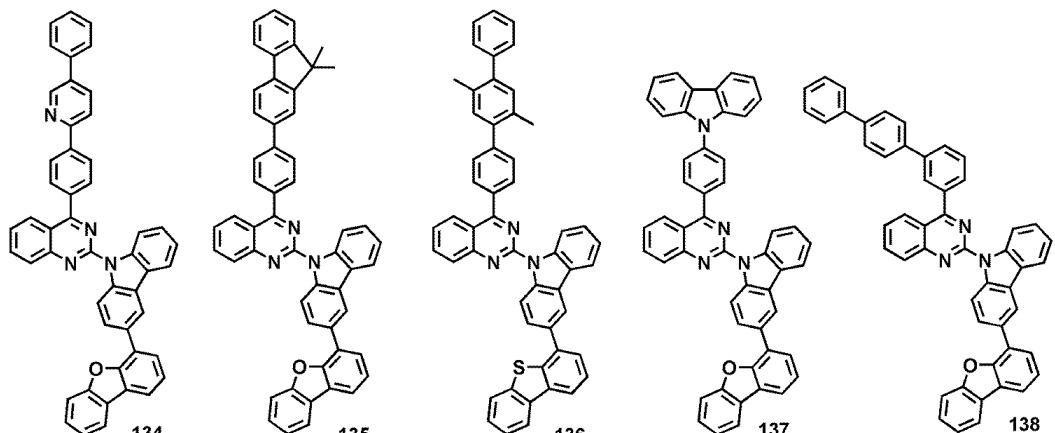
[0087]



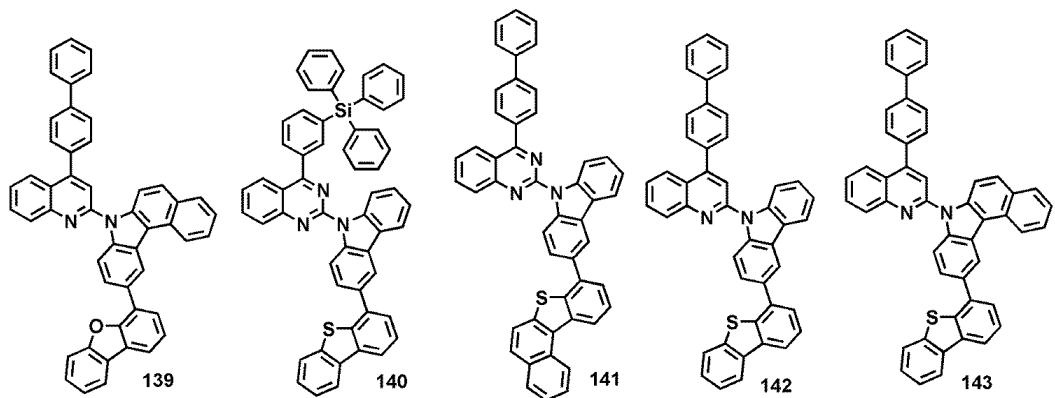
[0088]



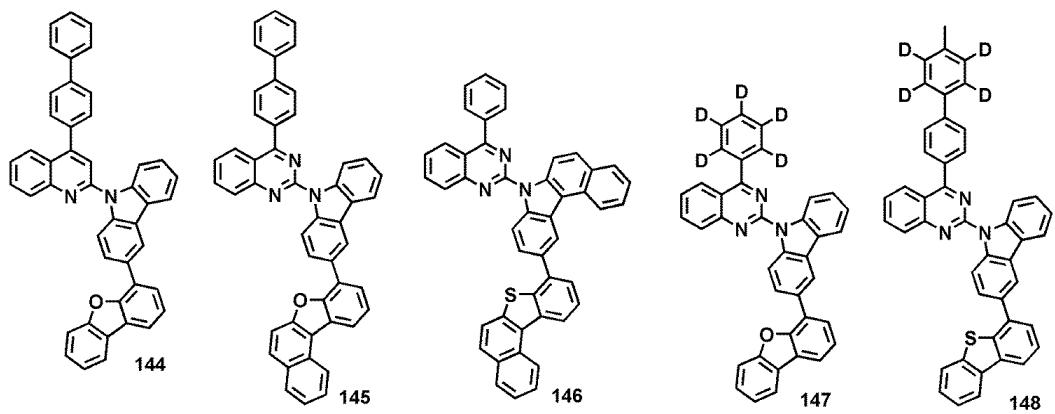
[0089]



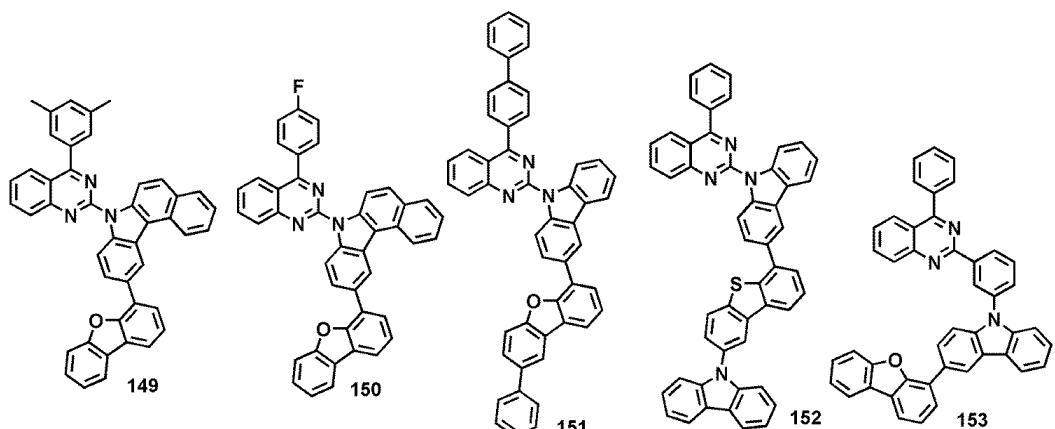
[0090]



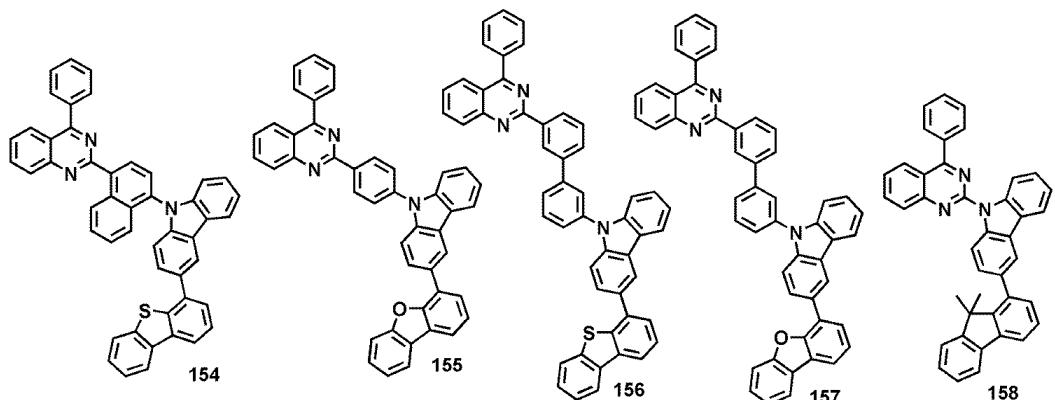
[0091]



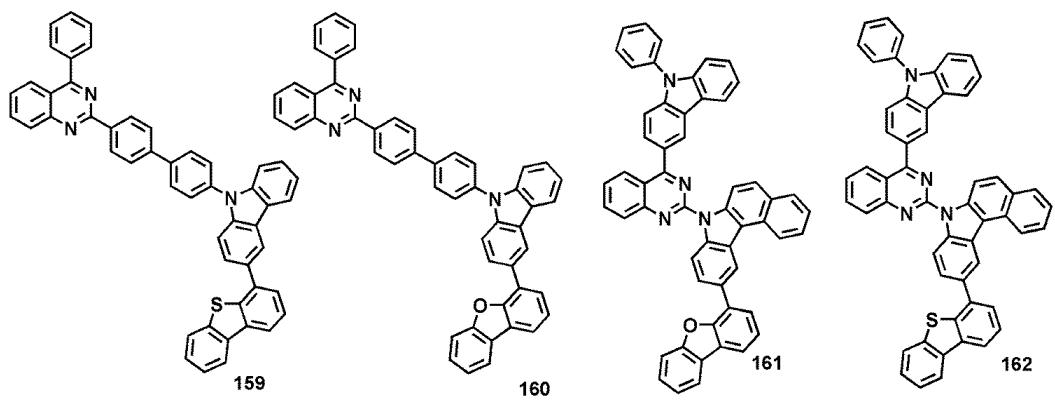
[0092]



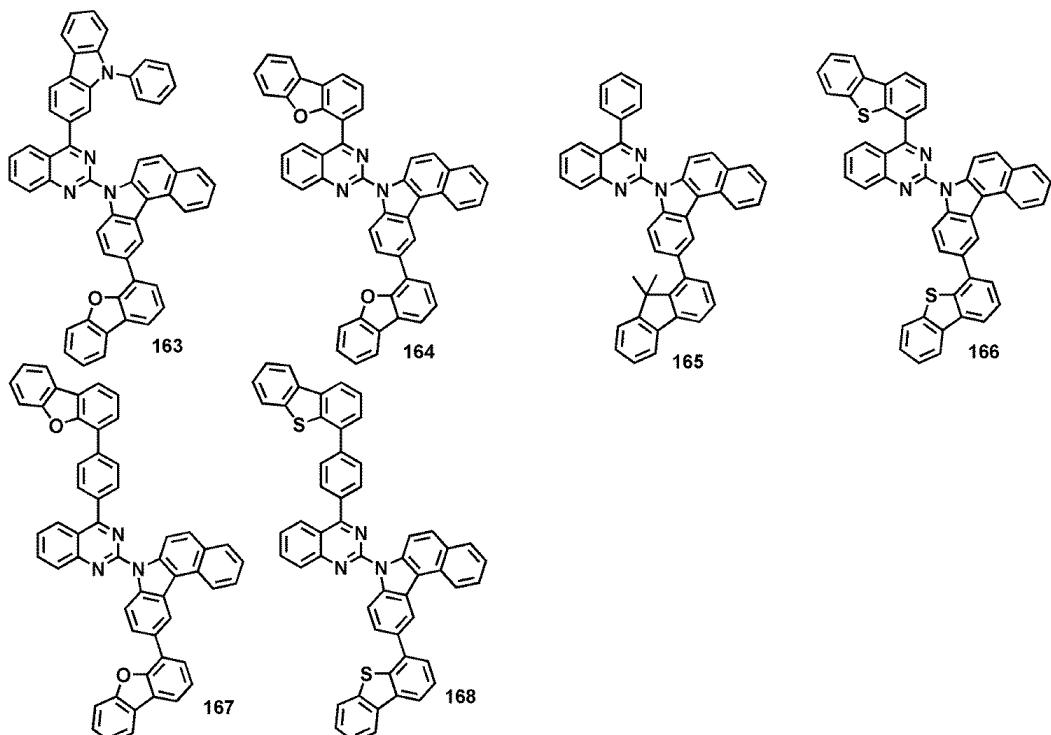
[0093]



[0094]



[0095]

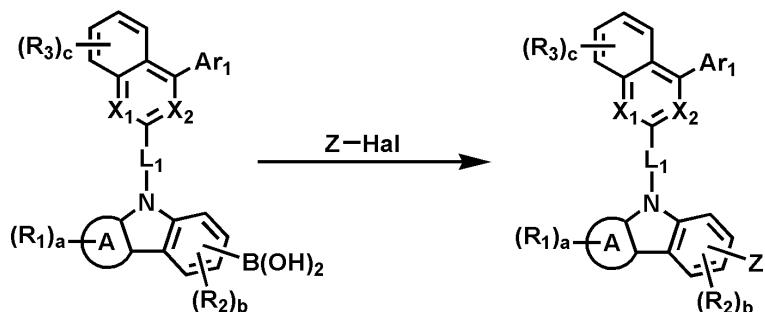


[0096]

본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 하기 반응식 1에 나타난 바와 같이, 제조될 수 있다.

[0097]

[반응식 1]



[0099]

[상기 반응식 1에서 A고리, X₁, X₂, L₁, Ar₁, R₁, R₂, R₃, a, b, c 및 Z은 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하고; Hal는 할로겐이다.]

[0100]

또한, 본 발명은 유기 전계 발광 소자를 제공하며, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어진 유기 전계 발광 소자에 있어서, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 발광 화합물을 하나 이상 포함하는 것을 특징으로 한다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층에서 상기 화학식 1의 유기 발광 화합물은 호스트 물질로 사용되어 진다.

[0101]

상기 발광층에서 상기 화학식 1의 유기발광화합물이 호스트로 사용되어질 때 하나 이상의 인광 도판트를 포함하는 것을 특징으로 한다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트는 특별히 제한되지는 않으나, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트는 하기 화학식 10로 표시되는 화합물로부터 선택되는 것이 바람직하다.

[0102]

[화학식 10]

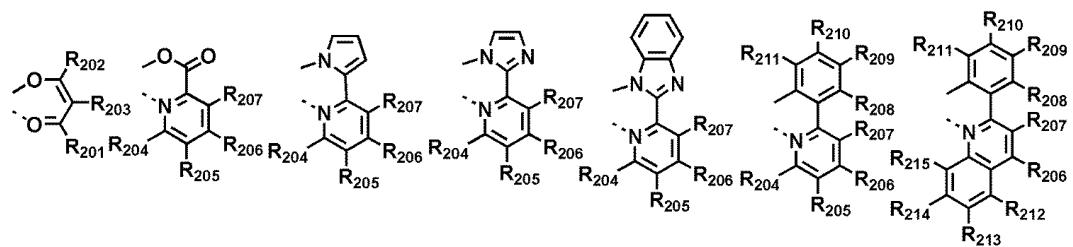
[0103]

M¹L¹⁰¹L¹⁰²L¹⁰³

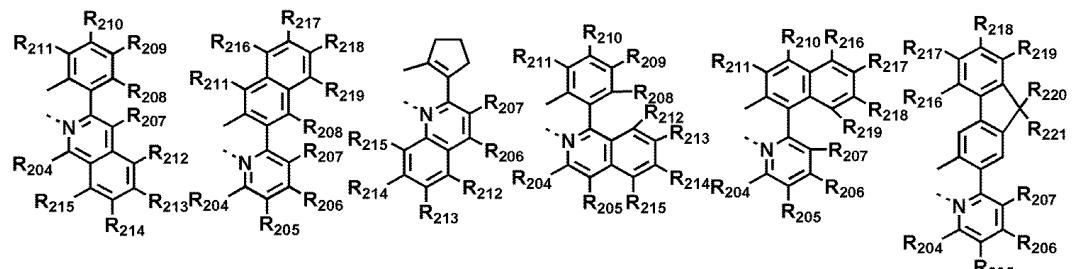
[0104]

여기서 M¹은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고,

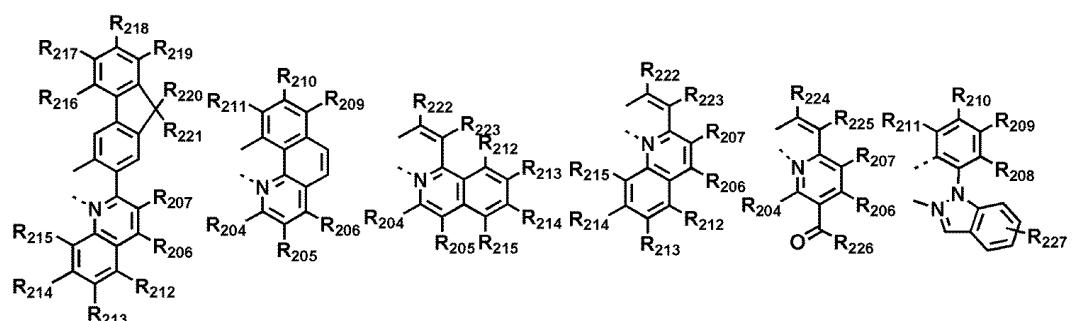
리간드 L¹⁰¹, L¹⁰² 및 L¹⁰³는 서로 독립적으로 하기 구조로부터 선택되어진다.



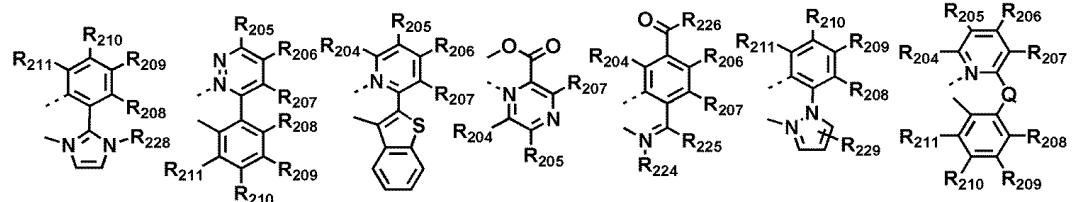
[0106]



[0107]



[0108]



[0109]

R₂₀₁ 내지 R₂₀₃은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C30)아릴 또는 할로겐이고;

[0110]

R₂₀₄ 내지 R₂₁₉는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 모노 또는 치환 또는 비치환된 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, SF₅, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 시아노 또는 할로겐이고;

[0111]

R₂₂₀ 내지 R₂₂₃는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬 또는 (C1-C30)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C30)아릴이고;

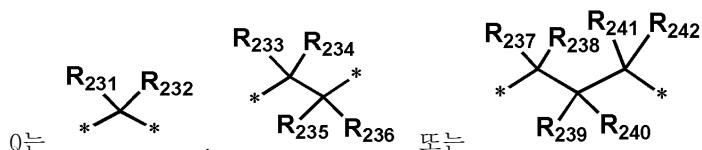
[0112]

R₂₂₄ 및 R₂₂₅는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴 또는 할로겐이거나, R₂₂₄와 R₂₂₅는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C12)알킬렌 또는 (C3-C12)알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하며;

[0113]

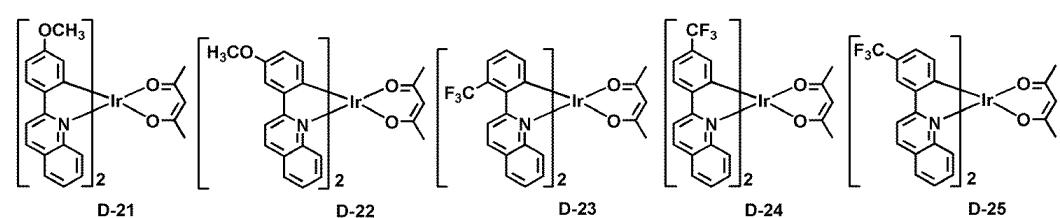
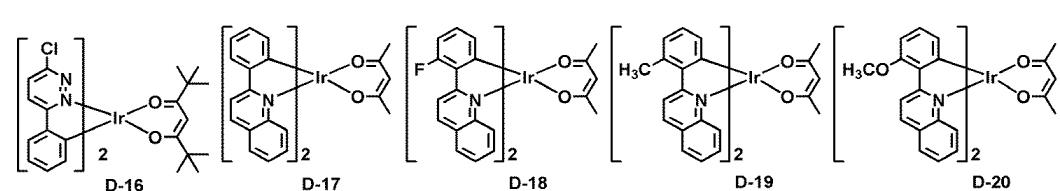
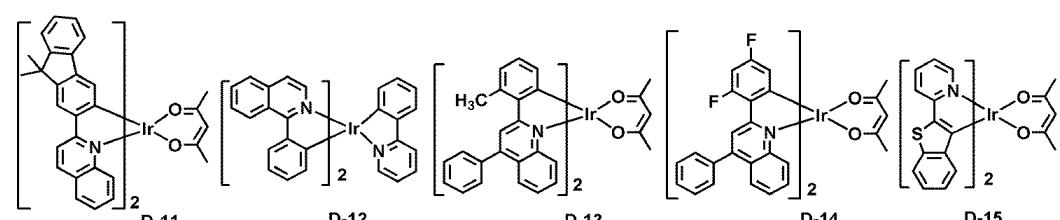
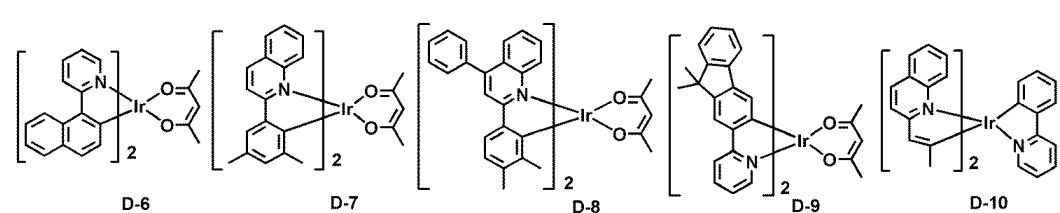
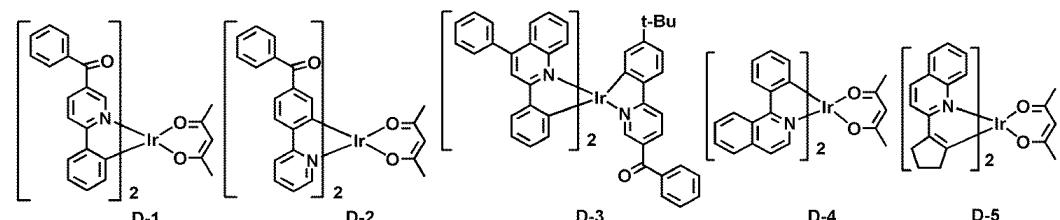
R₂₂₆은 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헥테로아릴 또는 할로겐이고;

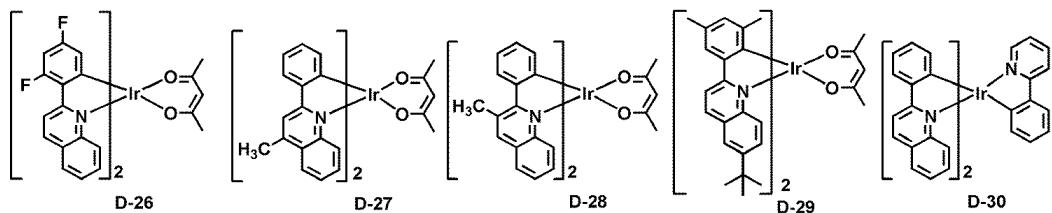
[0115] R₂₂₇ 내지 R₂₂₉은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴 또는 할로겐이고;



[0116] Q는 * , * , R₂₃₁, R₂₃₂ 또는 R₂₃₃, R₂₃₄ 또는 R₂₃₅, R₂₃₆이며, R₂₃₁ 내지 R₂₄₂는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알콕시, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로 고리 또는 융합고리를 형성할 수 있거나, R₂₀₇ 또는 R₂₀₈과 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 포화 또는 불포화의 융합고리를 형성할 수 있다.]

[0117] 상기 화학식 10의 인광 도판트 화합물은 하기 구조의 화합물로 예시될 수 있으나 이에 한정하는 것은 아니다.





[0123]

[0124] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 화학식 1의 유기 발광 화합물을 포함하고, 동시에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 상기 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물은 출원번호 제10-2008-0123276호, 제10-2008-0107606호 또는 제10-2008-0118428호에 예시되어 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0125]

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

[0126]

또한, 상기 유기물층에 상기 유기 발광 화합물 이외에 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함하는 유기발광층 하나 이상을 동시에 포함하여 백색 발광을 하는 유기 전계 발광 소자를 형성할 수 있다. 상기 청색, 녹색 또는 적색 발광을 하는 화합물은 출원번호 제10-2008-0123276호, 제10-2008-0107606호 또는 제10-2008-0118428호에 예시되어 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0127]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 일층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함) 이상을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 금속의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광매체층 측의 음극 표면에 할로겐화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 이것에 의해, 구동의 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드로서는 예컨대 SiO_x ($1 \leq X \leq 2$), AlO_x ($1 \leq X \leq 1.5$), SiON , SiAlON 등을 바람직하게 들 수 있으며, 할로겐화 금속으로서는 예컨대 LiF , MgF_2 , CaF_2 , 불화 희토류 금속 등을 바람직하게 들 수 있으며, 금속 산화물로서는 예컨대 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등을 바람직하게 들 수 있다.

[0128]

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

발명의 효과

[0129]

본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 발광 효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 우수한 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

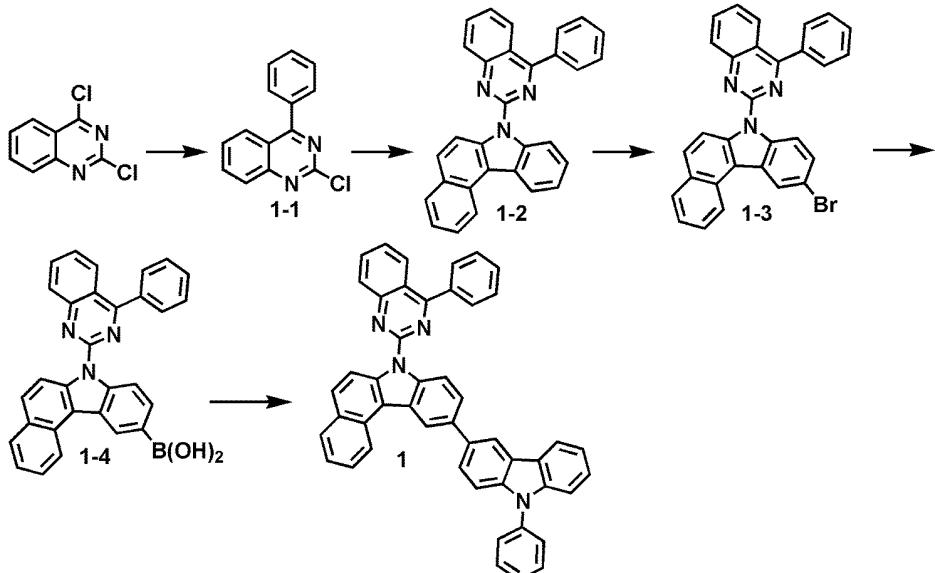
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0130]

이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 유기 발광 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광특성을 설명하나, 이는 단지 그 실시 양태를 예시하기 위한 것일 뿐, 본 발명의 범위를 한정하는 것은 아니다.

[0131]

[제조예 1] 화합물 1의 제조



[0132]

[0133]

화합물 1-1의 제조

[0134]

2,4-디클로로퀴나졸린 8.1g(40.6mmol), 페닐보론산 5.0g(40.6mmol), 툴루엔 200mL, 에탄올 50mL 및 물 50mL를 혼합한 후 $Pd(PPh_3)_4$ 1.9g(1.64mmol)과 K_2CO_3 12.9g(122mmol)을 첨가하였다. 상기 혼합물을 120°C에서 5시간동안 교반시킨 후 실온으로 식히고 염화암모늄 수용액 200mL로 반응을 종결시켰다. 상기 혼합물을 EA 500mL로 추출한 후, 중류수 50mL로 씻어주었다. 얻어진 유기층을 무수 $MgSO_4$ 로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 실리카겔 필터 후 재결정하여 화합물 1-1 6.6g(68%)을 얻었다.

[0135]

화합물 1-2의 제조

[0136]

7H-벤조[c]카바졸 8.9 g(41.10 mmol), 화합물 1-1 11.9g(49.32mmol), $Pd(OAc)_2$ 0.46g, NaOt-bu 7.9g(82.20mmol), 툴루엔 100mL, $P(t\text{-}bu)_3$ 2mL(4.11mmol, 50% in toluene)을 넣고 환류 교반하였다. 10시간 후에 상온으로 냉각하고 중류수를 넣고 EA로 추출하였다. 무수 $MgSO_4$ 으로 건조하고 감압 건조하였다. 컬럼 분리하여 화합물 1-2 14.5g(84%)을 얻었다.

[0137]

화합물 1-3의 제조

[0138]

화합물 1-2 14.3g(33.98mmol)를 1구 플라스크에 넣고 진공 분위기로 만든 후 아르곤으로 채운다. THF 500mL를 넣고 0°C에서 10분간 교반한다. NBS 7.35g(40.78mmol)을 첨가하고 상온에서 하루 동안 교반한다. 반응이 종결되면 중류수와 EA로 추출한다. 유기층을 무수 $MgSO_4$ 로 건조시킨 다음 회전 증발기로 용매를 제거한 후 헥산과 EA를 전개 용매로 하여 컬럼 크로마토그래피 작업으로 화합물 1-3 14.6g(85%)를 얻었다.

[0139]

화합물 1-4의 제조

[0140]

화합물 1-3 13.2g(26.30mmol)를 1구 플라스크에 넣고 진공 분위기로 만든 후 아르곤으로 채운다. THF 500mL를 넣고 -78°C에서 10분간 교반한다. n-BuLi(2.5M in hexane) 15.8mL(39.45mmol)를 적가하고 1시간 30분간 -78°C에서 교반한다. 트리메틸보레이트 4.85mL(39.45mmol)를 -78°C에서 첨가한다. 30분간 -78°C에서 교반한 후 실온에서 4시간동안 교반한다. 반응이 종결되면 중류수와 EA로 추출한다. 유기층을 무수 $MgSO_4$ 로 건조시킨 다음 회전 증발기로 용매를 제거한 후 헥산과 EA를 전개 용매로 하여 컬럼 크로마토그래피 작업으로 화합물 1-4 6.9g(18.05mmol, 65%)를 얻었다.

[0141]

화합물 1의 제조

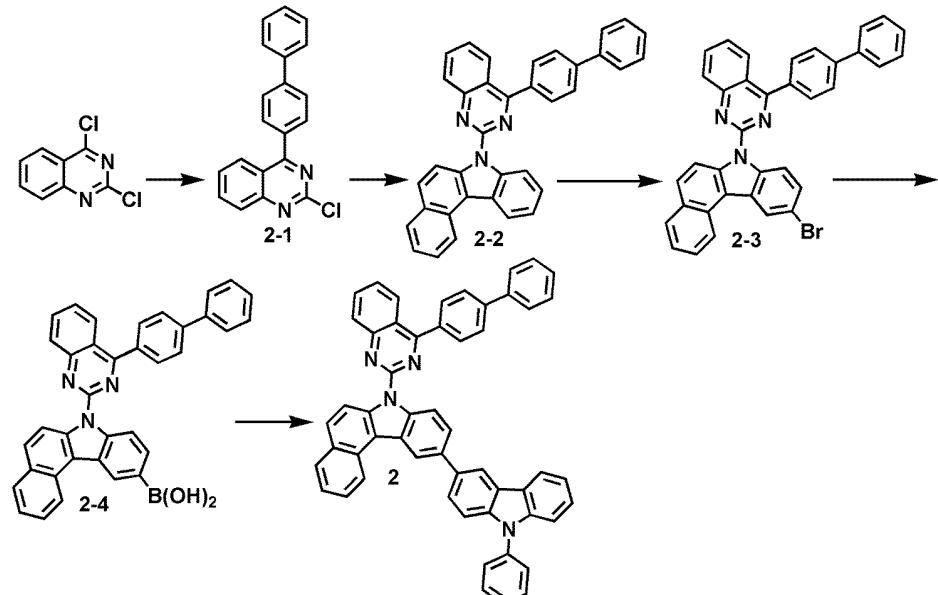
[0142]

화합물 1-4 8.1g(17.4mmol), 3-브로모-9-페닐-9H-카바졸 6.7g(20.88mmol), $Pd(PPh_3)_4$ 0.8g(0.7mmol), 2M K_2CO_3 수용액 20mL, 툴루엔 100mL, 에탄올 50mL를 넣고 12시간 환류 교반한다. 중류수로 씻어 주고 EA로 추출한다. 무

수MgSO₄로 건조하고 감압 증류한다. 컬럼 분리하여 화합물 1 6.8g(10.3mmol, 58%)을 얻었다.

[0143] MS/FAB: 663(found), 662.78(calculated)

[0144] [제조예 2] 화합물 2의 제조



[0145]

화합물 2-1의 제조

[0147]

2,4-디클로로퀴나졸린 8.1g(40.6mmol), 바이페닐 폐닐보론산 8.0g(40.6mmol), 틀루엔 200mL, 에탄올 50mL 및 물 50mL를 혼합한 후 Pd(PPh₃)₄ 1.9g(1.64mmol)과 K₂CO₃ 12.9g(122mmol)을 첨가하였다. 상기 혼합물을 120℃에서 5시간동안 교반시킨 후 실온으로 식히고 염화암모늄 수용액 200mL로 반응을 종결시켰다. 상기 혼합물을 EA 500mL로 추출한 후, 중류수 50mL로 씻어주었다. 얻어진 유기층을 무수MgSO₄로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 실리카겔 필터 후 재결정하여 화합물 2-1 8.2g(25.9mmol, 64%)을 얻었다.

[0148]

화합물 2-2의 제조

[0149]

화합물 1-2와 동일한 방법으로 화합물 2-2 9.5g(19.1mmol, 74%)을 제조하였다.

[0150]

화합물 2-3의 제조

[0151]

화합물 1-3과 동일한 방법으로 화합물 2-3 9.0g(15.6mmol, 82%)을 제조하였다.

[0152]

화합물 2-4의 제조

[0153]

화합물 1-4과 동일한 방법으로 화합물 2-4 4.0g(7.4mmol, 47%)을 제조하였다.

[0154]

화합물 2의 제조

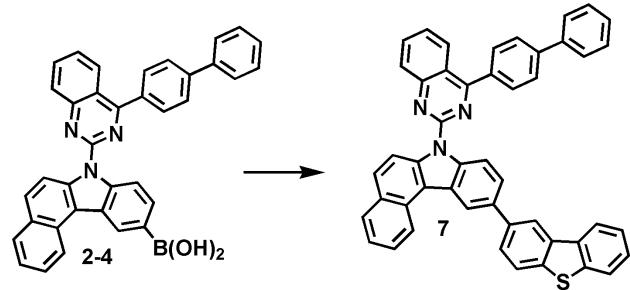
[0155]

화합물 2-4 4.0g(7.4mmol)와 3-브로모-9-페닐-9H-카바졸 6.7g(20.88mmol)을 화합물 1과 동일한 방법으로 화합물 2 2.8g(4.6mmol, 51%)을 제조하였다.

[0156]

MS/FAB: 739(found), 738.87(calculated).

[0157] [제조예 3] 화합물 7의 제조



[0158]

화합물 7의 제조

[0159]

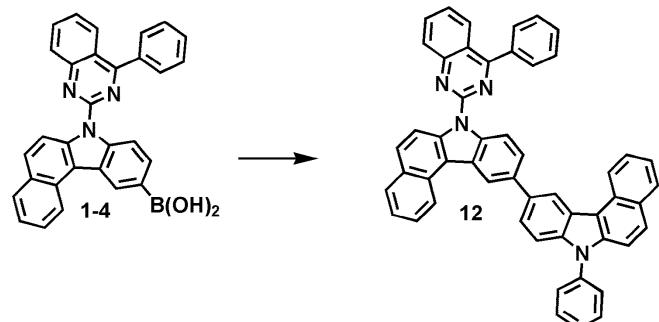
화합물 2-4 4.0g(7.4mmol)와 2-브로모다이벤조[b,d]티오펜 5.5g(20.88mmol)을 화합물 1과 동일한 방법으로 화합물 7 2.8g(4.6mmol, 51%)을 제조하였다.

[0160]

MS/FAB: 604(found), 603.73(calculated).

[0161]

[제조예 4] 화합물 12의 제조



[0162]

화합물 12의 제조

[0163]

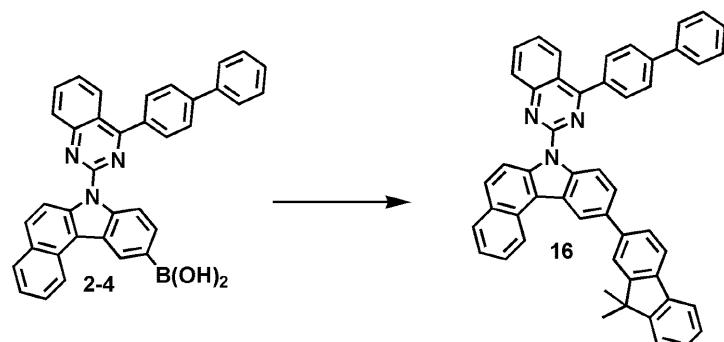
화합물 1-4 6.9g(18.05mmol)과 10-브로모-7-페닐-7H-벤조[c]카바졸 7.8g(20.88mmol)을 화합물 1과 동일한 방법으로 화합물 12 6.8g(9.5mmol, 53%)을 제조하였다.

[0164]

MS/FAB: 713(found), 712.84(calculated).

[0165]

[제조예 5] 화합물 16의 제조



[0166]

화합물 16의 제조

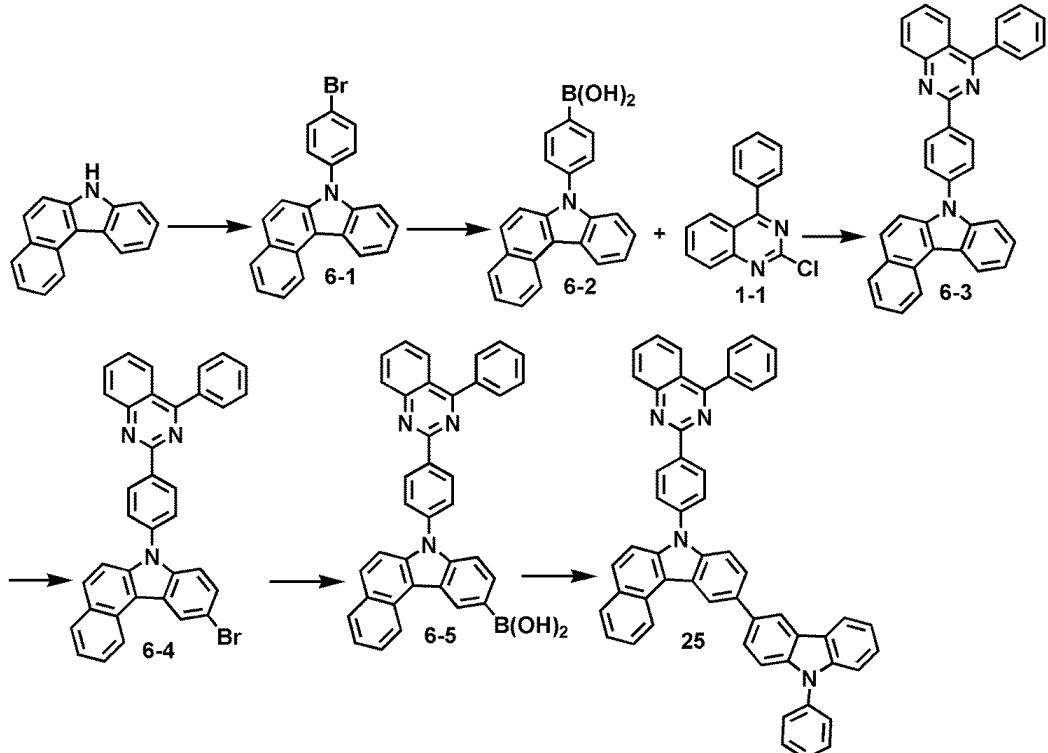
[0167]

화합물 2-4 9.8g(18.05mmol)과 2-브로모-9,9-다이메틸-9H-플루오렌 5.7g(20.88mmol)을 화합물 1과 동일한 방법으로 화합물 16 7.6g(11.0mmol, 61%)을 제조하였다.

[0168]

MS/FAB: 690(found), 689.84(calculated).

[0172] [제조예 6] 화합물 25의 제조



[0173]

[0174] 화합물 6-1의 제조

[0175] 7H-벤조[c]카바졸 20g(92mmol)과 1-브로모-4-요오드벤젠 43.5g(184mmol)을 틀루엔500mL에 녹인 후 CuI 8.8g(46 mmol), 디아미노에탄 6.2mL(92mmol)과 K_3PO_4 8.7g(276mmol)을 첨가하고 30시간동안 환류시켰다. 상기 반응혼합물을 상온으로 냉각한 후 2.0M 염산수용액 50mL로 반응을 종결시키고 EA 1L로 추출한 후, 중류수 200mL로 씻어었다. 얻어진 유기층을 무수 $MgSO_4$ 로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 6-1 19g(56%)을 얻었다.

[0176] 화합물 6-2의 제조

[0177] 화합물 6-1 19g(51mmol)을 THF 250mL에 녹인 후 -78°C로 냉각시킨 후 n-BuLi(2.5 M in hexane) 24.5mL를 -78 °C에서 첨가하였다. 상기 혼합물을 -78°C에서 1시간동안 교반한 후 $B(O\text{Me})_3$ 8.5mL를 첨가하고 2시간동안 교반시키고 염화암모늄 수용액 100mL로 반응을 종결시켰다. 그 다음, EA 500mL로 추출한 후, 중류수 100mL로 씻어었다. 얻어진 유기층을 무수 $MgSO_4$ 로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 재결정하여 화합물 6-2 14g(81%)을 얻었다.

[0178] 화합물 6-3의 제조

[0179] 화합물 1-1 3.3g(13.7mmol), 화합물 6-2 5.5g(16.4mmol)을 틀루엔 100mL, 에탄올 20mL 및 물 20mL를 혼합한 후 $Pd(PPh_3)_4$ 1.6g(1.4mmol)과 K_2CO_3 5.7g(41.1mmol)을 첨가하였다. 상기 혼합물을 120°C에서 5시간동안 교반시킨 후 실온으로 식히고 염화암모늄 수용액 20mL로 반응을 종결시켰다. 상기 혼합물을 EA 250mL로 추출한 후, 중류수 30mL로 씻어주었다. 얻어진 유기층을 무수 $MgSO_4$ 로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 실리카겔 필터 후 재결정하여 화합물 6-3 4.9g(9.8mmol, 72%)을 얻었다.

[0180] 화합물 6-4의 제조

[0181] 화합물 1-3과 동일한 방법으로 화합물 6-4 4.3g(7.5mmol, 76%)을 제조하였다.

[0182] 화합물 6-5의 제조

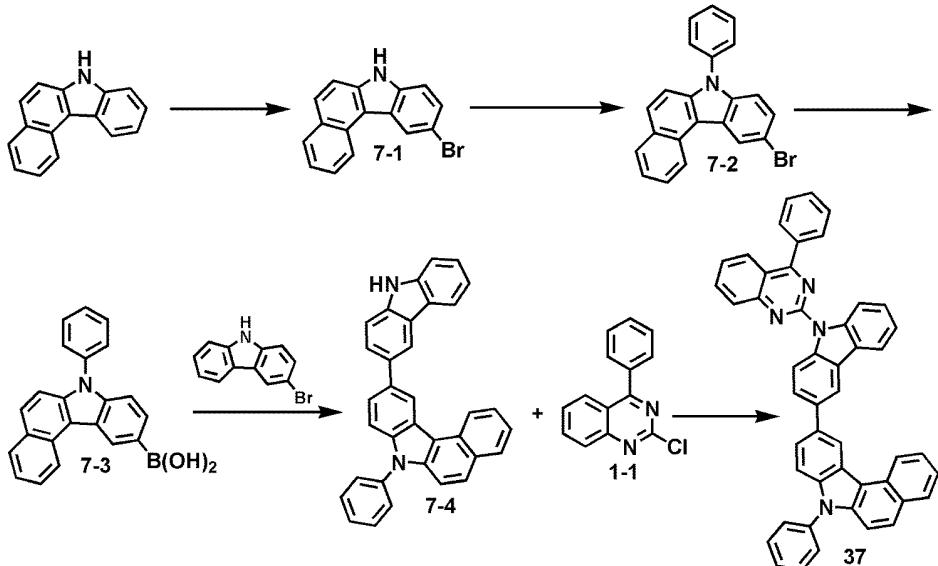
[0183] 화합물 1-4과 동일한 방법으로 화합물 6-5 1.7g(3.1mmol, 43%)을 제조하였다.

[0184] 화합물 25의 제조

화합물 6-5 9.8g(18.05mmol)과 3-브로모-9H-카바졸 6.7g(20.88mmol)을 화합물 1과 동일한 방법으로 화합물 25 7.6g(10.3mmol, 57%)을 제조하였다.

[0186] MS/FAB: 739(found), 738.87(calculated)

[제조예 7] 화합물 37의 제조



[0188]

[0189] 화합물 7-1의 제조

7H-벤조[c]카바졸 50g(0.23mol)를 DMF 1.4L에 녹인 후 NBS 41g(0.23mol)을 투입 후 상온에서 24시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 EA로 추출한 후 유기층을 감압증류하였다. 실리카로 컬럼 분리하여 화합물 7-1 53.2g(78%)을 얻었다.

[0191] 화합물 7-2의 제조

화합물 7-1 30g(0.10mol)과 요오드벤젠 22.6mL(0.20mmol), CuI 9.6g(0.05mol), Cs₂CO₃ 99g(0.030mol), EDA 13.7mL(0.20mol)을 톨루엔 500mL에 투입 후 24시간동안 환류교반하였다. EA로 추출 후 감압증류한 후 MC/Hex으로 칼럼분리하여 화합물 7-2 20g(53%)를 얻었다.

[0193] 화합물 7-3의 제조

화합물 7-2 18g(48.4mmol)을 THF 250mL에 녹이고 -78°C에서 2.5M n-BuLi(in Hexane) 23.2mL(58.0mmol)을 첨가한 후 한 시간 동안 교반하였다. B(O*i*-Pr)₃ 16.7mL(72.5mmol)을 천천히 첨가하여 2시간 동안 교반하였다. 2M HCl을 첨가하여 quenching 한 후 중류수와 EA로 추출하였다. MC와 Hex으로 재결정하여 화합물 7-3 13.6g(83.4%)를 얻었다.

[0195] 화합물 7-4의 제조

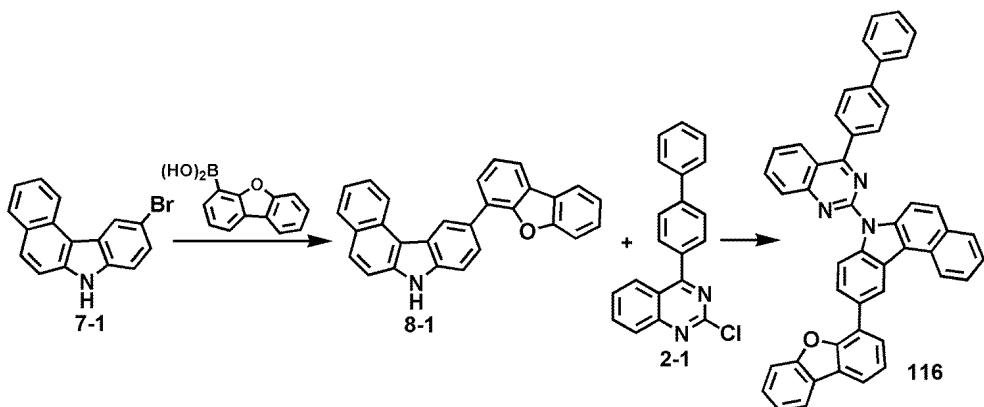
화합물 7-3 13.6g(40.3mmol), 브로모카바졸 9.9g(40.3mmol), Pd(PPh₃)₄ 2.3g(2.0mmol), K₂CO₃ 13.4g(96.7mmol), 톨루엔 200mL 및 중류수 48mL를 혼합한 후 90°C로 2시간 동안 교반하였다. 유기층을 감압증류한 후 MeOH로 trituration 하였다. 얻어진 고체를 MC에 녹여 실리카 필터한 후 MC와 헥산으로 trituration하여 화합물 7-4 15g(81%)을 얻었다.

[0197] 화합물 37의 제조

화합물 1-1 4g(16.6mmol), 화합물 7-4 7.6g(16.6mmol)을 DMF 80mL에 혼탁한 뒤 60% NaH 1.1g(28.2mmol)를 상온에서 첨가한 후 12시간 동안 교반하였다. 중류수 1L 첨가한 후 감압여과하였다. 얻어진 고체를 MeOH/EA로 trituration 하고 MC에 녹여 실리카 필터한 후 MC/n-Hexane으로 trituration하여 화합물 37 2.4g(21.8%)을 얻었다.

[0199] MS/FAB found 662.78, calculated 662.25

[0200] [제조예 8] 화합물 116의 제조



[0201]

[0202] 화합물 8-1의 제조

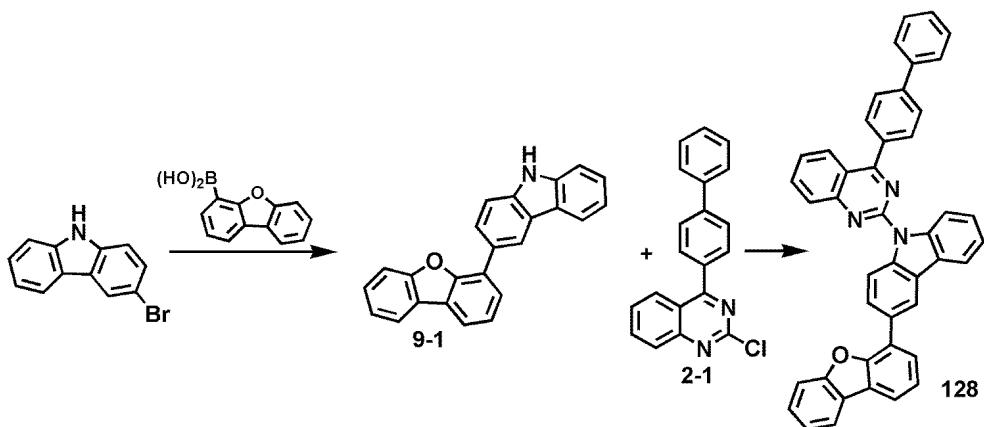
[0203] 화합물 7-1 (10 g, 33.8 mmol), 디벤조[b,d]퓨란-4-일보론산 (8.6 g, 40.56 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2 g, 1.7mmol), K₂CO₃ (34 g, 321 mmol), 톨루엔 60mL, EtOH 12mL 및 정제수 12mL를 혼합한 후 120℃에서 15 시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 정지하여 수층 제거 후 유기층은 농축하였다. 실리카 컬럼 정제하여 화합물 8-1 (10.2 g, 78%)을 얻었다.

[0204] 화합물 116의 제조

[0205] 화합물 8-1 3g(7.8mmol), 화합물 2-1 2.1g(7.8mmol)을 DMF 30mL에 혼탁한 뒤 60% NaH 376mg(9.4 mmol)를 상온에서 투입하고 12시간 동안 교반하였다. 정제수 500mL를 투입한 후 감압여과하였다. 얻어진 고체를 MeOH/EA로 trituration하고 DMF로 trituration한 후 EA/THF로 trituration하였다. MC로 녹여 실리카 필터한 후 MeOH/ EA로 trituration하여 화합물 116 2.4g(46%)를 얻었다.

[0206] MS/FAB found 663.76, calculated 663.23

[0207] [제조예 9] 화합물 128의 제조



[0208]

[0209] 화합물 9-1의 제조

[0210] 3-브로모-9H-카바졸 5g(20.32mmol), 디벤조[b,d]퓨란-4-일보론산 4.7g(22.35mmol), K₂CO₃ 7g(50.79mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.17g(1.01mmol), 톨루엔 100mL, EtOH 25mL 및 정제수 25mL를 혼합한 후 100℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 실온으로 냉각 한 뒤 정지하여 수층을 제거 하였다. 유기층은 농축 후 실리카 컬럼 정제하여 화합물 9-1 4.3g(64%)을 얻었다.

[0211] 화합물 128의 제조

[0212] 화합물 2-1 3g(8.99mmol), 화합물 9-1 3.14g(9.89mmol)을 무수 DMF 50mL에 혼탁한 후 60% NaH

0.54g(13.5mmol)을 실온에서 투입하였다. 실온에서 5시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 MeOH 3mL을 적가한 뒤 MeOH 과량으로 고체를 얻고, 실리카 컬럼 정제 후 EA로 혼탁하고 여과한 후 THF 결정화를 통하여 화합물 128 1g(18%)을 얻었다.

[0213] MS/FAB found 613.70, calculated 613.22

[0214] [실시예 1] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

본 발명의 발광 재료를 이용한 구조의 OLED 소자를 제작하였다. 우선, OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막($15\Omega/\square$)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 중류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착장비 내의 셀에 $N^1,N^{1'}-([1,1'-바이페닐]-4,4'-다이일)비스(N^1-(나프탈렌-1-일)-N^4,N^{4'}-다이페닐벤젠-1,4-다이아민) (N^1,N^{1'}-([1,1'-biphenyl]-4,4'-diyl)bis(N^1-(naphthalen-1-yl)-N^4,N^{4'}-diphenylbenzene-1,4-diamine)$ 을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 60nm 두께의 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 $N,N'-다이(4-바이페닐)-N,N'-다이(4-바이페닐)-4,4'-다이아미노바이페닐 (N,N'-di(4-biphenyl)-N,N'-di(4-biphenyl)-4,4'-diaminobiphenyl)$ 을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 정공주입층 위에 20nm 두께의 정공전달층을 증착하였다. 정공주입층, 정공전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 본 발명에 따른 화합물 1을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-11을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 4중량%으로 도핑 함으로서 상기 정공전달층위에 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 상기 발광층 위에 전자 전달층으로써 한쪽 셀에 2-(4-(9,10-다이(나프탈렌-2-일)안트라센-2-일)페닐)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸 (2-(4-(9,10-di(naphthalen-2-yl)anthracen-2-yl)phenyl)-1-phenyl-1H-benzo[d]imidazole)을 넣고, 또 다른 셀에는 리튬 퀴놀레이트(Lithium quinolate)를 각각 넣은 후, 두 물질을 같은 속도로 증발시켜 50중량%으로 도핑 함으로서 30nm의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서 전자 주입층으로 리튬 퀴놀레이트(Lithium quinolate)를 2nm두께로 증착한 후, 다른 진공 증착장비를 이용하여 Al 음극을 150nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제작하였다. 재료 별로 각 화합물은 10^{-6} torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0216] 그 결과, 4.4 V의 전압에서 8.8 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 900 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다.

[0217] [실시예 2] 본 발명에 따른 유기발광화합물을 이용한 OLED 소자 제작

발광층에서 호스트 재료로서 본 발명에 따른 화합물 2을 이용하고, 도판트로서 D-7을 이용한 것 외에는, 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.

[0219] 그 결과, 4.9 V의 전압에서 22.9 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 2710 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다.

[0220] [실시예 3] 본 발명에 따른 유기발광화합물을 이용한 OLED 소자 제작

발광층에서 호스트 재료로서 본 발명에 따른 화합물 25을 이용한 것 외에는, 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0222] 그 결과, 4.8 V의 전압에서 16.9 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 1780 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다.

[0223] [실시예 4] 본 발명에 따른 유기발광화합물을 이용한 OLED 소자 제작

발광층에서 호스트 재료로서 본 발명에 따른 화합물 37을 이용하고, 도판트로서 D-7을 이용한 것 외에는, 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.

[0225] 그 결과, 5.5 V의 전압에서 41.2 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 4800 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다.

[0226] [실시예 5] 본 발명에 따른 유기발광화합물을 이용한 OLED 소자 제작

발광층에서 호스트 재료로서 본 발명에 따른 화합물 128을 이용하고, 도판트로서 D-7을 이용한 것 외에는, 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.

- [0228] 그 결과, 4.2 V의 전압에서 8.7 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 900 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다.
- [0229] [실시예 6] 본 발명에 따른 유기발광화합물을 이용한 OLED 소자 제작
- [0230] 발광층에서 호스트 재료로서 본 발명에 따른 화합물 **116**를 이용하고, 도판트로서 D-7을 이용한 것 외에는, 실시 예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.
- [0231] 그 결과, 4.1 V의 전압에서 3.2 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 400 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다.
- [0232] [비교예 1] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자의 발광 특성
- [0233] 발광재료로서 호스트에는 4,4 '-N,N'-다이카바졸-바이페닐 (4,4 '-N,N'-dicarbazole-biphenyl)을 이용하고, 도판트에는 화합물 **D-11**을 사용하여 발광층을 증착하고, 발광층과 전자 전달층 사이에 정공 저지층으로 알루미늄 (III)비스(2-메틸-8-퀴놀리네이토)4-페닐페놀레이트 (aluminum(III)bis(2-methyl-8-quinolinato)4-phenylphenolate)을 10nm 두께로 증착한 것 외에는 실시예1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.
- [0234] 그 결과, 8.2 V의 전압에서 20.0 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 1000 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다.
- [0235] 본 발명에서 개발한 유기 발광 화합물들의 발광 특성이 종래의 재료 대비 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다. 또한 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 발광용 호스트 재료로 사용한 소자는 발광특성이 뛰어날 뿐만 아니라 구동전압을 강하시켜줌으로써 전력효율의 상승을 유도하여 소비전력을 개선시킬 수 있었다.

专利名称(译)	本发明涉及一种新型有机发光化合物和使用该化合物的有机电致发光器件。		
公开(公告)号	KR1020120030009A	公开(公告)日	2012-03-27
申请号	KR1020110092422	申请日	2011-09-14
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
当前申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	SHIN HYO NIM 신효님 HWANG SOO JIN 황수진 KIM HEE SOOK 김희숙 YOON SEOK KEUN 윤석근 LEE MI JA 이미자 KIM NAM KYUN 김남균 CHO YOUNG JUN 조영준 KWON HYUCK JOO 권혁주 LEE KYUNG JOO 이경주 KIM BONG OK 김봉옥		
发明人	신효님 황수진 김희숙 윤석근 이미자 김남균 조영준 권혁주 이경주 김봉옥		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	C09K2211/1011 H01L51/0072 C09K2211/1029 C09K2211/1092 H01L51/0085 C07D403/14 C07D409/14 C07D403/04 C09K2211/1007 C09K11/06 H01L51/0074 C07D405/14 H01L51/0073 C09K2211/1088 C09K2211/1044 Y02B20/181 H01L51/5016 H05B33/20		
代理人(译)	李昌勋		
优先权	1020100091545 2010-09-17 KR		
其他公开文献	KR101477614B1		

摘要(译)

本发明涉及新型有机电致发光化合物和使用该化合物的有机电致发光器件。并且根据本发明的有机发光化合物具体表示如下化学式1. [化学式1]在图像化学式1的存在下，环，X 1，X 2，L 1，Ar 1R 1 R 2，R 3 Z，A，b和c与本发明的各个细节中定义的相同。根据本发明的有机发光化合物具有以下优点：与预先存在的材料相比，具有改善的功耗以及发光效率的OLED器件是良好的并且材料的寿命性能优异并且装置的驱动耐久性非常优秀的是可以制造出引起功率效率的上升。

