



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2016-0079514
(43) 공개일자 2016년07월06일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07D 219/02 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2014-0191001
(22) 출원일자 2014년12월26일
심사청구일자 2015년12월02일

(71) 출원인
(주)피엔에이치테크
경기도 용인시 기흥구 동백중앙로16번길 16-25,
706호(중동, 대우프론티어밸리1단지)
(72) 발명자
현서용
경기도 용인시 수지구 손곡로 54 201동 503호(동
천동,수진마을아이파크효성화운트빌아파트)
정성욱
충청북도 청주시 흥덕구 산남로 23 101동 701호(
산남동,산남계룡리슈빌아파트)
김하연
광주광역시 북구 서하로 417 중흥아파트 102동
606호
(74) 대리인
정은열

전체 청구항 수 : 총 10 항

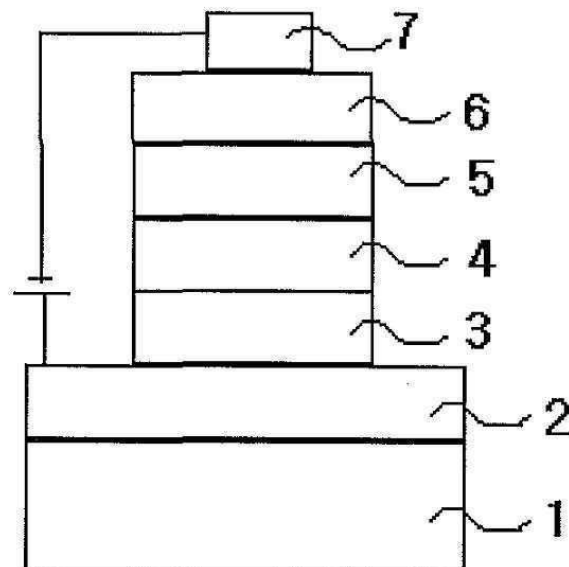
(54) 발명의 명칭 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

(57) 요약

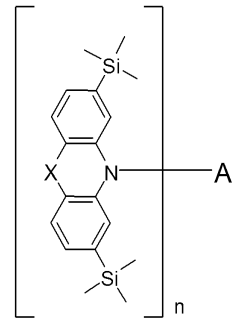
본 발명은 유기전계발광소자에 채용되는 유기발광 화합물에 관한 것으로서, 하기 [화학식 1]로 표시되는 것을 특징으로 하고, 이를 발광층 내의 도판트 화합물 또는 정공수송층의 정공수송 화합물로 채용하는 경우 구동전압, 휘도 및 장수명 등의 발광특성이 우수한 유기전계발광소자를 구현할 수 있다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



[화학식 1]



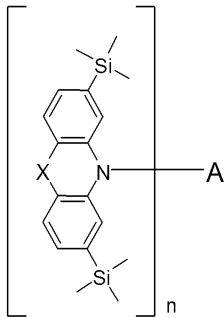
명세서

청구범위

청구항 1

하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물:

[화학식 1]



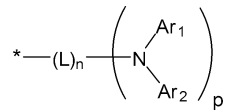
상기 [화학식 1]에서,

X는 R_1-C-R_2 이고, 상기 R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택되며,

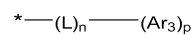
n은 0 내지 3이 정수이고, 상기 n이 2 이상인 경우 복수의 []은 서로 동일하거나 상이하며,

A는 하기 [구조식 1] 또는 [구조식 2]로 표시되고,

[구조식 1]



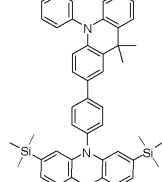
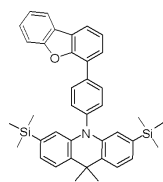
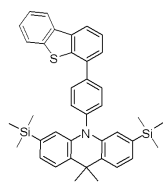
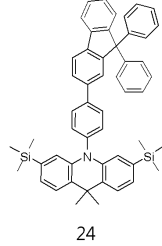
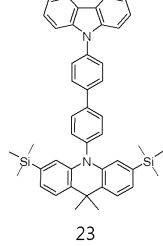
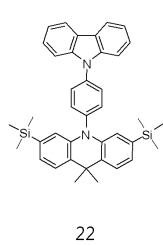
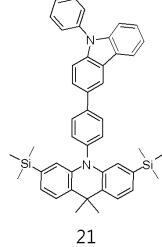
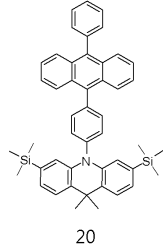
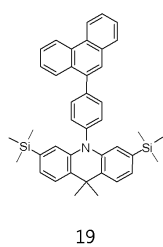
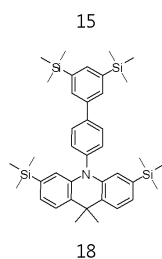
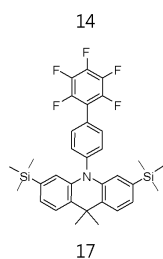
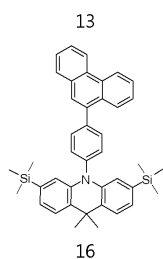
[구조식 2]



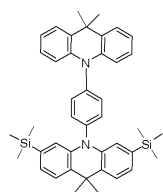
상기 [구조식 1] 또는 [구조식 2]에서,

L은 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되고, n은 0 내지 4의 정수이며, 상기 n이 2 이상인 경우, 복수 개의 L은 서로 동일하거나 상이하고,

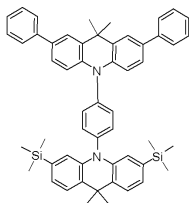
Ar_1 내지 Ar_3 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택되며,



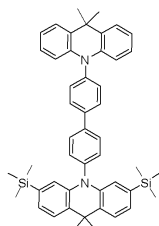
25



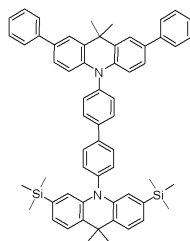
26



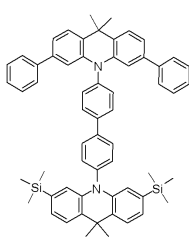
27



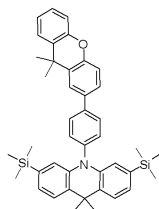
28



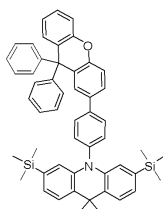
29



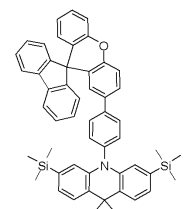
30



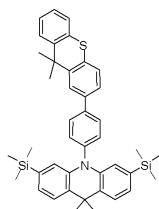
31



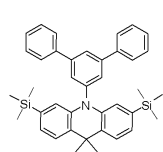
32



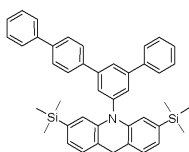
33



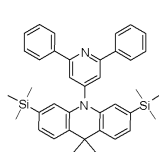
34



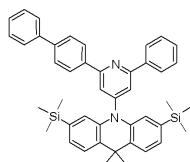
35



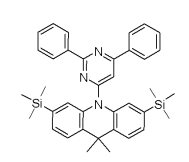
36



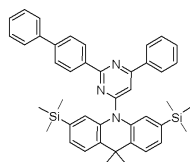
37



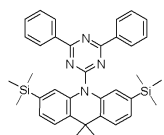
38



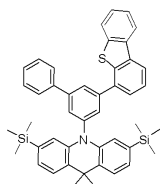
39



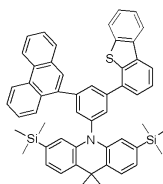
40



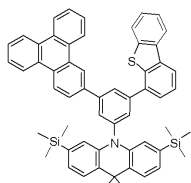
41



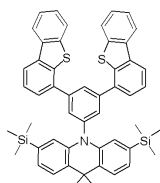
42



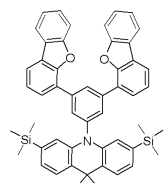
43



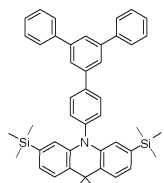
44



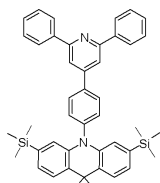
45



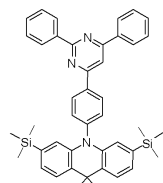
46



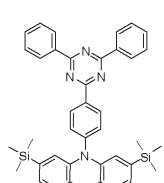
47



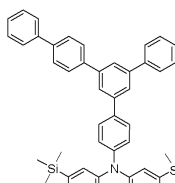
48



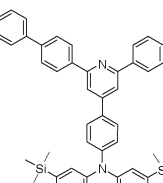
49



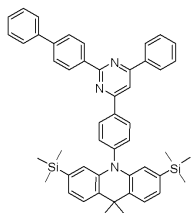
50



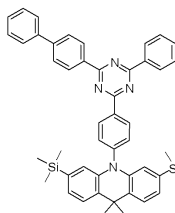
51



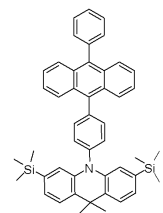
52

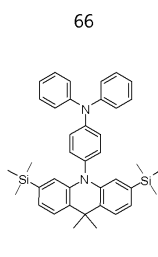
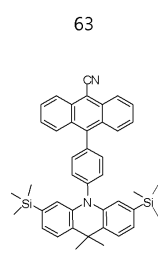
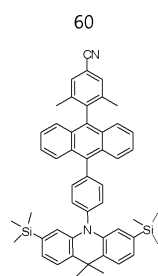
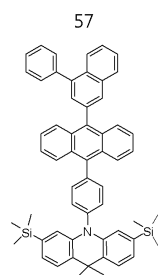
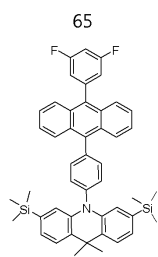
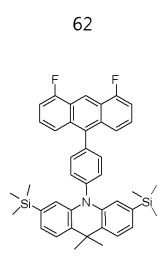
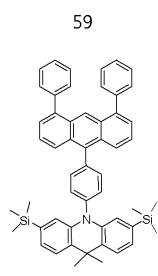
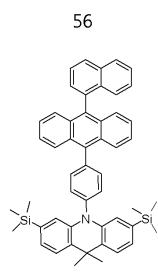
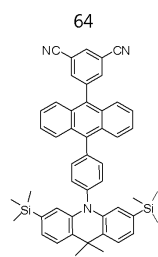
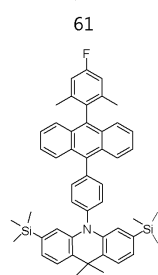
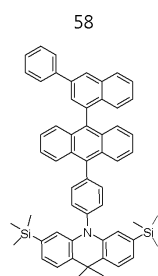
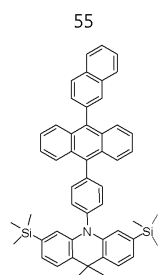


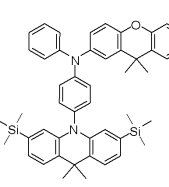
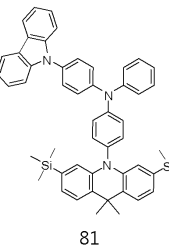
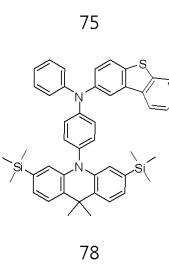
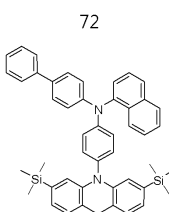
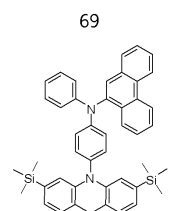
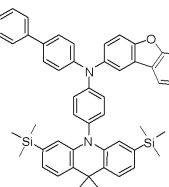
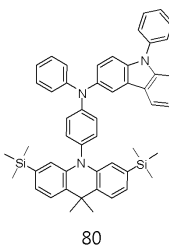
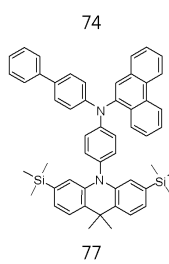
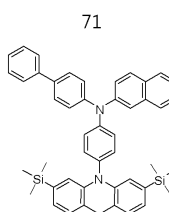
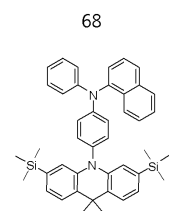
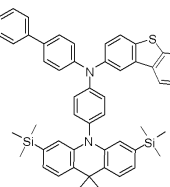
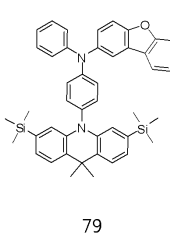
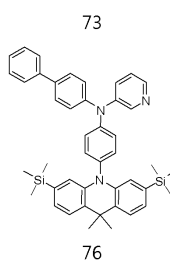
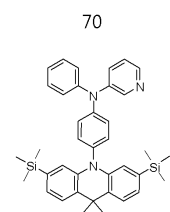
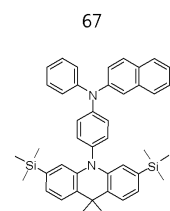
53

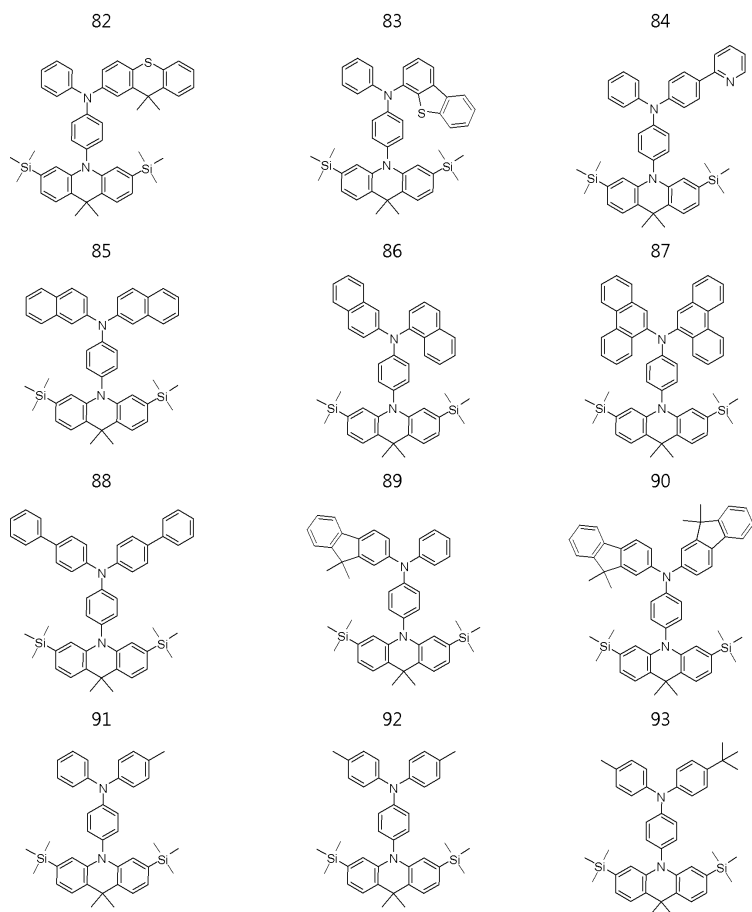


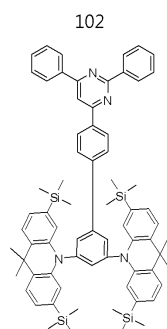
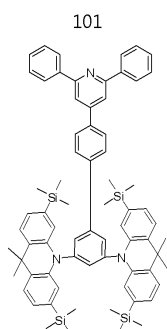
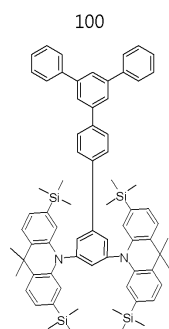
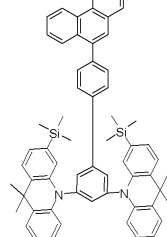
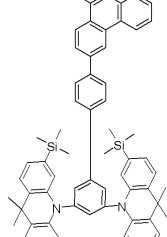
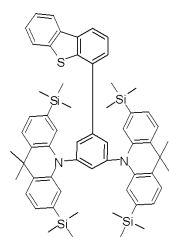
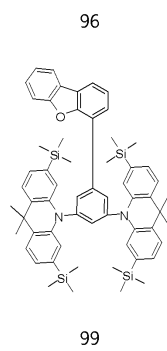
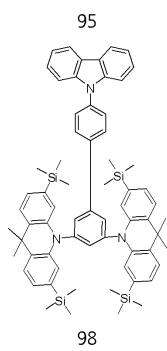
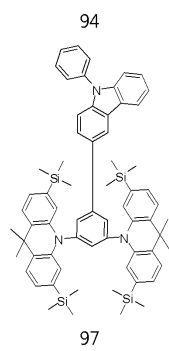
54



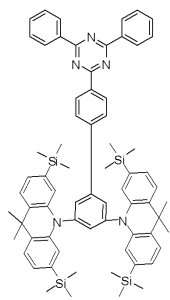




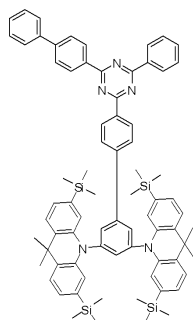




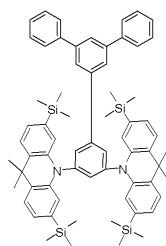
103



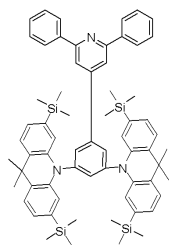
104



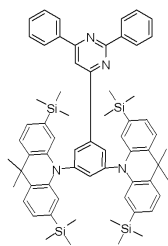
105



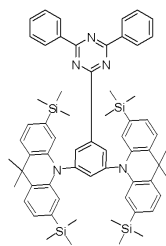
106



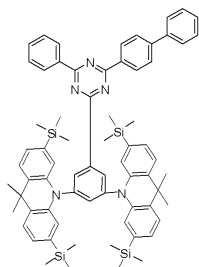
107



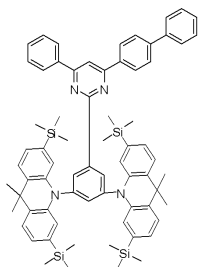
108



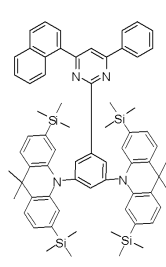
109

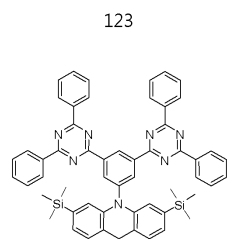
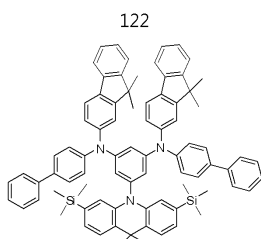
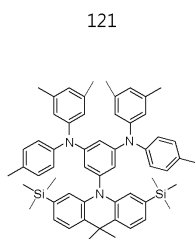
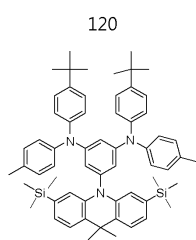
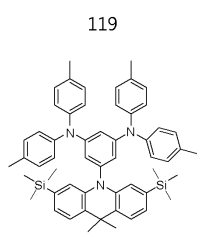
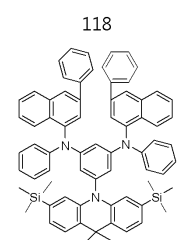
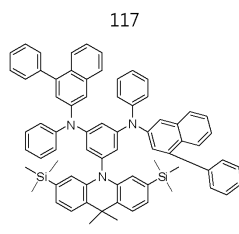
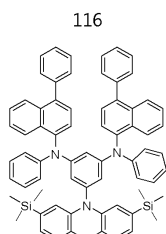
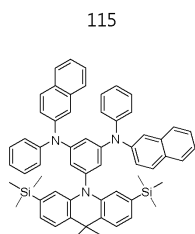
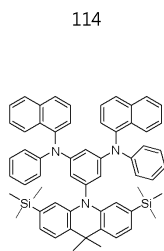
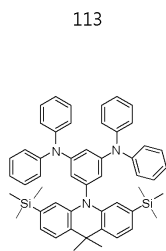
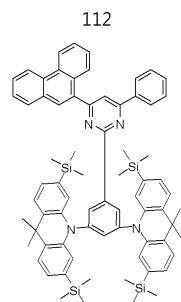


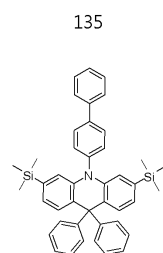
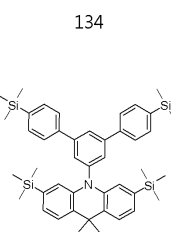
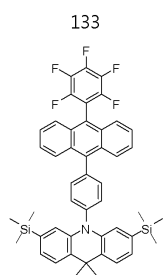
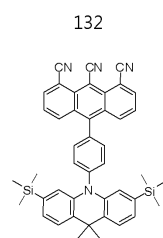
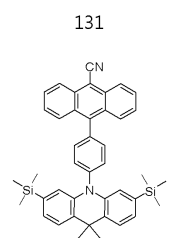
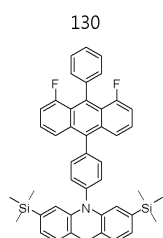
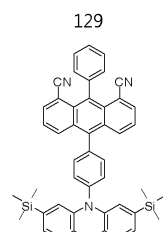
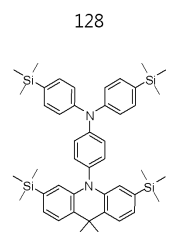
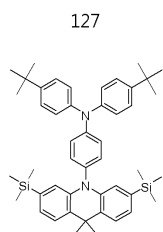
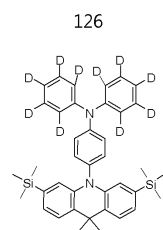
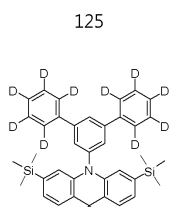
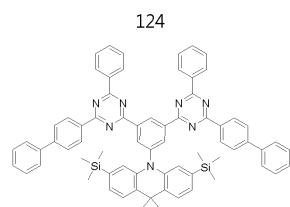
110



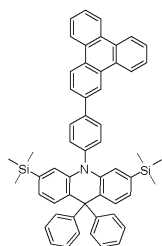
111



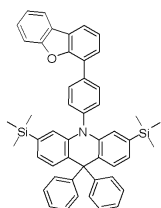




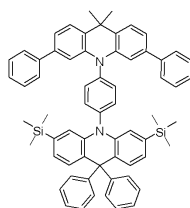
136



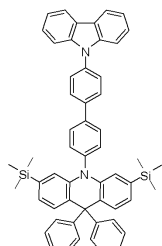
137



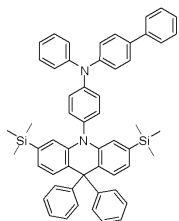
138



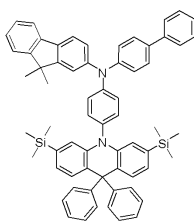
139



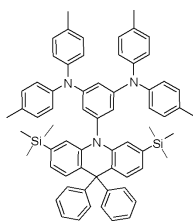
140



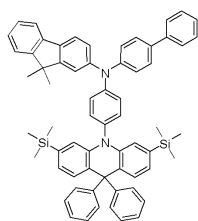
141



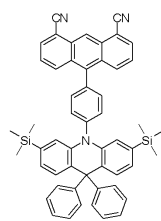
142



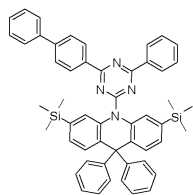
143



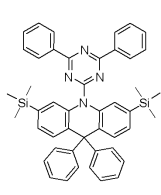
144



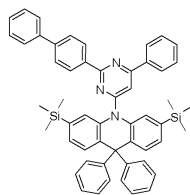
145



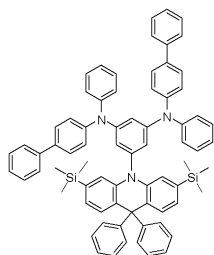
146



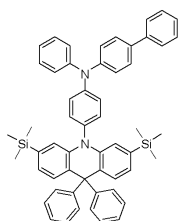
147



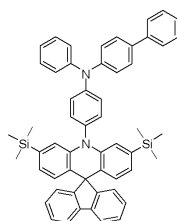
148



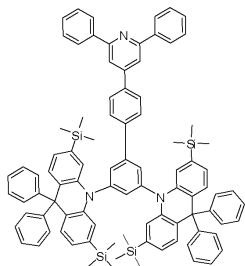
149



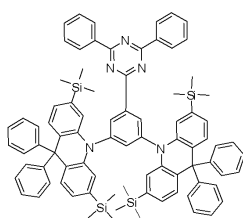
150



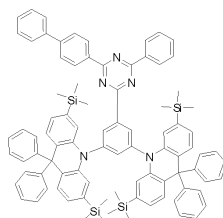
151



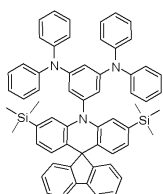
152



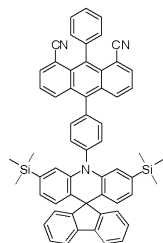
153



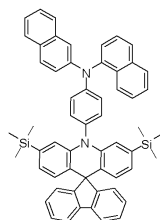
154



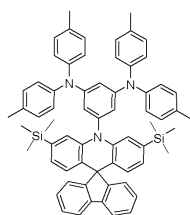
155



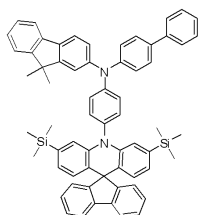
156



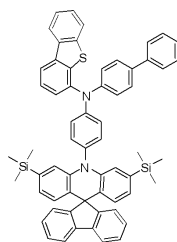
157

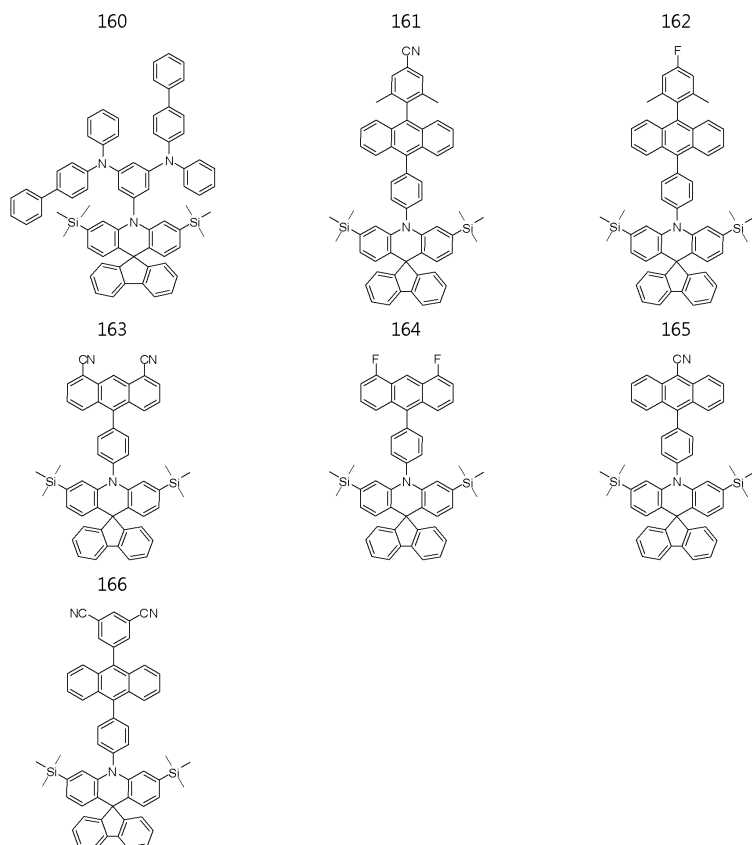


158



159





청구항 4

제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자로서,

상기 유기물층 중 1 층 이상은 제1항에 따른 [화학식 1]의 유기발광 화합물을 포함하는 것인 유기전계발광소자.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 및 정공 수송을 동시에 하는 층, 전자 수송층, 전자 주입층, 전자 수송 및 전자 주입을 동시에 하는 층 및 발광층 중 1층 이상을 포함하고,

상기 층들 중 1층 이상이 상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 6

제5항에 있어서,

상기 발광층이 상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 7

제6항에 있어서,

상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물은 상기 발광층 내의 도판트 화합물로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 8

제7항에 있어서,

상기 발광층은 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물 외의 도판트 화합물과 호스트 화합물을 1종 이상 더 포

합하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 9

제5항에 있어서,

상기 정공 수송층 또는 정공 주입 및 정공 수송을 동시에 하는 층이 상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 10

제4항에 있어서,

상기 유기물층에 적색, 녹색 또는 청색 발광을 하는 유기 발광층을 하나 이상을 더 포함하여 백색 발광을 하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기발광 화합물에 관한 것으로서, 보다 구체적으로는 유기전계발광소자의 발광층 도판트 화합물 또는 정공수송 기능층의 정공수송 화합물로 채용되는 유기발광 화합물 및 이를 채용하여 장수명 및 발광 효율 등의 발광 특성이 현저히 향상된 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기발광 현상을 이용하는 유기전계발광소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기전계발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기전계발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이러한 유기전계발광소자는 자발광, 고휘도, 고효율, 낮은 구동 전압, 넓은 시야각, 높은 콘트라스트, 고속 응답성 등의 특성을 갖는 것으로 알려져 있다.

[0003] 유기전계발광소자에서 유기물층으로 사용되는 물질은 기능에 따라, 발광 물질과 전하 수송 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다. 또한, 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 물질과 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 물질로 구분될 수 있다.

[0004] 한편, 발광 물질로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 물질로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.

[0005] 유기 발광 소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 발광 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정하고 효율적인 유기 발광 소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있으며, 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기 전자 소자에서도 마찬가지이다.

[0006] 청색발광물질로서 미국 등록특허 제US7053255에는 중심부는 디페닐안트라센 구조를 가지며, 아릴기가 말단에 치환된 청색 발광 화합물 및 이를 이용한 유기전계발광소자가 개시되어 있지만 발광효율 및 휘도가 충분하지 않다는 문제점이 있다. 한편, 미국등록특허공보 제US7233019호, 대한민국공개특허공보 제2006-0006760호에는 치환된 피렌계 화합물을 이용한 유기전계발광소자가 개시되어 있으나, 청색의 색순도가 낮아서 진한 청색(deep blue)의 구현이 어렵기 때문에 천연색의 풀컬러 디스플레이를 구현하는데 문제점이 있다.

발명의 내용

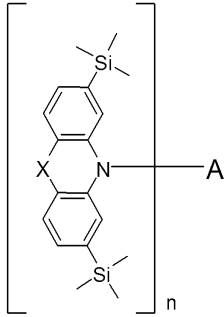
해결하려는 과제

[0007] 본 발명은 유기전계발광소자의 발광층 도판트 화합물 또는 정공수송 화합물로 채용되어 우수한 발광 특성을 구현할 수 있는 신규한 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광 소자를 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0008] 본 발명은 상기 과제를 해결하기 위하여, 하기 [화학식 1]로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.

[0009] [화학식 1]



[0010]

[0011] 상기 [화학식 1]에 따른 유기발광 화합물의 구체적인 구조 및 치환기에 대해서는 후술한다.

발명의 효과

[0012] 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 발광층이나 정공수송층에 채용한 유기전계발광소자는 보다 향상된 발광 효율과 장수명 특성의 구현이 가능하여 이를 채용한 유기전계발광소자는 다양한 디스플레이 소자에 유용하여 사용될 수 있다.

도면의 간단한 설명

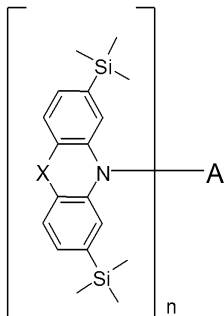
[0013] 도 1 내지 5는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 구조를 예시한 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0014] 이하, 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다.

[0015] 본 발명은 하기 [화학식 1]로 표시되는 신규한 유기발광 화합물에 관한 것이다.

[0016] [화학식 1]



[0017]

[0018] 상기 [화학식 1]에서,

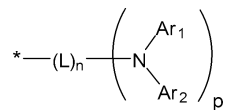
[0019] X는 R₁-C-R₂이고, 상기 R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택되며, [화학식 1]의 바람직한 구현예에 의하면, 상기 R₁ 및 R₂는 메틸기 또는 페닐기일 수 있다.

[0020] n은 0 내지 3이 정수이고, 상기 n이 2 이상인 경우 복수의 []은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며, 바람직하

게는 2 개 이상이 동일한 구조의 []가 A와 결합된다.

[0021] A는 유기발광소자의 다양한 발광 특성과 용도에 따라서 하기 [구조식 1] 또는 [구조식 2]로 표시되는 것을 특징으로 한다.

[0022] [구조식 1]



[0023]

[0024] [구조식 2]

[0025] $*(L)_n-(Ar_3)_p$

[0026] 상기 [구조식 1] 또는 [구조식 2]에서,

[0027] L은 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기 중에서 선택될 수 있으며, n은 0 내지 4의 정수이며, 상기 n이 2 이상인 경우, 복수 개의 L은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0028] Ar₁ 내지 Ar₃은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택된다.

[0029] 또한, 상기 Ar₁과 Ar₂는 서로 결합하거나 인접한 치환기와 연결되어 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리의 탄소원자는 N, S 및 O 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있다.

[0030] p는 0 내지 3의 정수이고, 상기 p가 2 이상인 경우 복수의 $*()$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0031] 한편, 상기 R₁, R₂, L 및 Ar₁ 내지 Ar₃는 1종 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고, 상기 1종 이상의 치환기는 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠기, 아미노기, 니트로기, 히드록시기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로겐화된 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 탄소수 1 내지 24의 알콕시기, 탄소수 1 내지 24의 알킬아미노기, 탄소수 1 내지 24의 아릴아미노기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로아릴아미노기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 탄소수 1 내지 24의 아릴실릴기 및 탄소수 1 내지 24의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택될 수 있다.

[0032] 본 발명에 있어서, 상기 치환기들의 예시들에 대해서 아래에서 구체적으로 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0033] 본 발명에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 50인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-프로필기, 이소프로필기, 부틸기, n-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, sec-부틸기, 1-메틸-부틸기, 1-에틸-부틸기, 펜틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, 네오펜틸기, tert-펜틸기, 헥실기, n-헥실기, 1-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, 3,3-디메틸부틸기, 2-에

틸부틸기, 헵틸기, n-헵틸기, 1-메틸헥실기, 시클로펜틸메틸기, 시클로헥틸메틸기, 옥틸기, n-옥틸기, tert-옥틸기, 1-메틸헵틸기, 2-에틸헥실기, 2-프로필헵틸기, n-노닐기, 2,2-디메틸헵틸기, 1-에틸-프로필기, 1,1-디메틸-프로필기, 이소헥실기, 2-메틸펜틸기, 4-메틸헥실기, 5-메틸헥실기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0034] 본 발명에 있어서, 알콕시기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 입체적 방해를 주지 않는 범위인 1 내지 30개인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, 이소프로폭시기, i-프로필옥시기, n-부톡시기, 이소부톡시기, tert-부톡시기, sec-부톡시기, n-펜틸옥시기, 네오펜틸옥시기, 이소펜틸옥시기, n-헥실옥시기, 3,3-디메틸부틸옥시기, 2-에틸부틸옥시기, n-옥틸옥시기, n-노닐옥시기, n-데실옥시기, 벤질옥시기, p-메틸벤질옥시기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0035] 본 발명에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 비닐기, 1-프로페닐기, 이소프로페닐기, 1-부테닐기, 2-부테닐기, 3-부테닐기, 1-펜테닐기, 2-펜테닐기, 3-펜테닐기, 3-메틸-1-부테닐기, 1,3-부타디에닐기, 알릴기, 1-페닐비닐-1-일기, 2-페닐비닐-1-일기, 2,2-디페닐비닐-1-일기, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일기, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일기, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.

[0036] 본 발명에 있어서, 아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 6 내지 60인 것이 바람직하다. 단환식 아릴기의 예로는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 스틸벤기 등이 있고, 다환식 아릴기의 예로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 페틸레닐기, 테트라세닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기, 아세나프타센닐기, 트리페닐렌기, 플루오안트렌(fluoranthrene)기 등이 있으나, 본 발명의 범위가 이들 예로만 한정되는 것은 아니다.

[0037] 본 발명에 있어서, 헤테로고리기는 이종원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로고리기로, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 헤테로고리기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딘기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 디벤조퓨라닐기, 페난트롤린기, 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페노티아지닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0038] 본 발명에 있어서, 아릴옥시기, 아릴티옥시기, 아릴술포시기 및 아랄킬아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 구체적으로 아릴옥시기로는 페녹시기, p-토릴옥시기, m-토릴옥시기, 3,5-디메틸-페녹시기, 2,4,6-트리메틸페녹시기, ptert-부틸페녹시기, 3-비페닐옥시기, 4-비페닐옥시기, 1-나프틸옥시기, 2-나프틸옥시기, 4-메틸-1-나프틸옥시기, 5-메틸-2-나프틸옥시기, 1-안트릴옥시기, 2-안트릴옥시기, 9-안트릴옥시기, 1-페난트릴옥시기, 3-페난트릴옥시기, 9-페난트릴옥시기 등이 있고, 아릴티옥시기로는 페닐티옥시기, 2-메틸페닐티옥시기, 4-tert-부틸페닐티옥시기 등이 있으며, 아릴술포시기로는 벤젠술포시기, p-톨루엔술포시기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

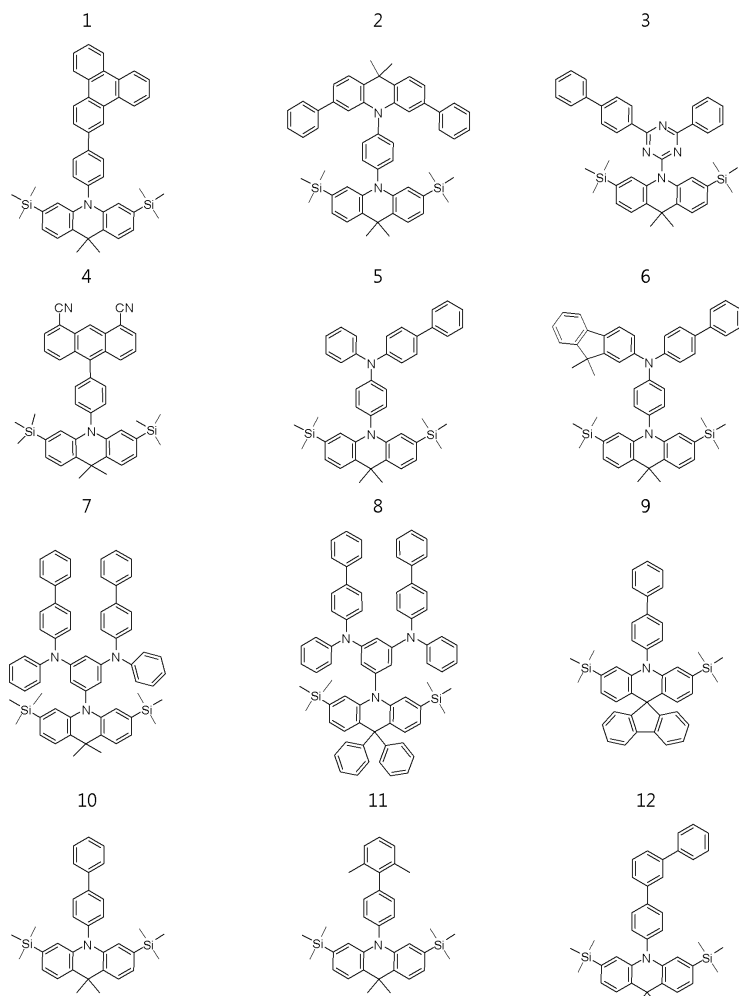
[0039] 본 발명에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 구체적으로 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 3-메틸시클로펜틸기, 2,3-디메틸시클로펜틸기, 시클로헥실기, 3-메틸시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 2,3-디메틸시클로헥실기, 3,4,5-트리메틸시클로헥실기, 4-tert-부틸시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0040] 본 발명에 있어서, 할로젠기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.

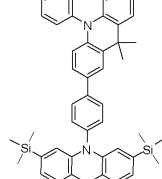
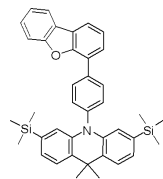
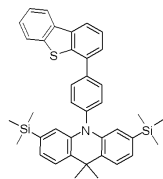
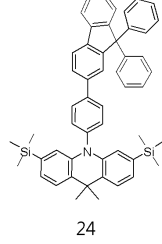
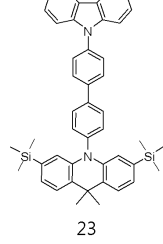
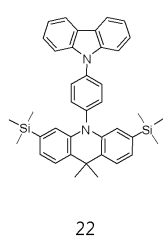
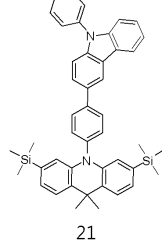
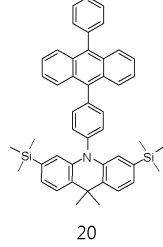
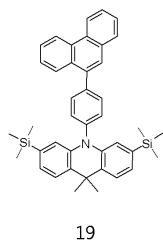
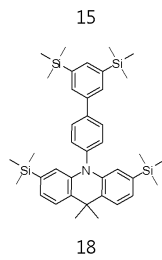
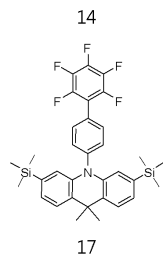
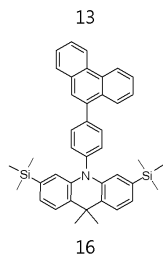
[0041] 본 발명에 있어서, 아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노아릴아민기, 치환 또는 비치환된 디아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리아릴아민기가 있다. 상기 아릴아민기 중의 아릴기는 단환식 아릴기일 수 있고, 다환식 아릴기일 수 있다. 상기 아릴기가 2 이상을 포함하는 아릴아민기는 단환식 아릴기, 다환식 아릴기, 또는 단환식아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다.

[0042] 상기 아릴아민기의 구체적인 예로는 페닐아민기, 나프틸아민기, 비페닐아민기, 안트라세닐아민기, 3-메틸-페닐아민기, 4-메틸-나프틸아민기, 2-메틸-비페닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐 아민기, 페닐 나프틸 아민기, 디톨릴 아민기, 페닐 톨릴 아민기, 카바졸기 및 트리페닐 아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0043] 본 발명에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.
- [0044] 본 발명에 있어서, 헤테로아릴아민기 중의 헤테로 아릴기는 전술한 헤테로고리기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [0045] 본 발명에 있어서, 알킬티옥시기, 알킬술폭시기 중의 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 구체적으로 알킬티옥시기로는 메틸티옥시기, 에틸티옥시기, tert-부틸티옥시기, 헥실티옥시기, 옥틸티옥시기 등이 있고, 알킬술폭시기로는 메실, 에틸술폭시기, 프로필술폭시기, 부틸술폭시기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0046] 본 발명에 있어서, 치환된 아릴렌기라 함은, 페닐기, 비페닐기, 나프탈렌기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페난트렌기, 페릴렌기, 테트라세닐기, 안트라센닐기 등이 다른 치환기로 치환된 것을 의미한다.
- [0047] 본 발명에 있어서, 치환된 헤테로아릴렌기라 함은, 피리딜기, 티오펜기, 트리아진기, 퀴놀린기, 페난트롤린기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 카바졸기 및 이들의 축합헤테로고리기, 예컨대 벤즈퀴놀린기, 벤즈이미다졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈티아졸기, 벤즈카바졸기, 디벤조티오펜기, 디벤조퓨란기 등이 다른 치환기로 치환된 것을 의미한다.
- [0048] 상기 [화학식 1]로 표시되는 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 그 구조적 특이성으로 인하여 유기전계발광소자의 다양한 유기물층에 사용될 수 있고, 바람직하게는 발광층 내의 도판트 화합물 또는 정공수송층의 정공수송 화합물로 사용될 수 있다.
- [0049] 본 발명에 따른 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물의 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

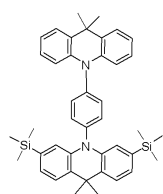


[0050]

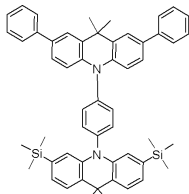


[0051]

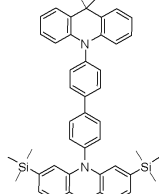
25



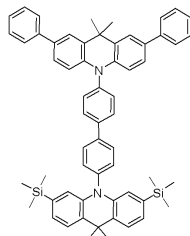
26



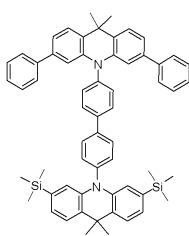
27



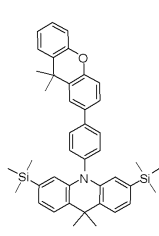
28



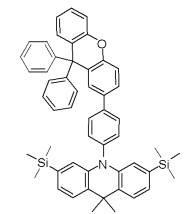
29



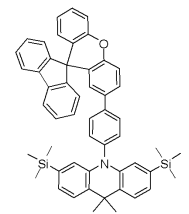
30



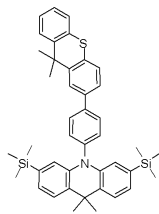
31



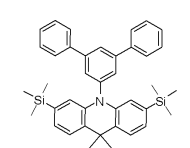
32



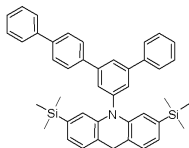
33



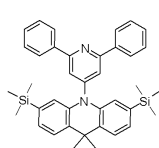
34



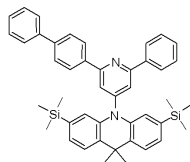
35



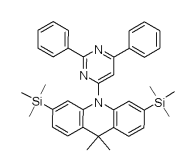
36



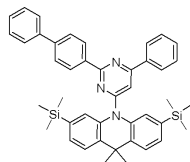
37



38

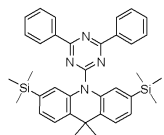


39

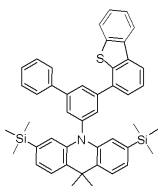


[0052]

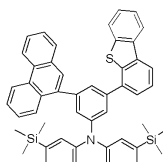
40



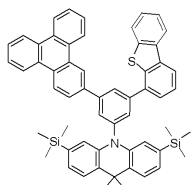
41



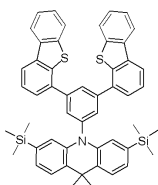
42



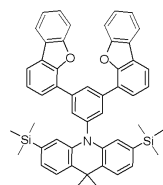
43



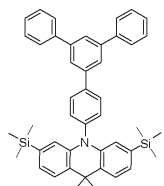
44



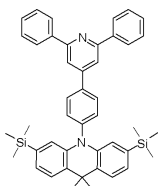
45



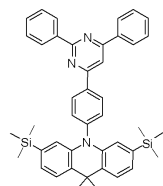
46



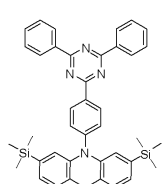
47



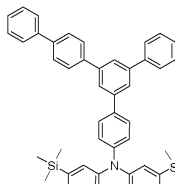
48



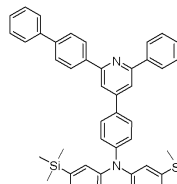
49



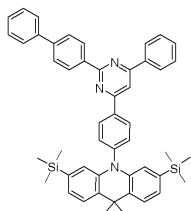
50



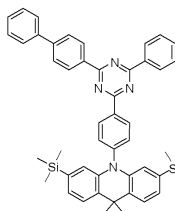
51



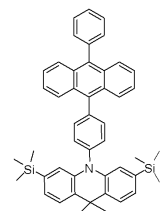
52



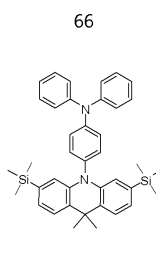
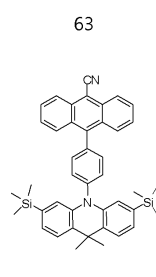
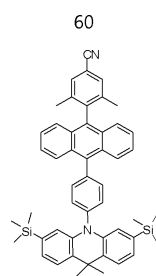
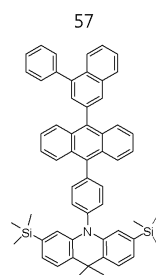
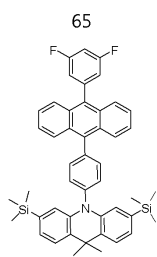
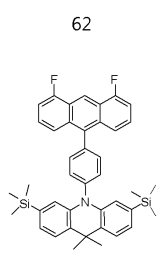
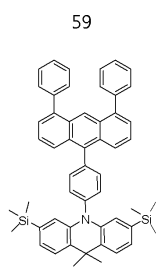
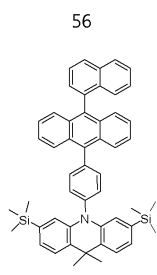
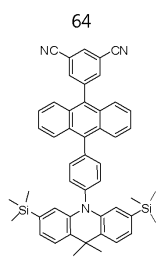
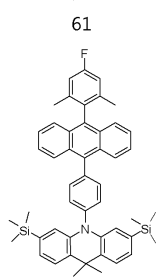
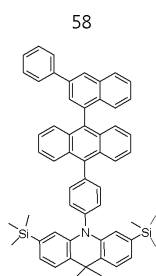
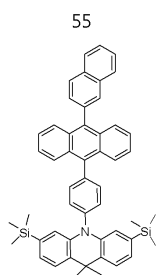
53



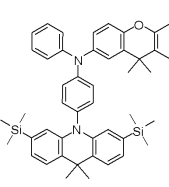
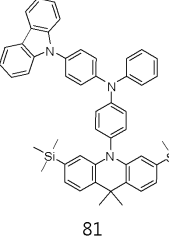
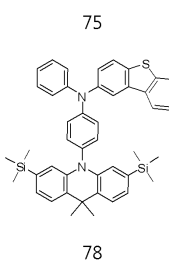
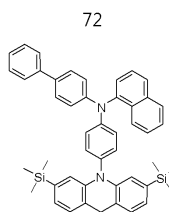
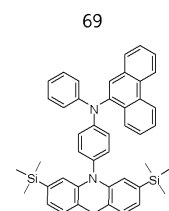
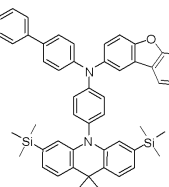
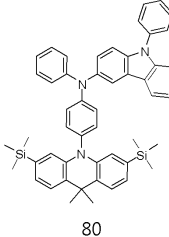
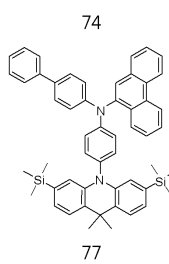
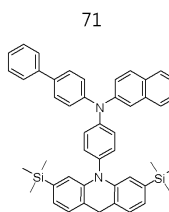
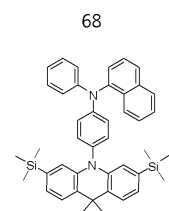
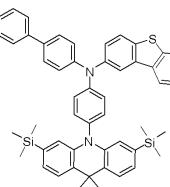
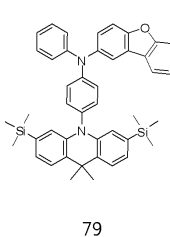
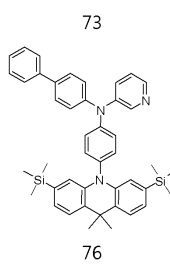
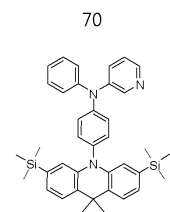
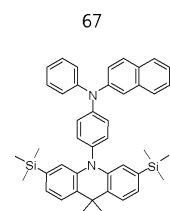
54



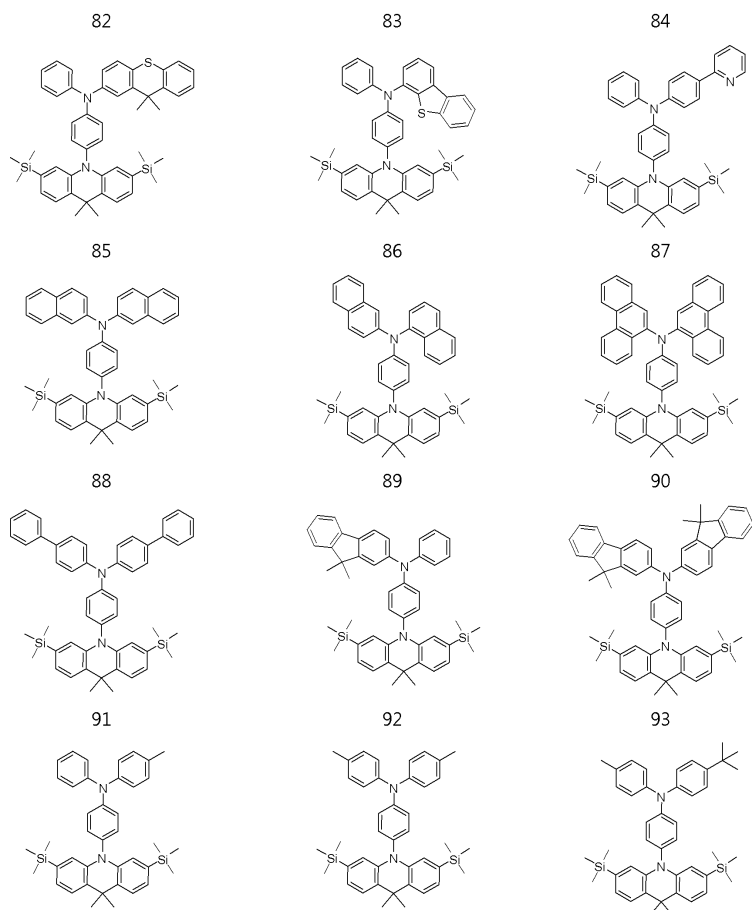
[0053]



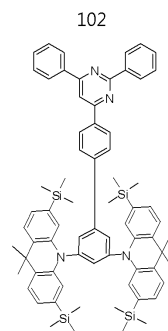
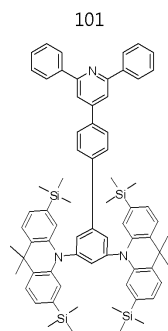
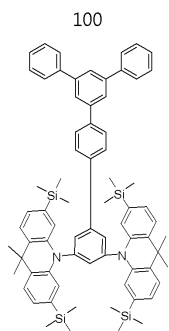
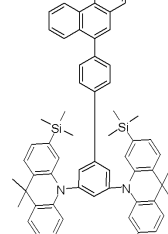
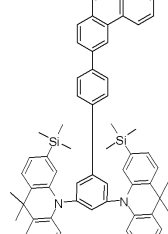
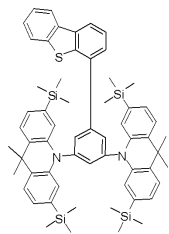
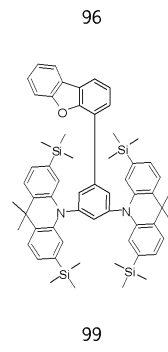
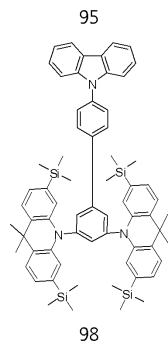
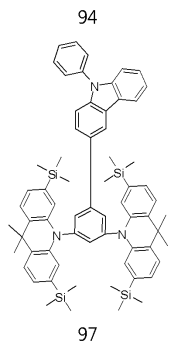
[0054]



[0055]

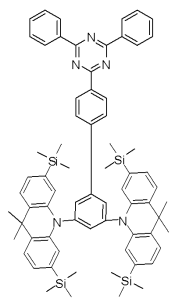


[0056]

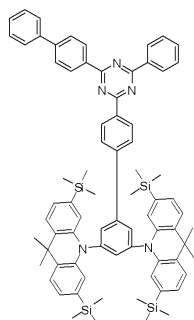


[0057]

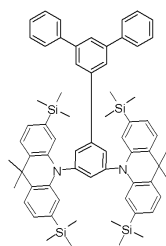
103



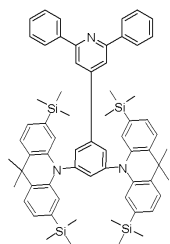
104



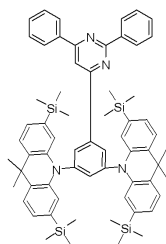
105



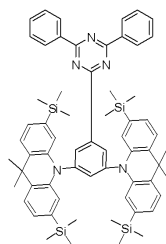
106



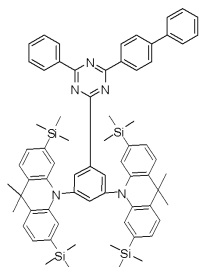
107



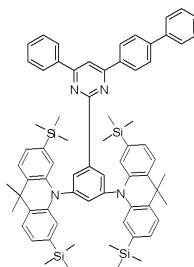
108



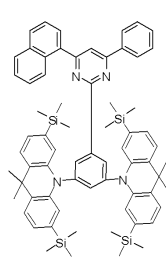
109



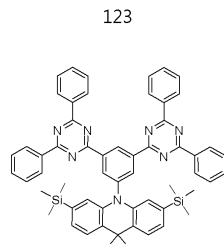
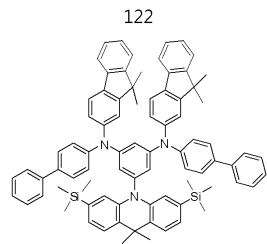
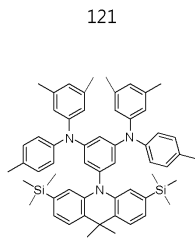
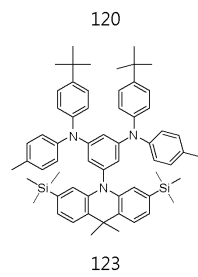
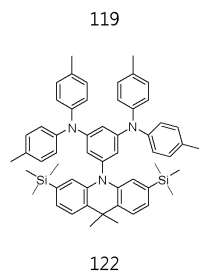
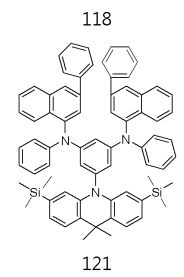
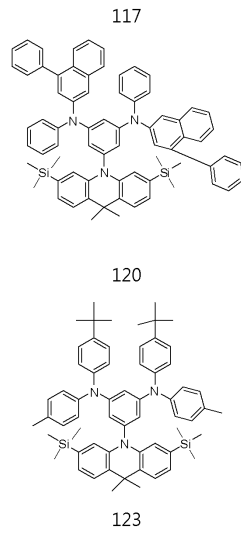
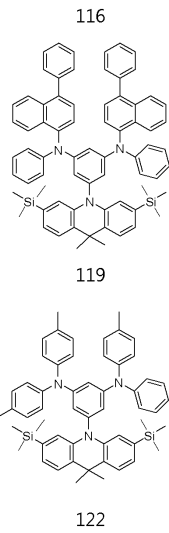
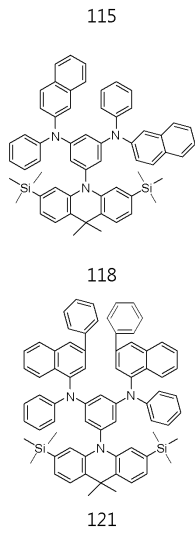
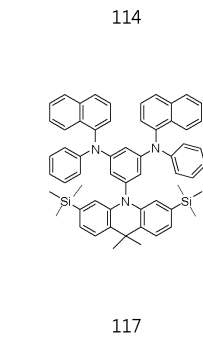
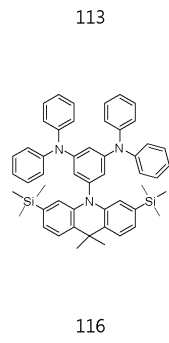
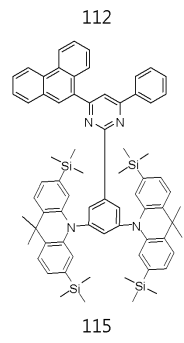
110



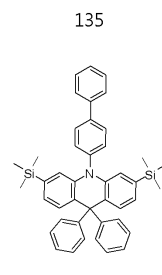
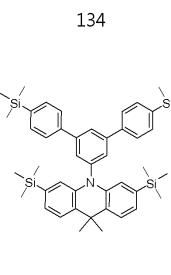
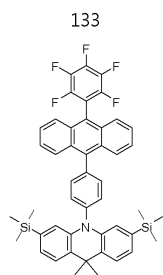
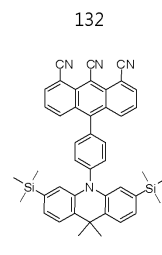
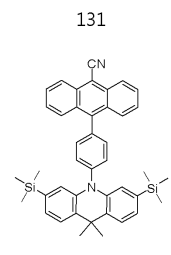
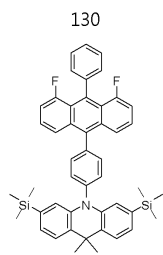
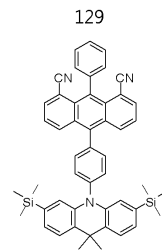
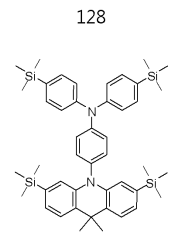
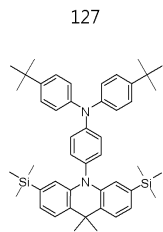
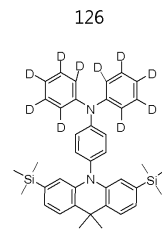
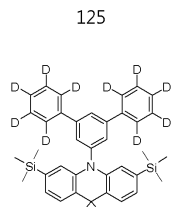
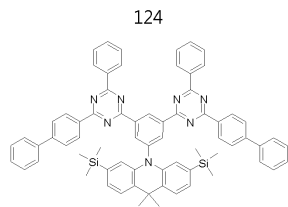
111



[0058]

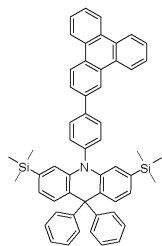


[0059]

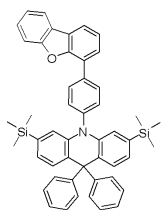


[0060]

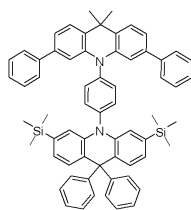
136



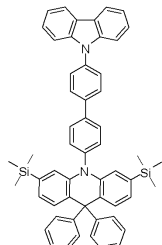
137



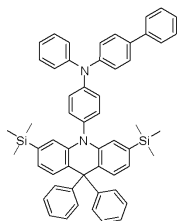
138



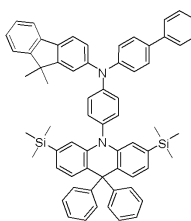
139



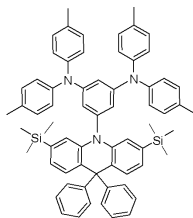
140



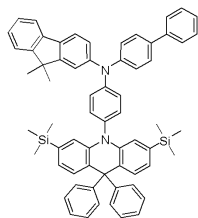
141



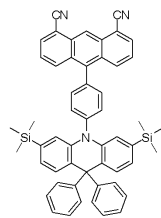
142



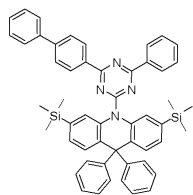
143



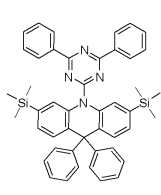
144



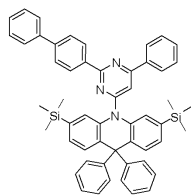
145



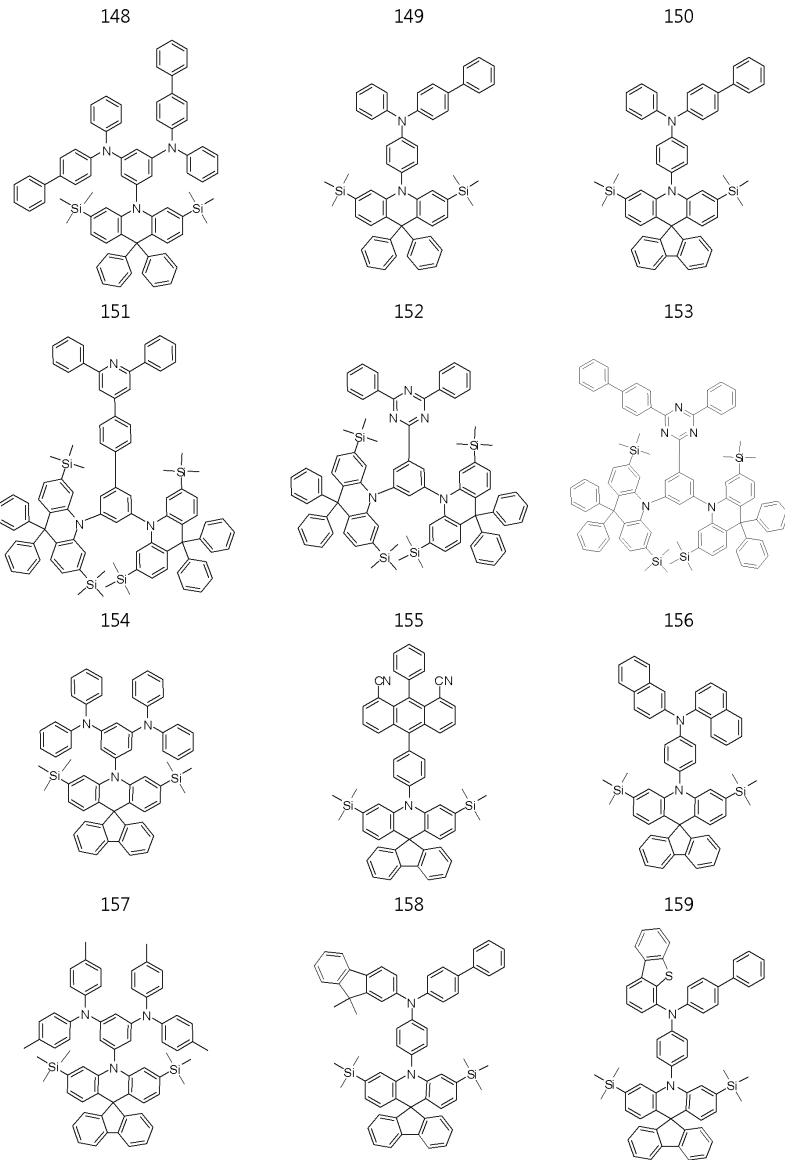
146



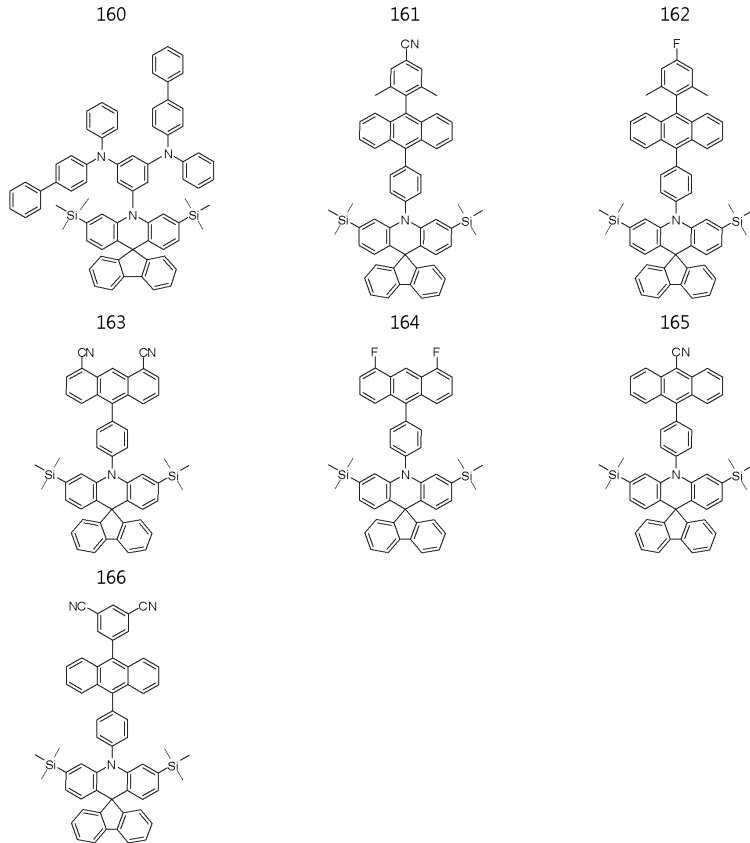
147



[0061]



[0062]



[0063]

[0064]

상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 유기발광 화합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기전계발광소자의 제조시 사용되는 정공 주입층 물질, 정공 수송층 물질 및 전자 수송층 물질에 사용되는 치환기를 상기 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 제조할 수 있다.

[0065]

특히, 본 발명에 따른 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물은 상기에서 살펴본 바와 같이, 특징적 코어 구조체에 치환기를 도입하여 유기전계발광소자의 발광층에 채용시 효율, 구동전압, 수명 등에서 우수한 특성을 나타내는 유기전계발광소자의 구현이 가능함을 확인하였다.

[0066]

본 발명의 화합물은 유기전계발광소자의 통상의 제조방법에 따라 소자에 적용할 수 있다. 본 발명의 하나의 실시예에 따른 유기전계발광소자는 제1 전극과 제2 전극 및 이 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 구조로 이루어질 수 있으며, 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 소자의 유기물층에 사용한다는 것을 제외하고는 통상의 소자의 제조 방법 및 재료를 사용하여 제조될 수 있다.

[0067]

본 발명에 따른 유기전계발광소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층을 포함할 수도 있다.

[0068]

따라서, 본 발명의 유기전계발광소자에서, 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 수송층, 전자 주입층, 정공 주입 및 정공 수송을 동시에 하는 층, 전자 주입 및 전자수송을 동시에 하는 층 및 발광층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있으며, 바람직하게는 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 발광층 내 도판트 물질 또는 정공수송 기능층의 정공수송 화합물로서 포함될 수 있다.

[0069]

상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물을 발광층 내 도판트 물질로서 포함되는 경우에, 도판트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 20 중량부의 범위에서 선택될 수 있다. 또한, [화학식 1]로 구현되는 유기발광 화합물 이외에도 호스트 또는 도판트 화합물을 더 포함할 수도 있으며, 그 함량은

상기와 마찬가지로이다.

- [0070] 이와 같은 다층 구조의 유기물층에서 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 발광층, 정공 주입/정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 또는 전자 수송과 발광을 동시에 하는 층 등에 포함될 수 있다.
- [0071] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 전자 소자의 구조는 도 1 내지 5에 예시되어 있다.
- [0072] 도 1에는 기판(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0073] 도 2에는 기판(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0074] 도 3에는 기판(1) 위에 양극(2), 정공 수송층(4), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0075] 도 4에는 기판(1) 위에 양극(2), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0076] 도 5에는 기판(1) 위에 양극(2), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5)에 포함될 수 있다.
- [0077] 예컨대, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다.
- [0078] 이와 같은 방법 외에도, 기판상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기전계발광소자를 만들 수도 있다. 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.
- [0079] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금, 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물, ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0080] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금, LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0081] 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입받을 수 있는 물질로서, 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0082] 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0083] 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq_3), 카르바졸 계열 화합물, 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물, BAlq , 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물, 벤조사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물, 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자, 스피로(spiro) 화합물, 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0084] 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물, Alq_3 를 포함한 착물, 유기 라디칼 화합물, 히드록시플라톤-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

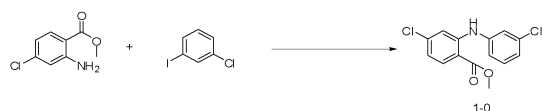
[0085] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0086] 또한, 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 유기 태양 전지, 유기 감광체, 유기 트랜지스터 등을 비롯한 유기 전자 소자에서도 유기전계발광소자에 적용되는 것과 유사한 원리로 작용할 수 있다.

[0087] 이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 바람직한 실시예를 제시한다. 그러나, 하기의 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 이에 의하여 본 발명의 범위가 한정되는 것은 아니다.

[0088] 실시예 1 : 화합물 1의 합성

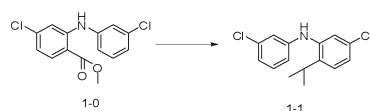
[0089] (1) 제조예 1 : 중간체 1-0의 합성



[0090]

[0091] 질소 분위기 하에서 methyl 2-amino-4-chlorobenzoate(1.9 g, 0.010 mol), 1-chloro-3-iodobenzene(2.4 g, 0.010 mol), $\text{Pd}(\text{dba})_3$ (0.1 g, 0.001 mol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.04 g, 0.0002 mol), STBT(2.9 g, 0.030 mol)에 Toluene 70 mL를 넣고 환류 교반하였다. 반응종료 후 H_2O : EA에 층분리를 한 후 컬럼정제(N-HEXANE : MC)하여 <중간체 1-0> 1.8 g (수율 62%) 수득하였다. (m/z = 296)

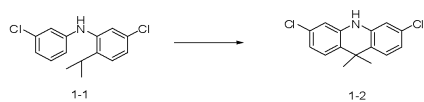
[0092] (2) 제조예 2 : 중간체 1-1의 합성



[0093]

[0094] 중간체 1-0(2.3 g, 0.010 mol)을 넣고 THF 30 mL를 가하여 교반하여 녹인 후, 온도를 0 °C로 낮추었다. 여기에 THF에 녹은 CH_3MgBr 을 천천히 넣고, 상온으로 온도를 서서히 올린 후 5시간동안 교반하였다. 반응종료 후 H_2O : EA에 층분리를 한 후 컬럼정제(N-HEXANE : MC)하여 <중간체 1-1> 2.0 g (수율 73%) 수득하였다. (m/z = 280)

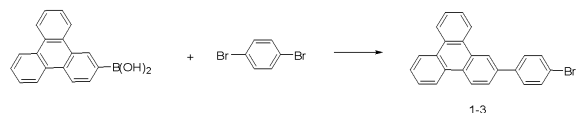
[0095] (3) 제조예 3 : 중간체 1-2의 합성



[0096]

[0097] 중간체 1-1(2.8 g, 0.010 mol)을 투입하고, 상온에서 소량의 H₂SO₄를 넣어 5시간동안 교반하였다. 반응종료 후 H₂O : EA에 층분리를 한 후 컬럼정제(N-HEXANE : MC)하여 <중간체 1-2> 1.7 g (수율 62%) 수득하였다. (m/z=278)

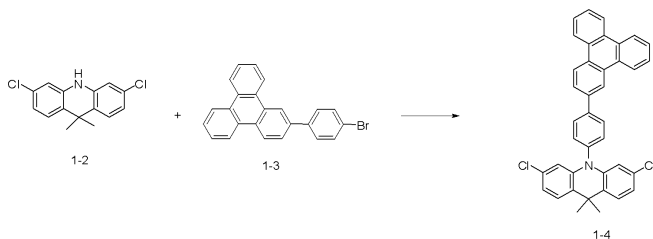
[0098] (4) 제조예 4 : 중간체 1-3의 합성



[0099]

[0100] triphenylboronic acid(3.3 g, 0.012 mol)에 1,4-dibromobenzene(2.4 g, 0.010 mol), Pd(pph₃)₄(0.6 g, 0.0005 mol), potassium carbonate(2.8 g, 0.020 mol)에 THF 100 mL를 넣고 65 °C에서 18 시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H₂O : MC에 층 분리 후 컬럼정제(N-HEXANE : MC) 하여 <중간체 1-3> 2.7 g (수율 70%) 수득하였다. (m/z=383)

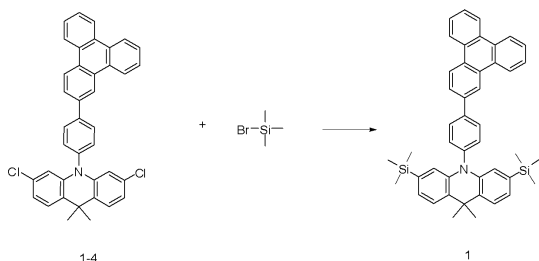
[0101] (5) 제조예 5 : 중간체 1-4의 합성



[0102]

[0103] 중간체 1-2(2.8 g, 0.010 mol)에 중간체 1-3(4.2 g, 0.011 mol), Pd(dba)₂ (0.5 g, 0.0005 mol), sodium-tert-butoxide(1.9 g, 0.020 mol)에 Toluene 100 mL를 넣고 95 °C에서 4시간 교반하여 반응시켰다. 반응종료 후 H₂O : MC에 층분리를 한 후 컬럼정제(N-HEXANE : MC)하여 <중간체 1-4> 3.6 g (수율 62%) 수득하였다. (m/z=580)

[0104] (6) 제조예 6 : 화합물 1의 합성



[0105]

[0106] 중간체 1-4(3.5 g, 0.010 mol)를 THF 50 mL에 녹인 후 질소하에서 Dry-ice Bath를 이용해 온도를 -78 °C로 낮춘 후 n-BuLi(2.5M in Hexane)(4.4 g, 0.011 mol)를 dripping시킨 후 교반시켰다. 90분간 교반시킨 후, bromotrimethylsilane (3.8 g, 0.025 mol)을 천천히 첨가한 후 -78 °C에 90분간 반응시켰다. 반응종료 후 H₂O : MC에 층분리를 한 후 컬럼정제(N-HEXANE : MC)하여 <화합물 1> 4.6 g (수율 70%) 수득하였다.

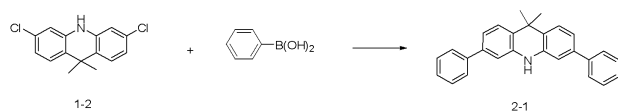
[0107] H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.18/d, 8.04/d) 2H(8.93/d, 8.12/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.54/d,

7.03/d, 6.69/d, 6.68/d, 6.60/s, 1.72/s) 6H(0.25/s)

[0108] LC/MS: $m/z = 657[(M+1)^+]$

[0109] 실시예 2 : 화합물 2 합성

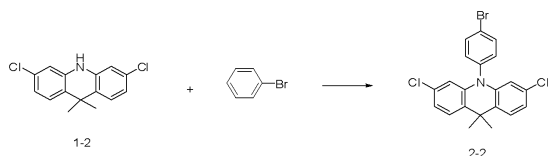
[0110] (1) 제조예 1 : 중간체 2-1의 합성



[0111]

[0112] 중간체 1-2(2.8 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid(2.8 g, 0.024 mol)을 넣고 실시예 1-제조예 (4)와 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 2-1> 2.5 g (수율 70%)을 얻었다. ($m/z=361$)

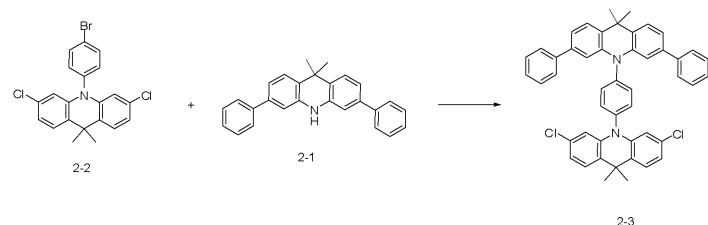
[0113] (2) 제조예 2 : 중간체 2-2의 합성



[0114]

[0115] 중간체 1-2(2.8 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(1.8 g, 0.011 mol)을 넣고 실시예 1-제조예 (5)와 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 2-2> 2.7 g(수율 62%)을 얻었다. ($m/z=433$)

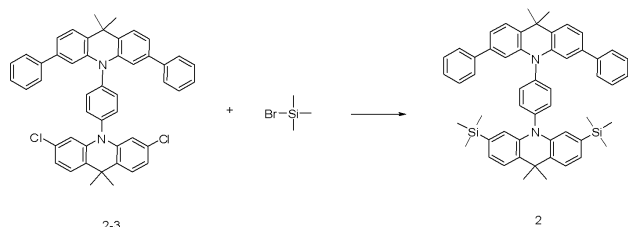
[0116] (3) 제조예 3 : 중간체 2-3의 합성



[0117]

[0118] 중간체 2-2(4.3 g, 0.010 mol)에 중간체 2-1(4.0 g, 0.011 mol)을 넣고 실시예 1-제조예 (5)와 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 2-3> 4.4 g (수율 62%)을 얻었다. ($m/z=708$)

[0119] (4) 제조예 4 : 화합물 2의 합성



[0120]

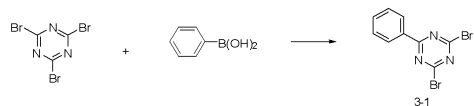
[0121] 중간체 2-3(7.1 g, 0.010 mol)을 실시예 1-제조예 (6)과 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 2> 5.4 g(수율 68%)을 얻었다.

[0122] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 2H(7.41/m, 7.11/d, 7.03/d, 6.81/s, 6.73/d, 6.68/d, 6.60/s) 4H(7.52/d, 7.51/m, 6.38/d, 1.72/s) 6H(0.25/s)

[0123] LC/MS: $m/z = 790[(M+1)^+]$

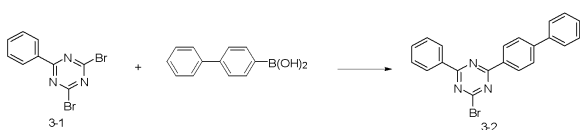
[0124] 실시예 3 : 화합물 3 합성

[0125] (1) 제조예 1 : 중간체 3-1의 합성



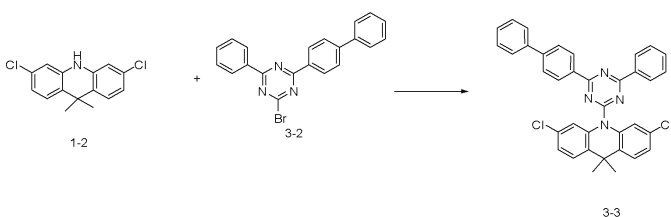
[0127] 2,4,6-tribromo-1,3,5-triazine(3.2 g, 0.010 mol)에 phenyl boronic acid (1.4 g, 0.012 mol)을 넣고 실시예 1-제조예 (4)과 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 3-1> 1.9 g (수율 61%)을 얻었다. ($m/z=314$)

[0128] (2) 제조예 2 : 중간체 3-2의 합성



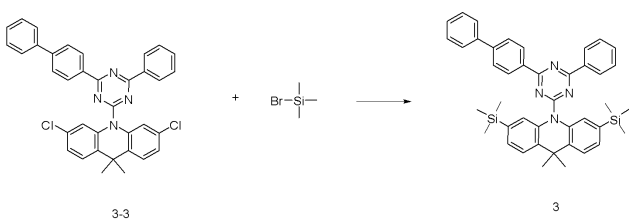
[0130] 중간체 3-1(3.1 g, 0.010 mol)에 biphenyl-4-ylboronic acid(2.4 g, 0.012 mol)을 넣고 실시예 1-제조예 (4)과 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 3-2> 2.5 g (수율 65%)을 얻었다. ($m/z=388$)

[0131] (3) 제조예 3 : 중간체 3-3의 합성



[0133] 중간체 1-2(2.8 g, 0.010 mol)에 중간체 3-2(4.3 g, 0.011 mol), NaH(0.8 g, 0.030 mol)에 DMF 80 mL를 넣고 12 시간 동안 교반하여 반응시켰다. 반응종료 후 H_2O : MC에 층분리를 한 후 컬럼정제(N-HEXANE : MC)하여 <중간체 3-3> 5.6 g (수율 95%) 수득하였다. ($m/z = 585$)

[0134] (4) 제조예 4 : 화합물 3의 합성



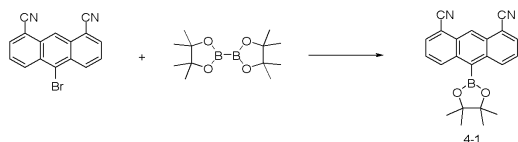
[0136] 중간체 3-3(5.9 g, 0.010 mol)을 실시예 1-제조예 (6)과 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 3> 4.2 g (수율 64%)을 얻었다.

[0137] 1H -NMR (200MHz, $CDCl_3$): δ ppm, 2H(8.28/d, 7.85/d, 7.52/d, 7.41/m, 7.25/d, 7.03/d, 6.68/d, 6.60/s, 1.72/s) 4H(7.51/m) 6H(0.25/s)

[0138] LC/MS: $m/z=662$ $[(M+1)^+]$

[0139] 실시예 4 : 화합물 4의 합성

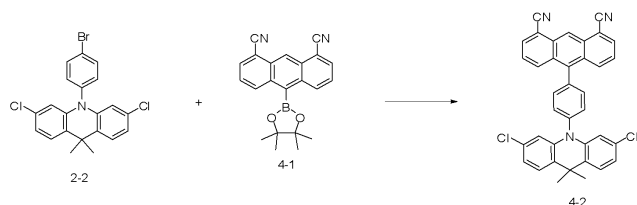
[0140] (1) 제조예 1 : 중간체 4-1의 합성



[0141]

[0142] 10-bromoanthracene-1,8-dicarbonitrile(3.1 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)을 넣고 실시예 1-제조예 (4)와 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 4-1> 2.4 g (수율 68%)을 얻었다. ($m/z=354$)

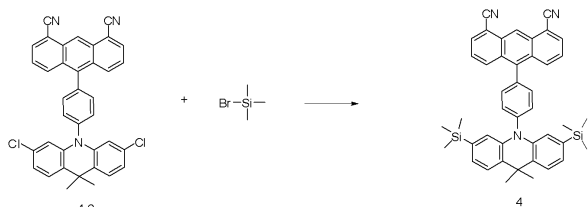
[0143] (2) 제조예 2 : 중간체 4-2의 합성



[0144]

[0145] 중간체 2-2(4.3 g, 0.010 mol)에 중간체 4-1(4.2 g, 0.012 mol)을 넣고 실시예 1-제조예 (4)와 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 4-2> 4.1 g (수율 70%)을 얻었다. ($m/z=580$)

[0146] (3) 제조예 3 : 화합물 4의 합성



[0147]

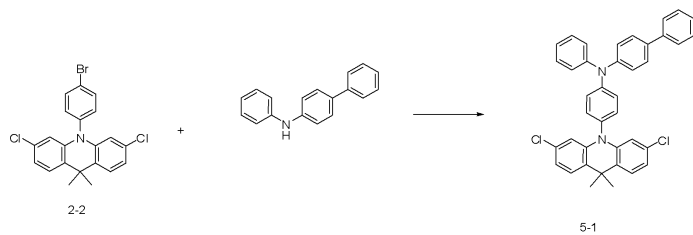
[0148] 중간체 4-2(5.8 g, 0.010 mol)을 실시예 1-제조예 (6)과 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 5> 3.8 g (수율 58%)을 얻었다.

[0149] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.29/s) 2H(8.21/d, 7.87/d, 7.54/d, 7.51/m, 7.03/d, 6.69/d, 6.68/d, 6.60/s, 1.72/s) 6H(0.25/s)

[0150] LC/MS: $m/z=656$ $[(M+1)^+]$

[0151] 실시예 5 : 화합물 5의 합성

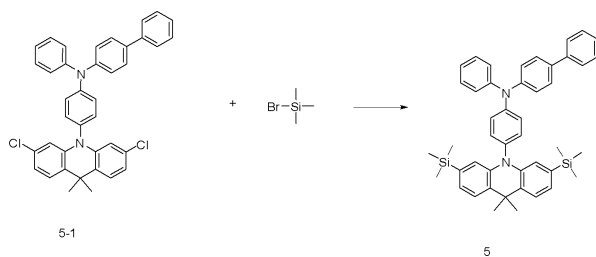
[0152] (1) 제조예 1 : 중간체 5-1의 합성



[0153]

[0154] 중간체 1-5(4.3 g, 0.010 mol)에 N-phenylbiphenyl-4-amine(2.7 g, 0.011 mol)을 넣고 실시예 1-제조예 (5)와 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 5-1> 3.9 g (수율 65%)을 얻었다. (m/z=597)

[0155] (2) 제조예 2 : 화합물 5의 합성



[0156]

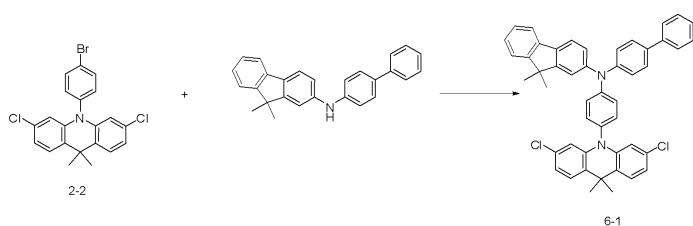
[0157] 중간체 5-1(6.0 g, 0.010 mol)을 실시예 1-제조예 (6)과 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 5> 4.2 g (수율 62%)을 얻었다.

[0158] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.41/m, 6.81/m) 2H(7.54/d, 7.52/d, 7.51/m, 7.20/m, 7.03/d, 6.69/d, 6.68/d, 6.63/d, 6.60/s, 1.72/s) 4H(6.38/d) 6H(0.25/s)

[0159] LC/MS: m/z=673 [(M+1)⁺]

[0160] 실시예 6 : 화합물 6 합성

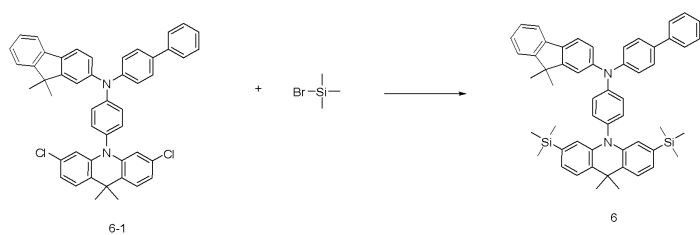
[0161] (1) 제조예 1 : 중간체 6-1의 합성



[0162]

[0163] 중간체 2-2(4.3 g, 0.010 mol)에 N-(biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine(4.0 g, 0.011 mol)을 넣고 실시예 1-제조예 (6)과 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 6-1> 5.1 g(수율 72%)을 얻었다. (m/z=713)

[0164] (2) 제조예 2 : 화합물 6의 합성



[0165]

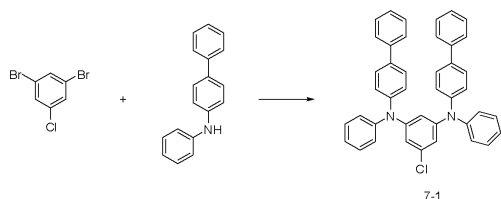
[0166] 중간체 6-1(7.1 g, 0.010 mol)을 실시예 1-제조예 (6)과 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 6> 5.4 g (수율 68%)을 얻었다.

[0167] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.87/d, 7.62/d, 7.55/d, 7.41/m, 7.38/m, 7.28/m, 6.75/s) 2H(7.54/d, 7.52/d, 7.51/m, 7.03/d, 6.69/d, 6.68/d, 6.60/s) 4H(6.38/d, 1.72/s) 6H(0.25/s)

[0168] LC/MS: $m/z=790$ [$(M+1)^+$]

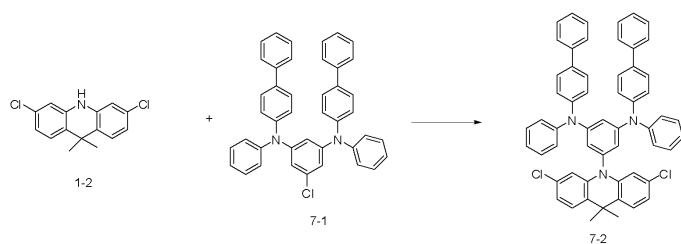
[0169] 실시예 7 : 화합물 7 합성

[0170] (1) 제조예 1 : 중간체 7-1의 합성



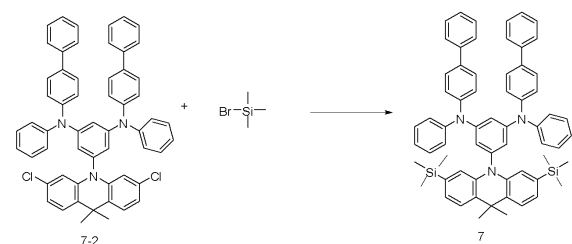
[0172] 1,3-dibromo-5-chlorobenzene(2.7 g, 0.010 mol)에 N-phenylbiphenyl-4-amine(5.4 g, 0.022 mol)을 넣고 실시예 1-제조예 (6)과 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 7-1> 4.4 g (수율 73%)을 얻었다. ($m/z=599$)

[0173] (2) 제조예 2 : 중간체 7-2의 합성



[0175] 중간체 1-2(2.8 g, 0.010 mol)에 중간체 7-1(6.6 g, 0.011 mol)을 넣고 실시예 1-제조예 (5)와 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 7> 5.3 g(수율 63%)을 얻었다. ($m/z=840$)

[0176] (3) 제조예 3 : 화합물 7의 합성



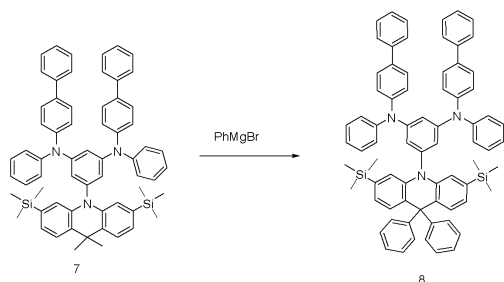
[0178] 중간체 7-2(8.4 g, 0.010 mol)을 실시예 1-제조예 (6)과 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 7> 6.6 g (수율 72%)을 얻었다.

[0179] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 2H(7.41/m, 7.03/d, 6.81/m, 6.68/d, 6.60/s, 1.72/s) 3H(5.13/s) 4H(7.54/d, 7.52/d, 7.51/m, 7.20/m, 6.69/d, 6.63/d) 6H(0.25/s)

[0180] LC/MS: $m/z= 917$ [($M+1$) $^+$]

[0181] 실시예 8 : 화합물 8 합성

[0182] (1) 제조예 1 : 화합물 8의 합성



[0183]

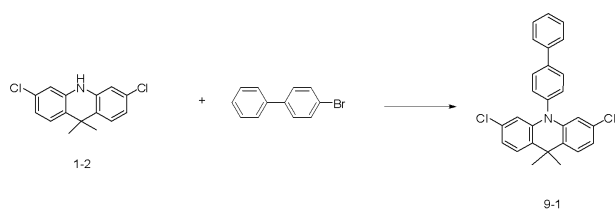
[0184] 화합물 7(9.2 g, 0.010 mol)을 THF 100 mL에 녹인 후 0 °C로 냉각한 후 phenyl magnesium bromide(4.5 g, 0.025 mol)을 천천히 첨가한다. 그 후 온도를 실온으로 천천히 상승시킨 후 12 시간 동안 교반하여 증류수를 넣고, 반응을 종결시켰다. 그리고, EA를 이용해 유기층을 추출한 후 컬럼정제(N-HEXANE : MC)하여 <화합물 8> 5.4 g(수율 52%) 수득하였다.

[0185] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 2H(7.41/m, 7.03/d, 6.81/m, 6.68/d, 6.60/s, 1.72/s) 3H(5.13/s) 4H(7.54/d, 7.52/d, 7.51/m, 7.33/m, 7.20/m, 7.11/d, 6.69/d, 6.63/d) 6H(0.25/s)

[0186] LC/MS: $m/z = 1041[(M+1)^+]$

[0187] 실시예 9 : 화합물 9의 합성

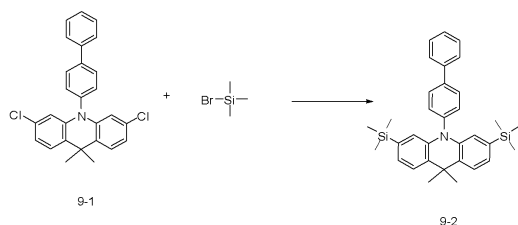
[0188] (1) 제조예 1 : 중간체 9-1의 합성



[0189]

[0190] 중간체 1-2(2.8 g, 0.010 mol)에 4-bromobiphenyl(2.6 g, 0.011 mol)을 넣고 실시예 1-제조예 (6)과 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 9-1> 2.6 g(수율 61%)을 얻었다. ($m/z=430$)

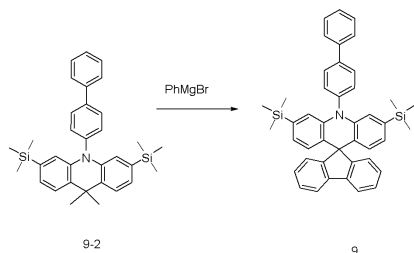
[0191] (2) 제조예 2 : 중간체 9-2의 합성



[0192]

[0193] 중간체 9-1(4.3 g, 0.010 mol)을 실시예 1-제조예 (6)과 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 9-2> 3.3 g(수율 65%)을 얻었다. ($m/z=508$)

(3) 제조예 3 : 화합물 9의 합성



중간체 9-2(5.1 g, 0.010 mol)에 phenylmagnesium bromide(4.5 g, 0.025 mol)을 넣고 실시예 8-제조예 (1)과 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 9> 3.4 g (수율 54%)을 얻었다.

¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 6H(0.25/s) 2H(7.87/d, 7.55/d, 7.54/d, 7.52/d, 7.51/m, 7.38/m, 7.28/m, 6.96/d, 6.69/d, 6.64/d, 6.56/d)

LC/MS: $m/z = 628[(M+1)^+]$

소자 실시예 1 : 화합물 1을 발광층의 형광 블루 도펀트 재료로 채용한 유기전계발광소자의 제조

ITO 투명전극 (양극)을 isopropyl-Alcohol에서 초음파 세정을 5분간 실시한 후, UV오존 세정을 30분간 실시하였다. 세정 후의 투명전극라인이 형성된 유리 기판을 진공증착 장치의 기판 홀더에 장착하고, 먼저 투명 전극 라인이 형성되어 있는 측면 상에 투명전극을 덮도록 정공주입재료로 CuPc(30 nm)를 증착하였다. 그 위에 정공수송 재료로 NPB(80 nm)를 증착한 후 <화합물 A> : <화합물 1>을 20:1의 질량비로 증착하여 막 두께 30 nm로 발광층을 형성하였다. 그 후 전자주입재료로 Alq3(5 nm), LiF(1 nm)를 형성한 후, Al(80 nm)로 음극을 형성하였다.

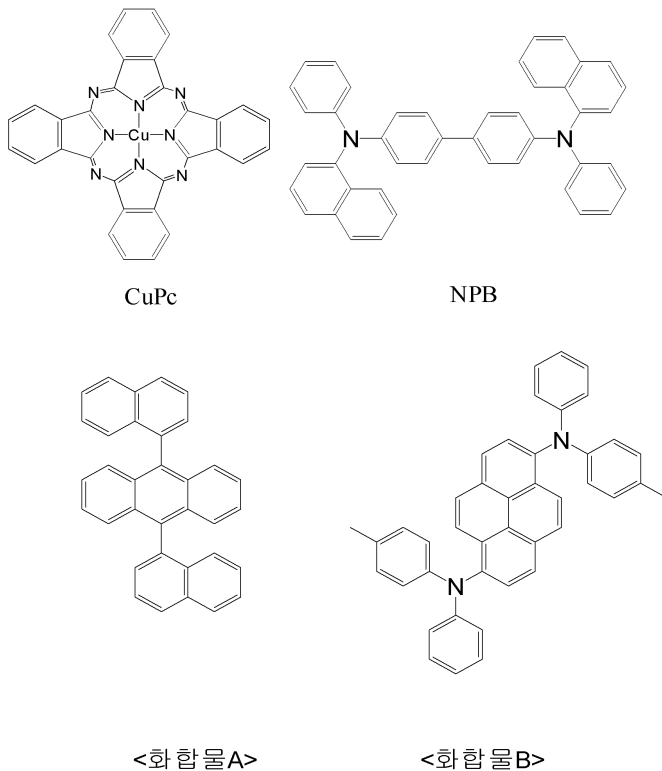
소자 실시예 2 내지 9

상기 화합물 1 대신 하기 [표 1]에 기재된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 소자 실시예 2 내지 9의 유기전계발광소자를 제조하였다.

소자 비교예 1

비교예 1를 위한 유기전계발광소자는 상기 실시예의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 대신 일반적으로 형광 도펀트 물질로 많이 사용되고 있는 화합물B를 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작하였다.

[0205] 상기에서 사용된 화합물의 구조는 다음과 같다.



[0206]

[0207] 이하, 상기 소자 실시예 1 내지 9와 소자 비교예 1에 따라 제조된 유기전계 발광소자의 특성을 비교한 결과를 하기 [표 1]에 나타내었다.

[0208]

[표 1]

	발광재료 DOPANT	구동전압(V) (at 1000cd/m ²)	발광휘도 (cd/m ²)	발광효율 (cd/A)	(CIE(x, y))
소자실시예1	화합물1	5.1	771	6.1	(0.13 ,0.10)
소자실시예2	화합물2	5.3	722	6.4	(0.13 ,0.12)
소자실시예3	화합물3	5.3	751	6.4	(0.14 ,0.11)
소자실시예4	화합물4	5.5	711	6.1	(0.13 ,0.11)
소자실시예5	화합물5	5.3	774	6.5	(0.14 ,0.11)
소자실시예6	화합물6	5.5	824	6.1	(0.13 ,0.09)
소자실시예7	화합물7	5.5	800	6.1	(0.15 ,0.10)
소자실시예8	화합물8	5.3	788	6.7	(0.15 ,0.11)
소자실시예9	화합물9	5.2	744	6.1	(0.14 ,0.12)
비교예1	화합물B	6.5	557	4.0	(0.14 ,0.13)

[0209]

[0210] 구동전압 및 발광효율 측정

[0211]

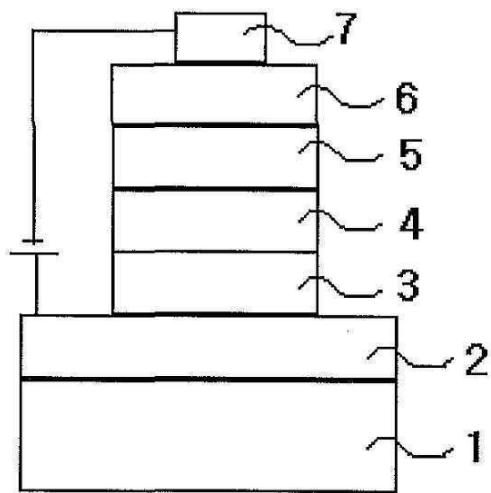
상기 실시예 및 비교예에 따른 유기전계발광소자(기판크기 : 25 × 25 mm² / 증착면적 : 2 × 2 mm²)를 IVL 측정 세트(CS-2000+지그+IVL프로그램)에 고정된 후 전류를 1 mA/m²씩 상승시키며 증착면의 발광 휘도(cd/m²), 구동전압(V), 발광효율(cd/A)을 측정하여 상기 [표 1]에 나타내었다.

[0212]

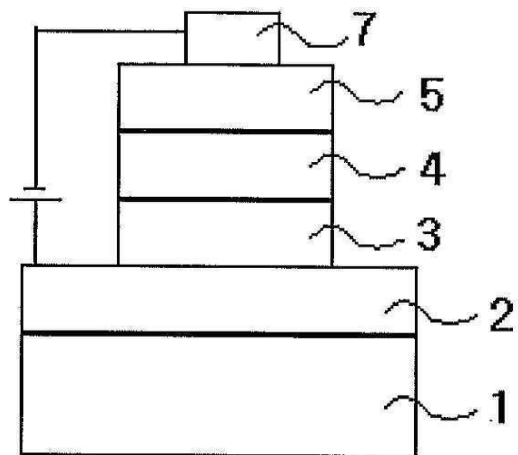
상기 실시예와 비교예 및 [표 1]의 결과로부터, 본 발명에 따른 [화학식 1]에 따른 유기발광 화합물은 종래의 청색형광발광재료를 사용한 경우에 비하여 구동전압 및 발광효율 등의 특성이 우수함을 보이므로, 표시소자, 디스플레이 소자 및 조명 등에 유용하게 사용될 수 있음을 알 수 있다.

도면

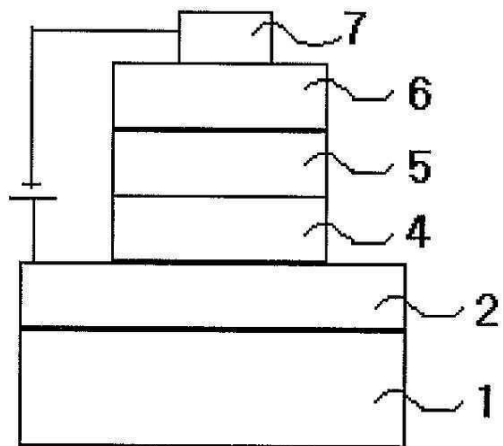
도면1



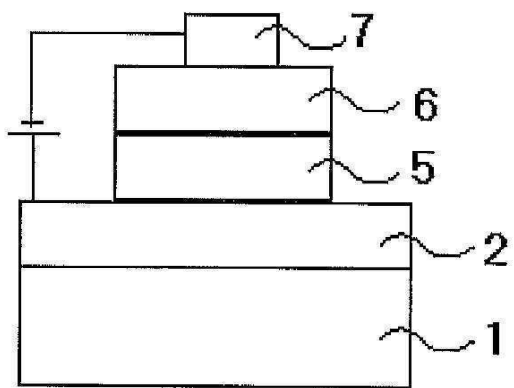
도면2



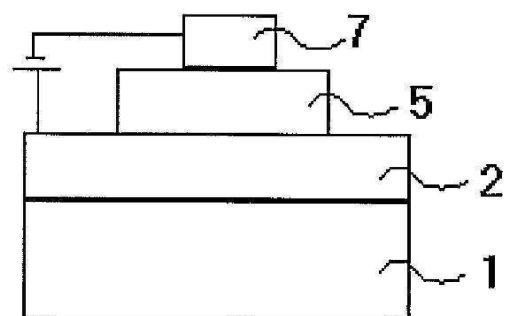
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	有机发光化合物和含有它们的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020160079514A	公开(公告)日	2016-07-06
申请号	KR1020140191001	申请日	2014-12-26
[标]申请(专利权)人(译)	株式会社P&H技术		
申请(专利权)人(译)	(注) 皮恩扎HI TECH		
当前申请(专利权)人(译)	(注) 皮恩扎HI TECH		
[标]发明人	HYUN SEO YONG 현서용 JUNG SUNG OUK 정성욱 KIM HA YEON 김하연		
发明人	현서용 정성욱 김하연		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 C07D219/02		
CPC分类号	C09K11/06 C07D219/02 H01L51/50 Y10S428/917		
其他公开文献	KR101825405B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及一种用于有机电致发光器件的有机发光化合物。有机发光化合物由化学式1表示。当将有机发光化合物用作发光层中的掺杂化合物或空穴传输层中的空穴传输化合物时，有机电致发光装置可以具有优异的发光特性，例如工作电压，亮度，使用寿命长等。

