



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2017년04월26일
(11) 등록번호 10-1729660
(24) 등록일자 2017년04월18일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2014-0098285
(22) 출원일자 2014년07월31일
심사청구일자 2014년07월31일
(65) 공개번호 10-2015-0129282
(43) 공개일자 2015년11월19일
(30) 우선권주장
1020140055533 2014년05월09일 대한민국(KR)
(56) 선행기술조사문헌
CN102372665 A*
JP2006124373 A*
KR1020130023071 A*
KR1020130055216 A*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
(주)씨엠디엘
충청남도 천안시 동남구 성남면 5산단2로 107 ()
(72) 발명자
이재성
경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)
안도환
경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인 대아

전체 청구항 수 : 총 15 항

심사관 : 지무근

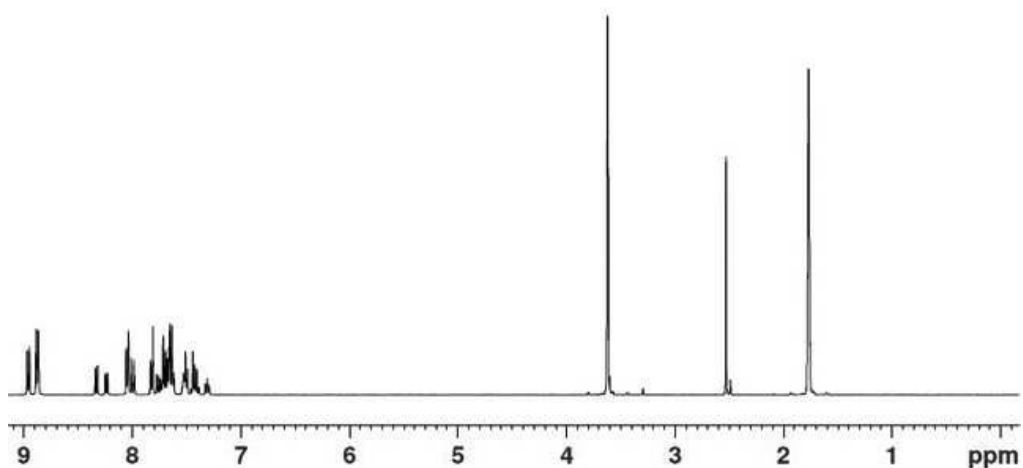
(54) 발명의 명칭 신규한 유기 전계 발광 소자용 화합물, 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자 및 전자 기기

(57) 요약

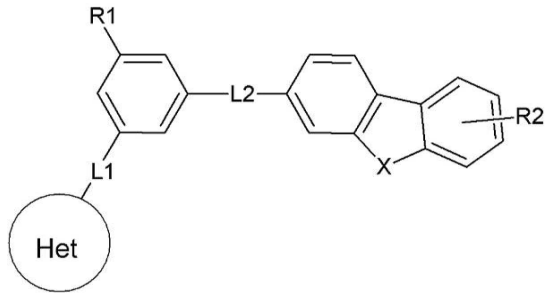
하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 소자용 화합물:

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



<화학식 1>



상기 식에서, R1, R2, L1, L2, X 및 Het는 명세서에서 정의한 바와 같다.

(72) 발명자

남기선

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

진현미

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

백지은

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

전아람

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

방수연

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

황인용

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

이대균

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

김소연

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

한근희

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

유동우

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

이재선

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

이미숙

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

신정철

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

한성민

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

현승학

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

배호기

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

안중복

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

박노길

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

문봉석

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

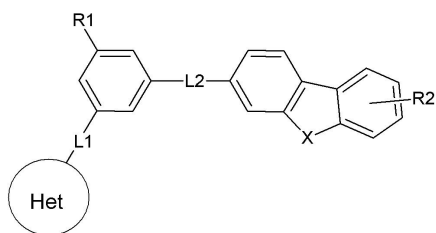
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 소자용 화합물:

<화학식 1>



상기 식에서,

X는 C(R15)(R16), C=O, O, S, N(R17), Si(CH₃)₂, SO₂, Se, 스피로 구조로 결합된 치환 또는 비치환된 C6-C50의 아릴기, 스피로 구조로 결합된 치환 또는 비치환된 C5-C50의 사이클로알킬기이고, 상기 아릴기 및 상기 사이클로알킬기가 2개 이상의 치환기를 가지는 경우 상기 2개 이상의 치환기가 융합되어 다환의 지방족 또는 방향족 융합고리를 형성할 수 있고;

R1은 페닐기이고,

R2, R15, R16 및 R17은, 각각 독립적으로, 수소(H), 중수소(D), 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C50 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알콕시아미노기이고;

상기 R15 및 상기 R16은 서로 융합되어 다환의 지방족 또는 방향족 융합고리를 형성할 수 있고;

Het는 치환 또는 비치환된 트리아진기이고;

L1 및 L2는, 각각 독립적으로, 단일결합, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 사이클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C3-C50 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 헤테로아릴알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬이미노기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴이미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬이미노기, 또는 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알콕시아미노기이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

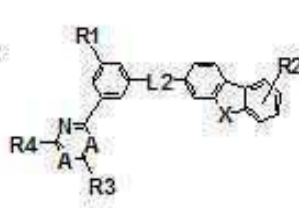
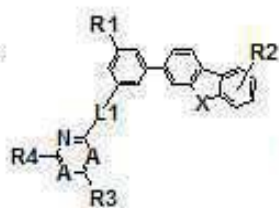
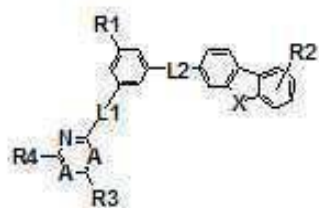
상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화학식 2 내지 4로 표시되는 화합물 중 어느 하나인

유기 전계 발광 소자용 화합물:

[화학식 2]

[화학식 3]

[화학식 4]



상기 식에서,

A는 질소이고;

R3 및 R4는, 각각 독립적으로, 수소(H), 중수소(D), 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아틸기, 치환 또는 비치환된 C3-C50 헤테로아틸기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알콕시아미노기이며;

X, R1, R2, L1 및 L2는 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화학식 5 내지 8로 표시되는 화합물 중 어느 하나인

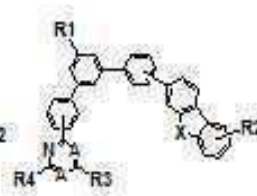
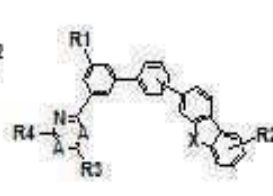
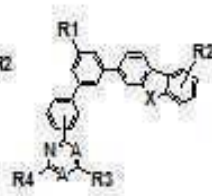
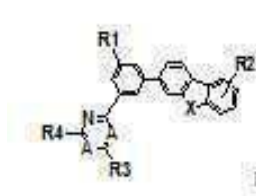
유기 전계 발광 소자용 화합물:

[화학식 5]

[화학식 6]

[화학식 7]

[화학식 8]



상기 식에서,

A는 질소이고;

R1은 페닐기이고,

R2 내지 R4는, 각각 독립적으로, 수소(H), 중수소(D), 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아틸기, 치환 또는 비치환된 C3-C50 헤테로아틸기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알콕시아미노기이며;

X는 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

청구항 4

제1항에 있어서,

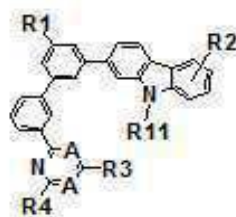
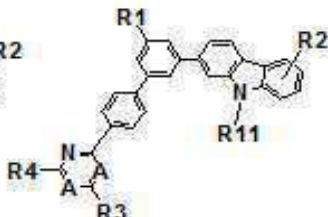
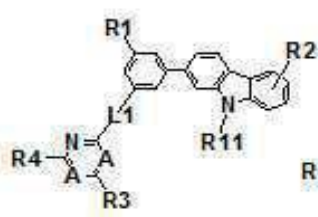
상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화학식 21 내지 25로 표시되는 화합물 중 어느 하나인

유기 전계 발광 소자용 화합물:

[화학식 21]

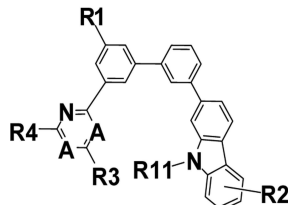
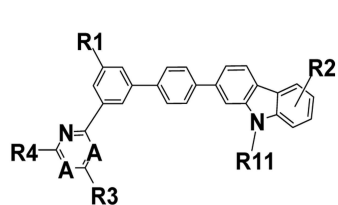
[화학식 22]

[화학식 23]



[화학식 24]

[화학식 25]



A는 질소이고;

R1은 페닐기이고,

R2, R3, R4 및 R11은, 각각 독립적으로, 수소(H), 중수소(D), 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C50 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알콕시아미노기이며;

L1은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 R2, R15, R16 및 R17은, 각각 독립적으로, 수소(H); 중수소(D); 할로젠;

C1-C50의 알킬기, C3-C50의 시클로알킬기, C2-C50의 알케닐기, C3-C50의 시클로알케닐기, C2-C50의 알키닐기, C5-C50의 시클로알키닐기, 시아노기, C1-C20의 알콕시기, C6-C60의 아릴기, C7-C60의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 기로 치환되거나, 치환되지 않은 헤테로아릴기;

C1-C50의 알킬기, C3-C50의 시클로알킬기, C2-C50의 알케닐기, C3-C50의 시클로알케닐기, C2-C50의 알키닐기, C5-C50의 시클로알키닐기, 시아노기, C1-C20의 알콕시기, C6-C60의 아릴기, C7-C60의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 기로 치환되거나, 치환되지 않은 헤테로아릴알킬기이고,

상기 헤테로아릴기 및 상기 헤테로아릴알킬기는, 각각 독립적으로, 이종원자 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는

유기 전계 발광 소자용 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 R2, R15, R16 및 R17은, 각각 독립적으로, 수소, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 카바줄기 또는 피리딘기이고,

상기 L1 및 L2는, 각각 독립적으로, 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기, 나프틸렌기, 카바줄기 또는 피리딘기인 유기 전계 발광 소자용 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화학식 101~124, 126, 131~154, 156, 163~172, 194, 199, 201, 203, 206~208 및 233~238로 표시되는 화합물 중 어느 하나인

유기 전계 발광 소자용 화합물.

101		102		103	
104		105		106	
107		108		109	
110		111		112	
113		114		115	
116		117		118	
119		120		121	
122		123		124	

126		131		132	
133		134		135	
136		137		138	
139		140		141	
142		143		144	
145		146		147	
148		149		150	
151		152		153	
154		156		163	

164		165		166	
167		168		169	
170		171		172	
194		199		201	
203		206		207	
208		233		234	
235		236		237	
238					

청구항 8

제1 전극, 1층 이상의 유기물층 및 제2 전극이 적층된 구조를 포함하고, 상기 유기물층은 제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 따른 유기 전계 발광 소자용 화합물을 1종 이상 포함하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 9

제8항에 있어서,

상기 유기물층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 유기 전계 발광 소자용 화합물을 1종 이상 포함하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 10

제9항에 있어서,

상기 유기 전계 발광 소자용 화합물은 발광층 중 인광 호스트, 형광 호스트, 또는 형광 도판트 재료로서 포함되는

유기 전계 발광 소자.

청구항 11

제8항에 있어서,

상기 유기물층은 정공수송층, 정공주입층, 정공차단층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자차단층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상을 포함하는

유기 전계 발광 소자.

청구항 12

제11항에 있어서,

상기 정공수송층, 상기 정공주입층, 상기 정공차단층, 상기 전자수송층, 상기 전자주입층 또는 상기 전자차단층이 상기 유기 전계 발광 소자용 화합물을 1종 이상 포함하는

유기 전계 발광 소자.

청구항 13

제8항에 따른 유기 전계 발광 소자를 포함하는 전자 기기.

청구항 14

제13항에 있어서,

상기 전자 기기는: 유기 집적 회로 (O-IC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-켄치 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 또는 유기 발광 소자 (OLED)인 전자 기기.

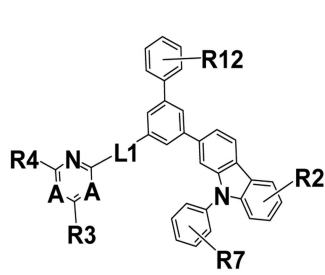
청구항 15

제1항에 있어서,

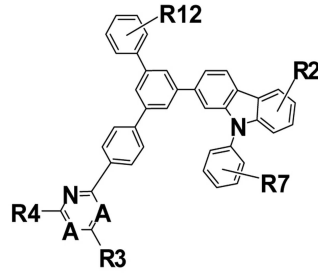
상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화학식 31 내지 35로 표시되는 화합물 중 어느 하나인

유기 전계 발광 소자용 화합물:

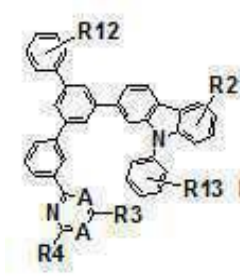
[화학식 31]



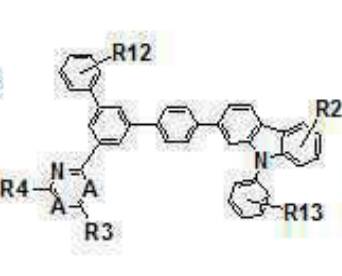
[화학식 32]



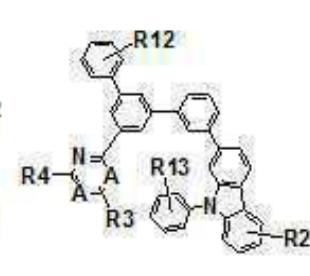
[화학식 33]



[화학식 34]



[화학식 35]



A는 질소이고;

R12는 수소이고,

R2 내지 R4, R7, R11 및 R13은, 각각 독립적으로, 수소(H), 중수소(D), 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C50 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알콕시아미노기이며;

L1은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 신규한 유기 전계 발광 소자용 화합물, 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자 및 전자 기기에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 전기 발광 소자(electroluminescence device: EL device)는 자체 발광형 표시 소자로서 응답 속도가 빠르고, 시야각이 넓다는 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발광층 재료로서 저분자 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용한 유기EL 소자를 처음으로 개발하였다[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] OLED에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료인데, 발광 재료 중 인광 재료는 이론적으로 형광 재료 대비 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있다. 현재까지 이리듐(III)착물 계열과 카바졸 계열의 재료들이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 최근 새로운 인광 재료들이 연구되고 있다.

[0004] 유기 전계 발광 현상의 원리는, 음극과 양극 사이에 유기물 층이 있을 때 두 전극 사이에 전압을 걸어주면 음극과 양극으로부터 각각 전자와 정공이 유기물 층으로 주입된다. 유기물 층으로 주입된 전자와 정공은 재결합하여 엑시톤(exciton)을 형성하고, 이 엑시톤이 다시 바닥 상태로 떨어지면서 빛이 나게 된다. 이러한 원리를 이용하는 유기 전계 발광 소자는 일반적으로 음극과 양극 및 그 사이에 위치한 유기물층, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층을 포함하는 유기물 층으로 구성될 수 있다.

[0005] 유기 전계 발광 소자에서 사용되는 재료로는 순수 유기물 또는 유기물과 금속이 착물을 이루는 착화합물이 대부

분을 차지하고 있으며, 용도에 따라 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 구분될 수 있다. 여기서, 정공주입 재료나 정공수송 재료로는 p-타입의 성질을 가지는 유기 재료, 즉 쉽게 산화가 되고 산화시에 전기화학적으로 안정한 상태를 가지는 유기물이 주로 사용되고 있다. 한편, 전자주입 재료나 전자수송 재료로는 n-타입 성질을 가지는 유기 재료, 즉 쉽게 환원이 되고 환원시에 전기화학적으로 안정한 상태를 가지는 유기물이 주로 사용되고 있다. 발광층 재료로는 p-타입 성질과 n-타입 성질을 동시에 가진 재료, 즉 산화와 환원 상태에서 모두 안정한 형태를 갖는 재료가 바람직하며, 엑시톤이 형성되었을 때 이를 빛으로 전환하는 발광 효율이 높은 재료가 바람직하다. 따라서, 당 기술 분야에서는 상기와 같은 요건을 갖춘 새로운 유기 재료의 개발이 요구되고 있다.

발명의 내용

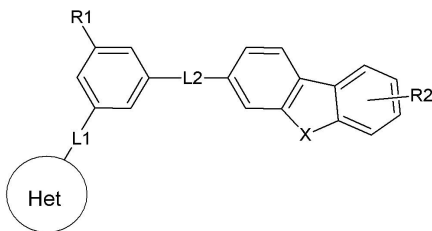
해결하려는 과제

- [0006] 본 발명의 일 구현예는 적절한 에너지 준위, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성을 가지는 유기 전계 발광 소자용 화합물을 제공한다.
- [0007] 본 발명의 다른 구현예는 상기 유기 전계 발광 소자용 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [0008] 본 발명의 또 다른 구현예는 상기 유기 전계 발광 소자를 적용한 전자 기기를 제공한다.

과제의 해결 수단

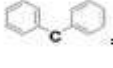
- [0009] 본 발명의 일 구현예에서, 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 소자용 화합물을 제공한다.

- [0010] <화학식 1>



- [0011]

- [0012] 상기 식에서,

- [0013] X는 C(R15)(R16), C(CH₃)₂, C=O, O, S, N(R17), Si(CH₃)₂, SO₂, Se, , 스피로 구조로 결합된 치환 또는 비치환된 C6-C50의 아릴기, 스피로 구조로 결합된 치환 또는 비치환된 C5-C50의 사이클로알킬기이고, 상기 아릴기 및 상기 사이클로알킬기가 2개 이상의 치환기를 가지는 경우 상기 2개 이상의 치환기가 융합되어 다환의 지방족 또는 방향족 융합고리를 형성할 수 있고;

- [0014] R1, R2, R15, R16 및 R17은, 각각 독립적으로, 수소(H), 중수소(D), 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C50 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알콕시아미노기이고;

- [0015] 상기 R15 및 상기 R16은 서로 융합되어 다환의 지방족 또는 방향족 융합고리를 형성할 수 있고;

- [0016] Het는 치환 및 비치환된 C3-C60 헤테로아릴기 또는 치환 및 비치환된 C4-C60 헤테로아릴알킬기이며, B, N, O, S, P(=O), Si 및 P 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하고;

- [0017] L1 및 L2는, 각각 독립적으로, 단일결합, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 사이클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C3-C50 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 헤테로아릴알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알

킬이미노기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴이미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬이미노기, 또는 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알콕시이미노기이다.

[0018] 본 발명의 다른 구현예에서, 제1 전극, 1층 이상의 유기물층 및 제2 전극이 적층된 구조를 포함하고, 상기 유기물층은 상기 유기 전계 발광 소자용 화합물을 1종 이상 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0019] 본 발명의 또 다른 구현예에서, 상기 유기 전계 발광 소자를 포함하는 전자 기기를 제공한다.

발명의 효과

[0020] 상기 유기 전계 발광 소자용 화합물은 유기 전계 발광 소자에서 사용 가능한 물질에 요구되는 조건, 예컨대 적절한 에너지 준위, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성 등을 모두 우수하게 만족시킬 수 있으며, 치환기에 따라 유기 전계 발광 소자에서 요구되는 다양한 역할을 할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0021] 도 1은 실시예 1에서 제조된 화합물 119의 ¹H-NMR 측정 결과이다.

도 2는 실시예 1에서 제조된 화합물 119의 TGA 측정 결과이다.

도 3은 실시예 1에서 제조된 화합물 119의 DSC 측정 결과이다.

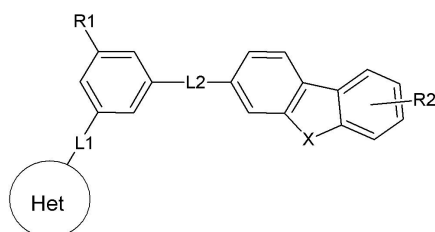
도 4는 실시예 1에서 제조된 화합물 119의 UV 흡수 스펙트럼이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0022] 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구항의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

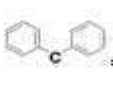
[0023] 본 발명의 일 구현예에서, 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 소자용 화합물을 제공한다.

[0024] <화학식 1>



[0025]

[0026] 상기 식에서,

[0027] X는 C(R15)(R16), C(CH₃)₂, C=O, O, S, N(R17), Si(CH₃)₂, SO₂, Se, , 스피로 구조로 결합된 치환 또는 비치환된 C6-C50의 아릴기, 스피로 구조로 결합된 치환 또는 비치환된 C5-C50의 사이클로알킬기이고, 상기 아릴기 및 상기 사이클로알킬기가 2개 이상의 치환기를 가지는 경우 상기 2개 이상의 치환기가 융합되어 다환의 지방족 또는 방향족 융합고리를 형성할 수 있고;

[0028] R1, R2, R15, R16 및 R17은, 각각 독립적으로, 수소(H), 중수소(D), 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C50 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알콕시아미노기이고;

[0029] 상기 R15 및 상기 R16은 서로 융합되어 다환의 지방족 또는 방향족 융합고리를 형성할 수 있고;

[0030] Het는 치환 및 비치환된 C3-C60 헤테로아릴기 또는 치환 및 비치환된 C4-C60 헤테로아릴알킬기이며, B, N, O,

S, P(=O), Si 및 P 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하고;

[0031] L1 및 L2는, 각각 독립적으로, 단일결합, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 사이클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C3-C50 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 헤테로아릴알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬이미노기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴이미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬이미노기, 또는 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알콕시이미노기이다.

[0032] 상기 R2는 화학식 1에서 결합 위치가 특정되지 않은 것으로서, R2가 부존재인 경우는 R2가 수소인 경우로 정의되는 것으로 한다.

[0033] 상기 유기 전계 발광 소자용 화합물은 유기 전계 발광 소자에서 사용 가능한 물질에 요구되는 조건, 예컨대 적절한 에너지 준위, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성 등을 모두 우수하게 만족시킬 수 있으며, 상기 정의된 치환기를 적절히 선택함에 따라 유기 전계 발광 소자에서 요구되는 다양한 역할을 할 수 있다.

[0034] 상기 화학식 1로 표시되는 구조는 Het기, R1 치환기를 갖는 페닐렌 및 3개의 융합고리기가 L1 및 L2의 링커기로 연결되어 있는 구조로서, 3개의 융합고리기의 결합 위치가 X를 포함하는 오각 고리에 융합된 육각 고리에서 X와 가장 가까운 탄소를 1번 탄소로 정의했을 때, 2번 탄소 위치에서 결합하는 구조를 가짐으로써, 전술한 바와 같이 적절한 에너지 준위, 우수한 전기화학적 안정성 및 우수한 열적 안정성의 특성을 구현할 수 있게 된다.

[0035] 아울러, R1이 수소가 아닌 경우, 상기 R1 치환기를 갖는 페닐렌의 벤젠 고리에 3개의 결합이 존재하는 구조를 형성할 수 있고, 이러한 구조는 전술한 바와 같은 적절한 에너지 준위, 우수한 전기화학적 안정성 및 우수한 열적 안정성의 특성을 개선하는 데에 더욱 도움이 될 수 있다.

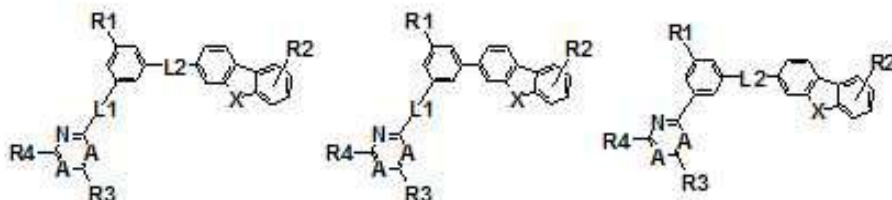
[0036] 상기 유기 전계 발광 소자용 화합물의 이러한 구조는 발광층 재료로서 유용하게 적용될 수 있다.

[0037] 일 구현예에서, 상기 유기 전계 발광 소자용 화합물은 발광층 중 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도판트, 또는 형광 도판트 재료로서 포함될 수 있다.

[0038] 본 명세서에서, "치환"된 경우의 치환기는, 별도의 정의가 없는 한, C1-C50의 알킬기, C3-C50의 시클로알킬기, C2-C50의 알케닐기, C3-C50의 시클로알케닐기, C2-C50의 알키닐기, C5-C50의 시클로알키닐기, 시아노기, C1-C20의 알콕시기, C6-C60의 아릴기, C7-C60의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택될 수 있고, 또한, 이들의 조합의 둘 이상의 치환기로 치환된 경우를 포함한다.

[0039] 다른 구현예에서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화학식 2 내지 4로 표시되는 화합물 중 어느 하나일 수 있다.

[0040] [화학식 2] [화학식 3] [화학식 4]



[0041]

[0042] 상기 식에서,

[0043] A는 탄소 또는 질소이고;

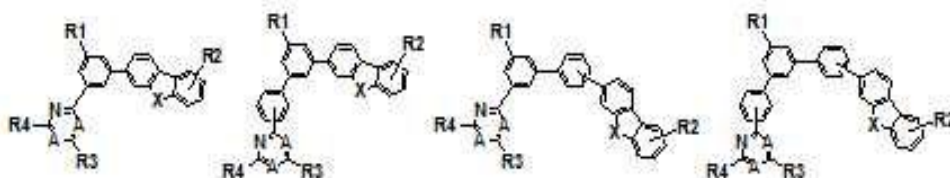
[0044] R1 내지 R4는, 각각 독립적으로, 수소(H), 중수소(D), 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C50 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된

C1-C50 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알콕시아미노기이며;

[0045] X, L1 및 L2는 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

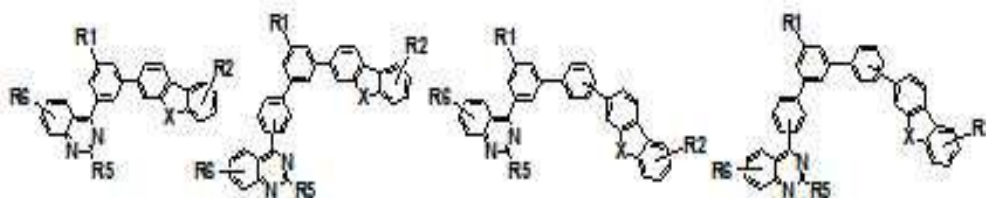
[0046] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화학식 5 내지 20으로 표시되는 화합물 중 어느 하나일 수 있다.

[0047] [화학식 5] [화학식 6] [화학식 7] [화학식 8]



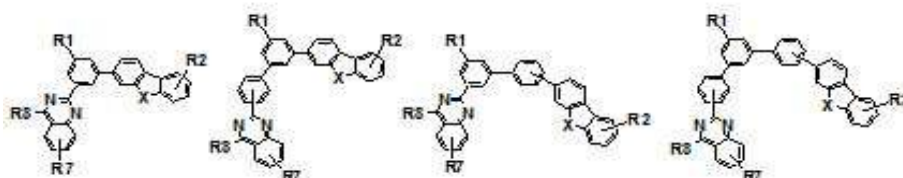
[0048]

[0049] [화학식 9] [화학식 10] [화학식 11] [화학식 12]



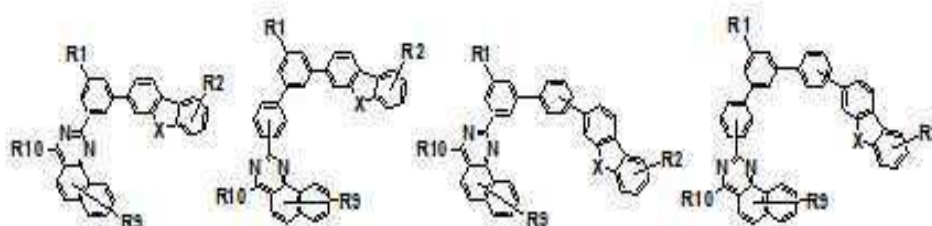
[0050]

[0051] [화학식 13] [화학식 14] [화학식 15] [화학식 16]



[0052]

[0053] [화학식 17] [화학식 18] [화학식 19] [화학식 20]



[0054]

[0055] 상기 식에서,

[0056] A는 탄소 또는 질소이고;

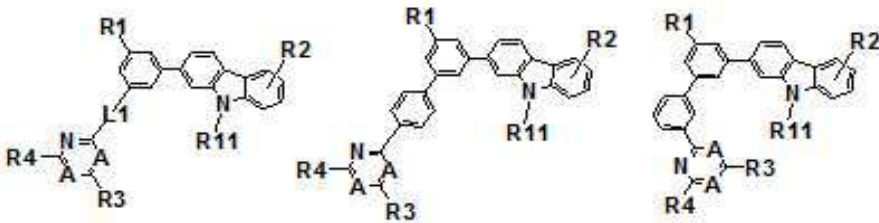
[0057] R1 내지 R10은, 각각 독립적으로, 수소(H), 중수소(D), 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C50 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알콕시아미노기이며;

[0058] X는 상기 화학식 1 내지 4에서 정의된 바와 같다.

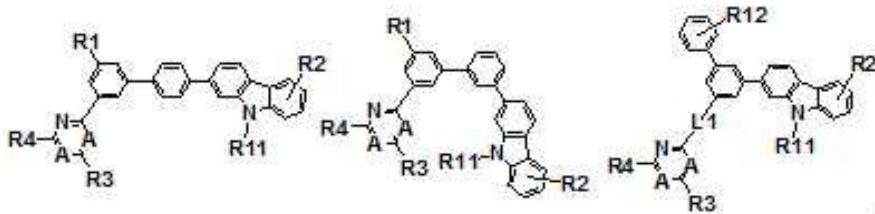
[0059] 상기 R2, R6, R7 및 R9는 화학식 1에서 결합 위치가 특정되지 않은 것으로서, R2, R6, R7 또는 R9가 부존재인 경우는 R2, R6, R7 또는 R9가 수소인 경우로 정의되는 것으로 한다.

[0060] 또한, 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화학식 21 내지 47로 표시되는 화합물 중 어느 하나일 수 있다.

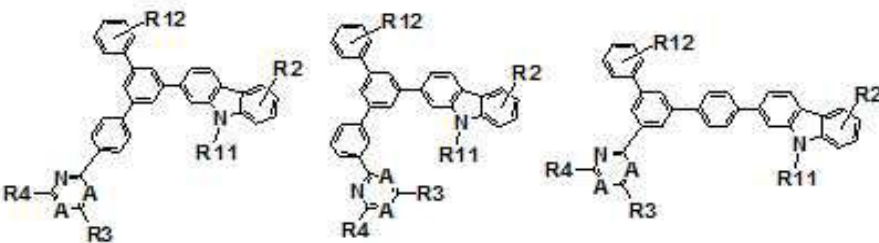
[0061] [화학식 21] [화학식 22] [화학식 23]



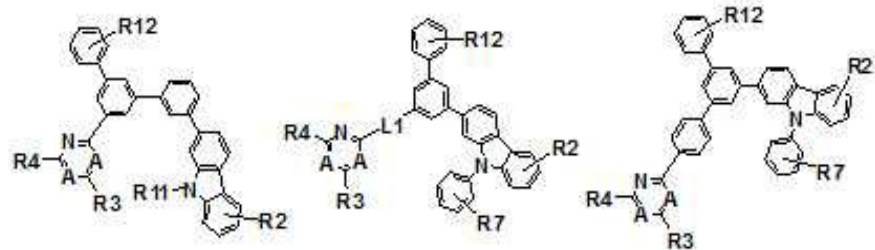
[0062] [화학식 24] [화학식 25] [화학식 26]



[0064] [화학식 27] [화학식 28] [화학식 29]

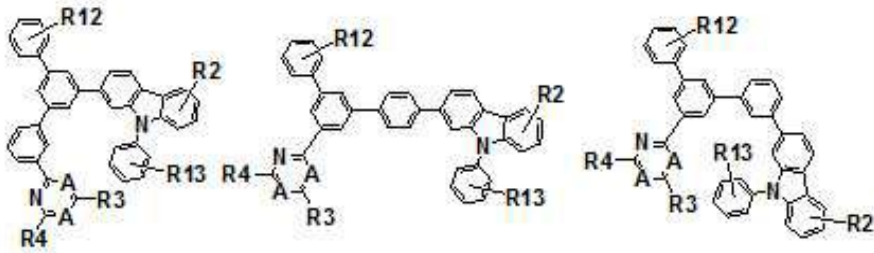


[0066] [화학식 30] [화학식 31] [화학식 32]

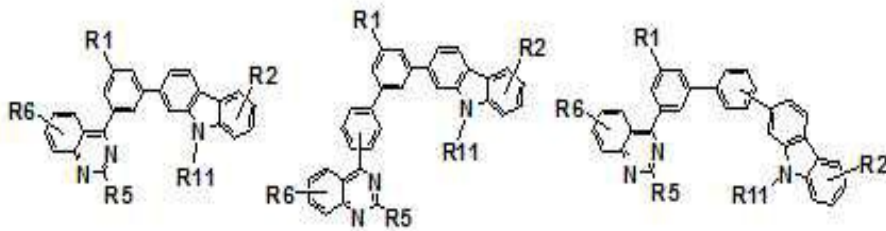


[0068]

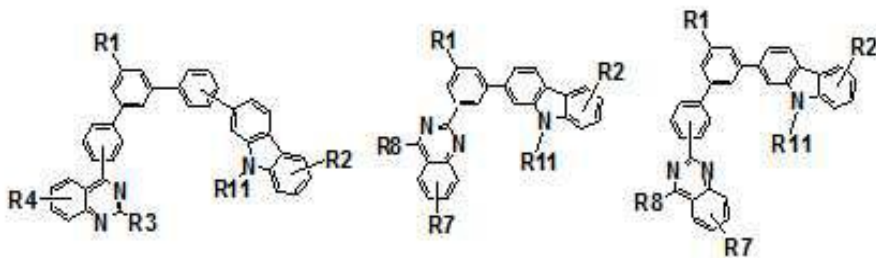
[0069] [화학식 33] [화학식 34] [화학식 35]



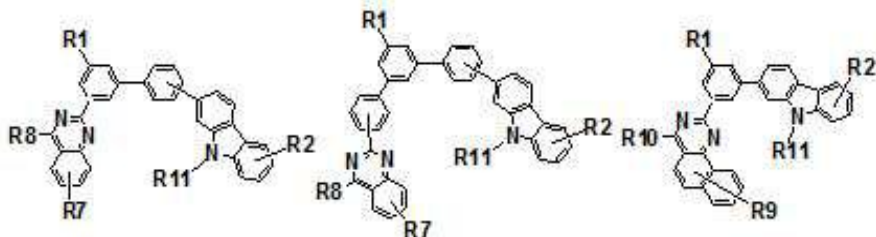
[0070]
[0071] [화학식 36] [화학식 37] [화학식 38]



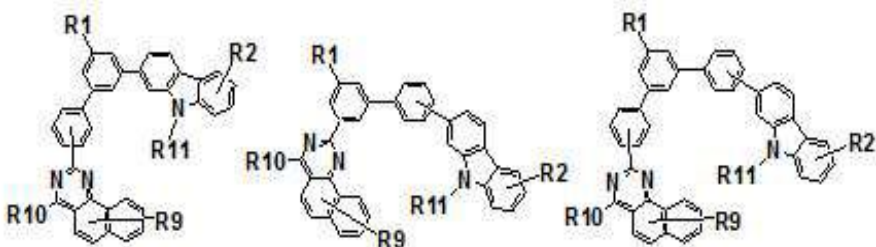
[0072]
[0073] [화학식 39] [화학식 40] [화학식 41]



[0074]
[0075] [화학식 42] [화학식 43] [화학식 44]



[0076]
[0077] [화학식 45] [화학식 46] [화학식 47]



[0078]
[0079] A는 탄소 또는 질소이고;

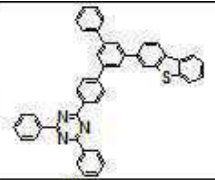
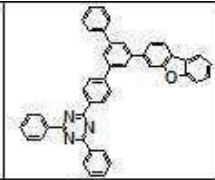
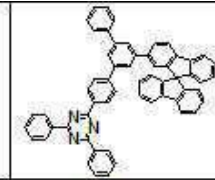
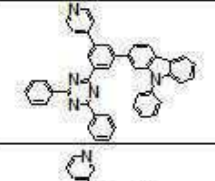
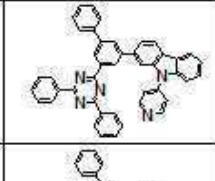
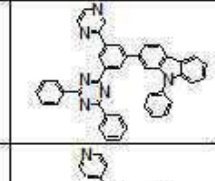
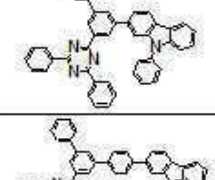
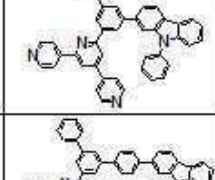
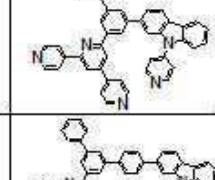
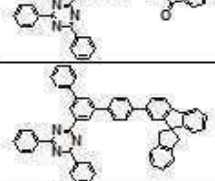
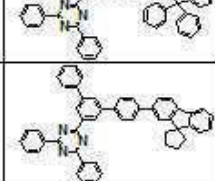
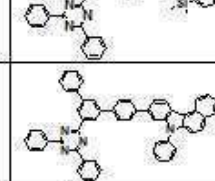
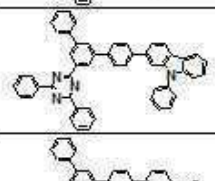
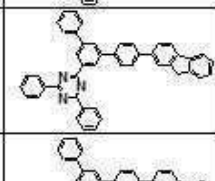
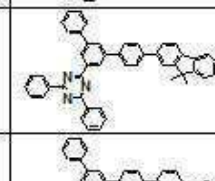
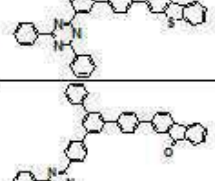
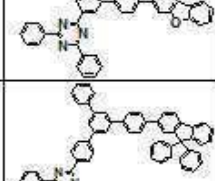
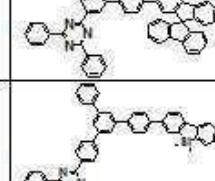
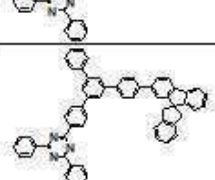
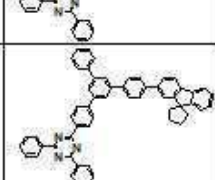
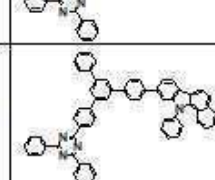
[0080] R1 내지 R13은, 각각 독립적으로, 수소(H), 중수소(D), 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C50 아릴기,

치환 또는 비치환된 C3-C50 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C4-C50 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C50 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C7-C50 아릴알콕시아미노기이며;

- [0081] X 및 L1은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.
- [0082] 상기 R2, R6, R7, R9, R12 및 R13은 화학식 1에서 결합 위치가 특정되지 않은 것으로서, R2, R6, R7, R9, R12 또는 R13이 부존재인 경우는 R2, R6, R7, R9, R12 또는 R13이 수소인 경우로 정의되는 것으로 한다.
- [0083] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, 상기 R1, R2, R15, R16 및 R17은, 예를 들어, 각각 독립적으로,
- [0084] 수소(H);
- [0085] 중수소(D);
- [0086] 할로젠;
- [0087] C1-C50의 알킬기, C3-C50의 시클로알킬기, C2-C50의 알케닐기, C3-C50의 시클로알케닐기, C2-C50의 알키닐기, C5-C50의 시클로알키닐기, 시아노기, C1-C20의 알콕시기, C6-C60의 아릴기, C7-C60의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 기로 치환되거나, 치환되지 않은 헤테로아릴기;
- [0088] C1-C50의 알킬기, C3-C50의 시클로알킬기, C2-C50의 알케닐기, C3-C50의 시클로알케닐기, C2-C50의 알키닐기, C5-C50의 시클로알키닐기, 시아노기, C1-C20의 알콕시기, C6-C60의 아릴기, C7-C60의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 기로 치환되거나, 치환되지 않은 헤테로아릴알킬기일 수 있다.
- [0089] 상기 R1, R2, R15, R16 및 R17이 상기 헤테로아릴기 및 상기 헤테로아릴알킬기인 경우, 상기 헤테로아릴기 및 상기 헤테로아릴알킬기는, 각각 독립적으로, 이종원자 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함할 수 있다.
- [0090] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, 예를 들어, 상기 R1, R2, R15, R16 및 R17은, 각각 독립적으로, 수소, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 카바졸기 또는 피리딘기이고, 상기 L1 및 L2는, 각각 독립적으로, 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기, 나프틸렌기, 카바졸기 또는 피리딘기일 수 있다.
- [0091] 보다 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화학식 101 내지 306로 표시되는 화합물 중 어느 하나일 수 있고, 이에 한정되지는 않는다.

101		102		103	
104		105		106	
107		108		109	
110		111		112	
113		114		115	
116		117		118	
119		120		121	

[0092]

122		123		124	
125		126		127	
128		129		130	
131		132		133	
134		135		136	
137		138		139	
140		141		142	
143		144		145	
146		147		148	

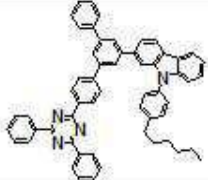
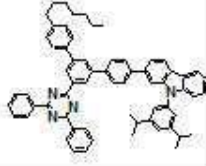
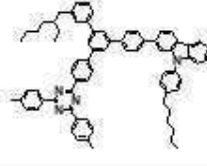
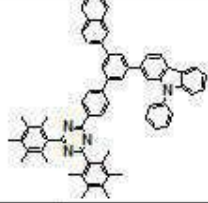
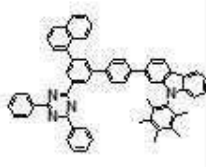
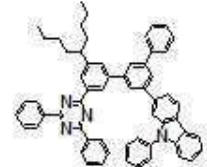
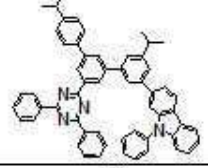
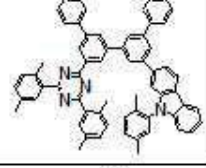
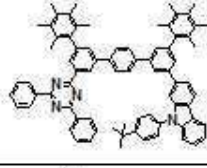
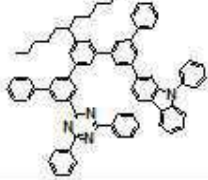
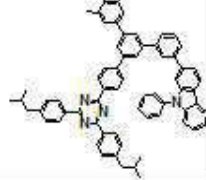
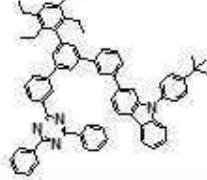
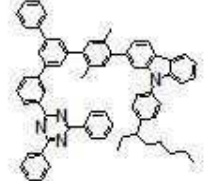
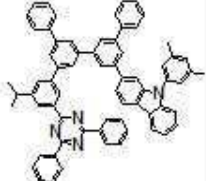
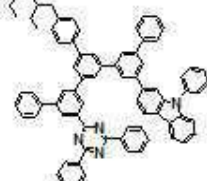
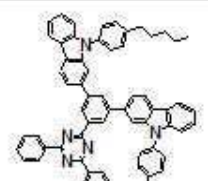
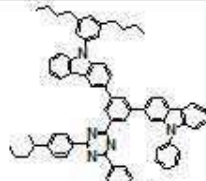
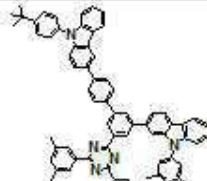
[0093]

149		150		151	
152		153		154	
155		156		157	
158		159		160	
161		162		163	
164		165		166	
167		168		169	
170		171		172	

[0094]

173		174		175	
176		177		178	
179		180		181	
182		183		184	
185		186		187	
188		189		190	
191		192		193	

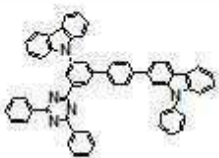
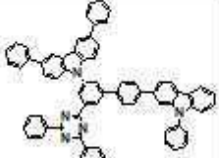
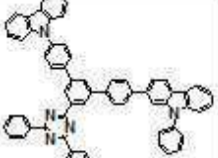
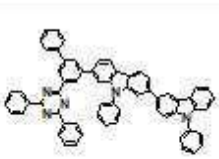
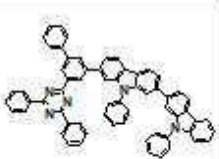
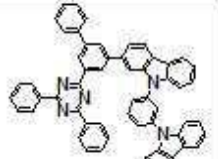
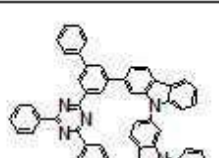
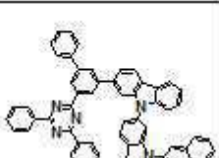
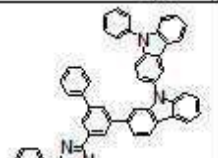
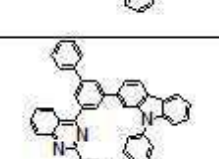
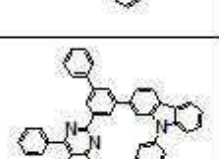
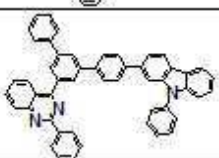
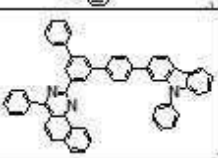
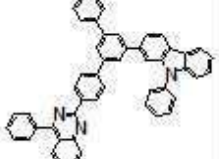
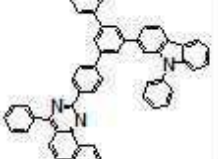
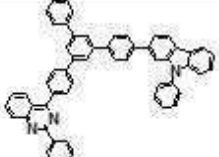
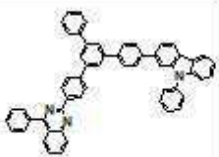
[0095]

194		195		196	
197		198		199	
200		201		202	
203		204		205	
206		207		208	
209		210		211	

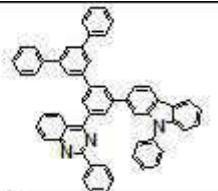
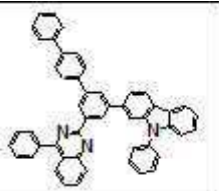
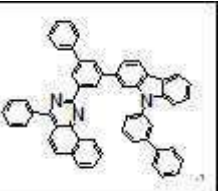
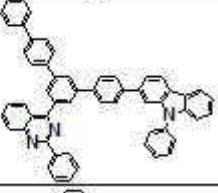
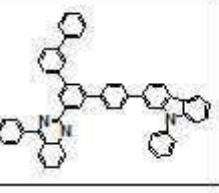
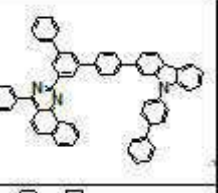
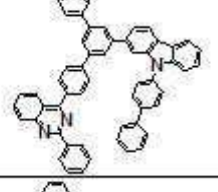
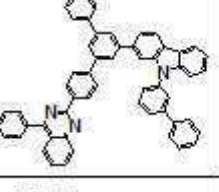
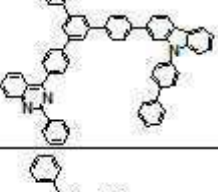
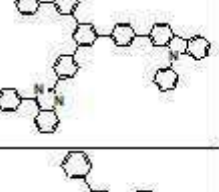
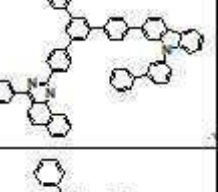
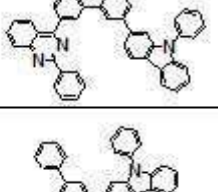
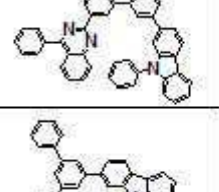
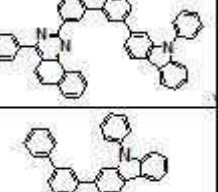
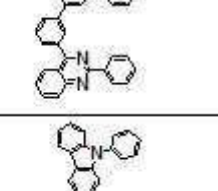
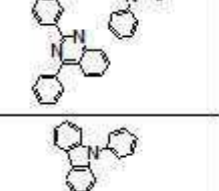
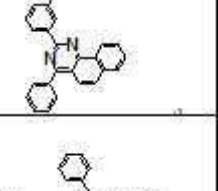
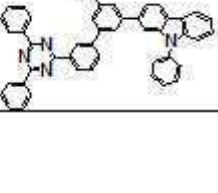
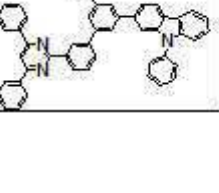
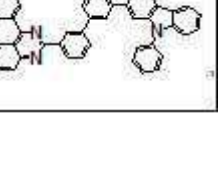
[0096]

212		213		214	
215		216		217	
218		219		220	
221		222		223	
224		225		226	
227		228		229	

[0097]

230		231		232	
233		234		235	
236		237		238	
239		240		241	
242		243		244	
245		246		247	
248		249		250	

[0098]

261		262		263	
264		265		266	
267		268		269	
270		271		272	
283		284		285	
288		287		286	
289		270		271	

[0099]

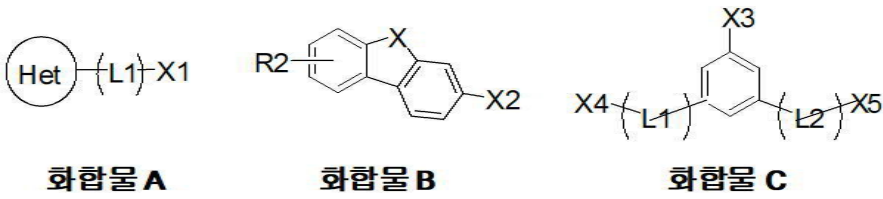
272		273		274	
275		276		277	
278		279		280	
281		282		283	
284		285		286	
287		288		289	
290		291		292	

[0100]

293		294		295	
296		297		298	
299		300		301	
302		303		304	
305		306			

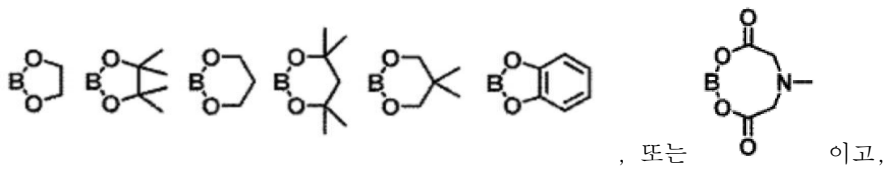
[0101]

[0102] 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 소자용 화합물은, 예를 들어, 하기 화합물 A, 화합물 B 및 화합물 C를 하기 반응식 1 또는 반응식 2에 의해 반응시켜 합성할 수 있다.



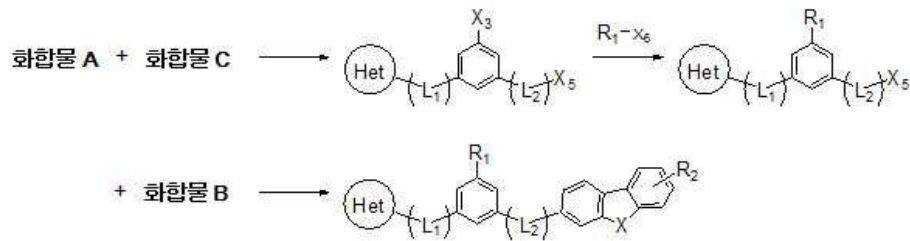
[0103]

[0104] 상기 화합물 A, B 및 C 중, X1 내지 X5는, 각각 독립적으로, Cl, Br, I, B(OH)₂,



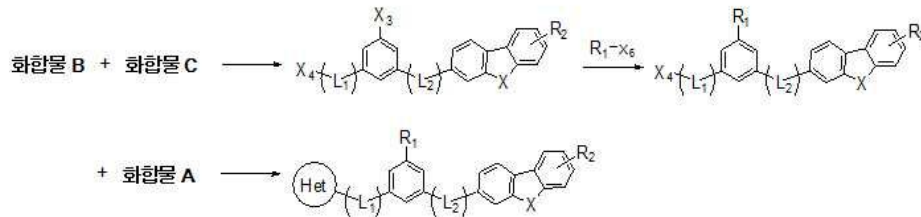
[0105] X, L1, L2, R2 및 Het는 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[0106] [반응식 1]



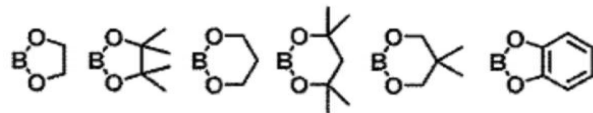
[0107]

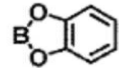
[0108] [반응식 2]

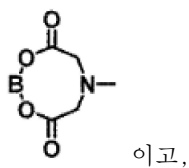


[0109]

[0110] 상기 반응식 1 및 반응식 2에서,



[0111] X3 내지 X6은 Cl, Br, I, B(OH)₂ 또는 , 또는



[0112] X, L1, L2, R1, R2 및 Het는 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[0113] 본 발명의 다른 구현예에서, 제1 전극, 1층 이상의 유기물층 및 제2 전극이 적층된 구조를 포함하고, 상기 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 1종 이상 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0114] 상기 유기 전계 발광 소자의 유기물층에 포함되는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대한 상세한 설명은 전술한 바와 같다.

[0115] 일 구현예에서, 상기 유기물층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0116] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층 중 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도판트, 또는 형광 도판트 재료로서 포함될 수 있다.

[0117] 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물, 이외에, 추가적으로, 공지된 재료의 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도판트, 또는 형광 도판트 재료를 더 포함할 수 있다.

[0118] 상기 유기물층은 필요한 용도에 따라서 적절히 정공수송층, 정공주입층, 정공차단층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자차단층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상을 포함할 수 있다.

[0119] 상기 정공수송층, 정공주입층, 정공차단층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자차단층은, 각각, 공지된 물질을 사용하여 형성되거나, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다.

[0120] 상기 유기물층은 유기 박막층을 형성하거나 적층하는 공지된 제조 방법에 따라서 제조될 수 있다.

[0121] 본 발명의 또 다른 구현예에서, 상기 유기 전계 발광 소자를 포함하는 전자 기기를 제공한다.

[0122] 상기 유기 전계 발광 소자는 다양한 응용분야에 적용될 수 있다. 예를 들어, 상기 유기 전계 발광 소자가 적용된 상기 전자 기기는 유기 집적 회로 (O-IC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-켄치 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 또는 유기 발광 소자 (OLED)일 수 있다.

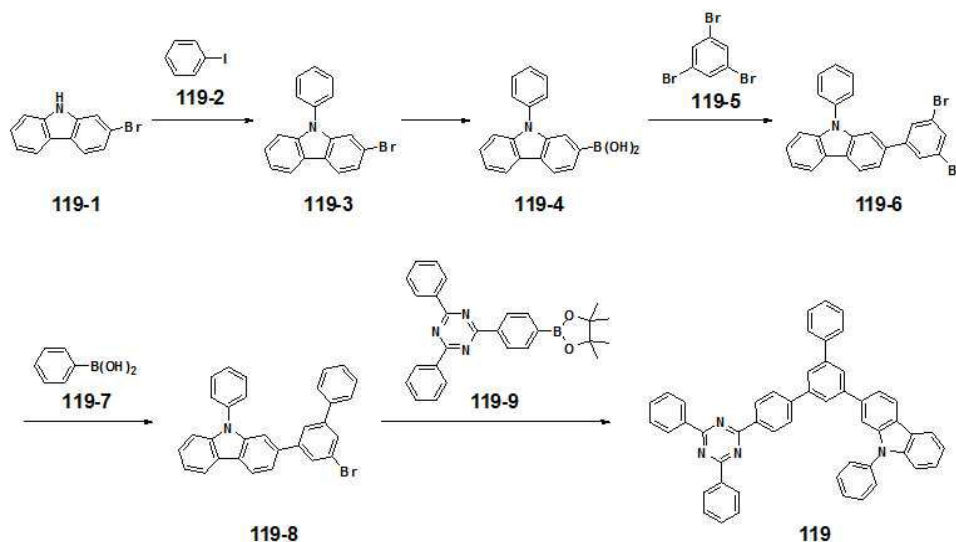
[0123] 이하 본 발명의 실시예 및 비교예를 기재한다. 그러한 하기한 실시예는 본 발명의 일 실시예일뿐 본 발명이 하기한 실시예에 한정되는 것은 아니다.

[0124] (실시예)

[0125] 실시예 1: 화합물 [119]의 합성

[0126] 하기 반응식 3에 따라 상기 화학식 119로 표시되는 화합물 (이하 화합물 119라고 함)을 제조하였다.

[0127] [반응식3]



[0128]

[0129] 중간체 화합물[119-3]의 제조

[0130] 0.5L 반응플라스크에 질소 분위기에서, 화합물 [119-1] 10.0g(40.6mmol), 화합물 [119-2] 10.7g(44.7mmol), 터트부톡시 나트륨 5.9g(60.9mmol), 톨루엔 150ml을 넣고 상온교반한다. 팔라듐아세테이트 0.1g(0.4mmol), 트리터트부틸포스핀(50%) 0.3g(0.8mmol)을 투입하고 질소기류 하에서 15시간 동안 환류 교반시켰다. 반응종료 후 실온까지 천천히 냉각한 다음 반응액을 포화 염화암모늄 수용액에 붓고 에틸아세테이트로 추출하였다. 유기층을 분리하고 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과하였다. 여과액은 감압농축하고 컬럼크로마토그래프로 분리정제하여 중간체 화합물[119-3] 9.0g(69%)를 제조하였다.

[0131] 중간체 화합물 [119-4]의 제조

[0132] 0.5L 반응플라스크에 질소 분위기에서 화합물 [119-3] 10g(31mmol)을 테트라히드로퓨란150ml 에 녹이고 교반하였다. 78℃로 온도를 낮추고 부틸리튬(2.5M)을 서서히 적가하고, 질소기류하에서 12시간 동안 상온으로 천천히

온도를 올리면서 교반하였다. 반응종료 후 6N 염산수용액을 적가하여 반응액을 산성으로 만든 뒤, 포화 소금물을 가하였다. 유기층을 분리하고 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과하였다. 여과액은 감압농축하고 디클로로메탄과 헥산을 사용하여 재결정하여 얻은 회색고체의 중간체 화합물 [119-4] 7.0g(78%)을 제조하였다.

[0133] **중간체 화합물 [119-6]의 제조**

[0134] 250ml 반응플라스크에 질소 분위기에서 화합물 [119-4] 5.0g(17.4mmol), 화합물 [119-5] 7.1g(22.6mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.6g(0.5mmol), 세슘카보네이트 8.5g(26.1mmol)을 톨루엔 120ml 에 녹이고, 에탄올 10mL, 증류수 20mL를 가한 뒤 20시간 환류교반하였다. 반응종료 후 실온까지 천천히 냉각한 다음, 증류수와 에틸아세테이트를 사용하여 추출하였다. 유기층을 분리하고 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과하였다. 여과액은 감압농축하고 컬럼크로마토그래프로 분리정제하여 중간체 화합물 [119-6] 8.3g(71%)을 제조하였다.

[0135] **중간체 화합물 [119-8]의 제조**

[0136] 250ml 반응플라스크에 질소 분위기에서 화합물 [119-6] 2.0g(4.2mmol), 화합물 [119-7] 2.2g(5.0mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.4g(0.4mmol), 세슘카보네이트 5.8g(17.9mmol)을 1,4-다이옥산 120ml 에 녹이고, 증류수 20ml를 가한 뒤 24시간 환류교반하였다. 반응종료 후 실온까지 천천히 냉각한 다음, 증류수와 에틸아세테이트를 사용하여 추출하였다. 유기층을 분리하고 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과하였다. 여과액은 감압농축하고 컬럼크로마토그래프로 분리정제하여 중간체 화합물 [119-8] 2.4g(41%)을 제조하였다.

[0137] **화합물 [119]의 제조**

[0138] 250ml 반응플라스크에 질소 분위기에서 화합물 [119-8] 5.7g(12.0mmol), 화합물 [119-9] 1.4g(11.3mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.2g(0.1mmol), 세슘카보네이트 2.1g(6.3mmol)을 1,4-다이옥산 800ml 에 녹이고, 증류수 160mL를 가한 뒤 20시간 환류교반하였다. 반응종료 후 실온까지 천천히 냉각한 다음, 고체를 감압여과하였다. 얻어진 고체를 메탄올, 증류수, 아세톤을 사용하여 세척한 뒤, 테트라하이드로퓨란과 헥산을 이용하여 재결정하여 흰색 고체의 목적 화합물인 화합물 [119] 2.7g(91%)을 제조하였다.

[0139] ^1H NMR (400 MHz, THF- d_8) : δ 8.96(d, 2H), 8.88(dd, 4H), 8.33(d, 1H), 8.24(d, 1H), 8.03(d, 3H), 7.98(d, 2H), 7.82(d, 3H), 7.73(d, 1H), 7.71~7.61(m, 10H), 7.52~7.48(m, 3H), 7.48~7.40(m, 3H), 7.40~7.30(m, 1H)

[0140] MS/FAB : 322(M^+)

[0141] 도 1은 상기 화합물 119의 ^1H -NMR 그래프이다.

[0142] 실시예 2

[0143] 실시예 1에서와 동일한 방법으로 치환기만 변경하여, 화학식 132로 표시되는 화합물 (이하, 화합물 132라고 함)을 제조하였다.

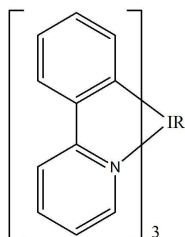
[0144] 실시예 3

[0145] 실시예 1에서와 동일한 방법으로 치환기만 변경하여, 화학식 163로 표시되는 화합물 (이하, 화합물 163이라고 함)을 제조하였다.

[0146] 실시예 4

- [0147] 실시예 1에서와 동일한 방법으로 치환기만 변경하여, 화학식 175로 표시되는 화합물 (이하, 화합물 175이라고 함)을 제조하였다.
- [0148] 실시예 5
- [0149] 실시예 1에서와 동일한 방법으로 치환기만 변경하여, 화학식 186로 표시되는 화합물 (이하, 화합물 186이라고 함)을 제조하였다.
- [0150] 실시예 6
- [0151] 실시예 1에서와 동일한 방법으로 치환기만 변경하여, 화학식 216로 표시되는 화합물 (이하, 화합물 216라고 함)을 제조하였다.
- [0152] 실시예 7
- [0153] 실시예 1에서와 동일한 방법으로 치환기만 변경하여, 화학식 235로 표시되는 화합물 (이하, 화합물 235이라고 함)을 제조하였다.
- [0154] 실시예 8
- [0155] 실시예 1에서와 동일한 방법으로 치환기만 변경하여, 화학식 269로 표시되는 화합물 (이하, 화합물 269이라고 함)을 제조하였다.
- [0156] 실시예 9
- [0157] 실시예 1에서와 동일한 방법으로 치환기만 변경하여, 화학식 272로 표시되는 화합물 (이하, 화합물 272라고 함)을 제조하였다.
- [0158] 실시예 10
- [0159] 실시예 1에서와 동일한 방법으로 치환기만 변경하여, 화학식 299로 표시되는 화합물 (이하, 화합물 299라고 함)을 제조하였다.
- [0160] 실시예 11-20
- [0161] 실시예 1-10에서 합성된 화합물 119, 132, 163, 175, 186, 216, 235, 269, 272, 299를 각각 인광 녹색 호스트로 사용하고, 하기 화합물 D를 인광 녹색 도판트로 사용하고, 2-TNATA(4,4',4"-tris(N-naphthalen-2-yl)-N-phenylamino)-triphenylamine)을 정공주입층 물질로 사용하고, α -NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)을 정공수송층 물질로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기 전계 발광 소자를 제작하였다 (각각 실시예 11-20): ITO/2-TNATA(80 nm)/ α -NPD(30 nm)/화학식 1로 표시되는 화합물 및 화합물 D(30 nm)/Alq3 (30 nm)/LiQ(1 nm)/Al(100 nm).
- [0162] 애노드는 코닝(Corning)사의 $15\Omega/\text{cm}^2$ (1000Å) ITO 유리 기판을 25 mm x 25 mm x 0.7 mm 크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수한 물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TNATA를 진공 증착하여 80 nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α -NPD를 진공 증착하여 30 nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 및 화합물 D (도핑률: 10wt%)를 진공 증착하여 30 nm 두께의 발광층을 형성하였다. 이후, 상기 발광층 상부에 Alq3 화합물을 30 nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiQ 1 nm (전자주입층)과 Al 100 nm (캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 표 1에 표시된 바와 같은 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[0163] <화합물 D>

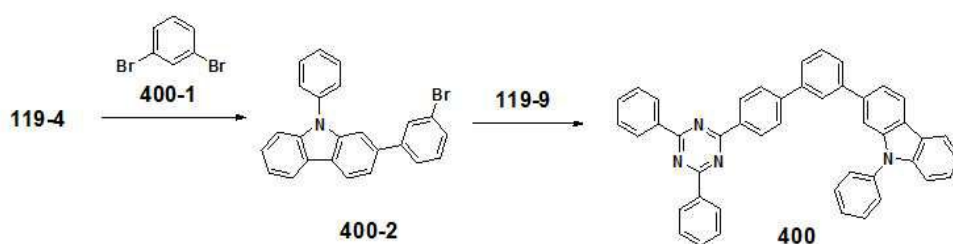


[0164]

[0165] 비교예 1: 화합물 [400]의 합성

[0166] 하기 반응식 4에 따라 상기 화학식 400로 표시되는 화합물 (이하 화합물 400라고 함)을 제조하였다.

[0167] [반응식 4]



[0168]

[0169] 중간체 화합물[400-2]의 제조

[0170] 0.5L 반응플라스크에 질소 분위기에서, 화합물 [400-1] 10.0g(42.4mmol), 화합물 [119-4] 13.4g(46.6mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 1.0g(0.8mmol), 탄산칼륨 7.7g(56.0mmol)을 1,4-다이옥산 210ml 에 녹이고, 증류수 42mL를 가한 뒤 24시간 환류교반하였다. 반응종료 후 실온까지 천천히 냉각한 다음, 증류수와 에틸아세테이트를 사용하여 추출하였다. 유기층을 분리하고 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과하였다. 여과액은 감압농축하고 컬럼크로마토그래프로 분리정제하여 중간체 화합물 [400-2] 8.1g(48%)을 제조하였다.

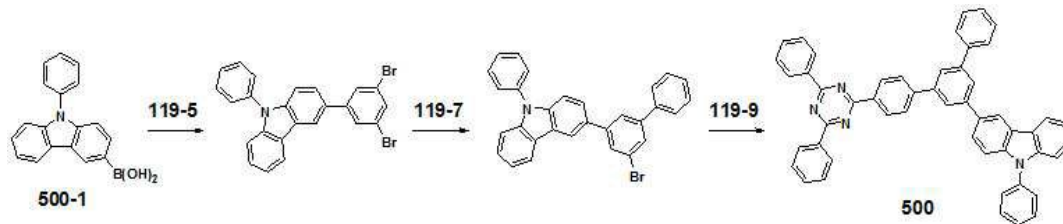
[0171] 화합물 [400]의 제조

[0172] 0.5L 반응플라스크에 질소 분위기에서 화합물 [400-2] 8.1g(20.3mmol), 화합물 [119-9] 9.7g(22.4mmol), 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐(0) 0.5g(0.4mmol), 탄산칼륨 3.7g(26.9mmol)을 1,4-다이옥산 110ml 에 녹이고, 증류수 20mL를 가한 뒤 28시간 환류교반한다. 반응종료 후 실온까지 천천히 냉각한 다음, 고체를 감압여과하였다. 얻어진 고체를 메탄올, 증류수, 아세톤을 사용하여 세척한 뒤, 테트라하이드로퓨란과 헥산을 이용하여 재결정하여 흰색 고체의 목적 화합물인 화합물 [400] 9.7g(76%)을 제조하였다.

[0173] 비교예 2: 화합물 [500]의 합성

[0174] 하기 반응식 5에 따라 상기 화학식 500로 표시되는 화합물 (이하 화합물 500라고 함)을 제조하였다.

[0175] [반응식 5]



[0176]

[0177] 실시예 1에서와 동일한 방법으로 화합물 [119-4] 대신, 화합물 [500-1]로 변경하여, 화학식 500로 표시되는 화합물 (이하, 화합물 500라고 함)을 제조하였다.

[0178] 비교예 3

[0179] 상기 실시예 12에서, 인광 녹색 호스트로 사용한 화학식 1로 표시되는 화합물 대신 화합물 400을 사용한 점을 제외하고, 상기 실시예 12와 동일한 방법으로 ITO/2-TNATA(80 nm)/ α -NPD(30 nm)/화합물 400 + 화합물 D (30 nm)/ Alq3 (30 nm)/Liq(1 nm)/ Al(100 nm)의 구조를 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

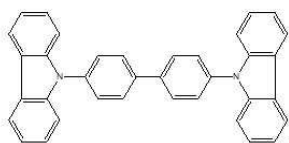
[0180] 비교예 4

[0181] 상기 실시예 12에서, 인광 녹색 호스트로 사용한 화학식 1로 표시되는 화합물 대신 화합물 500을 사용한 점을 제외하고, 상기 실시예 12와 동일한 방법으로 ITO/2-TNATA(80 nm)/ α -NPD(30 nm)/화합물 500 + 화합물 D (30 nm)/ Alq3 (30 nm)/Liq(1 nm)/ Al(100 nm)의 구조를 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[0182] 비교예 5

[0183] 상기 실시예 12에서, 인광 녹색 호스트로 사용한 화학식 1로 표시되는 화합물 대신 하기 화합물 E를 사용한 점을 제외하고, 상기 실시예 12와 동일한 방법으로 ITO/2-TNATA(80 nm)/ α -NPD(30 nm)/화합물 E + 화합물 D (30 nm)/ Alq3 (30 nm)/Liq(1 nm)/ Al(100 nm)의 구조를 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[0184] <화학식 E>



[0185]

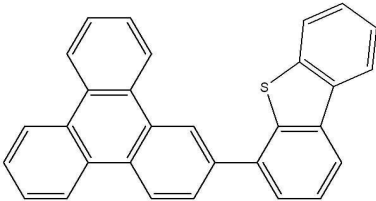
[0186] 비교예 6

[0187] 하기 화학식 F로 표시되는 화합물을 인광 녹색 호스트로 사용하고, 하기 화학식 D로 표시되는 화합물을 인광 녹색 도판트로 사용하고, 2-TNATA(4,4'4"-tris(N-naphthalen-2-yl)-N-phenylamino)-triphenylamine)을 정공주입층 물질로 사용하고, α -NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)을 정공수송층 물질로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기 전계 발광 소자를 제작하였다: ITO/2-TNATA(80 nm)/ α -NPD(30 nm)/ 화합물 F + 화합물 D (30 nm)/ Alq3 (30 nm)/Liq(1 nm)/ Al(100 nm).

[0188] 애노드는 코닝(Corning)사의 $15\Omega/\text{cm}^2$ (1000Å) ITO 유리 기판을 25 mm x 25 mm x 0.7 mm크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수한 물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TNATA를 진공 증착하여 80 nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α -NPD를 진공 증착하여 30nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화학식 F로 표시되는 화합물 및 화학식 D로 표시되는 화합물(도핑율:10%)를 진공 증착하여 30nm두께의 발광층을 형성하였다. 이후,

상기 발광층 상부에 Alq3 화합물을 30nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 Liq 1 nm(전자주입층)과 Al 100 nm(캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 표 1에 표시된 바와 같은 유기 전 계 발광 소자를 제조하였다.

<화학식 F>



평가예 1: 발광 특성 평가

실시에 12-21 및 비교예 3-6에서 제작된 유기 전 계 발광 소자의 각 샘플에 대하여, Keithley sourcemeter "2400" KONIKA MINOLTA "CS-2000"을 이용하여 발광휘도, 발광효율, 발광피크를 각각 평가하여, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 상기 샘플들은 513nm 내지 515nm 범위에서 녹색 발광 피크값을 보여주었다.

표 1

샘플 No.	인광 녹색 호스트	인광 녹색 도판트	전압 OP. V	휘도 [cd/m ²]	효율 [cd/A]	발광피크 [nm]
비교예 3	화합물 E	화합물 D	5.12	4759	47.59	514
비교예 4	화합물 F	화합물 D	4.89	4652	46.52	513
비교예 5	화합물 400	화합물 D	5.10	4498	43.11	510
비교예 6	화합물 500	화합물 D	4.82	4907	47.72	515
실시에 11	화합물 119	화합물 D	4.54	5214	52.14	513
실시에 12	화합물 132	화합물 D	4.65	5067	50.67	513
실시에 13	화합물 163	화합물 D	4.44	5128	51.28	513
실시에 14	화합물 175	화합물 D	4.21	5109	51.09	514
실시에 15	화합물 186	화합물 D	4.16	5008	50.08	515
실시에 16	화합물 216	화합물 D	4.79	5138	51.38	514
실시에 17	화합물 235	화합물 D	4.32	5205	52.05	515
실시에 18	화합물 269	화합물 D	4.08	5198	51.98	513
실시에 19	화합물 272	화합물 D	4.74	5198	51.98	513
실시에 20	화합물 299	화합물 D	4.01	5043	50.43	515

상기 표 1 에 보여지는 바와 같이 실시에 11-20의 유기 전 계 발광 소자는 비교예 3-6의 유기 전 계 발광 소자에 비하여 향상된 발광 특성을 나타내었다.

평가예 2: 수명 특성 평가

실시에 11-20 및 비교예 3-6에서 제작된 유기 전 계 발광 소자의 각 샘플에 대하여, ENC technology사의 LTS-1004AC 수명측정장치를 이용하여 3000 nit를 기준으로 수명이 97%에 도달하는 시간을 각각 측정하여, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

표 2

샘플 No.	인광 녹색 호스트 No.	인광 녹색 도판트 No.	수명 Time(Hours)
비교예 3	화합물 E	화합물 D	42
비교예 4	화합물 F	화합물 D	38
비교예 5	화합물 400	화합물 D	39

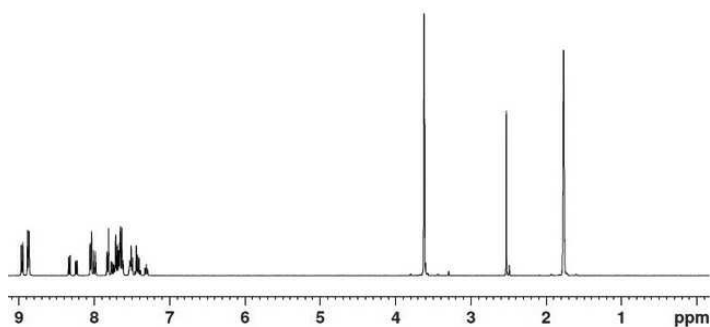
비교예 6	화합물 500	화합물 D	53
실시예 11	화합물 119	화합물 D	84
실시예 12	화합물 132	화합물 D	67
실시예 13	화합물 163	화합물 D	85
실시예 14	화합물 175	화합물 D	89
실시예 15	화합물 186	화합물 D	68
실시예 16	화합물 216	화합물 D	62
실시예 17	화합물 235	화합물 D	86
실시예 18	화합물 269	화합물 D	89
실시예 19	화합물 272	화합물 D	66
실시예 20	화합물 299	화합물 D	65

[0198] 상기 표 2 에 보여지는 바와 같이 실시예 11-20의 유기 전계 발광 소자는 비교예 3-6의 유기 전계 발광 소자에 비하여 향상된 수명 특성을 나타내었다.

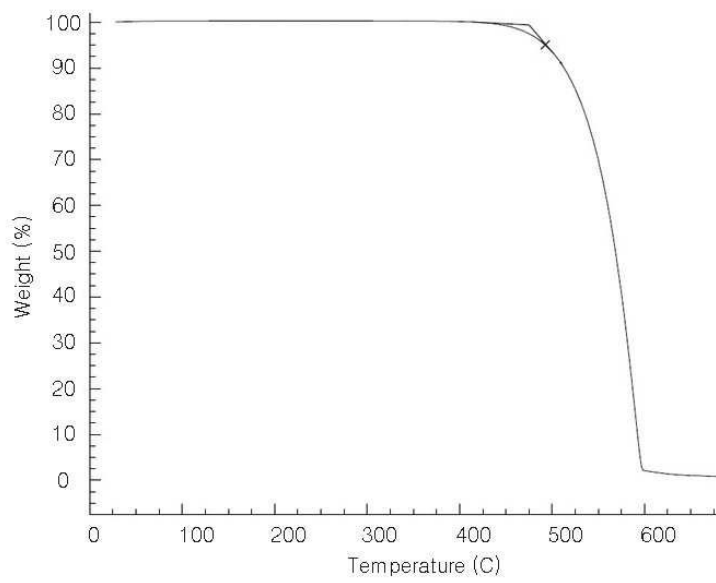
[0199] 이상에서 본 발명의 바람직한 실시예들에 대하여 상세하게 설명하였지만 본 발명의 권리 범위는 이에 한정되는 것은 아니고 다음의 청구 범위에서 정의하고 있는 본 발명의 기본 개념을 이용한 당업자의 여러 변형 및 개량 형태 또한 본 발명의 권리 범위에 속하는 것이다.

도면

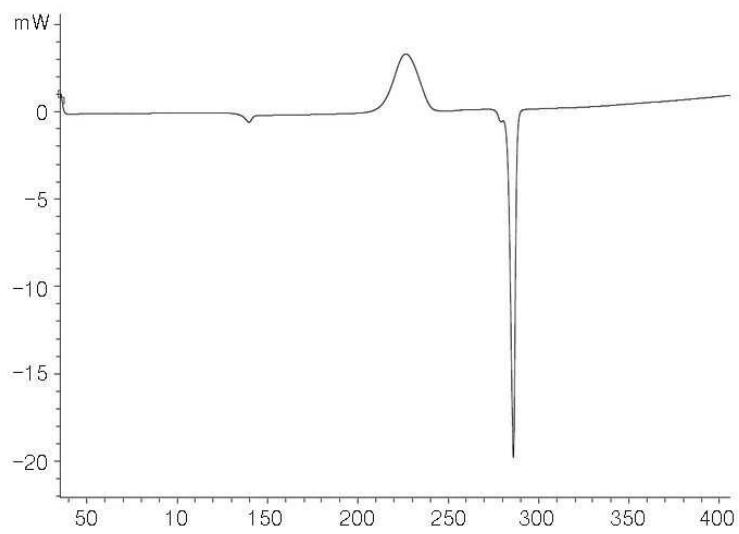
도면1



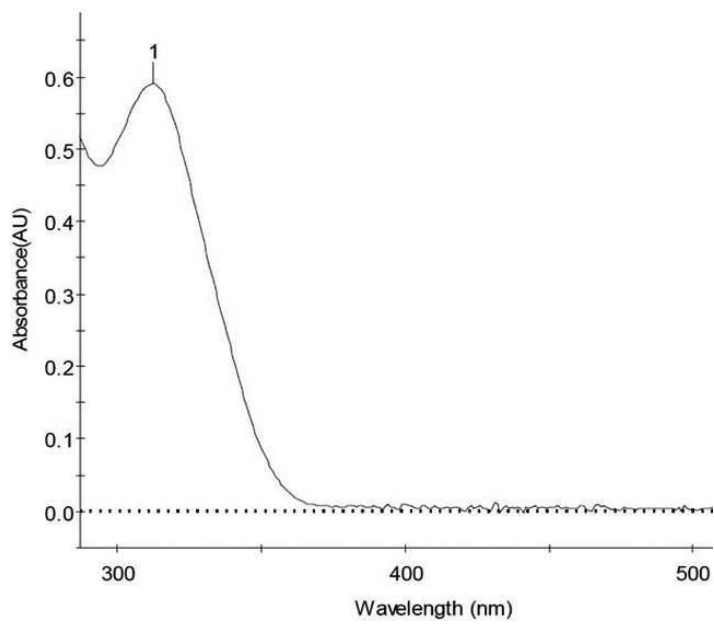
도면2



도면3



도면4



专利名称(译)	新型机电致发光化合物，有机电致发光器件和含有它的电子器件		
公开(公告)号	KR101729660B1	公开(公告)日	2017-04-26
申请号	KR1020140098285	申请日	2014-07-31
申请(专利权)人(译)	氛围有限公司凯		
当前申请(专利权)人(译)	(株) M.L		
[标]发明人	JEA SUNG LEE 이재성 DO HWAN AHN 안도환 KI SUN NAM 남기선 HYUN MI JIN 진현미 JI EUN BAEK 백지은 AH RAM JEON 전아람 SU YEON BANG 방수연 IN YONG HWANG 황인용 DAE KYUN LEE 이대균 SO YEON KIM 김소연 KEUN HEE HAN 한근희 DONG WOO YOO 유동우 JEA SUN LEE 이재선 MI SUK LEE 이미숙 KYUNG CHUL SHIN 신경철 SUNG MIN HAN 한성민 SEUNG HAK HYUN 현승학 HO GI BAE 배호기 JUNG BOK AN 안중복 NO GILL PARK 박노길 BONG SEOK MOON 문봉석		
发明人	이재성 안도환		

남기선
진현미
백지은
전아람
방수연
황인용
이대균
김소연
한근희
유동우
이재선
이미숙
신경철
한성민
현승학
배호기
안중복
박노길
문봉석

IPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 H01L51/50
CPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 H01L51/50 C07F13/00 H05B33/14 C07D307/78 C07D471/04
优先权	1020140055533 2014-05-09 KR
其他公开文献	KR1020150129282A
外部链接	Espacenet

摘要(译)

本发明涉及用于有机电致发光器件的新型化合物，其由化学式1表示。此外，本发明还涉及包含该化合物的有机电致发光器件和电子器件。在化学式1中，R1，R2，L1，L2，X和Het与本说明书中的定义相同。

COPYRIGHT KIPO 2016

