



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2015-0137265
(43) 공개일자 2015년12월09일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/08 (2006.01)

C07D 403/14 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2014-0064831

(22) 출원일자 2014년05월29일

심사청구일자 2014년05월29일

(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)

김동원

충청북도 청주시 흥덕구 월명로23번길 10-7 (봉
명동)

(74) 대리인

정은열

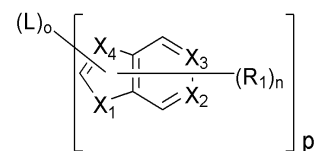
전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 발명의 명칭 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

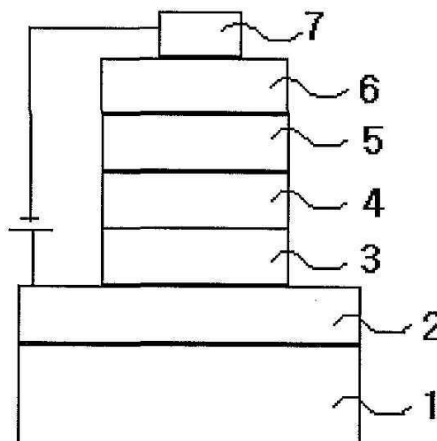
(57) 요약

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

[화학식 1]



대 표 도 - 도1



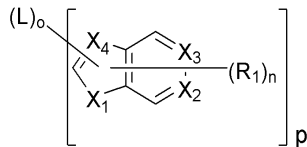
명세서

청구범위

청구항 1

하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물:

[화학식 1]



상기 [화학식 1]에서,

X_1 은 CR_2R_3 또는 NR_4 이고, X_2 내지 X_4 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 CR_5 또는 N 이고,

R_1 및 상기 R_2 내지 R_5 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 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,

L 은 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 선택되며,

n , o 및 p 는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, 상기 n , o 및 p 가 각각 2 이상인 경우 복수의 L , R_1 및 []는 각각 서로 동일하거나 상이하다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 L , R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 1종 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고, 상기 1종 이상의 치환기는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 게르마늄기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 알루미늄기, 카르보닐기, 포스포릴기, 아미노기, 싸이올기, 시아노기, 히드록시기, 니트로기, 할로젠기, 셀레늄기, 텔루륨기, 아미드기, 에테르기 및 에스테르기 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

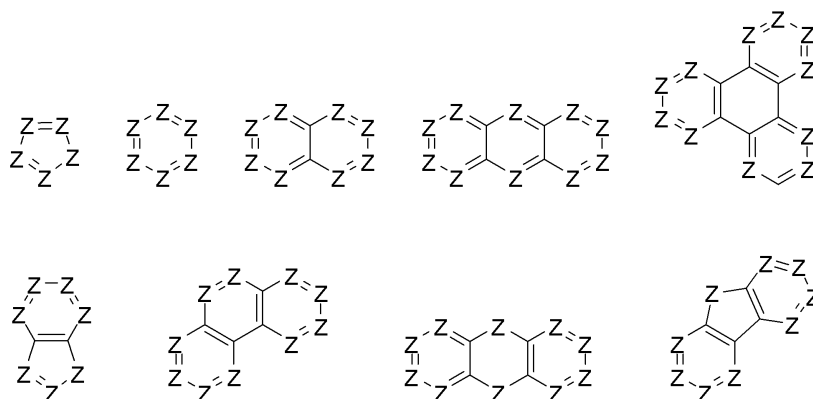
상기 L, R₁ 내지 R₅ 및 이들의 치환기는 서로 결합하거나 인접한 치환기와 연결되어 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리의 탄소원자는 N, S 및 O 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 L은 각각 독립적으로 하기 [구조식 1] 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

[구조식 1]



상기 [구조식 1]에서,

Z는 CR₆, NR₇, CR₈R₉, SiR₁₀R₁₁, GeR₁₂R₁₃, PR₁₄, BR₁₅, Te, O 및 S 중에서 선택되고, 상기 R₆ 내지 R₁₅는 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 히드록실기, 니트로기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 아릴알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐기 중에서 선택되며,

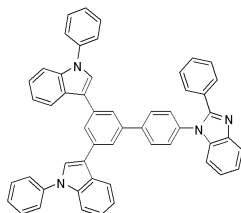
상기 R₁ 내지 R₁₀ 및 이들의 치환기는 서로 결합하거나 인접한 치환기와 연결되어 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리의 탄소원자는 N, S 및 O 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있다.

청구항 5

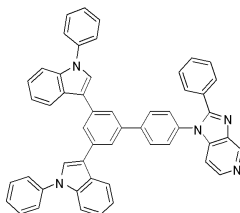
제1항에 있어서,

상기 [화학식 1]은 하기 [화합물 1] 내지 [화합물 82] 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

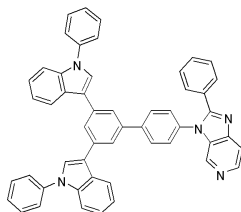
[화합물 1]



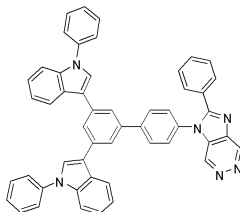
[화합물 2]



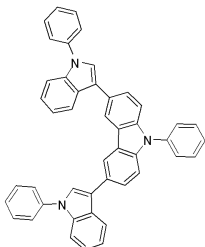
[화합물 3]



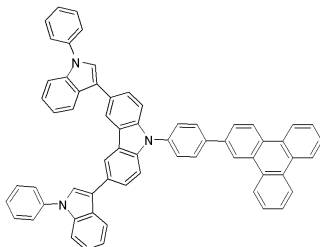
[화합물 4]



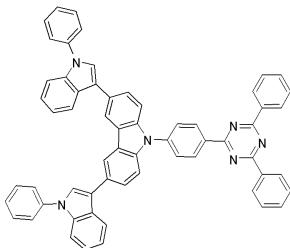
[화합물 5]



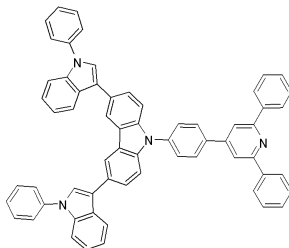
[화합물 6]



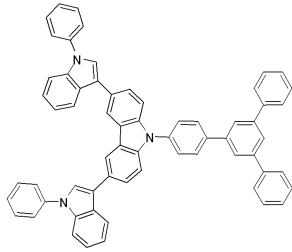
[화합물 7]



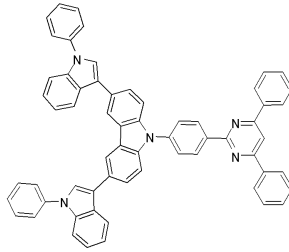
[화합물 8]



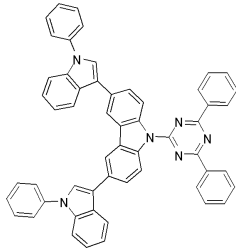
[화합물 9]



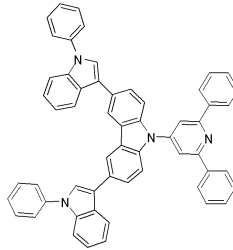
[화합물10]



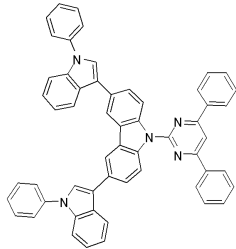
[화합물11]



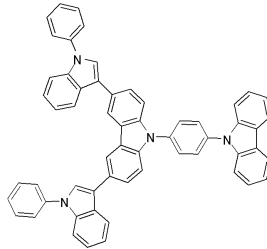
[화합물12]



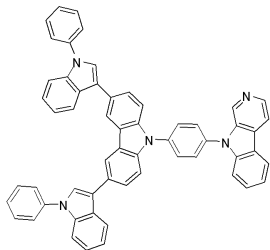
[화합물 13]



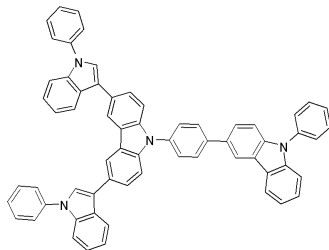
[화합물 14]



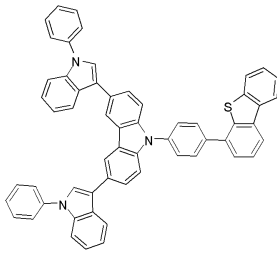
[화합물 15]



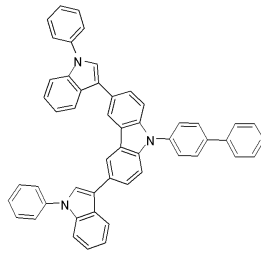
[화합물 16]



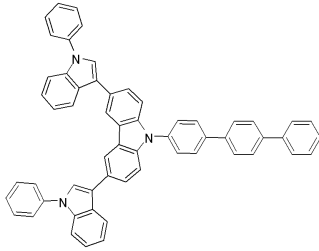
[화합물 17]



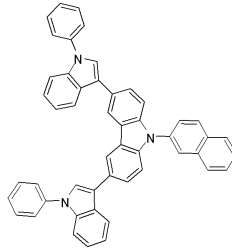
[화합물18]



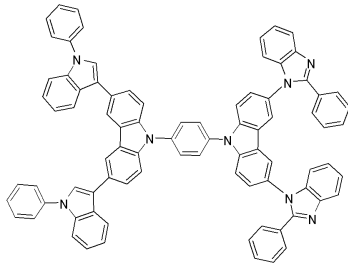
[화합물19]



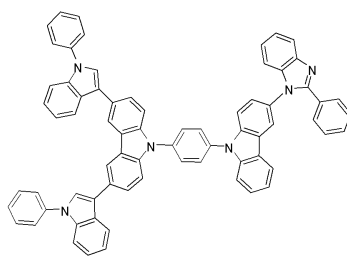
[화합물20]



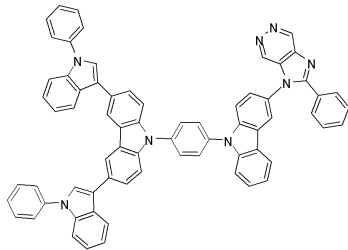
[화합물21]



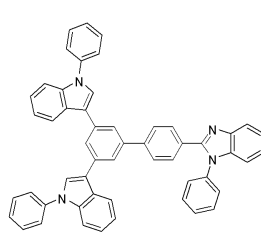
[화합물22]



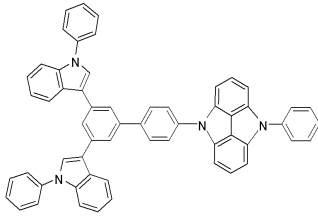
[화합물23]



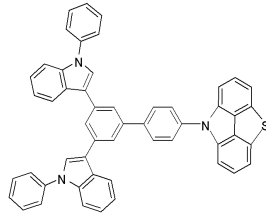
[화합물24]



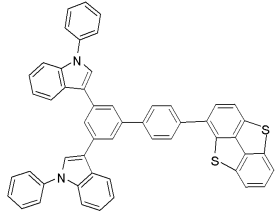
[화합물 25]



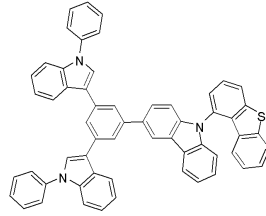
[화합물 26]



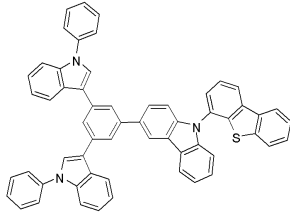
[화합물 27]



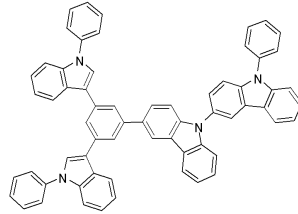
[화합물 28]



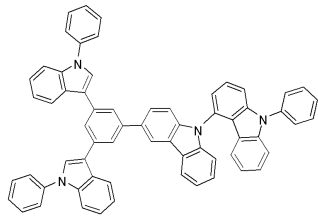
[화합물 29]



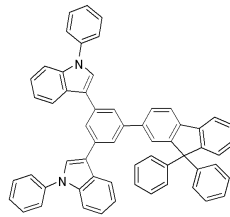
[화합물 30]



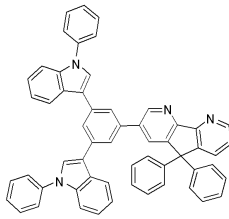
[화합물 31]



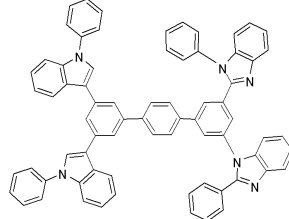
[화합물 32]



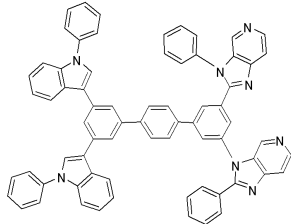
[화합물33]



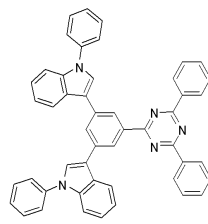
[화합물34]



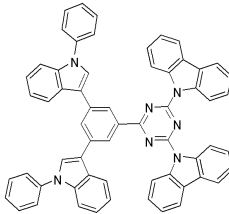
[화합물35]



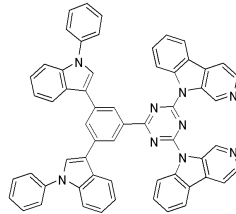
[화합물36]



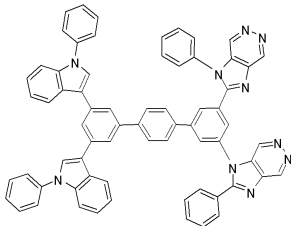
[화합물37]



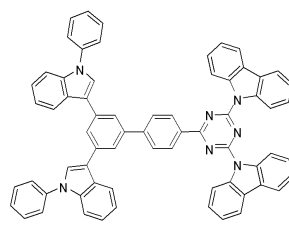
[화합물38]



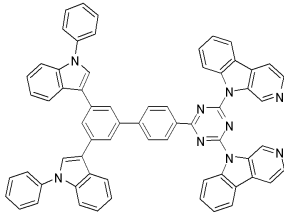
[화합물39]



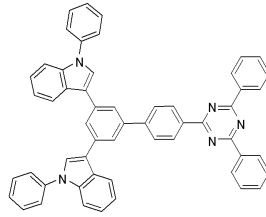
[화합물40]



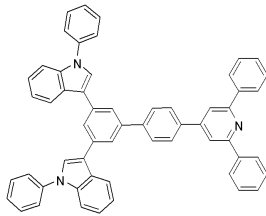
[화합물41]



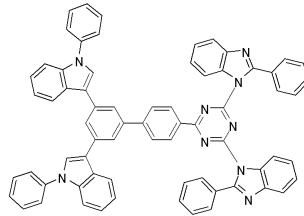
[화합물42]



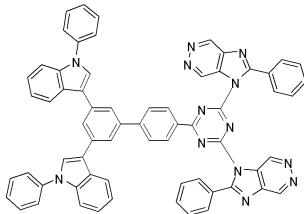
[화합물43]



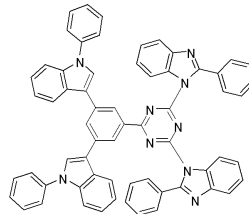
[화합물44]



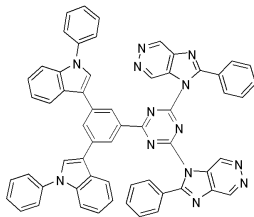
[화합물45]



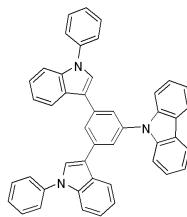
[화합물46]



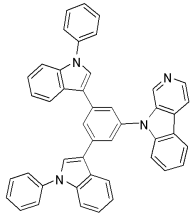
[화합물47]



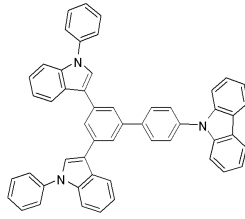
[화합물48]



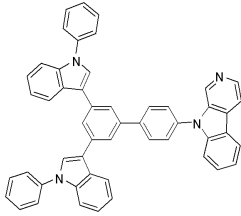
[화합물49]



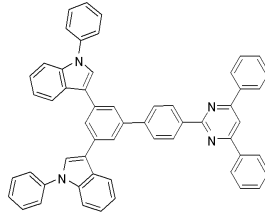
[화합물50]



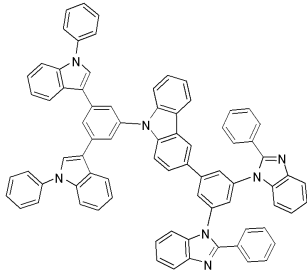
[화합물51]



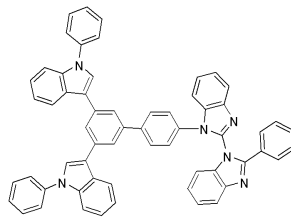
[화합물52]



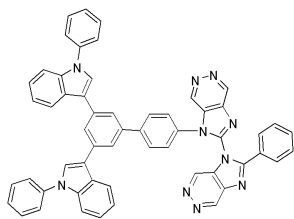
[화합물53]



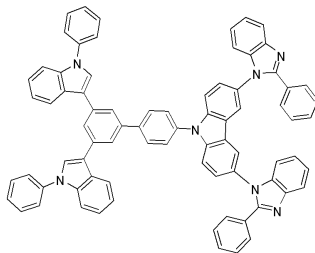
[화합물54]



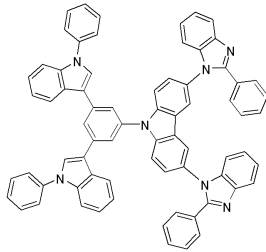
[화합물55]



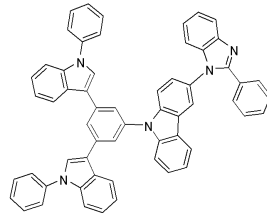
[화합물56]



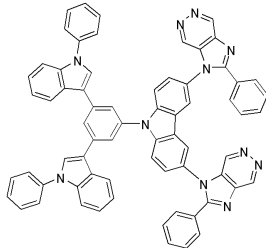
[화합물57]



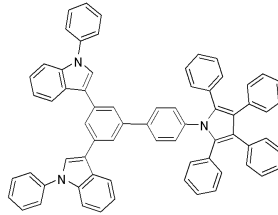
[화합물58]



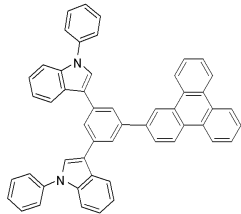
[화합물59]



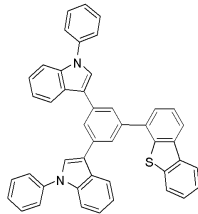
[화합물60]



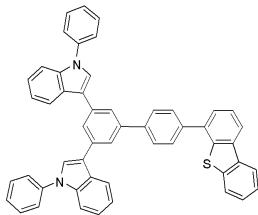
[화합물61]



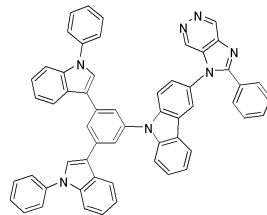
[화합물62]



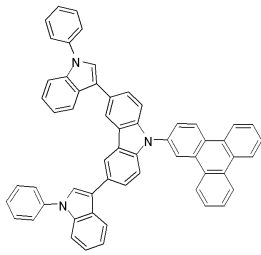
[화합물63]



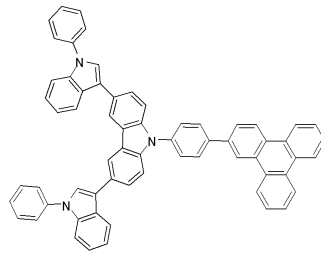
[화합물64]



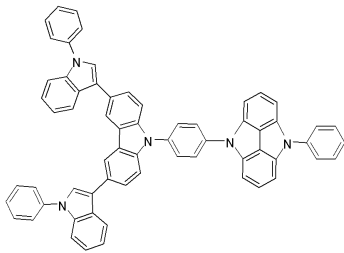
[화합물65]



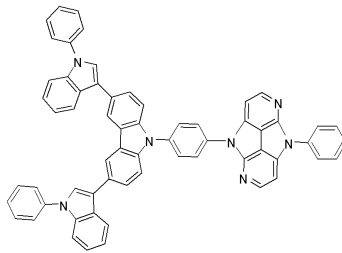
[화합물66]



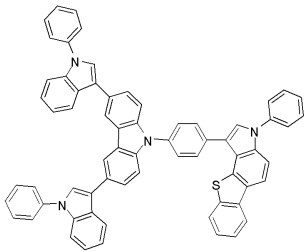
[화합물67]



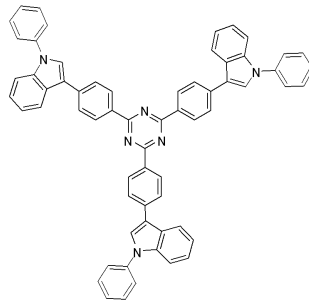
[화합물68]



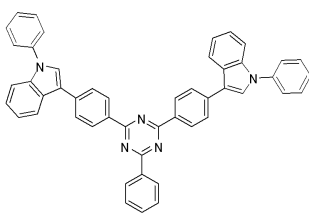
[화합물69]



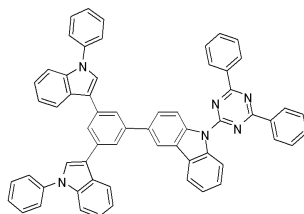
[화합물70]



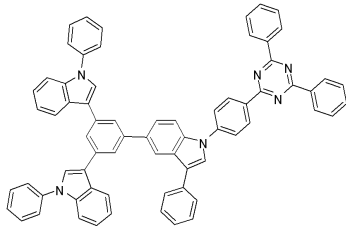
[화합물71]



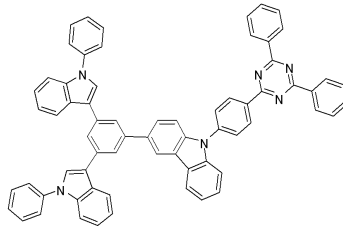
[화합물72]



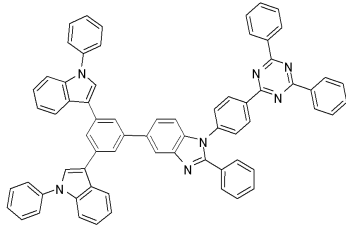
[화합물73]



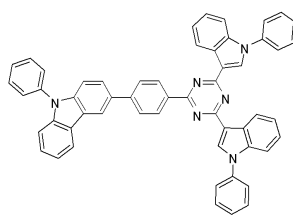
[화합물74]



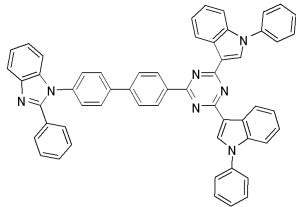
[화합물75]



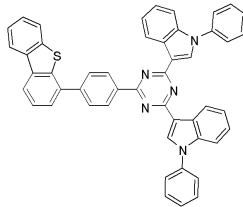
[화합물76]



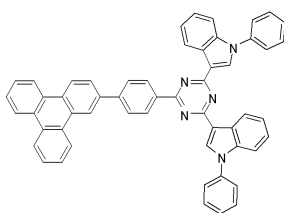
[화합물77]



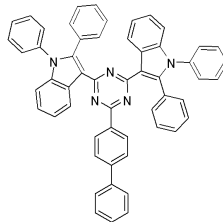
[화합물78]



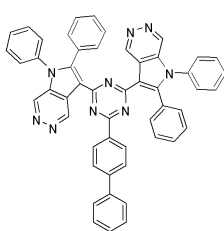
[화합물79]



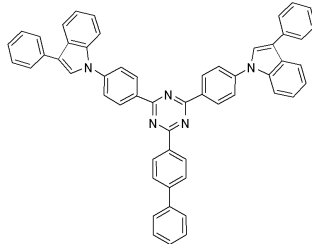
[화합물80]



[화합물81]



[화합물82]



청구항 6

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 [화합식 1]의 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 7

제6항에 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 8

제7항에 있어서,

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

청구항 9

제8항에 있어서,

상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물은 상기 발광층 내의 호스트 화합물로 사용되고, 상기 발광층은 도판트 화합물을 1종 이상 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 10

제6항에 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 호스트 화합물로 채용되는 유기발광 화합물 및 이를 채용하여 장수명 및 발광 효율이 현저히 향상된 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002]

유기전계발광소자는 투명 기판 위에도 소자를 형성할 수 있을 뿐 아니라, 플라즈마 디스플레이 패널(Plasma Display Panel)이나 무기 전계 발광(EL) 디스플레이에 비해 10 V 이하의 저전압 구동이 가능하고, 전력 소모가 비교적 적으며, 색감이 뛰어나다는 장점이 있고, 녹색, 청색, 적색의 3가지 색을 나타낼 수가 있어 최근에 차세대 디스플레이 소자로 많은 관심의 대상이 되고 있다.

[0003]

다만, 이러한 유기전계발광소자가 상기와 같은 특징으로 발휘하기 위해서는 소자 내 유기층을 이루는 물질인 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지는 안정하고 효율적인 유기 전계발광 소자사용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서, 저전압 구동, 고효율 및 장수명을 갖는 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있는 실정이다.

[0004]

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

[0005]

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

발명의 내용

해결하려는 과제

[0006]

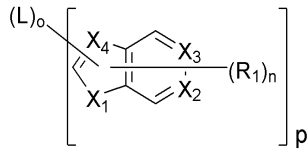
본 발명은 유기전계발광소자의 발광층에 채용되어 우수한 발광 특성을 구현할 수 있는 신규한 유기발광 화합물

및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0007] 본 발명은 상기 과제를 해결하기 위하여, 하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.

[0008] [화학식 1]



[0009]

[0010] 상기 [화학식 1]에 따른 유기발광 화합물의 구체적인 구조 및 치환기에 대해서는 후술한다.

발명의 효과

[0011] 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 구조 평판도가 우수하고, 높은 삼중항(triplet) 상태를 가져서 종래 인광 호스트 화합물에 비하여 보다 향상된 발광 효율과 장수명 특성의 구현이 가능하여 이를 채용한 유기전계발광소자는 다양한 디스플레이 소자에 유용하여 사용될 수 있다.

도면의 간단한 설명

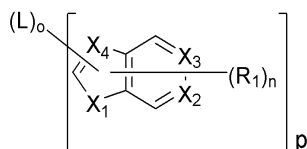
[0012] 도 1 내지 5는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 구조를 예시한 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0013] 이하, 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다.

[0014] 본 발명은 하기 [화학식 1]로 표시되는 신규한 유기발광 화합물에 관한 것이다.

[0015] [화학식 1]



[0016]

[0017] 상기 [화학식 1]에서,

[0018] X_1 은 CR_2R_3 또는 NR_4 이고, X_2 내지 X_4 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 CR_5 또는 N 이다.

[0019] R_1 및 상기 R_2 내지 R_5 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 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.

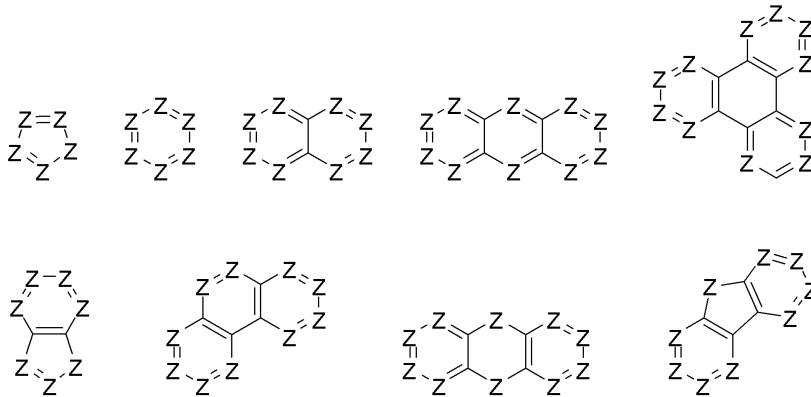
[0020] L 은 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기 중에서 선택된다.

[0021] n, o 및 p는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, 상기 n, o 및 p가 각각 2 이상인 경우 복수의 L, R₁ 및 []는 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0022] 또한, 상기 L, R₁ 내지 R₅ 및 이들의 치환기는 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.

[0023] 본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기 L은 각각 독립적으로 하기 [구조식 1] 중에서 선택될 수 있다.

[0024] [구조식 1]



[0025]

[0026] 상기 [구조식 1]에서,

[0027] Z는 CR₆, NR₇, CR₈R₉, SiR₁₀R₁₁, GeR₁₂R₁₃, PR₁₄, BR₁₅, Te, O 및 S 중에서 선택되고, 상기 R₆ 내지 R₁₅는 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 히드록실기, 니트로기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 아릴알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐기 중에서 선택된다.

[0028] 또한, 상기 R₁ 내지 R₁₀ 및 이들의 치환기는 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.

[0029] 상기 L, R₁ 내지 R₁₀은 각각 독립적으로 1종 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고, 상기 1종 이상의 치환기는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 게르마늄기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 알루미늄기, 카르보닐기, 포스포릴기, 아미노기, 싸이올기, 시아노기, 히드록시기, 니트로기, 할로젠기, 셀레늄기, 텔루륨기, 아미드기, 에테르기 및 에스테르기 중에서 선택될 수 있다.

[0030] 본 발명에 있어서, 상기 치환기들의 예시들에 대해서 아래에서 구체적으로 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니

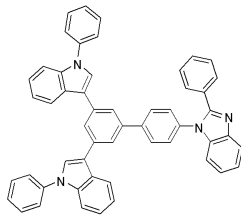
다.

- [0031] 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-에틸부틸기, 헵틸기, n-헵틸기, 1-메틸헥실기, 시클로헵틸메틸기, 시클로헥틸메틸기, 옥틸기, n-옥틸기, tert-옥틸기, 1-메틸헵틸기, 2-에틸헥실기, 2-프로필펜틸기, n-노닐기, 2,2-디메틸헵틸기, 1-에틸-프로필기, 1,1-디메틸-프로필기, 이소헥실기, 2-메틸펜틸기, 4-메틸헥실기, 5-메틸헥실기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0032] 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.
- [0033] 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-(나프탈-1-일)비닐-1-일기, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일기, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.
- [0034] 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, 페릴레닐기, 테트라세닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기, 아세나프타센닐기, 트리페닐렌기, 플루오안트렌(fluoranthrene)기 등이 있으나, 본 발명의 범위가 이들 예로만 한정되는 것은 아니다.
- [0035] 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, 피리딜기, 비피리딜기, 피리미딜기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딜기, 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.
- [0036] 본 발명에 있어서, 아릴옥시기, 아릴티옥시기, 아릴술포시기 및 아릴킬아민기 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.
- [0037] 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.
- [0038] 본 발명에 있어서, 할로겐기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.
- [0039] 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

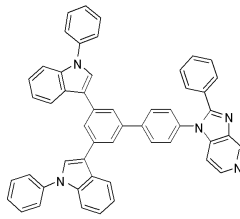
아릴기, 또는 단환식아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다.

- [0040] 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, 카바줄기 및 트리페닐 아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0041] 본 발명에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.
- [0042] 본 발명에 있어서, 헤테로아릴아민기 중의 헤테로 아릴기는 전술한 헤테로고리기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [0043] 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.
- [0044] 본 발명에 있어서, "치환 또는 비치환된"이란, 중수소, 할로젠기, 니트릴기, 니트로기, 히드록시기, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 아릴옥시기, 알킬티옥시기, 아릴티옥시기, 알킬술폭시기, 아릴술폭시기, 알케닐기, 실릴기, 붕소기, 알킬아민기, 아랄킬아민기, 아릴아민기, 아릴기, 플루오레닐기, 카바줄기 및 N, O 및 S 원자 중 1 개 이상을 포함하는 헤테로고리기 중 적어도 하나의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미한다.
- [0045] 본 발명에 있어서, 치환된 아릴렌기라 함은, 페닐기, 비페닐기, 나프탈렌기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기, 페릴렌기, 테트라세닐기, 안트라세닐기 등이 다른 치환기로 치환된 것을 의미한다.
- [0046] 본 발명에 있어서, 치환된 헤테로아릴렌기라 함은, 피리딜기, 티오펜기, 트리아진기, 퀴놀린기, 페난트롤린기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 카바줄기 및 이들의 축합헤테로고리기, 예컨대 벤즈퀴놀린기, 벤즈이미다졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈티아졸기, 벤즈카바줄기, 디벤조티오펜기, 디벤조퓨란기 등이 다른 치환기로 치환된 것을 의미한다.
- [0047] 상기 [화학식 1]로 표시되는 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 그 구조적 특이성으로 인하여 유기전계발광소자의 유기물층으로 사용될 수 있고, 보다 구체적으로 유기물층 내의 발광층에 인광 호스트 화합물로 사용될 수 있다.
- [0048] 특히, 본 발명에 따른 [화학식 1]로 표시되는 발광층의 인광 호스트 화합물에 채용될 수 있는 유기발광 화합물의 구체적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

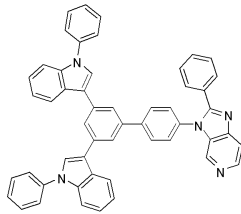
[화합물 1]



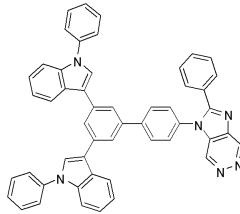
[화합물 2]



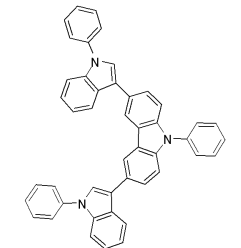
[화합물 3]



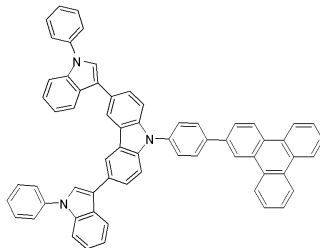
[화합물 4]



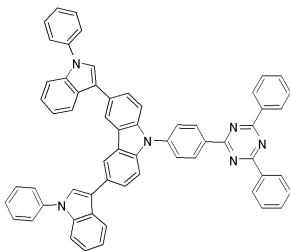
[화합물 5]



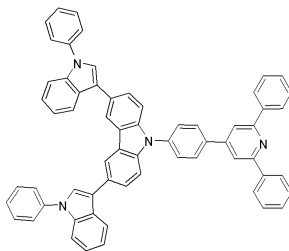
[화합물 6]



[화합물 7]

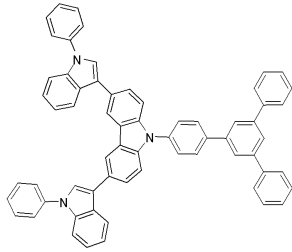


[화합물 8]

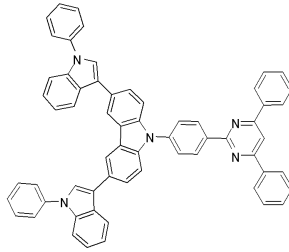


[0049]

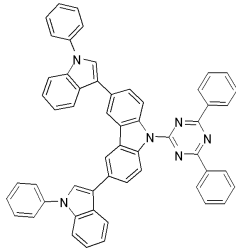
[화합물 9]



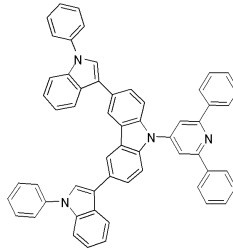
[화합물10]



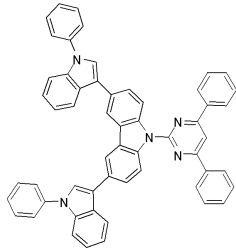
[화합물11]



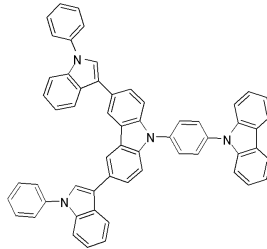
[화합물12]



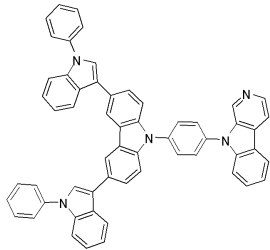
[화합물 13]



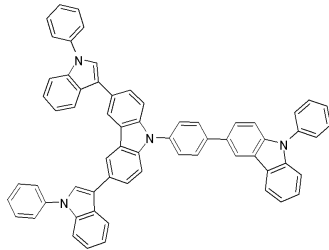
[화합물 14]



[화합물 15]

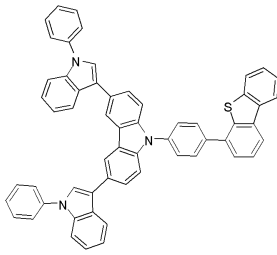


[화합물 16]

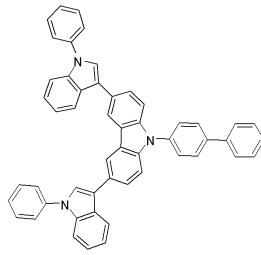


[0050]

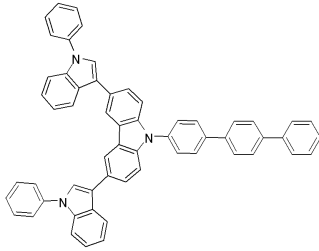
[화합물 17]



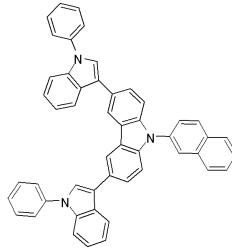
[화합물18]



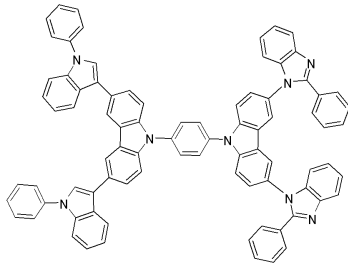
[화합물19]



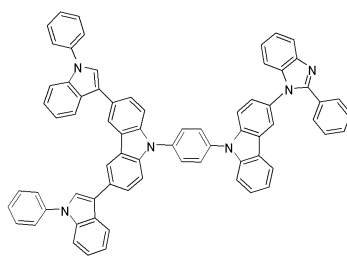
[화합물20]



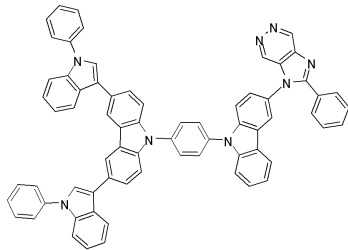
[화합물21]



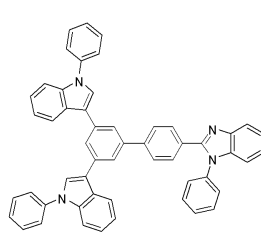
[화합물22]



[화합물23]

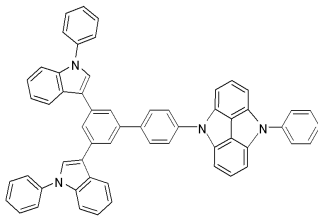


[화합물24]

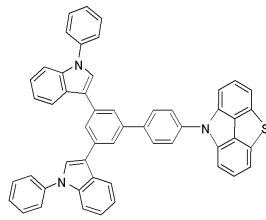


[0051]

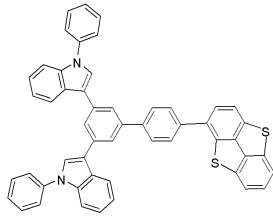
[화합물25]



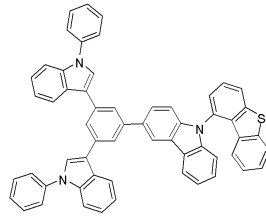
[화합물26]



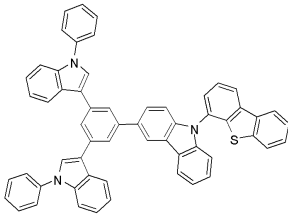
[화합물27]



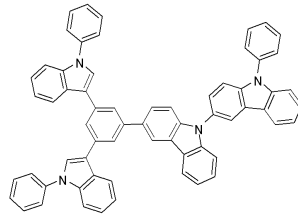
[화합물28]



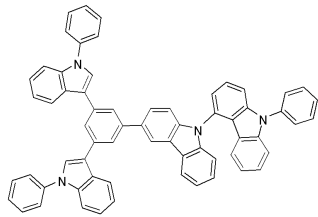
[화합물29]



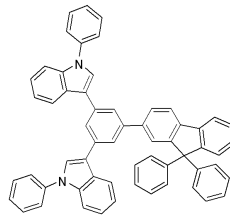
[화합물30]



[화합물31]

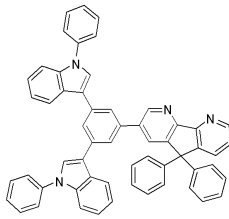


[화합물32]

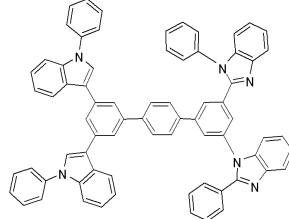


[0052]

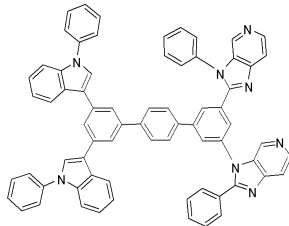
[화합물33]



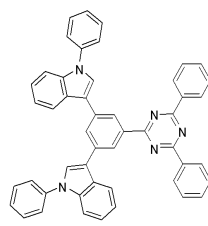
[화합물34]



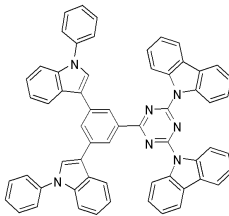
[화합물35]



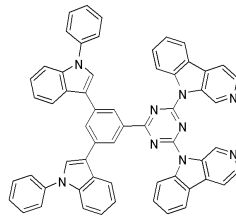
[화합물36]



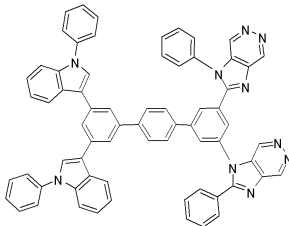
[화합물37]



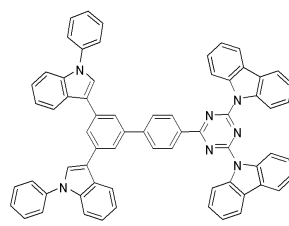
[화합물38]



[화합물39]

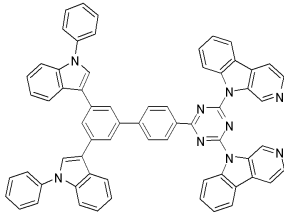


[화합물40]

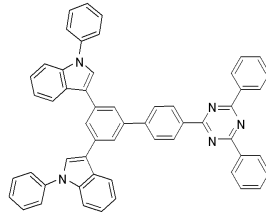


[0053]

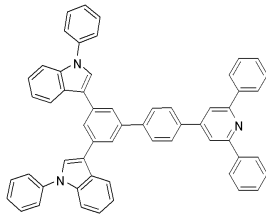
[화합물41]



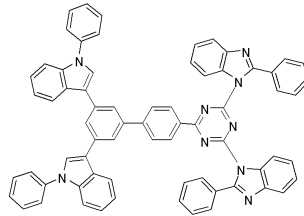
[화합물42]



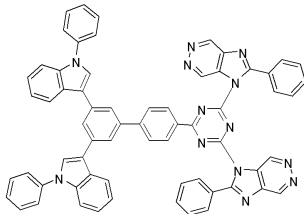
[화합물43]



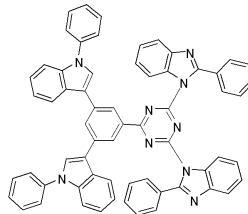
[화합물44]



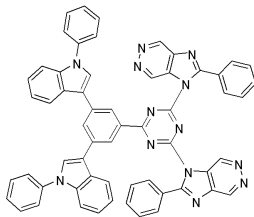
[화합물45]



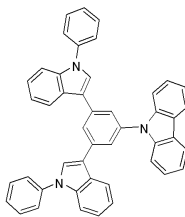
[화합물46]



[화합물47]

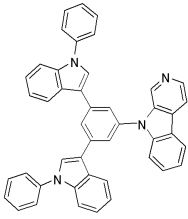


[화합물48]

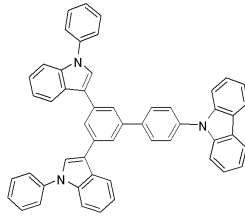


[0054]

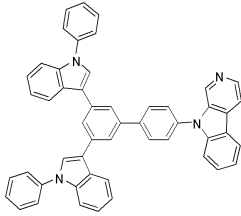
[화합물49]



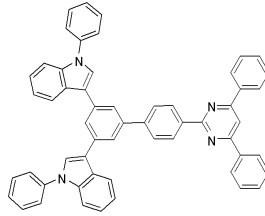
[화합물50]



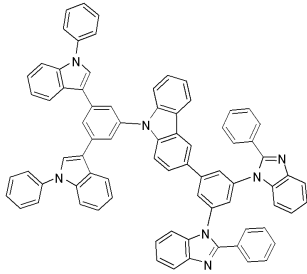
[화합물51]



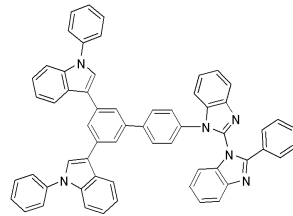
[화합물52]



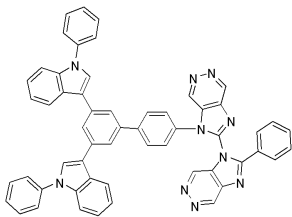
[화합물53]



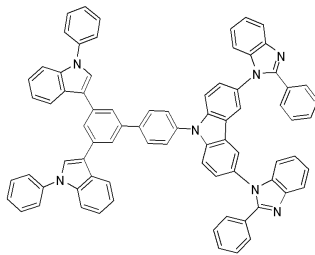
[화합물54]



[화합물55]

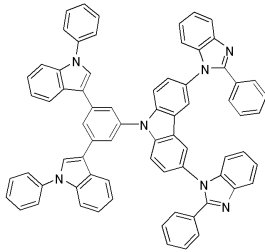


[화합물56]

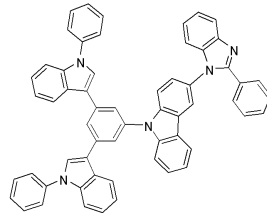


[0055]

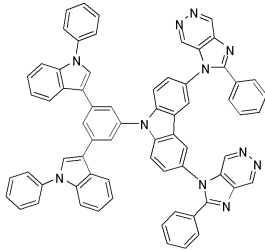
[화합물57]



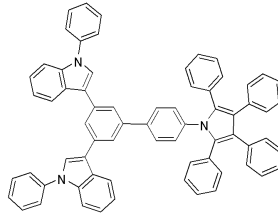
[화합물58]



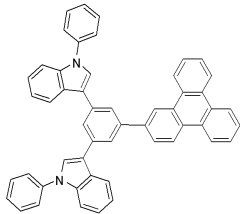
[화합물59]



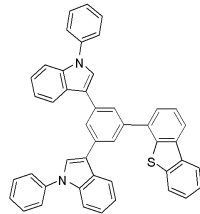
[화합물60]



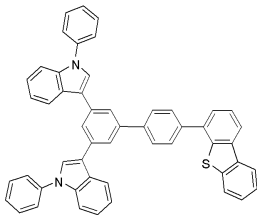
[화합물61]



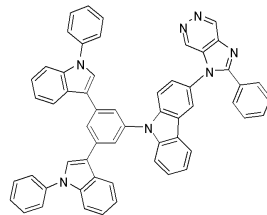
[화합물62]



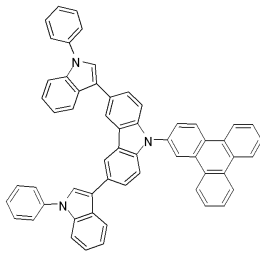
[화합물63]



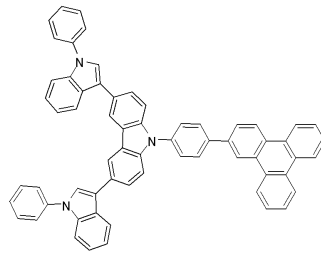
[화합물64]



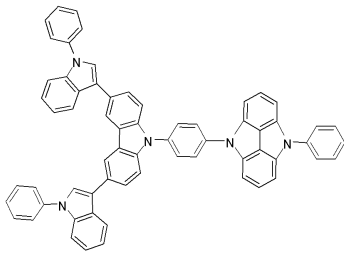
[화합물65]



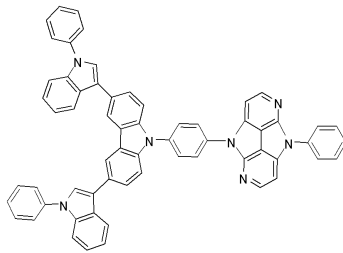
[화합물66]



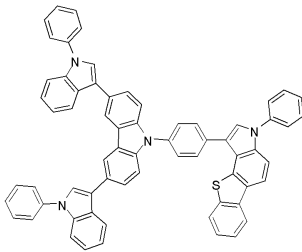
[화합물67]



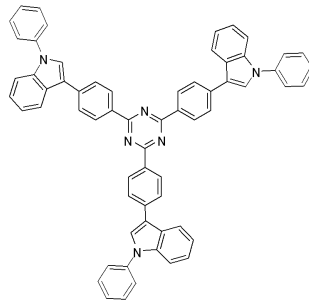
[화합물68]



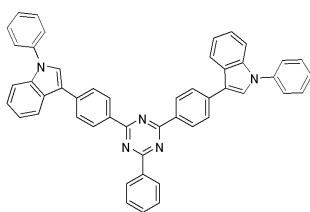
[화합물69]



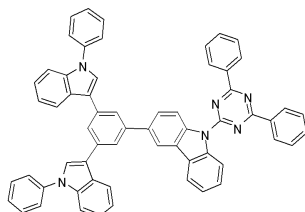
[화합물70]



[화합물71]

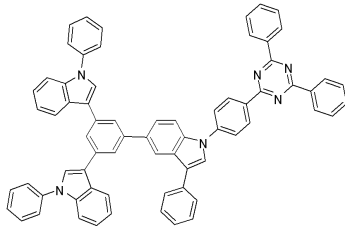


[화합물72]

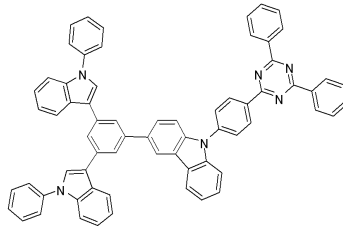


[0057]

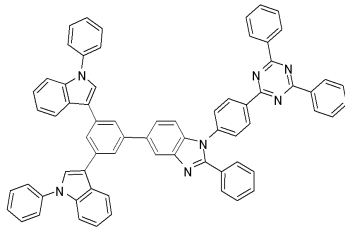
[화합물73]



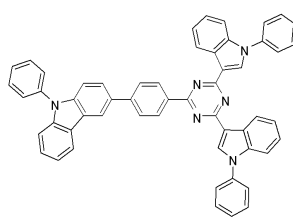
[화합물74]



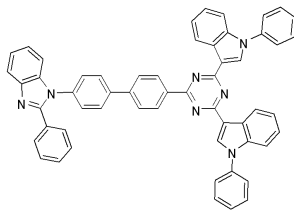
[화합물75]



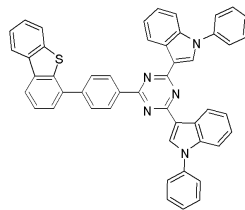
[화합물76]



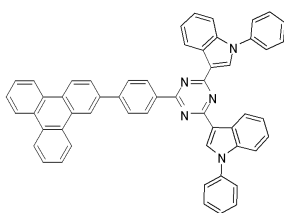
[화합물77]



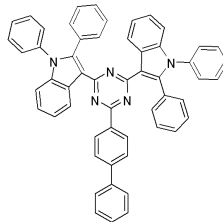
[화합물78]



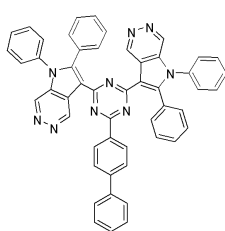
[화합물79]



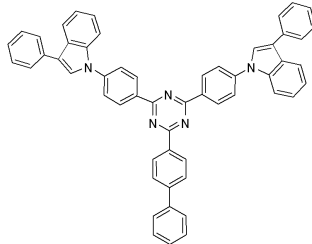
[화합물80]



[화합물81]



[화합물82]



[0058]

[0059]

[0060]

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, 발광층 물질, 및 전자 수송층 물질에 사용되는 치환기를 상기 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 제조할 수 있다.

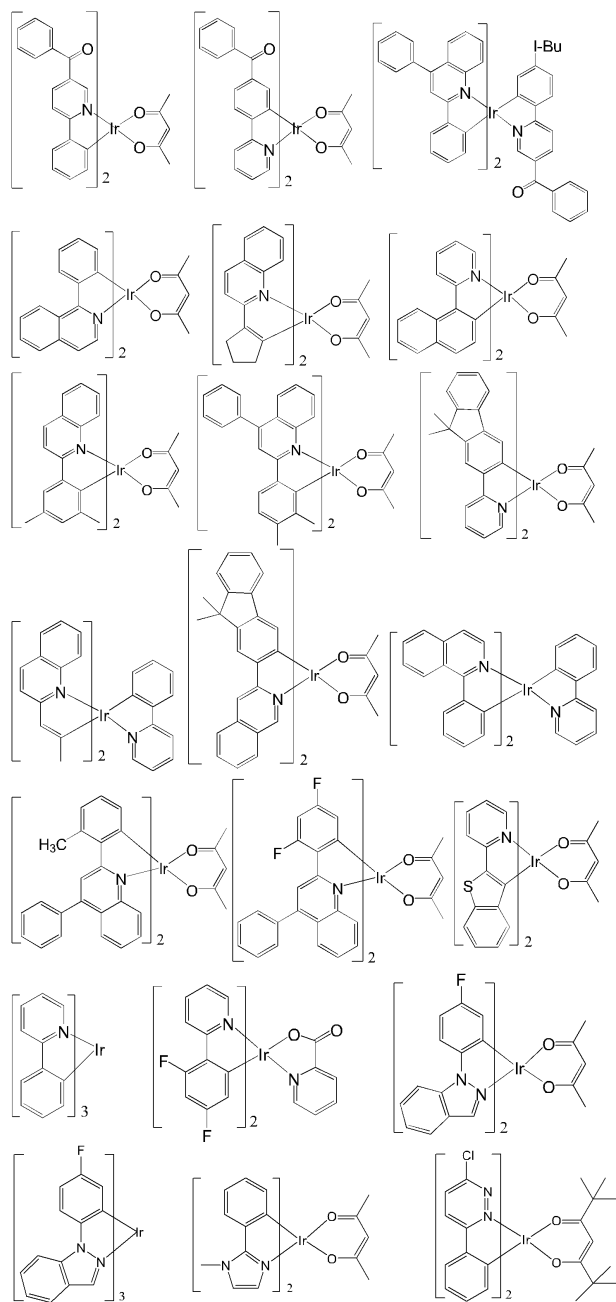
[0061]

특히, 본 발명에 따른 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물은 상기에서 살펴본 바와 같이, 특징적 코어 구조에 치환기를 도입한 결과 평판 구조도가 우수하고, 높은 삼중항(triplet) 상태를 가짐을 확인하였는 바, 이를 유기전계발광소자의 발광층 호스트 화합물에 채용시 효율, 구동전압, 수명 등에서 우수한 특성을 나타내는 유기전계발광소자의 구현이 가능하다.

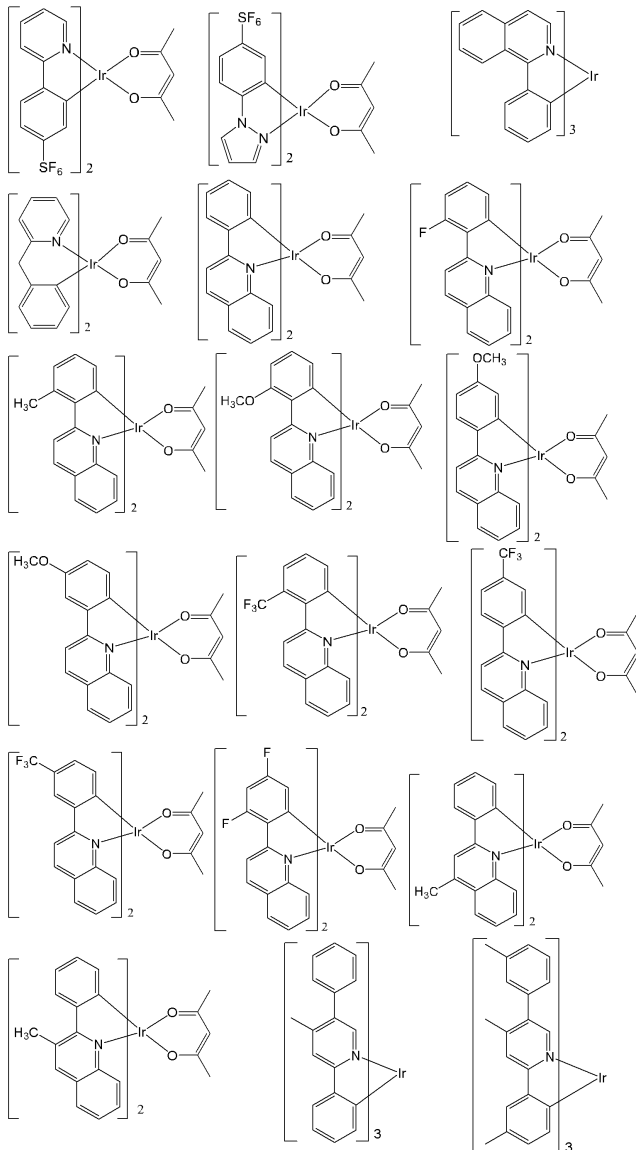
- [0062] 본 발명의 화합물은 유기전계발광소자의 통상의 제조방법에 따라 소자에 적용할 수 있다.
- [0063] 본 발명의 하나의 실시예에 따른 유기전계발광소자는 제1 전극과 제2 전극 및 이 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 구조로 이루어질 수 있으며, 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 소자의 유기물층에 사용한다는 것을 제외하고는 통상의 소자의 제조 방법 및 재료를 사용하여 제조될 수 있다.
- [0064] 본 발명에 따른 유기전계발광소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 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.
- [0065] 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 있다.
- [0066] 특히, 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 발광층 내 호스트 물질로서 포함될 수 있다.
- [0067] 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물이 발광층 내 호스트 물질로서 포함되는 경우에, 상기 발광층은 1종 이상의 인광 도펀트를 포함할 수 있으며, 상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 20 중량부의 범위에서 선택될 수 있다.
- [0068] 본 발명의 일 실시예에 의하면, 상기 발광층에 본 발명에 따른 [화학식 1]로 표시되는 호스트 화합물과 하기의 [구조식 2] 내지 [구조식 8] 중에서 선택되는 도펀트 화합물을 1종 이상 더 포함할 수 있다.

[0069]

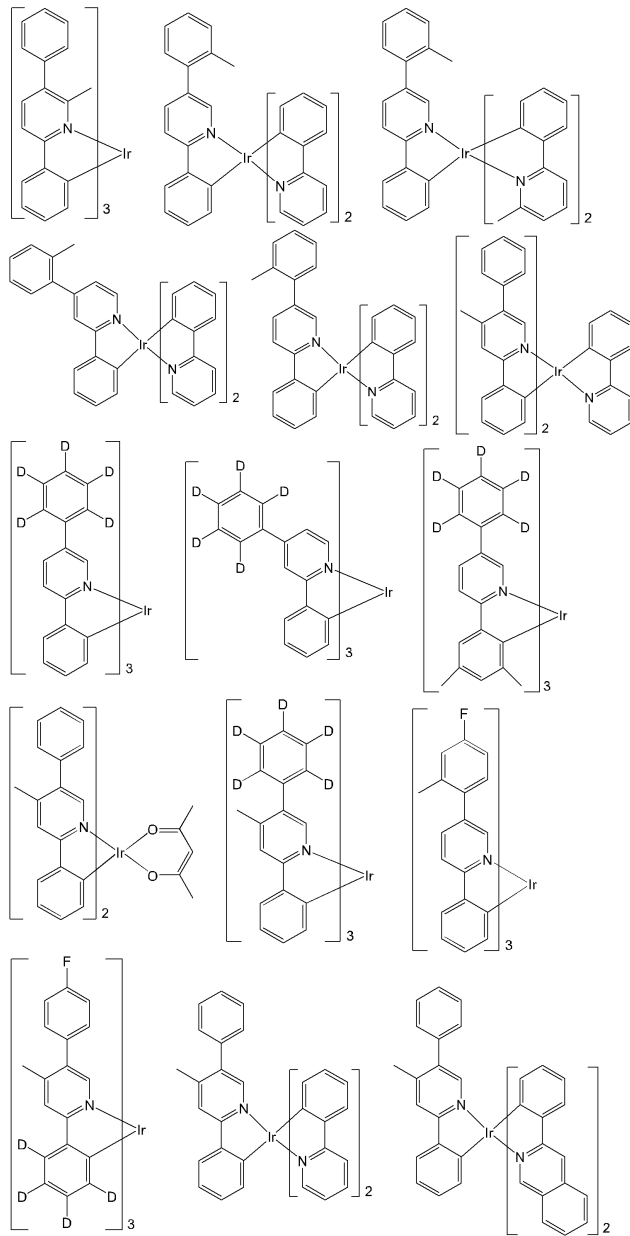
[구조식 2]



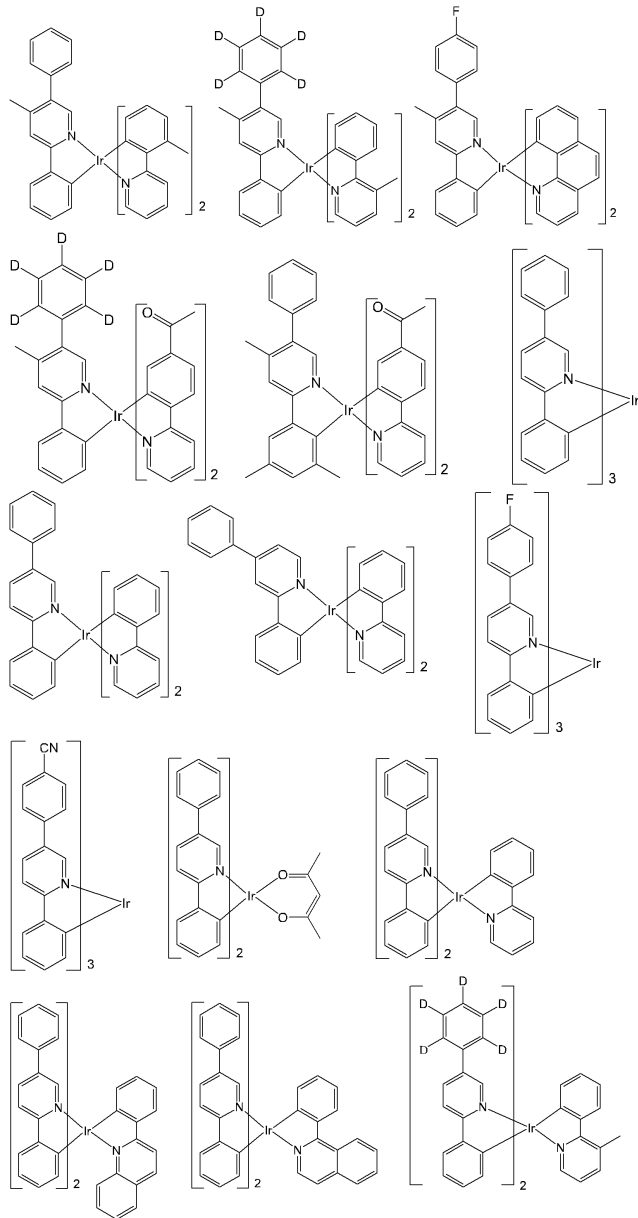
[0070]



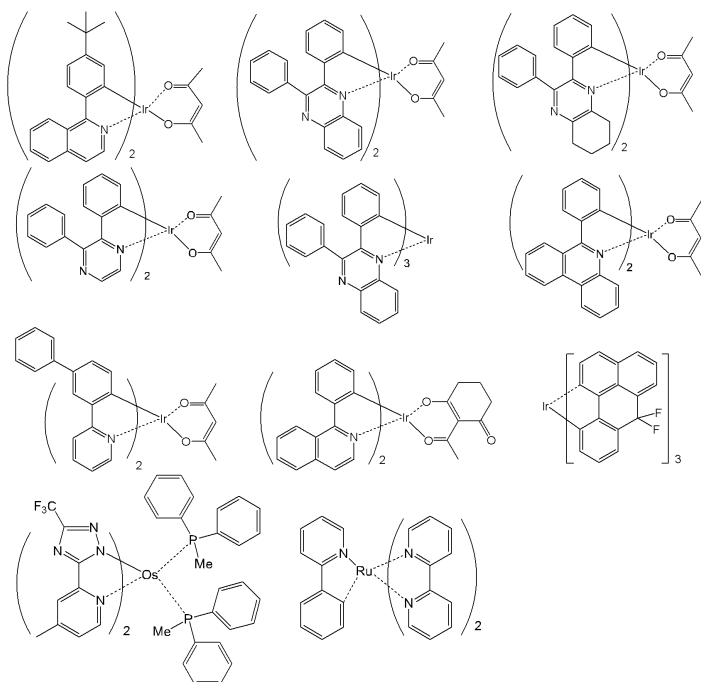
[0071]



[0072]



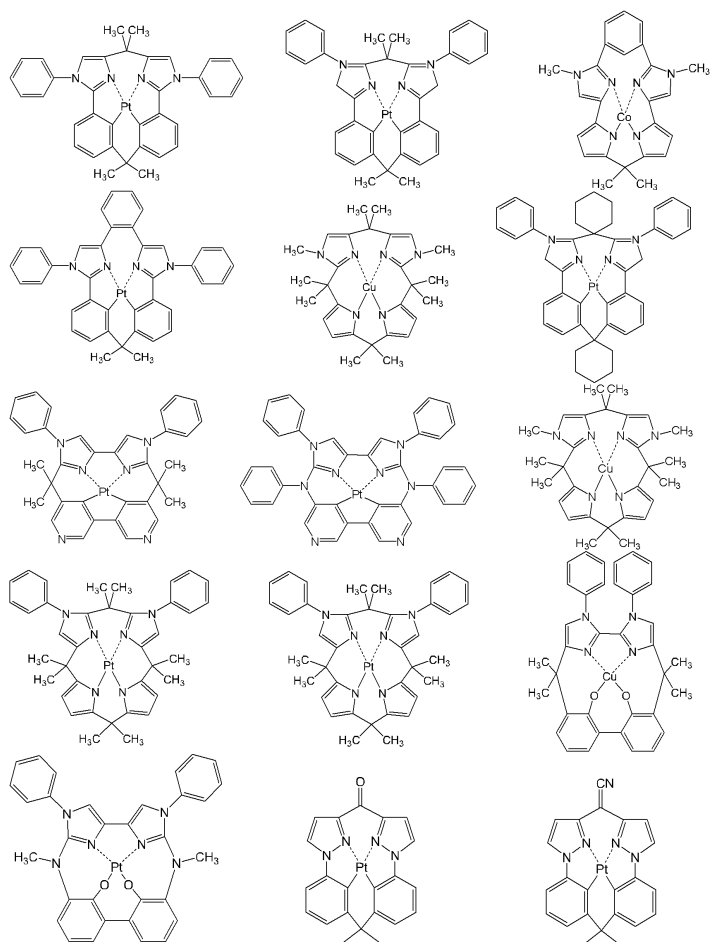
[0073]



[0074]

[0075]

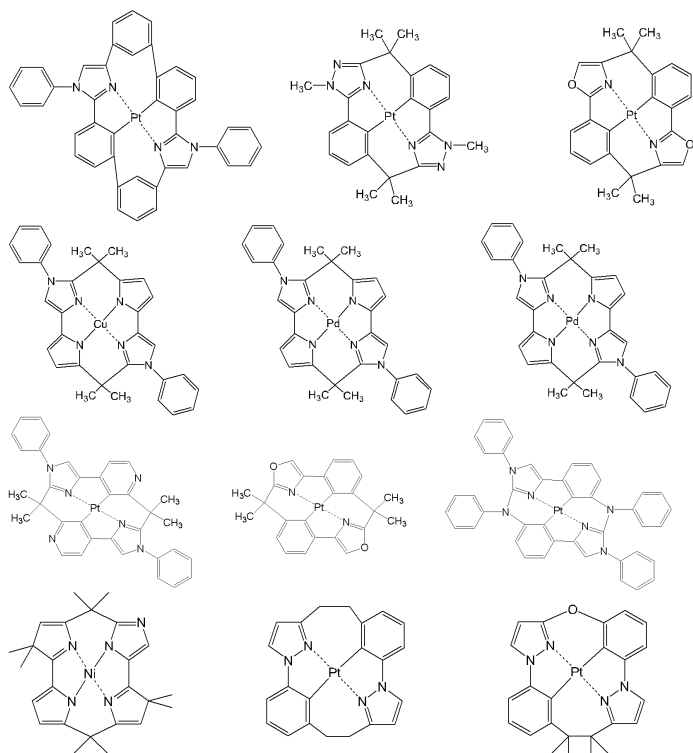
[구조식 3]



[0076]

[0077]

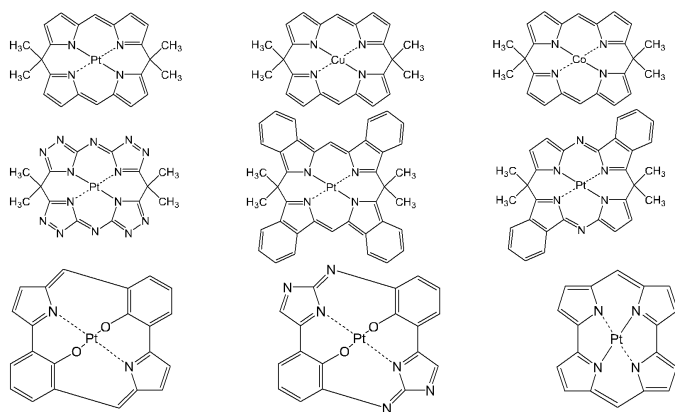
[구조식 4]



[0078]

[0079]

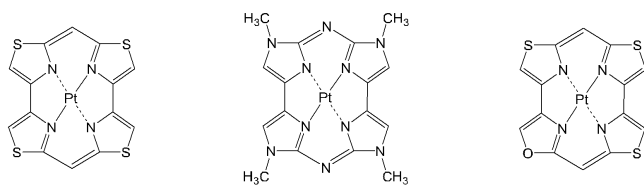
[구조식 5]



[0080]

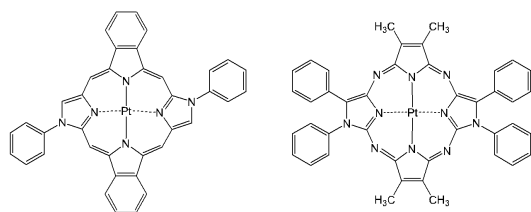
[0081]

[구조식 6]



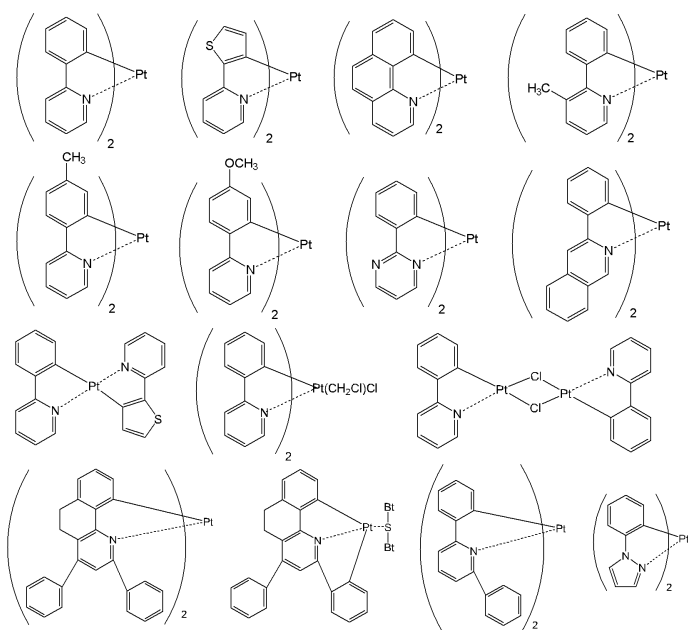
[0082]

[0083] [구조식 7]



[0084]

[0085] [구조식 8]



[0086]

[0087] 이와 같은 다층 구조의 유기물층에서 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 바람직하게는 발광층이지만, 정공 주입/정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 또는 전자 수송과 발광을 동시에 하는 층 등에도 포함될 수 있다.

[0088] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 전자 소자의 구조는 도 1 내지 5에 예시되어 있다.

[0089] 도 1에는 기관(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 1로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.

[0090] 도 2에는 기관(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 1로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.

[0091] 도 3에는 기관(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 1로 표시되는 화합물은 상기 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.

[0092] 도 4에는 기관(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 1로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.

- [0093] 도 5에는 기관(1) 위에 양극(2), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5)에 포함될 수 있다.
- [0094] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 전자 소자의 구조는 도 1 내지 5에 예시되어 있다.
- [0095] 도 1에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 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.
- [0096] 도 2에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 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.
- [0097] 도 3에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공 수송층(4), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 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.
- [0098] 도 4에는 기관(1) 위에 양극(2), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0099] 도 5에는 기관(1) 위에 양극(2), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5)에 포함될 수 있다.
- [0100] 예컨대, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기관 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.
- [0101] 이와 같은 방법 외에도, 기관 상에 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.
- [0102] 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.
- [0103] 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.
- [0104] 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.
- [0105] 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.
- [0106] 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, BAIq , 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.

[0107] 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, 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

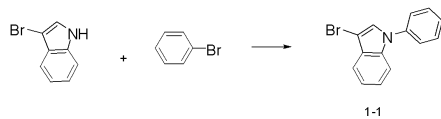
[0108] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0109] 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.

[0110] 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.

[0111] 실시예 1 : 화합물 1의 합성

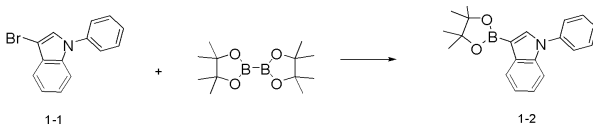
[0112] (1) 제조예 1 : 중간체 1-1의 합성



[0113]

[0114] 3-bromo-1H-indole(2.0 g, 0.010 mol)에 bromobenzene(1.6 g, 0.010 mol), $\text{Pd}(\text{dba})_2$ (0.5 g, 0.0005 mol), sodium-tert-butoxide(1.9 g, 0.020 mol)에 TOL 70 mL를 넣고 95 °C에서 4시간 교반하여 반응시켰다. 반응종료 후 $\text{H}_2\text{O}:\text{MC}$ 에 층분리 후 컬럼정제(n-HEXANE:MC)하여 중간체 1-1를 2.1 g (79%)수득하였다 ($m/z=272$)

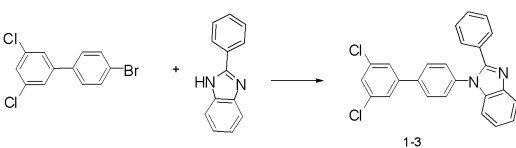
[0115] (2) 제조예 2 : 중간체 1-2의 합성



[0116]

[0117] 중간체 1-1(3.0 g, 0.011 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.3 g, 0.013 mol), $\text{PdCl}_2(\text{dppf})$ (0.4 g, 0.0005 mol), potassium-acetate(3.0 g, 0.022 mol)에 1,4-dioxane 100 mL를 넣고 95 °C에서 24시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 $\text{H}_2\text{O}:\text{MC}$ 에 층분리 후 컬럼정제(n-Hexane:MC)하여 중간체 1-2를 2.5 g (수율71%) 수득하였다. ($m/z=319$)

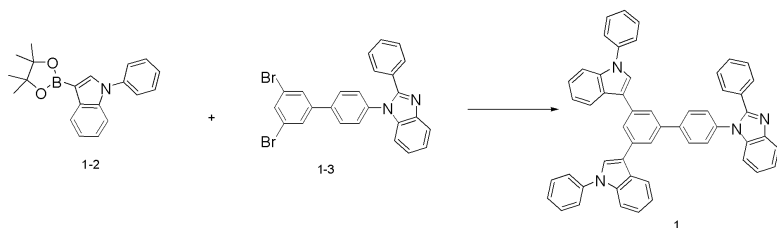
[0118] (3) 제조예 3 : 중간체 1-3의 합성



[0119]

[0120] 4'-bromo-3,5-dichlorobiphenyl(3.0 g, 0.010 mol)에 2-phenyl-1H-benzo[d]imidazole(1.9 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 1-3> 3.2 g (수율 76%)을 얻었다. (m/z=415)

[0121] (4) 제조예 4 : 화합물 1의 합성



[0122]

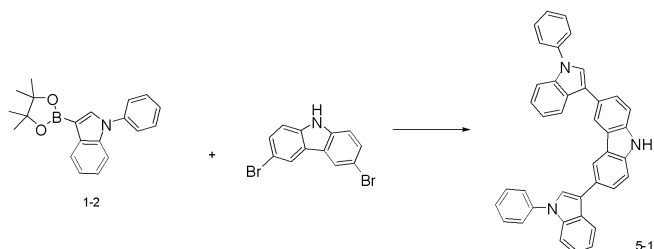
[0123] 중간체 1-2(6.0 g, 0.018 mol)에 중간체 1-3(3.3 g, 0.008 mol), Pd(pph₃)₄(1.0 g, 0.0009 mol), potassium carbonate(6.5 g, 0.036 mol)에 THF 130 mL를 넣고 65 °C에서 4시간 교반하여 반응시켰다. 반응종료 후 H₂O:MC에 층분리 후 컬럼정제(n-HEXANE:MC)하여 화합물 1을 9.3 g (71%)수득하였다.

[0124] H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(8.56/d, 7.59/d, 7.41/m) 2H(8.28/d, 8.17/d, 7.79/d, 7.71/d, 7.68/d, 7.51/m, 7.45/m, 7.36/s, 7.22/m) 3H(7.66/s) 4H(7.58/m, 7.50/d, 7.42/m)

[0125] LC/MS: m/z= 729[(M+1)⁺]

[0126] 실시예 2 : 화합물 5의 합성

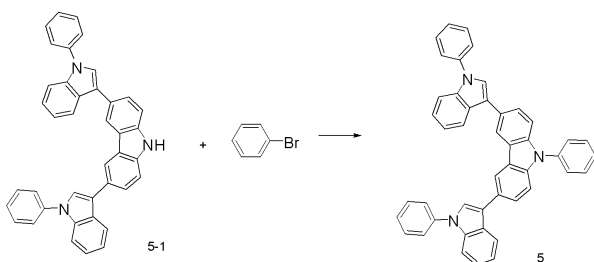
[0127] (1) 제조예 1 : 중간체 5-1의 합성



[0128]

[0129] 중간체 1-2(6.0 g, 0.018 mol)에 3,6-dibromo-9H-carbazole(2.6 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 5-1> 3.1 g (수율 71%)을 얻었다. (m/z=549)

[0130] (2) 제조예 2 : 화합물 5의 합성



[0131]

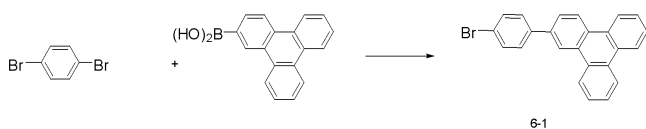
[0132] 중간체 5-1(5.0 g, 0.009 mol)에 bromobenzene(1.4 g, 0.009 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 5> 4.5 g (수율 80%)을 얻었다.

[0133] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H (8.18/d, 8.00/d, 7.87/d, 7.69/d) 2H(8.17/d, 7.77/s, 7.71/d, 7.36/s) 3H(7.45/m) 4H(7.42/m) 6H(7.58/m, 7.50/d)

[0134] LC/MS: $m/z = 626[(M+1)^+]$

[0135] 실시예 3 : 화합물 6의 합성

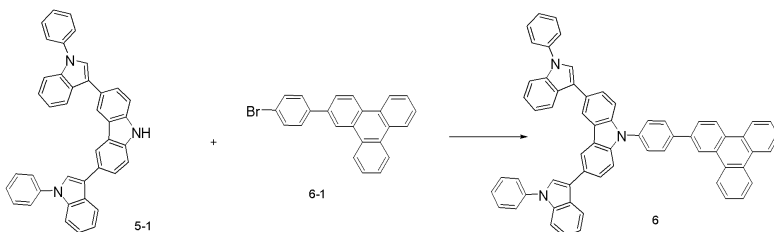
[0136] (1) 제조예 1 : 중간체 6-1의 합성



[0137]

[0138] 1,4-dibromobenzene(1.9 g, 0.008 mol)에 triphenylboronic acid(2.7 g, 0.010 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 6-1> 2.1 g (수율 69%)을 얻었다. ($m/z=383$)

[0139] (2) 제조예 2 : 화합물 6의 합성



[0140]

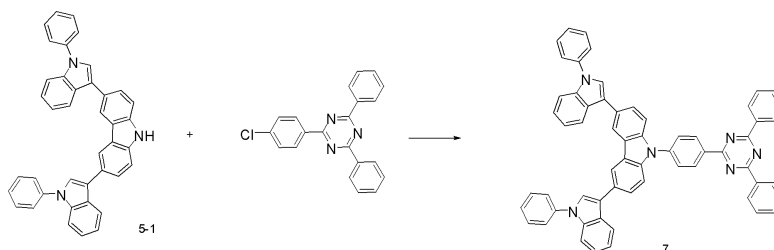
[0141] 중간체 5-1(5.0 g, 0.009 mol)에 중간체 6-1(3.4 g, 0.009 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 6> 5.8 g (수율 76%)을 얻었다.

[0142] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.18/d, 8.17/d, 8.04/d, 8.00/d, 7.87/d, 7.69/d) 2H(8.93/d, 8.17/d, 8.12/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.79/d, 7.77/s, 7.71/d, 7.68/d, 7.45/m, 7.36/s) 4H(7.58/m, 7.50/d, 7.42/m)

[0143] LC/MS: $m/z=853[(M+1)^+]$

[0144] 실시예 4 : 화합물 7의 합성

[0145] (1) 제조예 1 : 화합물 7의 합성



[0146]

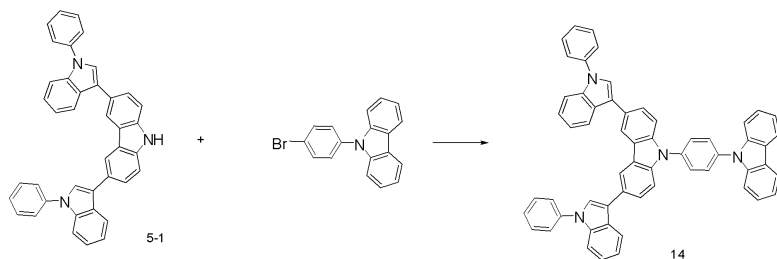
[0147] 중간체 5-1(5.0 g, 0.009 mol)에 2-(4-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(3.1 g, 0.009 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 7> 6.0 g (수율 78%)을 얻었다.

[0148] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.18/d, 8.00/d, 7.87/d, 7.69/d) 2H(8.17/d, 7.79/d, 7.77/s, 7.71/d, 7.68/d, 7.45/m, 7.41/m, 7.36/s) 4H(8.28/d, 7.58/m, 7.51/m, 7.50/d, 7.42/m)

[0149] LC/MS: $m/z=858$ $[(M+1)^+]$

[0150] 실시예 5 : 화합물 14의 합성

[0151] (1) 제조예 1 : 화합물 14의 합성



[0152]

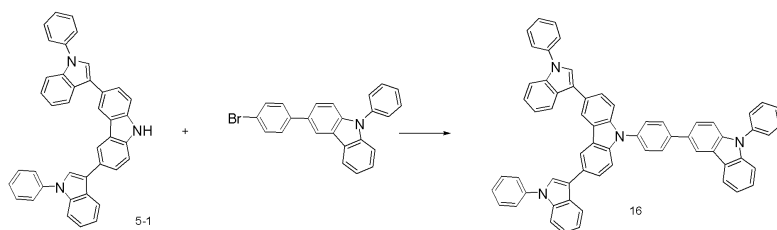
[0153] 중간체 5-1(5.0 g, 0.009 mol)에 9-(4-bromophenyl)-9H-carbazole(2.9 g, 0.009 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 14> 5.8 g (수율 82%)을 얻었다.

[0154] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 8.18/d, 8.12/d, 8.00/d, 7.94/d, 7.87/d, 7.69/d, 7.63/d, 7.50/m, 7.33/m, 7.29/m, 7.25/m) 2H(8.17/d, 7.77/s, 7.71/d, 7.45/m, 7.36/s) 4H(7.62/d, 7.58/m, 7.50/d, 7.42/m)

[0155] LC/MS: $m/z=791$ $[(M+1)^+]$

[0156] 실시예 6 : 화합물 16의 합성

[0157] (1) 제조예 1 : 화합물 16의 합성



[0158]

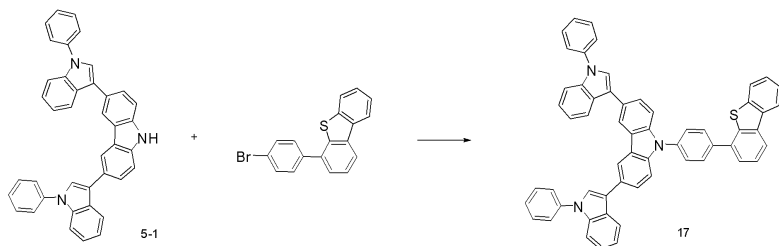
[0159] 중간체 5-1(5.0 g, 0.009 mol)에 3-(4-bromophenyl)-9-phenyl-9H-carbazole(3.6 g, 0.009 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 16> 6.2 g (수율 79%)을 얻었다.

[0160] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.55/d, 8.18/d, 8.00/d, 7.94/d, 7.33/m, 7.25/m) 2H(8.17/d, 7.87/d, 7.79/d, 7.71/d, 7.69/d, 7.68/d, 7.36/s) 3H(7.77/s, 7.45/m) 4H(7.42/m) 6H(7.58/m, 7.50/d)

[0161] LC/MS: $m/z=868$ $[(M+1)^+]$

[0162] 실시예 7 : 화합물 17의 합성

[0163] (1) 제조예 1 : 화합물 17의 합성



[0164]

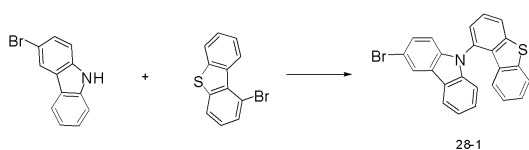
[0165] 중간체 5-1(5.0 g, 0.009 mol)에 4-(4-bromophenyl)dibenzo[b,d]thiophene (3.1 g, 0.009 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 17> 5.5 g (수율 76%)을 얻었다.

[0166] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.45/d, 8.41/d, 8.20/d, 8.18/d, 8.00/d, 7.98/d, 7.87/d, 7.69/d, 7.58/m, 7.52/m, 7.50/m) 2H(8.17/d, 7.79/d, 7.77/s, 7.71/d, 7.68/d, 7.45/m, 7.36/s) 4H(7.58/m, 7.50/d, 7.42/m)

[0167] LC/MS: $m/z=809$ [$(M+1)^+$]

[0168] 실시예 8 : 화합물 28의 합성

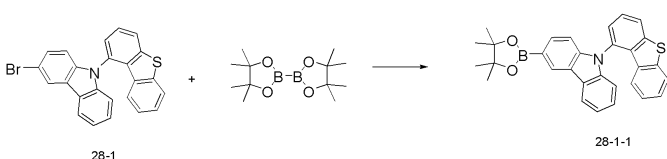
[0169] (1) 제조예 1 : 중간체 28-1의 합성



[0170]

[0171] 3-bromo-9H-carbazole(3.0 g, 0.012 mol)에 1-bromodibenzo[b,d]thiophene (3.2 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 28-1> 3.9 g (수율 76%)을 얻었다.($m/z=428$)

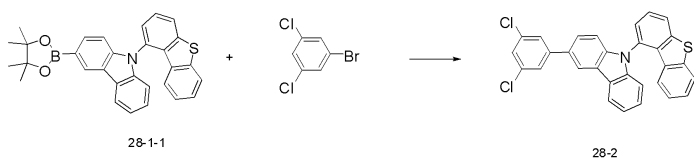
[0172] (2) 제조예 2 : 중간체 28-1-1의 합성



[0173]

[0174] 중간체 28-1(4.3 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 28-1-1> 3.4 g (수율 71%)을 얻었다.($m/z=475$)

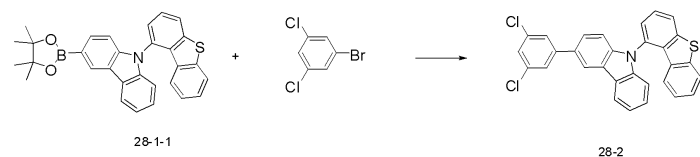
[0175] (3) 제조예 3 : 중간체 28-2의 합성



[0176]

[0177] 중간체 28-1-1(4.8 g, 0.010 mol)에 1-bromo-3,5-dichlorobenzene(1.8 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 28-2> 2.8 g (수율 71%)을 얻었다.($m/z=494$)

(3) 제조예 3 : 화합물 28의 합성



중간체 1-2(6.0 g, 0.018 mol)에 중간체 28-2(4.0 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 28> 4.8 g (수율 74%)을 얻었다.

¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(8.55/d, 8.45/d, 7.94/d, 7.87/d, 7.77/s, 7.69/d, 7.52/m, 7.33/m, 7.30/d, 7.25/m) 2H(8.17/d, 7.98/d, 7.71/d, 7.45/m, 7.36/s) 3H(7.66/s) 4H(7.58/m, 7.42/m) 6H(7.50/d)

LC/MS: m/z=809 [(M+1)⁺]

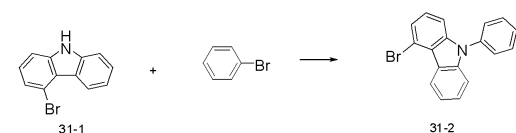
실시예 9 : 화합물 31의 합성

(1) 제조예 1 : 중간체 31-1의 합성



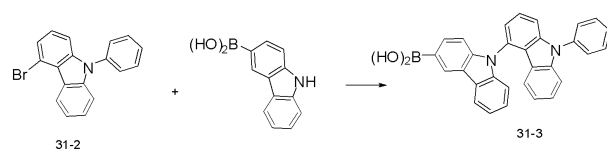
2-bromo-2'-nitrobiphenyl(5.0 g, 0.017 mol)에 triphenylphosphine(4.5 g, 0.017 mol)에 1,2-dichlorobenzene 100 mL를 넣고 180 °C에서 24시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H₂O:MC에 충분히 후 컬럼정제(n-Hexane:MC)하여 중간체 31-1을 4.2 g (수율 83%)수득하였다.(m/z=246)

(2) 제조예 2 : 중간체 31-2의 합성



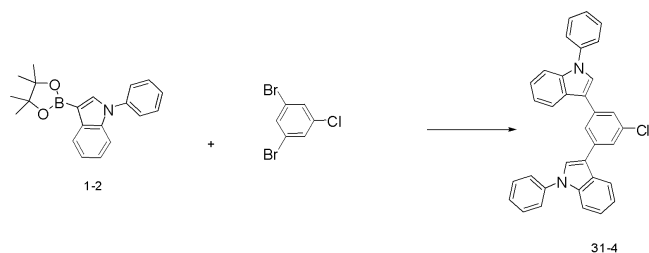
중간체 31-1(3.0 g, 0.012 mol)에 bromobenzene(1.9 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 31-2> 2.9 g (수율 76%)을 얻었다.(m/z=322)

(3) 제조예 3 : 중간체 31-3의 합성



중간체 31-2(3.0 g, 0.009 mol)에 9H-carbazol-3-ylboronic acid(1.9 g, 0.009 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 31-3> 3.2 g (수율 79%)을 얻었다.(m/z=452)

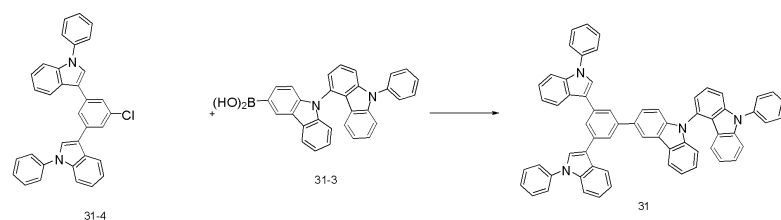
[0193] (4) 제조예 4 : 중간체 31-4의 합성



[0194]

[0195] 중간체 1-2(6.0 g, 0.018 mol)에 1,3-dibromo-5-chlorobenzene(2.2 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 31-4> 2.9 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=495)

[0196] (5) 제조예 5 : 화합물 31의 합성



[0197]

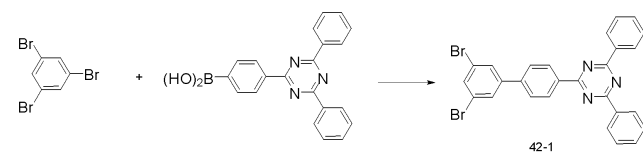
[0198] 중간체 31-4(5.0 g, 0.010 mol)에 중간체 31-3(3.9 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 31> 4.9 g (수율 70%)을 얻었다.

[0199] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.87/d, 7.77/s, 7.69/d, 7.63/d, 7.37/m, 7.23/d) 2H(8.55/d, 8.17/d, 7.94/d, 7.71/d, 7.36/s, 7.33/m, 7.25/m) 3H(7.66/s, 7.45/m) 4H(7.42/m) 6H(7.58/m, 7.50/d)

[0200] LC/MS: m/z= 868[(M+1)⁺]

[0201] 실시예 10 : 화합물 42의 합성

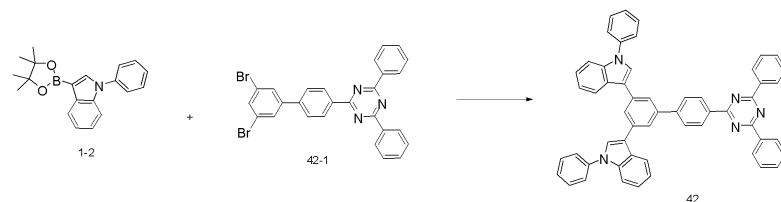
[0202] (1) 제조예 1 : 중간체 42-1의 합성



[0203]

[0204] 1,3,5-tribromobenzene(3.4 g, 0.011 mol)에 4-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)phenylboronic acid(4.6 g, 0.013 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 42-1> 4.3 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=543)

[0205] (2) 제조예 2 : 화합물 42의 합성



[0206]

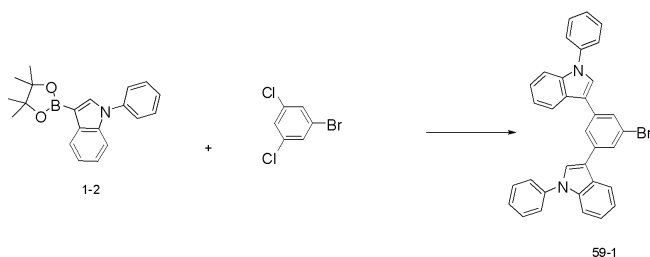
[0207] 중간체 1-2(6.0 g, 0.018 mol)에 중간체 42-1(4.3 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 42> 4.4 g (수율 71%)을 얻었다.

[0208] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 2H(8.17/d, 7.87/d, 7.71/d, 7.45/m, 7.41/m, 7.36/s, 7.25/d) 3H(7.66/s) 4H(8.28/d, 7.58/m, 7.51/m, 7.50/d, 7.42/m)

[0209] LC/MS: $m/z = 768[(M+1)^+]$

[0210] 실시예 11 : 화합물 59의 합성

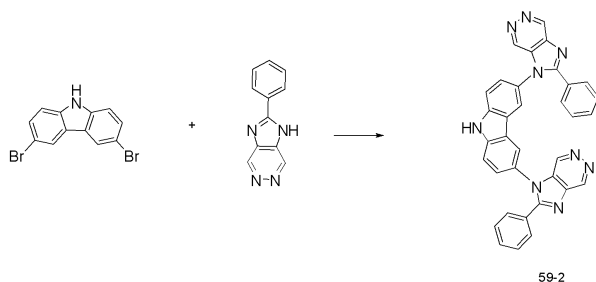
[0211] (1) 제조예 1 : 중간체 59-1의 합성



[0212]

[0213] 중간체 1-2(6.0 g, 0.018 mol)에 1-bromo-3,5-dichlorobenzene(1.8 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 59-1> 3.1 g (수율 73%)을 얻었다.($m/z=539$)

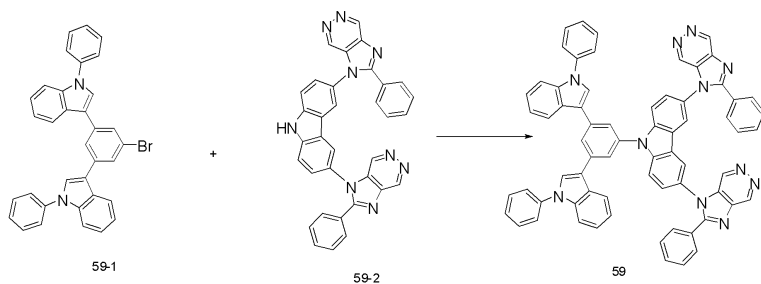
[0214] (2) 제조예 2 : 중간체 59-2의 합성



[0215]

[0216] 3,6-dibromo-9H-carbazole(3.0 g, 0.009 mol)에 2-phenyl-1H-imidazo[4,5-d]pyridazine(3.6 g, 0.018 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 59-2> 3.9 g (수율 78%)을 얻었다.($m/z=555$)

[0217] (3) 제조예 3 : 화합물 59의 합성



[0218]

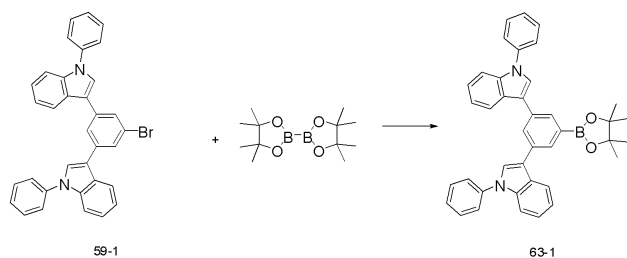
[0219] 중간체 59-1(5.0 g, 0.009 mol)에 중간체 59-2(5.0 g, 0.009 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 59> 6.9 g (수율 75%)을 얻었다.

[0220] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(7.94/d, 7.70/s, 7.63/d, 7.62/d, 7.31/d) 2H(8.17/d, 8.05/s, 7.71/d, 7.50/s, 7.45/m, 7.41/m, 7.36/s) 4H(9.24/s, 8.28/d, 7.58/m, 7.51/m, 7.50/d, 7.42/m)

[0221] LC/MS: $m/z = 1015[(M+1)^+]$

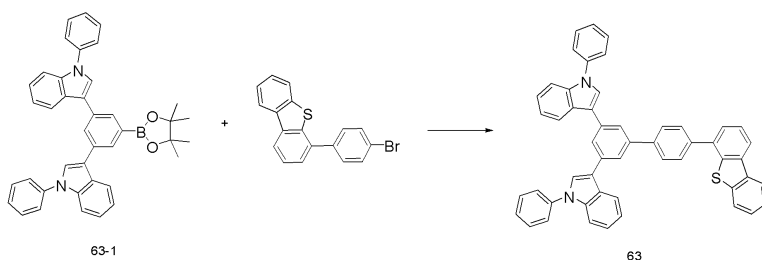
[0222] 실시예 12 : 화합물 63의 합성

[0223] (1) 제조예 1 : 화합물 63의 합성



[0225] 중간체 59-1(5.4 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 63-1> 4.2 g (수율 72%)을 얻었다.($m/z=586$)

[0226] (2) 제조예 2 : 화합물 63의 합성



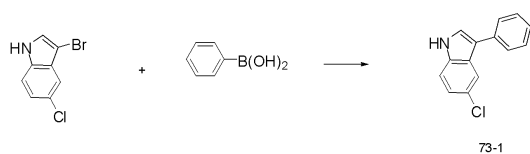
[0228] 중간체 63-1(5.9 g, 0.010 mol)에 4-(4-bromophenyl)dibenzo[b,d]thiophene (2.7 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 63> 4.1 g (수율 72%)을 얻었다.

[0229] H-NMR (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(8.45/d, 8.41/d, 8.20/d, 7.98/d, 7.58/m, 7.52/m, 7.50/m) 2H(8.17/d, 7.71/d, 7.45/m, 7.36/s) 3H(7.66/s) 4H(7.58/m, 7.50/d, 7.42/m, 7.25/d)

[0230] LC/MS: $m/z=719[(M+1)^+]$

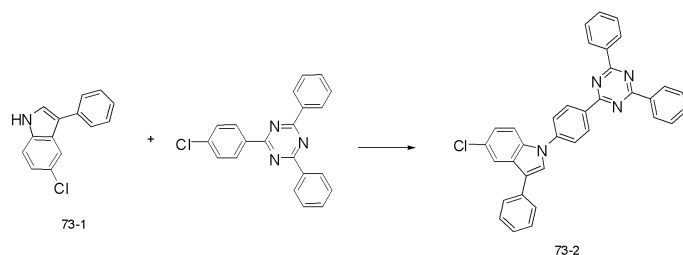
[0231] 실시예 13 : 화합물 73의 합성

[0232] (1) 제조예 1 : 중간체 73-1의 합성



[0234] 3-bromo-5-chloro-1H-indole(3.0 g, 0.013 mol)에 phenyl boronic acid(1.9 g, 0.016 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 73-1> 2.2 g (수율 73%)을 얻었다.($m/z=227$)

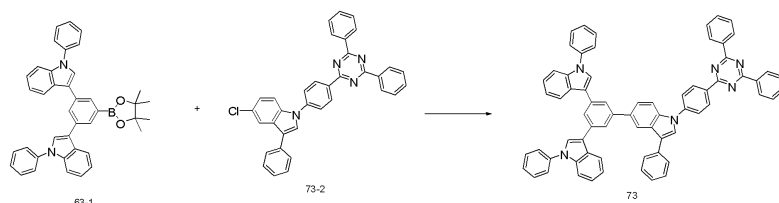
[0235] (2) 제조예 2 : 중간체 73-2의 합성



[0236]

[0237] 중간체 73-1(3.0 g, 0.013 mol)에 2-(4-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(4.5 g, 0.013 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (1)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 73-2> 5.4 g (수율 78%)을 얻었다. (m/z=535)

[0238] (3) 제조예 3 : 화합물 73의 합성



[0239]

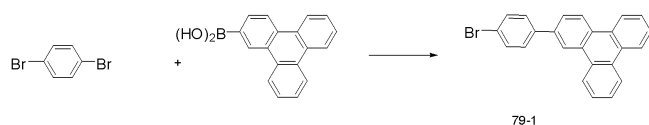
[0240] 중간체 63-1(5.8 g, 0.010 mol)에 중간체 73-2(4.3 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 73> 5.5 g (수율 71%)을 얻었다.

[0241] ¹H-NMR (200MHz, CDCl₃): δ ppm, 1H(8.27/d, 7.77/d, 7.39/s) 2H(8.17/d, 7.79/d, 7.71/d, 7.68/d, 7.52/d, 7.45/m) 3H(7.66/s, 7.41/m, 7.36/s) 4H(8.28/d, 7.58/m, 7.50/d, 7.42/m) 6H(7.51/m)

[0242] LC/MS: m/z= 960[(M+1)⁺]

[0243] 실시예 14 : 화합물 79의 합성

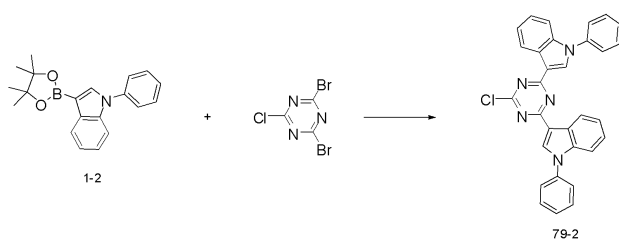
[0244] (1) 제조예 1 : 중간체 79-1의 합성



[0245]

[0246] 1,4-dibromobenzene(2.4 g, 0.010 mol)에 triphenyl-2-ylboronic acid(3.3 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 79-1> 2.8 g (수율 72%)을 얻었다. (m/z=383)

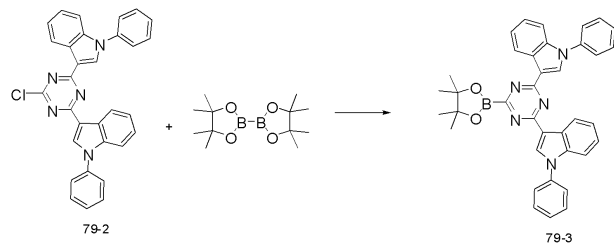
[0247] (2) 제조예 2 : 중간체 79-2의 합성



[0248]

[0249] 중간체 1-2(6.0 g, 0.018 mol)에 2,4-dibromo-6-chloro-1,3,5-triazine (2.2 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 79-2> 2.8 g (수율 70%)을 얻었다.(m/z=497)

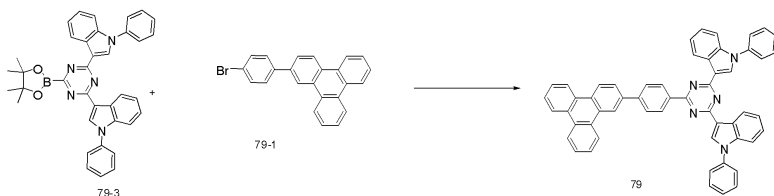
[0250] (3) 제조예 3 : 중간체 79-3의 합성



[0251]

[0252] 중간체 79-2(5.0 g, 0.010 mol)에 bis(pinacolato)diboron(3.0 g, 0.012 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (2)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 79> 4.3 g (수율 73%)을 얻었다.(m/z=589)

[0253] (4) 제조예 4 : 화합물 79의 합성



[0254]

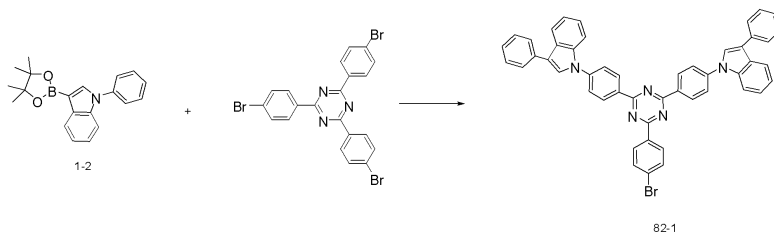
[0255] 중간체 79-3(5.9 g, 0.010 mol)에 중간체 79-1(2.8 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 79> 4.5 g (수율 73%)을 얻었다.

[0256] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 1H(9.15/s, 8.18/d, 8.04/d) 2H(8.93/d, 8.55/d, 8.12/d, 7.94/d, 7.88/m, 7.85/d, 7.82/m, 7.60/s, 7.45/m, 7.33/m, 7.25/d, 7.25/m) 4H(7.58/m, 7.50/d)

[0257] LC/MS: m/z= 766[(M+1)⁺]

[0258] 실시예 15 : 화합물 82의 합성

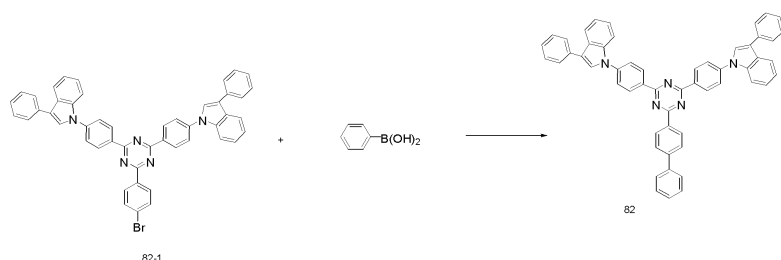
[0259] (1) 제조예 1 : 중간체 82-1의 합성



[0260]

[0261] 중간체 1-2(6.0 g, 0.018 mol)에 2,4,6-tris(4-bromophenyl)-1,3,5-triazine(4.4 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <중간체 82-1> 4.4 g (수율 72%)을 얻었다.(m/z=770)

[0262] (2) 제조예 2 : 화합물 82의 합성



[0263]

[0264] 중간체 82-1(5.0 g, 0.006 mol)에 phenyl boronic acid(0.9 g, 0.008 mol)를 넣고 실시예 1-제조예 (4)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 <화합물 82> 3.5 g (수율 75%)을 얻었다.

[0265] $^1\text{H-NMR}$ (200MHz, CDCl_3): δ ppm, 2H(8.17/d, 7.85/d, 7.71/d, 7.36/s, 7.25/d) 3H(7.41/m) 4H(7.79/d, 7.68/d, 7.42/m) 6H(7.52/d, 7.51/m)

[0266] LC/MS: $m/z=768$ [$(M+1)^+$]

[0267] 소자 실시예 1 : 화합물 1을 발광층의 호스트 재료로 하여 유기전계발광소자 제조

[0268] ITO로 코팅된 유리기판 위에 NPB를 증착하여 120 nm의 정공수송층을 형성하였으며, 이어서 Ir(ppy)_3 를 도펀트로 하여 화합물 1의 증착속도를 0.1 nm/sec, Ir(ppy)_3 를 증착속도 0.009 nm/sec로 증착하고, 증착속도 비율이 9%가 되도록 Ir(ppy)_3 를 도핑하여 정공수송층 상에 발광층을 30 nm 두께로 형성하였다.

[0269] 그 위에 Balq를 10 nm 두께로 증착하여 정공이 발광층을 지나 전자수송층으로 이동하는 것을 방지하는 정공차단층을 형성하고, 그 위에 Alq_3 를 증착하여 40 nm의 전자수송층을 형성하였으며, 그 위에 불화리튬을 증착하여 1 nm의 전자주입층을 형성하였다. 전자주입층 상에 알루미늄을 증착하여 120 nm의 음극을 형성하여 유기전계발광소자를 제조하였다.

[0270] 이때, 각 물질의 증착속도는 화합물 1, NPB, Alq_3 , Balq는 0.1 nm/sec, 불화리튬은 0.01 nm/sec, 알루미늄은 0.5 nm/sec로 하였다.

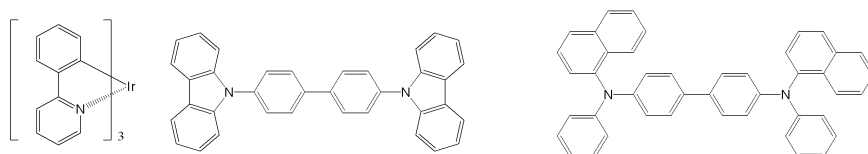
[0271] 소자 실시예 2 내지 15

[0272] 상기 화합물 1 대신 하기 [표 1]에 기재된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 소자실시예 2 내지 15의 유기전계발광소자를 제조하였다.

[0273] 소자 비교예 1

[0274] 소자 비교예 1을 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 1 대신 일반적으로 인광호스트 물질로 많이 사용되고 있는 CBP를 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작하였다.

[0275] 상기에서 사용된 Ir(ppy)_3 , CBP 및 NPB의 구조는 다음과 같다.



[0276]

[0277]

[표 1]

	발광HOST재료	구동전압(V) (at 1000cd/m ²)	발광효율 (cd/A)	(CIE(x, y))
소자실시예1	화합물1	5.0	53	(0.31, 0.63)
소자실시예2	화합물5	5.1	49	(0.31, 0.63)
소자실시예3	화합물6	5.0	54	(0.32, 0.64)
소자실시예4	화합물7	4.4	61	(0.32, 0.64)
소자실시예5	화합물14	4.5	49	(0.32, 0.64)
소자실시예6	화합물16	4.9	51	(0.32, 0.64)
소자실시예7	화합물17	4.9	51	(0.34, 0.62)
소자실시예8	화합물28	5.1	53	(0.35, 0.63)
소자실시예9	화합물31	4.9	60	(0.34, 0.62)
소자실시예10	화합물42	4.5	55	(0.32, 0.64)
소자실시예11	화합물59	5.1	53	(0.35, 0.64)
소자실시예12	화합물63	4.5	59	(0.32, 0.64)
소자실시예13	화합물73	5.0	54	(0.35, 0.65)
소자실시예14	화합물79	5.0	51	(0.33, 0.63)
소자실시예15	화합물82	4.9	48	(0.32, 0.62)
소자비교예1	C B P	6.8	37	(0.33, 0.62)

[0278]

[0279]

구동전압 및 발광효율 측정

[0280]

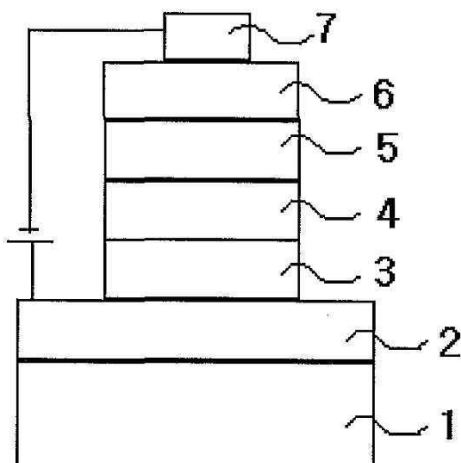
상기 유기전계발광소자(기판크기 : 25×25 mm² / 증착면적 : 2×2 mm²)를 IVL 측정셋트(CS-2000+지그+IVL프로그램)에 고정한 후 전류를 1 mA/m²씩 상승시키며 증착면의 발광 휘도(cd/m²), 구동전압(V), 전류밀도(A/m²), 발광효율(cd/A)을 측정하여 휘도가 1000 cd/m²일 때 구동전압과 발광효율을 상기 [표 1]에 나타내었다.

[0281]

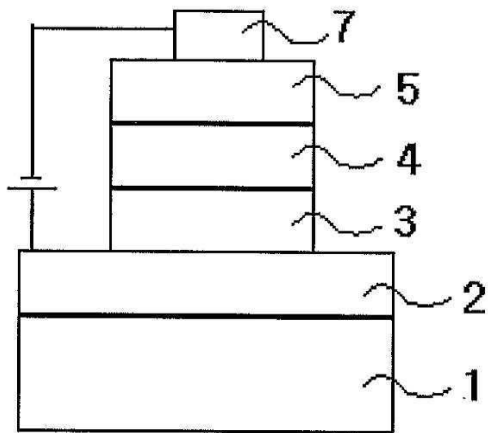
상기 [표 1]에 따르면, 본 발명에 따른 유기전계발광소자용 화합물이 유기전계발광소자의 발광층의 호스트 물질로 사용될 때 종래의 CBP(호스트재료)를 사용할 때보다 구동전압은 낮아지고, 발광효율은 증가됨을 볼 수 있다.

도면

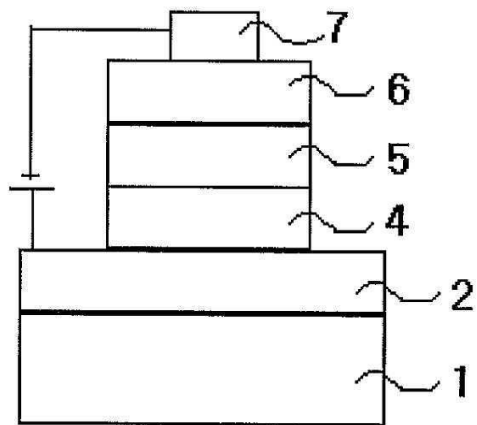
도면1



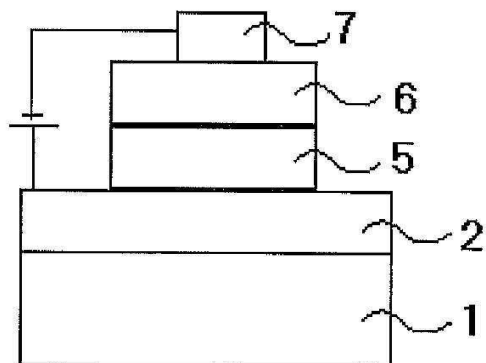
도면2



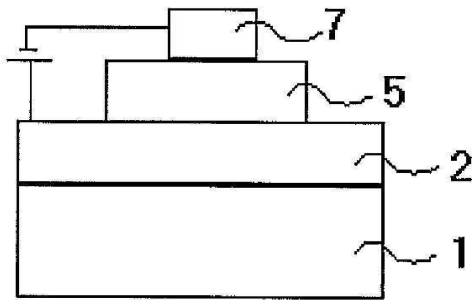
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	标题：有机发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020150137265A	公开(公告)日	2015-12-09
申请号	KR1020140064831	申请日	2014-05-29
[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 DONG WON 김동원		
发明人	현서용 정성욱 김동원		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/08 C07D403/14 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D209/08 C07D403/14 H01L51/50 C07F13/00 H05B33/14 C07D307/78 C07D471/04		
其他公开文献	KR101666826B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及用于有机电致发光器件的有机电致发光化合物，其特征在于由下式(1)表示，并且当其用作发光层中的磷光主体化合物时，可以实现有机电致发光器件。[化学式1]

