



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2015-0042387
(43) 공개일자 2015년04월21일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) C07D 401/14 (2006.01)
C07D 403/04 (2006.01) C07D 471/04 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2013-0120939

(22) 출원일자 2013년10월11일
심사청구일자 없음

(71) 출원인

에스에프씨 주식회사

충청북도 청원군 오창읍 과학산업5로 89

(72) 발명자

신봉기

전북 정읍시 용흥1길 15-25, 102동 803호 (상평동, 신흥장미아파트)

박부배

대구 북구 구암로 180, 102동 702호 (구암동, 칠곡동서영남아파트)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

정은열

전체 청구항 수 : 총 11 항

(54) 발명의 명칭 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

(57) 요약

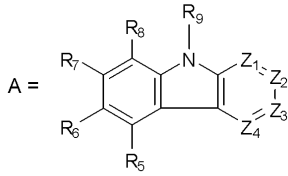
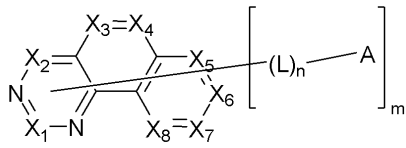
본 발명은 유기발광 화합물에 관한 것으로서, 하기 [화학식 1]로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 하며, 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 채용한 유기전계발광소자는 종래 인광 발광 호스트 재료를 채용한 소자에 비하여 보다 낮은 구동 전압이 가능하여 전력효율이 우수함과 동시에 발광 효율 및 장수명을 갖는다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1

80
70
60
50
40
30
20
10

[화학식 1]



(72) 발명자

박지희

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

이봉향

부산 강서구 대저로277번길 7-3, (대저1동)

박경화

강원도 춘천시 석사동 공지로 188-53

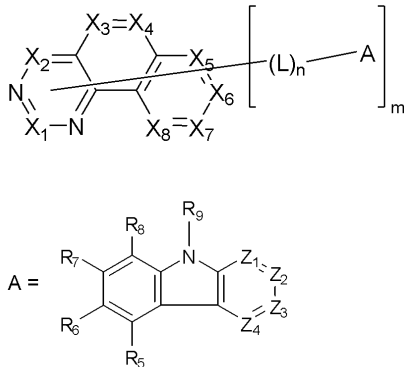
명세서

청구범위

청구항 1

하기 [화학식 1]로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

[화학식 1]



상기 [화학식 1]에서,

X₁ 내지 X₈는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 CR₀이고, 각각의 CR₀는 서로 동일하거나 상이하며,

Z₁ 내지 Z₄는 N 이거나 CR₁ 내지 CR₄이고,

L은 단일 결합이거나 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되며(n은 1 내지 3의 정수임),

상기 n이 2 이상인 경우 복수 개의 L은 서로 동일하거나 상이하고,

상기 R₀ 및 R₁ 내지 R₉는 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기, -SiR₁₁R₁₂R₁₃ 및 -NR₁₄R₁₅중에서 선택되며,

상기 A의 R₁ 내지 R₉는 중의 어느 하나가 상기 L과 연결되어 결합하고,

상기 R₁₁ 내지 R₁₅는 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환

또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기 중에서 선택되며,

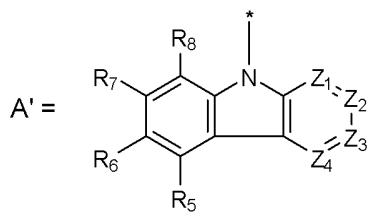
상기 R_0 , R_1 내지 R_9 및 이들의 치환기는 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있으며,

m 은 1 내지 3의 정수이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 A의 R_9 가 상기 L과 연결되어, 상기 A는 하기 A'인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:



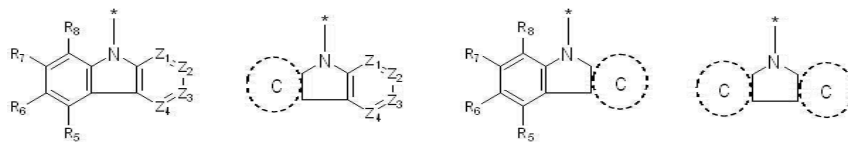
상기 A'에서,

Z_1 내지 Z_4 및 R_5 내지 R_8 은 상기 [화학식 1]에서의 R_1 내지 R_9 의 정의와 동일하고, [*]는 상기 L과 결합하는 사이트이다.

청구항 3

제2항에 있어서,

상기 A'는 하기 [화학식 A1] 내지 [화학식 A4] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:



[화학식 A1]

[화학식 A2]

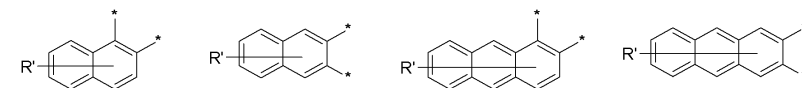
[화학식 A3]

[화학식 A4]

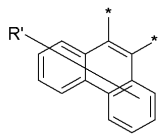
상기 [화학식 A1] 내지 [화학식 A4]에서,

Z_1 내지 Z_4 및 R_5 내지 R_8 은 상기 [화학식 1]에서의 정의와 동일하고,

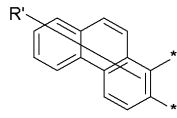
는 하기 C1 내지 C11 중에서 선택되는 어느 하나이며,



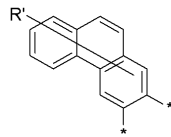
C1



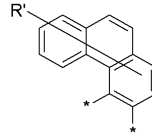
C2



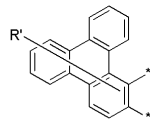
C3



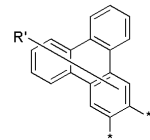
C4



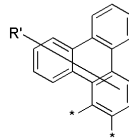
C5



C6



C7



C8

C9

C10

C11

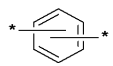
상기 C1 내지 C11 내의 [*]는 구조식에 결합하는 사이트를 의미하고, 상기 R'는 상기 [화학식 1]에서의 R₁ 내지 R₉의 정의와 동일하다.

청구항 4

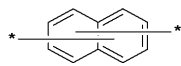
제1항에 있어서,

상기 L은 하기 [구조식 B1] 내지 [구조식 B14] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

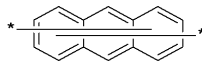
[구조식 B1]



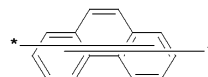
[구조식 B2]



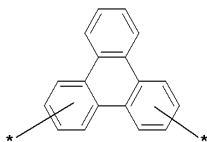
[구조식 B3]



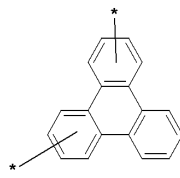
[구조식 B4]



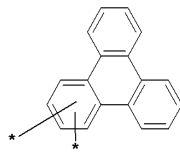
[구조식 B5]



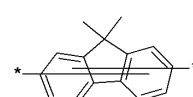
[구조식 B6]



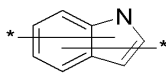
[구조식 B7]



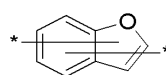
[구조식 B8]



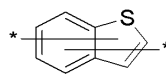
[구조식 B9]



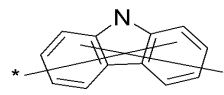
[구조식 B10]



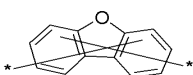
[구조식 B11]



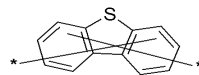
[구조식 B12]



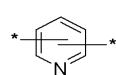
[구조식 B13]



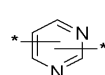
[구조식 B14]



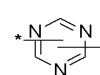
[구조식 B15]



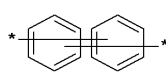
[구조식 B16]



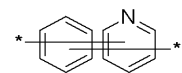
[구조식 B17]



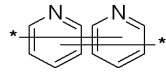
[구조식 B18]



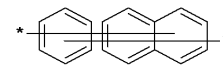
[구조식 B19]



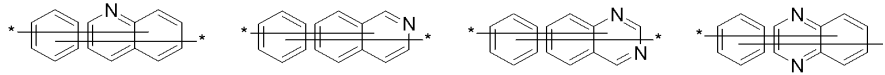
[구조식 B20]



[구조식 B21]



[구조식 B22] [구조식 B23] [구조식 B24] [구조식 B25]



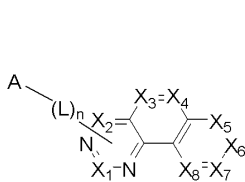
상기 [구조식 B1] 내지 [구조식 B25]에서,

각 구조식 내 방향족 고리의 탄소에는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있고, 각 구조식 내의 질소 자리에는 R이 결합될 수 있으며, 상기 R은 [화학식 1]에서의 R₁ 내지 R₉의 정의와 동일하다.

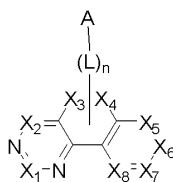
청구항 5

제1항에 있어서,

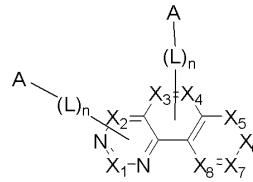
상기 [화학식 1]은 하기 [화학식 2] 내지 [화학식 8]로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:



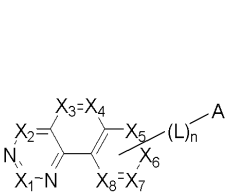
[화학식 2]



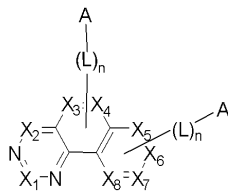
[화학식 3]



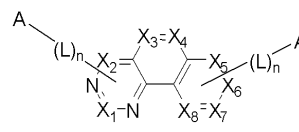
[화학식 4]



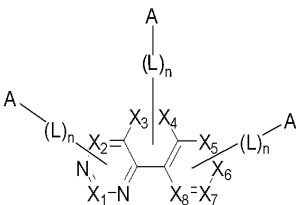
[화학식 5]



[화학식 6]



[화학식 7]



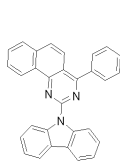
[화학식 8]

상기 [화학식 2] 내지 [화학식 8]에서, L, X₁ 내지 X₈, A 및 n의 정의는 상기 [화학식 1]에서의 정의와 동일하다.

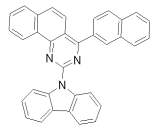
청구항 6

제1항에 있어서,

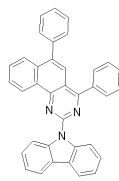
상기 [화학식 1]은 하기 [화합물 1] 내지 [화합물 65]로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:



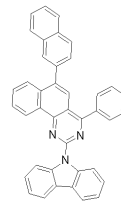
[화합물 1]



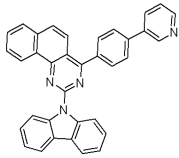
[화합물 2]



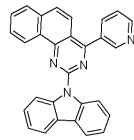
[화합물 3]



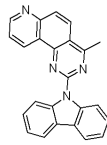
[화합물 4]



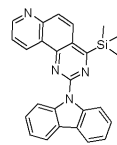
[화합물 5]



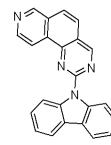
[화합물 6]



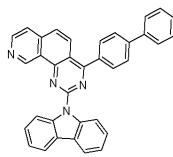
[화합물 7]



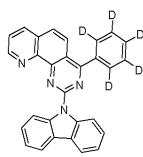
[화합물 8]



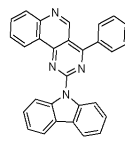
[화합물 9]



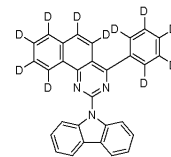
[화합물 10]



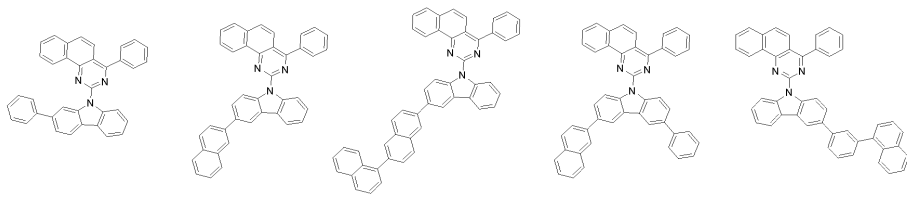
[화합물 11]



[화합물 12]



[화합물 13]



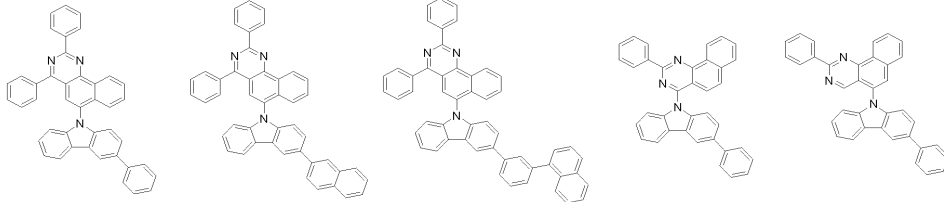
[화합물 14]

[화합물 15]

[화합물 16]

[화합물 17]

[화합물 18]



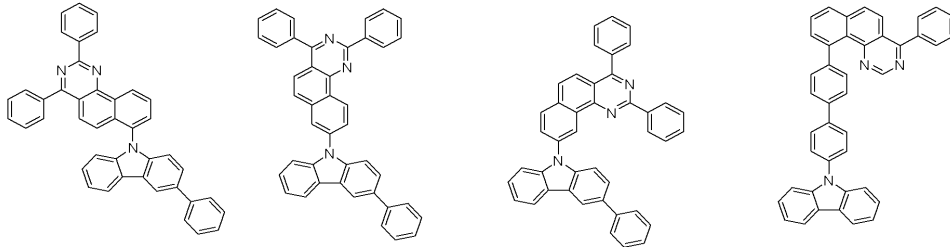
[화합물 19]

[화합물 20]

[화합물 21]

[화합물 22]

[화합물 23]

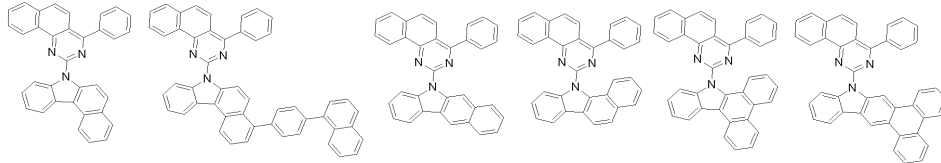


[화합물 24]

[화합물 25]

[화합물 26]

[화합물 27]



[화합물 28]

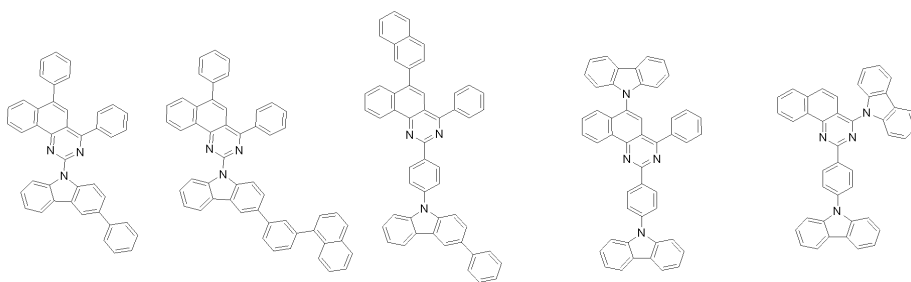
[화합물 29]

[화합물 30]

[화합물 31]

[화합물 32]

[화합물 33]



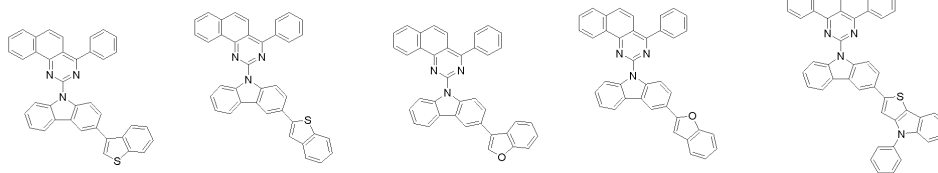
[화합물 34]

[화합물 35]

[화합물 36]

[화합물 37]

[화합물 38]



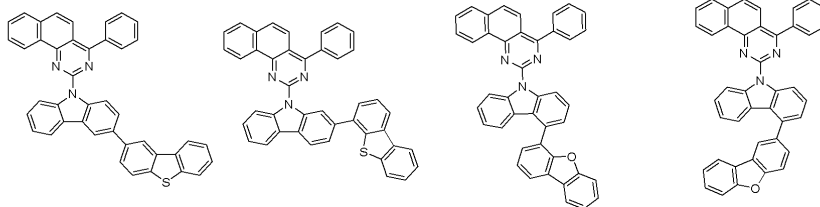
[화합물 39]

[화합물 40]

[화합물 41]

[화합물 42]

[화합물 43]

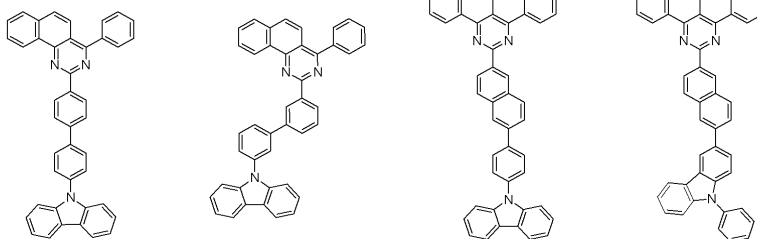


[화합물 44]

[화합물 45]

[화합물 46]

[화합물 47]

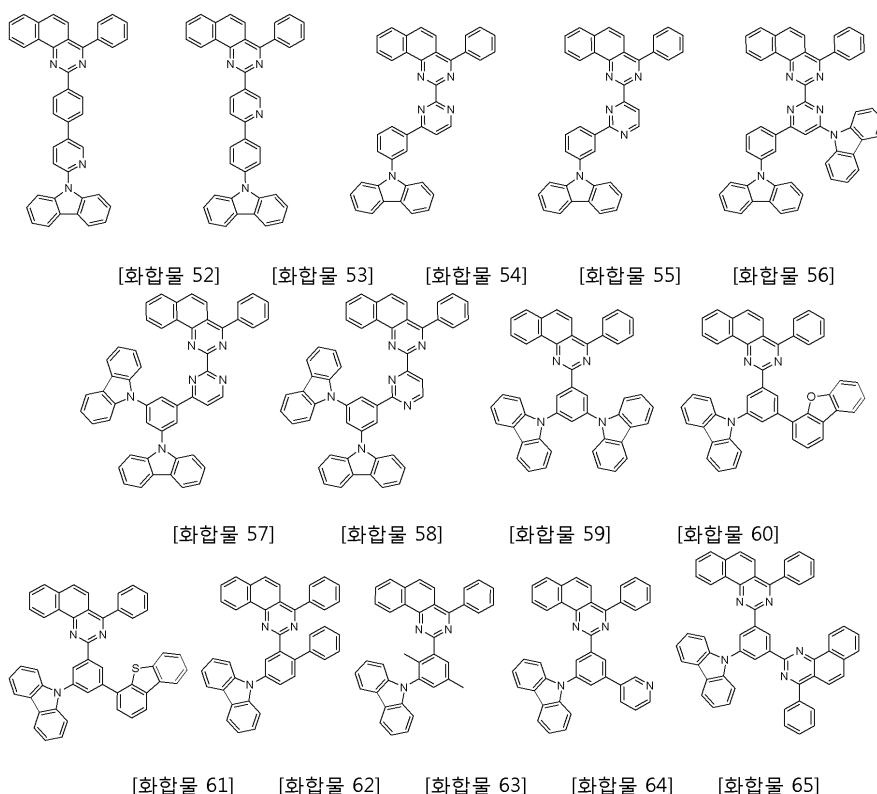


[화합물 48]

[화합물 49]

[화합물 50]

[화합물 51]



청구항 7

제1 전극; 제2 전극 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기층;으로 이루어지고,
상기 유기층은 제1항에 따른 [화합식 1]의 유기발광 화합물을 하나 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

청구항 8

제7항에 있어서,

상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중에서 선택되는 1층 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 9

제7항에 있어서,

상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 개재된 유기층이 발광층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 10

제9항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 화합물과 도판트 화합물로 이루어지고, 상기 제1항에 따른 [화합식 1]의 유기발광 화합물이 호스트로 사용되며,

상기 발광층은 도판트 화합물을 하나 이상을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 11

제7항에 있어서,

상기 유기층에 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 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

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

[0003] 유기전계발광소자는 전자 주입 전극(음극)과 정공 주입 전극(양극) 사이에 형성된 유기 발광층에 전하를 주입하면 전자와 정공이 쌍을 이룬 후 소멸하면서 빛을 내는 소자로서, 플라스틱 같이 휘 수 있는 투명 기판 위에도 소자를 형성할 수 있을 뿐 아니라, 플라즈마 디스플레이 패널이나 무기전계 발광 디스플레이에 비해 10 V 이하의 낮은 전압에서 구동이 가능하고, 전력 소모가 비교적 적으며, 색감이 뛰어나다는 장점이 있다. 또한, 유기전계발광소자는 녹색, 청색, 적색의 3 가지 색을 나타낼 수가 있어 차세대 풍부한 색 디스플레이 소자로 많은 관심의 대상이 되고 있다.

[0004] 유기전계발광소자에서 발광효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 발광 메커니즘 상 인광 재료의 개발이 이론적으로 발광 효율을 보다 개선시킬 수 있는 방법 중의 하나이고, 이에 따라 현재까지 다양한 인광 재료에 대해서 개발이 이루어지고 있으며, 특히 인광 발광 호스트 재료로는 현재까지 CBP(4,4'-N,N'-dicarbazolbiphenyl)가 가장 널리 알려져 있고, 카바졸에 다양한 치환기가 도입된 물질들이 (일본 특허공개 2008-214244, 일본 특허공개 2003-133075) 또는 BALq 유도체를 호스트로 이용한 유기전계발광소자가 공지되어 있다.

[0005] 그러나, 인광 발광 재료를 사용한 유기전계발광소자는 형광 발광 재료를 사용한 소자에 비해 전류 효율이 상당히 높으나, 인광 발광 재료의 호스트로 BALq, CBP 등의 재료를 사용할 경우, 형광재료를 사용한 소자에 비해 구동 전압이 높아서 전력 효율면에서 큰 이점이 없고, 또한, 소자의 수명 측면에서도 만족할만한 수준이 되질 못하여 더욱 안정적이고, 고성능의 호스트 재료의 개발이 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

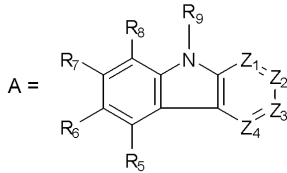
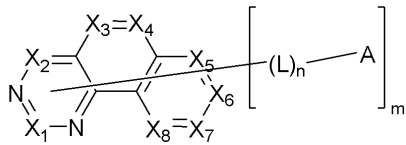
[0006] 따라서, 본 발명이 해결하고자 하는 과제는 상기 문제점을 해결하고자 하는 것으로서, 종래 재료보다 발광 효율이 우수하면서도 동시에 향상된 전력효율과 장수명 특성을 갖는 유기발광 화합물을 제공하는 것이다.

[0007] 또한, 본 발명은 상기 유기발광 화합물을 발광 재료로 채용하여 저전압 구동, 고효율 및 장수명의 유기전계발광소자를 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0008] 본 발명은 상기 과제를 해결하기 위하여, [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 제공하고, 상기 유기발광 화합물을 최소한 1개 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자를 제공한다.

[0009] [화학식 1]



[0010]

[0011] 상기 [화학식 1]의 각 치환기에 대해서는 후술한다.

[0012] 또한, 상기 유기전계발광소자는 제1 전극, 제2 전극 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기층으로 이루어져 있으며, 상기 유기층은 상기 유기발광 화합물을 최소한 1개 이상 포함할 수 있다.

[0013] 또한, 상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중에서 선택되는 하나 이상을 포함할 수 있다.

[0014] 또한, 상기 유기발광 화합물은 호스트로 사용되고, 상기 유기층은 도펀트 화합물을 하나 이상 더 포함할 수 있다.

[0015] 또한, 청색, 적색 또는 녹색 발광을 하는 유기 발광층을 하나 더 이상 포함하여 백색 발광을 하는 유기전계발광 소자일 수 있다.

발명의 효과

[0016] 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 채용한 유기전계발광소자는 종래 인광 발광 호스트 재료를 채용한 소자에 비하여 보다 낮은 구동 전압이 가능하여 전력효율이 우수함과 동시에 발광 효율 및 장수명을 갖는다.

도면의 간단한 설명

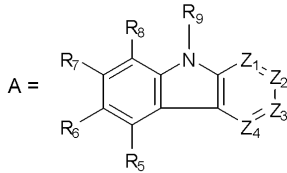
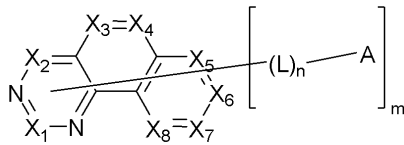
[0017] 도 1은 본 발명의 일 구현예에 따른 다층 구조의 유기전계발광소자를 나타낸 개념도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0018] 이하, 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다.

[0019] 본 발명의 일 측면은 하기 [화학식 1-1] 내지 [화학식 1-4]로 표시되는 유기발광 화합물에 관한 것이다.

[0020] [화학식 1]



[0021]

[0022] 상기 [화학식 1]에서,

[0023] X_1 내지 X_8 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 CR_0 이고, 각각의 CR_0 는 서로 동일하거나 상이하다.

[0024] Z_1 내지 Z_4 는 N 이거나 CR_1 내지 CR_4 이다.

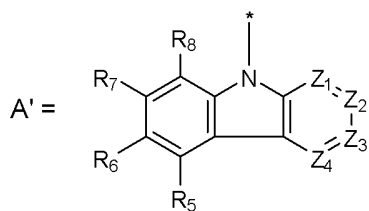
[0025] L은 연결기로서, 단일 결합이거나 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되고(n 은 1 내지 3의 정수임), 상기 n 이 2 이상인 경우 복수 개의 L은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0026] 상기 R_0 및 R_1 내지 R_9 는 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기, $-SiR_{11}R_{12}R_{13}$ 및 $-NR_{14}R_{15}$ 중에서 선택된다.

[0027] 상기 R_{11} 내지 R_{15} 는 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기 중에서 선택되며, 상기 R_0 , R_1 내지 R_9 및 이들의 치환기는 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

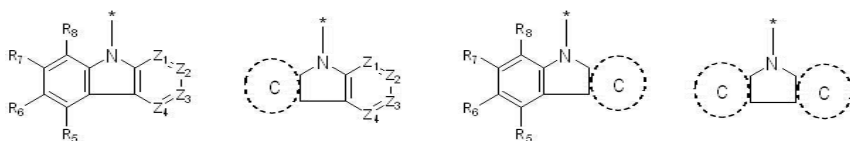
[0028] m 은 1 내지 3의 정수이다.

[0029] 상기 A의 R_1 내지 R_9 는 중의 어느 하나가 상기 L과 연결되어 결합할 수 있고, 본 발명의 바람직한 실시예에 의하면, 상기 A의 R_9 가 상기 L과 연결되어, 상기 A는 하기 A'일 수 있다.



상기 A'에서, Z₁ 내지 Z₄ 및 R₅ 내지 R₈은 상기 [화학식 1]에서의 R₁ 내지 R₉의 정의와 동일하고, [*]는 상기 L과 결합하는 사이트이다.

또한, 상기 A'는 보다 구체적으로 [화학식 A1] 내지 [화학식 A4] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.



[화학식 A1]

[화학식 A2]

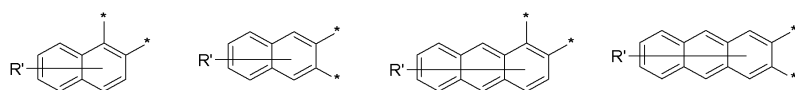
[화학식 A3]

[화학식 A4]

상기 [화학식 A1] 내지 [화학식 A4]에서, Z₁ 내지 Z₄ 및 R₅ 내지 R₈은 상기 [화학식 1]에서의 정의와 동일하고,



는 하기 C1 내지 C11 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

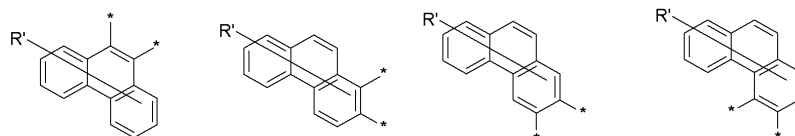


C1

C2

C3

C4

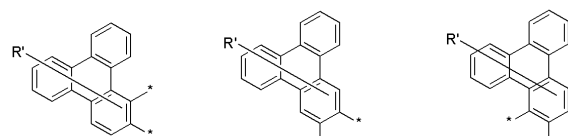


C5

C6

C7

C8



C9

C10

C11

상기 C1 내지 C11 내의 [*]는 구조식에 결합하는 사이트를 의미하고, 상기 R'는 상기 [화학식 1]에서의 R₁ 내지 R₉의 정의와 동일하다.

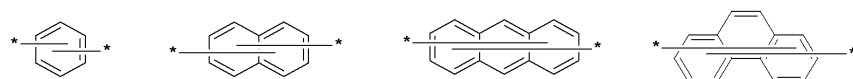
또한, 상기 L은 보다 구체적으로 단일결합이거나 하기 [구조식 B1] 내지 [구조식 B25] 중에서 선택되는 어느 하나의 연결기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[구조식 B1]

[구조식 B2]

[구조식 B3]

[구조식 B4]



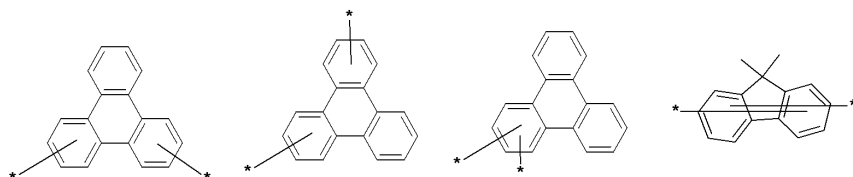
[0046]

[구조식 B5]

[구조식 B6]

[구조식 B7]

[구조식 B8]



[0047]

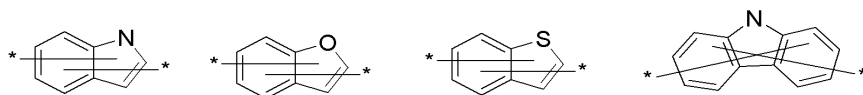
[0048]

[구조식 B9]

[구조식 B10]

[구조식 B11]

[구조식 B12]



[0049]

[0050]

[구조식 B13]

[구조식 B14]

[구조식 B15]

[구조식 B16]

[구조식 B17]



[0051]

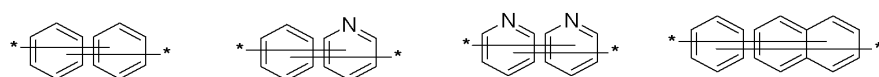
[0052]

[구조식 B18]

[구조식 B19]

[구조식 B20]

[구조식 B21]



[0053]

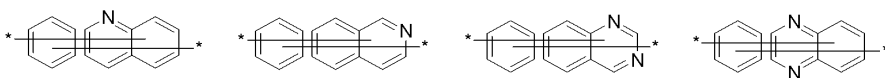
[0054]

[구조식 B22]

[구조식 B23]

[구조식 B24]

[구조식 B25]



[0055]

[0056]

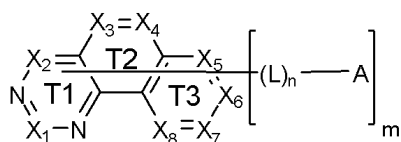
상기 [구조식 B1] 내지 [구조식 B25]에서, 각 구조식 내 방향족 고리의 탄소에는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있고, 각 구조식 내의 질소 자리에는 R이 결합될 수 있으며, 상기 R은 [화학식 1]에서의 R₁ 내지 R₉의 정의와 동일하다.

[0057]

또한, 본 발명에 따른 [화학식 1]은 $*(L)_n-A$ 이 연결되는 위치에 따라서 다양한 구조를 가질 수 있고, 상기 [화학식 1]은 하기 [화학식 1-1]로 표시될 수 있다.

[0058]

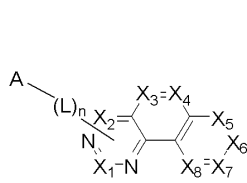
[화학식 1-1]



[0059]

[0060]

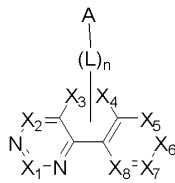
상기 [화학식 1-1]에서, T1에 연결되는 경우는 하기 [화학식 2]로 표시되고, T2에 연결되는 경우는 [화학식 3]으로 표시되고, T1과 T2에 각각 연결되는 경우는 하기 [화학식 3]으로 표시되고, T3에 연결되는 경우는 하기 [화학식 5]로 표시되고, T2와 T3에 각각 연결되는 경우는 하기 [화학식 6]으로 표시되고, T1과 T3에 각각 연결되는 경우는 하기 [화학식 7]로 표시되고, T1, T2 및 T3에 각각 연결되는 경우는 하기 [화학식 8]로 표시된다.



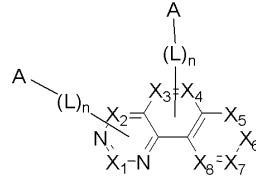
[0061]

[0062]

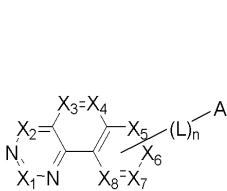
[화학식 2]



[화학식 3]



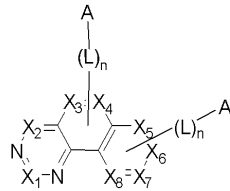
[화학식 4]



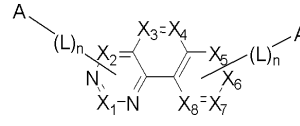
[0063]

[0064]

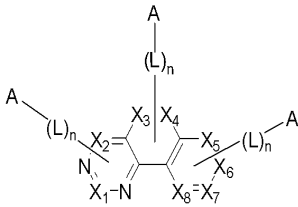
[화학식 5]



[화학식 6]



[화학식 7]



[0065]

[0066]

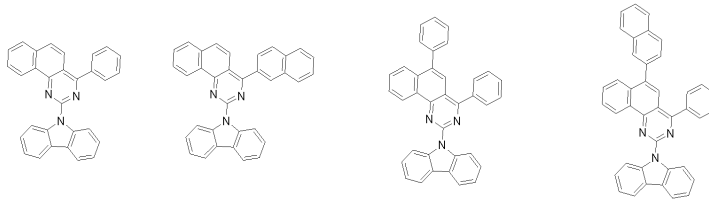
[화학식 8]

[0067]

상기 [화학식 2] 내지 [화학식 8]에서, L, X₁ 내지 X₈, A 및 n의 정의는 상기 [화학식 1]에서의 정의와 동일하다.

[0068]

본 발명의 바람직한 일 구현예에 의하면, 상기 [화학식 1]에 따른 본 발명의 유기발광 화합물은 보다 구체적으로 하기 [화합물 1] 내지 [화합물 65]로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 것일 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

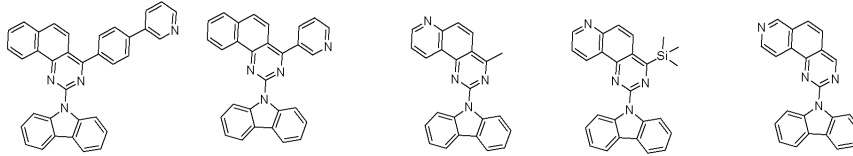


[화합물 1]

[화합물 2]

[화합물 3]

[화합물 4]



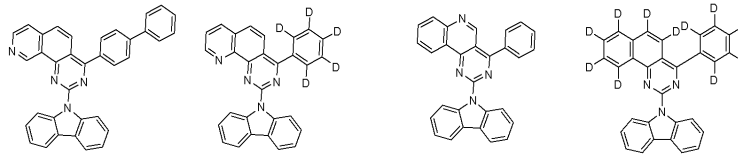
[화합물 5]

[화합물 6]

[화합물 7]

[화합물 8]

[화합물 9]



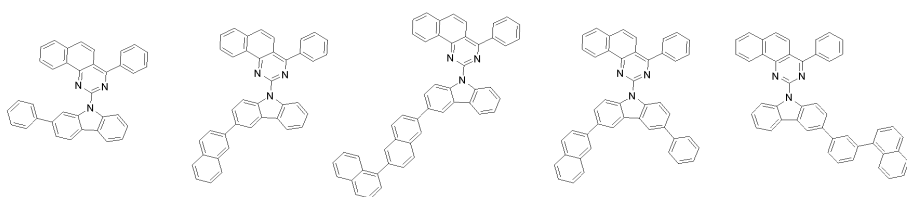
[화합물 10]

[화합물 11]

[화합물 12]

[화합물 13]

[0069]



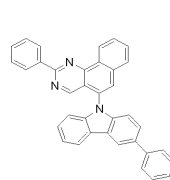
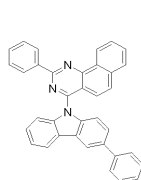
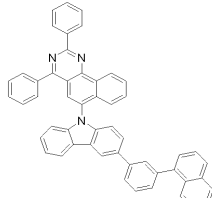
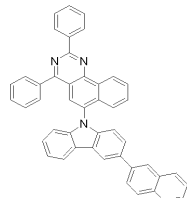
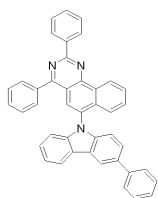
[화합물 14]

[화합물 15]

[화합물 16]

[화합물 17]

[화합물 18]



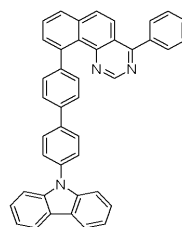
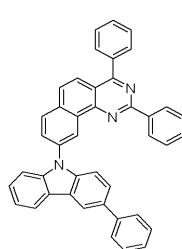
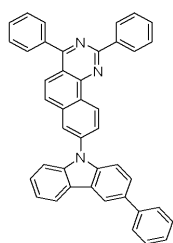
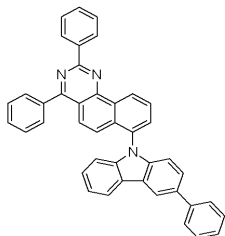
[화합물 19]

[화합물 20]

[화합물 21]

[화합물 22]

[화합물 23]

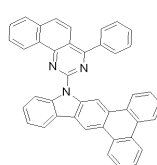
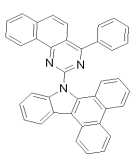
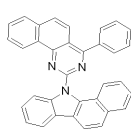
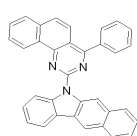
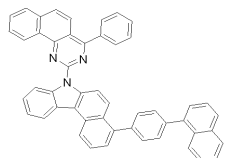
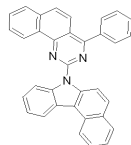


[화합물 24]

[화합물 25]

[화합물 26]

[화합물 27]



[화합물 28]

[화합물 29]

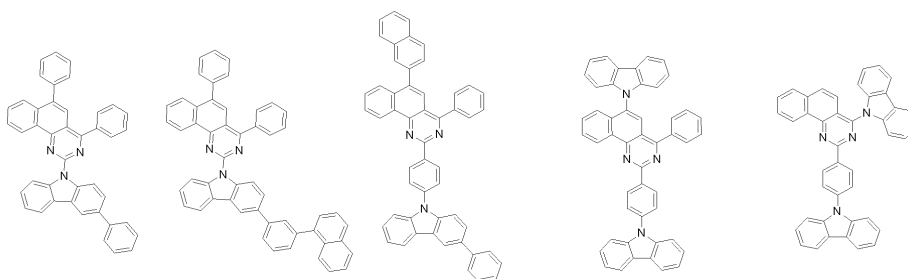
[화합물 30]

[화합물 31]

[화합물 32]

[화합물 33]

[0070]



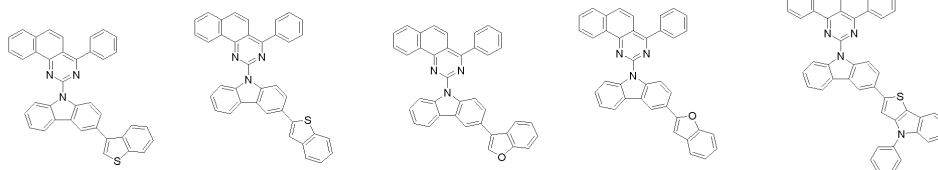
[화합물 34]

[화합물 35]

[화합물 36]

[화합물 37]

[화합물 38]



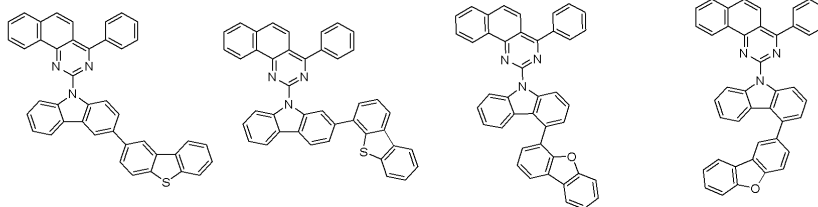
[화합물 39]

[화합물 40]

[화합물 41]

[화합물 42]

[화합물 43]

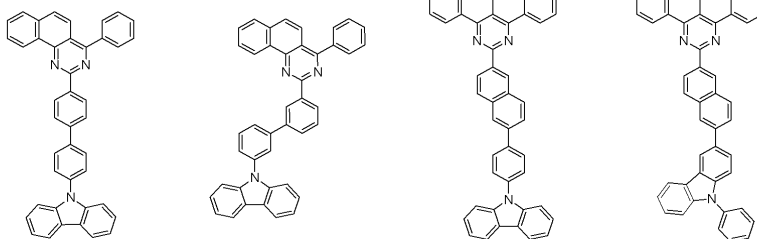


[화합물 44]

[화합물 45]

[화합물 46]

[화합물 47]



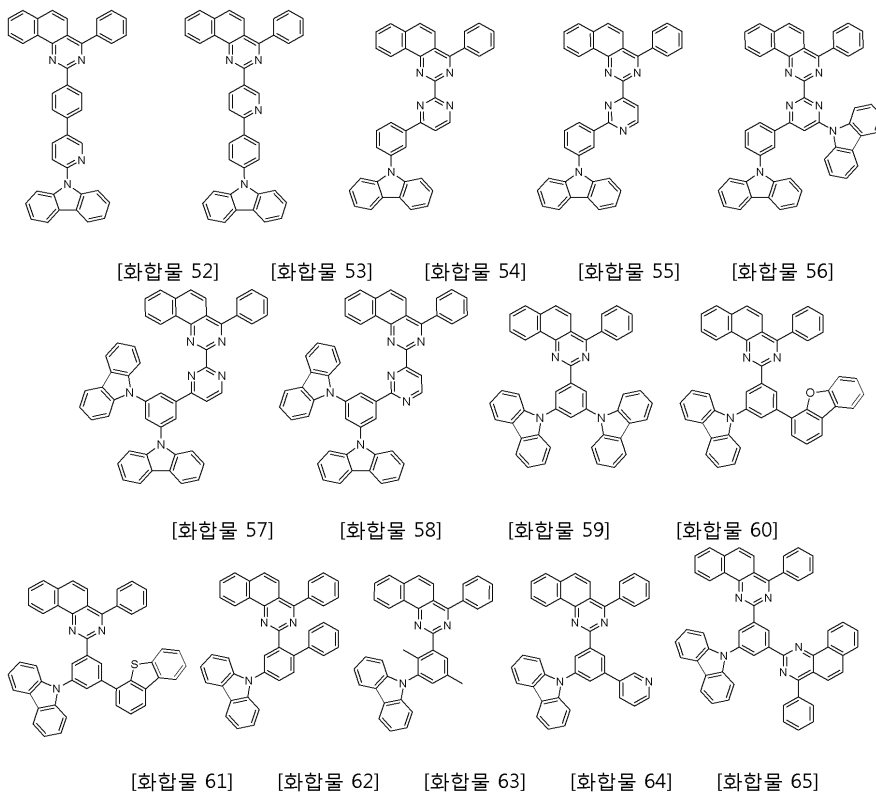
[화합물 48]

[화합물 49]

[화합물 50]

[화합물 51]

[0071]



[0072]

[0073]

또한, 본 발명의 다른 일 측면은 제1 전극, 제2 전극 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기층으로 이루어진 유기전계발광소자에 관한 것으로서, 상기 유기층에 상기 [화합식 1]로 표시되는 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 최소한 1 개 이상 포함할 수 있다.

[0074]

또한, 상기 본 발명의 유기발광 화합물이 포함된 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0075]

이때, 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층이 발광층을 포함할 수 있으며, 상기 발광층은 호스트와 도판트로 이루어지고, 본 발명의 유기발광 화합물은 호스트로서 사용될 수 있다.

[0076]

한편, 본 발명에서 상기 발광층에는 호스트와 더불어 도판트 재료가 사용될 수 있다. 상기 발광층이 호스트 및 도판트를 포함할 경우, 도판트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 20 중량부의 범위에서 선택될 수 있다.

[0077]

이하, 본 발명에 따른 유기전계발광소자의 일 실시예를 하기 도 1을 통해 보다 상세히 설명하고자 한다.

[0078]

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

[0079]

도 1을 참조하여 본 발명의 유기전계발광소자 및 그 제조방법에 대하여 살펴보면 다음과 같다.

[0080]

먼저 기판(10) 상부에 애노드 전극용 물질을 코팅하여 애노드(20)를 형성한다. 여기에서 기판(10)으로는 통상적인 유기전계발광소자에서 사용되는 기판을 사용하는데 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 및 방수성이 우수한 유기 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 그리고, 애노드 전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 사용한다.

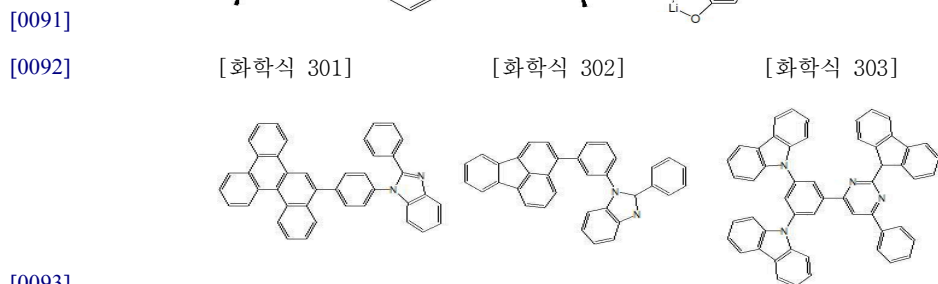
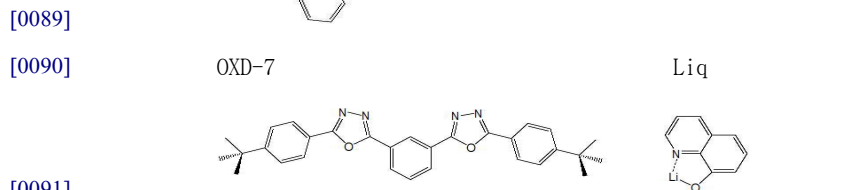
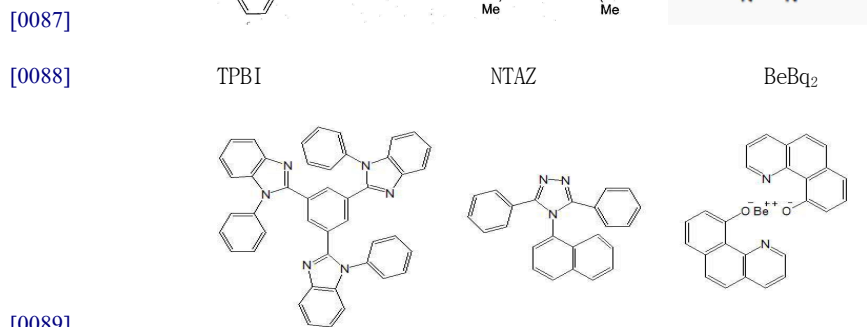
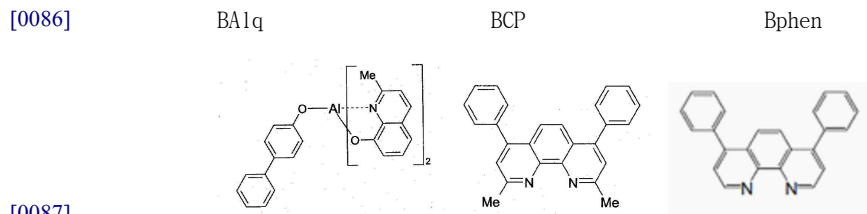
[0081] 상기 애노드(20) 전극 상부에 정공 주입층 물질을 진공열 증착 또는 스핀 코팅하여 정공주입층(30)을 형성한다. 그 다음으로 상기 정공주입층(30)의 상부에 정공수송층 물질을 진공 열증착 또는 스핀 코팅하여 정공수송층(40)을 형성한다.

[0082] 상기 정공주입층 재료는 당업계에서 통상적으로 사용되는 것이라면, 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있으며, 구체적인 예시로서, 2-TNATA[4,4',4"-tris(2-naphthylphenyl-phenylamino)-triphenylamine], NPD[N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine]], TPD[N,N'-diphenyl-N,N'-bis(3-methylphenyl)-1,1'-biphenyl-4,4'-diamine], DNTPD[N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine] 등을 사용할 수 있다.

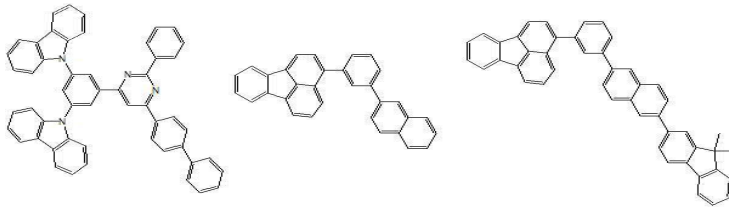
[0083] 또한, 상기 정공수송층의 재료로서 당업계에 통상적으로 사용되는 것이라면, 특별히 제한되지 않으며, 예를 들어, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD) 또는 N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐벤지딘(α -NPD) 등을 사용할 수 있다.

[0084] 이어서, 상기 정공수송층(40)의 상부에 유기발광층(50)을 적층하고 상기 유기발광층(50)의 상부에 선택적으로 정공저지층(미도시)을 진공 증착 방법, 또는 스핀 코팅 방법으로서 박막을 형성할 수 있다. 상기 정공저지층은 정공이 유기발광층을 통과하여 캐소드로 유입되는 경우에는 소자의 수명과 효율이 감소되기 때문에 HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital) 레벨이 매우 낮은 물질을 사용함으로써 이러한 문제를 방지하는 역할을 한다. 이 때, 사용되는 정공 저지 물질은 특별히 제한되지는 않으나 전자수송능력을 가지면서 발광 화합물보다 높은 이온화 포텐셜을 가져야 하며 대표적으로 BA1q, BCP, TPBI 등이 사용될 수 있다.

[0085] 상기 정공저지층에 사용되는 물질로서, BA1q, BCP, Bphen, TPBI, NTAZ, BeBq₂, OXD-7, Liq 및 [화학식 301] 내지 [화학식 307] 중에서 선택되는 어느 하나가 사용될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

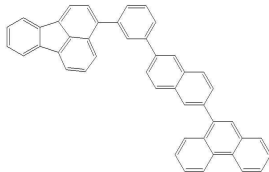


[0094] [화학식 304] [화학식 305] [화학식 306]



[0095]

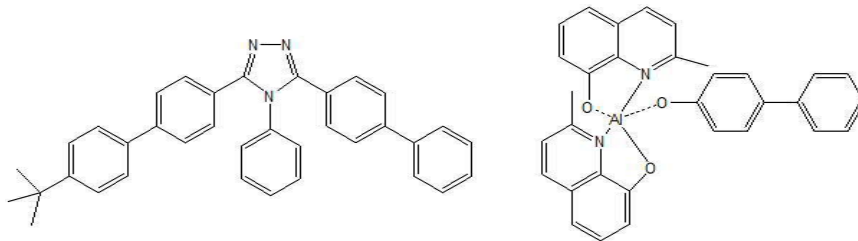
[0096] [화학식 307]



[0097]

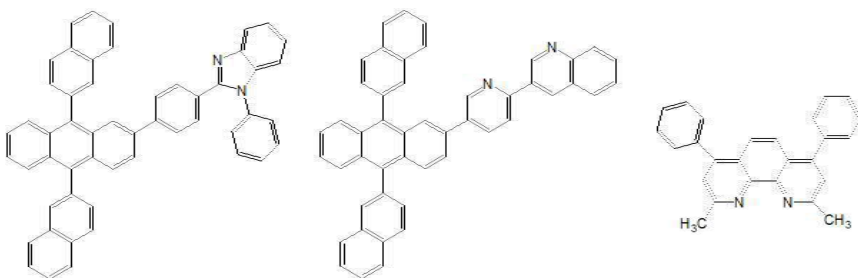
[0098] 이러한 정공저지층 위에 전자수송층(60)을 진공 증착 방법, 또는 스핀 코팅 방법을 통해 증착한 후에 전자주입층(70)을 형성하고 상기 전자주입층(70)의 상부에 캐소드 형성용 금속을 진공 열증착하여 캐소드(80) 전극을 형성함으로써 유기 EL 소자가 완성된다. 여기에서 캐소드 형성용 금속으로는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 사용할 수 있으며, 전면 발광 소자를 얻기 위해서는 ITO, IZO를 사용한 투과형 캐소드를 사용할 수 있다.

[0099] 상기 전자 수송층 재료로는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 공지의 전자 수송 물질을 이용할 수 있다. 공지의 전자 수송 물질의 예로는, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq3), TAZ, Balq, 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: Bebq2), ADN, [화학식 401], [화학식 402], 옥사디아졸 유도체인 PBD, BMD, BND 등과 같은 재료를 사용할 수도 있다.



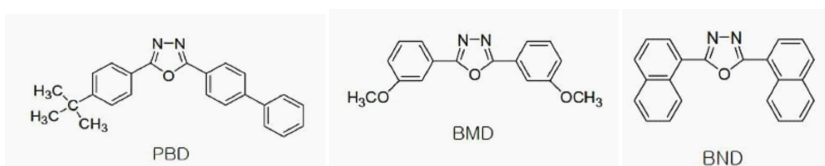
[0100]

[0101] TAZ Balq



[0102]

[0103] [화합물 401] [화합물 402] BCP



[0104]

[0105] 또한, 본 발명에서 사용되는 전자 수송층은 하기 [화학식 C]로 표시되는 유기 금속 화합물이 단독 또는 상기 전자수송층 재료와 혼합으로 사용될 수 있다.

[0106] [화학식 C]

[0107] $Y_m-M-(OA)_n$

[0108] 상기 [화학식 C]에서,

[0109] Y는 C, N, O 및 S에서 선택되는 어느 하나가 상기 M에 직접 결합되어 단일결합을 이루는 부분과, C, N, O 및 S에서 선택되는 어느 하나가 상기 M에 배위결합을 이루는 부분을 포함하며, 상기 단일결합과 배위결합에 의해 킬레이트된 리간드이다. M은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 알루미늄(Al) 또는 붕소(B)원자이다.

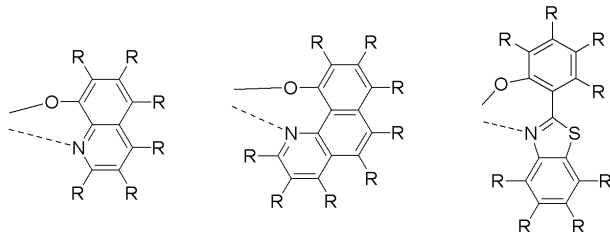
[0110] OA는 상기 M과 단일결합 또는 배위결합 가능한 1가의 리간드로서, 상기 O는 산소이며, 상기 A는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기 및 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택되는 어느 하나이다.

[0111] 또한, 상기 M이 알칼리 금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는 $m=1$, $n=0$ 이고, 상기 M이 알칼리 토금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는 $m=1$, $n=1$ 이거나, 또는 $m=2$, $n=0$ 이고, 상기 M이 붕소 또는 알루미늄인 경우에는 $m=1$ 내지 3중 어느 하나이며, n 은 0 내지 2 중 어느 하나로서 $m+n=3$ 을 만족한다.

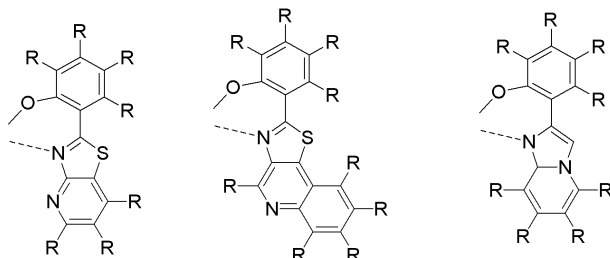
[0112] 상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 알킬기, 알콕시기, 알킬아미노기, 아릴아미노기, 헤테로 아릴아미노기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 아릴옥시기, 아릴기, 헤테로아릴기, 게르마늄, 인 및 보론으로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

[0113] 또한, 상기 Y는 각각 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 하기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C39]부터 선택되는 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0114] [구조식 C1] [구조식 C2] [구조식 C3]



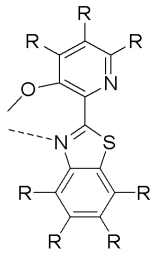
[0115] [구조식 C4] [구조식 C5] [구조식 C6]



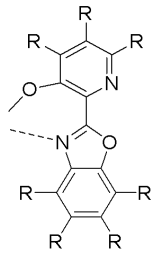
[0117]

[0118]

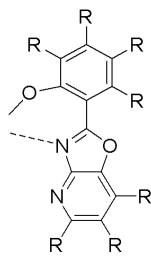
[구조식 C7]



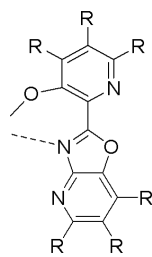
[구조식 C8]



[구조식 C9]



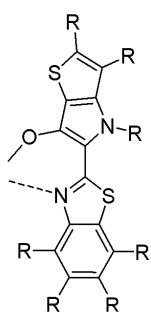
[구조식 C10]



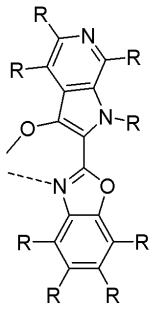
[0119]

[0120]

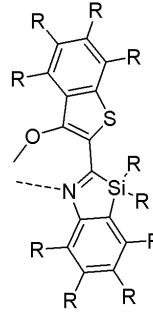
[구조식 C11]



[구조식 C12]



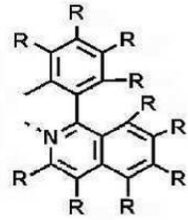
[구조식 C13]



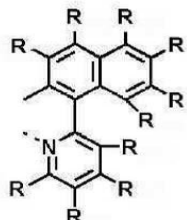
[0121]

[0122]

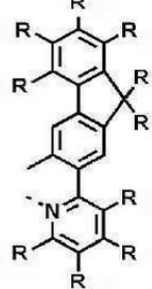
[구조식 C14]



[구조식 C15]



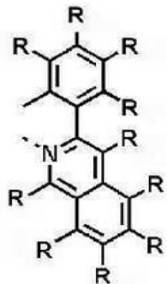
[구조식 C16]



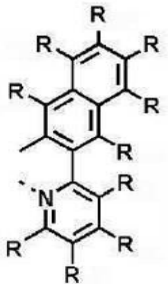
[0123]

[0124]

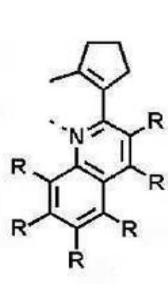
[구조식 C17]



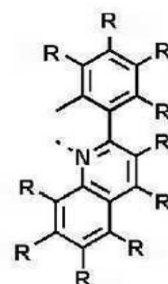
[구조식 C18]



[구조식 C19]



[구조식 C20]



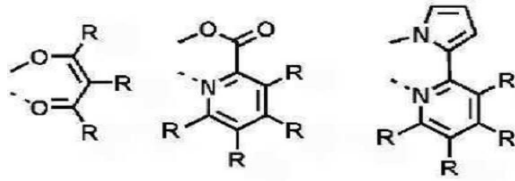
[0125]

[0126]

[구조식 C21]

[구조식 C22]

[구조식 C23]



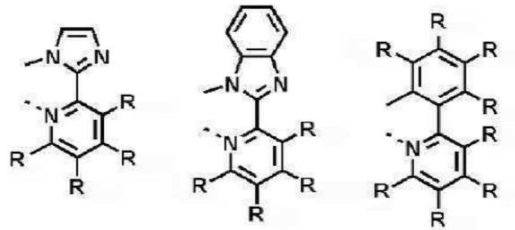
[0127]

[0128]

[구조식 C24]

[구조식 C25]

[구조식 C26]



[0129]

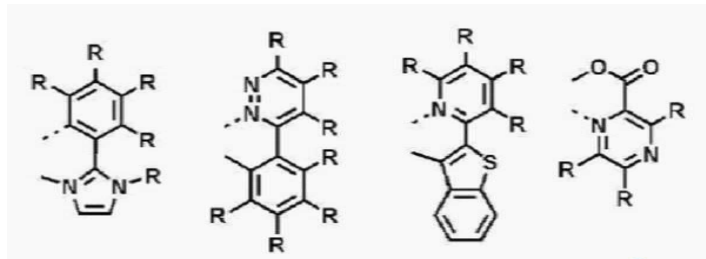
[0130]

[구조식 C27]

[구조식 C28]

[구조식 C29]

[구조식 C30]



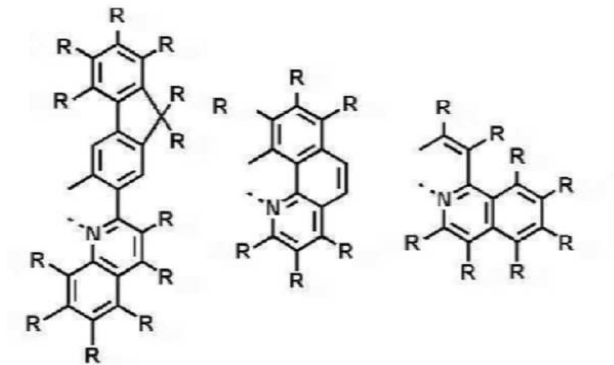
[0131]

[0132]

[구조식 C31]

[구조식 C32]

[구조식 C33]



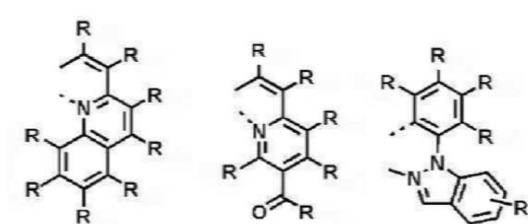
[0133]

[0134]

[구조식 C34]

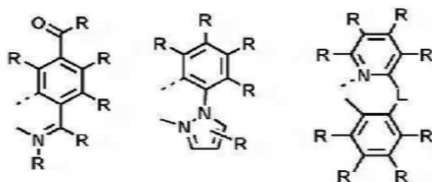
[구조식 C35]

[구조식 C36]



[0135]

[0136] [구조식 C37] [구조식 C38] [구조식 C39]



[0137]

[0138] 상기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C39]에서,

[0139] R은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 중에서 선택되고, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로고리 또는 융합고리를 형성할 수 있다.

[0140] L은 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알킬기 중에서 선택되고, 상기 L은 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기, 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 헤테로아릴기, 시아노기, 할로젠기, 중수소 및 수소 중에서 선택되는 1종 이상의 치환기로 더 치환되며, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로고리 또는 융합고리를 형성할 수 있다.

[0141] 또한, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 상기 유기층이 발광층을 포함하며, 상기 발광층은 상기 [화학식 1]로 표시되는 하나 이상의 유기발광 화합물 이외에 하나 이상의 인광 도펀트를 더 포함하는 것을 특징으로 하며, 본 발명의 유기전계발광소자에 적용되는 발광 도펀트는 특별히 제한되지는 않으나, 하기 [일반식 A-1] 내지 [일반식 J-1]으로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 1종 이상의 화합물일 수 있다.

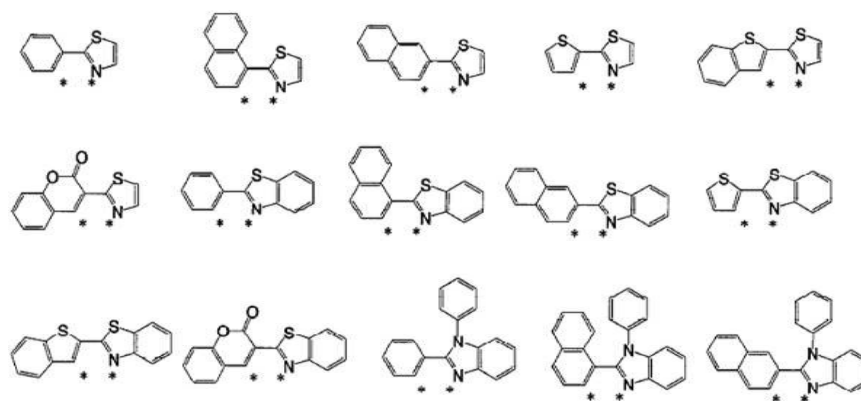
[0142] [일반식 A-1]

[0143] $ML_1L_2L_3$

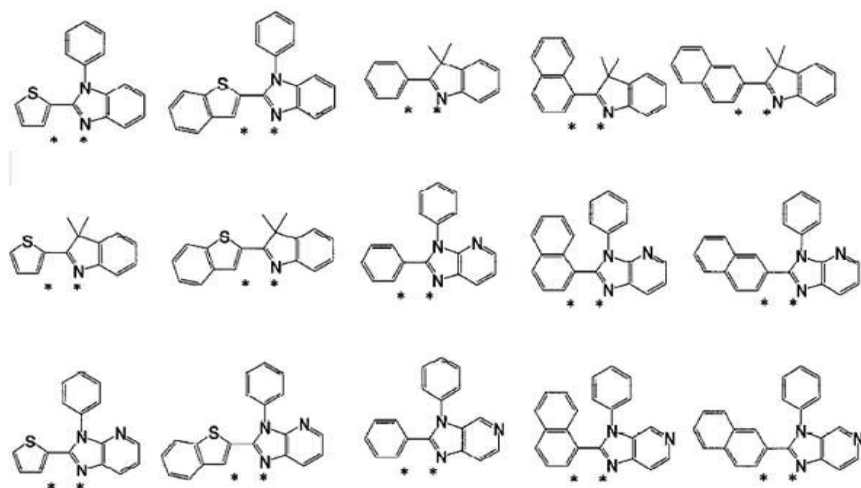
[0144] 상기 M은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 바람직하게는 Ir, Pt, Pd, Rh, Re, Os, Tl, Pb, Bi, In, Sn, Sb, Te, Au 및 Ag로부터 선택된다. 또한, 상기 L_1 , L_2 및 L_3 는 리간드로 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 하기 [구조식 D]에서 선택되는 어느 하나를 들 수 있지만, 이에 한정되는 것은 아니다. 또한, 하기 [구조식 D]내 *은 금속 이온 M에 결합하는 사이트(site)를 표현한다.

Figure 1 displays 15 chemical structures of organic molecules used in the study. The molecules are arranged in three rows of five. Each molecule has a '+' sign indicating a specific site of interest. The molecules include various combinations of benzene, pyridine, thiophene, and fused ring systems like naphthalene and indole.

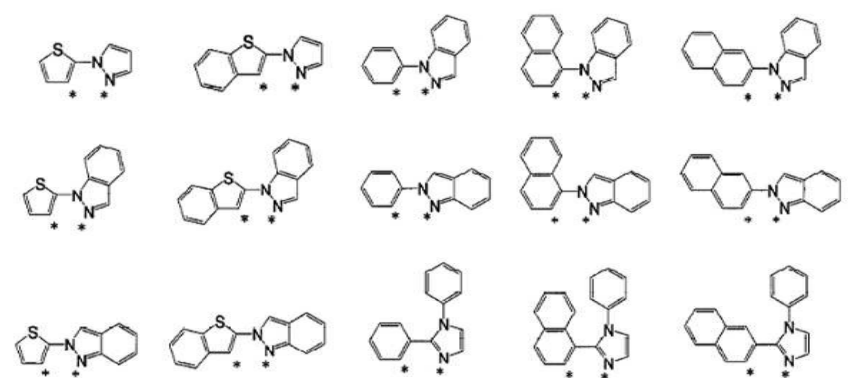
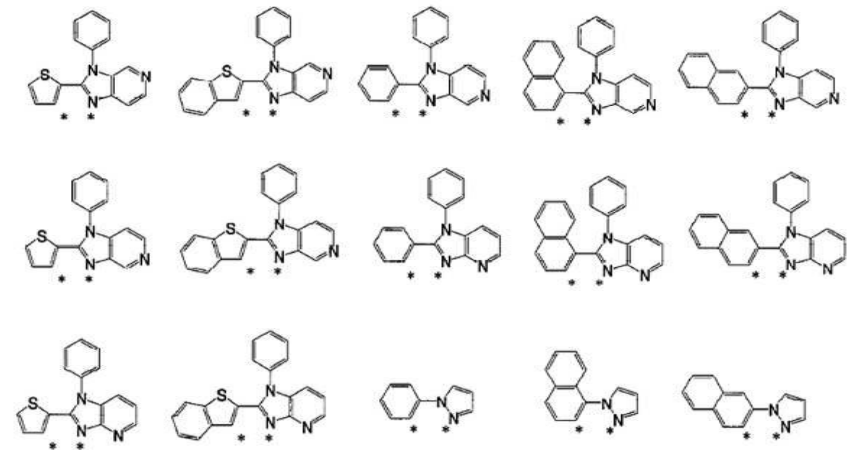
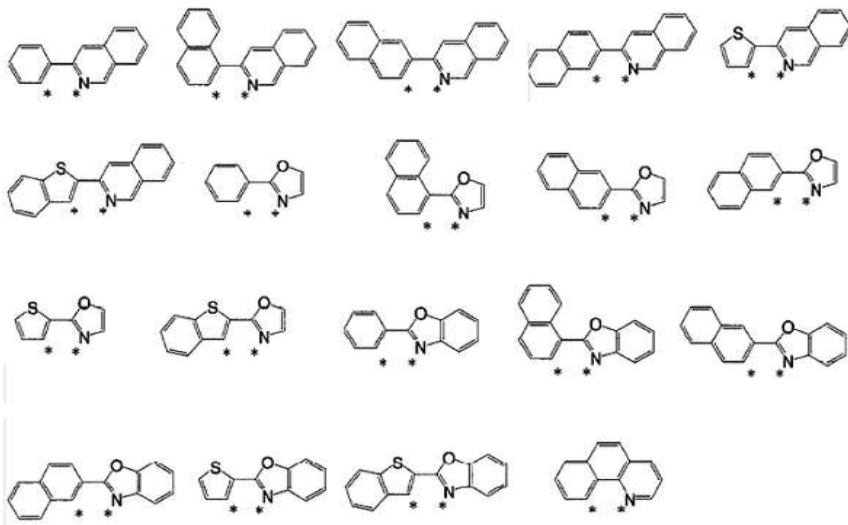
[0146]

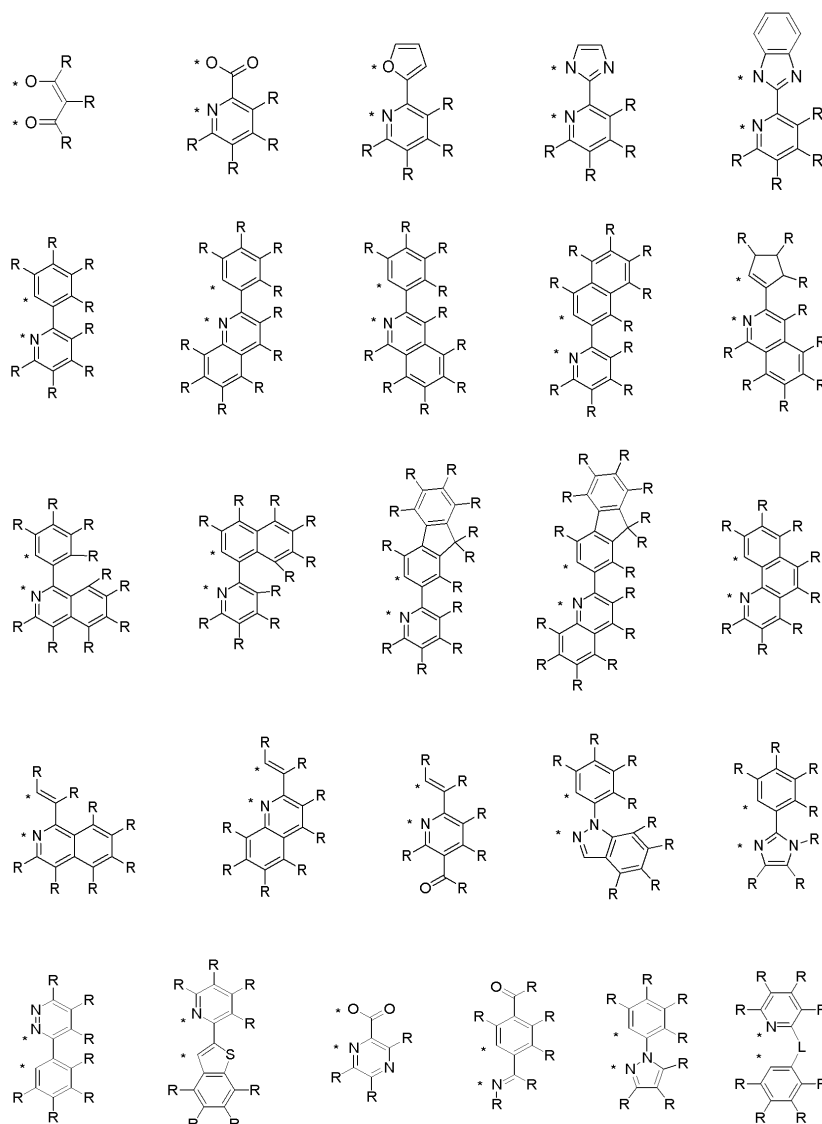


[0147]



[0148]





상기 [구조식 D]에서,

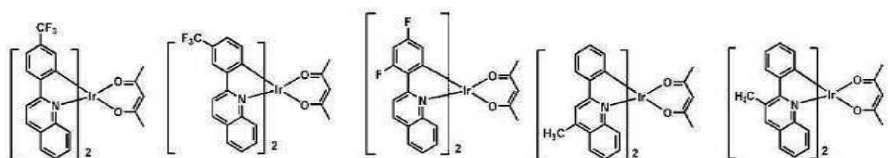
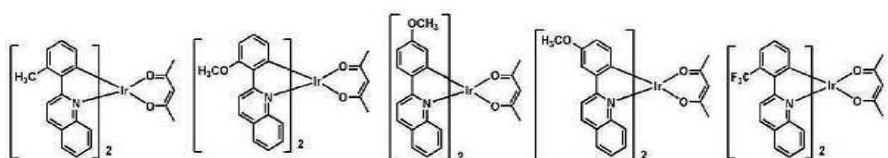
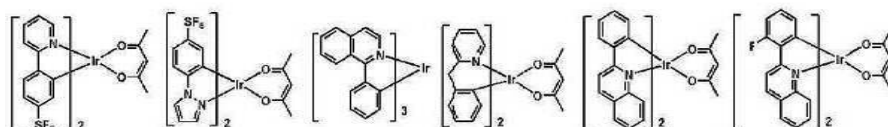
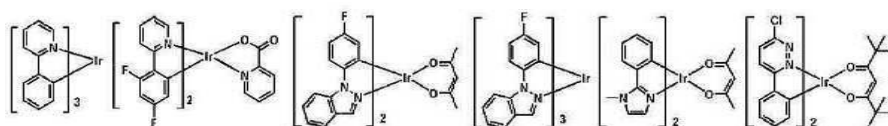
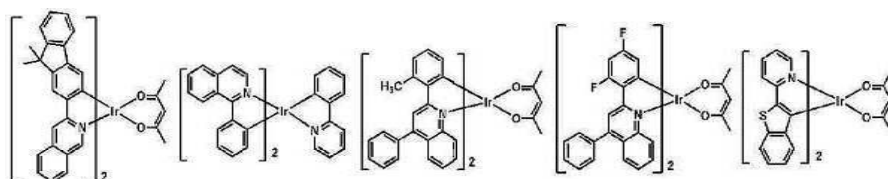
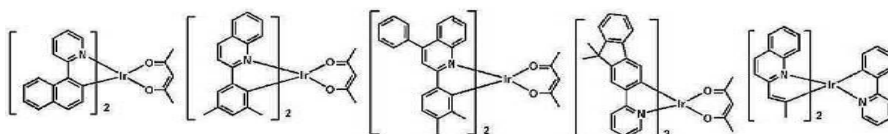
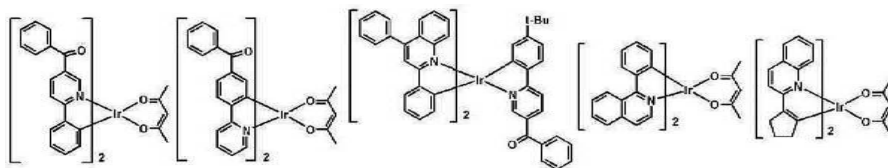
상기 R은 서로 상이하거나 동일하며 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된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

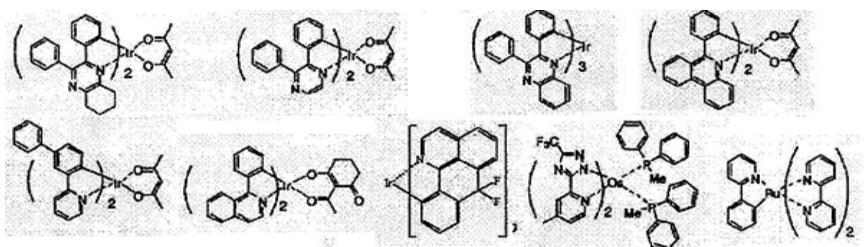
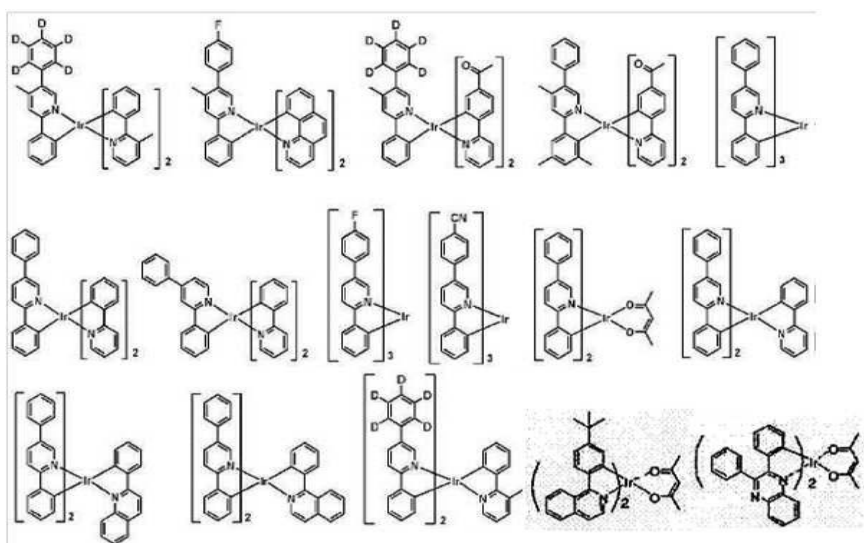
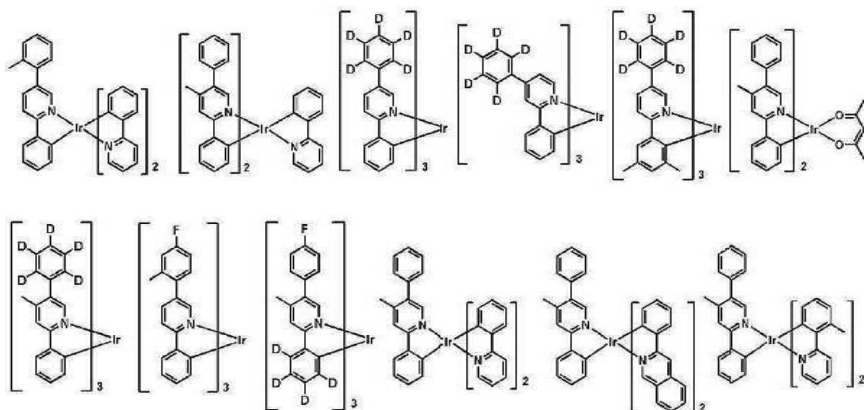
상기 R은 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기, 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 헤테로아릴기, 시아노기, 할로젠기, 중수소 및 수소 중에서 선택되는 1종 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.

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

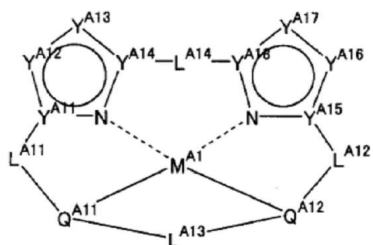
상기 L은 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로 고리 또는 융합 고리를 형성할 수 있다.

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





[일반식 B-1]

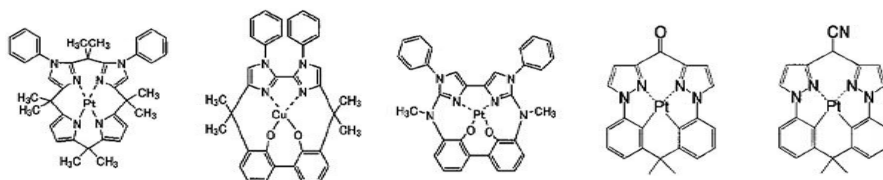
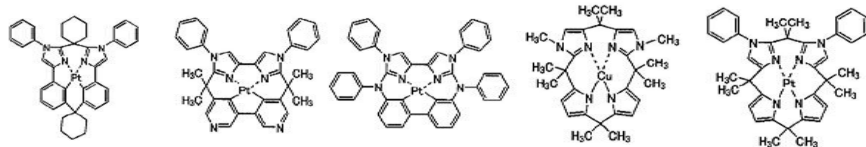
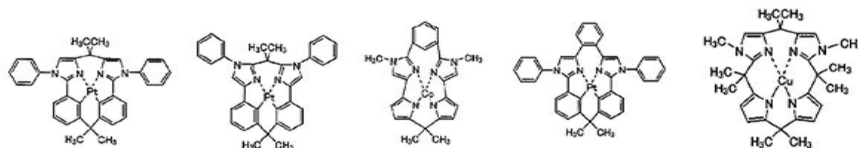


상기 [일반식 B-1]에서,

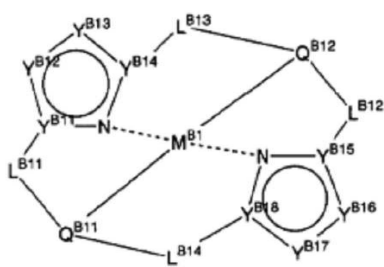
M^{A1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, 또한, Y^{A11} , Y^{A14} , Y^{A15} 및 Y^{A18} 은 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내며, Y^{A12} , Y^{A13} , Y^{A16} 및 Y^{A17} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소

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

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



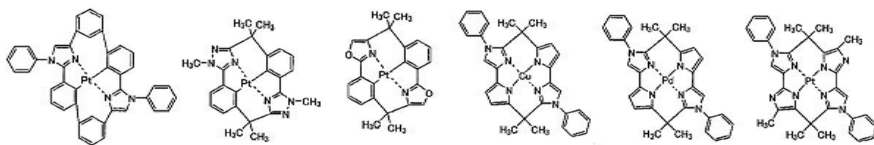
[일반식 C-1]

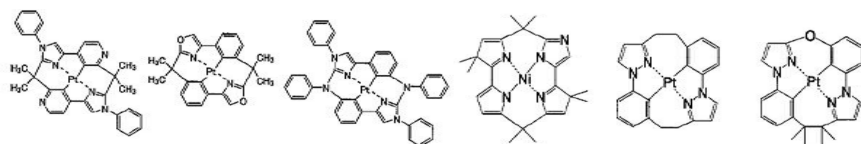


상기 [일반식 C-1]에서,

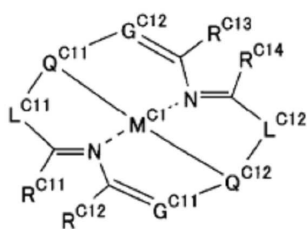
M^{B1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, Y^{B11} , Y^{B14} , Y^{B15} 및 Y^{B18} 은 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고, Y^{B12} , Y^{B13} , Y^{B16} 및 Y^{B17} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환의 탄소 원자, 치환 또는 비치환의 질소원자, 산소원자, 황원자를 나타내며, L^{B11} , L^{B12} , L^{B13} , L^{B14} 는 연결기를 나타내고, Q^{B11} , Q^{B12} 는 M^{B1} 에 결합하는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

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





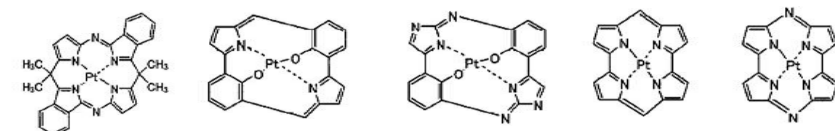
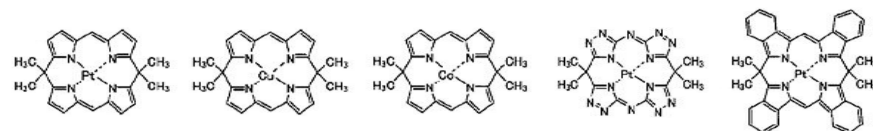
[일반식 D-1]



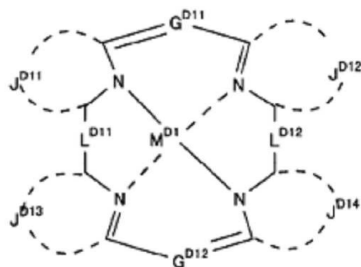
상기 [일반식 D-1]에서,

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

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



[일반식 E-1]

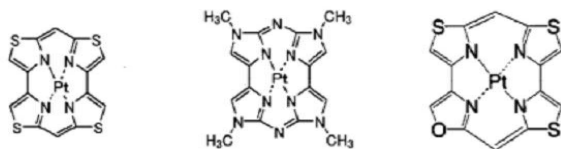


상기 [일반식 E-1]에서,

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

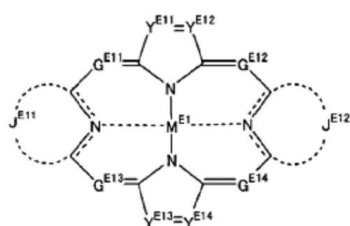
환 또는 비치환된 탄소 원자를 나타내며, J^{D11} , J^{D12} , J^{D13} 및 J^{D14} 는 각각 독립에 5 원 고리를 형성하는데도 필요한 원자군을 나타내며, L^{D11} , L^{D12} 는 연결기를 나타낸다.

[0194] 상기 [일반식 E-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0195]

[0196] [일반식 F-1]

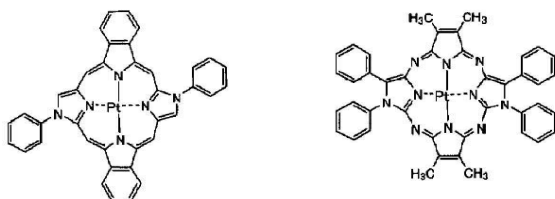


[0197]

[0198] 상기 [일반식 F-1]에서,

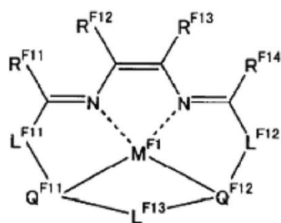
[0199] M^{E1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, J^{E11} , J^{E12} 는 각각 독립적으로 5 원 고리를 형성하는데도 필요한 원자군을 나타내며, G^{E11} , G^{E12} , G^{E13} 및 G^{E14} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소 원자를 나타내며, Y^{E11} , Y^{E12} , Y^{E13} 및 Y^{E14} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소원자를 나타낸다.

[0200] 상기 [일반식 F-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0201]

[0202] [일반식 G-1]



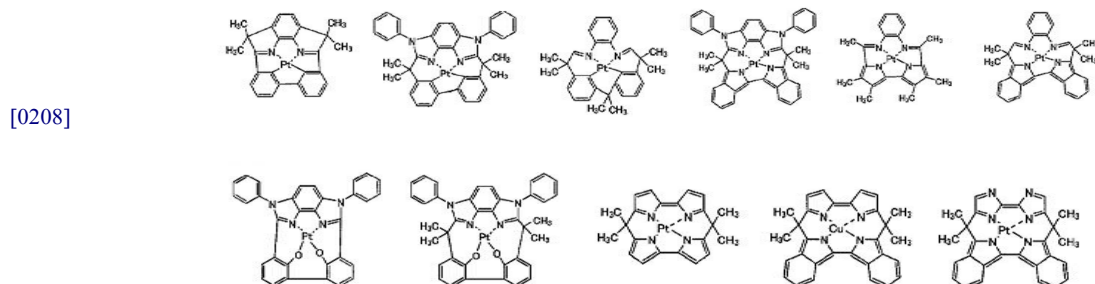
[0203]

[0204] 상기 [일반식 G-1]에서,

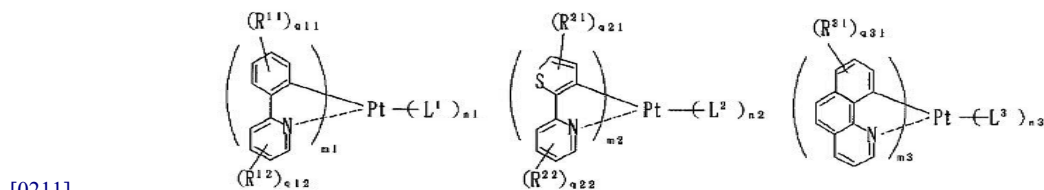
[0205] M^{F1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타낸다.

[0206] L^{F11} , L^{F12} 및 L^{F13} 은 연결기를 나타내며, R^{F11} , R^{F12} , R^{F13} 및 R^{F14} 는 치환기를 나타내고, R^{F11} 과 R^{F12} , R^{F12} 과 R^{F13} , R^{F13} 과 R^{F14} 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 이때 R^{F1} 과 R^{F12} , R^{F13} 과 R^{F14} 가 형성하는 고리는 5 원환이다. 또한 Q^{F11} , Q^{F12} 는 M^{F1} 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

[0207] 상기 [일반식 G-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0210] [일반식 H-1] [일반식 H-2] [일반식 H-3]



[0212] 상기 [일반식 H-1] 내지 [일반식 H-3]에서,

[0213] R^{11} , R^{12} 는 알킬, 아릴 또는 헤테로아릴의 치환기이며; 또한 서로 인접한 치환기와 융합고리를 형성할 수 있고, q_{11} , q_{12} 는 0 내지 4의 정수로서, 바람직하게는 0 내지 2가 될 수 있다.

[0214] 또한, q_{11} , q_{12} 가 2 내지 4인 경우, 복수 개의 R_{11} 및 R_{12} 는 각각 동일하거나 상이할 수 있다.

[0215] L^1 은 백금에 결합하는 리간드로서, 오르토 메탈(ortho metal)화 백금 착체를 형성할수 있는 리간드, 함질소헤테로환 리간드, 디케톤 리간드, 할로젠 리간드가 바람직하고, 보다 바람직하게는 오르토 메탈(ortho metal)화 백금 착체를 형성하는 리간드, 비피리딜 리간드 또는 페난트로린 리간드이다.

[0216] n^1 은 0 내지 3의 정수이며, 바람직하게는 0이고, m^1 은 1 또는 2이고 바람직하게는 2이다.

[0217] 또한, 상기 n^1 , m^1 은 상기 일반식 H-1로 나타나는 금속 착체가 중성 착체가 되도록 하는 것이 바람직하다.

[0218] 상기 [일반식 H-2]에서,

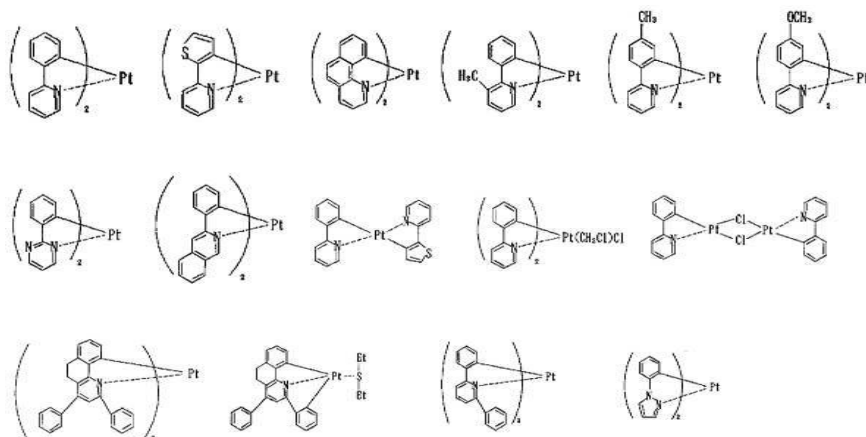
[0219] R^{21} , R^{22} , n^2 , m^2 , q^{22} , L^2 는 각각 상기 R^{11} , R^{12} , n^1 , m^1 , q^{12} , L^1 과 동일하고, q^{21} 은 0 내지 2의 정수이며, 0이 바람직하다.

[0220] 상기 [일반식 H-3]에서,

[0221] R^{31} , n^3 , m^3 , L^3 은 각각 상기 R^{11} , n^1 , m^1 , L^1 과 동일하고, q^{31} 은 0 내지 8의 정수를 나타내고, 0 내지 2가 바람직하고, 0이 보다 바람직하다.

[0222]

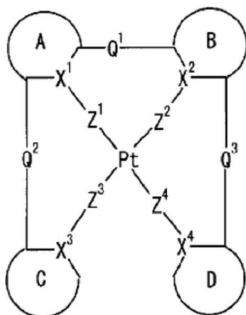
상기 [일반식 H-1] 내지 [일반식 H-3]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0223]

[0224]

[일반식 I-1]



[0225]

[0226]

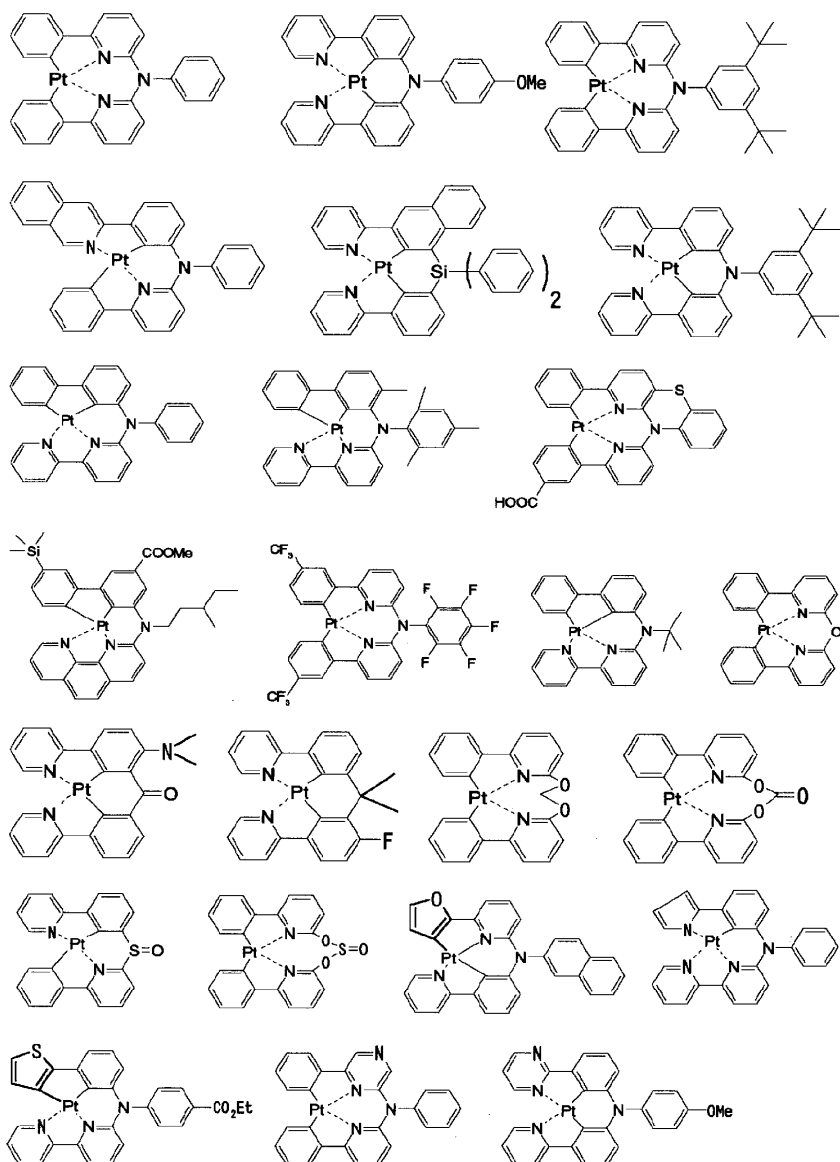
상기 [일반식 I-1]에서,

[0227]

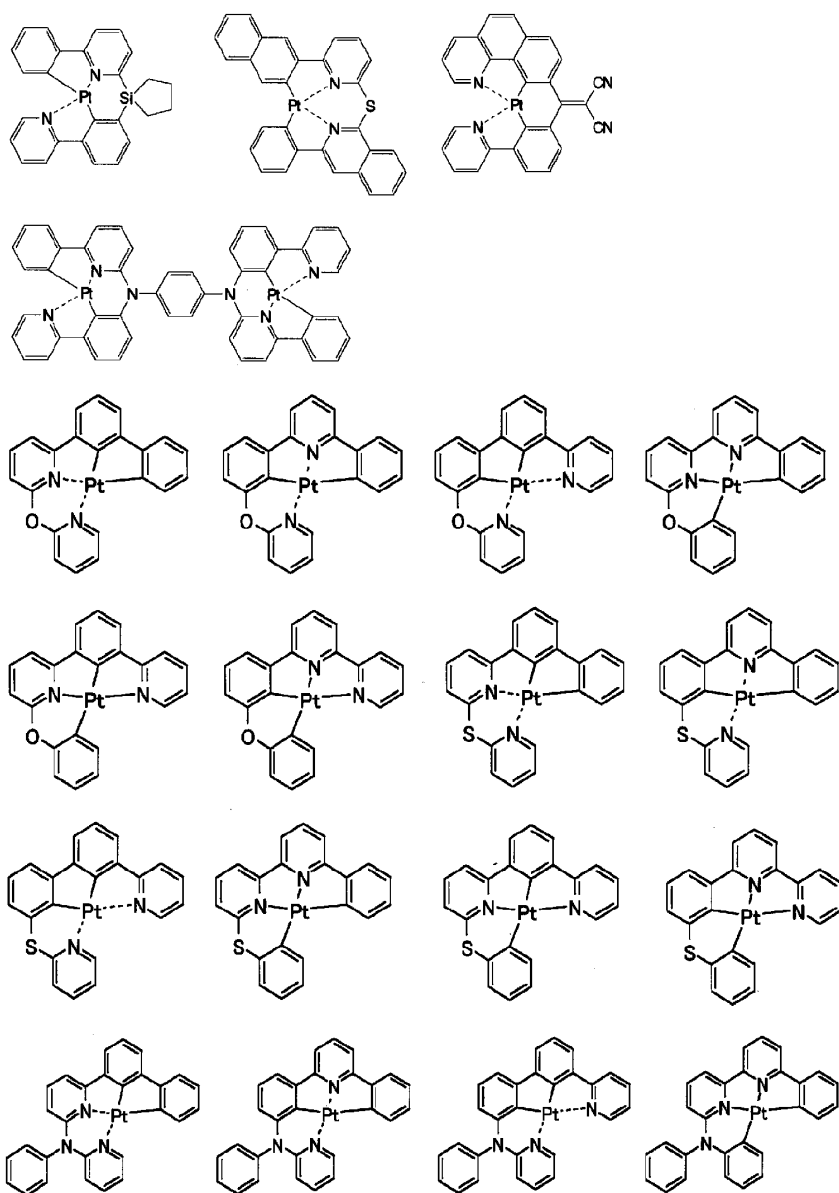
고리A, 고리B, 고리C 및 고리D는 상기 고리 A내지 D중의 어느 2개의 고리는 치환기를 가질 수 있는 질소 함유 헤테로고리를 나타내고, 나머지 2개의 환은 고리는 치환기를 가질 수 있는 아릴고리 또는 헤테로아릴고리를 나타내고, 나타내며, 고리A와 고리B, 고리A와 고리C 및/또는 고리B와 고리D로 축합환을 형성할 수 있다. X^1 , X^2 , X^3 및 X^4 는 이 중의 어느 2개가 백금원자에 배위결합하는 질소원자를 나타내고, 나머지 2개는 탄소원자 또는 질소원자를 나타낸다. Q^1 , Q^2 및 Q^3 은 각각 독립적으로 2가의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

[0228]

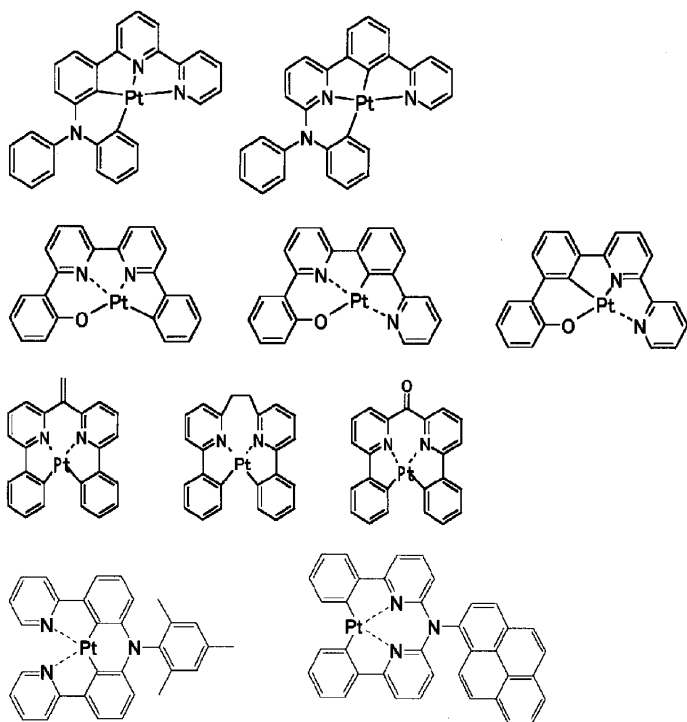
상기 [일반식 I-1]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



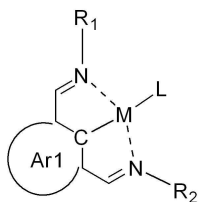
[0229]



[0230]



[일반식 J-1]



상기 [일반식 J-1]에 있어서,

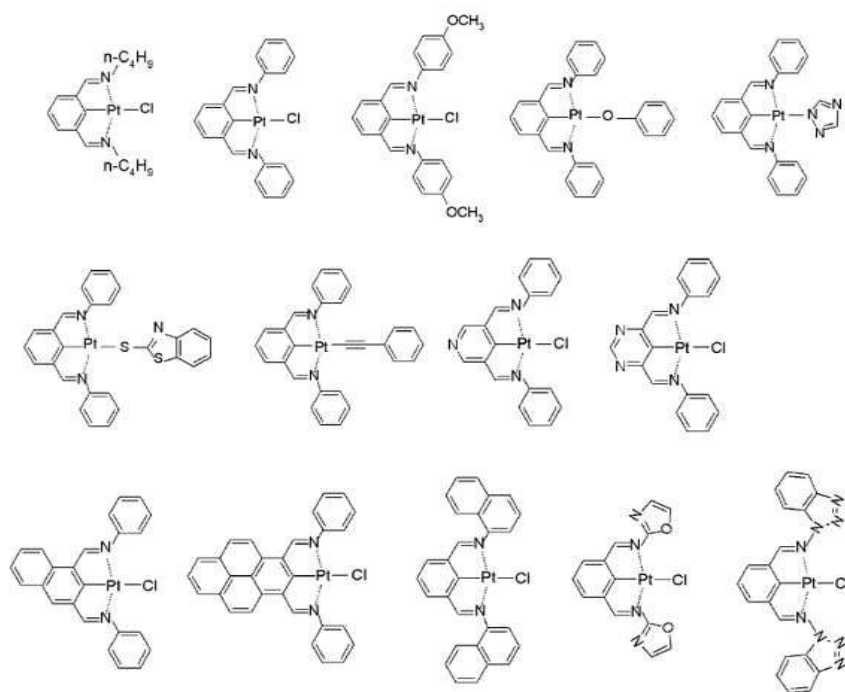
M은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, Ar1은 치환 또는 비치환의 고리구조를 표현하고, 상기 M에 결합하는 2개의 아조메틴(azomethine) 결합($-C=N-$)에 있어서, 질소원자(N)는 각각 상기 M에 결합하고, 전체로서 상기 M에 3좌에서 결합되는 3좌 배위자를 형성하고 있다.

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

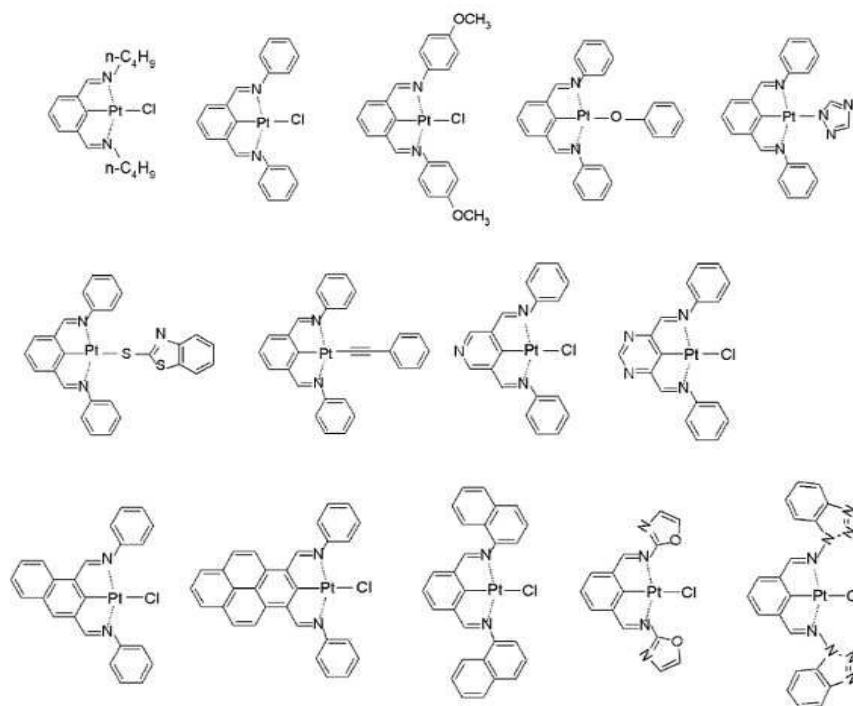
상기 [일반식J-1]에 있어서, 상기 M은 Pt인 것이 바람직하다. 또한, 상기 Ar1으로서는, 5원환, 6원환 및 이들의 축합환기부터 선택되는 것이 바람직하다.

[0238]

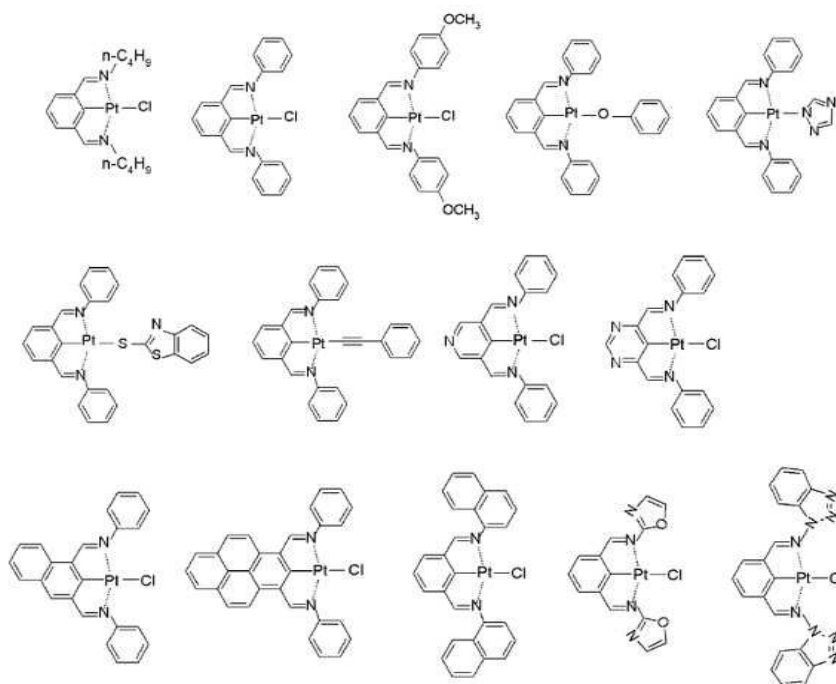
상기 [일반식 J-1]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0239]



[0240]



[0241]

[0242]

또한, 상기 발광층은 상기 도판트와 호스트 이외에도 다양한 호스트와 다양한 도펀트 물질을 추가로 포함할 수 있다.

[0243]

또한, 상기 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로부터 선택된 하나 이상의 층은 단분자 증착방식 또는 용액공정에 의하여 형성될 수 있으며, 여기서 상기 증착 방식은 상기 각각의 층을 형성하기 위한 재료로 사용되는 물질을 진공 또는 저압상태에서 가열 등을 통해 증발시켜 박막을 형성하는 방법을 의미하고, 상기 용액공정은 상기 각각의 층을 형성하기 위한 재료로 사용되는 물질을 용매와 혼합하고 이를 잉크젯 인쇄, 롤투롤 코팅, 스크린 인쇄, 스프레이 코팅, 딥 코팅, 스핀 코팅 등과 같은 방법을 통하여 박막을 형성하는 방법을 의미한다.

[0244]

또한, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 평판 디스플레이 장치, 플렉시블 디스플레이 장치, 단색 또는 백색의 평판 조명용 장치 및 단색 또는 백색의 플렉시블 조명용 장치에서 선택되는 장치에 사용될 수 있다.

[0245]

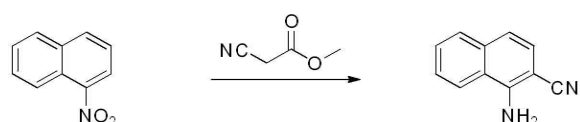
이하, 바람직한 실시예를 들어 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다. 그러나, 이들 실시예는 본 발명을 보다 구체적으로 설명하기 위한 것으로, 본 발명의 범위가 이에 의하여 제한되지 않는다는 것은 당업계의 통상의 지식을 가진 자에게 자명할 것이다.

[0246]

[합성예 1] 화합물 39의 합성

[0247]

[반응식 1-1] [중간체 1-a]의 합성



[0248]

[0249]

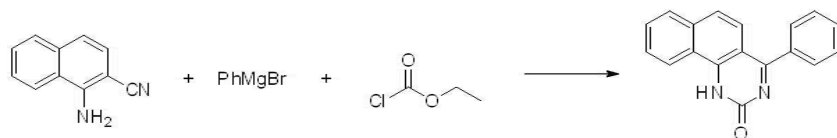
[중간체 1-a]

[0250]

1-니트로나프탈렌 97 g(0.56 mol), 메틸 시아노아세테이트 166.5 g(1.68 mol), 시안화칼륨 40.1 g(0.62 mol), 수산화칼륨 62.9 g(1.12 mol)을 넣고 교반하였다. 다음 디메틸포름아마이드 970 mL을 넣고 60 ℃에서 밤새 교반

하였다. 상온에서 감압농축 하여 용매를 제거한 뒤 10% 수산화나트륨수용액 500 mL 를 넣고 약 1시간 동안 환류시켰다. 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 컬럼 크로마토그래피로 분리한 후 톨루엔과 헵탄으로 재결정하여 [중간체 1-a] 50.8 g (수율54%)을 얻었다.

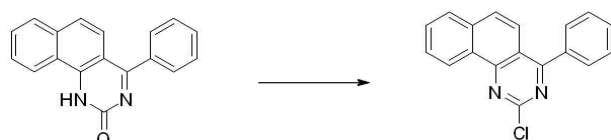
[반응식 1-2] [중간체 1-b]의 합성



[중간체 1-b]

상기 [반응식 1-1]에서 얻은 [중간체 1-a] (25.0 g, 149 mmol)를 테트라하이드로퓨란 200 mL에 녹여 교반하였다. 0 °C로 냉각한 후, 페닐 마그네슘브로마이드 (3.0 M in Et₂O) (87.4 mL, 297 mmol)를 적가하고, 1시간 동안 환류시켰다. 0 °C로 냉각한 후, 에틸 클로로포메이트 (19.4 g, 179 mmol)를 적가한 다음, 1시간 동안 환류시켰다. 약산성이 될 때까지 포화 염화암모늄 수용액을 투입하고, 생성된 고체를 여과하여 [중간체 1-b] 32.4 g (수율 80%)을 얻었다.

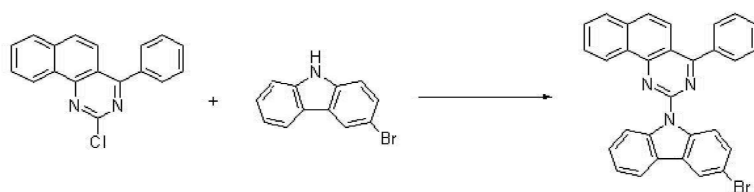
[반응식 1-3] [중간체 1-c]의 합성



[중간체 1-c]

상기 [반응식 1-2]에서 얻은 [중간체 1-b] 30.0 g(110 mmol)을 옥시염화인 80 mL에 넣고 12시간 동안 환류시켰다. -20 °C로 냉각한 후 증류수 400 mL를 적가하였다. 생성된 고체를 여과한 후, 톨루엔과 헵탄으로 재결정하여 [중간체 1-c] 14.1 g (수율 44%)을 얻었다.

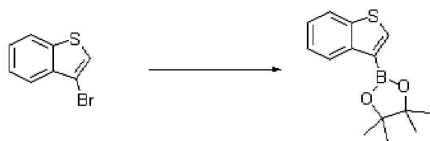
[반응식 1-4] [중간체 1-d]의 합성



[중간체 1-d]

60% 소듐 하이드라이드 0.91 g(37 mmol)와 디메틸포름아마이드 30 mL를 넣고 로 냉각한 후, 3-브로모-9H-카바졸 6.0 g(24 mmol)과 디메틸포름아마이드 60 mL에 녹여 적가하고 1시간 동안 교반하였다. 상기 [반응식 1-3]에서 얻은 [중간체 1-c] 9.2 g(32 mmol)를 디메틸포름아마이드 60 mL에 녹여 적가하고, 상온으로 승온하여 2시간 동안 교반하였다. 증류수 300 mL를 넣은 후 생성된 고체를 여과하였다. 톨루엔으로 재결정하여 [중간체 1-d] 9.5 g (수율 78%)을 얻었다.

[0263] [반응식 1-5] [중간체 1-e]의 합성

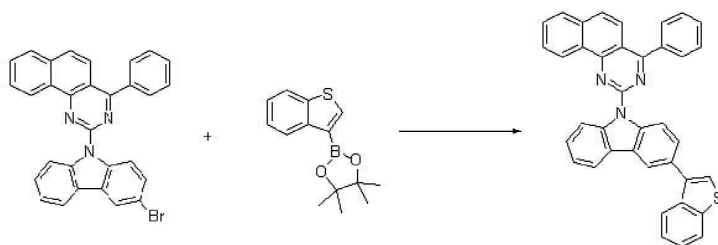


[0264]

[0265] [중간체 1-e]

[0266] 3-브로모 벤조싸이오펜 50.0g(0.235 mol), 비스(피나콜라토)다이보론 71.5 g(0.282 mol), PdCl₂(dppf) 5.2 g(0.007 mol), 포타슘아세테이트 57.57 g(0.587 mol), 톨루엔 500 ml를 넣고 12시간 동안 환류시켰다. 고온에서 필터한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 [중간체 1-e] 39.0 g (수율 64 %)를 얻었다.

[0267] [반응식 1-6] [화합물 39]의 합성



[0268]

[0269] [화합물 39]

[0270] 상기 [반응식 1-4] 에서 합성한 [중간체 1-d] <1-d> 10.0 g (33 mmol), 상기 [반응식 1-5]에서 합성한 [중간체 1-e] 10.4 g (40 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 0.8 g (0.001 mmol), 탄산칼륨 13.8 g (100 mmol), 1,4-다이옥산 40 mL, 톨루엔 40 mL, 증류수 14 mL에 넣고 12시간 동안 환류시켰다. 상온으로 냉각한 후 에틸아세테이트로 추출한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제 하여 [화합물 39] 13.0 g (수율 70 %)을 얻었다.

[0271] MS : m/z 554

[0272] [합성예 2] 화합물 37의 합성

[0273] [반응식 2-1] [중간체 2-a]의 합성

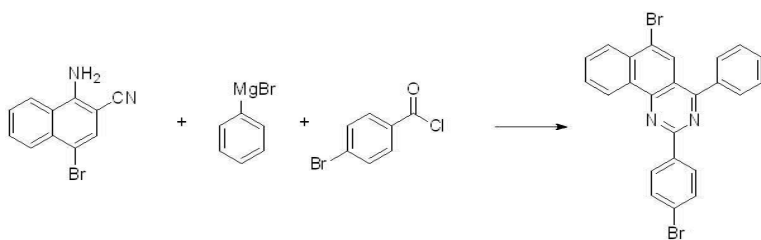


[0274]

[0275] [중간체 2-a]

[0276] 상기 [반응식 1-1]에서 얻은 [중간체 1-a] 50.0 g (297 mmol), 디메틸포름아마이드 500 mL를 넣고 0 ℃로 냉각시켰다. N-브로모석신이미드 55.56 g (312 mmol)을 적가한 다음, 상온으로 승온 후 4시간 동안 교반시켰다. 증류수를 적가하여 생성된 고체를 여과한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 [중간체 2-a] 68.0 g(수율 93%)을 얻었다.

[0277] [반응식 2-2] [중간체 2-b]의 합성



[0278]

[0279]

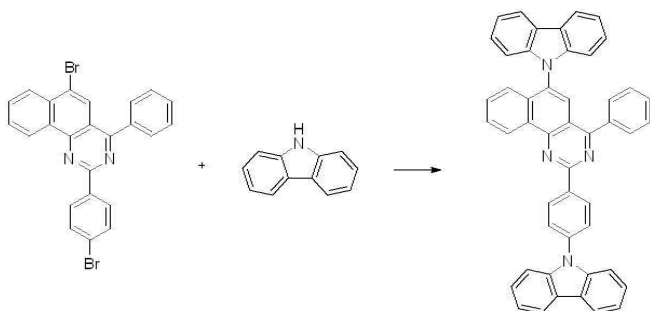
[중간체 2-b]

[0280]

상기 [반응식 2-1]에서 얻은 [중간체 2-a] 10.0 g (41 mmol), 테트라하이드로퓨란 200 mL를 넣고 0 ℃에서 3M-페닐마그네슘브로마이드 27.6 mL (83 mmol)를 적가한 후, 3시간 동안 환류 시켰다. 0 ℃로 냉각한 후 4-브로모벤조일클로라이드 10.8 g (0.571 mmol)을 테트라하이드로퓨란 150 mL에 녹여 적가한 후 2시간 동안 환류시켰다. 0 ℃로 냉각한 후 포화염화암모늄 수용액을 넣고, 에틸아세테이트로 추출하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 [중간체 2-b] 12.0 g(수율 58 %)을 얻었다.

[0281]

[반응식 2-3] [화합물 37]의 합성



[0282]

[0283]

[화합물 37]

[0284]

상기 [반응식 2-2]에서 얻은 [중간체 2-b] 12.0 g (24 mmol), 카바졸 9.8 g (59 mmol), 트리스(다이벤지리덴아세톤) 다이팔라듐 1.1 g (1.2 mmol), 트리터셔리부틸포스포늄 테트라플루오로보레이트 2.1 g (7.3 mmol), 소듐 터셔리부톡사이드 11.8 g (122 mmol) 및 자일렌 60 mL를 넣고 12 시간 환류시켰다. 고온에서 여과한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 [화합물 37]로 표시되는 화합물 3.0 g (수율 38 %)을 얻었다.

[0285]

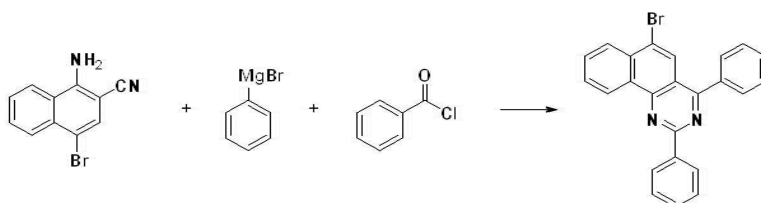
MS : m/z 663

[0286]

[합성예 3] 화합물 19의 합성

[0287]

[반응식 3-1] [중간체 3-a]의 합성



[0288]

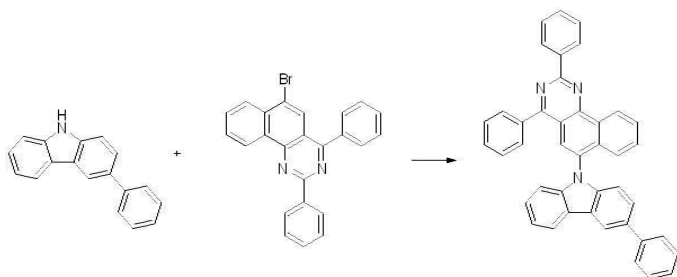
[0289]

[중간체 3-a]

[0290]

상기 [반응식 2-2]에서 사용한 4-브로모벤조일클로라이드 대신 벤조일클로라이드를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 3-a]로 표시되는 화합물 12.5 g(수율 63 %)을 얻었다.

[0291] [반응식 3-2] [화합물 19]의 합성



[0292]

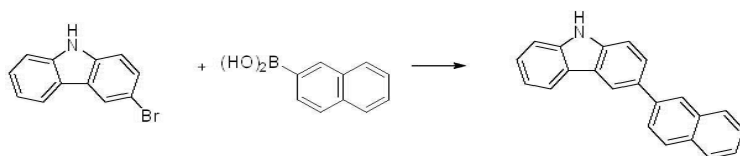
[0293] [화합물 19]

[0294] 상기 [반응식 2-3]에서 사용한 [중간체 2-b] 대신 상기 [반응식 3-1]에서 합성한 [중간체 3-a]를 사용하고 카바졸 대신 3-페닐카바졸을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 19] 2.3 g (수율 38 %)을 얻었다.

[0295] MS : m/z 574

[0296] [합성예 4] 화합물 20의 합성

[0297] [반응식 4-1] [중간체 4-a]의 합성

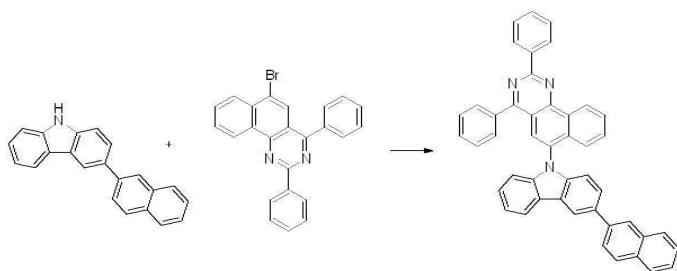


[0298]

[0299] [중간체 4-a]

[0300] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-d] 대신 3-브로모카바졸을 사용하고, [중간체 1-e] 대신 2-나프틸보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 4-a] 82.0 g (수율 63 %)을 얻었다.

[0301] [반응식 4-2] [화합물 20]의 합성



[0302]

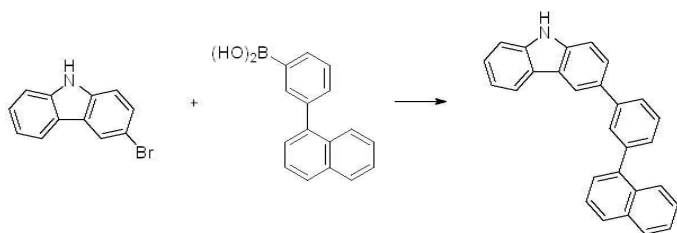
[0303] [화합물 20]

[0304] 상기 [반응식 2-3]에서 사용한 [중간체 2-b] 대신 상기 [반응식 3-1]에서 합성한 [중간체 3-a]를 사용하고 카바졸 대신 상기 [반응식 4-1]에서 합성한 [중간체 4-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 20] 3.0 g (수율 32 %)을 얻었다.

[0305] MS: m/z 624

[0306] [합성예 5] 화합물 21의 합성

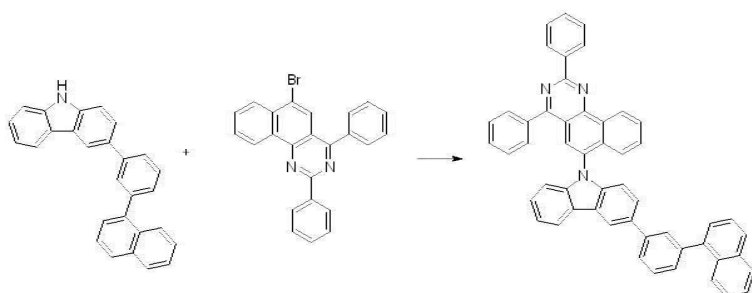
[0307] [반응식 5-1] [중간체 5-a]의 합성



[0308]
[0309] [중간체 5-a]

[0310] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-d] 대신 3-브로모카바졸을 사용하고, [중간체 1-e] 대신 3-(1-나프틸)페닐보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 5-a] 47.5 g (수율 68 %)을 얻었다.

[0311] [반응식 5-2] [화합물 21]의 합성



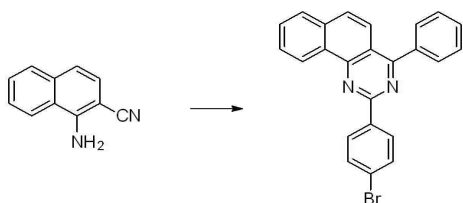
[0312]
[0313] [화합물 21]

[0314] 상기 [반응식 2-3]에서 사용한 [중간체 2-b] 대신 상기 [반응식 3-1]에서 합성한 [중간체 3-a]를 사용하고, 카바졸 대신 상기 [반응식 5-1]에서 합성한 [중간체 5-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 21] 2.4 g (수율 28 %)을 얻었다.

[0315] MS : m/z 700

[0316] [합성예 6] 화합물 48의 합성

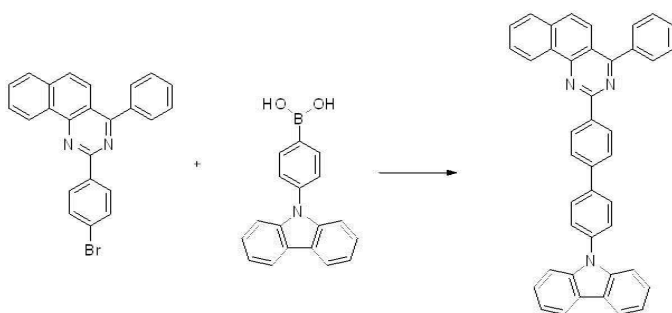
[0317] [반응식 6-1] [중간체 6-a]의 합성



[0318]
[0319] [중간체 6-a]

[0320] 페닐마그네슘브로마이드의 1 M 테트라하이드로퓨란 용액 100ml (100mmol), 테트라하이드로퓨란 100 mL를 넣고, 45 ℃에서 가열하였다. [반응식1-1]에서 합성한 [중간체1-a] 5.91g(50mmol)를 테트라하이드로퓨란 50 mL에 녹여 적가하고 2 시간 동안 환류시켰다. 0 ℃로 냉각한 후, 4-브로모벤조일클로라이드 13.2g(60mmol) 을 테트라하이드로퓨란 100ml 에 녹여적가하였다. 45 도로 승온하여 2 시간 교반 후, 0℃로 냉각하고 포화 염화암모늄 수용액을 첨가하였다. 생성된 고체를 여 과한 후 톨루엔으로 재결정하여 [화합물 6-a] 10.8 g (수율 60 %)을 얻었다.

[0321] [반응식 6-2] [화합물 48]의 합성



[0322]

[0323]

[화합물 48]

[0324] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 6-1]에서 합성한 [중간체 6-a]를 사용하고, [중간체 1-e] 대신 4-(9H-카바졸-9-일)페닐보론산 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 48] 3.9 g (수율 44 %)을 얻었다.

[0325]

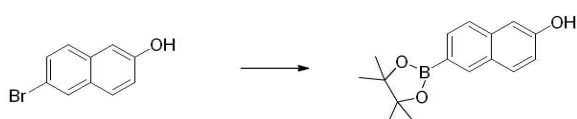
MS : m/z 574

[0326]

[합성예 7] 화합물 50의 합성

[0327]

[반응식 7-1] [중간체 7-a]의 합성



[0328]

[0329]

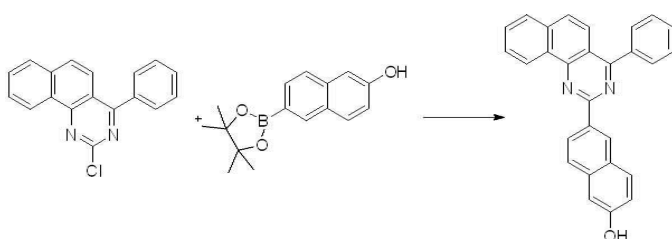
[중간체 7-a]

[0330]

6-브로모-2-나프톨 (50g, 224mmol), 비스피나콜라토 다이보론 (85.4g, 336mmol), 팔라듐(II) 염화-1,1'-비스(다이페닐포스포노)페로센 (4.9g, 7mmol), 포타슘아세테이트 (66g, 672mmol), 톨루엔 500ml를 넣고 12시간 동안 환류시켰다. 고온에서 여과 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 [중간체 7-a] 43g (수율 71%)을 얻었다.

[0331]

[반응식 7-2] [중간체 7-b]의 합성



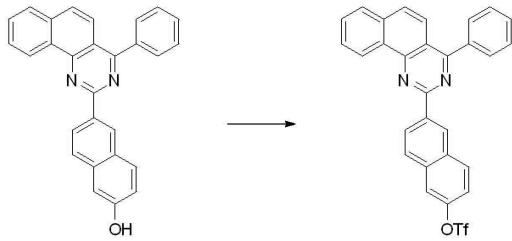
[0332]

[0333]

[중간체 7-b]

[0334] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 1-3]에서 합성한 [중간체 1-c]를 사용하고, [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 7-1]에서 합성한 [중간체 7-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 7-b] 24.5 g (수율 99 %)을 얻었다.

[0335] [반응식 7-3] [중간체 7-c]의 합성



[0336]

[0337]

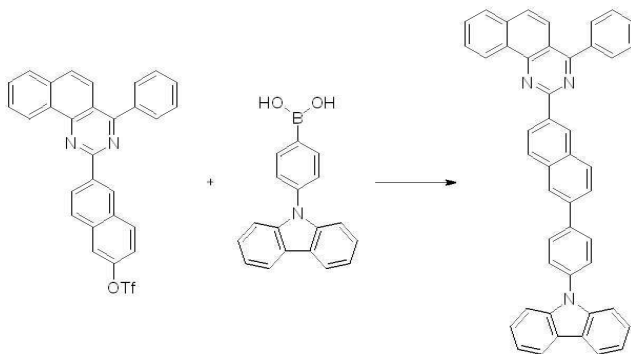
[중간체 7-c]

[0338]

상기 [반응식 7-2]에서 합성한 [중간체 7-b] (39g, 98mmol), 피리딘 10.1g (127mmol), 메틸렌 클로라이드 390ml를 넣고 0℃로 냉각하였다. 트리플로로메탄설포닉아이드라이드 35.9g (127 mmol)를 적가한 후, 상온으로 승온하여 2 시간 동안 교반하였다. 0℃로 냉각한 후 물을 투입하여 생성된 고체를 여과하고 재결정하여 [중간체 7-c] 38.1g (수율 73.4%)을 얻었다.

[0339]

[반응식 7-4] [화합물 50]의 합성



[0340]

[0341]

[화합물 50]

[0342]

상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 7-3]에서 합성한 [중간체 7-c]를 사용하고, [중간체 1-e] 대신 4-(9H-카바졸-9-일)페닐보론산 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 50] 5.5 g (수율 99 %)을 얻었다.

[0343]

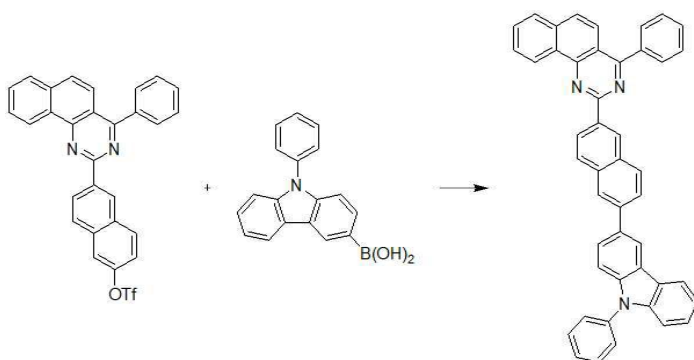
MS : m/z 624

[0344]

[합성예 8] 화합물 51의 합성

[0345]

[반응식 8-1] [화합물 51]의 합성



[0346]

[0347]

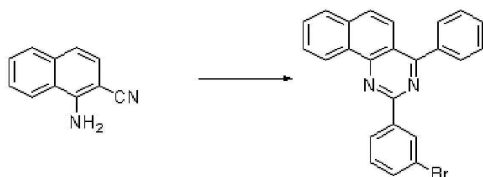
[화합물 51]

[0348] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 7-3]에서 합성한 [중간체 7-c] 를 사용하고, [중간체 1-e] 대신 9-페닐-9H-카바졸-3-보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 51] 3.9 g (수율 46 %)을 얻었다.

[0349] MS : m/z 624

[0350] [합성예 9] 화합물 49의 합성

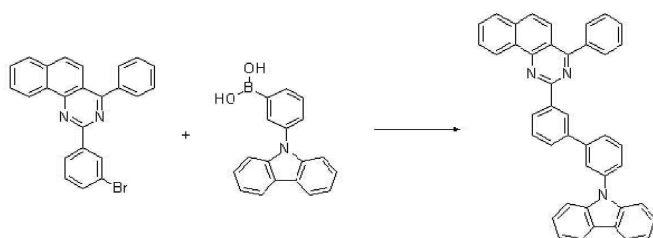
[0351] [반응식 9-1] [중간체 9-a]의 합성



[중간체 9-a]

[0354] 상기 [반응식 6-1]에서 사용한 4-브로모벤조일클로라이드 대신 3-브로모벤조일클로라이드를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 9-1] 12.3 g (수율 62 %)을 얻었다.

[0355] [반응식 9-2] [화합물 49]의 합성



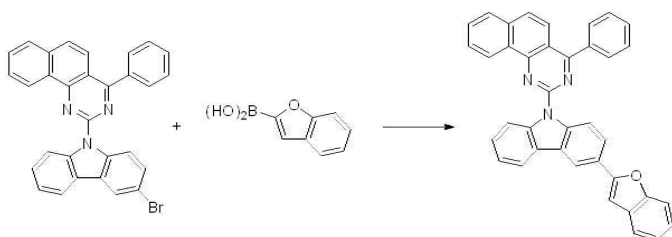
[화합물 49]

[0358] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 9-1]에서 합성한 [중간체 9-a] 를 사용하고, [중간체 1-e] 대신 3-(9H-카바졸-9-일)페닐보론산 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 6-b] 8.5 g (수율 87 %)을 얻었다.

[0359] MS : m/z 574

[0360] [합성예 10] 화합물 42의 합성

[0361] [반응식 10-1] [화합물 42]의 합성



[화합물 42]

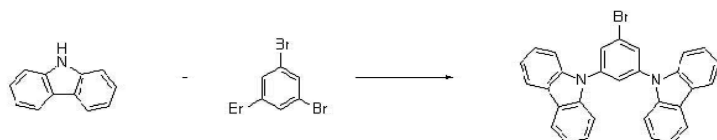
[0364] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 벤조퓨란-2-보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으

로 합성하여 [중간체 6-b] 6.3 g (수율 72 %)을 얻었다.

[0365] MS : m/z 538

[0366] [합성예 11] 화합물 59의 합성

[0367] [반응식 11-1] [중간체 11-a]의 합성

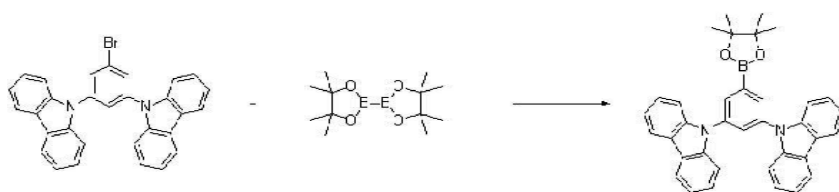


[0368]

[0369] [중간체 11-a]

[0370] 카바졸 (40.0 g, 239 mmol), 1,3,5-트리브로모벤젠 (113.0 g, 359 mmol), 아이오도구리 (2.3 g, 12 mmol), 포타슘포스페이트 (101.6 g, 479 mmol), 1,2-사이클로헥산다이아민 (54.6 g, 479 mmol), 톨루엔 400 mL를 넣고 12시간 동안 환류시켰다. 고온에서 여과한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여, [중간체 11-a] 15.0 g (15%) 을 얻었다.

[0371] [반응식 11-2] [중간체 11-b]의 합성

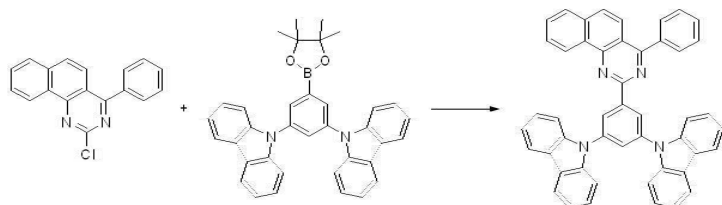


[0372]

[0373] [중간체 11-b]

[0374] 상기 [반응식 11-1]에서 합성한 [중간체 11-a] (19.0 g, 39 mmol)와 비스피나콜라토다이보론 (13.0 g, 51 mmol), 팔라듐(II) 염화-1,1'-비스(다이페닐포스피노)페로센 (0.9 g, 1 mmol), 포타슘아세테이트 (11.5 g, 117 mmol), 톨루엔 150 mL을 넣고 12시간 동안 환류시켰다. 고온에서 여과한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 [중간체 11-b] 14.8 g (71%)을 얻었다.

[0375] [반응식 11-3] [화합물 59]의 합성



[0376]

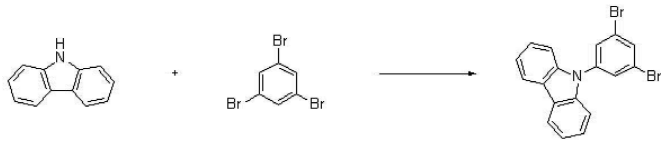
[0377] [화합물 59]

[0378] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 1-3]에서 합성한 [중간체 1-c] 를 사용하고, [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 11-2]에서 합성한 [중간체 11-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 59] 4.0 g (수율 40 %)을 얻었다.

[0379] MS : m/z 663

[0380] [합성예 12] 화합물 60의 합성

[0381] [반응식 12-1] [중간체 12-a]의 합성

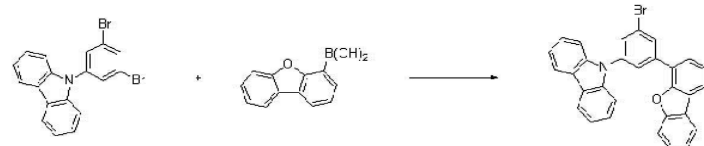


[0382]

[0383] [중간체 12-a]

[0384] 카바졸 (40.0 g, 239 mmol), 1,3,5-트리브로모벤젠 (113.0 g, 359 mmol), 아이오도구리 (2.3 g, 12 mmol), 포타슘포스페이트 (101.6 g, 479 mmol), 1,2-사이클로헥산다이아민 (54.6 g, 479 mmol), 톨루엔 400 mL를 넣고 12시간 동안 환류시켰다. 고온에서 여과 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여, [중간체 12-a] 34.0 g (35%)을 얻었다.

[0385] [반응식 12-2] [중간체 12-b]의 합성

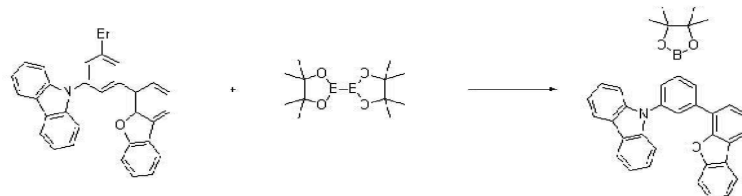


[0386]

[0387] [중간체 12-b]

[0388] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 12-1]에서 합성한 [중간체 12-a]를 사용하고, [중간체 1-e] 대신 다이벤조퓨란-4-보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 12-b] 19.0 g (수율 78 %)을 얻었다.

[0389] [반응식 12-3] [중간체 12-c]의 합성

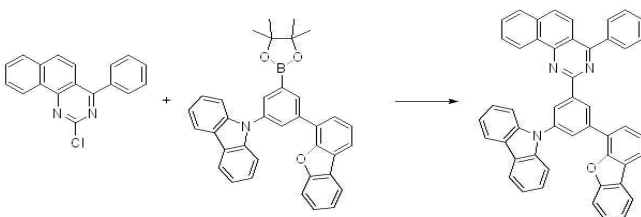


[0390]

[0391] [중간체 12-c]

[0392] 상기 [반응식 11-2]에서 사용한 [중간체 11-a] 대신 상기 [반응식 12-2]에서 합성한 [중간체 12-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 12-c] 13.4 g (수율 64 %)을 얻었다.

[0393] [반응식 12-4] [화합물 60]의 합성



[0394]

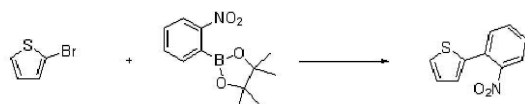
[0395] [화합물 60]

[0396] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 1-3]에서 합성한 [중간체 1-c]를 사용하고, [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 12-3]에서 합성한 [중간체 12-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 59] 4.7 g (수율 45 %)을 얻었다.

[0397] MS : m/z 664

[0398] [합성예 13] 화합물 43의 합성

[0399] [반응식 13-1] [중간체 13-a]의 합성

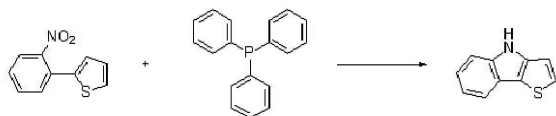


[0400]

[0401] [중간체 13-a]

[0402] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-d] 대신 2-브로모싸이오펜 (45.0 g, 276 mmol)을 사용하고, [중간체 1-e] 대신 2-이트로페닐 보론산 피나콜에스터 (89.3 g, 359 mmol)를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 13-a] 20.0 g (수율 35 %)을 얻었다.

[0403] [반응식 13-2] [중간체 13-b]의 합성

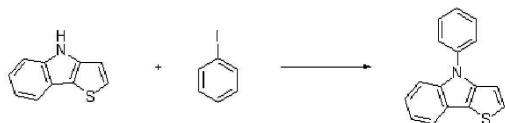


[0404]

[0405] [중간체 13-b]

[0406] 상기 [반응식 13-1]에서 합성한 [중간체 13-a] (20.0 g, 97 mmol), 트리페닐포스핀 (63.9 g, 244 mmol), 디클로로벤젠 200 mL를 넣고 6시간 동안 환류시켰다. 디클로로벤젠을 제거하고 컬럼크로마토그래피로 정제하여 [중간체 13-b] 10.5 g (63%)을 얻었다.

[0407] [반응식 13-3] [중간체 13-c]의 합성

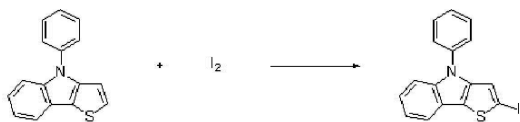


[0408]

[0409] [중간체 13-c]

[0410] 상기 [반응식 13-2]에서 합성한 [중간체 13-b] (14.0 g, 80 mmol), 아이오도벤젠 (24.0 g, 120 mmol), 아이오도구리 (0.8 g, 4 mmol), 포타슘프อส페이트 (35.6 g, 168 mmol), 1,2-사이클로헥산다이아민 (18.2 g, 160 mmol), 1,4-다이옥산 70 mL를 넣고 12시간 동안 환류시켰다. 고온에서 여과한 후, 컬럼크로마토그래피로 정제하여 [중간체 13-c] 19.2 g (96%)을 얻었다.

[0411] 반응식 13-4] [중간체 13-d]의 합성

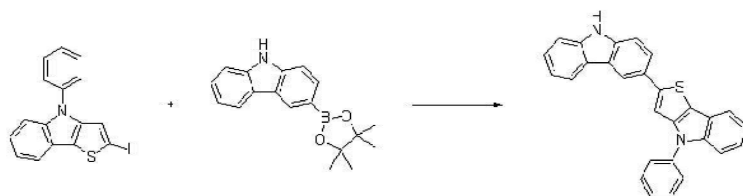


[0412]

[0413] [중간체 13-d]

[0414] 상기 [반응식 13-c]에서 합성한 [중간체 13-c] (12.0 g, 39 mmol)과 테트라하이드로퓨란 120 mL를 넣고 -78℃로 냉각하였다. 노르말부틸리튬 (36.10 g, 58 mmol)를 적가한 후 상온으로 승온하여 12시간 동안 교반하였다. -78℃로 냉각한 후 아이오딘 (14.7 g, 58 mmol)을 투입한 다음 상온으로 승온하여 12시간 동안 교반하였다. 소듐싸이오세레이트 수용액을 넣은 후 에틸아세테이트로 추출하였다. 헵탄으로 재결정하여 [중간체 13-d] 7.2 g (54%)을 얻었다.

[0415] [반응식 13-5] [중간체 13-e]의 합성

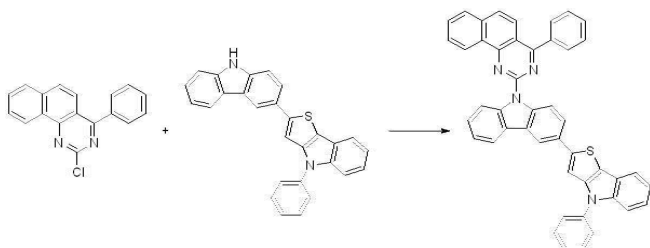


[0416]

[0417] [중간체 13-e]

[0418] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 13-4]에서 합성한 [중간체 13-d] (14.7 g, 39 mmol)를 사용하고, [중간체 1-e] 대신 3-(4,4,5,5-테트라메틸-[1,3,2]다이옥사보롤란-2-일)-9H-카바졸 (89.3 g, 359 mmol)를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 13-e] 6.5 g (수율 40 %)을 얻었다.

[0419] [반응식 13-6] [화합물 43]의 합성



[0420]

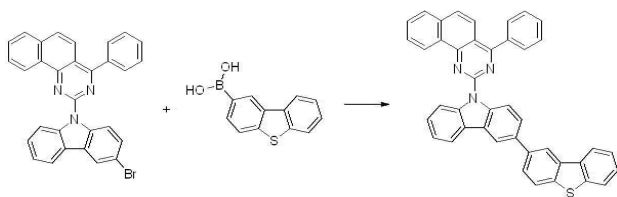
[0421] [화합물 43]

[0422] 상기 [반응식 1-4]에서 사용한 3-브로모-9H-카바졸 대신 상기 [반응식 13-5]에서 합성한 [중간체 13-e] (14.7 g, 39 mmol)를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 43] 3.5 g (수율 30 %)을 얻었다.

[0423] MS : m/z 669

[0424] [합성예 14] 화합물 44의 합성

[0425] [반응식 14-1] [화합물 44]의 합성



[0426]

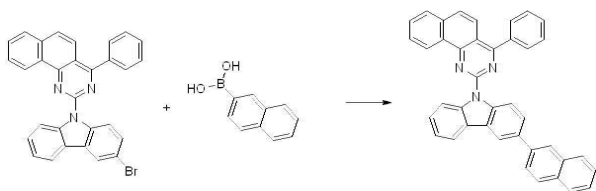
[0427] [화합물 44]

[0428] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 다이벤조싸이오펜 2-보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 44] 7.2 g (수율 80 %)을 얻었다.

[0429] MS : m/z 604

[0430] [합성예 15] 화합물 15의 합성

[0431] [반응식 15-1] [화합물 15]의 합성



[0432]

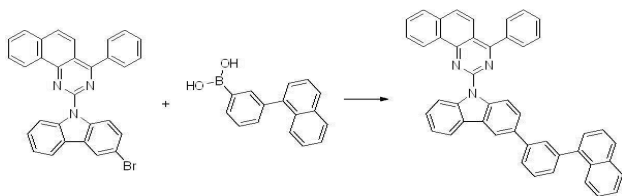
[0433] [화합물 15]

[0434] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 2-나프틸 보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 44] 8.1 g (수율 74 %)을 얻었다.

[0435] MS : m/z 548

[0436] [합성예 16] 화합물 18의 합성

[0437] [반응식 16-1] [화합물 18]의 합성



[0438]

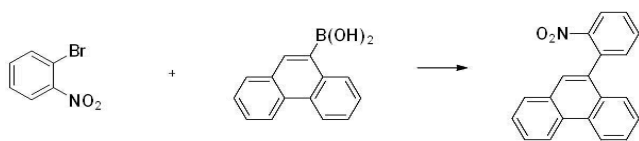
[0439] [화합물 18]

[0440] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 3-(1-나프틸)페닐보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 44] 6.2 g (수율 73 %)을 얻었다.

[0441] MS : m/z 624

[0442] [합성예 17] 화합물 32의 합성

[0443] [반응식 17-1] [중간체 17-a]의 합성

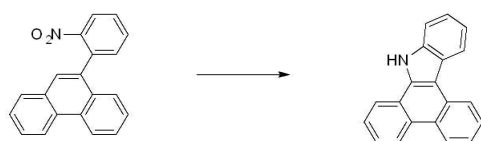


[0444]

[0445] [중간체 17-a]

[0446] 1-브로모-2-나이트로벤젠 25.0 g (124 mmol), 9-페난트릴 보론산 33.0 g (149 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 2.9 g (3 mmol), 탄산칼륨 34.2 g (248 mmol), 1,4-다이옥산 250 mL, 톨루엔 250 mL, 증류수 100 mL를 넣고 12시간 동안 환류시켰다. 에틸아세테이트를 사용하여 추출한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 [중간체 17-a] 33.2 g (수율 90 %)을 얻었다.

[0447] [반응식 17-2] [중간체 17-b]의 합성

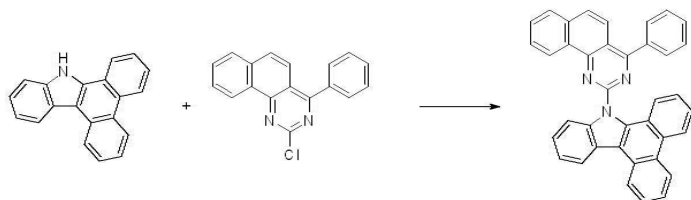


[0448]

[0449] [중간체 17-b]

[0450] 상기 [반응식 13-2]에서 사용한 [중간체 13-a] 대신 상기 [반응식 17-1]로부터 얻은 [중간체 17-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 17-b] 23.0g (수율 77 %)를 얻었다.

[0451] [반응식 17-3] [화합물 32]의 합성



[0452]

[0453] [화합물 32]

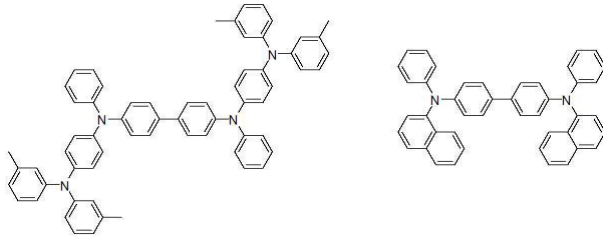
[0454] 상기 [반응식 1-4]에서 사용한 3-브로모-9H-카바졸 대신 상기 [반응식 17-2]에서 합성한 [중간체 17-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 32] 7.4 g (수율 30 %)을 얻었다.

[0455] MS : m/z 522

[0456] 실시예 : 유기 발광다이오드의 제조

[0457] ITO 글래스의 발광 면적이 $2\text{ mm} \times 2\text{ mm}$ 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1×10^{-6} torr가 되도록 한 후 유기물을 상기 ITO위에 DNTPD(700 Å), NPD(300 Å), 본 발명에 의해 제조된 화합물 + RD-1 (10%)(300 Å), 화합물 E : Liq = 1:1 (250 Å), Liq(10 Å), Al(1,000 Å)의 순서로 성막하였으며, 0.4 mA에서 측정을 하였다.

[0458] 상기 DNTPD, NPD, RD-1, 화합물 A, Liq의 구조는 다음과 같다.

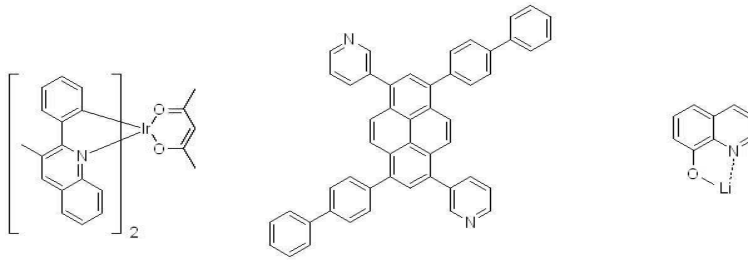


[0459]

[0460]

[DNTPD]

[NPD]



[0461]

[0462]

[RD-1]

[화합물 A]

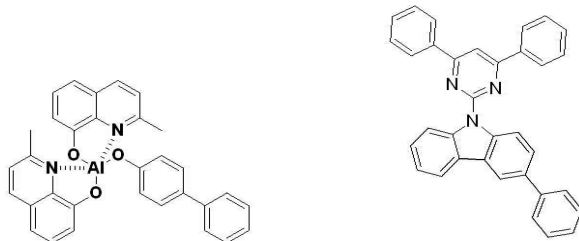
[Liq]

[0463]

비교예

[0464]

비교예를 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 대신 일반적으로 인광호스트 물질로 많이 알려져 있는 BA1q 또는 화합물 B를 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작하였으며 상기 BA1q와 화합물 B의 구조는 아래와 같다.



[0465]

[0466]

[BA1q]

[화합물 B]

[0467]

상기 실시예 1 내지 8, 비교예 1, 비교예 2에 따라 제조된 유기전계발 광소자에 대하여, 전압, 전류밀도, 휘도, 색 좌표 및 수명을 측정하고 그 결과를 하기 [표 1]에 나타내었다. T95은 휘도가 초기휘도(3000 cd/m^2)에서 95%로 감소되는데 소요되는 시간을 의미한다.

표 1

[0468]

구분	호스트	도핑농도%	V	Cd/m^2	CIEx	CIEx	T ₉₅ (Hr)
비교예1	BA1q	10	6.2	1470	0.665	0.334	40
비교예2	B	10	4.9	1210	0.664	0.335	10
실시예1	15	10	4.5	1900	0.665	0.334	340
실시예2	18	10	4.3	1910	0.665	0.334	300
실시예3	19	10	3.5	1960	0.665	0.335	280
실시예4	20	10	3.3	2000	0.666	0.333	260
실시예5	29	10	4.0	1930	0.664	0.335	240
실시예6	34	10	3.6	1750	0.664	0.335	270
실시예7	44	10	4.3	2010	0.665	0.334	300

[0469]

상기 [표 1]에서 보는 바와 같이 본 발명에 의하여 확보된 유기화합물은 인광 발광성 호스트 재료로 많이 알려져 있는 BA1q에 비하여 훨씬 낮은 구동전압을 가지고, BA1q와 화합물 B에 비하여 발광효율이 높으며 장수명을 가진다.

도면

도면1

80
70
60
50
40
30
20
10

专利名称(译)	标题：有机发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020150042387A	公开(公告)日	2015-04-21
申请号	KR1020130120939	申请日	2013-10-11
[标]申请(专利权)人(译)	SFC股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	에스에프씨주식회사		
当前申请(专利权)人(译)	에스에프씨주식회사		
[标]发明人	SHIN BONG KI 신봉기 PARK BU BAE 박부배 PARK JI HEE 박지희 LEE BONG HYANG 이봉향 PARK KYUNG HWA 박경화		
发明人	신봉기 박부배 박지희 이봉향 박경화		
IPC分类号	C09K11/06 C07D401/14 C07D403/04 C07D471/04 H01L51/50		
CPC分类号	C07D471/04 C07D403/04 C09K11/06 C07D401/14 C07D403/06 C07D403/10 C07D403/14 C07D405/14 C07D409/14 C07D495/04 C07F5/025 C07F7/0814 C09K11/025 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/1059 C09K2211/1088 C09K2211/1092 H01L51/0052 H01L51/0058 H01L51/0059 H01L51/0067 H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/0085 H01L51/0094 H01L51/5016 H01L2251/308 H01L51/0054 H01L51/0055 H01L51/0069 H01L51/5024 C09K2211/185 H01L51/5012 H01L51/504		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

有机电致发光化合物本发明涉及一种有机电致发光化合物，其特征在于是由下式(1)表示的化合物，并且采用本发明的有机电致发光化合物的有机电致发光器件是使用常规磷光主体材料的器件。可以实现更低的驱动电压，从而实现优异的功率效率，发光效率和长寿命。[化学式1]

80
70
60
50
40
30
20
10