



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0047398
(43) 공개일자 2020년05월07일

- | | |
|---|--|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
 <i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>C07D 307/91</i> (2006.01)
 <i>C07D 405/10</i> (2006.01) <i>C07D 407/10</i> (2006.01)
 <i>C07D 413/10</i> (2006.01) <i>C07D 417/10</i> (2006.01)
 <i>C07D 487/04</i> (2006.01) <i>H01L 51/00</i> (2006.01)
 <i>H01L 51/50</i> (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
 <i>C09K 11/06</i> (2013.01)
 <i>C07D 307/91</i> (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2019-0132727
 (22) 출원일자 2019년10월24일
 심사청구일자 없음
 (30) 우선권주장
 1020180129371 2018년10월26일 대한민국(KR)</p> | <p>(71) 출원인
 룸엔드하스전자재료코리아유한회사
 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)</p> <p>(72) 발명자
 김치식
 경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
 이수용
 경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
 (뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인
 장훈</p> |
|---|--|

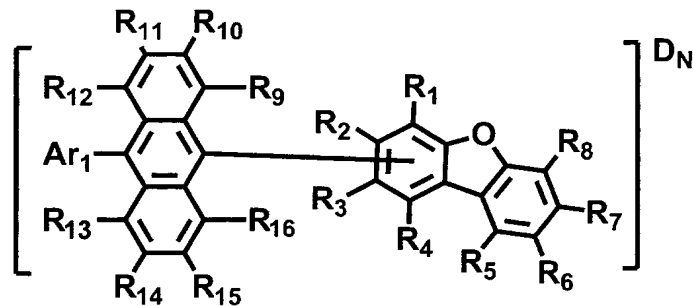
전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 발명의 명칭 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

(57) 요약

본원은 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물은 발광층에 포함될 수 있고, 발광 효율 및/또는 수명 특성이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조하는 데 효과적이다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 405/10 (2013.01)

C07D 407/10 (2013.01)

C07D 413/10 (2013.01)

C07D 417/10 (2013.01)

C07D 487/04 (2013.01)

H01L 51/0073 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

C09K 2211/1088 (2013.01)

(72) 발명자

유승훈

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

이동형

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

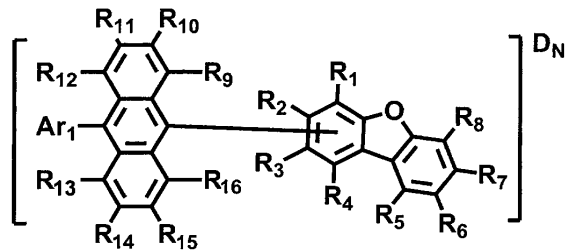
명세서

청구범위

청구항 1

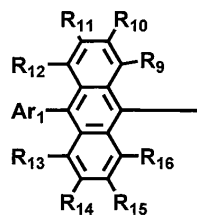
하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, 단, R₂ 내지 R₄ 중 하나는



와 결합되고;

R₉ 내지 R₁₆은 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이고;

Ar₁은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며;

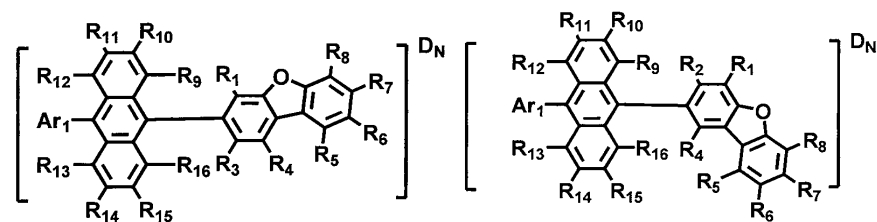
D_N은 N개의 수소가 중수소로 대체된 것을 의미하고;

N은 8 내지 50의 정수이다.

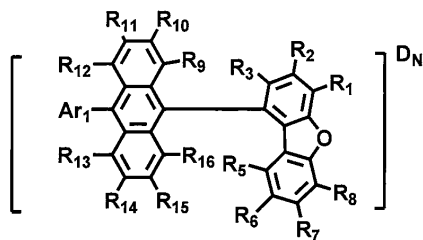
청구항 2

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시되는 것인, 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 1-1] [화학식 1-2]



[화학식 1-3]



상기 화학식 1-1 내지 1-3 에서,

R₁ 내지 R₈, R₉ 내지 R₁₆, Ar₁ 및 D_N은 청구항 1에서의 정의와 동일하고,

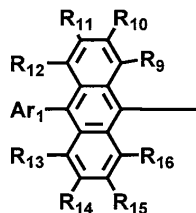
N은 8 내지 30의 정수이다.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 R₁ 내지 R₈ 및 Ar₁에서 치환된 알킬, 치환된 아릴 및 치환된 헤테로아릴의 치환기는 각각 독립적으로 중수소; 할로젠; 시아노; 카르복실; 니트로; 히드록시; (C1-C30)알킬; 할로(C1-C30)알킬; (C2-C30)알케닐; (C2-C30)알킬닐; (C1-C30)알콕시; (C1-C30)알킬티오; (C3-C30)시클로알킬; (C3-C30)시클로알케닐; (3-7원)헤테로시클로알킬; (C6-C30)아릴옥시; (C6-C30)아릴티오; (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴; (C1-C30)알킬 및 (3-30원)헤테로아릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴; 트리(C1-C30)알킬실릴; 트리(C6-C30)아릴실릴; 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴; (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴; 아미노; 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노; 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬카보닐; (C1-C30)알콕시카보닐; (C6-C30)아릴카보닐; 디(C6-C30)아릴보로닐; 디(C1-C30)알킬보로닐; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐; (C6-C30)아르(C1-C30)알킬; 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인 것인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

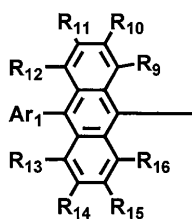


와 결합되지 않는 R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이고;

Ar₁은 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,



와 결합되지 않는 R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이고;

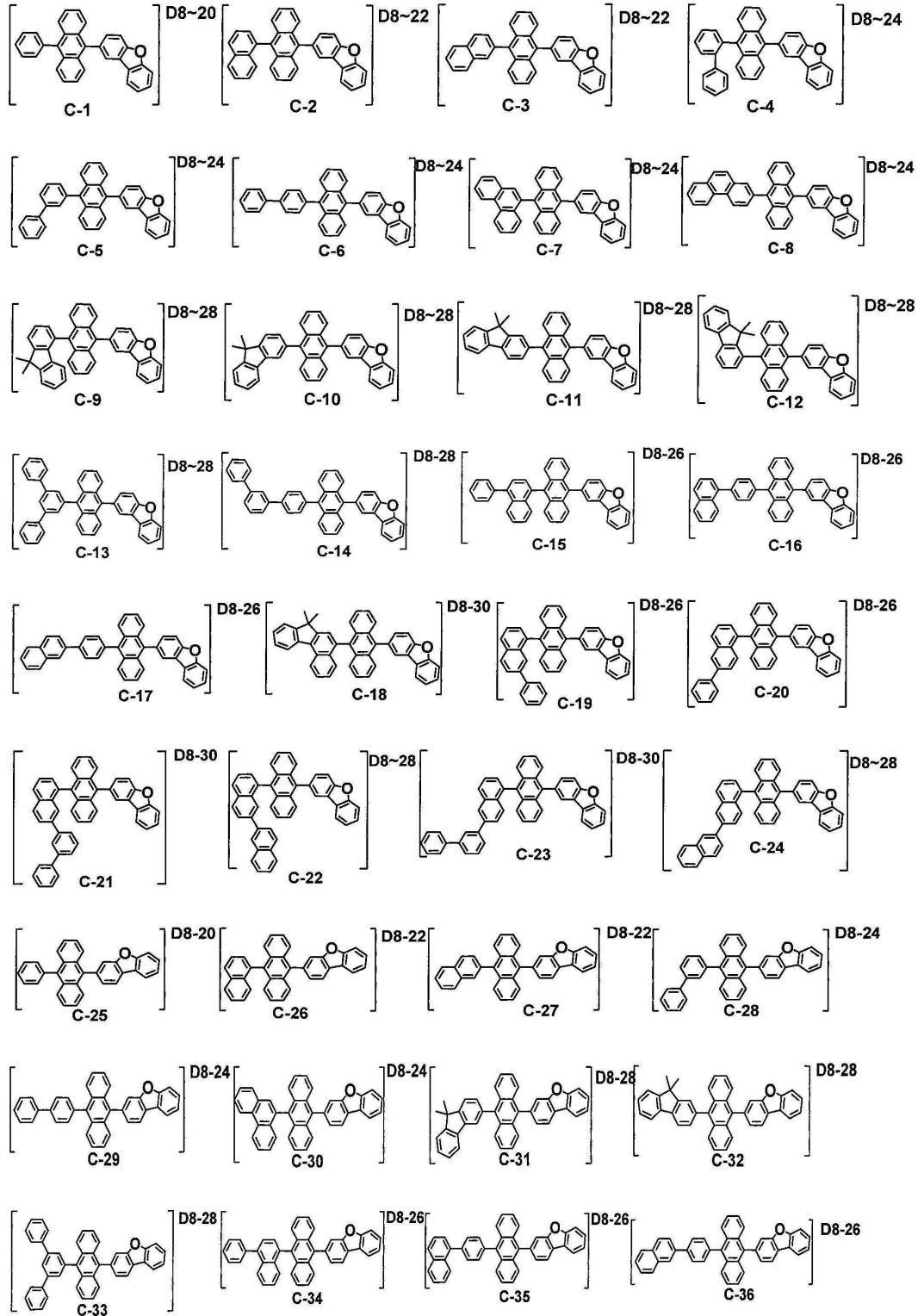
Ar₁은 (C1-C6)알킬, (C6-C15)아릴 및 (5-15원)헤테로아릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴; 또는 하나 이상의 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴인, 유기 전계 발광 화합물.

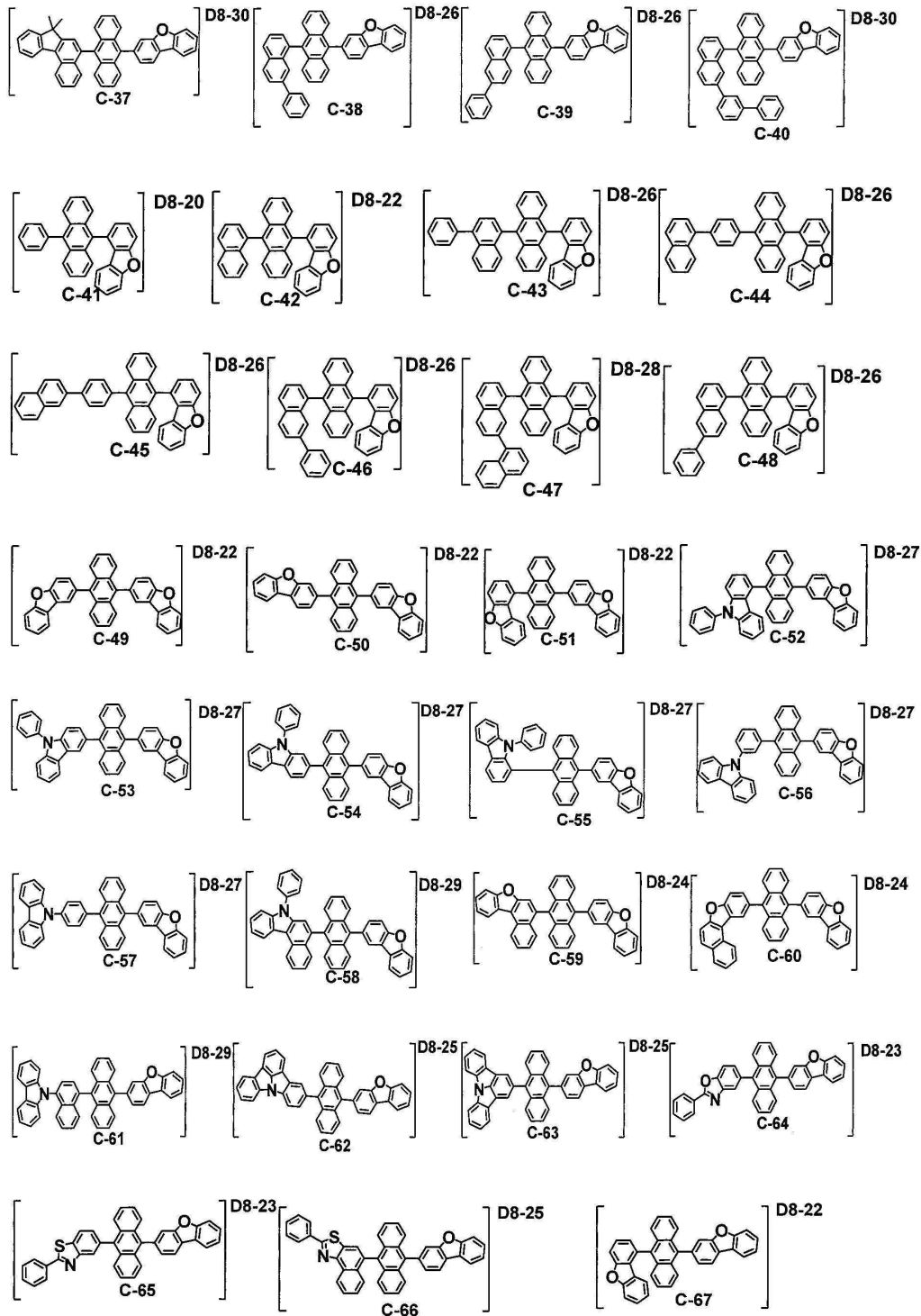
청구항 6

제1항에 있어서, 상기 N은 13 내지 30의 정수인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물들로부터 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.





청구항 8

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 재료.

청구항 9

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

청구항 10

제9항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 화합물을 발광층에 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본원은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 전계 발광 소자(electroluminescent device: EL 소자)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 전계 발광 소자(organic electroluminescent device)는 유기 발광 재료에 전기를 가해 전기 에너지를 빛으로 바꾸는 소자로서, 통상 양극(애노드) 및 음극(캐소드)과 이들 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 유기 전계 발광 소자의 유기물층은 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 차단층, 발광층(호스트 및 도판트 재료 포함), 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층, 전자 주입층 등을 포함할 수 있다. 상기 유기물층에 사용되는 재료는 기능에 따라 정공 주입재료, 정공 전달재료, 정공 보조재료, 발광 보조재료, 전자 차단재료, 발광 재료, 전자 버퍼재료, 정공 차단재료, 전자 전달재료, 전자 주입재료 등으로 나눌 수 있다. 이러한 유기 전계 발광 소자에서는 전압 인가에 의해 양극에서 정공이, 음극에서 전자가 발광층에 주입되고, 정공과 전자의 재결합에 의해 에너지가 높은 엑시톤이 형성된다. 이 에너지에 의해 유기 발광 화합물이 여기 상태로 되며, 유기 발광 화합물의 여기 상태가 기저 상태로 돌아가면서 에너지를 빛으로 방출하여 발광하게 된다.

[0004] 최근 디스플레이의 대면적화에 따라 더 섬세하고 더 선명한 색들을 나타낼 수 있는 발광 물질들이 요구되고 있다. 특히, 청색 발광 재료의 경우, 호스트 재료로 ADN, DPVBi와 같은 물질을 사용하고, 도판트 재료로는 방향족 아민계 화합물, 구리프탈로시아닌 화합물, 카바졸계 유도체, 페릴렌(Perylene)계 유도체, 쿠마린(coumarine)계 유도체, 파이렌(pyrene)계 유도체와 같은 물질을 사용하고 있으나, 색순도가 높은 진한 청색(deep blue)을 얻기가 어렵고 단파장으로 갈수록 발광 수명이 짧아지는 문제점이 있다.

[0005] 이에, 풀 컬러 디스플레이(full color display)를 구현하는 데 있어 수명이 긴 진한 청색(deep blue) 발광 재료의 개발 및 이러한 청색 발광 재료와 에너지 레벨이 맞는 다른 유기 재료들의 개발이 요구되고 있다.

[0006] 미국 등록특허공보 제8,759,818호 및 미국 공개특허공보 제2014/0001459호는 일부 수소가 중수소로 치환된 안트라센 모이어티를 포함하는 유기 전계 발광 화합물을 개시하나, 일부 수소가 중수소로 치환된 안트라센 모이어티를 포함하고 디벤조푸란이 특정한 위치에서 치환된 유기 전계 발광 화합물에 대하여는 구체적으로 개시하지 못한다.

선행기술문헌

특허문헌

[0007] (특허문헌 0001) 미국 등록특허공보 제8,759,818호 (2014.06.24 등록)
(특허문헌 0002) 미국 공개특허공보 제2014/0001459호 (2014.01.02 공개)

발명의 내용

해결하려는 과제

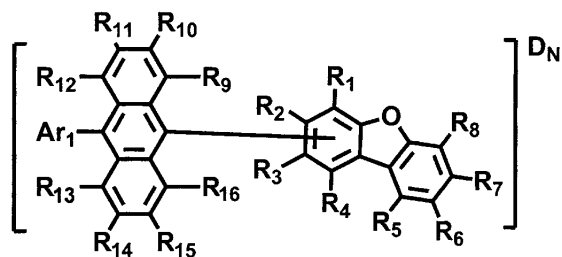
[0008] 본원의 목적은, 첫째로 우수한 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조하는데 효과적인 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며, 둘째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0009] 유기 전계 발광 소자에서 청색 발광 화합물 또는 소자의 수명 특성의 개선이 중요하다. 그런데, 유기 전계 발광 소자가 개발되었던 초창기부터 청색 호스트 재료로서 안트라센 메인 모이어티의 화합물을 사용함에 변화가 없었고, 그래서 청색 유기 전계 발광 화합물이나 소자의 수명 특성을 개선하는 데에 한계가 있었다. 수명 특성을 향

상시시키기 위한 방법으로 청색 호스트 화합물에 포함된 안트라센 화합물의 안정성을 증가시키는 방법을 생각할 수 있는데, 그 방법 중 하나가 중수소화이다. 안트라센 화합물을 중수소로 치환하면, 화합물의 영점 전자진동 에너지(zero point vibration energy)를 낮춤으로써 화합물에서의 결합 해리 에너지(BDE, bond dissociation energy)를 증가시켜 안트라센 화합물의 안정성을 증가시킬 수 있다. 도 2는 중수소화에 따른 결합 해리 에너지의 증가를 나타낸 그래프이다. 구체적으로, 본 발명자들은 특히 하기 화학식 1로 표시되는 특정 구조를 갖는 유기 전계 발광 화합물을 중수소화시킬 경우, 다른 구조의 안트라센계 화합물보다 더 현저한 수명 연장 효과가 있음을 발견하였다. 안트라센 코어에 아릴 대신 헤테로아릴을 결합시킴으로써 정공 및/또는 전자의 이동도를 향상시켜 구동전압을 줄일 수 있었다.

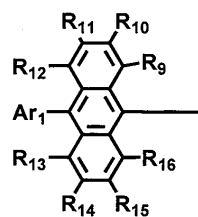
[0010] [화학식 1]



[0011]

[0012] 상기 화학식 1에서,

[0013] R_1 내지 R_8 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, 단, R_2 내지 R_4 중 하나는



와 결합되고;

[0014] R_9 내지 R_{16} 은 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이고;

[0015] Ar_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며;

[0016] D_N 은 N개의 수소가 중수소로 대체된 것을 의미하고;

[0017] N은 8 내지 50의 정수이다.

발명의 효과

[0018] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 사용함으로써 청색 발광의 수명 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0019] 도 1은 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물의 대표적인 화학식이다.

도 2는 중수소화에 따른 결합 해리 에너지의 증가를 나타낸 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0020] 이하에서 본원을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본원의 범위를 제한하도록 해석되어서는 안 된다.

[0021] 본원에서 "유기 전계 발광 화합물"은 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 화합물을 의미하며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다.

[0022] 본원에서 "유기 전계 발광 재료"는 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 재료를 의미하고, 1종 이상의 화합물

을 포함할 수 있으며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다. 예를 들면, 상기 유기 전계 발광 재료는 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료, 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료일 수 있다.

[0023] 본원의 유기 전계 발광 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 이에 한정되는 것은 아니지만, 상기 화학식 1의 화합물은 발광층 또는 정공전달층에 포함될 수 있으며, 예를 들어 발광층에 포함되는 경우 화학식 1의 화합물은 호스트로, 예를 들어 청색 발광의 호스트로 포함될 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, 상기 화학식 1의 화합물은 형광 호스트일 수 있으며, 예를 들어, 청색 발광의 형광 호스트일 수 있다.

[0024] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

[0025] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은쇄를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 1 내지 20개, 더 바람직하게는 1 내지 10개이다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알케닐"은쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 2 내지 20개, 더 바람직하게는 2 내지 10개이다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알키닐"은쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알키닐을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 2 내지 20개, 더 바람직하게는 2 내지 10개이다. 상기 알키닐의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 상기 탄소수는 바람직하게는 3 내지 20개, 더 바람직하게는 3 내지 7개이다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(3-7원)헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 3 내지 7개, 바람직하게는 5 내지 7개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군, 바람직하게는 O, S 및 N로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라하이드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라하이드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 부분적으로 포화될 수도 있다. 상기 환 골격 탄소수는 바람직하게는 6 내지 25개, 더 바람직하게는 6 내지 18개이다. 상기 아릴은 스피로 구조를 가진 것을 포함한다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 페닐터페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페틸레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 스피로비플루오레닐, 아줄레닐기 등이 있다. 더욱 구체적으로, 상기 아릴의 예로는 페닐, 1-나프틸, 2-나프틸, 1-안트릴, 2-안트릴, 9-안트릴, 벤즈안트릴, 1-페난트릴, 2-페난트릴, 3-페난트릴, 4-페난트릴, 9-페난트릴, 나프타세닐, 피레닐, 1-크리세닐, 2-크리세닐, 3-크리세닐, 4-크리세닐, 5-크리세닐, 6-크리세닐, 벤조[c]페난트릴, 벤조[g]크리세닐, 1-트리페닐레닐, 2-트리페닐레닐, 3-트리페닐레닐, 4-트리페닐레닐, 1-플루오레닐, 2-플루오레닐, 3-플루오레닐, 4-플루오레닐, 9-플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 2-비페닐일, 3-비페닐일, 4-비페닐일, o-터페닐, m-터페닐-4-일, m-터페닐-3-일, m-터페닐-2-일, p-터페닐-4-일, p-터페닐-3-일, p-터페닐-2-일, m-퀴터페닐, 3-플루오란테닐, 4-플루오란테닐, 8-플루오란테닐, 9-플루오란테닐, 벤조플루오란테닐, o-톨릴, m-톨릴, p-톨릴, 2,3-자일릴, 3,4-자일릴, 2,5-자일릴, 메시틸, o-쿠멘일, m-쿠멘일, p-쿠멘일, p-t-부틸페닐, p-(2-페닐프로필)페닐, 4'-메틸비페닐일, 4"-t-부틸-p-터페닐-4-일, 9,9-디메틸-1-플루오레닐, 9,9-디메틸-2-플루오레닐, 9,9-디메틸-3-플루오레닐, 9,9-디메틸-4-플루오레닐, 9,9-디페닐-1-플루오레닐, 9,9-디페닐-2-플루오레닐, 9,9-디페닐-3-플루오레닐, 9,9-디페닐-4-플루오레닐 등을 들 수 있다.

[0026] 본원에서 "(3-30원)헤테로아릴"은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함하며, 스피로 구조를 가진 것도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리디, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조나프토푸란일, 벤조나프토티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 나프토티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사

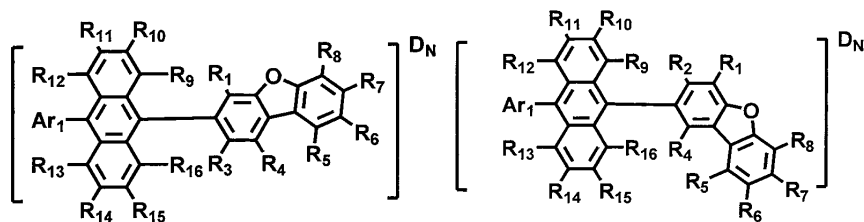
졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 벤조인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 쿠나졸리닐, 벤조퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 벤조퀴녹살리닐, 나프티리디닐, 카바졸릴, 벤조카바졸릴, 디벤조카바졸릴, 페녹사진일, 페노티아진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 더욱 구체적으로, 상기 헤테로아릴의 예로는, 1-피롤릴, 2-피롤릴, 3-피롤릴, 피라지닐, 2-피리디닐, 2-피리미디닐, 4-피리미디닐, 5-피리미디닐, 6-피리미디닐, 1,2,3-트리아진-4-일, 1,2,4-트리아진-3-일, 1,3,5-트리아진-2-일, 1-이미다졸릴, 2-이미다졸릴, 1-피라졸릴, 1-인돌리디닐, 2-인돌리디닐, 3-인돌리디닐, 5-인돌리디닐, 6-인돌리디닐, 7-인돌리디닐, 8-인돌리디닐, 2-이미다조피리디닐, 3-이미다조피리디닐, 5-이미다조피리디닐, 6-이미다조피리디닐, 7-이미다조피리디닐, 8-이미다조피리디닐, 3-피리디닐, 4-피리디닐, 1-인돌릴, 2-인돌릴, 3-인돌릴, 4-인돌릴, 5-인돌릴, 6-인돌릴, 7-인돌릴, 1-이소인돌릴, 2-이소인돌릴, 3-이소인돌릴, 4-이소인돌릴, 5-이소인돌릴, 6-이소인돌릴, 7-이소인돌릴, 2-푸릴, 3-푸릴, 2-벤조푸라닐, 3-벤조푸라닐, 4-벤조푸라닐, 5-벤조푸라닐, 6-벤조푸라닐, 7-벤조푸라닐, 1-이소벤조푸라닐, 3-이소벤조푸라닐, 4-이소벤조푸라닐, 5-이소벤조푸라닐, 6-이소벤조푸라닐, 7-이소벤조푸라닐, 2-퀴놀릴, 3-퀴놀릴, 4-퀴놀릴, 5-퀴놀릴, 6-퀴놀릴, 7-퀴놀릴, 8-퀴놀릴, 1-이소퀴놀릴, 3-이소퀴놀릴, 4-이소퀴놀릴, 5-이소퀴놀릴, 6-이소퀴놀릴, 7-이소퀴놀릴, 8-이소퀴놀릴, 2-퀴녹살리닐, 5-퀴녹살리닐, 6-퀴녹살리닐, 1-카르바졸릴, 2-카르바졸릴, 3-카르바졸릴, 4-카르바졸릴, 9-카르바졸릴, 아자카르바졸릴-1-일, 아자카르바졸릴-2-일, 아자카르바졸릴-3-일, 아자카르바졸릴-4-일, 아자카르바졸릴-5-일, 아자카르바졸릴-6-일, 아자카르바졸릴-7-일, 아자카르바졸릴-8-일, 아자카르바졸릴-9-일, 1-페난트리디닐, 2-페난트리디닐, 3-페난트리디닐, 4-페난트리디닐, 6-페난트리디닐, 7-페난트리디닐, 8-페난트리디닐, 9-페난트리디닐, 10-페난트리디닐, 1-아크리디닐, 2-아크리디닐, 3-아크리디닐, 4-아크리디닐, 9-아크리디닐, 2-옥사졸릴, 4-옥사졸릴, 5-옥사졸릴, 2-옥사디아졸릴, 5-옥사디아졸릴, 3-푸라자닐, 2-티에닐, 3-티에닐, 2-메틸피롤-1-일, 2-메틸피롤-3-일, 2-메틸피롤-4-일, 2-메틸피롤-5-일, 3-메틸피롤-1-일, 3-메틸피롤-2-일, 3-메틸피롤-4-일, 3-메틸피롤-5-일, 2-t-부틸피롤-4-일, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일, 2-메틸-1-인돌릴, 4-메틸-1-인돌릴, 2-메틸-3-인돌릴, 4-메틸-3-인돌릴, 2-t-부틸-1-인돌릴, 4-t-부틸-1-인돌릴, 2-t-부틸-3-인돌릴, 4-t-부틸-3-인돌릴, 1-디벤조푸라닐, 2-디벤조푸라닐, 3-디벤조푸라닐, 4-디벤조푸라닐, 1-디벤조티오펜, 2-디벤조티오펜, 3-디벤조티오펜, 4-디벤조티오펜, 1-실라플루오레닐, 2-실라플루오레닐, 3-실라플루오레닐, 4-실라플루오레닐, 1-게르마플루오레닐, 2-게르마플루오레닐, 3-게르마플루오레닐, 4-게르마플루오레닐 등을 들 수 있다. 본원에서 "할로젠"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0027] 또한, "오르토(ortho; o-)", "메타(meta; m-)", 및 "파라(para; p-)"는 각각 치환기의 상대적인 위치를 나타내는 접두어이다. 오르토(ortho)는 2개의 치환기가 서로 이웃하는 것을 나타내고, 일 예로 벤젠 치환체에서 치환기가 1, 2 위치에 있을 때, 오르토 위치라고 한다. 메타(meta)는 2개의 치환기가 1, 3 위치에 있는 것을 나타내며, 일 예로 벤젠 치환체에서 치환기가 1, 3 위치에 있을 때 메타 위치라고 한다. 파라(para)는 2개의 치환기가 1, 4 위치에 있는 것을 나타내며, 일 예로 벤젠 치환체에서 치환기가 1, 4 위치에 있을 때 파라 위치라고 한다.

[0028] 또한, 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환기)로 대체되는 것을 뜻한다. 본원의 R₁ 내지 R₈ 및 Ar₁ 등에서 치환된 알킬, 치환된 아릴 및 치환된 헤테로아릴의 치환기는 각각 독립적으로 중수소; 할로젠; 시아노; 카르복실; 니트로; 히드록시; (C1-C30)알킬; 할로(C1-C30)알킬; (C2-C30)알케닐; (C2-C30)알키닐; (C1-C30)알콕시; (C1-C30)알킬티오; (C3-C30)시클로알킬; (C3-C30)시클로알케닐; (3-7원)헤테로시클로알킬; (C6-C30)아릴옥시; (C6-C30)아릴티오; (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴; (C1-C30)알킬 및 (3-30원)헤테로아릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴; 트리(C1-C30)알킬실릴; 트리(C6-C30)아릴실릴; 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴; (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴; 아미노; 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노; 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬카보닐; (C1-C30)알콕시카보닐; (C6-C30)아릴카보닐; 디(C6-C30)아릴보로닐; 디(C1-C30)알킬보로닐; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐; (C6-C30)아르(C1-C30)알킬; 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이고, 본원의 일양태에 따르면, 상기 치환기는 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬, (C6-C15)아릴 및 (5-15원)헤테로아릴 중 하나 이상이다. 구체적으로, 상기 치환기는 각각 독립적으로 메틸, 페닐, 나프틸, 비페닐, 카바졸릴 중 하나 이상일 수 있다.

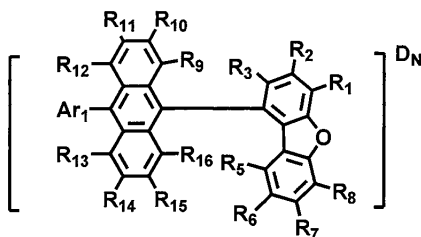
[0029] 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0030] [화학식 1-1] [화학식 1-2]



[0031]

[0032] [화학식 1-3]

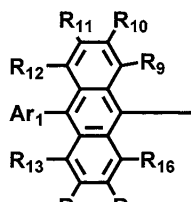


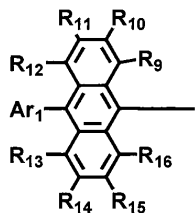
[0033]

[0034] 상기 화학식 1-1 내지 1-3에서,

[0035] R₁ 내지 R₈, R₉ 내지 R₁₆, Ar₁ 및 D_N은 화학식 1에서의 정의와 동일하다.

[0036] 상기 화학식 1에서, R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, 단, R₂ 내지

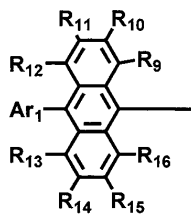
R₄ 중 하나는  와 결합된다. 본원의 일양태에 있어서는, R₂ 내지 R₄ 중 하나는



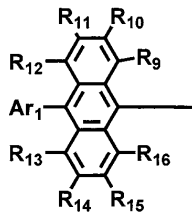
와 결합되고, R₂ 내지 R₄ 중 나머지, R₁ 및 R₅ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이다.

[0037] 상기 화학식 1에서, Ar₁은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이다. 본원의 일양태에 있어서는, Ar₁은 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고, 본원의 다른 일양태에 있어서는, Ar₁은 (C1-C6)알킬, (C6-C15)아릴 및 (5-15원)헤테로아릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴; 또는 하나 이상의 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이다. 구체적으로, Ar₁은 페닐, 나프틸, 비페닐, 터페닐, 페난트레닐, 나프틸페닐, 페닐나프틸, 비나프틸, 비페닐나프틸, 디메틸플루오레닐, 디메틸벤조플루오레닐, 카바졸릴페닐, 카바졸릴나프틸, 페닐벤조티아졸릴, 페닐벤조옥사졸릴, 디벤조티오펜일, 페닐카바졸릴, 페닐나프토티아졸릴, 벤조나프토폰란일, 페닐벤조카바졸릴, 19원 질소 함유 헤테로아릴 동일 수 있다.

[0038] 상기 화학식 1에서, D_N은 화학식 1에서 N개의 수소가 중수소로 대체된 것을 의미한다. N은 8 내지 50의 정수이며, 바람직하게는 8 내지 40의 정수이고, 더 바람직하게는 8 내지 30의 정수이고, 보다 바람직하게는 13 내지 30의 정수이다. 상기 하한 이상의 수로 중수소화되면 중수소화에 따른 결합 해리 에너지가 충분히 증가하여 수명 특성의 효과가 현저하다. 상기 상한은 각 화합물에 따라 치환될 수 있는 수소의 개수에 따라 정해진다.



[0039] 본원 발명의 일양태에 따르면, 상기 화학식 1에서, R_1 내지 R_8 은 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이고; Ar_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이다.

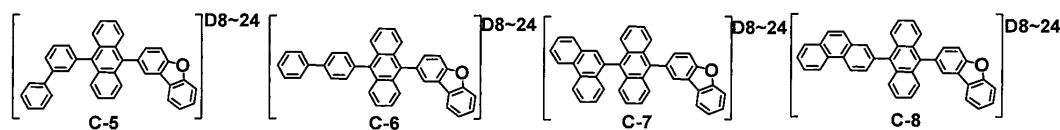
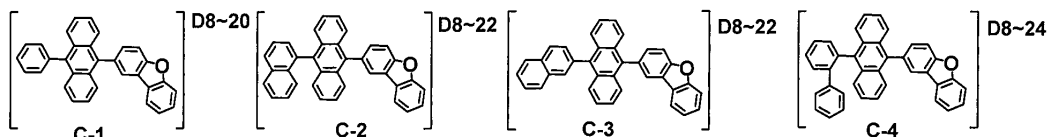


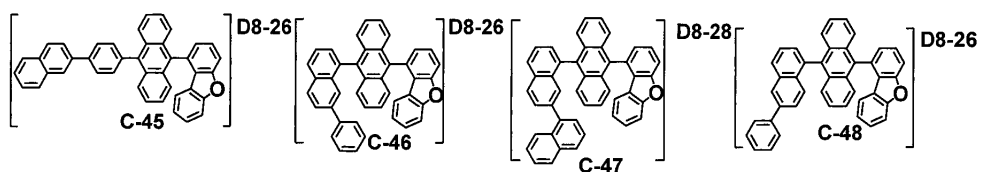
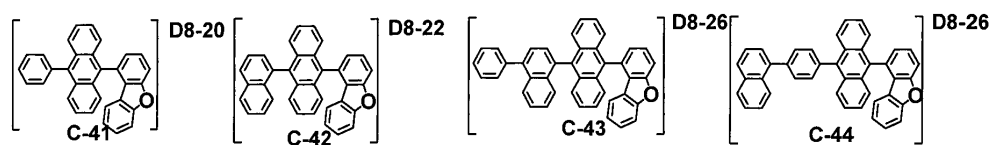
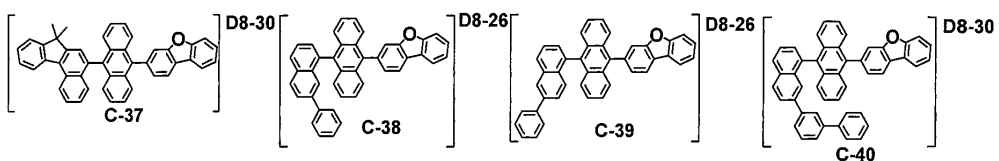
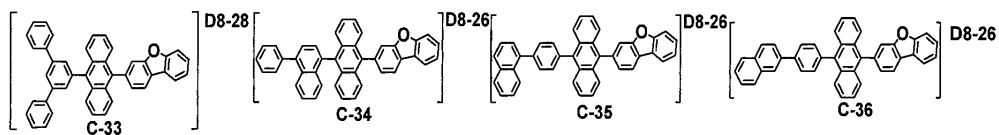
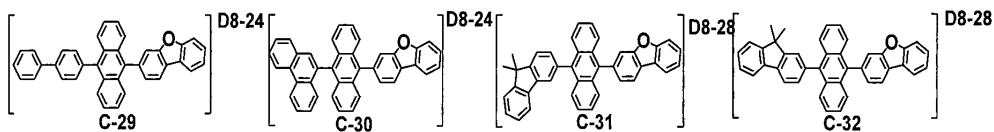
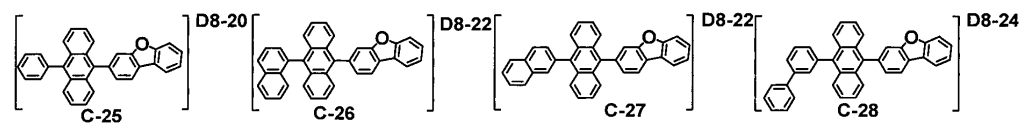
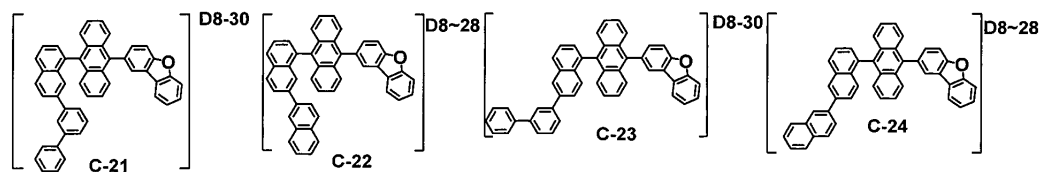
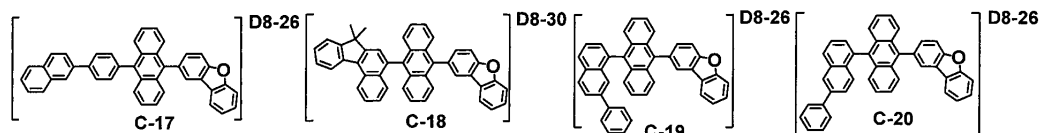
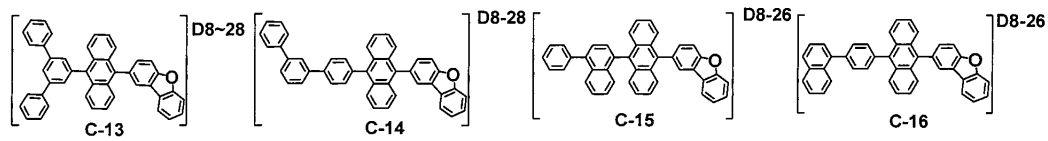
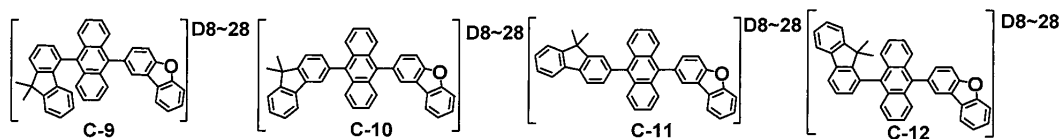
[0040] 본원 발명의 다른 일양태에 따르면, 상기 화학식 1에서, R_1 내지 R_8 은 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이고; Ar_1 은 (C1-C6)알킬, (C6-C15)아릴 및 (5-15원)헤테로아릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴; 또는 하나 이상의 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이다.

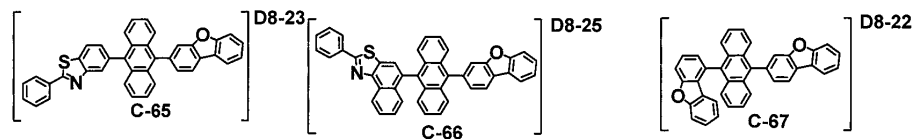
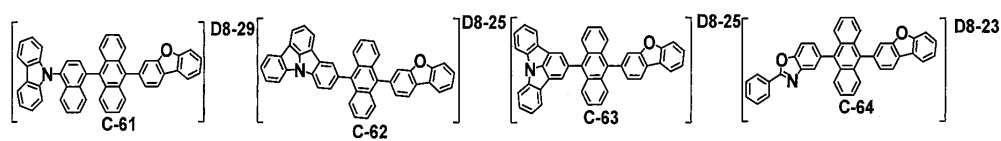
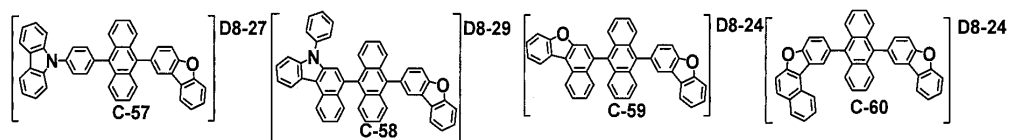
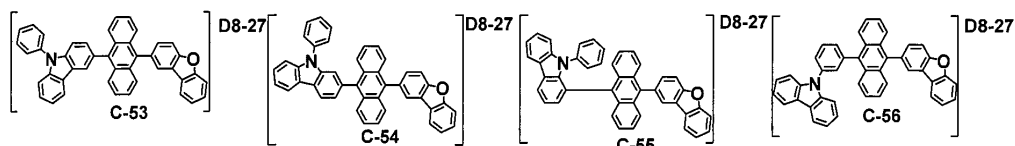
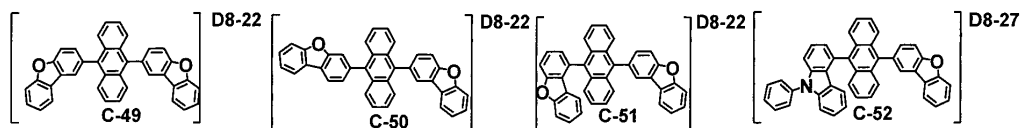
[0041] 본원 화학식에서, 인접한 치환기와 서로 연결되어 고리를 형성하는 경우, 상기 고리는 치환 또는 비치환된 (3-30원) 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리일 수 있다. 또한, 형성된 고리는 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, 상기 환 골격 원자수는 (5-20원)이고, 본원의 다른 일 양태에 따르면, 상기 환 골격 원자수는 (5-15원)이다. 예를 들면, 상기 융합된 고리는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜 고리, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 고리, 치환 또는 비치환된 나프탈렌 고리, 치환 또는 비치환된 페난트렌 고리, 치환 또는 비치환된 플루오렌 고리, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜 고리, 치환 또는 비치환된 벤조푸란 고리, 치환 또는 비치환된 인돌 고리, 치환 또는 비치환된 인덴 고리, 치환 또는 비치환된 벤젠 고리 또는 치환 또는 비치환된 카바졸 고리 형태일 수 있다.

[0042] 본원 화학식에서, 헤테로아릴은 각각 독립적으로, B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다. 또한, 상기 헤테로원자는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 및 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이 결합될 수 있다.

[0043] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

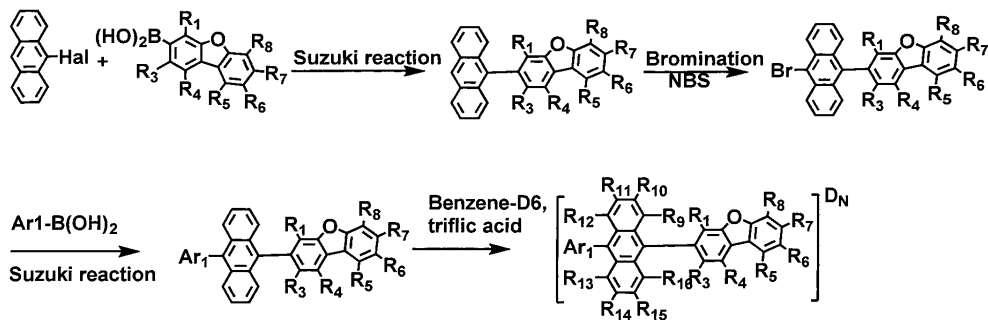




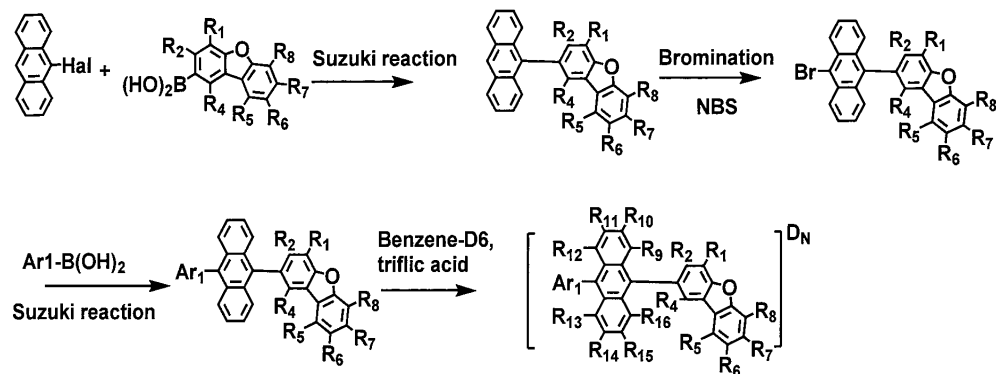


[0061] 본원에 따른 화학식 1의 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면, 하기 반응식 1 내지 3에 나타난 바와 같이 제조할 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

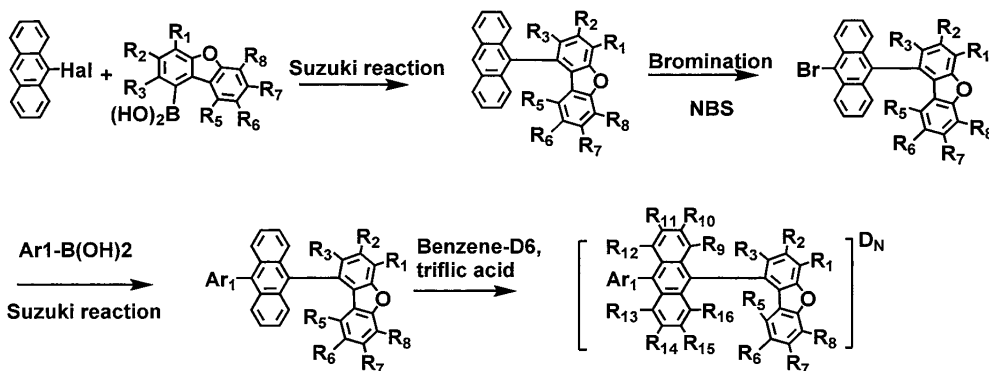
[0062] [반응식 1]



[0065] [반응식 2]



[0068] [반응식 3]



[0069]

[0070]

[0071]

상기 반응식 1 내지 3에서 Ar_1 , R_1 내지 R_8 , R_9 내지 R_{16} 및 D_N 은 화학식 1에서의 정의와 동일하고, Hal은 할로젠이다.

[0072]

또한, 화학식 1로 표시되는 화합물의 비-중수소화된 유사체는 공지된 커플링 및 치환 반응에 의해 제조될 수 있으며, 중수소화된 유사체는, 중수소화된 전구체 물질을 사용하여 유사한 방식으로, 또는 더욱 일반적으로는 알루미늄 트리클로라이드 또는 에틸 알루미늄 클로라이드와 같은 루이스산, 트리플루오로메탄설폰산 또는 트리플루오로메탄설폰산-D와 같은 H/D 교환 촉매의 존재 하에 비-중수소화된 화합물을 중수소화된 용매, D6-벤젠으로 처리함으로써 제조될 수 있다. 또한, 반응 온도와 같은 반응 조건을 달리함으로써 중수소화되는 정도를 조절할 수 있다. 예를 들면, 반응 온도와 시간, 산의 당량 등을 조절함으로써, 화학식 1에서의 n의 개수를 조절할 수 있다.

[0073]

상기에서 화학식 1로 표시되는 본 발명의 예시적 합성예를 설명하였지만, 이들은 모두 Buchwald-Hartwig cross coupling 반응, N-arylation 반응, H-mont-mediated etherification 반응, Miyaura borylation 반응, Suzuki cross-coupling 반응, Intramolecular acid-induced cyclization 반응, Pd(II)-catalyzed oxidative cyclization 반응, Grignard 반응, Heck reaction, Cyclic Dehydration 반응, SN_1 치환 반응, SN_2 치환 반응, 및 Phosphine-mediated reductive cyclization 반응 등에 기초한 것으로 구체적 합성예에 명시된 치환기 이외에 화학식 1에 정의된 다른 치환기가 결합되더라도 상기 반응이 진행된다는 것을 당업자라면 쉽게 이해할 수 있을 것이다.

[0074]

본원은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다. 상기 재료는 본원의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0075]

본원에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖고, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다.

[0076]

상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 버퍼층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

[0077]

여기서 제2 전극은 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있고, 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0078]

상기 제1 전극 및 제2 전극은 각각 투명한 도전성 물질로 형성되거나, 반투과형 또는 반사형 도전성 물질로 형성될 수 있다. 상기 제1 전극 및 제2 전극을 형성하는 물질의 종류에 따라, 유기 전계 발광 소자는 전면 발광형, 배면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다. 또한, 상기 정공 주입층은 p-도판트로 추가로 도핑될 수 있으며, 전자 주입층은 n-도판트로 추가로 도핑될 수 있다.

[0079]

본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 버퍼층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층 중 어느 하나의 층 이상에 포함될 수 있다. 경우에 따라 바람직하게는, 발광층에 포함될 수 있다. 발광층에 사용될 경우, 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는, 상기 발광층은 하나

이상의 도판트를 추가로 더 포함할 수 있다. 필요한 경우, 본원의 유기 전계 발광 화합물은 코호스트(co-host) 재료로 사용될 수 있다. 즉, 발광층은 본원의 화학식 1 의 유기 전계 발광 화합물(제1 호스트 재료) 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다. 이 때, 제1 호스트 재료와 제2 호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

- [0080] 본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로는 하나 이상의 인광 또는 형광 도판트를 사용할 수 있고, 형광 도판트가 바람직할 수 있다. 본원의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 형광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않는다.
- [0081] 상기 유기물층에 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 추가로 포함할 수도 있다.
- [0082] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층은 1족, 2족, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란타넘계 금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속, 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체화합물을 추가로 포함할 수도 있다.
- [0083] 또한, 본원의 상기 유기 전계 발광 소자는 본원의 화합물 이외에 당업계에 알려진 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함하는 발광층 하나 이상을 더 포함함으로써 백색 발광을 할 수 있다. 또한, 필요에 따라, 황색 또는 오렌지색 발광층을 더 포함할 수도 있다.
- [0084] 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 하나 이상의 층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 애노드 표면에 규소 및 알루미늄의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 캐소드 표면에 할로겐화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 유기 전계 발광 소자의 구동 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 SiO_x ($1 \leq x \leq 2$), AlO_x ($1 \leq x \leq 1.5$), SiON , SiAlON 등이 있고, 할로겐화 금속의 바람직한 예로는 LiF , MgF_2 , CaF_2 , 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등이 있다.
- [0085] 애노드와 발광층 사이에 정공 주입층, 정공 전달층 또는 전자 차단층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 정공 주입층은 애노드에서 정공 전달층 또는 전자 차단층으로의 정공 주입 장벽(또는 정공 주입 전압)을 낮출 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공 전달층 또는 전자 차단층도 복수의 층이 사용될 수 있다.
- [0086] 발광층과 캐소드 사이에 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층 또는 전자 주입층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 전자 버퍼층은 전자 주입을 조절하고 발광층과 전자 주입층 사이의 계면 특성을 향상시킬 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공 차단층 또는 전자 전달층도 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다.
- [0087] 발광 보조층은 애노드와 발광층 사이에 위치하거나, 캐소드와 발광층 사이에 위치하는 층으로서, 상기 애노드와 발광층 사이에 위치할 경우, 정공의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 전자의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용되거나, 상기 캐소드와 발광층 사이에 위치할 경우, 전자의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 정공의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있다. 또한, 상기 정공 보조층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도(또는 주입 속도)를 원활하게 하거나 블록킹하는 효과를 나타낼 수 있으며, 이에 따라 전하 밸런스(charge balance)를 조절할 수 있는 층이다. 또한, 상기 전자 차단층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 발광층으로부터의 전자의 오버플로우를 차단하여 엑시톤을 발광층 내에 가두어 발광 누수를 방지하는 층이다. 상기 정공 전달층을 2층 이상 포함할 경우, 추가로 포함되는 층을 상기 정공 보조층 또는 상기 전자 차단층의 용도로 사용할 수 있다. 상기 정공 보조층과 전자 차단층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및/또는 수명의 개선효과를 갖는다.
- [0088] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들

수 있고, 바람직한 환원성 도판트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진 백색 발광을 하는 유기 전계 발광소자를 제조할 수 있다.

[0089] 본원의 일예에 따른 유기 전계 발광 재료는 백색 유기 전계 발광 소자(White Organic Light Emitting Device)를 위한 발광 재료로서 사용될 수 있다. 상기 백색 유기 전계 발광 소자는 R(적색), G(녹색) 또는 YG(황녹색), B(청색) 발광부들의 배열 형태에 따라 병렬 배치(side-by-side) 방식, 적층(stack) 방식, 또는 색변환 물질(color conversion material, CCM) 방식 등 다양한 구조들이 제안되고 있다. 또한, 본 원의 일 예에 따른 유기 전계 발광 물질은 양자점(QD)을 포함하는 유기 전계 발광 소자에도 사용될 수 있다.

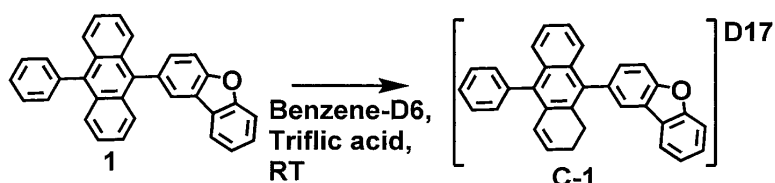
[0090] 본원의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막법이나 잉크 젯 프린팅(ink jet printing), 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

[0091] 습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로푸란, 디옥산 등의 적절한 용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 각 층을 형성하는 재료가 용해 또는 분산될 수 있고, 성막성에 문제가 없는 것이라면 어느 것이어도 된다.

[0092] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 디스플레이 장치, 예를 들면, 스마트폰, 태블릿, 노트북, PC, TV 또는 차량용의 디스플레이 장치, 또는 조명 장치, 예를 들면, 옥외 또는 옥내용 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

[0093] 이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 대표 화합물을 들어 본원에 따른 화합물의 제조방법 및 이의 물성, 그리고 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자의 발광특성을 설명한다. 그러나, 본 발명은 하기의 예들에 한정되는 것은 아니다.

[실시예 1] 화합물 C-1의 제조



[0095]

[0096] 플라스크에 화합물 1 (3.5 g, 8.3 mmol) 및 벤젠-D6 100 mL를 넣고 가열하여 화합물 1을 모두 녹였다. 그리고 상온으로 냉각하고 트리플릭산 (4.4 mL, 49.8 mmol)을 넣었다. 상온에서 2시간 30분 교반한 후 중수 20 mL를 넣었다. 10분 교반한 후 K_3PO_4 수용액으로 중성화하였다. 디클로로메탄으로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하였다. 얻어진 유기층을 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-1 (1.5 g, 41.3%)을 얻었다. 중수소의 치환 개수는 분자량 및 NMR로 확인하였다.

MW	M.P.
437.61	279.2℃

[0097]

[소자 제조에 1] 본원 발명에 따른 화합물을 포함하는 OLED 제조

[0099] 본원 발명의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED 용 글래스(지오마텍사 제조) 기판 상의 투명 전극 ITO 박막($10\Omega/\square$)을 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 HI-1을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 60 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HI-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 HT-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 20 nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HT-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 전달층

을 증착하였다. 정공 주입층 및 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀에 발광층 호스트로서 화합물 C-1을 넣고, 또 다른 셀에는 발광층 도판트로서 화합물 BD를 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 2 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 20 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ET-1과 화합물 EI-1을 1:1의 중량비로 증발시켜 발광층 위에 35 nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서, 전자 주입층으로 화합물 EI-1을 상기 전자 전달층 위에 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 캐소드를 상기 전자 주입층 위에 80 nm의 두께로 증착하여 OLED를 제조하였다.

그 결과, 2000 nit의 휘도에서 발광이 100%에서 95%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 76시간이었다.

[비교예 1] 종래의 화합물을 포함하는 OLED 제조

발광층 호스트 재료로서 화합물 H-1을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED를 제조하였다.

그 결과, 2000 nit의 휘도에서 발광이 100%에서 95%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 11시간이었다.

[비교예 2] 종래의 화합물을 포함하는 OLED 제조

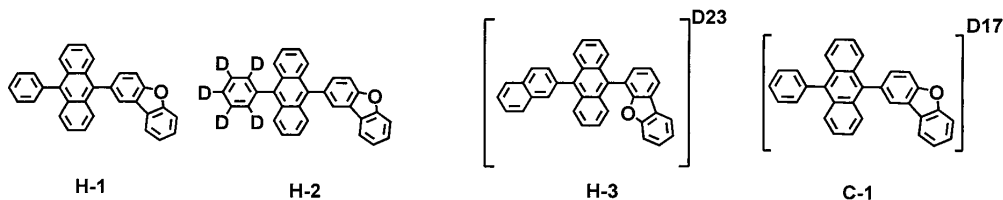
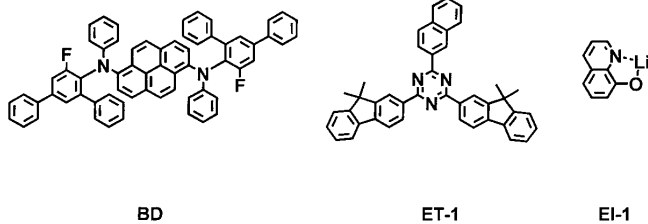
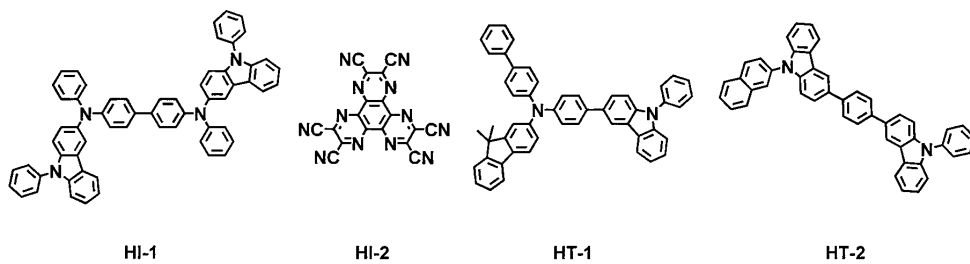
발광층 호스트 재료로서 화합물 H-2을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED를 제조하였다.

그 결과, 2000 nit의 휘도에서 발광이 100%에서 95%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 25시간이었다.

[비교예 3] 종래의 화합물을 포함하는 OLED 제조

발광층 호스트 재료로서 화합물 H-3을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED를 제조하였다.

그 결과, 2000 nit의 휘도에서 발광이 100%에서 95%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 13시간이었다.

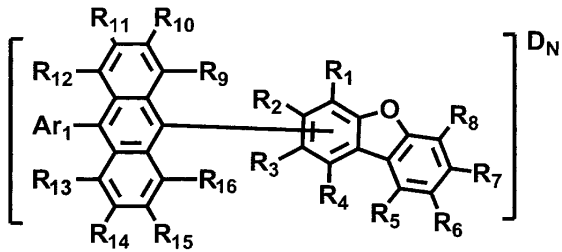


본원에서는 발광층의 호스트 화합물에 중수소를 치환하여 유기 전계 발광 소자를 제조함으로써 수명 특성이 종래의 화합물을 호스트로 사용한 유기 전계 발광 소자에 비해 월등히 우수함을 확인하였다. 이는, 중수소로 치환된 화합물은 중수소로 치환되지 않거나 적은 수의 중수소로 치환된 화합물에 비하여 영점 전자진동 에너지(zero point vibration energy)가 낮아지게 됨으로 인해 물질의 안정성이 향상되어 OLED의 수명 특성이 향상되는 효과를 나타낸 것으로 이해된다. 또한, 이론으로써 한정하려는 것은 아니나, 형광 청색 유기 전계 발광 소자의 수명을 향상시키기 위해서는 전자 이동도를 조절할 필요가 있는데, 디벤조푸란은 아릴보다 빠른 정공 이동도를 갖기

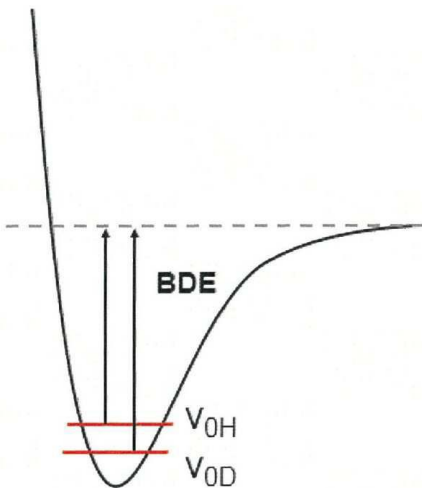
때문에 전자 이동도가 떨어지는 효과를 낼 수 있다. 이론으로써 한정하려는 것은 아니나, 전자 이동도가 떨어지면 인접층의 변성(degradation)이 줄어들어 수명이 상승할 수 있는데, 이러한 효과에 있어서 아릴로 치환된 안트라센을 중수소화한 화합물보다 디벤조푸란으로 치환된 안트라센을 중수소화한 화합물이 유리할 수 있다.

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	有机电致发光化合物和包括该化合物的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020200047398A	公开(公告)日	2020-05-07
申请号	KR1020190132727	申请日	2019-10-24
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	김치식 이수용 유승훈 이동형		
发明人	김치식 이수용 유승훈 이동형		
IPC分类号	C09K11/06 C07D307/91 C07D405/10 C07D407/10 C07D413/10 C07D417/10 C07D487/04 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D307/91 C07D405/10 C07D407/10 C07D413/10 C07D417/10 C07D487/04 H01L51/0073 H01L51/5012 C09K2211/1088		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020180129371 2018-10-26 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本申请涉及式1表示的有机电致发光化合物和包括该化合物的有机电致发光器件。根据本申请的有机电致发光化合物可以被包括在发光层中，并且在制造具有优异的发光效率和/或寿命特性的有机电致发光器件中是有效的。

