



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0057797
(43) 공개일자 2017년05월25일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01)
C07D 251/12 (2006.01) C07D 307/91 (2006.01)
C07D 403/10 (2006.01) C07D 403/14 (2006.01)
C07D 405/14 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C09K 11/06 (2013.01)
C07D 209/82 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2015-0161428

(22) 출원일자 2015년11월17일

심사청구일자 2015년11월17일

(71) 출원인

에스케이케미칼주식회사

경기도 성남시 분당구 판교로 310 (삼평동)

(72) 발명자

신용준

서울특별시 서대문구 수색로 100 DMC 레미안 이편
한세상 114동 2503호

박정호

경기도 성남시 분당구 동판교로 275 풍성신미주
아파트 121동 504호

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

특허법인 다해

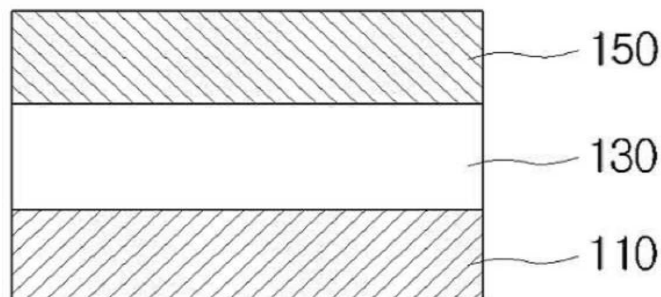
전체 청구항 수 : 총 12 항

(54) 발명의 명칭 유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자

(57) 요약

본 발명은 유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자를 제공하며, 이에 의하여 인광발광재료의 색순도 및 발광효율을 향상 시킬 수 있는 발광층의 호스트로서 사용할 수 있는 유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자를 제공할 수 있다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 251/12 (2013.01)
C07D 307/91 (2013.01)
C07D 403/10 (2013.01)
C07D 403/14 (2013.01)
C07D 405/14 (2013.01)
H01L 51/0067 (2013.01)
H01L 51/50 (2013.01)
C09K 2211/1007 (2013.01)
C09K 2211/1059 (2013.01)

(72) 발명자

전석운

경기도 수원시 팔달구 정자천로32번길 27 꽃피버들
마을금강아파트 151-2305

강주식

경기도 화성시 동탄반석로 232 신일유토빌아파트
131-2403

장유미

경기도 광주시 송정로 69 나산아파트 102동 1504호

양남철

서울특별시 서초구 바우피로 91 우성아파트
110-507

박재균

서울특별시 관악구 인현12길 46-1 은천아파트 202
동 306호

이송

서울특별시 강남구 광평로47길 17, 신동아아파트
708동 1202호

채희일

경기도 수원시 팔달구 권광로348번길 17-6 하이빌
109동 201호

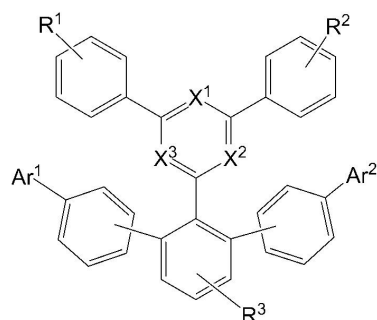
명세서

청구범위

청구항 1

하기 구조식 1로 표시되는 유기전계발광소자용 화합물.

[구조식 1]



구조식 1에서,

X^1 내지 X^3 중에서 선택된 적어도 어느 하나는 질소원자이고, 나머지는  이고,

R^4 는 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

Ar^1 및 Ar^2 는 같거나 서로 다르고, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, R^1 및 R^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

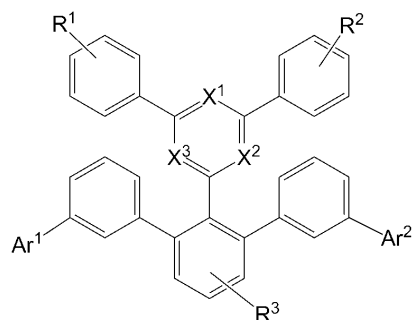
R^3 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 2로 표시되고,

[구조식 2]



구조식 2에서,

X^1 내지 X^3 중에서 선택된 적어도 어느 하나는 질소원자이고, 나머지는  이고,

R^4 는 수소원자, 중수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

Ar^1 및 Ar^2 는 같거나 서로 다르고, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

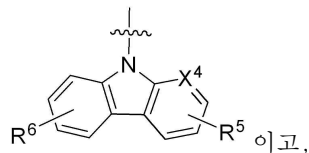
R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, R^1 및 R^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

R^3 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

청구항 3

제2항에 있어서,

Ar^1 및 Ar^2 는 같거나 서로 다르고, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 또는



X^4 는 질소원자 또는  이고,

R^7 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

R^5 및 R^6 은 서로 같거나 다르고, R^5 및 R^6 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기인 것을

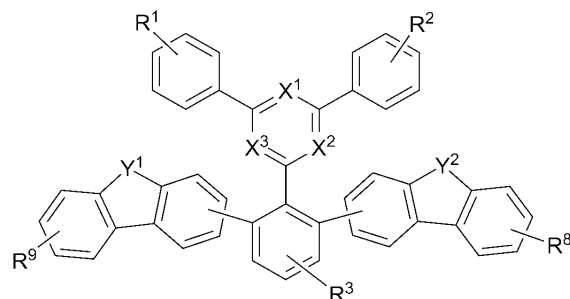
특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 3으로 표시되고,

[구조식 3]

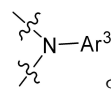


구조식 3에서,

X^1 내지 X^3 중에서 선택된 적어도 어느 하나는 질소원자이고, 나머지는 이고,

R^4 는 수소원자, 중수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, R^1 및 R^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

Y^1 및 Y^2 는 서로 같거나 다르고, Y^1 및 Y^2 는 각각 독립적으로 산소원자, 황원자, 또는 이고,

Ar^3 는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

R^8 및 R^9 는 서로 같거나 다르고, R^8 및 R^9 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

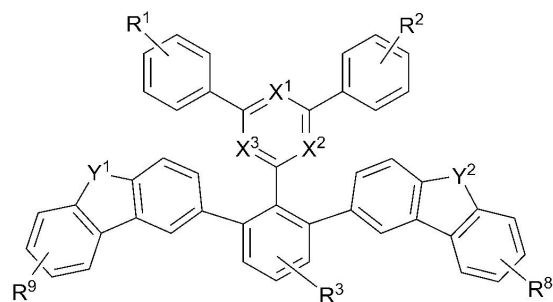
R^3 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

청구항 5

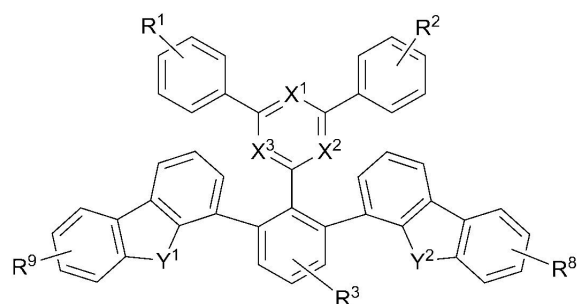
제4항에 있어서,

상기 구조식 3으로 표시되는 화합물은 하기 구조식 4로 표시되는 화합물 또는 하기 구조식 5로 표시되는 화합물이고,

[구조식 4]



[구조식 5]



구조식 4 및 구조식 5에서,

X^1 내지 X^3 중에서 선택된 적어도 어느 하나는 질소원자이고, 나머지는 $\text{C}=\text{R}^4$ 이고,

R^4 는 수소원자, 중수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, R^1 및 R^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

Y^1 및 Y^2 는 서로 같거나 다르고, Y^1 및 Y^2 는 각각 독립적으로 산소원자, 황원자, 또는 $\text{N}-\text{Ar}^3$ 이고,

Ar^3 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

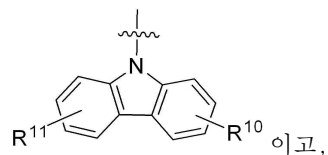
R^8 및 R^9 는 서로 같거나 다르고, R^8 및 R^9 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

R^3 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

청구항 6

제5항에 있어서,

R^8 및 R^9 는 서로 같거나 다르고, R^8 및 R^9 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 또는

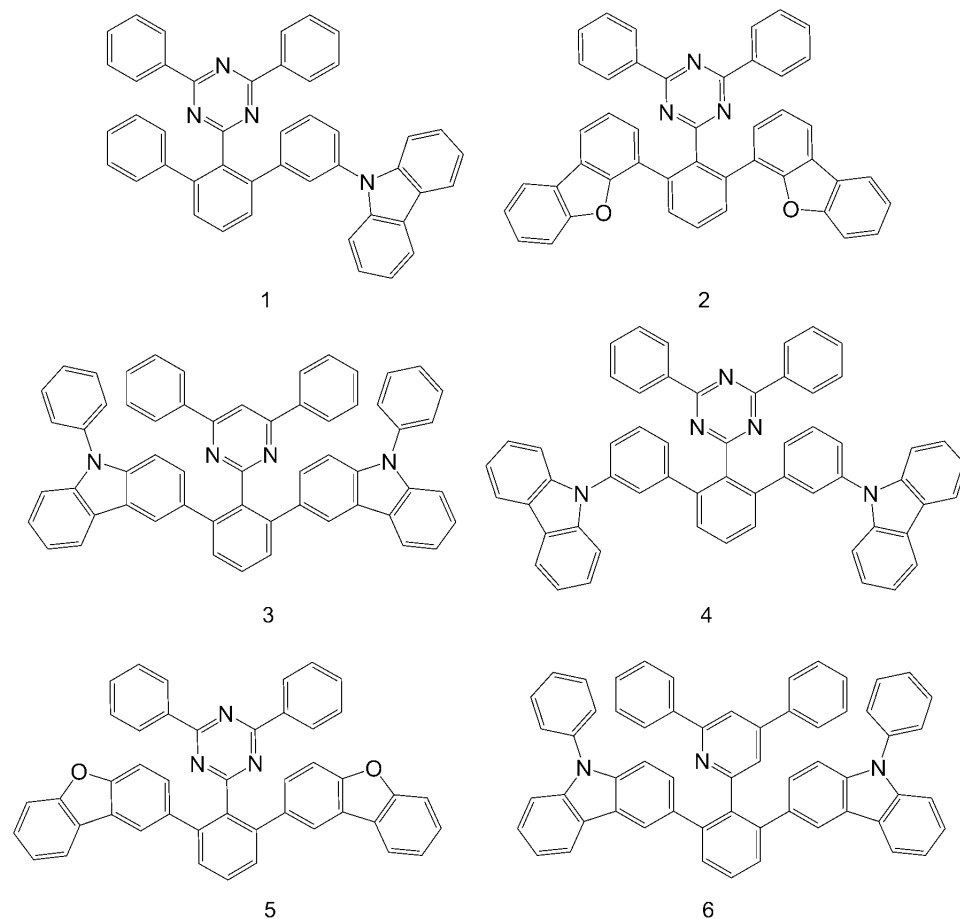


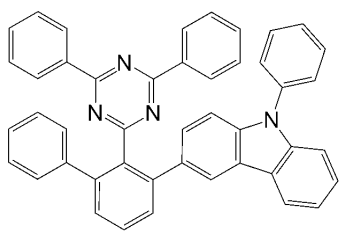
R^{10} 및 R^{11} 은 서로 같거나 다르고, R^{10} 및 R^{11} 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

청구항 7

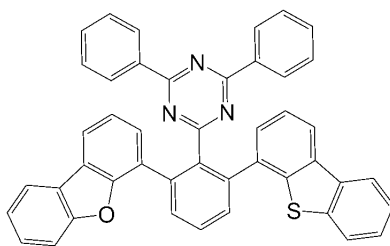
제1항에 있어서,

상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 화학식으로 표시되는 화합물 1 내지 18 중에서 선택된 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

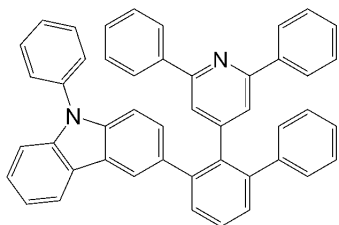




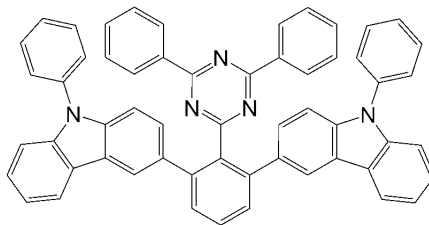
7



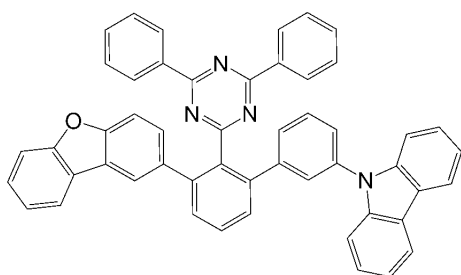
8



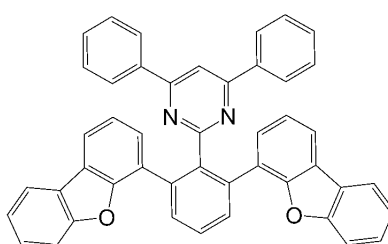
9



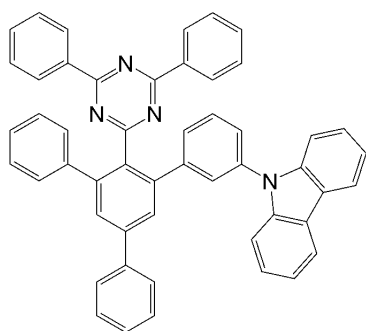
10



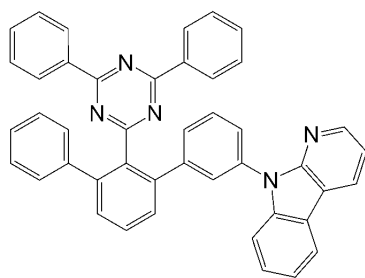
11



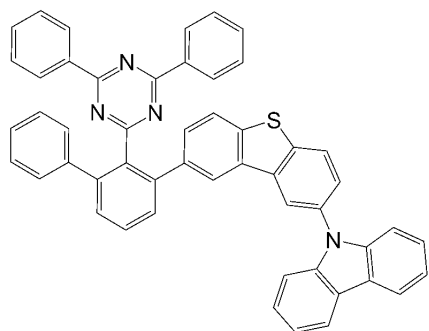
12



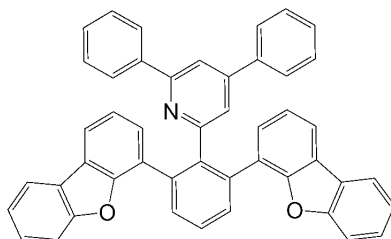
13



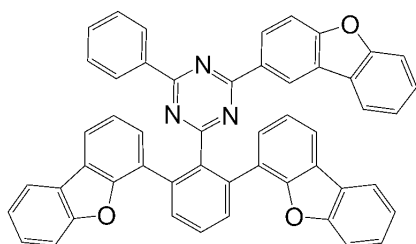
14



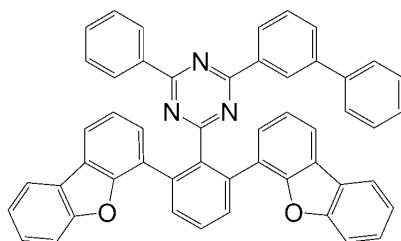
15



16



17



18

청구항 8

제1항에 따른 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계발광소자.

청구항 9

제1전극, 제2전극 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 단수 또는 복수의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자에 있어서,

상기 단수 또는 복수의 유기물층 중에서 선택된 1종 이상의 유기물층은 제1항에 따른 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 10

제9항에 있어서,

상기 단수 또는 복수의 유기물층은 발광층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 11

제9항에 있어서,

상기 복수의 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 복수의 유기물층은 전자주입층, 전자수송층, 정공차단층, 전자차단층, 정공수송층 및 정공주입층 중에서 선택된 1종 이상을 추가로 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계

발광소자.

청구항 12

제10항에 있어서,

상기 발광층은 호스트와 도펀트를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 유기전계발광소자의 발광효율을 향상시킬 수 있는 유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기전계발광소자는 기존 액정 표시 장치(LCD), 플라즈마 디스플레이 패널(PDP) 그리고 전계 방출 디스플레이(FED)등의 타 평판 표시 소자에 비해 구조가 간단하고, 제조 공정상 다양한 장점이 있으며 높은 휘도 및 시야각 특성이 우수하며, 응답속도가 빠르고 구동전압이 낮아 벽걸이 TV등의 평판 디스플레이 또는 디스플레이의 배면광, 조명, 광고판 등의 광원으로 사용되도록 활발하게 개발이 진행되고 있다.

[0003] 유기전계발광소자는 일반적으로 직류 전압을 인가하였을 때 양극으로부터 주입된 정공과 음극으로부터 주입된 전자가 재결합하여 전자-정공 쌍인 엑시톤을 형성하며 이 엑시톤이 안정한 바닥 상태로 돌아오면서 그에 해당하는 에너지를 발광 재료에 전달함에 의해 빛으로 변환된다.

[0004] 유기전계발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위해 이스트만 코닥사의 탕(C. W. Tang) 등에 의해 두 개의 반대 전극 사이에 적층형 유기물 박막을 구성하여 저전압 구동 유기전계발광소자가 보고(C. W. Tang, S. A. Vanslyke, Applied Physics Letters, 51권 913페이지, 1987년)된 이래, 다층 박막 구조형 유기전계발광소자용 유기 재료에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. 이러한 적층형 유기전계발광소자의 효율과 수명은 박막을 구성하는 재료의 분자구조와 관련이 깊다. 예컨대, 박막을 구성하는 재료 중 발광재료, 정공수송층 물질, 또는 전자수송층 물질 등의 구조에 따라 양자효율이 크게 영향을 받으며, 열안정성이 떨어질 경우 고온 또는 구동온도에 서 재료의 결정화가 이루어져 소자의 수명을 단축시키는 원인이 되고 있다.

[0005] 특히 상기 유기전계발광소자의 박막 구성 재료 중 크게 호스트물질과 발광물질(도펀트)로 나눌 수 있는 발광재료의 경우, 발광 기작에 따라 형광과 인광으로 구별되는데, 인광 발광재료를 사용하는 경우 기존의 물질보다 높은 효율과 색순도, 그리고 장수명을 만족시킬 수 있는 인광 호스트 물질이 필요한 실정이다.

발명의 내용

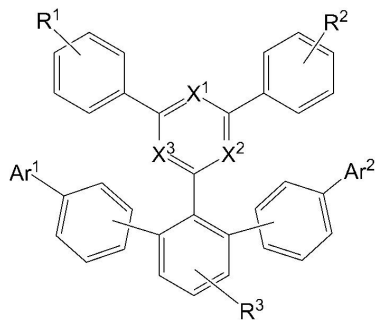
해결하려는 과제

[0006] 본 발명은 전기적 안정성이 우수하며, 고효율과 높은 색순도 및 장수명을 구현할 수 있고, 순청 발광을 보이며, 호스트로서 인광 발광층에 사용될 수 있는 유기발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공할 수 있다.

과제의 해결 수단

[0007] 본 발명의 하나의 측면에 따르면, 하기 구조식 1로 표시되는 유기전계발광소자용 화합물이 제공된다.

[0008] [구조식 1]



[0009]

[0010] 구조식 1에서,

[0011] X^1 내지 X^3 중에서 선택된 적어도 어느 하나는 질소원자이고, 나머지는  이고,

[0012] R^4 는 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

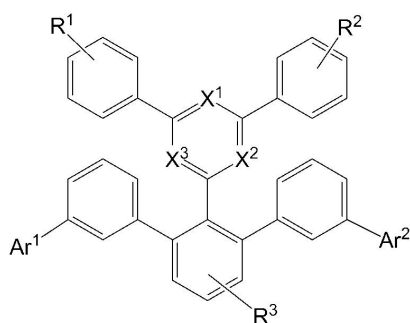
[0013] Ar^1 및 Ar^2 는 같거나 서로 다르고, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0014] R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, R^1 및 R^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0015] R^3 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이다.

[0016] 바람직하게는, 상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 2로 표시되고,

[0017] [구조식 2]



[0018]

[0019] 구조식 2에서,

[0020] X^1 내지 X^3 중에서 선택된 적어도 어느 하나는 질소원자이고, 나머지는  이고,

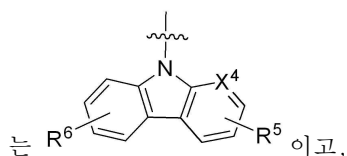
[0021] R^4 는 수소원자, 중수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

[0022] Ar^1 및 Ar^2 는 같거나 서로 다르고, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0023] R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, R^1 및 R^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0024] R^3 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0025] 또한 바람직하게는, Ar^1 및 Ar^2 는 같거나 서로 다르고, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 또



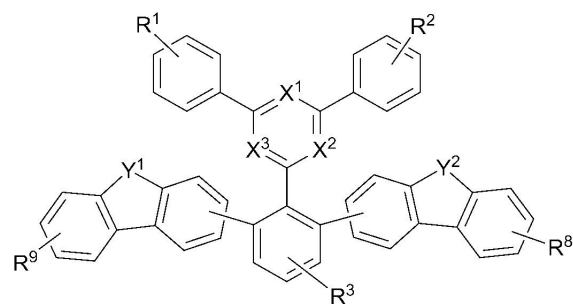
[0026] X^4 는 질소원자 또는  이고,

[0027] R^7 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0028] R^5 및 R^6 은 서로 같거나 다르고, R^5 및 R^6 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0029] 또한 바람직하게는, 상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 3으로 표시되고,

[0030] [구조식 3]



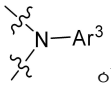
[0031]

[0032] 구조식 3에서,

[0033] X^1 내지 X^3 중에서 선택된 적어도 어느 하나는 질소원자이고, 나머지는  이고,

[0034] R^4 는 수소원자, 중수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

[0035] R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, R^1 및 R^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0036] Y^1 및 Y^2 는 서로 같거나 다르고, Y^1 및 Y^2 는 각각 독립적으로 산소원자, 황원자, 또는  이고,

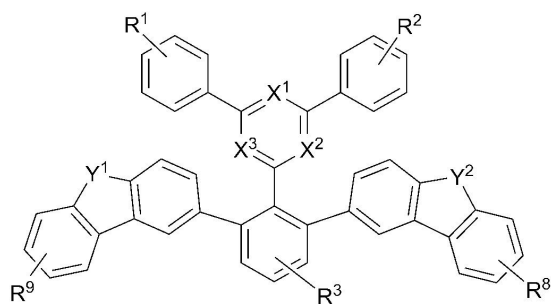
[0037] Ar^3 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0038] R^8 및 R^9 는 서로 같거나 다르고, R^8 및 R^9 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0039] R^3 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

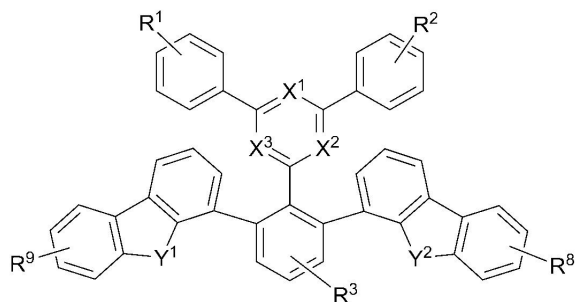
[0040] 또한 바람직하게는, 상기 구조식 3으로 표시되는 화합물은 하기 구조식 4로 표시되는 화합물 또는 하기 구조식 5로 표시되는 화합물이고,

[0041] [구조식 4]



[0042]

[0043] [구조식 5]



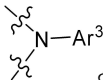
[0044]

[0045] 구조식 4 및 구조식 5에서,

[0046] X^1 내지 X^3 중에서 선택된 적어도 어느 하나는 질소원자이고, 나머지는  이고,

[0047] R^4 는 수소원자, 중수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

[0048] R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, R^1 및 R^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

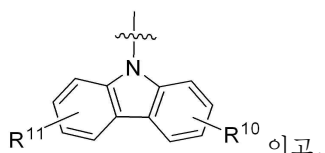
[0049] Y^1 및 Y^2 는 서로 같거나 다르고, Y^1 및 Y^2 는 각각 독립적으로 산소원자, 황원자, 또는  이고,

[0050] Ar^3 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0051] R^8 및 R^9 는 서로 같거나 다르고, R^8 및 R^9 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

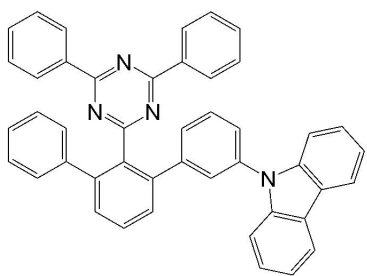
[0052] R^3 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0053] 또한 바람직하게는, R^8 및 R^9 는 서로 같거나 다르고, R^8 및 R^9 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 또는

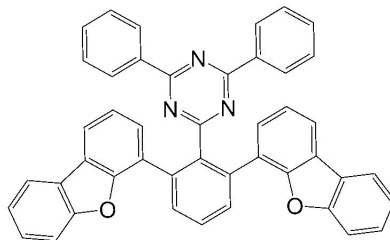


[0054] R^{10} 및 R^{11} 은 서로 같거나 다르고, R^{10} 및 R^{11} 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

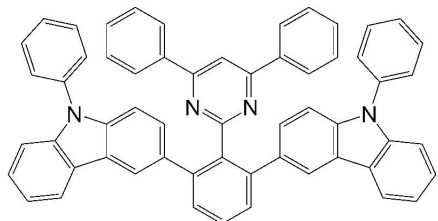
[0055] 상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 화학식으로 표시되는 화합물 1 내지 18 중에서 선택된 어느 하나일 수 있다.



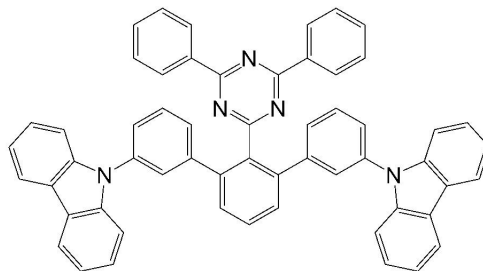
1



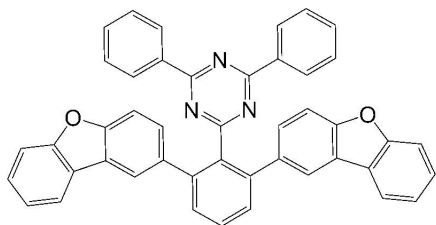
2



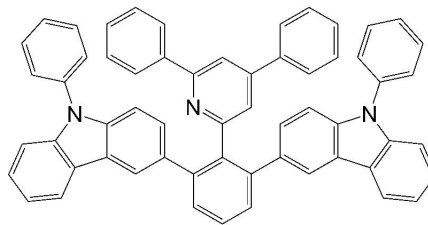
3



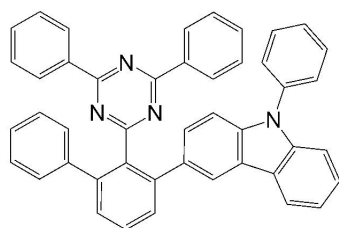
4



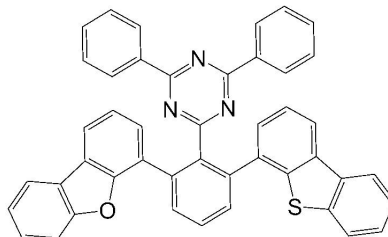
5



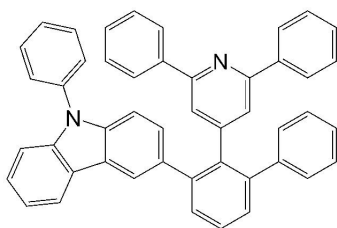
6



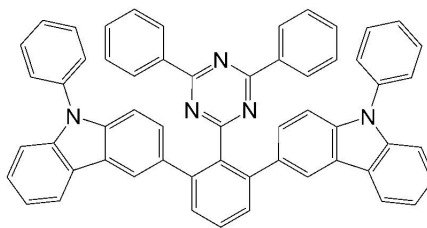
7



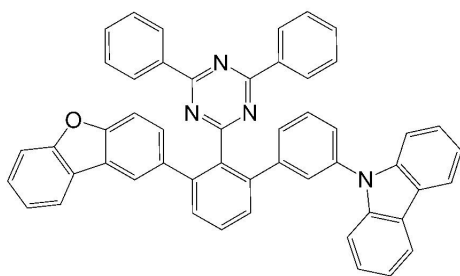
8



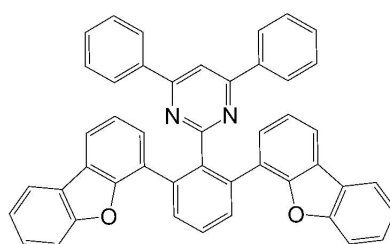
9



10

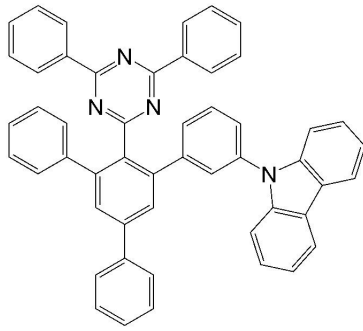


11

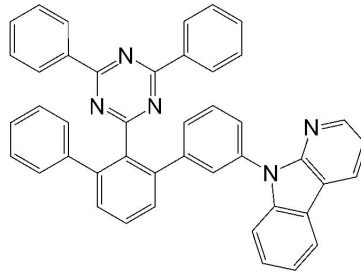


12

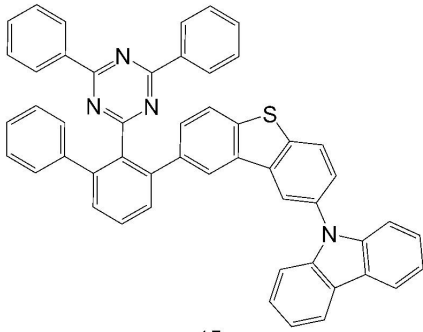
[0056]



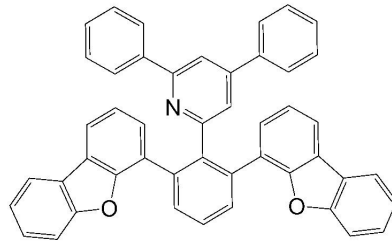
13



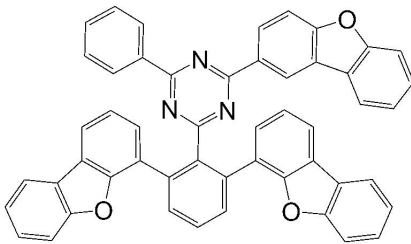
14



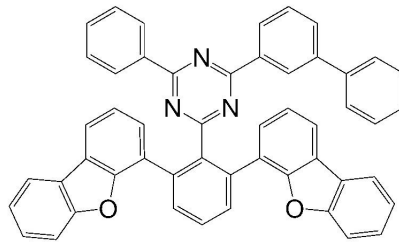
15



16



17



18

[0057]

[0058]

본 발명의 다른 측면에 따르면, 상기 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계발광소자가 제공될 수 있다.

[0059]

본 발명의 또 다른 측면에 따르면, 제1전극, 제2전극 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 단수 또는 복수의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자에 있어서, 상기 단수 또는 복수의 유기물층 중에서 선택된 1종 이상의 유기물층은 상기 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자가 제공될 수 있다.

[0060]

상기 단수 또는 복수의 유기물층은 발광층을 포함할 수 있다.

[0061]

상기 복수의 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 복수의 유기물층은 전자주입층, 전자수송층, 정공차단층, 전자차단층, 정공수송층 및 정공주입층 중에서 선택된 1종 이상을 추가로 포함할 수 있다.

[0062]

상기 발광층은 호스트와 도펀트를 포함할 수 있다.

발명의 효과

[0063]

본 발명은 안정성이 우수하며, 인광발광재료의 색순도 및 발광효율, 수명을 크게 향상시킬 수 있고, 호스트로서 순청 발광을 보이는 발광층에 사용될 수 있는 유기전계발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전기발광소자를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0064]

도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 단면을 나타낸 단면도이다.

도 2는 본 발명의 다른 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 단면을 나타낸 단면도이다.

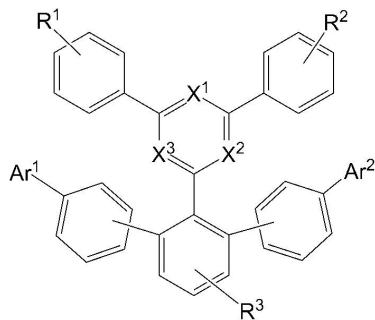
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0065] 본 발명은 다양한 변환을 가할 수 있고 여러 가지 실시예를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 예시하고 상세한 설명에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 실시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변환, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 본 발명을 설명함에 있어서 관련된 공지 기술에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우 그 상세한 설명을 생략한다.
- [0066] 또한, 이하에서 사용될 제1, 제2 등과 같이 서수를 포함하는 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되지는 않는다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다.
- [0067] 또한, 어떤 구성요소가 다른 구성요소 상에 "형성되어" 있다거나 "적층되어" 있다고 언급된 때에는, 그 다른 구성요소의 표면 상의 전면 또는 일면에 직접 부착되어 형성되어 있거나 적층되어 있을 수도 있지만, 중간에 다른 구성요소가 더 존재할 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.
- [0068] 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 출원에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.
- [0070] 본 명세서에서 "원자가결합"이란 별도의 정의가 없는 한, 단일결합, 이중결합 또는 삼중결합을 의미한다.
- [0071] 상기 "치환된"이란 적어도 하나의 수소원자가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C1 내지 C30 할로젠화알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C30 알콕시기, C2 내지 C30 알케닐기, C2 내지 C30 알키닐기, C6 내지 C30 아릴옥시기, 실릴옥시기(-OSiH₃), -OSiR¹H₂(R¹은 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), -OSiR¹R²H(R¹ 및 R²는 각각 독립적으로 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), -OSiR¹R²R³, (R¹, R², 및 R³는 각각 독립적으로 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), C1 내지 C30 아실기, C2 내지 C30 아실옥시기, C2 내지 C30 헤테로아릴옥시기, C1 내지 C30 술폰닐기, C1 내지 C30 알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, C1 내지 C30 헤테로시클로티올기, C1 내지 C30 인산아마이드기, 실릴기(-SiH₃), -SiR¹H₂(R¹은 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), -SiR¹R²H(R¹ 및 R²는 각각 독립적으로 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), -SiR¹R²R³, (R¹, R², 및 R³는 각각 독립적으로 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), 아민기-NRR'(여기에서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소 원자, C1 내지 C30 알킬기, 및 C6 내지 C30 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기임), 카르복실기, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아조기, 및 하이드록시기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환된 것을 의미한다.
- [0072] 또한 상기 치환기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수도 있다.
- [0073] 또한, 상기 "치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기" 또는 "치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기" 등에서의 상기 알킬기 또는 아릴기의 탄소수 범위는 상기 치환기가 치환된 부분을 고려하지 않고 비치환된 것으로 보았을 때의 알킬 부분 또는 아릴 부분을 구성하는 전체 탄소수를 의미하는 것이다. 예컨대, 파라 위치에 부틸기가 치환된 페닐기는 탄소수 4의 부틸기로 치환된 탄소수 6의 아릴기에 해당하는 것을 의미한다.
- [0074] 또한, 상기 "치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 융합된 아릴기" 등에서 상기 융합된 아릴기의 탄소수 범위는 상기 치환기가 치환된 부분을 고려하지 않고 비치환된 것으로 보았을 때 융합되어 부가적으로 새롭게 형성된 아릴 부분을 구성하는 전체 탄소수를 의미하는 것이다.
- [0075] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.
- [0076] 본 명세서에서 "이들의 조합"이란 별도의 정의가 없는 한, 둘 이상의 치환기가 연결기로 결합되어 있거나, 둘

이상의 치환기가 축합하여 결합되어 있는 것을 의미한다.

- [0077] 본 명세서에서 "수소"란 별도의 정의가 없는 한, 일중수소, 이중수소, 또는 삼중수소를 의미한다.
- [0078] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다.
- [0079] 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.
- [0080] 알킬기는 적어도 하나의 이중결합 또는 삼중결합을 포함하고 있는 "불포화 알킬(unsaturated alkyl)기"일 수도 있다.
- [0081] "알케닐렌(alkenylene)기"는 적어도 두 개의 탄소원자가 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합으로 이루어진 작용기를 의미하며, "알키닐렌(alkynylene)기"는 적어도 두 개의 탄소원자가 적어도 하나의 탄소-탄소 삼중 결합으로 이루어진 작용기를 의미한다. 포화이든 불포화이든 간에 알킬기는 분지형, 직쇄형 또는 환형일 수 있다.
- [0082] 알킬기는 C1 내지 C30 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 C1 내지 C20 알킬기, C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다.
- [0083] 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자, 즉, 알킬쇄는 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.
- [0084] 구체적인 예를 들어 상기 알킬기는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.
- [0085] "아민기"는 아미노기, 아릴아민기, 알킬아민기, 아릴알킬아민기, 또는 알킬아릴아민기를 포함하고, -NRR'로 표현될 수 있고, 여기에서 R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소 원자, C1 내지 C30 알킬기, 및 C6 내지 C30 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기이다.
- [0086] "시클로알킬(cycloalkyl)기"는 모노시클릭 또는 융합고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나뉘 가지는 고리) 작용기를 포함한다.
- [0087] "헤테로시클로알킬(heterocycloalkyl)기"는 시클로알킬기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로시클로알킬기가 융합된 고리(fused ring)인 경우, 융합된 고리 중 적어도 하나의 고리가 상기 헤테로 원자를 1 내지 4개 포함할 수 있다.
- [0088] "방향족(aromatic)기"는 고리 형태인 작용기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 작용기를 의미한다. 구체적인 예로 아릴기와 헤테로아릴기가 있다.
- [0089] "아릴(aryl)기"는 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나뉘 가지는 고리) 작용기를 포함한다.
- [0090] "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로아릴기가 융합된 고리(fused ring)인 경우, 융합된 고리 중 적어도 하나의 고리가 상기 헤테로 원자를 1 내지 4개 포함할 수 있다.
- [0091] 아릴기 및 헤테로아릴기에서 고리의 원자수는 탄소수 및 비탄소원자수의 합이다.
- [0092] "알킬아릴기" 또는 "아릴알킬기"와 같이 조합하여 사용할 때, 상기에 든 각각의 알킬 및 아릴의 용어는 상기 나타난 의미와 내용을 가진다.
- [0093] "아릴알킬기"이란 용어는 벤질과 같은 아릴 치환된 알킬 라디칼을 의미하며 알킬기에 포함된다.
- [0094] "알킬아릴기"이란 용어는 알킬 치환된 아릴 라디칼을 의미하며 아릴기에 포함된다.
- [0096] 이하, 본 발명의 실시예를 첨부도면을 참조하여 설명하기로 하며, 첨부 도면을 참조하여 설명함에 있어, 동일하거나 대응하는 구성 요소는 동일한 도면번호를 부여하고 이에 대한 중복되는 설명은 생략하기로 한다.
- [0097] 본 발명의 하나의 측면에 따르면, 하기 구조식 1로 표시되는 유기전계발광소자용 화합물이 제공된다.

[0098] [구조식 1]



[0099]

[0100] 구조식 1에서,

[0101] X^1 내지 X^3 중에서 선택된 적어도 어느 하나는 질소원자이고, 나머지는  이고,

[0102] R^4 는 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

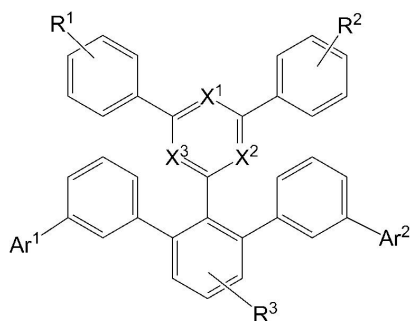
[0103] Ar^1 및 Ar^2 는 같거나 서로 다르고, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0104] R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, R^1 및 R^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0105] R^3 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이다.

[0106] 바람직하게는, 상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 2로 표시되고,

[0107] [구조식 2]



[0108]

[0109] 구조식 2에서,

[0110] X^1 내지 X^3 중에서 선택된 적어도 어느 하나는 질소원자이고, 나머지는  이고,

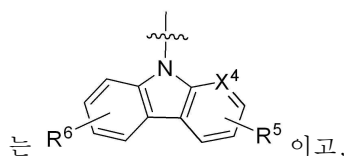
[0111] R^4 는 수소원자, 중수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

[0112] Ar^1 및 Ar^2 는 같거나 서로 다르고, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0113] R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, R^1 및 R^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0114] R^3 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0115] 또한 바람직하게는, Ar^1 및 Ar^2 는 같거나 서로 다르고, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 또



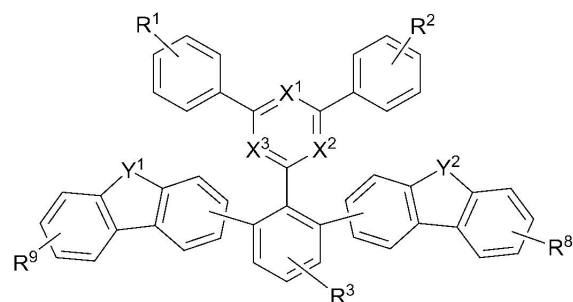
[0116] X^4 는 질소원자 또는  이고,

[0117] R^7 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0118] R^5 및 R^6 은 서로 같거나 다르고, R^5 및 R^6 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0119] 또한 바람직하게는, 상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 3으로 표시되고,

[0120] [구조식 3]



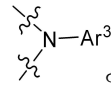
[0121]

[0122] 구조식 3에서,

[0123] X^1 내지 X^3 중에서 선택된 적어도 어느 하나는 질소원자이고, 나머지는  이고,

[0124] R^4 는 수소원자, 중수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

[0125] R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, R^1 및 R^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0126] Y^1 및 Y^2 는 서로 같거나 다르고, Y^1 및 Y^2 는 각각 독립적으로 산소원자, 황원자, 또는  이고,

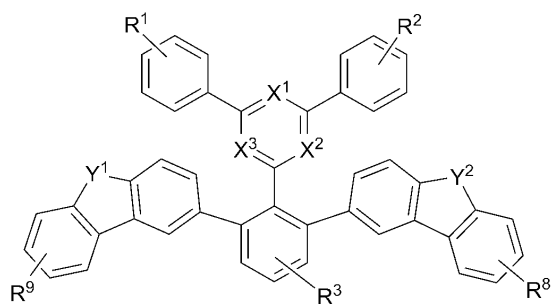
[0127] Ar^3 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0128] R^8 및 R^9 는 서로 같거나 다르고, R^8 및 R^9 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0129] R^3 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

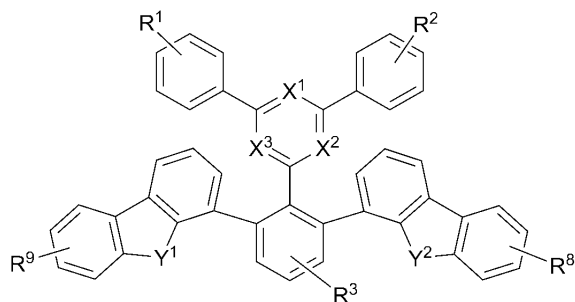
[0130] 또한 바람직하게는, 상기 구조식 3으로 표시되는 화합물은 하기 구조식 4로 표시되는 화합물 또는 하기 구조식 5로 표시되는 화합물이고,

[0131] [구조식 4]



[0132]

[0133] [구조식 5]



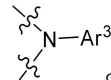
[0134]

[0135] 구조식 4 및 구조식 5에서,

[0136] X^1 내지 X^3 중에서 선택된 적어도 어느 하나는 질소원자이고, 나머지는  이고,

[0137] R^4 는 수소원자, 중수소원자, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기이고,

[0138] R^1 및 R^2 는 서로 같거나 다르고, R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, R^1 및 R^2 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 화학 결합하여 그 결합된 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C2 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

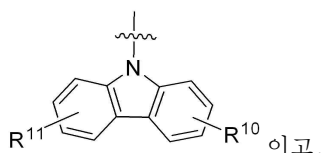
[0139] Y^1 및 Y^2 는 서로 같거나 다르고, Y^1 및 Y^2 는 각각 독립적으로 산소원자, 황원자, 또는  이고,

[0140] Ar^3 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0141] R^8 및 R^9 는 서로 같거나 다르고, R^8 및 R^9 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0142] R^3 은 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0143] 또한 바람직하게는, R^8 및 R^9 는 서로 같거나 다르고, R^8 및 R^9 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 또는



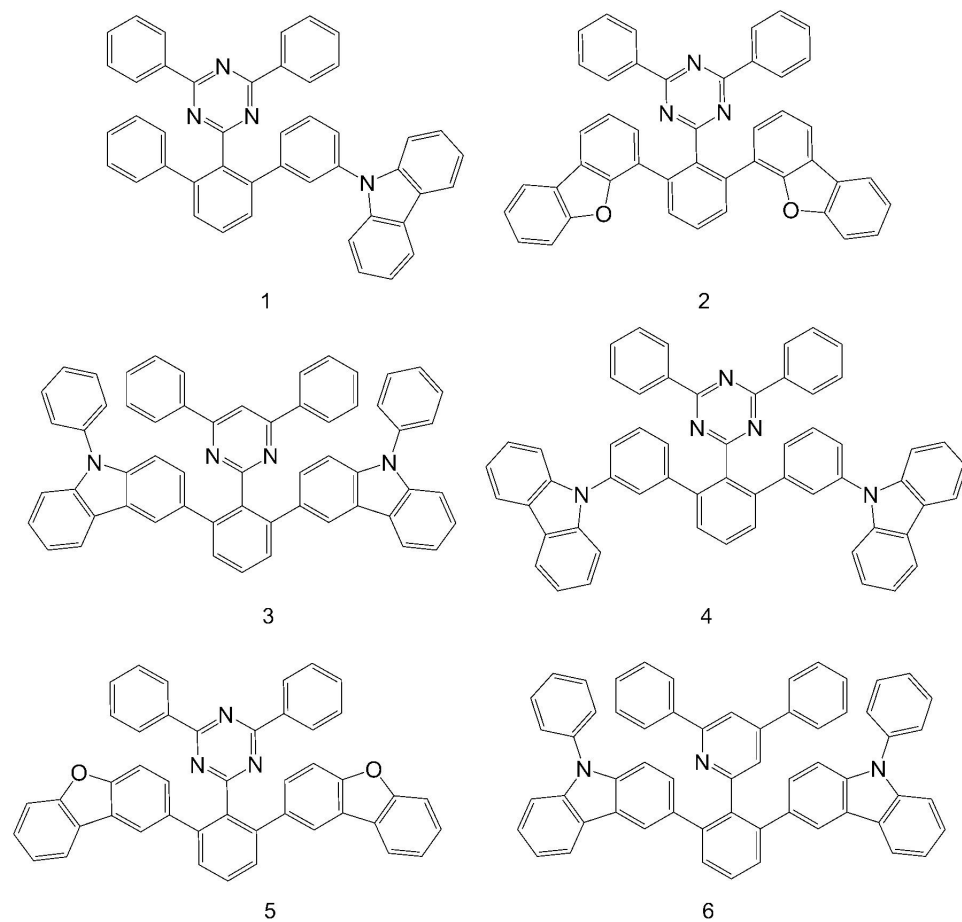
[0144] R^{10} 및 R^{11} 은 서로 같거나 다르고, R^{10} 및 R^{11} 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0145] 상기 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기의 예는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 이미다조[1,2-a]피리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤지이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인다졸릴기, 치환 또는 비치환된 페노티아지닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 테트라졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사다리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 싸이아트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 퓨리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프피리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 이미다조[1,2-a]피리디닐기, 치환 또는 비치환된

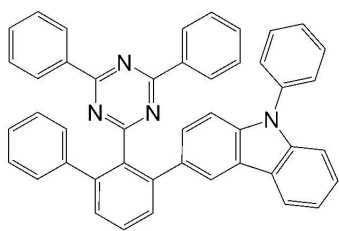
벤지이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인다졸릴기, 치환 또는 비치환된 페노티아지닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조싸이오펜릴기일 수 있다.

[0146]

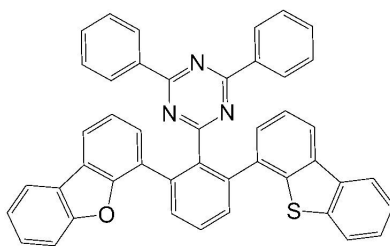
상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 화학식으로 표시되는 화합물 1 내지 18 중에서 선택된 어느 하나일 수 있다.



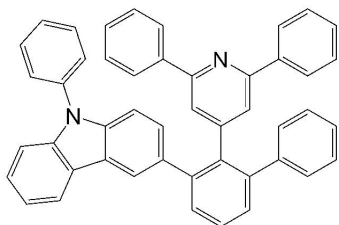
[0147]



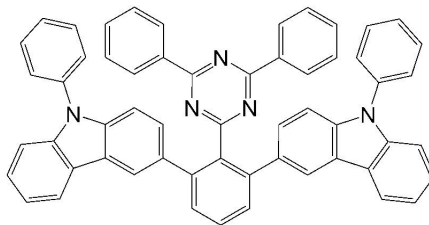
7



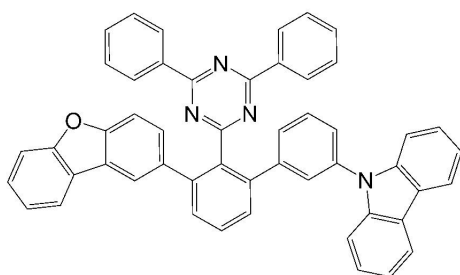
8



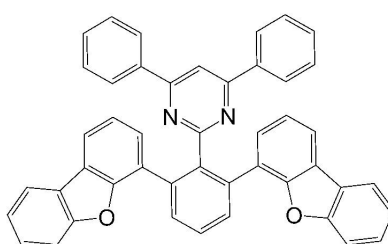
9



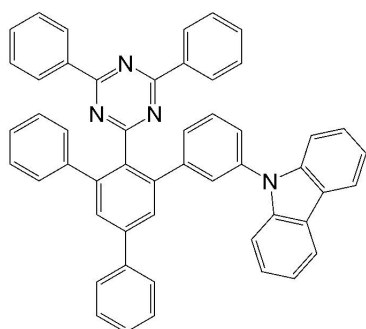
10



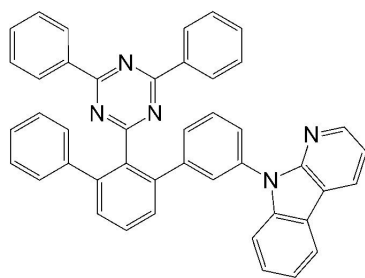
11



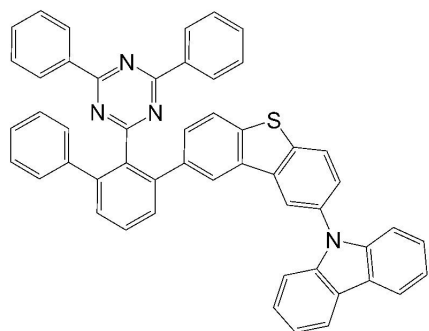
12



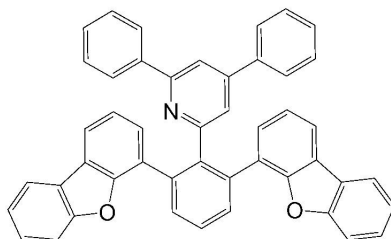
13



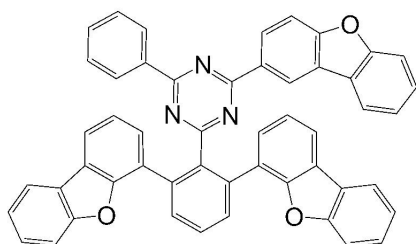
14



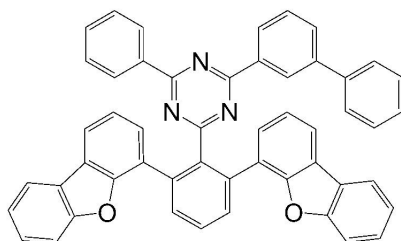
15



16



17



18

[0148]

[0149]

도 1 및 2를 참고하면, 본 발명의 실시예에 따른 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계발광소자(1)가 제공될 수 있다.

[0150]

본 발명의 다른 실시예에 따르면, 상기 유기전계발광소자는 제1전극(110); 제2전극(150); 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 단수 또는 복수의 유기물층(130)을 포함하며, 상기 단수 또는 복수의 유기물층(130) 중에서 선택된 1종 이상의 유기물층은 본 발명에 따른 유기발광소자용 화합물을 포함할 수 있다.

[0151]

여기서, 상기 단수 또는 복수의 유기물층(130)은 발광층(134)을 포함할 수 있다.

[0152]

또한 상기 복수의 유기물층(130)은 발광층(134)을 포함하고, 상기 복수의 유기물층은 전자주입층(131), 전자수송층(132), 정공차단층(133), 전자차단층(135), 정공수송층(136) 및 정공주입층(137) 중에서 선택된 1종 이상을 추가로 포함할 수 있다.

[0153]

상기 발광층(134)은 호스트와 도펀트를 포함할 수 있다.

[0154]

상기 유기전계발광소자는 바람직하게는 투명기판에 의하여 지지된다. 투명기판의 재료로는 양호한 기계적 강도, 열안정성 및 투명성을 갖는 한 특별한 제한은 없다. 구체적인 예를 들면, 유리, 투명 플라스틱 필름 등을 사용할 수 있다.

[0155]

본 발명의 유기전계발광소자의 양극재료로서는 4eV 이상의 일함수를 갖는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 또는 이의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적으로는 금속인 Au 또는 CuI, ITO(인듐 주석 산화물), SnO₂ 및 ZnO와 같은 투명 전도성 재료를 들 수 있다. 양극 필름의 두께는 10 내지 200nm 가 바람직하다.

[0156]

본 발명의 유기전계발광소자의 음극 재료로서는 4eV 미만의 일함수를 갖는 금속, 합금, 전기 전도성 화합물 또

는 이의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적으로는, Na, Na-K 합금, 칼슘, 마그네슘, 리튬, 리튬 합금, 인듐, 알루미늄, 마그네슘 합금, 알루미늄 합금을 들 수 있다. 이외에, 알루미늄/ AlO_2 , 알루미늄/리튬, 마그네슘/은 또는 마그네슘/인듐 등도 사용될 수 있다. 음극필름의 두께는 10 내지 200nm 가 바람직하다.

[0157] 유기 EL 소자의 발광효율을 높이기 위해서는 하나 이상의 전극은 바람직하게는 10% 이상의 광투과율을 가지는 것이 바람직하다. 전극의 쉬트저항은 바람직하게는 수백 Ω/mm 이하이다. 전극의 두께는 10nm 내지 1 μm , 보다 바람직하게는 10 내지 400nm 이다. 이러한 전극은 화학적 기상증착(CVD), 물리적 기상증착(PVD) 등의 기상증착법 또는 스퍼터링법을 통하여 상기한 전극 재료를 박막으로 형성하여 제조할 수 있다.

[0158] 또한 본 발명의 목적에 적합하게 본 발명의 유기전계발광소자용 화합물이 사용될 때, 공지된 정공수송 물질, 정공주입 물질, 발광층 물질, 발광층의 호스트 물질, 전자수송 물질, 및 전자주입 물질이 상기 각각의 유기물층에서 단독으로 사용되거나 또는 본 발명의 유기전계발광소자용 화합물과 선택적으로 병행하여 사용될 수 있다.

[0159] 정공 수송 물질로서 N,N-dicarbazolyl-3,5-benzene(mCP), poly(3,4-ethylenedioxythiophene):polystyrenesulfonate (PEDOT:PSS), N, N' -di(1-naphthyl)-N,N' -diphenylbenzidine(NPD), N,N'-디페닐-N,N'-디(3-메틸페닐)-4,4'-디아미노비페닐(TPD), N,N'-디페닐-N,N'-디나프틸-4,4'-디아미노비페닐, N,N,N',N'-테트라-p-톨릴-4,4'-디아미노비페닐, N,N,N',N'-테트라페닐-4,4'-디아미노비페닐, 코퍼(II)1,10,15,20-테트라페닐-21H,23H-포피린 등과 같은 포피린(porphyrin)화합물 유도체, 주쇄 또는 측쇄내에 방향족 3차아민을 갖는 중합체, 1,1-비스(4-디-p-톨릴아미노페닐)시클로헥산, N,N,N-트리(p-톨릴)아민, 4, 4', 4'-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트리페닐아민과 같은 트리아릴아민 유도체, N-페닐카르바졸 및 폴리비닐카르바졸과 같은 카르바졸 유도체, 무금속 프탈로시아닌, 구리프탈로시아닌과 같은 프탈로시아닌 유도체, 스타버스트 아민 유도체, 엔아민스틸벤계 유도체, 방향족 삼급아민과 스티릴 아민 화합물의 유도체, 및 폴리실란 등을 들 수 있다.

[0160] 전자 수송 물질로서 diphenylphosphine oxide-4-(triphenylsilyl)phenyl (TSP01), Alq_3 , 2,5-디아릴 실롤 유도체(PyPySPyPy), 퍼플루오리네이티드 화합물(PF-6P), Octasubstituted cyclooctatetraene 화합물(COTs)을 들 수 있다.

[0161] 본 발명의 유기전계발광소자에 있어서, 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 수송층 및 정공 주입층은 상기한 화합물의 하나 이상의 종류를 함유하는 단일 층으로 형성되거나, 또는 상호 적층된, 상이한 종류의 화합물을 함유하는 복수의 층으로 구성될 수 있다.

[0162] 발광재료로서 예를 들면 측광 형광재료, 형광증백제, 레이저 색소, 유기 신틸레이터 및 형광 분석용 시약을 들 수 있다. 구체적으로는, 카바졸계 화합물, 포스핀옥사이드계 화합물, 카바졸계 포스핀옥사이드 화합물, bis((3,5-difluoro-4-cyanophenyl)pyridine) iridium picolinate(FCNIrpic), tris(8-hydroxyquinoline) aluminum(Alq_3), 안트라센, 페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 코로넨, 루브렌 및 퀴나크리돈과 같은 폴리아로마틱 화합물, 쿼터페닐과 같은 올리고페닐렌 화합물, 1,4-비스(2-메틸스티릴)벤젠, 1,4-비스(4-메틸스티릴)벤젠, 1,4-비스(4-메틸-5-페닐-2-옥사졸릴)벤젠, 1,4-비스(5-페닐-2-옥사졸릴)벤젠, 2,5-비스(5-t-부틸-2-벤즈옥사졸릴)사이오펜, 1,4-디페닐-1,3-부타디엔, 1,6-디페닐-1,3,5-헥사트리엔, 1,1,4,4-테트라페닐-1,3-부타디엔과 같은 액체신틸레이션용 신틸레이터, 옥신 유도체의 금속착체, 쿠마린 색소, 디시아노메틸렌피란 색소, 디시아노메틸렌사이오피란 색소, 폴리메틴 색소, 옥소벤즈안트라센 색소, 크산텐 색소, 카르보스티릴 색소, 페릴렌 색소, 옥사진 화합물, 스티벤 유도체, 스피로 화합물, 옥사디아졸 화합물 등을 들 수 있다.

[0163] 본 발명의 유기 EL 소자를 구성하는 각 층은 진공 증착, 스퍼 코팅 또는 캐스팅과 같은 공지된 방법을 통하여 박막으로 형성시키거나, 각 층에서 사용되는 재료를 이용하여 제조할 수 있다. 이들 각층의 막두께에 대해서는 특별한 제한은 없으며, 재료의 특성에 따라 알맞게 선택할 수 있으나, 보통 2nm 내지 5,000nm의 범위에서 결정될 수 있다.

[0164] 본 발명의 따른 유기전계발광소자용 화합물은 진공 증착법에 의하여 형성될 수 있으므로, 박막 형성 공정이 간편하고, 핀홀(pin hole)이 거의 없는 균질한 박막으로 용이하게 얻을 수 있는 장점이 있다.

[0165]

[0166] [실시예]

[0167] 이하, 실시예를 통하여 본 발명에 따른 유기전계발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자의 제조

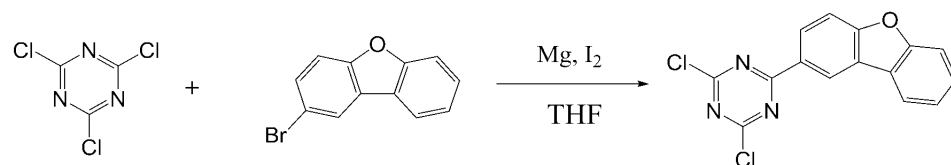
방법을 더욱 구체적으로 설명한다. 그러나 이는 예시를 위한 것으로서 이에 의하여 본 발명의 범위가 한정되는 것이 아니다.

[0168]

[0169] 제조예 1: 중간체(1)의 합성

[0170]

[0171]



500ml 둥근바닥 3구 플라스크에 마그네슘 3 g, 요오드 0.6 g 및 THF 50 mL를 투입 후, 상온에서 교반한다. 2-브로모 디벤조퓨란 30 g을 THF 100 mL에 용해한 다음 적가한다. 적가 완료 후, 2 시간 동안 환류한 다음, 용액을 상온으로 식혔다. 이 용액에 cyanuric chloride 22 g을 THF 100 mL에 용해한 용액을 적가하였다. 반응액을 여과한 후, 물과 디클로로메탄으로 세척한 다음, 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피로 분리하여 중간체(1) 20g을 얻었다. (수율 52%)

[0172]

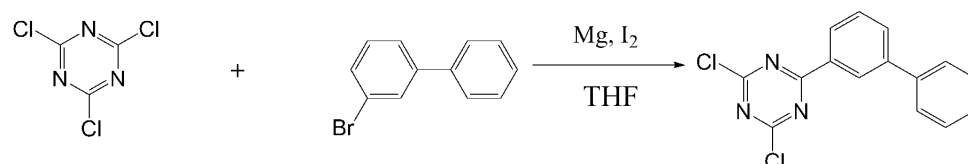
MS (ESI) : $[M+H]^+$ 316

[0174]

제조예 2: 중간체(2)의 합성

[0175]

[0176]



제조예 1에서 2-브로모 디벤조퓨란 대신에 3-브로모-1,1'비페닐을 사용한 것을 제외하고, 같은 방법으로 중간체 (2) 27 g을 얻었다. (수율 69%)

[0177]

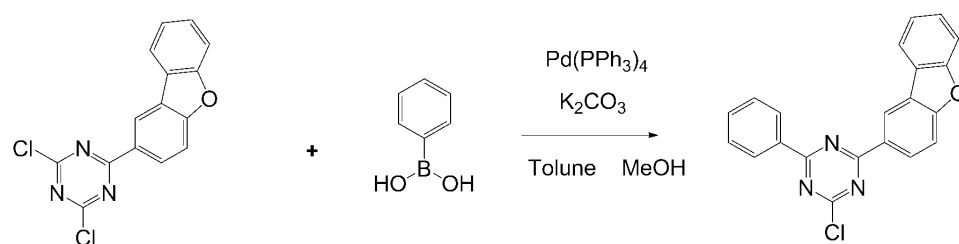
MS (ESI) : $[M+H]^+$ 302

[0179]

제조예 3: 중간체(3)의 합성

[0180]

[0181]

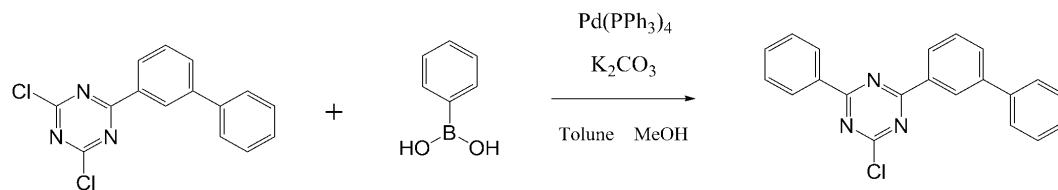


250ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체 (1) 10 g, 페닐 보론산 4.5 g, 탄산 칼륨 13 g, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) 0.9 g 톨루엔 100 ml 그리고 MeOH 25 ml를 넣고 교반 및 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피 실시한 용액을 농축하여 중간체(3) 3.2 g을 얻었다. (수율 28%)

[0182]

MS (ESI) : $[M+H]^+$ 378

[0184] 제조예 4: 중간체(4)의 합성

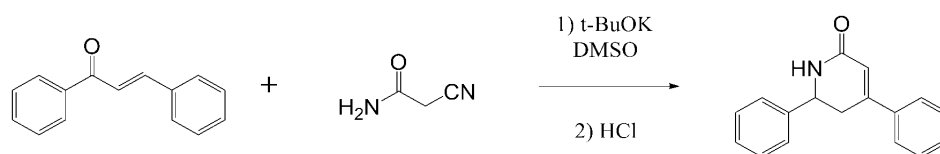


[0185]

[0186] 제조예 3에서 중간체 (1)대신에 중간체 (2)를 사용한 것을 제외하고 제조예 3과 같은 방법으로 중간체 (4)를 합성하여 5.5 g을 얻었다. (수율 48 %)

[0187] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 344

[0189] 제조예 5: 중간체(5)의 합성

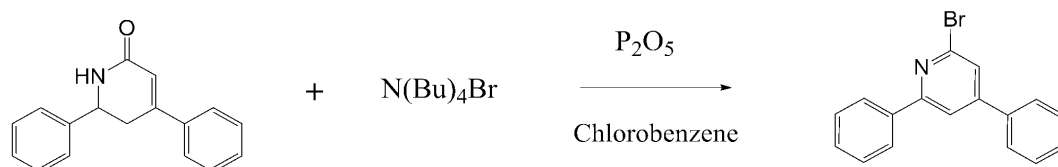


[0190]

[0191] 1 L 3구 둥근바닥 플라스크에 chalone 50 g, 2-시아노 아세트아마이드 23 g을 투입 후, DMSO 150 mL에 용해한 다음 ice bath에서 냉각하였다. t-BuOK 54 g을 DMSO 350 mL에 용해한 후, 위의 용액에 적가하였다. 적가가 완료 되면 혼합 용액을 90℃에서 4 시간 동안 교반하며 가열하였다. 반응액을 4N HCl 2.5 L에 적가하였다. 생성된 고체를 여과하고, 물 및 메탄올로 세척한 후 건조하여 중간체 (5) 54 g을 얻었다. (수율 91 %)

[0192] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 250

[0194] 제조예 6: 중간체(6)의 합성

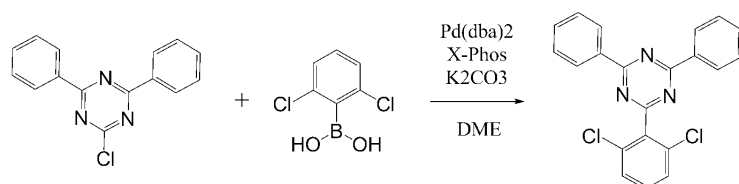


[0195]

[0196] 250 mL 3구 둥근바닥 플라스크에 중간체 (5) 20 g, 테트라부틸암모늄브로마이드 39 g 및 오산화 인 35 g을 염화 벤젠 200 mL에 투입 후, 8 시간 동안 승온, 교반하였다. 반응 완료 후, 용매를 감압 증류하고, 물로 세척 한 다음, 디클로로메탄으로 추출하여 중간체 (6) 22 g을 얻었다. (수율 89 %)

[0197] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 310

[0199] 제조예 7: 중간체(7)의 합성



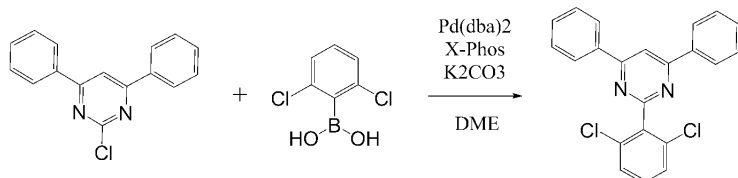
[0200]

[0201] 500 mL 3구 둥근바닥 플라스크에 2-Chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 34 g, 1,3-디클로로-2-보론산 20 g, 비스(디벤질리덴아세톤)팔라듐(0) (Pd(dba)₂) 4 g, 2-디사이클로헥실포스피노-2',4,6'-트리이소프로필바이페닐 (X-Phos) 3.5 g 및 탄산칼륨 44 g을 디메틸에틸렌글리콜 (DME) 400 mL에 투입 후, 8 시간 동안 승온, 교반하였

다. 반응액을 냉각 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합 용매로 컬럼크로마토그래피 실시한 용액을 농축하고, 농축된 용액을 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 중간체 (7)을 26 g 얻었다. (수율 66%)

[0202] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 378

[0204] 제조예 8: 중간체(8)의 합성

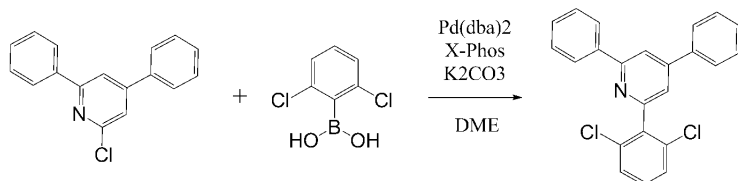


[0205]

[0206] 제조예 7에서 2-Chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신에 2-Chloro-4,6-diphenyl-1,3-pyrimidine을 사용한 것을 제외하고, 제조예 7과 같은 방법으로 중간체 8을 25 g을 얻었다. (수율 75 %)

[0207] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 377

[0209] 제조예 9: 중간체(9)의 합성

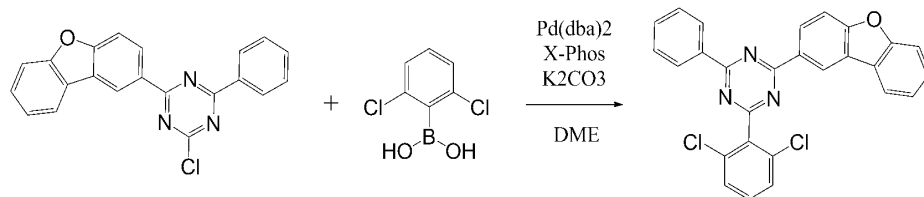


[0210]

[0211] 제조예 7에서 2-Chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신에 중간체 6을 사용한 것을 제외하고, 제조예 7과 같은 방법으로 중간체 9을 28 g을 얻었다. (수율 87 %)

[0212] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 376

[0214] 제조예 10: 중간체(10)의 합성

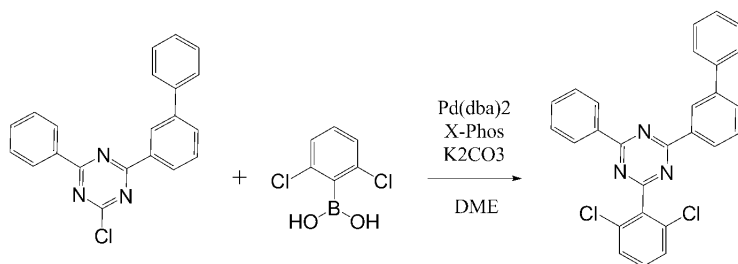


[0215]

[0216] 제조예 7에서 2-Chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신에 중간체 3을 사용한 것을 제외하고, 제조예 7과 같은 방법으로 중간체 10을 15 g을 얻었다. (수율 47 %)

[0217] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 468

[0219] 제조예 11: 중간체(11)의 합성

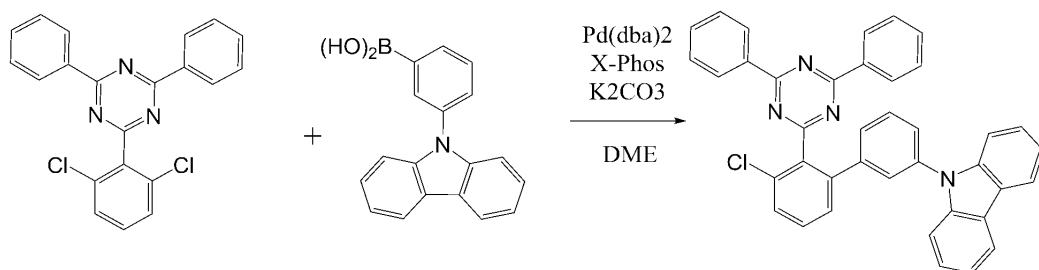


[0220]

[0221] 제조예 7에서 2-Chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신에 중간체 3을 사용한 것을 제외하고, 제조예 7과 같은 방법으로 중간체 11을 17 g을 얻었다. (수율 84 %)

[0222] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 454

[0224] 제조예 12: 중간체(12)의 합성

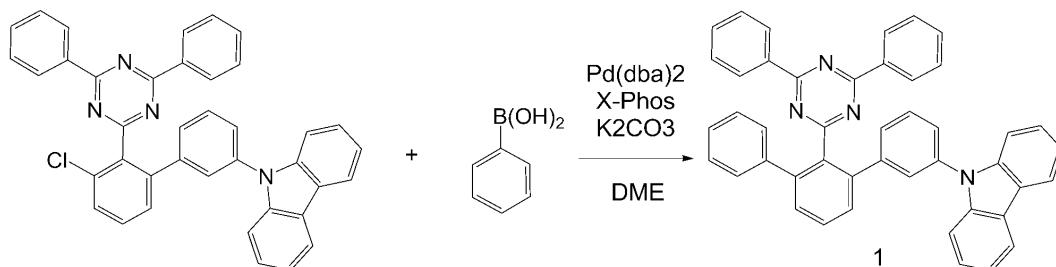


[0225]

[0226] 250 mL 3구 둥근바닥 플라스크에 중간체 7 10 g, (3-9H-카바졸-9-틸)페닐 보론산 7.6 g, 비스(디벤질리덴아세톤)팔라듐(0) ($Pd(dba)_2$) 1 g, 2-디사이클로헥실포스포노-2',4,6'-트리이소프로필바이페닐 (X-Phos) 0.8 g 및 탄산칼륨 11 g을 디메틸에틸렌글리콜 (DME) 150 mL에 투입 후, 8 시간 동안 승온, 교반하였다. 반응액을 냉각 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피 실시한 용액을 농축하고, 농축된 용액을 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 중간체 (12)를 10 g 얻었다. (수율 64%)

[0227] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 585

[0229] 실시예 1: 화합물(1)의 합성



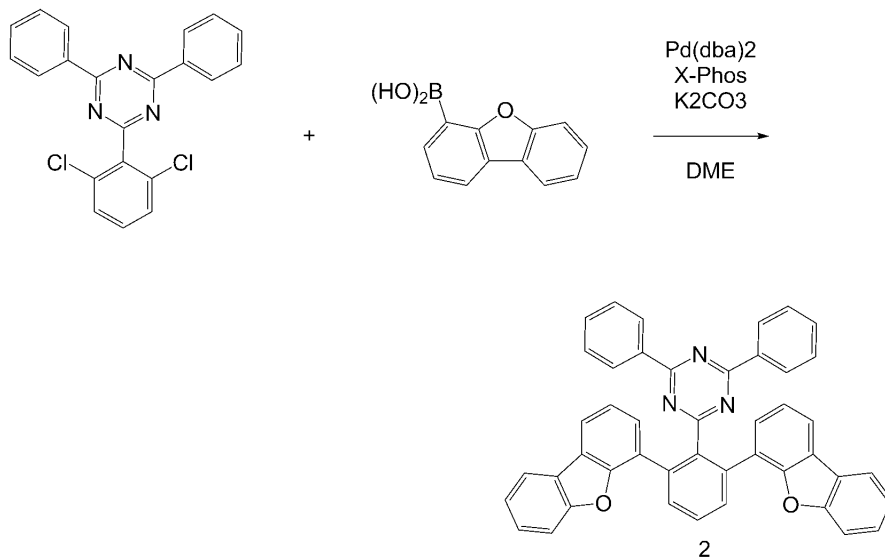
[0230]

[0231] 질소 분위기 하의 250ml 둥근바닥 3구 플라스크에 제조예 12에서 제조한 중간체(12) 5.0 g과 페닐 보론산 2.0g, $Pd(dba)_2$ 0.2 g, X-Phos 0.2 g, 탄산 칼륨 3.5g, 및 DME 50ml를 넣고 16시간 교반하며 환류하였다. 반응액을 냉각 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피 실시한 용액을 농축하고, 농축된 용액을 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 화합물(1)을 4.1g 얻었다. (수율 76%)

[0232] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 627

[0233] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 8.29-8.25 (d, 2H), 8.08-8.04 (d, 4H), 7.71-7.63 (m, 3H), 7.59-7.57 (d, 2H), 7.51-7.47 (t, 2H), 7.44-7.40 (m, 1H), 7.37-7.30 (m, 8H), 7.26-7.19 (m, 5H), 7.16-7.12 (d, 2H)

[0235] 실시예 2: 화합물(2)의 합성



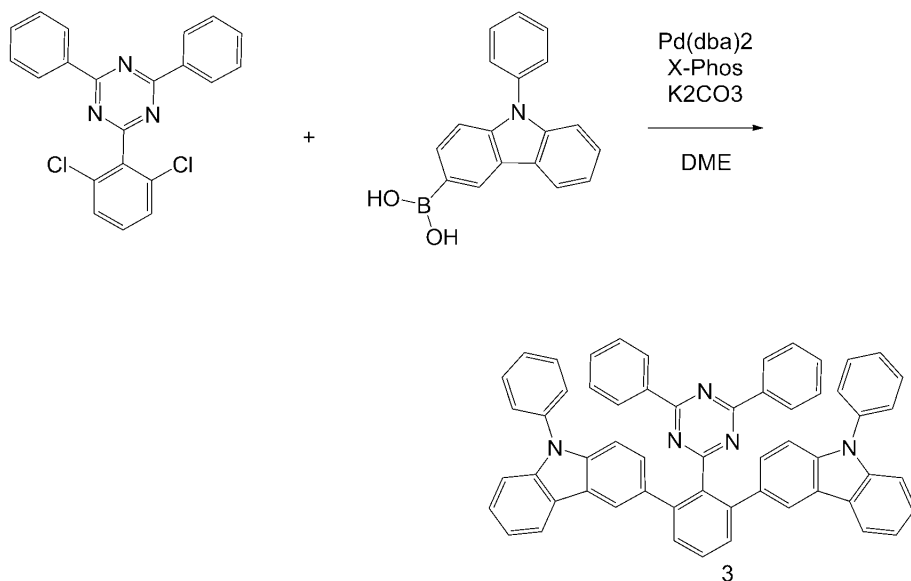
[0236]

[0237] 250 mL 3구 둥근바닥 플라스크에 중간체 7 9.0 g, 4-디벤조퓨란 보론산 12.6 g, 비스(디벤질리텐아세톤)팔라듐 (0) ($\text{Pd}(\text{dba})_2$) 0.7 g, 2-디사이클로헥실포스피노-2',4,6'-트리이소프로필바이페닐 (X-Phos) 0.5 g 및 탄산칼륨 20 g을 디메틸에틸렌글리콜 (DME) 150 mL에 투입 후, 8 시간 동안 승온, 교반하였다. 반응액을 냉각 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피 실시한 용액을 농축하고, 농축된 용액을 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 화합물 (2)을 5.6 g 얻었다. (수율 57%)

[0238] MS (ESI) : $[\text{M}+\text{H}]^+$ 642

[0239] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 7.88-7.84 (d, 4H), 7.82-7.79 (m, 1H), 7.76-7.73 (d, 2H), 7.67-7.63 (d, 4H), 7.37-7.25 (m, 10H), 7.24-7.20 (t, 2H), 7.03-6.69 (t, 4H)

[0241] 실시예 3: 화합물(3)의 합성



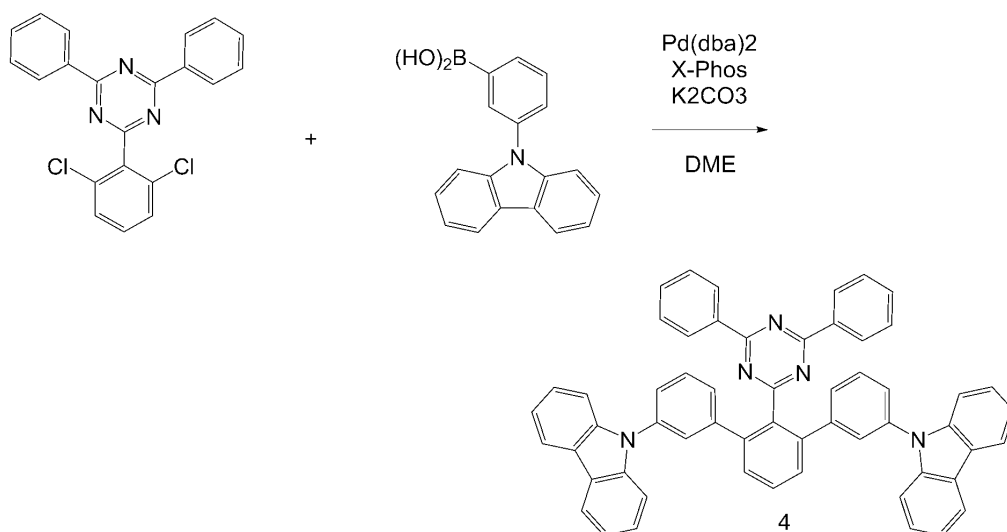
[0242]

[0243] 250 mL 3구 둥근바닥 플라스크에 중간체 7 10 g, (9-페닐-9H-카바졸-3-릴) 보론산 19 g, 비스(디벤질리덴아세톤)팔라듐(0) ($\text{Pd}(\text{dba})_2$) 1 g, 2-디사이클로헥실포스피노-2',4,6'-트리이소프로필바이페닐 (X-Phos) 1 g 및 탄산칼륨 11 g을 디메틸에틸렌글리콜 (DME) 150 mL에 투입 후, 8 시간 동안 승온, 교반하였다. 반응액을 냉각 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피 실시한 용액을 농축하고, 농축된 용액을 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 화합물 (3)을 12 g 얻었다. (수율 92%)

[0244] MS (ESI) : $[\text{M}+\text{H}]^+$ 792

[0245] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 8.32-8.29 (d, 2H), 8.07-8.03 (d, 2H), 7.93-7.89 (d, 4H), 7.74-7.68 (m, 3H), 7.50-7.45 (t, 4H), 7.40-7.35 (m, 4H), 7.35-7.27 (m, 8H), 7.26-7.18 (m, 4H), 7.13-7.10 (d, 4H), 7.07-7.02 (t, 4H)

[0247] 실시예 4: 화합물(4)의 합성



[0248]

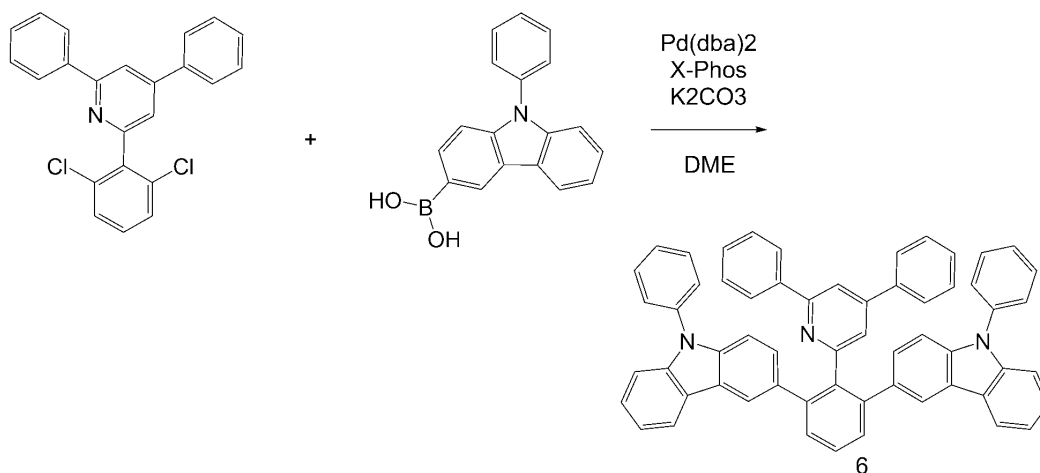
[0249] 250 mL 3구 둥근바닥 플라스크에 중간체 7 10 g, (3-9H-카바졸-9-릴)페닐 보론산 19 g, 비스(디벤질리덴아세톤)팔라듐(0) ($\text{Pd}(\text{dba})_2$) 1 g, 2-디사이클로헥실포스피노-2',4,6'-트리이소프로필바이페닐 (X-Phos) 1 g 및 탄

산칼륨 11 g을 디메틸에틸렌글리콜 (DME) 150 mL에 투입 후, 8 시간 동안 승온, 교반하였다. 반응액을 냉각 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피 실시한 용액을 농축하고, 농축된 용액을 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 화합물 (4)를 10 g 얻었다. (수율 77%)

[0250] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 792

[0251] 1H NMR(600MHz, $CDCl_3$): δ 8.29-8.25 (d, 4H), 8.08-8.04 (d, 4H), 7.71-7.63 (m, 3H), 7.59-7.57 (d, 2H), 7.51-7.47 (t, 2H), 7.44-7.40 (m, 2H), 7.37-7.30 (m, 8H), 7.26-7.19 (m, 8H), 7.16-7.12 (d, 4H)

[0253] 실시예 5: 화합물(6)의 합성



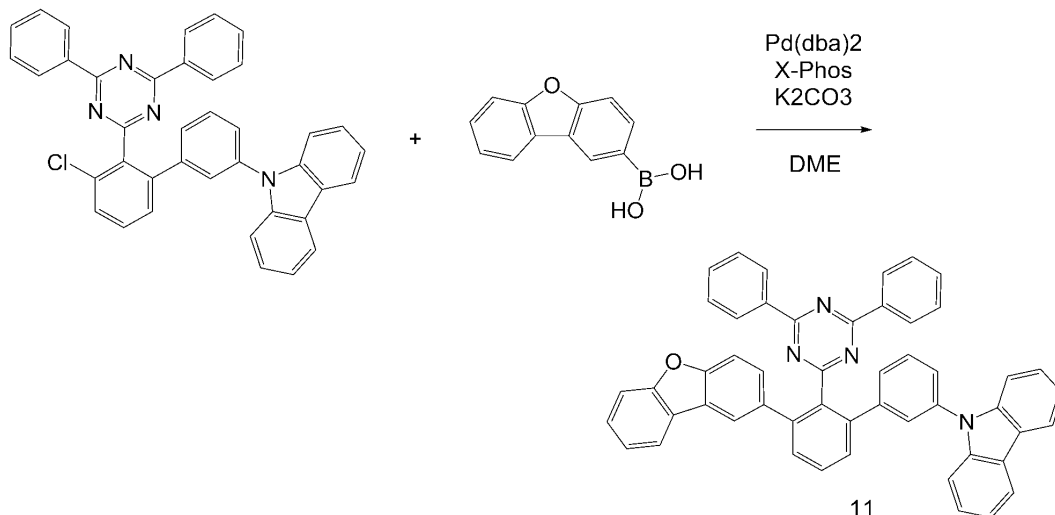
[0254]

[0255] 실시예 3에서 중간체 7 대신에 중간체 9를 사용한 것을 제외하고, 실시예 3과 같은 방법으로 화합물 (6)을 7 g 얻었다. (수율 64 %)

[0256] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 790

[0257] 1H NMR(600MHz, $CDCl_3$): δ 8.32-8.29 (d, 2H), 8.07-8.03 (d, 2H), 7.87-7.64 (d, 2H), 7.74-7.68 (m, 4H), 7.50-7.35 (m, 7H), 7.35-7.18 (m, 16H), 7.13-7.10 (d, 4H), 7.07-7.02 (t, 4H)

[0259] 실시예 6: 화합물(11)의 합성



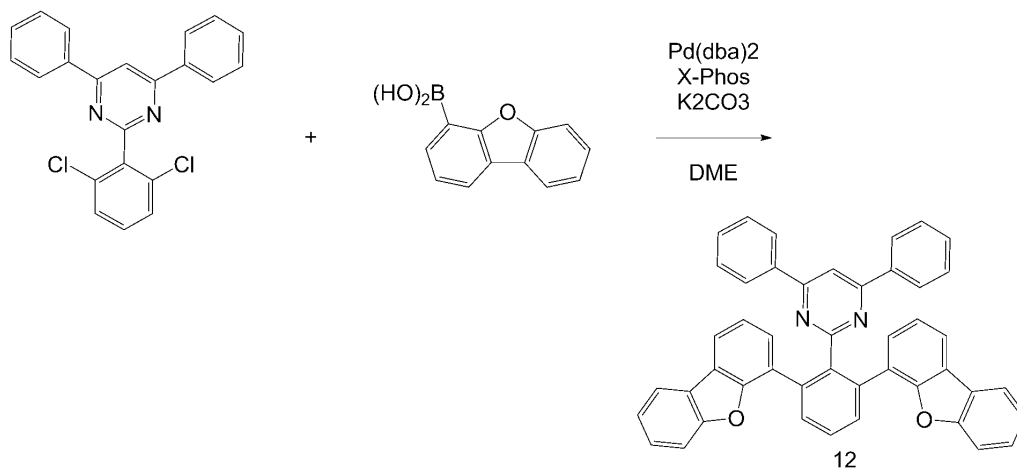
[0260]

[0261] 실시예 1에서 페닐 보론산 대신에 2-디벤조퓨란 보론산을 사용한 것을 제외하고, 실시예 1과 같은 방법으로 화합물 (11)을 4.8 g 얻었다. (수율 79 %)

[0262] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 717

[0263] 1H NMR(600MHz, $CDCl_3$): δ 8.35-8.28 (m, 3H), 7.96-7.80 (m, 7H), 7.72-7.62 (m, 3H), 7.59-7.35 (m, 5H), 7.20-7.15 (t, 4H), 7.41-7.30 (m, 4H), 7.26-7.16 (m, 6H)

[0265] 실시예 7: 화합물(12)의 합성



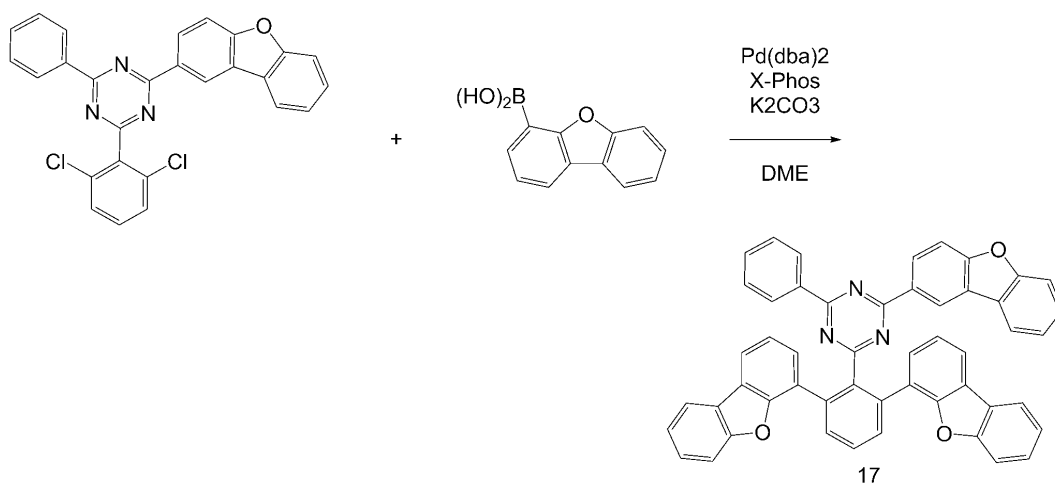
[0266]

[0267] 실시예 2에서 중간체 7 대신에 중간체 8을 사용한 것을 제외하고, 실시예 2와 같은 방법으로 화합물 (12)를 5 g 얻었다. (수율 64 %)

[0268] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 641

[0269] 1H NMR(600MHz, $CDCl_3$): δ 8.71-8.69 (d, 1H), 8.44-8.38 (d, 4H), 8.20-8.17 (m 3H), 8.14-8.01 (m, 3H), 7.78-7.75 (d, 1H), 7.63-7.50 (m, 11H), 7.45-7.30 (m, 5H)

[0271] 실시예 8: 화합물(17)의 합성



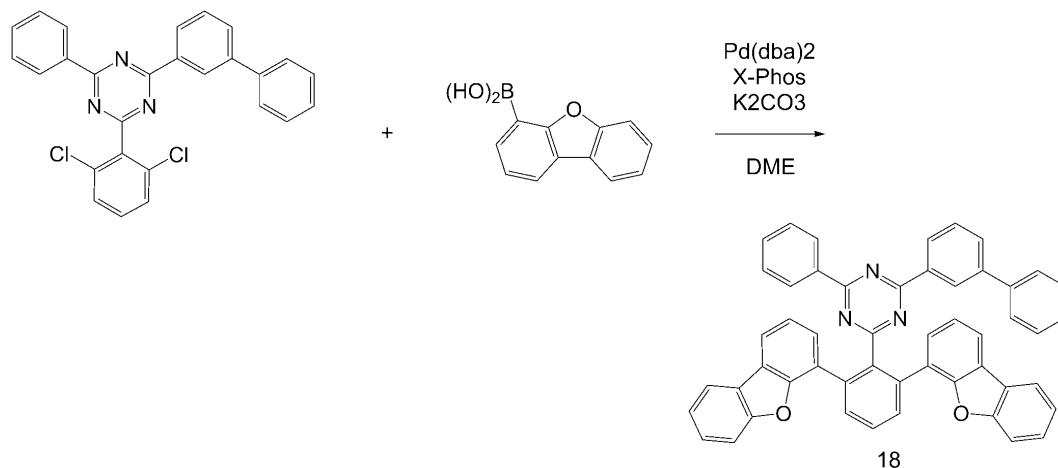
[0272]

[0273] 실시예 2에서 중간체 7 대신에 중간체 10을 사용한 것을 제외하고, 실시예 2와 같은 방법으로 화합물 (17)을 9 g 얻었다. (수율 64 %)

[0274] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 732

[0275] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 9.12 (s, 1H), 9.02-8.99 (d, 1H), 8.76-8.64 (d, 1H), 8.80-8.76 (d, 1H), 8.02-7.98 (d, 1H), 7.88-7.84 (d, 4H), 7.82-7.79 (m, 1H), 7.76-7.73 (m, 4H), 7.47-7.20 (m, 11H), 7.03-7.20 (t, 4H)

[0277] 실시예 9: 화합물(18)의 합성



[0278]

[0279] 실시예 2에서 중간체 7 대신에 중간체 11을 사용한 것을 제외하고, 실시예 2와 같은 방법으로 화합물 (18)을 10 g 얻었다. (수율 72 %)

[0280] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 718

[0281] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 7.88-7.84 (d, 4H), 7.82-7.79 (m, 1H), 7.76-7.63 (t, 6H), 7.53-7.25 (m, 16H), 7.21-7.10 (m, 3H)

[0283] 소자실시예 1: 화합물 1을 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조

[0284] ITO (Indium tin oxide)가 150nm 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 이소프로필 알코올 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송시켜 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[0285] 이와 같이 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상에 HT-1을 진공 증착하여 45nm 두께의 정공 주입층을 형성하였다. 이어서 정공수송층으로서 HT-2를 증착하여 30nm의 정공수송층을 형성하였으며, 이어서 화합물(1)을 호스트로 하여 증착속도를 0.1nm/sec, Fir6의 증착속도를 0.01nm/sec로 증착하고, 증착속도 비율이 10%가 되도록 BD-1을 도핑하여 정공수송층 위에 발광층을 30nm 두께로 형성하였다. 그 위에 엑시톤 차단층으로서 화합물(1)을 증착하여 10nm의 엑시톤 차단층을 형성하였으며, 그 위에 ET-1을 증착하여 30nm의 전자수송층을 형성하였으며, 상기 전자수송층 상부에 불화리튬 [lithium fluoride] 1nm와 알루미늄 [Al] 50nm를 순차적으로 진공 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전계발광소자를 제조하였다.

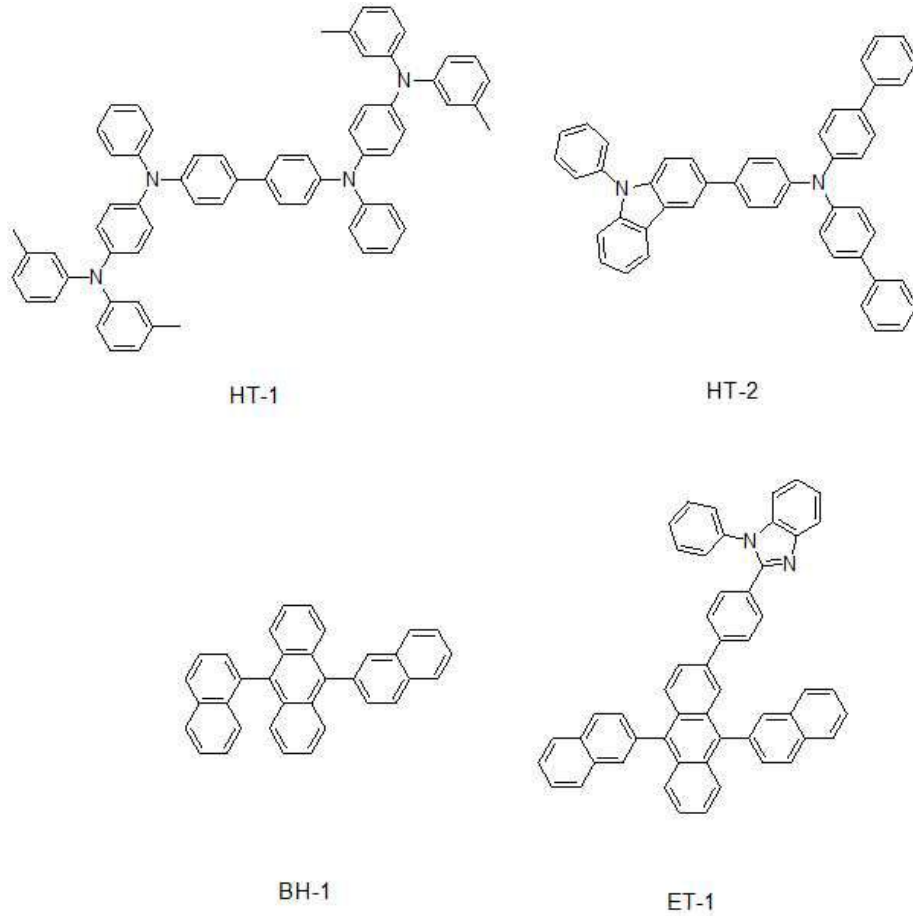
[0286] 이때, 각 물질의 증착속도는 유기물질인 HT-1, HT-2, ET-1은 0.1 nm/sec, 불화리튬은 0.02 nm/sec, 알루미늄은 0.2 nm/sec로 하였다.

[0288] 소자실시예 2: 화합물 2를 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조

[0289] 소자실시예 1에서 발광층 및 엑시톤 차단층으로 화합물(1) 대신에 화합물(2)를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.

- [0291] 소자실시예 3: 화합물 3을 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0292] 소자실시예 1에서 발광층 및 엑시톤 차단층으로 화합물(1) 대신에 화합물(3)을 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0294] 소자실시예 4: 화합물 4를 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0295] 소자실시예 1에서 발광층 및 엑시톤 차단층으로 화합물(1) 대신에 화합물(4)를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0297] 소자실시예 5: 화합물 6을 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0298] 소자실시예 1에서 발광층 및 엑시톤 차단층으로 화합물(1) 대신에 화합물(6)을 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0300] 소자실시예 6: 화합물 11을 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0301] 소자실시예 1에서 발광층 및 엑시톤 차단층으로 화합물(1) 대신에 화합물(11)을 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0303] 소자실시예 7: 화합물 12를 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0304] 소자실시예 1에서 발광층 및 엑시톤 차단층으로 화합물(1) 대신에 화합물(12)를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0306] 소자실시예 8: 화합물 13을 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0307] 소자실시예 1에서 발광층 및 엑시톤 차단층으로 화합물(1) 대신에 화합물(13)을 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0309] 소자실시예 9: 화합물 14를 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0310] 소자실시예 1에서 발광층 및 엑시톤 차단층으로 화합물(1) 대신에 화합물(14)를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0312] 소자비교예 1: mCBP를 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0313] 소자실시예 1에서 발광층 및 엑시톤 차단층으로 화합물(1) 대신에 mCBP를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.

[0315] 상기 소자실시예에서 사용한 HT-1, HT-2, BH-1 및 ET-1의 구조식은 아래와 같다.



[0316]

[0318] 유기전계발광소자의 특성 분석

[0319] 이하, 소자실시예 1 내지 9, 및 소자비교예 1에 따라 제조된 유기전계발광소자를 1000 cd/m² 휘도에서 특성을 비교하여 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0320]

구분	호스트 재료	1000 cd/m ² 에서 구동전압 (V)	100 cd/m ² 에서 외부양자효율 (%)	1000 cd/m ² 에서 외부양자효율 (%)
소자실시예 1	화합물 1	5.6	10.5	10.0
소자실시예 2	화합물 2	5.8	11.5	9.8
소자실시예 3	화합물 3	5.5	11.4	10.3
소자실시예 4	화합물 4	5.9	10.8	10.1
소자실시예 5	화합물 6	6.5	10.5	9.9
소자실시예 6	화합물 11	6.1	10.4	9.4
소자실시예 7	화합물 12	5.4	10.9	8.7
소자실시예 8	화합물 13	5.4	10.7	8.9
소자실시예 9	화합물 14	5.5	11.0	9.1
소자비교예 1	mCBP	7.1	10.0	8.4

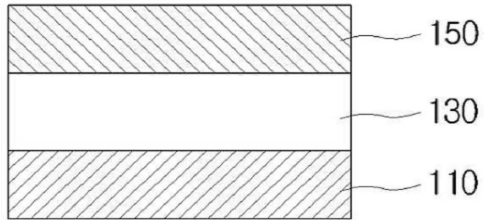
[0321]

외부양자효율은 전압을 0 V 부터 5 V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta CS-2000)를 이용하여 그때의 광량을 측정하고, 측정된 광량값을 전자 밀도인 전류값으로 나누어 결과를 얻었다. 또한, 색좌표 값은 색좌표는 휘도계(Minolta CS-2000)를 이용하여 측정하였다.

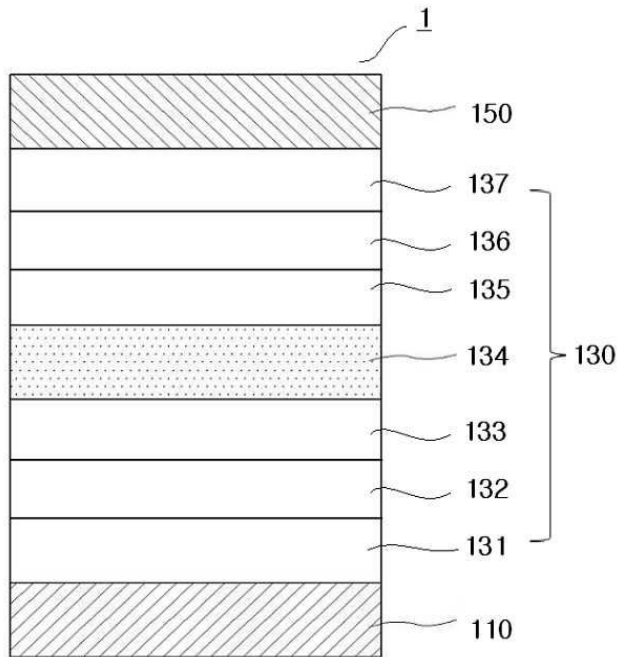
[0322] 상기 표 1에 따르면, 본 발명에 의한 화합물을 호스트로 포함하는 유기전계발광소자를 사용한 결과, 소자비교예 1과 대비하여 구동 전압 및 효율에서 좋은 성능을 보이는 것을 확인할 수 있었다.

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	用于有机电致发光器件的化合物和含有该化合物的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020170057797A	公开(公告)日	2017-05-25
申请号	KR1020150161428	申请日	2015-11-17
[标]申请(专利权)人(译)	SK化学株式会社		
申请(专利权)人(译)	SK化工有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	SK化工有限公司		
[标]发明人	SHIN YONG JUN 신용준 PARK JEONG HO 박정호 JUN SUK WOON 전석운 KANG JU SIK 강주식 CHANG YU MI 장유미 YANG NAM CHOUL 양남철 PARK JAE KYUN 박재균 LEE SONG 이송 CHAE HEE IL 채희일		
发明人	신용준 박정호 전석운 강주식 장유미 양남철 박재균 이송 채희일		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 C07D251/12 C07D307/91 C07D403/10 C07D403/14 C07D405/14 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D251/12 C07D209/82 C07D307/91 C07D403/10 C07D405/14 C07D403/14 H01L51/50 H01L51/0067 C09K2211/1059 C09K2211/1007		
代理人(译)	Yisuyeol		
其他公开文献	KR101821808B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明提供用于有机电致发光器件的化合物和包含该化合物的有机电致发光器件，以及用于有机电致发光器件的化合物，其可用作能够改善磷光材料的色纯度和发光效率的发光层的主体。可以提供包括其的有机电致发光器件。

