



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호

10-2015-0071685

(43) 공개일자

2015년06월26일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01)

C07D 471/04 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(21) 출원번호

10-2014-0183599

(22) 출원일자

2014년12월18일

심사청구일자

없음

(30) 우선권주장

1020130158371 2013년12월18일 대한민국(KR)

1020140073623 2014년06월17일 대한민국(KR)

(71) 출원인

룸엔드하스전자재료코리아유한회사

충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)

(72) 발명자

이미자

경기도 화성시 영통로26번길 24 305-1503

문두현

경기도 화성시 병점3로 117 906동 1304호

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

장훈

전체 청구항 수 : 총 12 항

(54) 발명의 명칭 유기 전계 발광 화합물, 및 이를 포함하는 복수종의 호스트 재료 및 유기 전계 발광 소자

(57) 요약

본 발명은 유기 전계 발광 화합물, 및 이를 포함하는 복수종의 호스트 재료 및 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하면, 낮은 구동 전압 및 우수한 전류 효율과 전력 효율을 가지면서도 구동 수명이 현저히 탁월하게 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

(72) 발명자

강희룡

서울특별시 관악구 인현12나길 31 (봉천동, 삼성그린맨)

강현주

경기도 광명시 하안로 198, 205동1001호

김치식

경기도 화성시 동탄 반석로 71 쌍용예가 아파트 441-1201

김남균

경기도 용인시 수지구 포은대로 219 (상현동 서원마을3단지 아이파크 아파트) 302동 1801호

조영준

경기도 성남시 분당구 판교로 393 이지더원아파트 204-701

권혁주

서울특별시 강남구 학동로68길 29 105-2003

이경주

서울특별시 마포구 새창로8길 72 도화현대홈타운아파트 210-1001

김빛나리

경기도 안양시 동안구 동안로 101 목련선경아파트 102-2401

도유진

경기도 과천시 별양로 85 주공아파트 408동 204호

이수현

경기도 수원시 장안구 수일로 205 105동 1102호

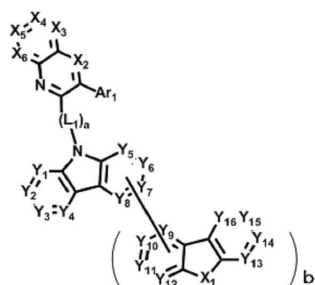
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

L_1 은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이고;

X_1 는 $-NR_1-$, $-CR_2R_3-$, $-O-$, 또는 $-S-$ 이고;

X_2 내지 X_6 은 각각 독립적으로, $-CR_4-$ 또는 $-N-$ 이며;

Ar_1 은 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고;

단, 상기 X_2 가 $-N-$ 일 경우, 상기 L_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이 아니고, 상기 Ar_1 은 수소가 아니고;

Y_1 내지 Y_4 및 Y_{13} 내지 Y_{16} 은 각각 독립적으로, $-N-$ 또는 $-CR_5-$ 이고;

Y_5 내지 Y_{12} 는 각각 독립적으로 $-\overset{\cdot}{C}-$, $-N-$, 또는 $-CR_6-$ 이고;

R_1 내지 R_3 은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬이고;

R_4 내지 R_6 은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환기와 융합되어 치환 또는 비치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

상기 헤테로아릴(렌) 및 헤테로시클로알킬은 각각 독립적으로, B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

a 및 b 는 각각 독립적으로 0 또는 1이다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 L_1 , Ar_1 , 및 R_1 내지 R_6 에서 치환 알킬, 치환 시클로알킬, 치환 시클로알케닐, 치환 헤테로시클로알킬, 치환 아릴(렌), 치환 헤테로아릴(렌), 치환 디아릴아미노 및 치환 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족고리의 치환체는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알

킬, 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 치환되거나 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, (3-30원)헤테로아릴로 치환되거나 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 1종 이상인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 L_1 은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴렌이고;

상기 X_1 은 $-NR_1-$, $-CR_2R_3-$, $-O-$, 또는 $-S-$ 이고;

상기 X_2 내지 X_6 모두가 $-CR_4-$ 이거나, 상기 X_2 내지 X_6 중 하나가 $-N-$ 이고 나머지는 $-CR_4-$ 이고, 여기서, 상기 X_2 가 $-N-$ 일 경우, 상기 L_1 은 단일 결합이고;

상기 Ar_1 은 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴이고, 여기서, 상기 Ar_1 이 수소일 경우, 상기 R_4 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴이고;

상기 Y_1 내지 Y_4 및 Y_{13} 내지 Y_{16} 은 각각 독립적으로 $-CR_5-$ 이고;

상기 Y_5 내지 Y_{12} 는 각각 독립적으로 $-\overset{\overset{|}{\text{C}}}{-}$ 또는 $-CR_6-$ 이고;

상기 R_1 내지 R_3 은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C5-C21)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (5-7원)헤테로시클로알킬이고;

상기 R_4 내지 R_6 는 각각 독립적으로, 수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C5-C21)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C21)아릴아미노이거나, 인접한 치환기와 융합되어 치환 또는 비치환된 (5-21원)의 단일 환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 1 내지 2개의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

상기 헤테로아릴(렌) 및 헤테로시클로알킬은 각각 독립적으로, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

a 및 b가 각각 독립적으로 0 또는 1인, 유기 전계 발광 화합물.

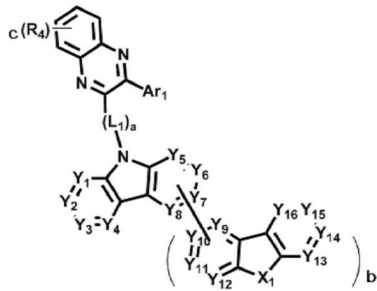
청구항 4

제3항에 있어서, 상기 Ar_1 이 수소, 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 테페닐, 치환 또는 비치환된 안트라세닐, 치환 또는 비치환된 페난트레닐, 치환 또는 비치환된 페닐나프틸, 또는 치환 또는 비치환된 나프틸페닐인, 유기 전계 발광 화합물.

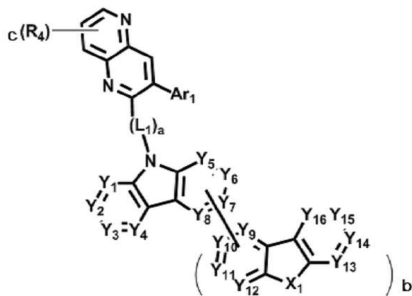
청구항 5

제1항에 있어서, 상기 화합물이 하기 화학식 2 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

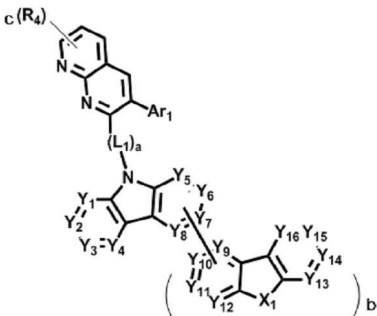
[화학식 2]



[화학식 3]



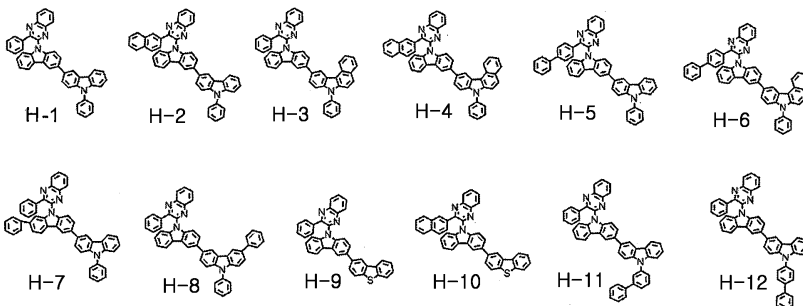
[화학식 4]

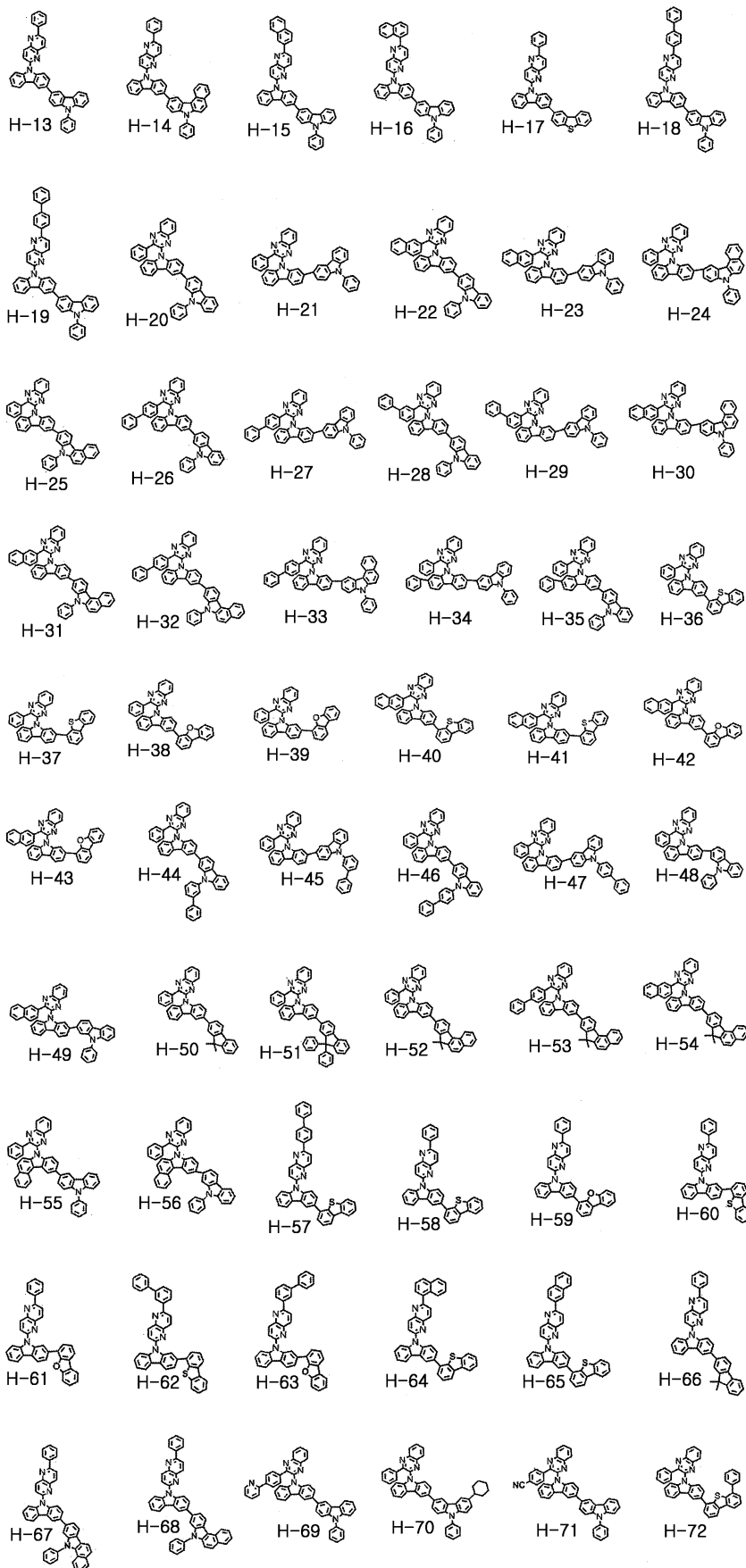


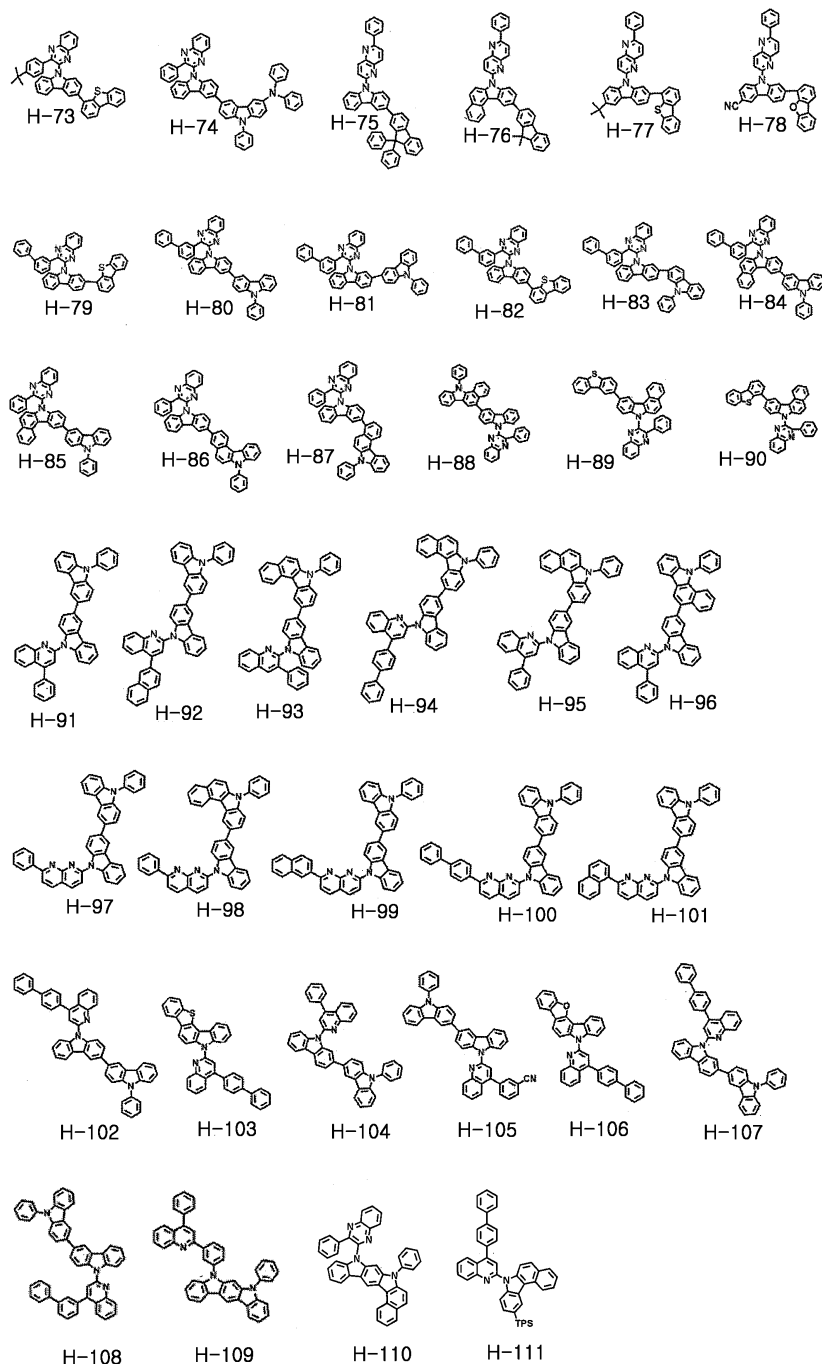
상기 화학식 2 내지 4에서, X_1 , Ar_1 , Y_1 내지 Y_{16} , R_4 , L_1 , a , 및 b 는 제1항에서 정의한 바와 동일하고; c 는 1 내지 4의 정수이고, c 가 2 이상일 경우, 각각의 R_4 는 동일하거나 상이하다.

청구항 6

제1항에 있어서, 상기 화합물이 하기 화합물로부터 선택되는 유기 전계 발광 화합물.







청구항 7

제1항에 기재된 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 8

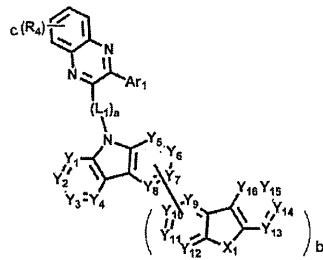
양극, 음극, 및 상기 양극과 상기 음극 사이의 유기물층을 포함하고; 상기 유기물층은 1층 이상의 발광층을 포함하고; 상기 발광층 중 적어도 1층이 1종 이상의 도판트 화합물 및 2종 이상의 호스트 화합물을 포함하고; 상기 2종 이상의 호스트 화합물 중 적어도 1종이 제1항에 기재된 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물인 유기 전계 발광 소자.

청구항 9

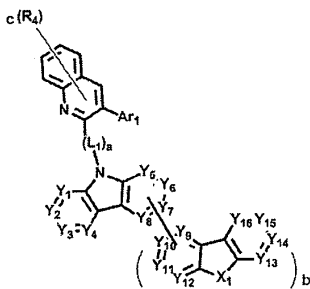
제8항에 있어서, 상기 2종 이상의 호스트 화합물 중 제1 호스트 화합물이 하기 화학식 2 및 5로 표시되는 화합

물에서 선택되는, 유기 전계 발광 소자.

[화학식 2]



[화학식 5]



상기 화학식 2 및 5에서, X_1 , Ar_1 , Y_1 내지 Y_{16} , R_4 , L_1 , a , 및 b 는 제1항에서 정의한 바와 동일하고; c 는 1 내지 5의 정수이고, c 가 2 이상일 경우, 각각의 R_4 는 동일하거나 상이하다.

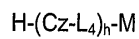
청구항 10

제8항에 있어서, 상기 2종 이상의 호스트 화합물 중 적어도 2종이 각각 독립적으로 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물에서 선택되는 유기 전계 발광 소자.

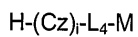
청구항 11

제8항에 있어서, 상기 2종 이상의 호스트 화합물 중 제1 호스트 화합물이 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이고, 제2 호스트 화합물이 하기 화학식 6 내지 11로 표시되는 화합물에서 선택되는 유기 전계 발광 소자.

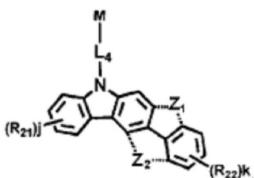
[화학식 6]



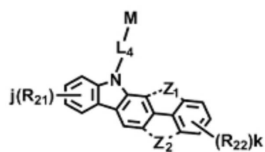
[화학식 7]



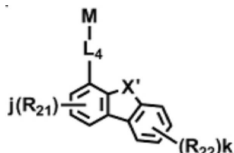
[화학식 8]



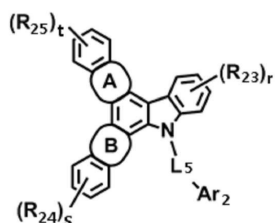
[화학식 9]



[화학식 10]

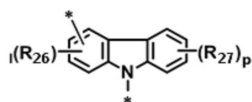


[화학식 11]



상기 화학식 6 내지 11에서,

Cz는 하기 구조이며,



L₄ 및 L₅는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고;

M은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며, 단, 화학식 6에서 h

가 1일 경우의 M, 화학식 7에서 i가 1일 경우의 M, 및 화학식 8과 9에서의 M은

내지 X₆ 및 Ar₁은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고, *는 연결 부위를 나타낸다.);



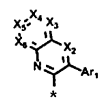
Z₁ 및 Z₂는 각각 독립적으로 -O-, -S-, -N(R₃₁)- 또는 -C(R₃₂)(R₃₃)-이고, Z₁과 Z₂가 동시에 존재하지는 않으며;

X'는 -O- 또는 -S-이고;

환 A는  이고; 환 B는  이고;

D 및 E는 각각 독립적으로, -O-, -S-, -N(R₃₄)- 또는 -C(R₃₅)(R₃₆)-이고;

Ar₂는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고, 단, Ar₂는



이 아니고 (여기서, X₂ 내지 X₆ 및 Ar₁은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고, *는 연결 부위를 나타

낸다.);

R₂₁ 내지 R₂₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 또는 R₂₈R₂₉R₃₀Si-이며, 인접한 치환체와 함께 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 치환족 또는 방향족 고리의 탄소원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, 단, 상기 화학식 6과 7에서 h 또는 i가 1일 경우, R₂₆ 또는 R₂₇은 상기 화학식 8, 9, 및 11에서 Z₁, Z₂, D, 또는 E를 포함하는 고리 구조를 형성하지 않고, 상기 화학식 10에서 R₂₂는 상기 화학식 8과 9에서 R₂₁에 연결된 인돌 고리 구조 및 상기 화학식 11에서 R₂₃에 연결된 인돌 고리 구조를 형성하지 않고;

R₂₈ 내지 R₃₀은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;

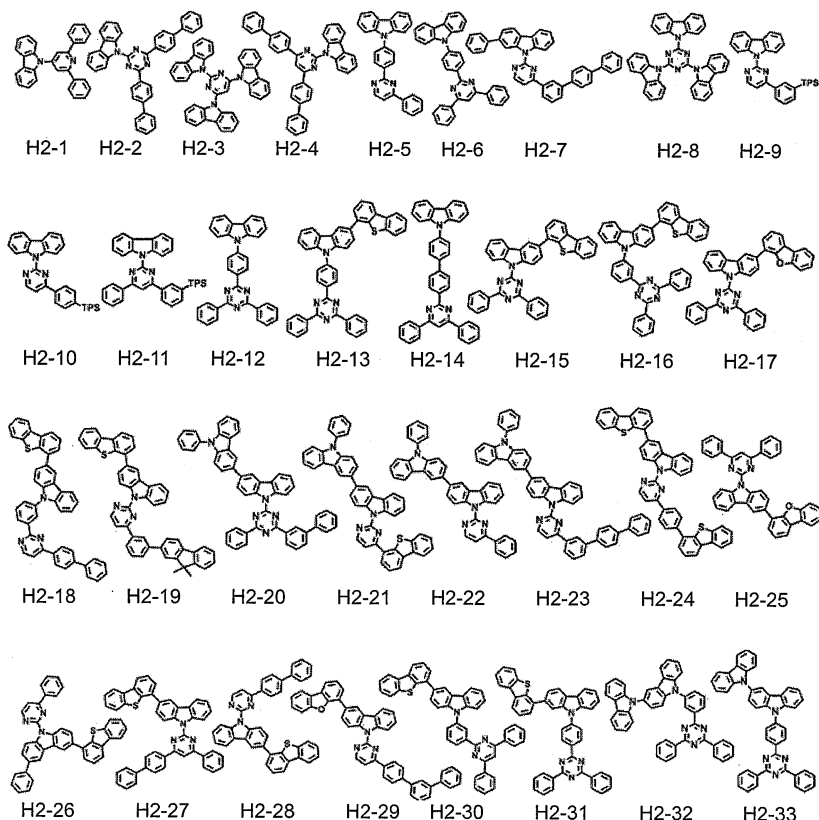
R₃₁ 내지 R₃₆은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, R₃₂와 R₃₃은 동일하거나 상이할 수 있고, R₃₅와 R₃₆은 동일하거나 상이할 수 있고;

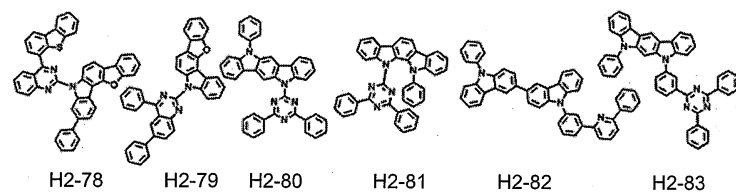
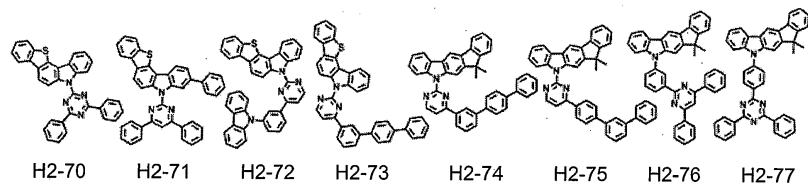
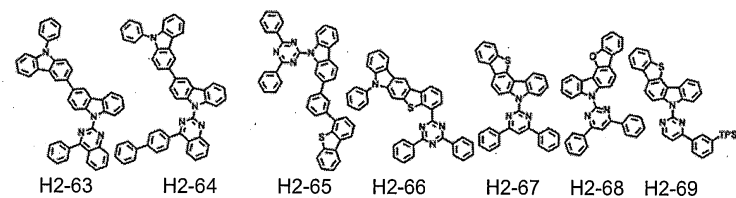
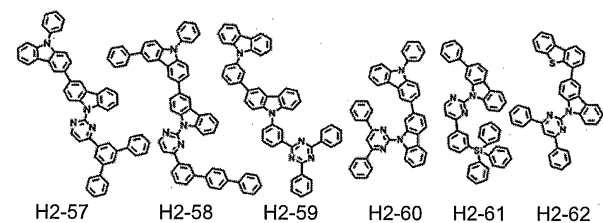
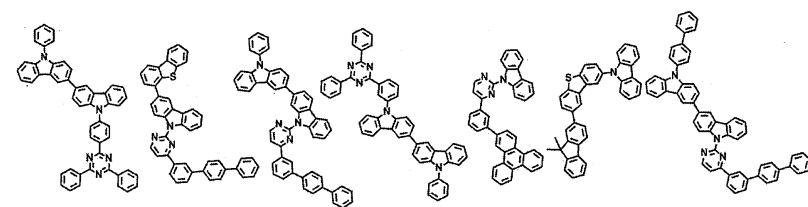
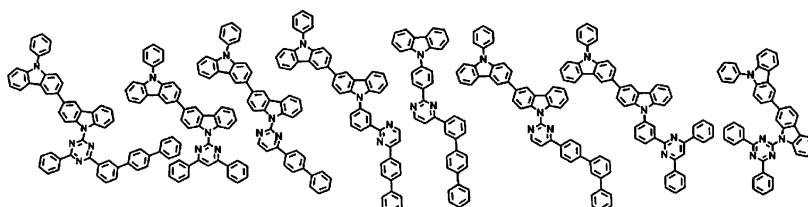
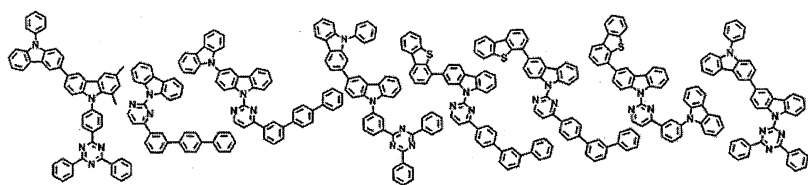
상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

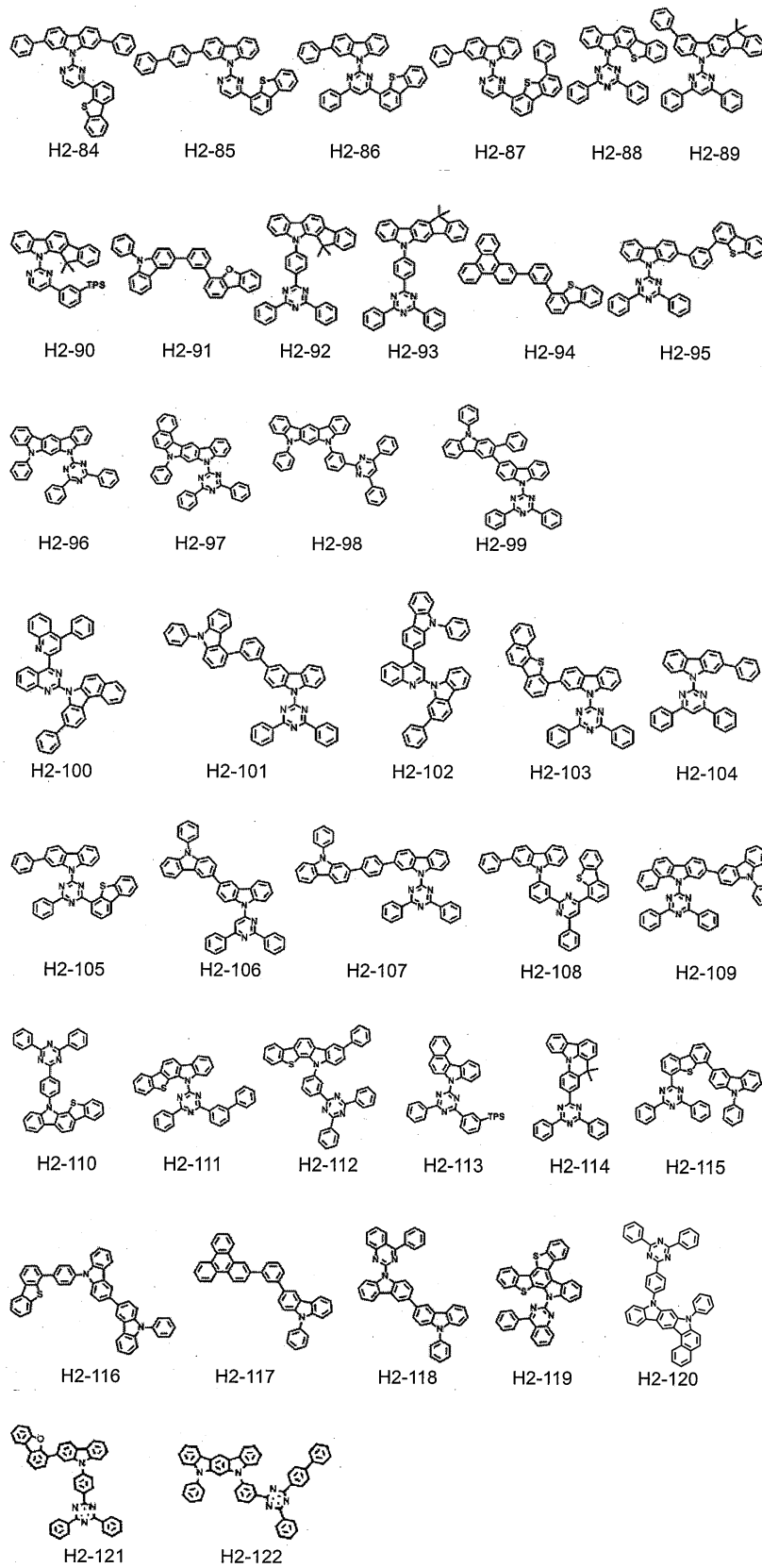
h 및 i는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고; j, k, l 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며; r, s, 및 t는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이며; h, i, j, k, l, p, r, s, 또는 t가 2 이상의 정수인 경우 각각의 (Cz-L₄), 각각의 (Cz), 각각의 R₂₁, 각각의 R₂₂, 각각의 R₂₃, 각각의 R₂₄, 각각의 R₂₅, 각각의 R₂₆, 또는 각각의 R₂₇은 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 12

제11항에 있어서, 상기 화학식 6 내지 11로 표시되는 화합물이 하기 화합물에서 선택되는 유기 전계 발광 소자.







발명의 설명

기술분야

[0001] 본 발명은 유기 전계 발광 화합물, 및 이를 포함하는 복수종의 호스트 재료 및 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 표시 소자 중, 전계 발광 소자(electroluminescent device: EL device)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[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 전계 발광 소자에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재까지 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 전계 발광의 메커니즘상 형광 발광 재료에 비해 인광 발광 재료가 이론적으로 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있다는 점에서 인광 발광 재료의 개발 연구가 널리 수행되고 있다. 현재까지 이리듐(III)착물 계열이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 각 RGB 별로는 비스(2-(2'-벤조티에닐)-피리디네이트-N,C-3')이리듐(아세틸아세토네이트) [(acac)Ir(btp)₂], 트리스(2-페닐피리딘)이리듐 [Ir(ppy)₃] 및 비스(4,6-디플루오로페닐피리디네이트-N,C2)피콜리네이트이리듐 (Firpic) 등의 재료가 알려져 있다.

[0004] 종래 기술에서, 인광용 호스트 재료로는 4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐(CBP)이 가장 널리 알려져 있었다. 최근에는, 일본의 파이오니어 등이 정공 차단층의 재료로 사용되던 바토큐프로인(Bathocuproine, BCP) 및 알루미늄(III) 비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)(4-페닐페놀레이트)(BALq) 등을 호스트 재료로 이용해 고성능의 유기 전계 발광 소자를 개발한 바 있다.

[0005] 그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 다음과 같은 단점이 있다: (1) 유리 전이 온도가 낮고 열적 안정성이 낮아서, 진공 하에서 고온 증착 공정을 거칠 때, 물질이 변한다. (2) 유기 전계 발광 소자에서 전력효율 = [(π /전압) × 전류효율]의 관계에 있으므로 전력 효율은 전압에 반비례하는데, 인광용 호스트 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자는 형광 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자에 비해 전류 효율(cd/A)은 높으나, 구동 전압 역시 상당히 높기 때문에 전력 효율(lm/w) 면에서 큰 이점이 없다. (3) 또한, 유기 전계 발광 소자에 사용할 경우, 작동 수명 측면에서도 만족스럽지 못하며, 발광 효율도 여전히 개선이 요구된다.

[0006] 한국 공개특허공보 제10-2010-0105501호는 비스카바졸의 N 원자 중 하나에 퀴녹살린이 페닐렌을 경유하여 치환되어있는 구조의 화합물을 유기 전계 발광 소자용 화합물로서 개시한다. 그러나, 상기 문헌은 비스카바졸의 N 원자 중 하나에 나프티리딘이 직접적으로 또는 링커(linker)를 경유하여 치환되거나 퀴녹살린이 직접적으로 또는 링커로서 헤테로아릴렌을 경유하여 치환된 것은 개시되어 있지 않다.

선행기술문헌

특허문헌

[0007] (특허문헌 0001) 한국 공개특허공보 제10-2010-0105501호 (2010.09.29. 공개)

발명의 내용

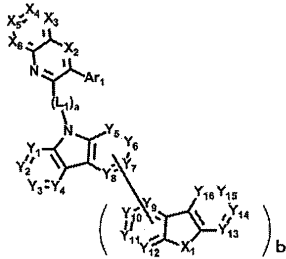
해결하려는 과제

[0008] 본 발명의 목적은, 첫째로 구동 수명이 길고, 구동전압이 낮고, 전류효율 및 전력효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며, 둘째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 복수종의 호스트 재료 및 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0009] 상기의 기술적 과제를 해결하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0010] [화학식 1]



[0011]

[0012] 상기 화학식 1에서,

[0013] L₁은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이고;

[0014] X₁는 -NR₁-, -CR₂R₃-, -O-, 또는 -S-이고;

[0015] X₂ 내지 X₆은 각각 독립적으로, -CR₄- 또는 -N-이며;

[0016] Ar₁은 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고;

[0017] 단, 상기 X₂가 -N-일 경우, 상기 L₁은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이 아니고, 상기 Ar₁은 수소가 아니고;

[0018] Y₁ 내지 Y₄ 및 Y₁₃ 내지 Y₁₆은 각각 독립적으로, -N- 또는 -CR₅-이고;

[0019] Y₅ 내지 Y₁₂는 각각 독립적으로 $\overset{\text{I}}{\text{C}}-$, -N-, 또는 -CR₆-이고;

[0020] R₁ 내지 R₃은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬이고;

[0021] R₄ 내지 R₆는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환기와 융합되어 치환 또는 비치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

[0022] 상기 헤테로아릴(렌) 및 헤테로시클로알킬은 각각 독립적으로 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

[0023] a 및 b는 각각 독립적으로 0 또는 1이다.

발명의 효과

[0024] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물, 및 이를 포함하는 복수종의 호스트 재료는 구동 전압이 낮고 전류 효율 및 전력 효율이 우수하면서도, 구동 수명이 현저히 탁월하게 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0025] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.

[0026] 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물, 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

[0027] 본 발명의 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

[0028]

본 발명에 기재되어 있는 "알킬"의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸 등이 있다. 본원에서 "알케닐"의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "알키닐"의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "시클로알킬"의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(3-7원) 헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 3 내지 7개이고, B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 O, S 및 N에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라히드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 등이 있다. 본원에서 "아릴(렌)"은 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 하나의 원자를 통해 2개의 고리가 연결된 스피로 화합물도 포함한다. 상기 아릴의 예로서 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페틸레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 스피로비플루오레닐 등이 있다. 본원에서 "(3-30원) 헤테로아릴(렌)"은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, P(=O), 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 헤테로아릴(렌)은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 프라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로겐"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0029]

또한 본 발명에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 '치환'은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 본 발명에서, L_1 , Ar_1 , R_1 내지 R_6 , R_{21} 내지 R_{27} , R_{31} 내지 R_{33} , R_{100} 내지 R_{109} , R_{111} 내지 R_{127} , L_4 및 M에서 치환 알킬, 치환 시클로알킬, 치환 시클로알케닐, 치환 헤테로시클로알킬, 치환 아릴(렌), 치환 헤테로아릴(렌), 치환 디아릴아미노, 치환 알콕시 및 치환 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리의 치환체는, 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 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 치환되거나 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, (3-30원)헤테로아릴로 치환되거나 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 1종 이상이고; 각각 독립적으로 시아노, 할로겐, (C1-C10)알킬, (C3-C12)시클로알킬, (C5-C18)아릴, (5-18원)헤테로아릴, 디(C6-C12)아릴아미노, 및 (C1-C10)알킬(C5-C18)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상인 것이 바람직하다.

[0030]

상기 L_1 은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴렌이고; 바람직하게는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴렌이다. 구체적으로는, 상기 L_1 은 단일 결합일 수 있다.

[0031]

상기 X_1 은 $-NR_1-$, $-CR_2R_3-$, $-O-$, 또는 $-S-$ 이다. 구체적으로는, 상기 X_1 은 $-NR_1-$ 일 수 있다.

[0032]

상기 X_2 내지 X_6 은 각각 독립적으로, $-CR_4-$ 또는 $-N-$ 이고; 바람직하게는 상기 X_2 내지 X_6 모두가 $-CR_4-$ 이거나, 상기 X_2 내지 X_6 중 하나가 $-N-$ 이고 나머지는 $-CR_4-$ 이다. 상기 X_2 가 $-N-$ 일 경우, 상기 L_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이 아니고, 상기 Ar_1 은 수소가 아니다. 구체적으로는, 상기 X_2 가 $-N-$ 일 경우, 상기 L_1 은 단일 결합일 수 있다.

[0033]

상기 Ar₁은 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고; 바람직하게는, 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴이고; 더 바람직하게는 수소, 또는 (C1-C10)알킬, 시아노, (C6-C13)아릴 또는 (5-13원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이다. 구체적으로는, Ar₁은 수소, 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 터페닐, 치환 또는 비치환된 안트라세닐, 치환 또는 비치환된 페난트레닐, 치환 또는 비치환된 페닐나프틸, 또는 치환 또는 비치환된 나프틸페닐일 수 있다. 더 구체적으로는, Ar₁은 수소; 또는 (C1-C4)알킬, 시아노, 또는 피리딜로 치환 또는 비치환된, 페닐, 비페닐, 나프틸, 터페닐, 안트라세닐, 페난트레닐, 페닐나프틸, 또는 나프틸페닐일 수 있다. 바람직하게는, 상기 Ar₁이 수소일 경우, 상기 X₂ 내지 X₆ 중 적어도 하나는 R₄가 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴인 -CR₄-이다. 더 바람직하게는, 상기 Ar₁이 수소일 경우, 상기 X₂ 내지 X₆ 중 적어도 하나는 R₄가 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴인 -CR₄-일 수 있고; 더더욱 바람직하게는 상기 X₂ 내지 X₆ 중 하나는 R₄가 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴인 -CR₄-일 수 있다.

[0034]

상기 Y₁ 내지 Y₄ 및 Y₁₃ 내지 Y₁₆은 각각 독립적으로, -N- 또는 -CR₅-이고; 바람직하게는 -CR₅-이다. 구체적으로는, 상기 Y₁ 내지 Y₄는 -CH-이거나; 상기 Y₁ 내지 Y₄ 중 하나가 -CR₅-이고 (여기서, R₅는 수소가 아님), 나머지는 -CH-이거나; 상기 Y₁ 내지 Y₄ 중 둘은 -CH-이고, 나머지 둘은 -CR₅- (여기서, R₅는 수소가 아님)일 수 있다. 또한, 구체적으로는, 상기 Y₁₃ 내지 Y₁₆는 -CH-이거나; 상기 Y₁₃ 내지 Y₁₆ 중 하나가 -CR₅-이고 (여기서, R₅는 수소가 아님), 나머지는 -CH-이거나; 상기 Y₁₃ 내지 Y₁₆ 중 둘은 -CH-이고, 나머지 둘은 -CR₅- (여기서, R₅는 수소가 아님)일 수 있다.

[0035]

상기 Y₅ 내지 Y₁₂는 각각 독립적으로, $\overset{\text{I}}{\text{C}}-$, -N-, 또는 -CR₆-이고; 바람직하게는, 상기 Y₅ 내지 Y₁₂는 각각 독립적으로 $\overset{\text{I}}{\text{C}}-$ 또는 -CR₆-이다. 구체적으로는, 상기 Y₅ 내지 Y₈ 중 하나는 $\overset{\text{I}}{\text{C}}-$ 이고, 나머지는 -CH-일 수 있다. 또한, 구체적으로는, 상기 Y₉ 내지 Y₁₂ 중 하나는 $\overset{\text{I}}{\text{C}}-$ 이고, 나머지는 -CH-이거나; 상기 Y₉ 내지 Y₁₂ 중 하나는 $\overset{\text{I}}{\text{C}}-$ 이고, 둘은 -CR₆- (여기서, R₆는 수소가 아님)이고, 나머지 하나는 -CH-일 수 있다.

[0036]

상기 R₁ 내지 R₃은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬이고; 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C5-C21)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (5-7원)헤테로시클로알킬이고; 더 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이고; 더욱 더 바람직하게는 비치환된 (C1-C10)알킬 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이다. 바람직하게는, 상기 R₂와 R₃가 서로 동일하다. 구체적으로는, 상기 R₁은 페닐, 비페닐, 또는 나프틸일 수 있고; 상기 R₂는 (C1-C4)알킬 또는 페닐일 수 있고; 상기 R₃은 (C1-C4)알킬 또는 페닐일 수 있다.

[0037]

상기 R₄ 내지 R₆는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환기와 융합되어 치환 또는 비치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있다. 바람직하게는, 상기 R₄ 내지 R₆는 각각 독립적으로, 수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C5-C21)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C21)아릴아미노이거나, 인접한 치환기와 융합되어 치환 또는 비치환된 (5-21원)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터

선택되는 1 내지 2개의 헤테로원자로 대체될 수 있다. 더 바람직하게는, 상기 R_4 는 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이다. 구체적으로는, 상기 R_4 는 수소, 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 터페닐, 치환 또는 비치환된 안트라세닐, 치환 또는 비치환된 페난트레닐, 치환 또는 비치환된 페닐나프틸, 또는 치환 또는 비치환된 나프틸페닐일 수 있다. 또한, 상기 R_5 및 R_6 는, 더 바람직하게는, 수소, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C5-C18)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C18)아릴아미노이거나; 인접한 치환기와 융합되어 치환 또는 비치환된 (5-18원)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리 중 하나의 탄소 원자는 질소, 산소, 및 황으로부터 선택되는 헤테로원자로 대체될 수 있다. 구체적으로는, 상기 R_5 및 R_6 는 각각 독립적으로 수소, 시아노, (C1-C4)알킬, 페닐, 시클로헥실 또는 디(페닐)아미노일 수 있거나, 인접한 치환기와 융합되어 치환 또는 비치환된 벤젠 고리, 치환 또는 비치환된 티오펜 고리, 치환 또는 비치환된 푸란 고리, 치환 또는 비치환된 인돌 고리, 치환 또는 비치환된 인덴 고리, 치환 또는 비치환된 나프탈렌 고리, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜 고리, 치환 또는 비치환된 벤조푸란 고리, 또는 치환 또는 비치환된 벤조인돌 고리를 형성할 수 있다.

[0038]

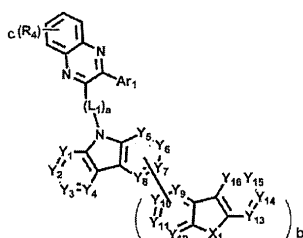
본 발명의 일 실시예에 따르면, 상기 L_1 는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴렌이고; 상기 X_1 은 $-NR_1-$, $-CR_2R_3-$, $-O-$, 또는 $-S-$ 이고; 상기 X_2 내지 X_6 모두가 $-CR_4-$ 이거나, 상기 X_2 내지 X_6 중 하나가 $-N-$ 이고 나머지는 $-CR_4-$ 이고, 여기서, 상기 X_2 가 $-N-$ 일 경우, 상기 L_1 은 단일 결합이고; 상기 Ar_1 은 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴이고, 여기서, 상기 Ar_1 이 수소일 경우, 상기 R_4 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴이고; 상기 Y_1 내지 Y_4 및 Y_{13} 내지 Y_{16} 는 각각 독립적으로 $-CR_5-$ 이고; 상기 Y_5 내지 Y_{12} 는 각각 독립적으로 $-\overset{\overset{|}{C}}{-}$ 또는 $-CR_6-$ 이고; 상기 R_1 내지 R_3 은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C5-C21)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (5-7원)헤테로시클로알킬이고; 상기 R_4 내지 R_6 는 각각 독립적으로, 수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C5-C21)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C21)아릴아미노이거나, 인접한 치환기와 융합되어 치환 또는 비치환된 (5-21원)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 1 내지 2개의 헤테로원자로 대체될 수 있고; 상기 헤테로아릴(렌) 및 헤테로시클로알킬은 각각 독립적으로 N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고; a 및 b는 각각 독립적으로 0 또는 1이다.

[0039]

본 발명의 다른 일 실시예에 따르면, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[0040]

[화학식 2]



[0041]

[0042]

상기 화학식 2에서, X_1 , Ar_1 , Y_1 내지 Y_{16} , R_4 , L_1 , a, 및 b는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하고; c는 1 내지 4의 정수이고, c가 2 이상일 경우, 각각의 R_4 는 동일하거나 상이하다. 바람직하게는, 상기 화학식 2에서, L_1 은 단일 결합이고, 상기 Ar_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴이고, 상기 R_4 는 모두 수소이다.

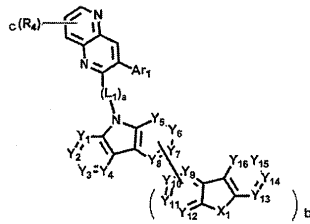
[0043]

본 발명의 또 다른 일 실시예에 따르면, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 3 내지 화학식 5 중 어느 하나

로 표시될 수 있다.

[0044]

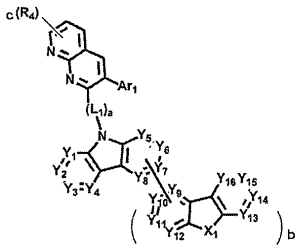
[화학식 3]



[0045]

[0046]

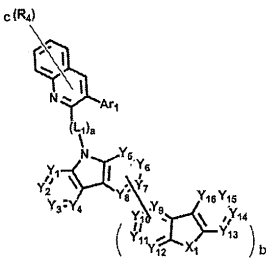
[화학식 4]



[0047]

[0048]

[화학식 5]



[0049]

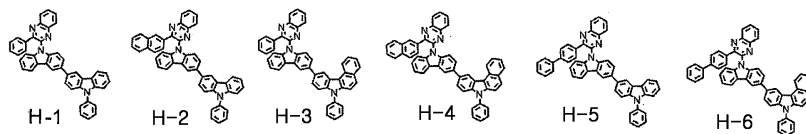
[0050]

상기 화학식 3 내지 화학식 5에서, X_1 , Ar_1 , Y_1 내지 Y_{16} , L_1 , R_4 , a , 및 b 는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하고; c 는 1 내지 5의 정수이고, c 가 2 이상일 경우, 각각의 R_4 는 동일하거나 상이하다. 상기 화학식 3 내지 화학식 5에서, 바람직하게는, 상기 Ar_1 이 수소일 경우, 상기 R_4 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴이고; 더 바람직하게는, 상기 Ar_1 은 수소이고; 상기 R_4 중 하나가 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이고, 나머지 R_4 는 수소이다.

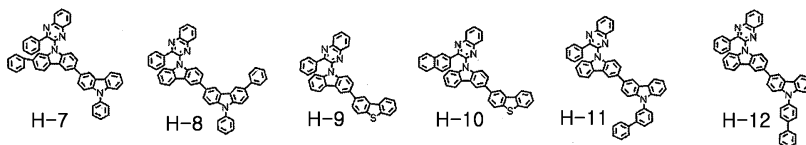
[0051]

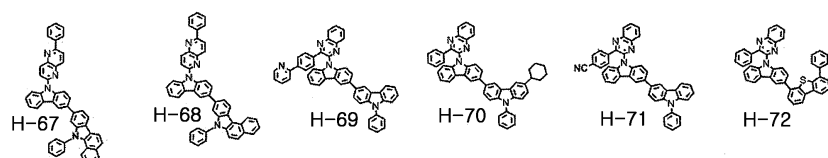
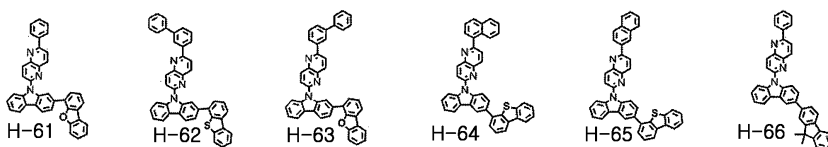
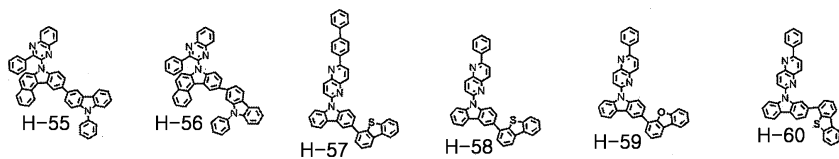
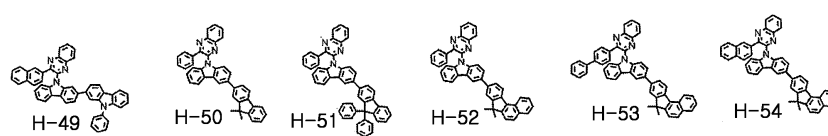
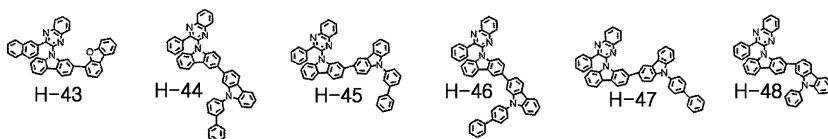
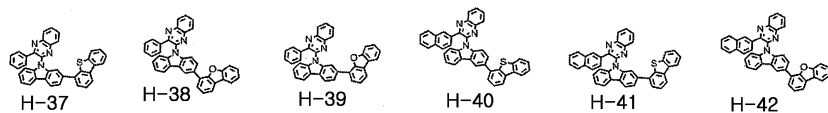
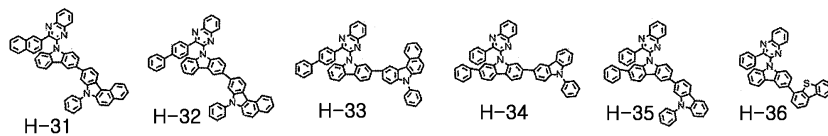
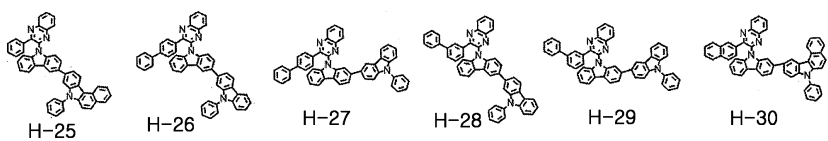
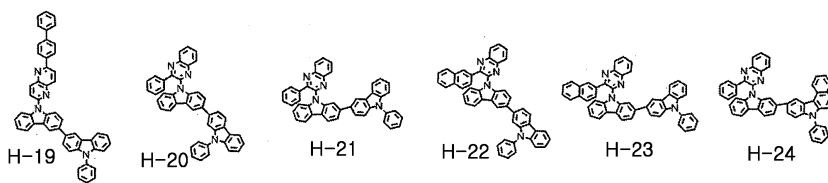
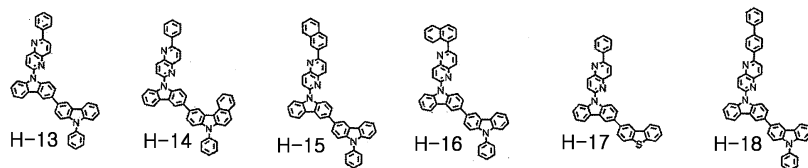
본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

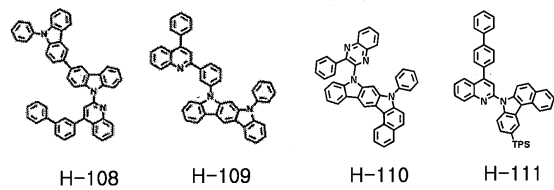
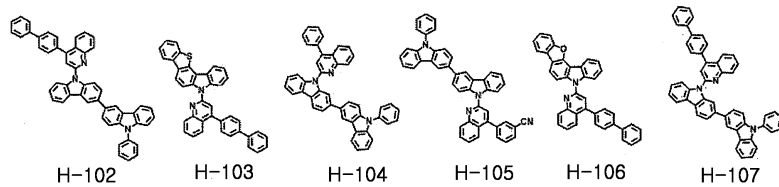
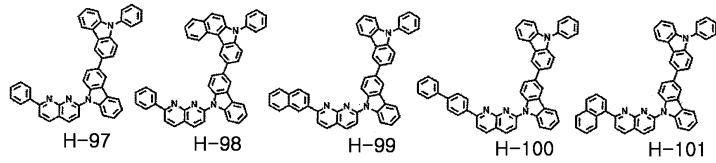
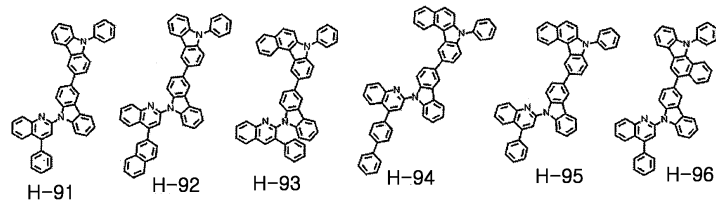
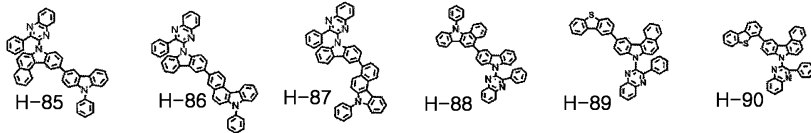
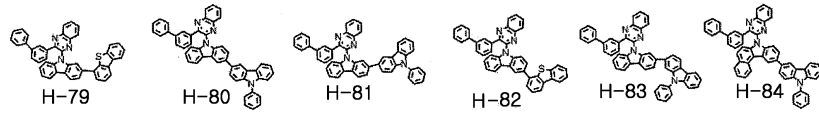
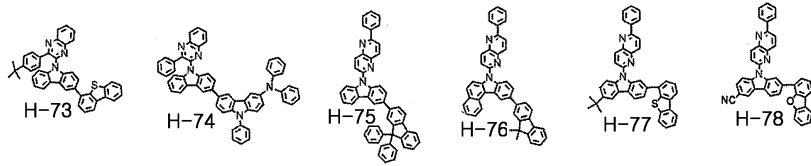
[0052]



[0053]

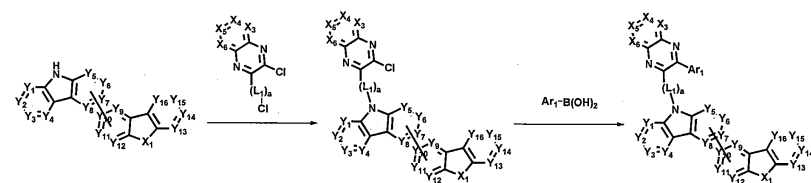




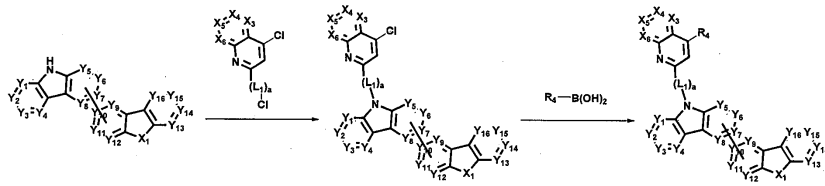


본 발명에 따른 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식 1 내지 반응식 4에 나타난 바와 같이 제조할 수 있다.

[반응식 1]

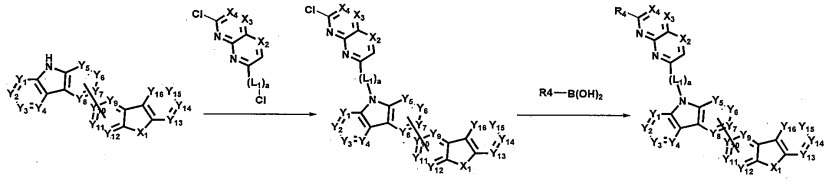


[0074] [반응식 2]



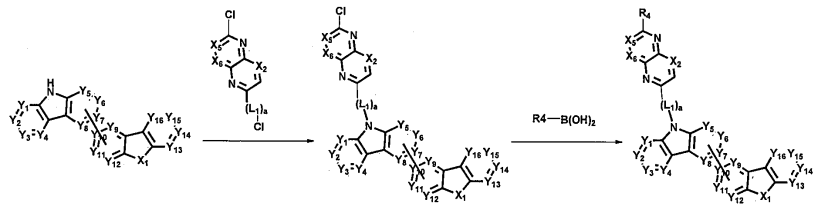
[0075]

[0076] [반응식 3]



[0077]

[0078] [반응식 4]



[0079]

[0080] 또한, 본 발명은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0081] 상기 재료는 본 발명의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물에서 선택되는 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 상기 재료는 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0082] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖고, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다.

[0083] 상기 제1전극과 제2전극 중 하나는 양극이고 다른 하나는 음극일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 발광층에 추가하여, 정공주입층, 정공전달층, 전자전달층, 전자주입층, 계면층(interlayer), 정공차단층, 전자버퍼층 및 전자차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

[0084] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다. 발광층에 사용되는 경우, 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는 상기 발광층은 하나 이상의 도판트를 추가로 더 포함할 수 있다. 필요한 경우, 상기 발광층은 본 발명의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물에서 선택되는 2종 이상의 화합물을 포함할 수 있거나; 또는 본 발명의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물과, 본 발명의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외의 다른 제2 호스트 재료를 추가로 포함할 수 있다.

[0085] 상기 제2 호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용가능하나, 하기 화학식 6 내지 11로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 구동 전압, 수명, 및 발광 효율면에서 특히 바람직하다.

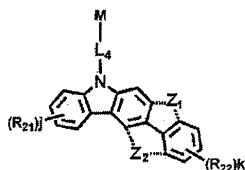
[0086] [화학식 6]

[0087] $H-(Cz-L_4)_h-M$

[0088] [화학식 7]

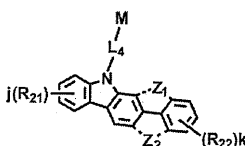
[0089] $H-(Cz)_i-L_4-M$

[0090] [화학식 8]



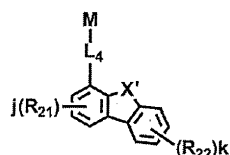
[0091]

[0092] [화학식 9]



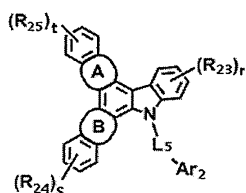
[0093]

[0094] [화학식 10]



[0095]

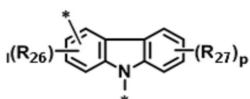
[0096] [화학식 11]



[0097]

[0098] 상기 화학식 6 내지 11에서,

[0099] Cz는 하기 구조이며,



[0100]

[0101] L4 및 L5는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고;

[0102] M은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며, 단, 화학식 6에서 h



가 1일 경우의 M, 화학식 7에서 i가 1일 경우의 M, 및 화학식 8과 9에서의 M은 내지 X6 및 Ar1은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고, *는 연결 부위를 나타낸다.);

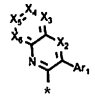
[0103] Z1 및 Z2는 각각 독립적으로 -O-, -S-, -N(R31)- 또는 -C(R32)(R33)-이고, Z1과 Z2가 동시에 존재하지는 않으며;

[0104] X'는 -O- 또는 -S-이고;

[0105] 환 A는  이고; 환 B는  이고;

[0106] D 및 E는 각각 독립적으로, -O-, -S-, -N(R₃₄)- 또는 -C(R₃₅)(R₃₆)-이고;

[0107] Ar₂는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고, 단, Ar₂는 이 아니고 (여기서, X₂ 내지 X₆ 및 Ar₁은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고, *는 연결 부위를 나타낸다.);



[0108] R₂₁ 내지 R₂₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 또는 R₂₈R₂₉R₃₀Si-이며, 인접한 치환체와 함께 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 치환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, 단, 상기 화학식 6과 7에서 h 또는 i가 1일 경우, R₂₆ 또는 R₂₇은 상기 화학식 8, 9, 및 11에서 Z₁, Z₂, D, 또는 E를 포함하는 고리 구조를 형성하지 않고, 상기 화학식 10에서 R₂₂는 상기 화학식 8과 9에서 R₂₁에 연결된 인돌 고리 구조 및 상기 화학식 11에서 R₂₃에 연결된 인돌 고리 구조를 형성하지 않고;

[0109] R₂₈ 내지 R₃₀은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;

[0110] R₃₁ 내지 R₃₆은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, R₃₂와 R₃₃은 동일하거나 상이할 수 있고, R₃₅와 R₃₆은 동일하거나 상이할 수 있고;

[0111] 상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

[0112] h 및 i는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고; j, k, l 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며; r, s, 및 t는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이며; h, i, j, k, l, p, r, s, 또는 t가 2 이상의 정수인 경우 각각의 (Cz-L₄), 각각의 (Cz), 각각의 R₂₁, 각각의 R₂₂, 각각의 R₂₃, 각각의 R₂₄, 각각의 R₂₅, 각각의 R₂₆, 또는 각각의 R₂₇은 동일하거나 상이할 수 있다.

[0113] 바람직하게는, 화학식 6 내지 10에서 M은 치환 또는 비치환된 질소 함유 (6-20원) 헤테로아릴일 수 있다. 상기 M의 치환기는 바람직하게는 (C1-C20)알킬; (C1-C10)알킬, 트리(C6-C13)아릴실릴, 또는 (6-13원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C24)아릴; (C1-C10)알킬, 트리(C6-C13)아릴실릴, 또는 (C6-C24)아릴로 치환 또는 비치환된 (6-20원)헤테로아릴; 또는 트리(C6-C20)아릴실릴일 수 있다. 구체적으로, 상기 M은 치환 또는 비치환된 피리딜, 치환 또는 비치환된 피리미딘일, 치환 또는 비치환된 트리아진일, 치환 또는 비치환된 피라진일, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 또는 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐일 수 있다.

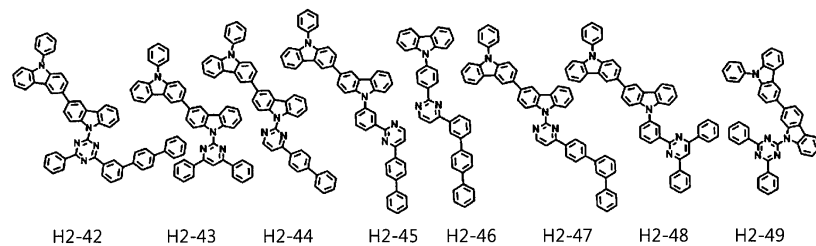
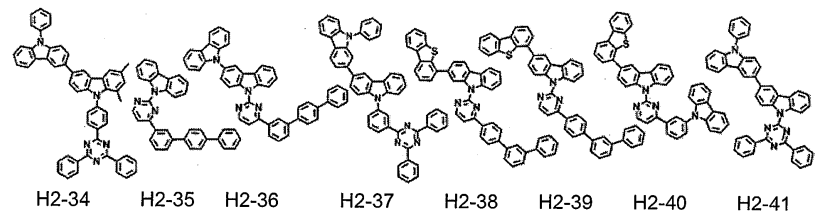
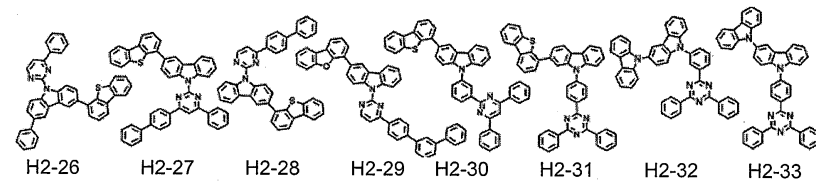
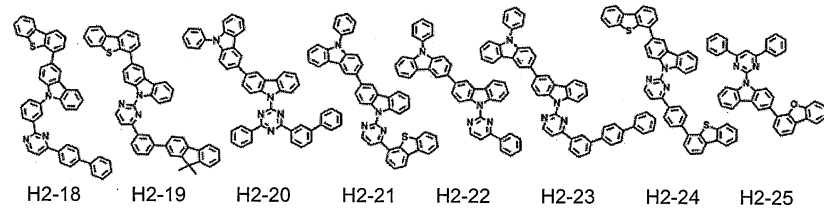
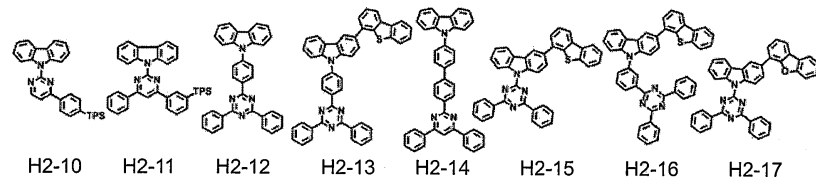
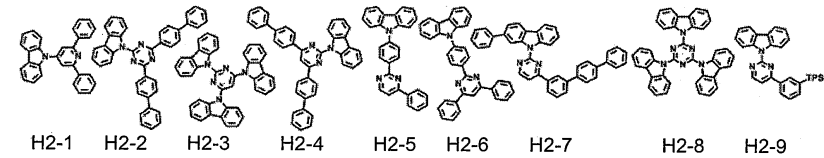
[0114] 화학식 6과 7에서 R₂₆과 R₂₇중의 적어도 하나, 또는 화학식 8 내지 10에서 R₂₁과 R₂₂ 중의 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 카바졸릴, 치환 또는 비치환된 벤조카바졸릴, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일, 치환 또는 비치환된 나프토벤조티오펜일, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란일, 치환 또는 비치환된 나프토벤조푸란일, 치환 또는 비치환된 카바졸릴로 치환된 (C6-C18)아릴, 치환 또는 비치환된 벤조카바졸릴로 치환된 (C6-C18)아릴, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일로 치환된 (C6-C18)아릴, 치환 또는 비치환된 나프토벤조티오펜일로 치환된 (C6-C18)아릴, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란일로 치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 나프토벤조푸란일로 치환된 (C6-C18)아릴일 수 있다. 상기 M이 아릴일 경우, 상기 R₂₆과 R₂₇중의 적어도 하나, 또는 R₂₁과 R₂₂ 중의 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 질소 함유 (6-20원)헤테로아릴이거나, 치환기로서 치환 또는 비치환된 질소 함유 (6-20원)헤테로아릴을 가질 수 있다. 상기 치환 또는 비치환된 질소 함유 헤테로아릴은 구체적으로 치환 또는 비치환된 피리딜, 치환 또는 비치환된 피리미딘일, 치환 또는 비치환된 트리아진일, 치환 또는 비치환된 피라진일, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 또는 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐일 수 있다.

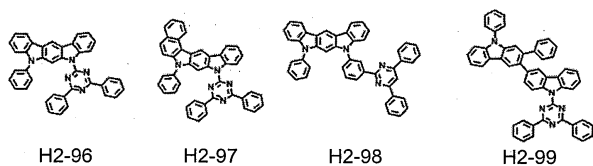
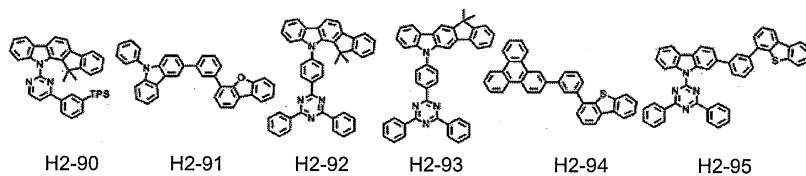
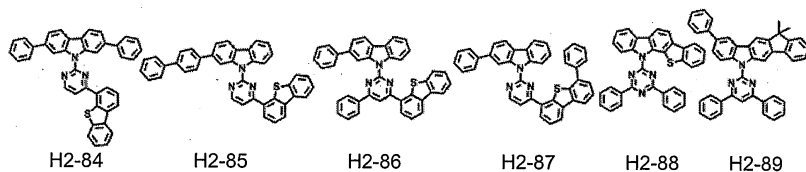
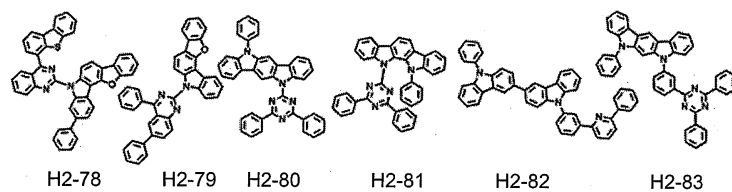
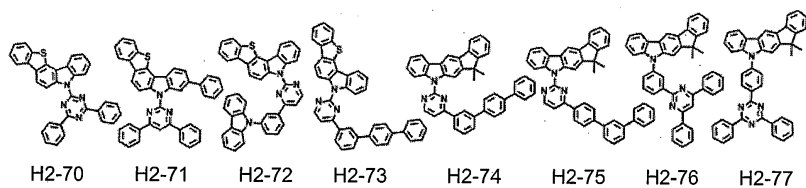
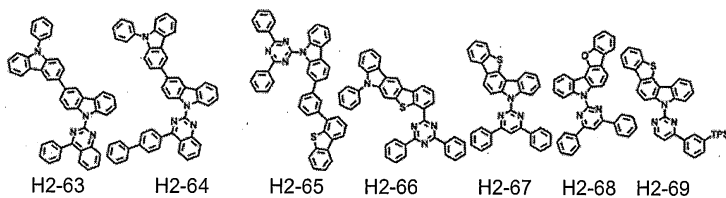
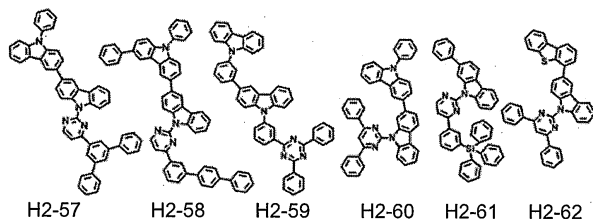
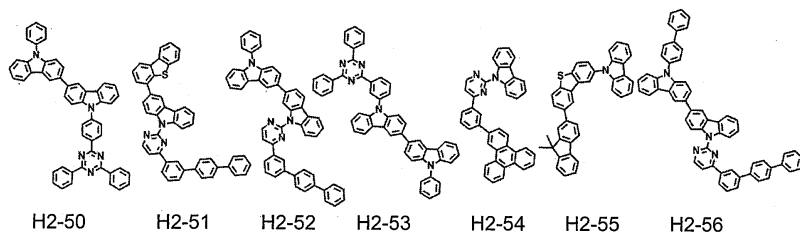
[0115] 바람직하게는 상기 D와 E는 각각 독립적으로 -O-, -S-, 및 -N(R₃₄)-에서 선택되고, 단, X 및 Y가 동시에 -N(R₃₄)-인 경우는 제외된다. 본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 X와 Y는 각각 독립적으로 -O- 및 -S-에서 선택될 수 있다. 본 발명의 다른 일 구현예에 따르면, 상기 X와 Y는 각각 독립적으로 -O- 및 -S-에서 선택될 수

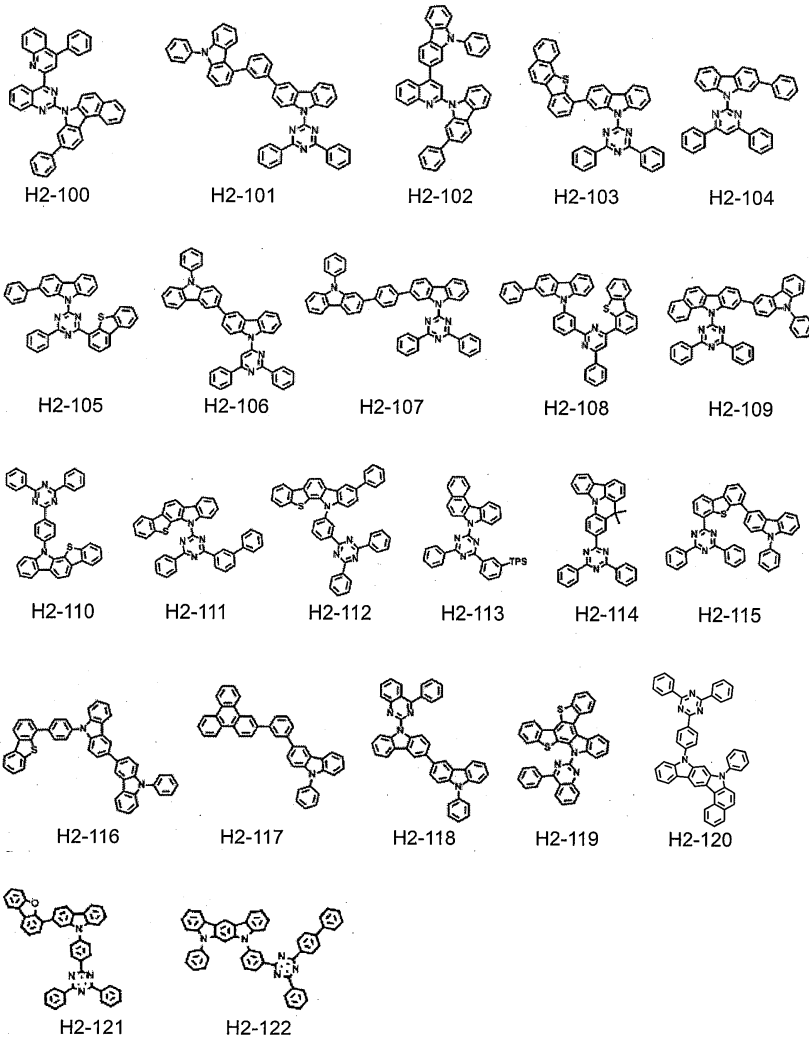
있고, 상기 X와 Y 중 적어도 하나가 -S-일 수 있다. 상기 R₃₄는 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴일 수 있고, 구체적으로는 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 또는 치환 또는 비치환된 비페닐일 수 있다.

상기 Ar₂는 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (6-20원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 더 바람직하게는 치환 또는 비치환된 질소 함유 (6-20원)헤테로아릴일 수 있다. 구체적으로는, 상기 Ar₂는 치환 또는 비치환된 트리아진일, 치환 또는 비치환된 피리미딘일, 치환 또는 비치환된 피리딜, 치환 또는 비치환된 피라진일, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 또는 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐일 수 있다.

구체적으로 상기 제2 호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같다.







[여기서, TPS는 트리페닐실릴(triphenylsilyl)이다.]

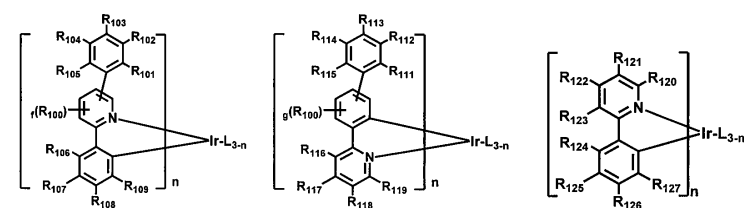
상기 도판트로는 하나 이상의 인광 도판트가 바람직하다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물이 바람직하고, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물이 더욱 바람직하며, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물이 더더욱 바람직하다.

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 12 내지 14로 표시되는 화합물을 사용할 수 있다.

[화학식 12]

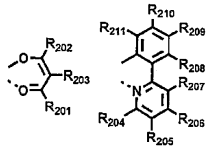
[화학식 13]

[화학식 14]



상기 화학식 12 내지 14에서,

[0143] L은 하기 구조에서 선택되고;



[0144]

[0145] R₁₀₀은 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이며;

[0146]

R₁₀₁ 내지 R₁₀₉ 및 R₁₁₁ 내지 R₁₂₃은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; R₁₀₆ 내지 R₁₀₉는 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 치환 또는 비치환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며; R₁₂₀ 내지 R₁₂₃는 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 치환 또는 비치환된 퀴놀린 형성이 가능하며;

[0147]

R₁₂₄ 내지 R₁₂₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; R₁₂₄ 내지 R₁₂₇ 중 어느 하나가 아릴기인 경우 인접기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 치환 또는 비치환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜 또는 치환 또는 비치환된 디벤조푸란의 형성이 가능하며;

[0148]

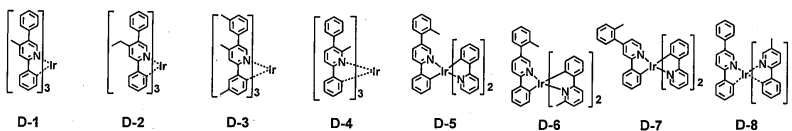
R₂₀₁ 내지 R₂₁₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로겐이 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-30)아릴이고, R₂₀₈ 내지 R₂₁₁은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 치환 또는 비치환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

[0149]

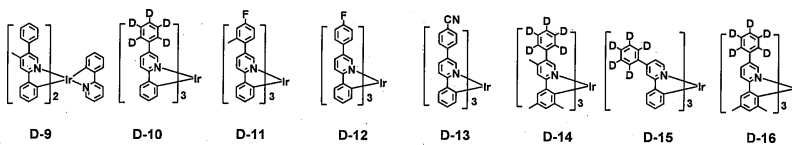
f 및 g는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며; f 또는 g가 각각 2 이상의 정수인 경우 각각의 R₁₀₀은 서로 동일하거나 상이할 수 있고; n은 1 내지 3의 정수이다.

[0150]

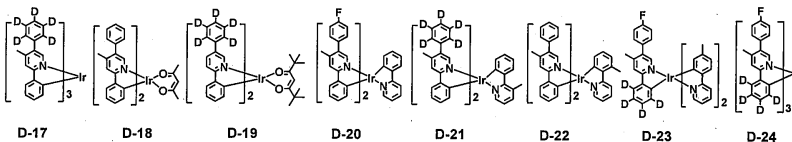
상기 도판트 재료의 구체적인 예로는 다음과 같다.



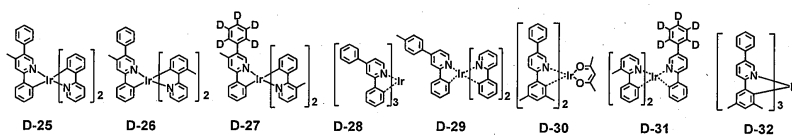
[0151]



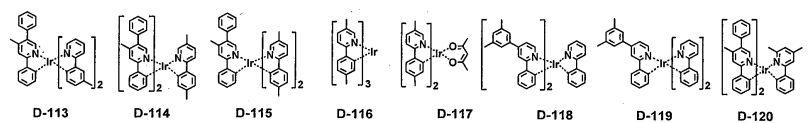
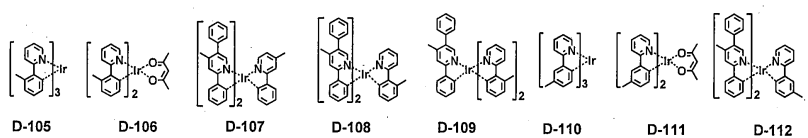
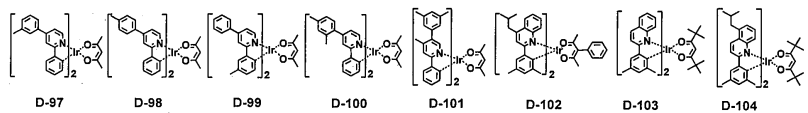
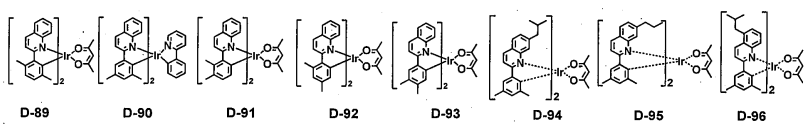
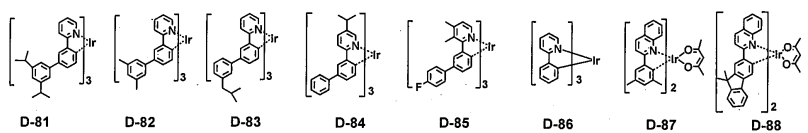
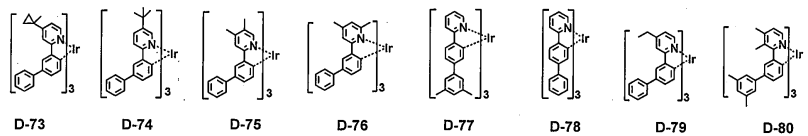
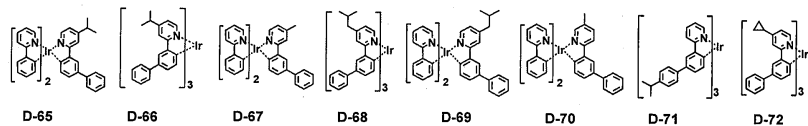
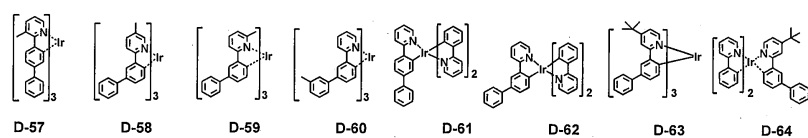
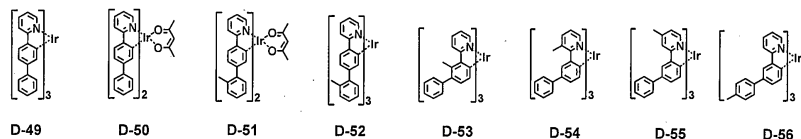
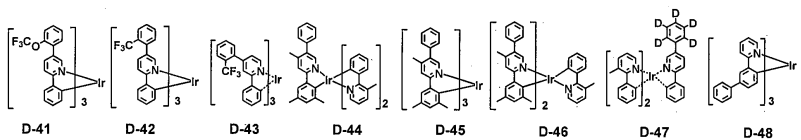
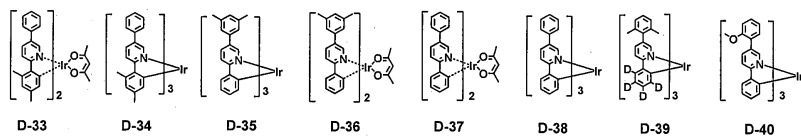
[0152]

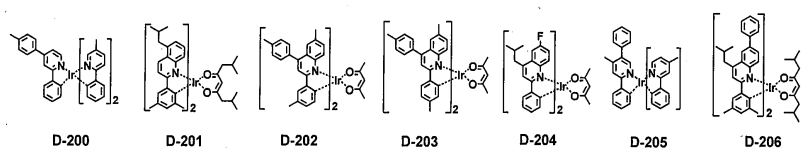
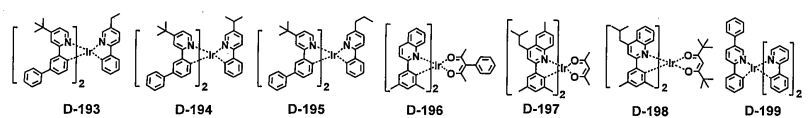
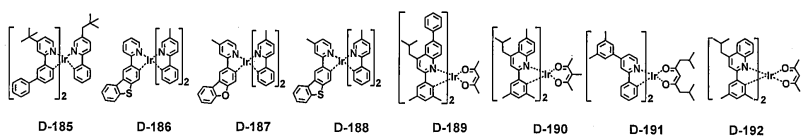
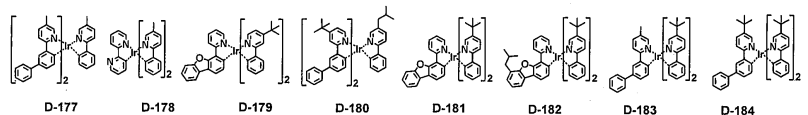
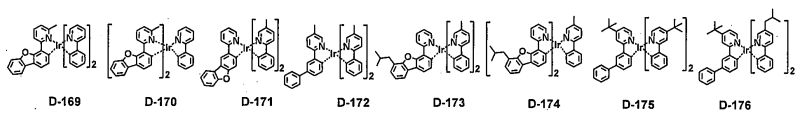
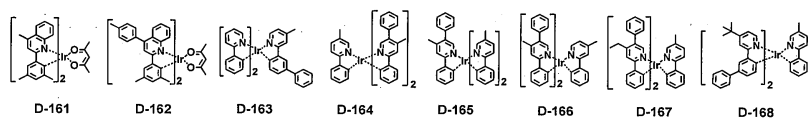
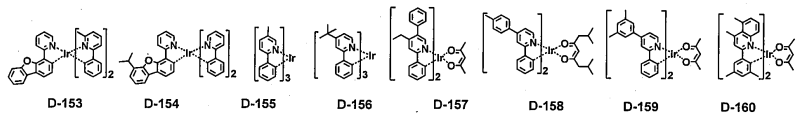
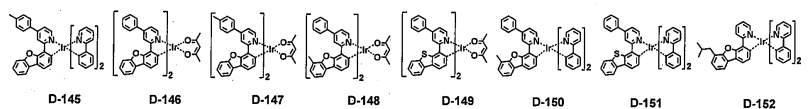
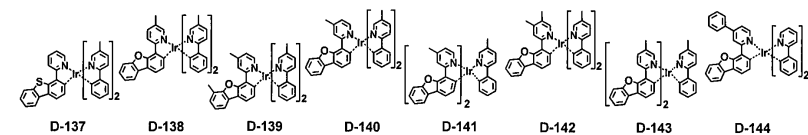
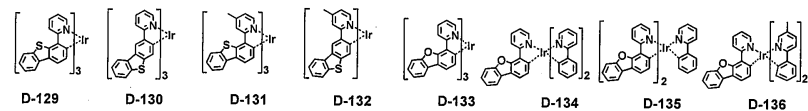
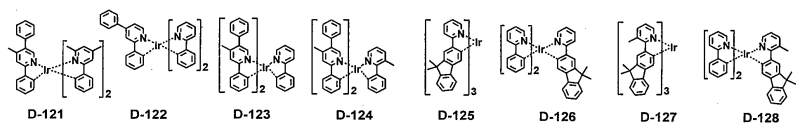


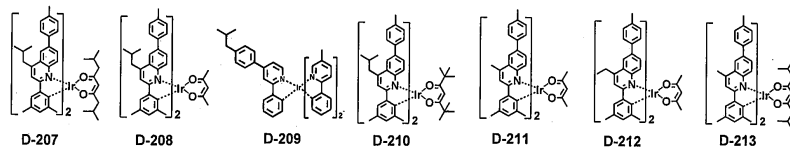
[0153]



[0154]







[0177]

[0178]

본 발명은 추가의 양태로 유기 전계 발광 소자 제조용 재료를 제공한다. 상기 재료는 본 발명의 화합물을 포함한다. 상기 재료는 유기 전계 발광 소자의 발광층 또는 전자전달층 제조용 재료일 수 있다. 본 발명의 화합물이 유기 전계 발광 소자의 발광층 제조용 재료에 포함될 경우, 본 발명의 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 본 발명의 화합물이 호스트 재료로 포함될 경우, 상기 재료는 본 발명의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물에서 선택되는 2종 이상의 화합물을 포함할 수 있거나; 또는 본 발명의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외의 다른 제2 호스트 재료 (예를 들어, 상기 화학식 6 내지 11로 표시된 화합물에서 선택된 것)를 추가로 포함할 수 있다. 상기 제1 호스트 재료와 제2 호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위, 바람직하게는 30:70 내지 70:30의 범위인 것이 구동 전압, 수명, 및 발광 효율에서 유리하다. 본 발명의 화합물이 유기 전계 발광 소자의 전자 전달층 제조용 재료에 포함될 경우, 본 발명의 화합물은 전자 전달 재료로서 포함될 수 있다. 상기 재료는 혼합물 또는 조성물의 형태일 수 있다. 상기 재료는 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0179]

본 발명은 추가의 양태로 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 가지며, 상기 유기물층은 본 발명의 상기 유기 전계 발광 소자용 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0180]

본 발명은 추가의 양태로 양극, 음극, 및 상기 양극과 상기 음극 사이의 유기물층을 포함하고; 상기 유기물층은 1층 이상의 발광층을 포함하고; 상기 발광층 중 적어도 1층이 1종 이상의 도판트 화합물 및 2종 이상의 호스트 화합물을 포함하고; 상기 2종 이상의 호스트 화합물 중 적어도 1종이 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물인 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0181]

본 발명의 일 실시예에 따르면, 상기 유기 전계 발광 소자는 상기 2종 이상의 호스트 화합물 중 제1 호스트 화합물이 상기 화학식 2 및 5로 표시되는 화합물에서 선택될 수 있다.

[0182]

본 발명의 다른 일 실시예에 따르면, 상기 유기 전계 발광 소자는 상기 2종 이상의 호스트 화합물 중 적어도 2종이 각각 독립적으로 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물에서 선택될 수 있다.

[0183]

본 발명의 다른 일 실시예에 따르면, 상기 유기 전계 발광 소자는 상기 2종 이상의 호스트 화합물 중 제1 호스트 화합물이 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이고, 제2 호스트 화합물이 상기 화학식 6 내지 11로 표시되는 화합물에서 선택될 수 있다.

[0184]

본 발명의 다른 일 실시예에 따르면, 상기 유기 전계 발광 소자는 상기 1종 이상의 도판트 화합물이 상기 화학식 12 내지 14로 표시되는 화합물에서 선택될 수 있다.

[0185]

본 발명의 유기 전계 발광 소자는 유기물층이 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하고, 이와 동시에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있다.

[0186]

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1의 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타넘 계열 금속 및 d-전이 원소의 유기 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 착체 화합물을 더 포함할 수도 있고, 나아가 상기 유기물층은 추가로 포함되는 하나 이상의 발광층 및 전하생성층을 더 포함할 수 있다.

[0187]

또한, 본 발명의 상기 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 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.

[0188]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측 표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 1층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함) 이상을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 금속의 칼코제나이드(산화물을 포함한다) 층을, 또한 발광매체층 측의 음극 표면에 할로겐화 금속층 또는 금속 산화

물층을 배치하는 것이 바람직하다. 이것에 의해 구동의 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 SiO_x ($1 \leq x \leq 2$), AlO_x ($1 \leq x \leq 1.5$), SiON 또는 SiAlON 등이 있고, 할로겐화 금속의 바람직한 예로는 LiF , MgF_2 , CaF_2 , 불화 회토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등이 있다.

[0189] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 이렇게 제조된 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 액셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도판트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 회토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진 백색 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

[0190] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막법이나 잉크 젯 프린팅(ink jet printing), 노즐 프린팅(nozzle printing), 슬롯 코팅(slot coating), 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

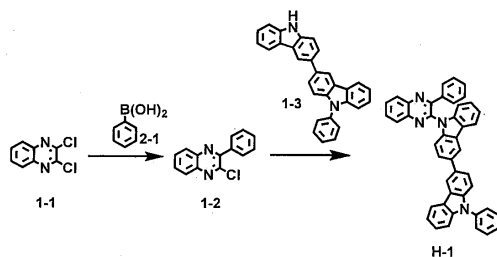
[0191] 습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로푸란, 디옥산 등의 적절한 용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 각 층의 재료가 용해 또는 분산되는 것이라면 어느 것이어도 된다.

[0192] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에서, 상기 발광층의 2종 이상의 호스트 화합물은 공증착 또는 혼합증착된 것일 수 있다. 상기 공증착이란 두가지 이상의 재료를 각각의 개별 도가니 소스에 넣고, 각각의 셀을 동시에 전류를 인가하여 재료를 증발시켜 혼합 증착하는 방식이고, 상기 혼합증착이란 증착 전 두가지 이상의 재료를 하나의 도가니 소스에 혼합한 후, 하나의 셀에 전류를 인가하여 재료를 증발시켜 혼합 증착하는 방식이다.

[0193] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 표시 장치 또는 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

[0194] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광특성을 설명한다.

[실시예 1]



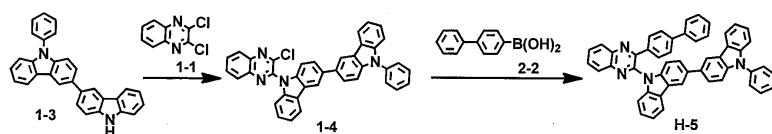
[0196] 화합물 1-2의 합성

[0197] 화합물 1-1 (20 g, 100.5 mmol), 화합물 2-1 (19 g, 150 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) [$\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$] (5.7 g, 5.0 mmol), Na_2CO_3 (31 g, 300 mmol)을 톨루엔 500 mL, 에탄올 250 mL, 정제수 250 mL에 투입 후 120°C에서 15 시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 정지하여 수층을 제거한 후, 유층은 농축하였다. 실리카겔 칼럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-2 (20 g, 83%)을 얻었다.

[0199] 화합물 H-1의 합성

[0200] 화합물 1-2 (20 g, 83 mmol), 화합물 1-3 (50 g, 99 mmol), NaH (4 g, 166 mmol)을 디메틸포름아미드(DMF)에 녹이고, 15 시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 고체를 여과하고 실리카겔 칼럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 H-1 (50 g, 82%)을 얻었다.

[실시예 2]



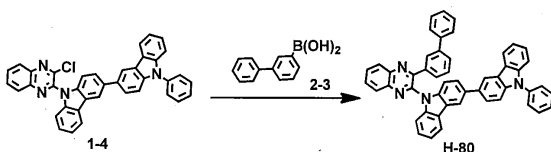
화합물 1-4의 합성

화합물 1-3 (30g, 73.44mmol)을 디메틸포름아미드 370mL에 녹인 후, 수소화나트륨 (4.4g, 110.16mmol)을 천천히 넣어준다. 30분 교반 후 화합물 1-1 (17.5g, 88.13mmol)을 넣어준 후 4시간 교반한다. 이 혼합물을 증류수 500mL에 천천히 넣어 30분 교반하여 얻어진 고체를 실리카겔 칼럼 크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 1-4 (30g, 71%)를 얻었다.

화합물 H-5의 합성

반응용기에 화합물 1-4 (10g, 17.51 mmol), 화합물 2-2 (4.2g, 21.01 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) [Pd(PPh₃)₄] (0.6g, 0.53 mmol), 탄산나트륨 (4.6g, 43.78 mmol), 톨루엔 90mL 및 에탄올 22mL을 넣고, 증류수 22mL를 첨가한 후 120℃로 4시간 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤, 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조시킨 후, 회전 증발기로 용매를 제거한 후 칼럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 H-5 (5.5g, 46%)를 얻었다.

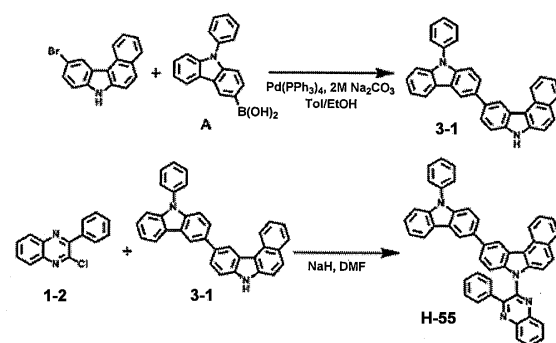
[실시예 3]



화합물 H-80의 합성

반응용기에 화합물 1-4 (10g, 17.51 mmol), 화합물 2-3 (4.2g, 21.01 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) [Pd(PPh₃)₄] (0.6g, 0.53 mmol), 탄산나트륨 (4.6g, 43.78 mmol), 톨루엔 90mL 및 에탄올 22mL을 넣고, 증류수 22mL를 첨가한 후 120℃로 4시간 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤, 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조시킨 후, 회전 증발기로 용매를 제거한 후 칼럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 H-80 (7.7g, 64%)를 얻었다.

[실시예 4]



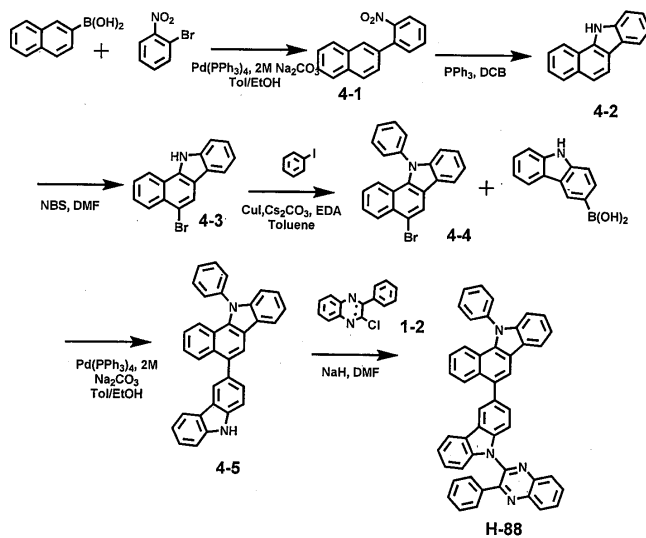
화합물 3-1의 합성

[0214] 화합물 10-브로모-7H-벤조[c]카바졸 (15.5g, 41.64 mmol), 화합물 A (13.1g, 45.80 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.4g, 2.08 mmol), 및 2M Na₂CO₃ 110mL을 톨루엔 220mL 및 에탄올 110mL 으로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **3-1** (15.4g, 수율: 81 %)을 얻었다.

[0215] **화합물 H-55의 합성**

[0216] 화합물 1-2 (6.3g, 26.17 mmol), 화합물 3-1 (10g, 21.81 mmol)을 DMF 110mL에 녹이고 NaH (0.5g, 14.54 mmol, 미네랄 오일 중 60%)을 넣었다. 12시간 상온에서 교반하고 메탄올과 증류수를 넣었다. 생성된 고체를 감압 여과하고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **H-55** (2.5g, 수율: 18%)을 얻었다.

[0217] **[실시예 5]**



[0218]

[0219] **화합물 4-1의 합성**

[0220] 플라스크에 나프탈렌-2-일 보론산 (30g, 174.35 mmol), 2-브로모니트로벤젠 (42g, 209.22 mmol), Pd(PPh₃)₄ (10g, 8.71 mmol), 및 2M Na₂CO₃ 425mL을 톨루엔 850mL 및 에탄올 425mL으로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **4-1** (40g, 수율: 93%)을 얻었다.

[0221] **화합물 4-2의 합성**

[0222] 화합물 4-1 (40g, 160.34 mmol), 및 PPh₃ (105.1g, 400.86 mmol)을 디클로로벤젠(DCB) 1000mL으로 녹인 후 150℃에서 6시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 증류한 후 메탄올로 트리추레이션(trituration)하여 화합물 **4-2** (24g, 수율: 50%)을 얻었다.

[0223] **화합물 4-3의 합성**

[0224] 화합물 1-2 (24g, 110.46 mmol)을 DMF 570mL에 녹이고 0℃에서 N-브로모숙신이미드(NBS) (17g, 99.42 mmol)을 넣었다. 5시간 교반 후 증류수를 넣고, 생성된 고체를 감압 여과하였다. 얻어진 고체를 메탄올에 넣고 교반하고 감압 여과하였다. 다시 고체를 에틸 아세테이트(EA)와 메탄올에 넣고 교반하고 감압 여과하여 화합물 **4-3** (23g, 수율: 73%)을 얻었다.

[0225] **화합물 4-4의 합성**

[0226] 화합물 4-3 (23.4g, 79.01 mmol), 요오도벤젠 (18mL, 158.02 mmol), CuI (7.5g, 39.50 mmol), 에틸렌 디아민(EDA) (2.6mL, 39.50 mmol), 및 Cs₂CO₃ (77g, 237.03 mmol)을 톨루엔 400mL으로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을

제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **4-4** (21.5g, 수율: 74%)을 얻었다.

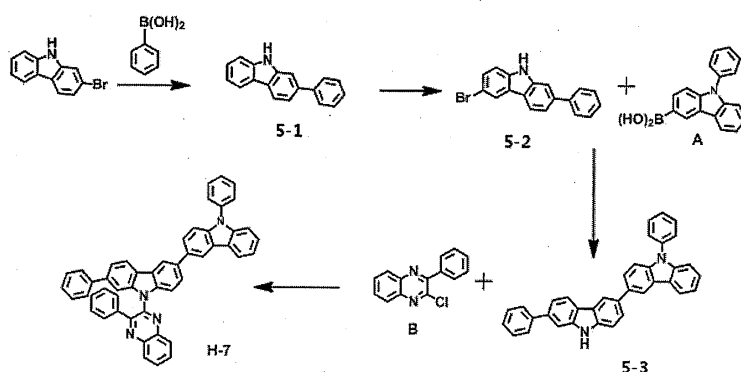
[0227] 화합물 4-5의 합성

화합물 4-4 (21.5g, 57.75 mmol), (9H-카바졸-3-일)보론산 (15g, 69.31 mmol), Pd(PPh₃)₄ (3.4g, 2.88 mmol) 및 2M Na₂CO₃ 150mL을 톨루엔 300mL 및 에탄올 150mL으로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **4-5** (4.2g, 수율: 17%)을 얻었다.

[0229] 화합물 H-88의 합성

화합물 1-2 (2.6g, 10.99 mmol), 화합물 4-5 (4.2g, 9.16 mmol), K₂CO₃(1.2g, 9.16 mmol), 4-디메틸아미노피리딘(DMAP) (0.6g, 4.58 mmol), 및 디메틸아세트아미드(DMA) 50mL를 4시간 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. 메틸렌 클로라이드로 추출하고 마그네슘 설페이트로 건조하였다. 감압 증류하고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **H-88** (1.7 g, 28 %)을 얻었다.

[실시예 6] 화합물 H-7의 제조



1) 화합물 5-1의 합성

플라스크에 2-브로모-카바졸 (30g, 121.90 mmol), 페닐보론산 (18g, 146.28 mmol), Pd(PPh₃)₄ (7g, 6.09 mmol), 및 2M Na₂CO₃ 250mL을 톨루엔 500mL 및 에탄올 250mL으로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **5-1** (15g, 수율: 52 %)을 얻었다.

2) 화합물 5-2의 합성

플라스크에 화합물 **5-1** (14.4g, 59.19 mmol)을 DMF 200mL에 녹이고 0℃에서 NBS (11 g, 59.19 mmol)을 넣었다. 12시간 교반 후 증류수를 넣고 생성된 고체를 감압 여과하였다. 얻어진 고체를 메탄올에 넣고 교반하고 감압 여과하였다. 다시 고체를 에틸 아세테이트(EA)와 메탄올에 넣고 교반하고 감압 여과하였다. 그래서 화합물 **5-2** (15.8g, 수율: 83%)을 얻었다.

3) 화합물 5-3의 합성

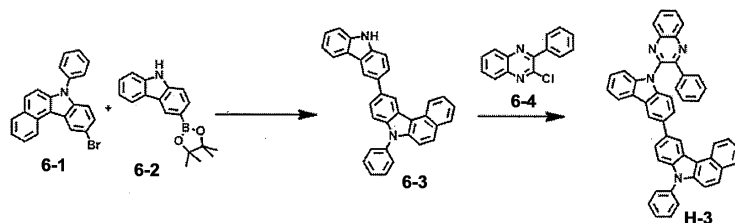
플라스크에 화합물 **5-2** (15.8g, 49.04 mmol), 화합물 **A** (15.5g, 53.94 mmol), Pd(PPh₃)₄ (3g, 2.452 mmol), 및 2M Na₂CO₃ 150mL을 톨루엔 300mL 및 에탄올 150mL로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **5-3** (4g, 수율: 17%)을 얻었다.

4) 화합물 H-7의 합성

플라스크에 화합물 **5-3** (4 g, 8.254 mmol), 화합물 **B** (2.4g, 9.905 mmol), K₂CO₃ (1.15g, 8.254 mmol), 및 DMAP (0.5g, 4.127 mmol)을 DMF 40mL으로 녹인 후 220℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세

테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **H-7** (2.8g, 수율: 50 %)을 얻었다.

[실시예 7] 화합물 H-3 의 제조



1) 화합물 6-3의 합성

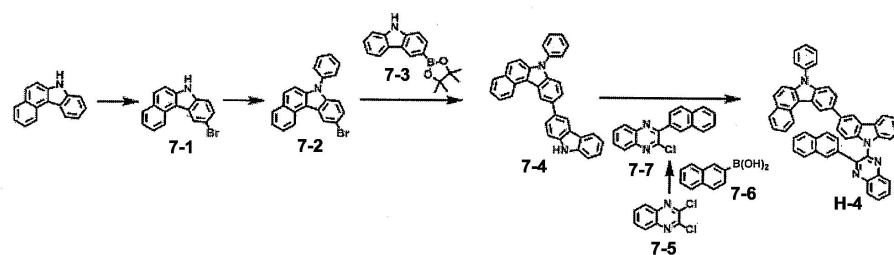
플라스크에 화합물 6-1 (25.4g, 68.22 mmol), 화합물 6-2 (20g, 68.22 mmol), $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (4g, 3.41 mmol), 및 2M K_2CO_3 100mL을 톨루엔 340mL 및 에탄올 100mL으로 녹인 후 120℃에서 3시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 6-3 (8g, 수율: 25 %)을 얻었다.

2) 화합물 H-3의 합성

플라스크에 화합물 6-3 (11 g, 23.99 mmol), 화합물 6-4 (9g, 35.98 mmol), NaH (미네랄 오일 내에서 60%) (2.8g, 71.97 mmol)을 DMF 230mL으로 녹인 후 실온에서 5시간 교반시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **H-3** (4g, 수율: 25 %)을 얻었다.

[화합물 H-3] MW 662.78; UV 296 nm; PL 517 nm; 융점(M.P.) 234℃

[실시예 8] 화합물 H-4의 제조



1) 화합물 7-1의 합성

플라스크에 7H-벤조[c]카바졸 (50g, 230.12 mmol), 및 N-브로모숙신이미드 (41g, 230.12 mmol)을 DMF 500mL로 녹인 후 상온에서 5시간 동안 교반한다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **7-1** (50g, 수율: 73%)을 얻었다.

2) 화합물 7-2의 합성

플라스크에 10-브로모-7H-벤조[c]카바졸 (화합물 7-1) (15g, 61.00 mmol), 요오도벤젠(14ml, 123.00mmol), CuI (6.0g, 30.00 mmol), EDA (4ml, 61.00 mmol), 및 K_3PO_4 (40g, 183.00 mmol)을 톨루엔 500mL으로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **7-2** (13g, 수율: 73 %)을 얻었다.

3) 화합물 7-4의 합성

화합물 10-브로모-7-페닐-7H-벤조[c]카바졸 (화합물 7-2) (10g, 34.10 mmol), 및 화합물 7-3 (10g, 40.92 mmol)을 톨루엔 100 mL, 에탄올 50 mL, 및 H₂O 50 mL에 녹이고 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 7-4 (9g, 수율: 57 %)을 얻었다

4) 화합물 7-7의 합성

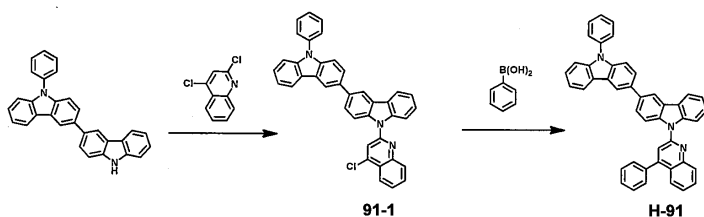
화합물 2,3-디클로로퀴놀린 (화합물 7-5) (28g, 140.67 mmol), 화합물 7-6 (24g, 140.67 mmol)을 톨루엔 100 mL, 에탄올 50 mL, H₂O 50 mL에 녹이고 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 7-7 (30g, 수율: 73 %)을 얻었다

4) 화합물 H-4의 합성

화합물 10-(9H-카바졸-3-일)-7-페닐-7H-벤조[c]카바졸 (화합물 7-4) (9.1 g, 19.80 mmol), 화합물 7-7 (9g, 29.7 mmol), K₂CO₃ (5.5 g, 39.6 mmol), DMAP (1.2 g, 9.9 mmol), 및 DMF 100 mL를 1시간 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. 메틸렌 클로라이드(MC)로 추출하고 마그네슘 설페이트로 건조하였다. 감압 증류하고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 H-4 (5 g, 수율: 35 %)을 얻었다.

	MW	UV	PL	Melting point
H-4	712.84	334nm	516nm	298.0 °C

[실시예 9] 화합물 H-91의 제조



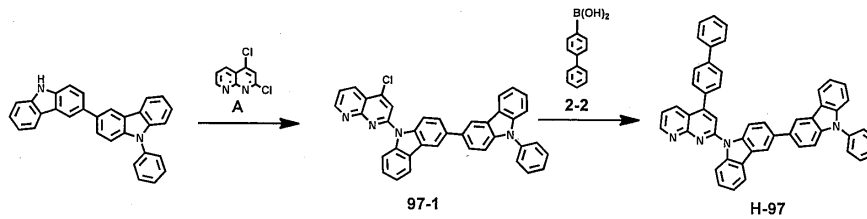
1) 화합물 91-1의 합성

플라스크에 9-페닐-9H,9'H-3,3'-비카바졸 (33.8g, 82.7mmol), 2,4-디클로로퀴놀린 (17.2g, 86.9mmol), CuI (31.5g, 165.4mmol), 및 트랜스-1,2-디아미노시클로헥산 (6mL, 49.63mmol)을 o-DCB 550mL로 녹인 후, 200℃에서 6시간 동안 환류 교반시킨다. 반응 완료 후 MC로 추출한 후 MgSO₄로 건조한다. 칼럼 크로마토그래피로 분리한 후 메탄올을 넣어 생성된 고체를 감압여과하여 화합물 91-1 (32.5g, 수율: 69%)을 얻었다.

2) 화합물 H-91의 합성

화합물 91-1 [9-(4-클로로퀴놀린-2-일)-9'-페닐-9H,9'H-3,3'-비카바졸] (32g, 56.13mmol), 페닐보론산 (13.7g, 112.3mmol), 및 Pd(PPh₃)₄ (6.5g, 5.7mmol), K₂CO₃ (19.4g, 140.33mmol)을 톨루엔 560mL, 에탄올 35mL, 및 H₂O 70mL로 녹인 후 120℃에서 12시간 동안 환류시킨다. 반응 완료 후 MC로 추출한 후 MgSO₄로 건조한다. 칼럼 크로마토그래피로 분리한 후 헥산을 넣어 생성된 고체를 감압 여과하여 화합물 H-91 (23g, 수율: 67%)을 얻었다.

[실시예 10] 화합물 H-97의 제조



1) 화합물 97-1의 합성

플라스크에 화합물 9-페닐-9H,9'H-3,3'-비카바졸 (20.5g, 50.24 mmol), 및 화합물 A (12g, 60.29 mmol)을 DMF 50mL에 녹이고, NaH (2.6g, 62.31 mmol, 미네랄 오일 중에서 60%)을 넣었다. 12시간 상온에서 교반하고 메탄올과 증류수를 넣었다. 생성된 고체를 감압 여과하고 칼럼 분리하여 화합물 97-1 (10g, 수율: 35%)을 얻었다

2) 화합물 H-97의 합성

플라스크에 화합물 97-1 (10g, 17.51 mmol), 화합물 2-2 (4.5g, 22.76 mmol), Pd₂dba₃ (0.96g, 1.05 mmol), S-phos (0.6g, 1.40 mmol), 및 K₃PO₄ (12g, 52.53 mmol)을 톨루엔 200mL으로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 H-97 (3g, 수율: 25%)을 얻었다.

[소자 실시예 1] 본 발명의 유기 전계 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 구조의 OLED 소자를 제작하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사제조)로부터 얻어진 투명 전극 ITO 박막(15Ω/□)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO기판을 장착한 후, 진공 증착 장비내의 셀에 N¹,N^{1'}-([1,1'-비페닐]-4,4'-디일)비스(N¹-(나프탈렌-1-일)-N⁴,N^{4'}-디페닐벤젠-1,4-디아민)을 넣고 챔버내의 진공도가 10⁻⁶ torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 60nm 두께의 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비내의 다른 셀에 N,N'-디(4-비페닐)-N,N'-디(4-비페닐)-4,4'-디아미노비페닐을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 정공주입층위에 20nm 두께의 정공전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비내의 한쪽 셀에 호스트로서 화합물 H-1을 넣고, 또다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-88을 넣은후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 도판트와 호스트 전체에 대하여 도판트를 4중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 정공전달층 위에 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 한쪽 셀에 2-(4-(9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센-2-일)페닐)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸을 넣고, 또다른 셀에는 리튬 퀴놀레이트를 넣은후, 두 물질을 같은 속도로 증발시켜 각각 50중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 발광층 위에 30nm의 전자전달층을 증착하였다. 이어서 전자주입층으로 리튬 퀴놀레이트를 2nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 150nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제작하였다. 재료별로 각 화합물은 10⁻⁶ torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다. 그 결과, 4.1V의 전압에서 11.1 mA/cm²의 전류가 흘렀으며, 1050 cd/m²의 적색 발광이 확인되었으며, 5000nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 90시간이었다.

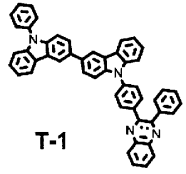
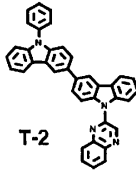
[소자 실시예 2 내지 8] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

발광 재료로서 호스트 및 도판트에 하기 [표 2]에 기재된 화합물을 사용한 것 외에는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다. 이렇게 제작된 OLED 소자의 구동 전압 (V), 전류 밀도 (mA/cm²), 휘도 (cd/m²), 발광색, 및 5000nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 최소 시간 (즉, 수명)을 측정하여 하기 [표 2]에 나타내었다.

[비교예 1 및 2] 종래에 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제작

발광 재료로서 호스트에는 하기 [표 1]의 화합물 T-1 또는 T-2를 사용하고, 도판트에는 하기 [표 2]에 나타난 화합물을 사용한 것 외에는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다. 이렇게 제작된 OLED 소자의 구동 전압 (V), 전류 밀도 (mA/cm^2), 휘도 (cd/m^2), 발광색, 및 5000nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 최소 시간 (즉, 수명)을 측정하여 하기 [표 2]에 나타내었다.

[표 1]

비교예 1의 화합물	비교예 2의 화합물
 T-1	 T-2

[표 2]

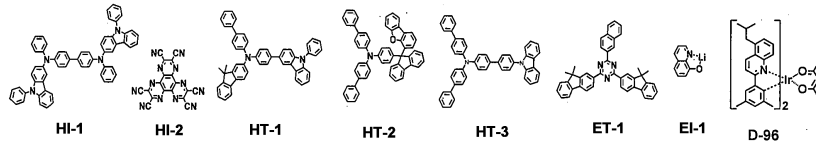
실시예 No.	호스트	도판트	전압 (V)	전류 밀도 (mA/cm^2)	휘도 (cd/m^2)	발광색	T90 수명 (시간)
실시예 1	H-1	D-88	4.1	11.1	1050	적색	90
실시예 2	H-2	D-88	4.1	11.8	1020	적색	100
실시예 3	H-3	D-87	4.0	6.4	1100	적색	120
실시예 4	H-5	D-88	4.1	12.2	1150	적색	100
실시예 5	H-80	D-87	3.9	6.7	1120	적색	80
실시예 6	H-88	D-88	3.7	12.9	1200	적색	100
실시예 7	H-55	D-87	3.8	7.1	1100	적색	120
실시예 8	H-4	D-88	4.3	11.4	1050	적색	95
비교예 1	T-1	D-87	3.5	6.8	1000	적색	20
비교예 2	T-2	D-88	4.4	11.8	1000	적색	40

상기 [표 2]에서 확인할 수 있듯이, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 우수한 구동 전압, 전류 효율 및 전력 효율을 유지하면서도, 구동 수명이 종래 기술에 비해 심지어 600%까지 현저히 탁월하게 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있었다.

[소자 실시예 9] 본 발명에 따른 호스트로서 제1 호스트 화합물 및 제2 호스트 화합물을 공증착한 OLED 소자 제조

본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사제조)로부터 얻어진 투명 전극 ITO 박막($10\Omega/\square$)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기관 홀더에 ITO기관을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 N4,N4'-디페닐-N4,N4'-비스(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민 (화합물 HI-1)을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기관 위에 80 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 1,4,5,8,9,12-헥사아자트리페닐렌-헥사카르보니트릴 (화합물 HI-2)를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층위에 5 nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 N-([1,1'-비페닐]-4-일)-9,9-디메틸-N-(4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐)-9H-플루오렌-2-아민 (화합물 HT-1)을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10 nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 N,N-디([1,1'-비페닐]-4-일)-4'-(9H-카바졸-9-일)-[1,1'-비페닐]-4-아민 (화합물 HT-3)를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 60 nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착하였다. 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀 두 군데에 호스트로서 각각 화합물 H-1 및 H2-116를 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-96을 넣은 후, 두 호스트 물질을 1:1의 같은 속도로 증발시키고 동시에 도판트 물질을 다른 속도로 증발시켜 호

스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 2,4-비스(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-6-(나프탈렌-2-일)-1,3,5-트리아진 (화합물 **ET-1**)과 리튬 퀴놀레이트 (화합물 **EI-1**)을 1:1 속도로 증발시켜 발광층 위에 30nm 두께의 전자전달층을 증착하였다. 이어서, 전자주입층으로 리튬 퀴놀레이트 (화합물 **EI-1**)을 2 nm두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다.



그 결과 5000nit의 휘도에서 발광이 80%로 떨어지는데 걸린 시간이 195시간 이상이었다.

[소자 실시예 10 내지 16] 본 발명의 복수종 호스트 재료를 이용한 OLED 소자제작

발광층을 형성하기 위한 제1 호스트 및 제2 호스트로서 하기 [표 3]에 나타난 화합물들을 사용한 것 외에는 소자 실시예 9과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다. 이렇게 제작된 OLED 소자에 대해 5000nit의 휘도에서 발광이 80%로 떨어지는데 걸린 최소 시간을 측정하여 하기 [표 3]에 나타내었다.

[비교예 3 내지 4] 호스트로서 제1 호스트 화합물만 포함하는 OLED 소자 제조

발광층의 호스트로서 하기 [표 3]에 나타난 제1호스트 화합물만을 사용한 것 외에는 소자 제조에 9과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다. 이렇게 제작된 OLED 소자에 대해 5000nit의 휘도에서 발광이 80%로 떨어지는데 걸린 최소 시간을 측정하여 하기 [표 3]에 나타내었다.

[표 3]

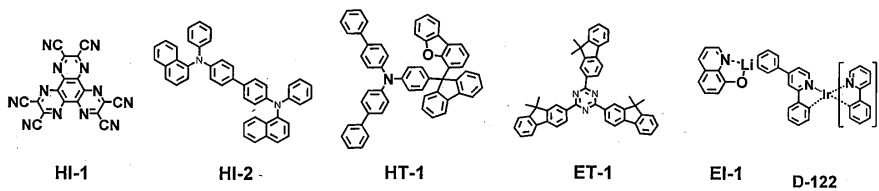
실시예 No.	호스트	도판트	T80 수명 (시간)
실시예 9	H-1 : H2-116	D-96	195
실시예 10	H-3 : H2-94	D-96	490
실시예 11	H-3 : H2-117	D-96	517
실시예 12	H-3 : H2-116	D-96	378
실시예 13	H-3 : H2-118	D-96	480
실시예 14	H-3 : H-110	D-96	1422
실시예 15	H-3 : H2-119	D-96	1080
실시예 16	H-3 : H2-120	D-96	1250
비교예 3	H-1	D-96	168
비교예 4	H-3	D-96	295

본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 단독으로 사용하여도 유기 전계 발광 소자의 구동 수명이 우수하지만, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 복수종의 호스트 재료로서 사용하였을 때 유기 전계 발광 소자의 구동 수명이 상당히 더 개선되는 장점을 보인다.

[소자 실시예 17-1 내지 17-5, 18-1 내지 18-6] 본 발명에 따른 호스트로서 제1 호스트 화합물 및 제2 호스트 화합물을 공증착한 OLED 소자 제조

본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스 (지오마텍사 제조)로부터 얻어진 투명 전극 ITO 박막(10Ω/□)을, 트리클로로에틸렌, 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 1,4,5,8,9,12-헥사아자트리페닐렌-헥사카르보니트

릴 (화합물 **HI-1**)을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 5 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)벤지딘 (화합물 **HI-2**)를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층위에 95 nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 N-([1,1'-비페닐]-4-일)-9,9-디메틸-N-(4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐)-9H-플루오렌-2-아민 (화합물 **HT-1**)을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 20 nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 정공 주입층, 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀 두 군데에 호스트로서 하기 [표 4]에 나타낸 각각의 화합물을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-122을 넣은 후, 두 호스트 물질을 1:1의 같은 속도로 증발시키고 동시에 도판트 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 함계량에 대해 도판트를 12중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 정공 전달층 위에 30 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀에 2,4,6-트리스(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-1,3,5-트리아진 (화합물 **ET-1**)을 넣은 후, 발광층 위에 35 nm 두께의 전자전달층을 증착하였다. 이어서, 전자주입층으로 리튬 퀴놀레이트 (화합물 **EI-1**)을 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제작하였다.



[비교예 5-1 내지 5-3]

발광층의 호스트로서 제1 호스트 화합물 및 제2 호스트 화합물을 하기 [표 4] 및 [표 5]에 나타낸 종래의 발광 재료만으로 구성한 것 외에는 소자 실시예 17-1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

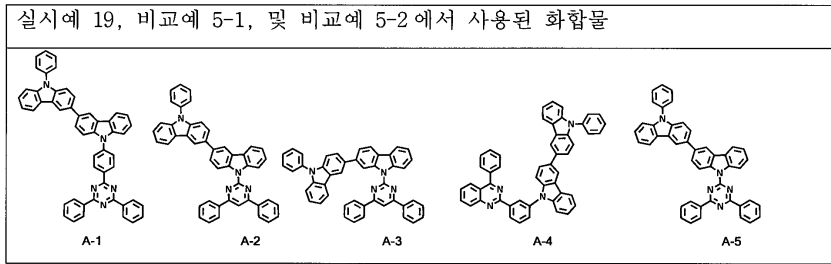
상기 소자 실시예 17-1 내지 17-5, 18-1 내지 18-6, 및 비교예 5-1 내지 5-3에서 제조된 유기 전계 발광 소자의 구동 전압, 발광 효율, CIE 색좌표와 10,000nits 휘도 기준 정전류에서 100%부터 95%까지 떨어지는데 걸리는 최소 수명 시간의 결과를 하기 [표 4]에 나타내었다.

[표 4]

실시예 No.	호스트	도판트	전압	효율	색좌표	T95 수명
			[V]	[cd/A]	(x, y)	[hr]
실시예 17-1	H-91:H2-110	D-122	3.7	74.6	0.430, 0.557	328
실시예 17-2	H-102:H2-110	D-122	4	70	0.429, 0.558	206
실시예 17-3	H-103:H2-110	D-122	3.6	-	0.429, 0.557	97
실시예 17-4	H-105:H2-110	D-122	4	74.4	0.429, 0.558	126
실시예 17-5	H-104:H2-110	D-122	3.6	-	0.429, 0.558	157
실시예 18-1	H-91:H2-31	D-122	3.7	73.6	0.426, 0.560	165
실시예 18-2	H-91:H2-111	D-122	3.6	72.2	0.419, 0.570	172
실시예 18-3	H-91:H2-112	D-122	3.5	-	0.420, 0.569	87
실시예 18-4	H-91:H2-113	D-122	3.9	-	0.428, 0.559	105
실시예 18-5	H-91:H2-115	D-122	3.8	72.9	0.428, 0.558	138
실시예 18-6	H-91:H2-114	D-122	3.9	75.1	0.425, 0.561	111
비교예 5-1	A-5: A-1	D-122	3.8	73.9	0.429, 0.558	83
비교예 5-2	A-2: A-3	D-122	3.8	70.8	0.425, 0.561	42
비교예 5-3	A-4: A-5	D-122	3.7	72.4	0.428, 0.558	66

[0303]

[표 5]



[0304]

专利名称(译)	有机电致发光化合物，以及包含其的多种主体材料和有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020150071685A	公开(公告)日	2015-06-26
申请号	KR1020140183599	申请日	2014-12-18
[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		
当前申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	LEE MI JA 이미자 MOON DOO HYEON 문두현 KANG HEE RYONG 강희룡 KANG HYUN JU 강현주 KIM CHI SIK 김치식 KIM NAM KYUN 김남균 CHO YOUNG JUN 조영준 KWON HYUCK JOO 권혁주 LEE KYUNG JOO 이경주 KIM BITNARI 김빛나리 DOH YOO JIN 도유진 LEE SU HYUN 이수현		
发明人	이미자 문두현 강희룡 강현주 김치식 김남균 조영준 권혁주 이경주 김빛나리 도유진 이수현		
IPC分类号	C09K11/06 C07D471/04 C07D209/82 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D471/04 C07D209/82 H01L51/50 Y10S428/917 C09K2211/1044 H01L51/0072 H05B33/14		
	张本勋		

代理人(译)

优先权 1020130158371 2013-12-18 KR
1020140073623 2014-06-17 KR

其他公开文献 KR101712808B1

外部链接 [Espacenet](#)

摘要(译)

有机电致发光化合物，包含其的主体材料和有机电致发光器件技术领域
通过使用本发明的有机电致发光化合物，可以制造具有显著改善的驱动
寿命和低驱动电压，优异的电流效率和功率效率的有机电致发光器件。
专利文献10-2015-0071685

