



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호

10-2016-0076884

(43) 공개일자

2016년07월01일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01)

C07D 219/02 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

(21) 출원번호

10-2014-0187482

(22) 출원일자

2014년12월23일

심사청구일자

없음

(71) 출원인

주식회사 두산

서울특별시 중구 장충단로 275 (을지로6가, 두산타워)

(72) 발명자

심재의

서울특별시 성동구 독서당로 431, 102동 205호 (응봉동, 대림2차아파트)

(74) 대리인

특허법인 정안

전체 청구항 수 : 총 15 항

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

(57) 요약

본 발명은 캐리어 수송능 및 발광능 등이 우수한 신규의 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 낮은 구동 전압과, 높은 발광 효율, 및 향상된 수명 특성 등을 갖는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

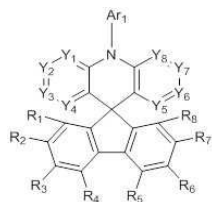
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

R₁과 R₂, R₂와 R₃ 및 R₃과 R₄ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하고;

R₅와 R₆, R₆과 R₇ 및 R₇과 R₈ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하며;

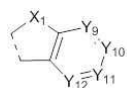
Y₁ 내지 Y₈은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₉)이며;

하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합을 형성하지 않는 R₁ 내지 R₈은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성하며;

Ar₁은 C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

상기 Ar₁ 및 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합을 형성하지 않는 R₁ 내지 R₈의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환되거나 비치환되고, 복수개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

점선은 상기 화학식 1과 축합이 이루어지는 부분이고;

X_1 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 X_1 은 각각 독립적으로 O, S, Se, $N(Ar_2)$, $C(Ar_3)(Ar_4)$ 및 $Si(Ar_5)(Ar_6)$ 으로 구성된 군에서 선택되고;

Y_9 내지 Y_{12} 는 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_9)$ 이며;

R_9 가 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 R_9 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성하며;

Ar_2 내지 Ar_6 는 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

상기 R_9 와 Ar_2 내지 Ar_6 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.

청구항 2

제1항에 있어서,

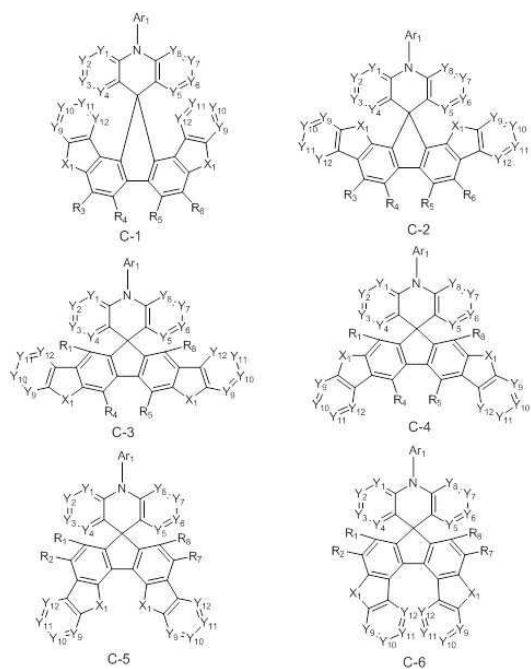
상기 X_1 이 복수 개인 경우, 복수 개의 X_1 중 적어도 하나는 $N(Ar_2)$ 이며,

Y_1 내지 Y_{12} 중 적어도 하나는 N이거나, Y_1 내지 Y_{12} 모두가 $C(R_9)$ 인 것을 특징으로 하는, 화합물.

청구항 3

1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 C-1 내지 화학식 C-6 중 어느 하나로 표시되는 화합물:



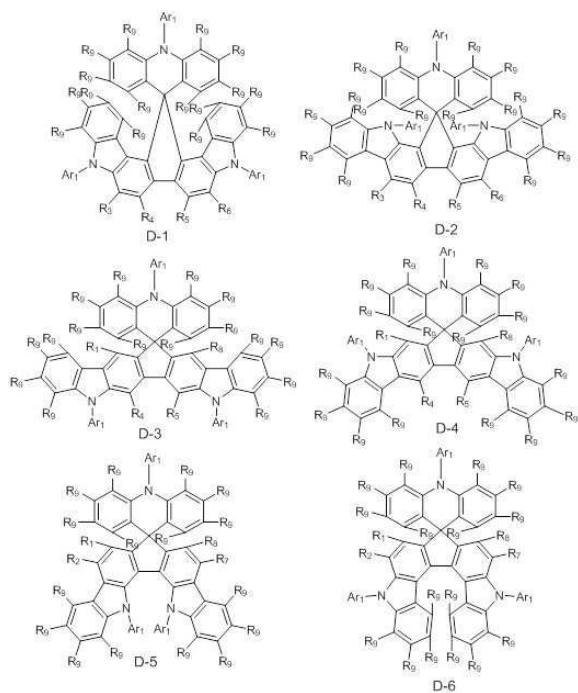
상기 화학식 C-1 내지 화학식 C-6 에 있어서,

X_1 , Ar_1 , Y_1 내지 Y_{12} 및 R_1 내지 R_8 은 제1항에서 정의된 바와 같다.

청구항 4

1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 D-1 내지 화학식 D-6 중 어느 하나로 표시되는 화합물:



상기 화학식 D-1 내지 화학식 D-6 에 있어서,

Ar_1 및 R_1 내지 R_9 는 제1항에서 정의된 바와 같다.

청구항 5

1항에 있어서,

상기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합을 형성하지 않는 R_1 내지 R_8 와, R_9 및 Ar_1 내지 Ar_6 중 적어도 하나는 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며,

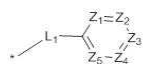
상기 R_1 내지 R_8 와 R_9 및 Ar_1 내지 Ar_6 의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴아민기는 각각 독립적으로, 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이한 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 6

1항에 있어서,

상기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합을 형성하지 않는 R_1 내지 R_8 와 R_9 및 Ar_1 내지 Ar_6 중 적어도 하나는 페닐기 또는 하기 화학식 3으로 표시되는 치환기인 특징으로 하는 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

*는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

L_1 은 단일결합, $C_6\sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며;

Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_{11})$ 이되, 상기 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고;

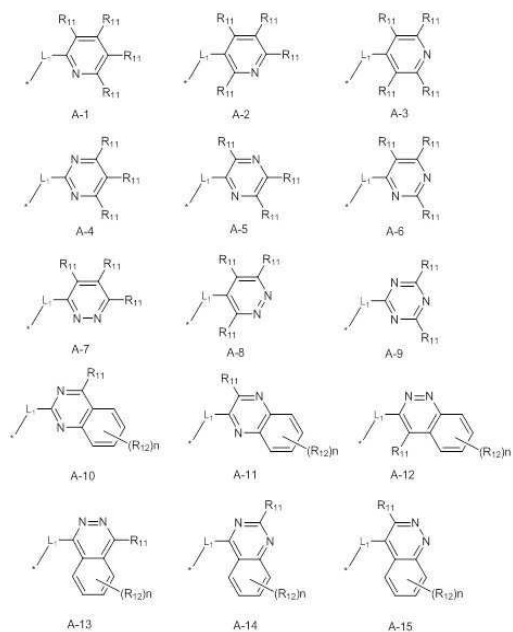
R_{11} 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 R_{11} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성하며;

상기 R_{11} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.

청구항 7

제6항에 있어서,

상기 화학식 3으로 표시되는 치환기는 하기 화학식 A-1 내지 화학식 A-15 중 어느 하나로 표시되는 치환기인 것을 특징으로 하는 화합물:



상기 A-1 내지 A-15에서,

*는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

n은 0 내지 4의 정수로서, 상기 n이 0인 경우, 수소가 치환기 R₁₂로 치환되지 않는 것을 의미하고, 상기 n이 1 내지 4의 정수인 경우, R₁₂는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성하며;

상기 R₁₂의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하;

L₁ 및 R₁₁은 각각 제6항에서 정의된 바와 같다.

청구항 8

제6항에 있어서,

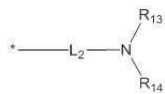
상기 L₁은 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기 및 카바졸릴기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 9

1항에 있어서,

상기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합을 형성하지 않는 R_1 내지 R_8 와, R_9 및 Ar_1 내지 Ar_6 중 적어도 하나는 하기 화학식 4로 표시되는 치환기인 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 4]



상기 화학식 4에서,

*는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

L_2 은 단일결합, $C_6 \sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고;

R_{13} 및 R_{14} 는 각각 독립적으로 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 상기 R_{13} 및 R_{14} 가 서로 결합하여 축합 고리를 형성하며;

상기 R_{13} 및 R_{14} 의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.

청구항 10

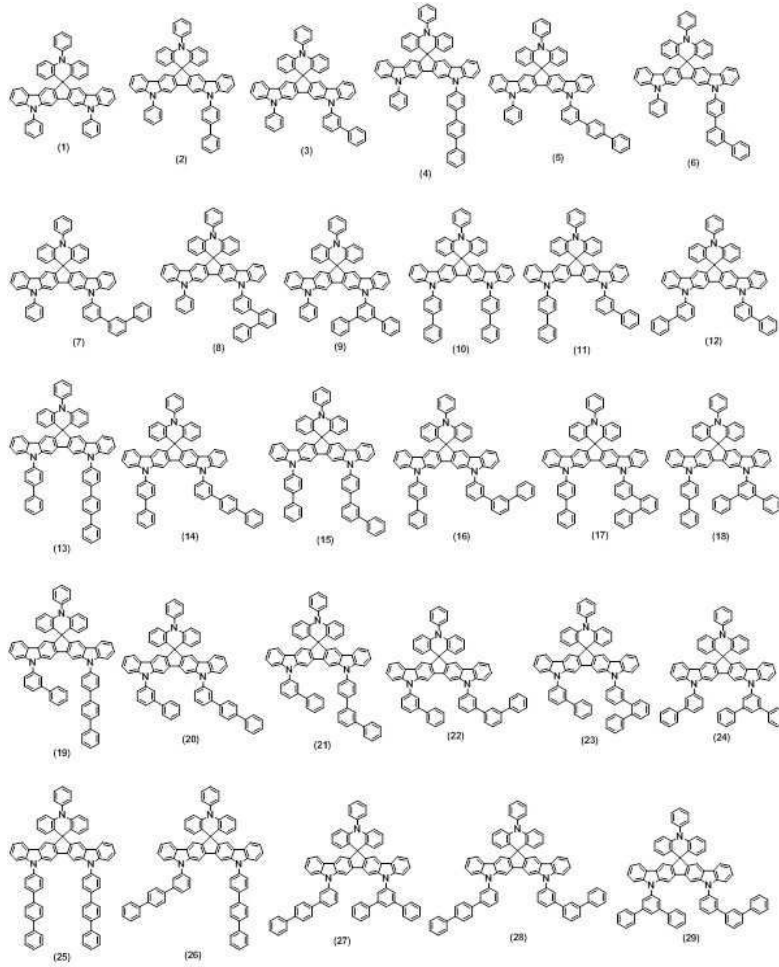
제9항에 있어서,

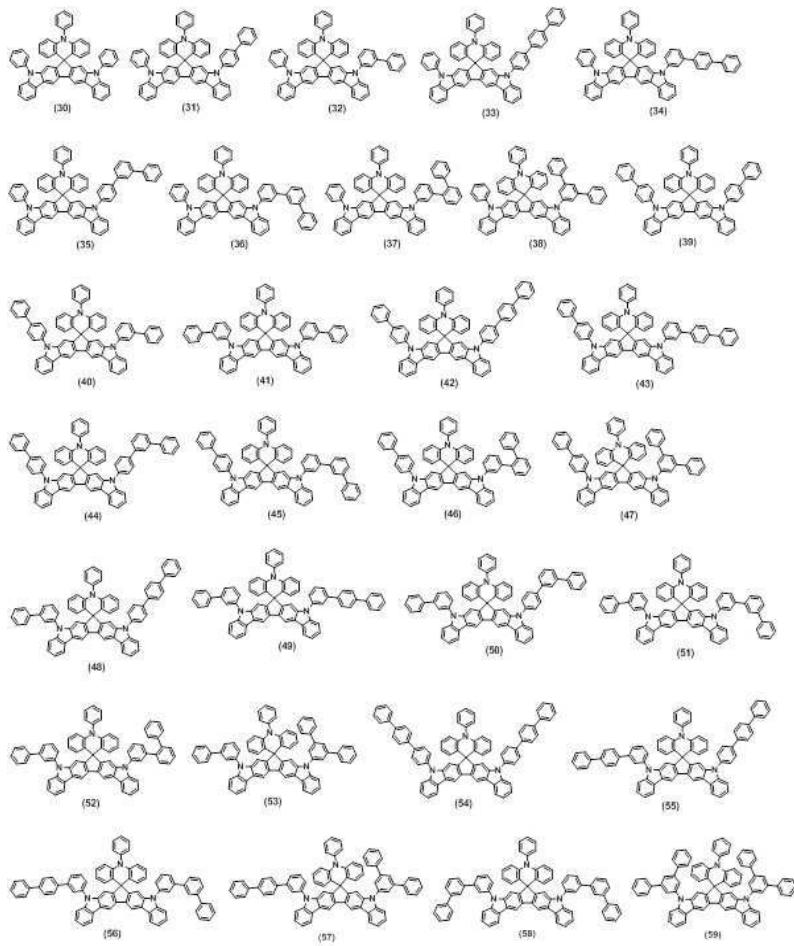
상기 L_2 는 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기 및 카바졸릴기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

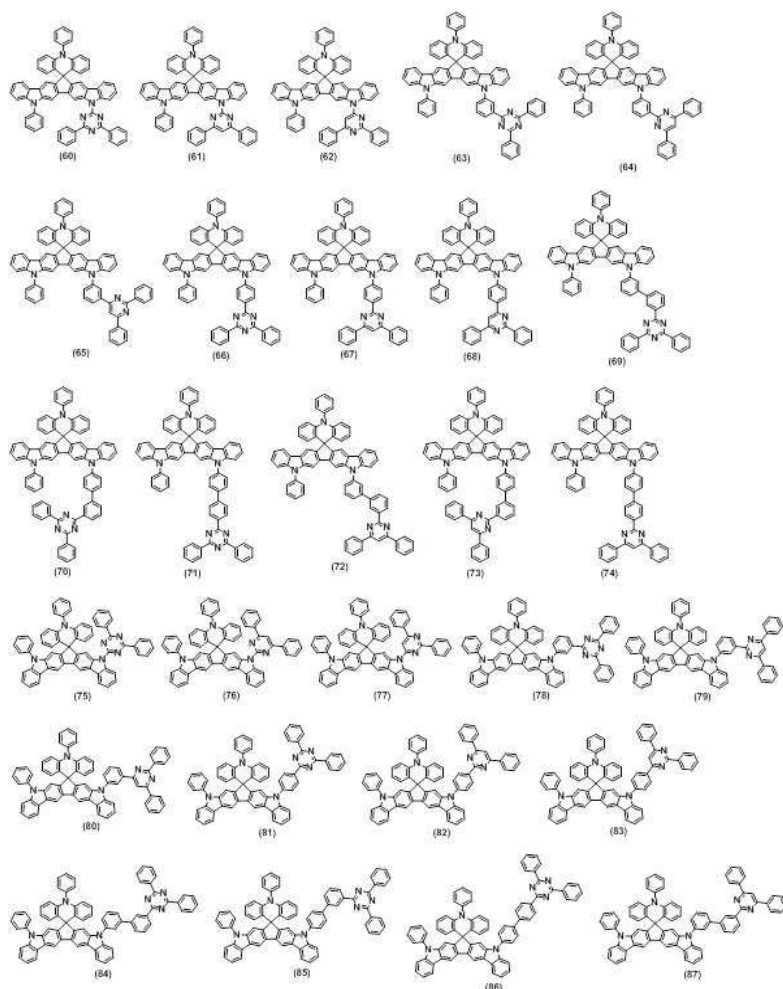
청구항 11

제1항에 있어서,

상기 화합물은 아래의 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:







청구항 12

(i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서,

상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항 내지 11항 중 어느 한 항에 기재된 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 13

제12항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 발광 보조층, 정공 수송층, 정공 주입층, 전자 수송층 및 전자 주입층으로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 14

제13항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 15

제14항에 있어서,

상기 화합물은 발광층의 인광 호스트로 사용되는 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 캐리어 수송능 및 발광능 등이 우수한 신규한 아크리딘계 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함하여 낮은 구동 전압과, 향상된 발광 효율 및 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

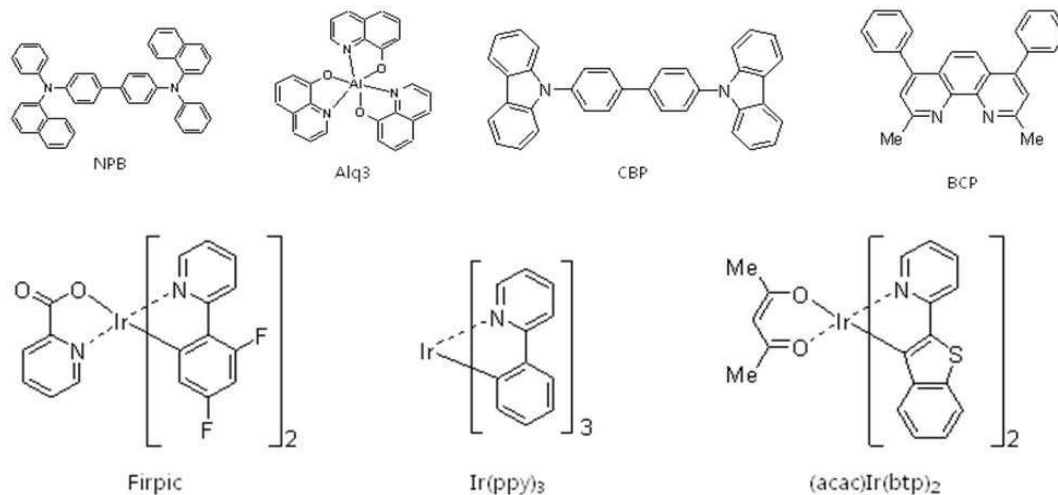
배경 기술

[0002] 1950년대 베르나소스(Bernanose)의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광 (electroluminescent, EL) 소자(이하, 간단히 '유기 EL 소자'라 칭함)에 대한 연구는 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층 구조의 유기 EL 소자가 제시되었다. 이후 고효율, 고수명의 유기 EL 소자를 만들기 위하여, 소자 내 각각의 특징적인 유기물 층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.

[0003] 유기 EL 소자는 두 전극 사이에 전압을 걸어 주면 양극에서는 정공이 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이때 유기물 층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.

[0004] 유기 EL 소자의 발광층 형성 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료로 구분될 수 있다. 그 밖에, 보다 나은 천연색을 구현하기 위한 발광 재료로 노란색 및 주황색 발광 재료도 사용된다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 재료로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다. 도펀트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도펀트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도펀트로 나눌 수 있다. 이러한 인광 재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 4배까지의 발광 효율을 향상시킬 수 있어 인광 도펀트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대해 관심이 집중되고 있다.

[0005] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층으로는, 하기 화학식으로 표현된 NPB, BCP, Alq₃ 등이 널리 알려져 있고, 발광 재료는 안트라센 유도체들이 형광 도펀트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히 발광 재료 중 효율 향상 측면에서 큰 장점을 가지고 있는 인광 재료로서는 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 청색, 녹색, 적색 도펀트 재료로 사용되고 있다. 현재까지는 4,4-디카바졸릴비페닐(4,4-dicarbazolybiphenyl, CBP)가 인광 호스트 재료로 우수한 특성을 나타내고 있다.



[0007] 그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 매우 좋지 않아 유기 EL 소자에서의 수명 측면에서 만족할 만한 수준이 되지 못하고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0009] 본 발명은 유기 전계 발광 소자에 적용할 수 있으며, 캐리어 수송능 및 발광능 등이 모두 우수한 신규 유기 화

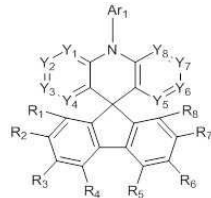
합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[0010] 또한 본 발명은 상기한 신규 유기 화합물을 포함하여 낮은 구동 전압과 높은 발광 효율을 나타내며 수명이 향상되는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 또 다른 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0011] 상기 목적을 달성하기 위하여, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0012] [화학식 1]



[0013]

[0014] 상기 화학식 1에서,

[0015] R₁과 R₂, R₂와 R₃ 및 R₃과 R₄ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하고;

[0016] R₅와 R₆, R₆과 R₇ 및 R₇과 R₈ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하며;

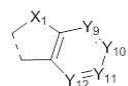
[0017] Y₁ 내지 Y₈은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₉)이며;

[0018] 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합을 형성하지 않는 R₁ 내지 R₈은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성하며;

[0019] Ar₁은 C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

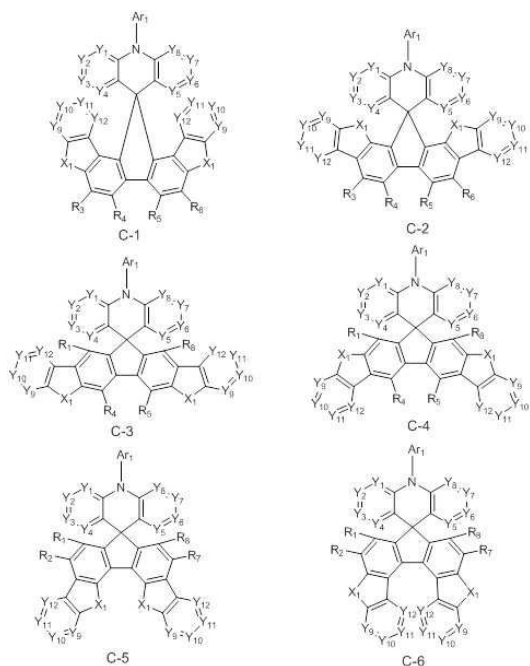
[0020] 상기 Ar₁ 및 R₁ 내지 R₈의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[0021] [화학식 2]



[0022]

- [0023] 상기 화학식 2에서,
- [0024] 점선은 상기 화학식 1과 축합이 이루어지는 부분이고;
- [0025] X_1 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 X_1 은 각각 독립적으로 O, S, Se, $N(Ar_2)$, $C(Ar_3)(Ar_4)$ 및 $Si(Ar_5)(Ar_6)$ 으로 구성된 군에서 선택되고;
- [0026] Y_9 내지 Y_{12} 는 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_9)$ 이며;
- [0027] R_9 가 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 R_9 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성하며;
- [0028] Ar_2 내지 Ar_6 는 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;
- [0029] 상기 R_9 와 Ar_2 내지 Ar_6 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.
- [0030] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, 상기 X_1 이 복수 개인 경우, 복수 개의 X_1 중 적어도 하나는 $N(Ar_2)$ 이며, 보다 바람직하게는 복수 개의 X_1 모두가 $N(Ar_2)$ 이고;
- [0031] Y_1 내지 Y_{12} 중 적어도 하나는 N이거나, 상기 Y_1 내지 Y_{12} 모두가 $C(R_9)$ 일 수 있다.
- [0032] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 C-1 내지 화학식 C-6 중 어느 하나로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 한다.



[0033]

[0034]

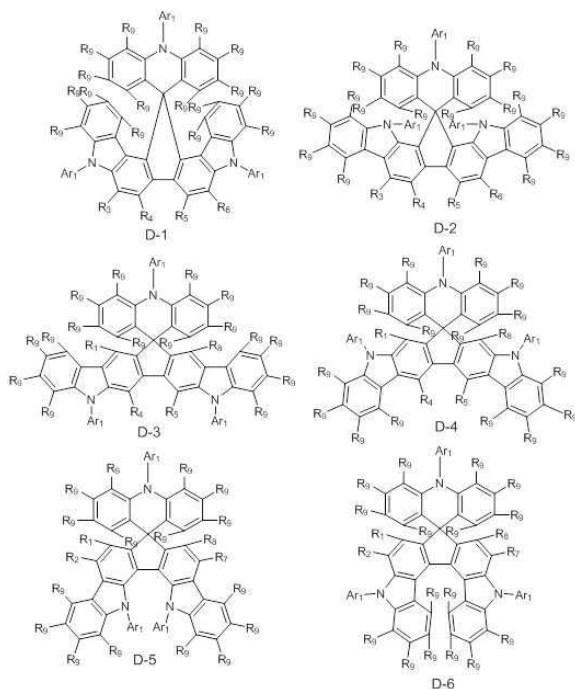
상기 화학식 C-1 내지 화학식 C-6 에 있어서,

[0035]

X₁, Ar₁, Y₁ 내지 Y₁₂ 및 R₁ 내지 R₈은 각각 상기 화학식 1 및 화학식 2에서 정의된 바와 같다.

[0036]

본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 D-1 내지 화학식 D-6 중 어느 하나로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 한다.



[0037]

[0038]

상기 화학식 D-1 내지 화학식 D-6 에 있어서,

[0039]

Ar₁ 및 R₁ 내지 R₉는 각각 상기 화학식 1 및 화학식 2에서 정의된 바와 같다.

[0040]

본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1에서 화학식 2로 표시되는 고리와 축합을 형성하지 않는 R₁ 내지 R₈와, R₉ 및 Ar₁ 내지 Ar₆ 중 적어도 하나는 C₁~C₄₀의 알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하며,

[0041] 상기 R_1 내지 R_8 와 R_9 및 Ar_1 내지 Ar_6 의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴아민기는 각각 독립적으로, 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환될 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0042] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1에서 화학식 2로 표시되는 고리와 축합을 형성하지 않는 R_1 내지 R_8 와, R_9 및 Ar_1 내지 Ar_6 중 적어도 하나는 페닐기 또는 하기 화학식 3으로 표시되는 치환기인 것을 특징으로 한다.

[0043] [화학식 3]



[0045] 상기 화학식 3에서,

[0046] *는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

[0047] L_1 은 단일결합, $C_6\sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게는 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기 및 카바졸렌기로 이루어진 군에서 선택되며;

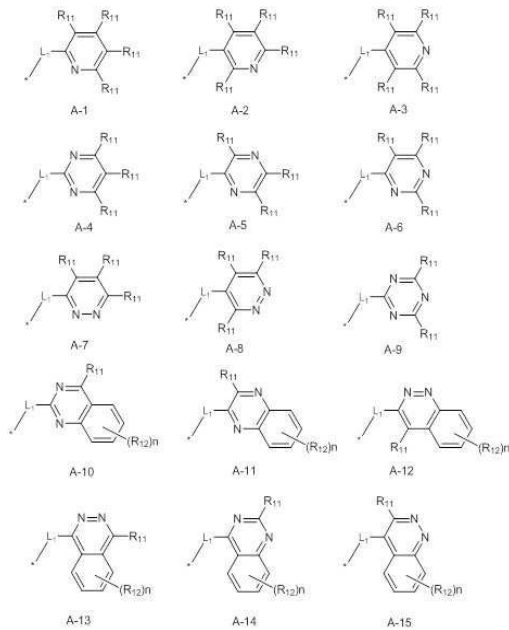
[0048] Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_{11})$ 이되, 상기 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고;

[0049] 상기 R_{11} 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 R_{11} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알킬닐기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

[0050] 상기 R_{11} 의 알킬기, 알케닐기, 알킬닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알킬닐기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0051] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면,

[0052] 상기 화학식 3으로 표시되는 치환기는 하기 화학식 A-1 내지 화학식 A-15 중 어느 하나로 표시되는 치환기인 것을 특징으로 한다.



[0053]

[0054]

[0055]

[0056]

상기 화학식 A-1 내지 화학식 A-15에서,

*는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

n은 0 내지 4의 정수로서, 상기 n이 0인 경우, 수소가 치환기 R₁₂로 치환되지 않는 것을 의미하고, 상기 n이 1 내지 4의 정수인 경우, R₁₂는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성하며;

[0057]

상기 R₁₂의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하;

[0058]

L₁ 및 R₁₁은 각각 상기 화학식 3에서 정의된 바와 같다.

[0059]

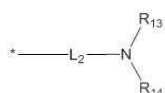
본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면,

[0060]

상기 화학식 1에서 화학식 2로 표시되는 고리와 축합을 형성하지 않는 R₁ 내지 R₈와 R₉ 및 Ar₁ 내지 Ar₆ 중 적어도 하나는 하기 화학식 4로 표시되는 치환기인 것을 특징으로 한다.

[0061]

[화학식 4]



[0062]

- [0063] 상기 화학식 4에서,
- [0064] *는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;
- [0065] L_2 은 단일결합, $C_6\sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게는 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기 및 카바졸릴기로 이루어진 군에서 선택되며;
- [0066] R_{13} 및 R_{14} 는 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 상기 R_{13} 및 R_{14} 가 서로 결합하여 축합 고리를 형성하며;
- [0067] 상기 R_{13} 및 R_{14} 의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0068] 또한, 본 발명은 (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물 층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [0069] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층, 정공 수송층, 정공 주입층, 발광 보조층 및 수명개선층으로 이루어진 군에서 선택될 수 있으며, 바람직하게는 발광층, 전자 주입층, 발광 보조층 및 수명 개선층으로 이루어진 군에서 선택될 수 있고, 보다 바람직하게는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 발광층의 인광 호스트로 사용될 수 있다.
- [0070] 본 발명에서 "알킬"은 탄소수 1 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0071] 본 발명에서 "알케닐(alkenyl)"은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0072] 본 발명에서 "알키닐(alkynyl)"은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0073] 본 발명에서 "아릴"은 단독 고리 또는 2이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 60개의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0074] 본 발명에서 "헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 40개의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리, 페녹사티에닐(phenoxathienyl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinoly), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazoly)과 같은 폴리아사이클릭 고리 및 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0075] 본 발명에서 "아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 5 내지 60개의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0076] 본 발명에서 "알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'은 탄소수 1 내지 40개의 알킬을 의미하며, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함할 수 있다. 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡

시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0077] 본 발명에서 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 60개의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.

[0078] 본 발명에서 "사이클로알킬"은 탄소수 3 내지 40개의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0079] 본 발명에서 "헤테로사이클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40개의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이러한 헤테로사이클로알킬의 예로는 모르폴린, 피페라진 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0080] 본 발명에서 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40개의 알킬로 치환된 실릴이고, "아릴실릴"은 탄소수 6 내지 60개의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.

[0081] 본 발명에서 "축합고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

발명의 효과

[0082] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성, 캐리어 수송능 및 발광 특성이 우수하기 때문에 유기 전계 발광 소자의 유기물층의 재료로 사용될 수 있다.

[0083] 특히, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 인광 호스트 재료로 사용할 경우, 종래의 호스트 재료에 비해 낮은 구동 전압과, 우수한 발광 성능, 높은 효율 및 장수명을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가 성능 및 수명이 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

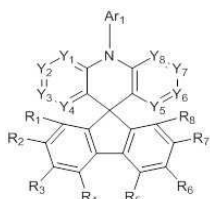
[0084] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.

[0085] 1. 신규 유기 화합물

[0086] 본 발명은 스피로아크리딘플루오렌(10H-spiro[acridine-9,9'-fluorene]) 모이어티(moiety)에 벤젠이 축합된 5원 헤테로방향족환 모이어티, 인덴 모이어티(indene moiety), 또는 인돌 모이어티(indole moiety)가 축합되어 기본 골격을 이루는 아크리딘계 화합물을 제공한다.

[0087] 구체적으로 본 발명에서 제공하는 신규 유기 화합물은 하기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다.

[0088] [화학식 1]



[0089]

[0090] 상기 화학식 1에서,

[0091] R₁과 R₂, R₂와 R₃ 및 R₃과 R₄ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하고;

[0092] R₅와 R₆, R₆과 R₇ 및 R₇과 R₈ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하며;

[0093] Y₁ 내지 Y₈은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₉)이며;

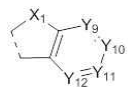
[0094] 하기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합을 형성하지 않는 R₁ 내지 R₈은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적

으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

[0095] Ar_1 은 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

[0096] 상기 Ar_1 와, 하기 화학식 2 로 표시되는 고리와 축합을 형성하지 않는 R_1 내지 R_8 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[0097] [화학식 2]



[0098]

[0099] 상기 화학식 2에서,

[0100] 점선은 상기 화학식 1과 축합이 이루어지는 부분이고;

[0101] X_1 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 X_1 은 각각 독립적으로 O, S, Se, $N(Ar_2)$, $C(Ar_3)(Ar_4)$ 및 $Si(Ar_5)(Ar_6)$ 으로 구성된 군에서 선택되고;

[0102] Y_9 내지 Y_{12} 는 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_9)$ 이며;

[0103] R_9 은 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 R_9 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

[0104] Ar_2 내지 Ar_6 는 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

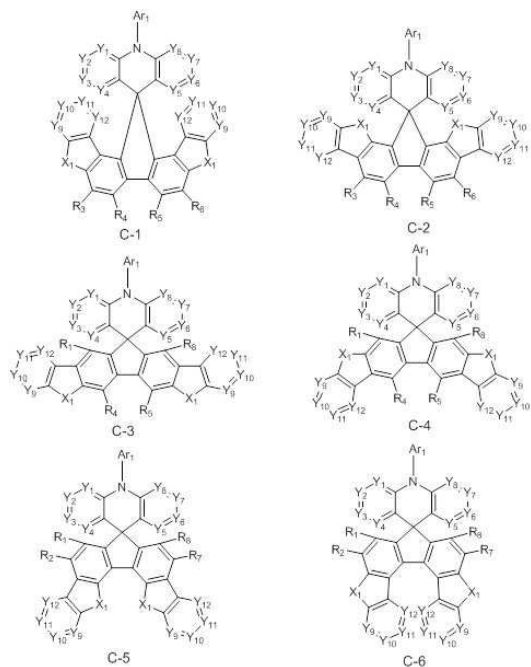
[0105] 상기 R_9 와 Ar_2 내지 Ar_6 의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴

아민기는 각각 독립적으로, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

- [0106] 본 발명에서 제공하는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 종래 유기 EL 소자용 재료[예: 4,4-dicarbazolybiphenyl (이하, 'CBP'라 함)]보다 높은 분자량을 갖기 때문에, 유리전이온도가 높아 열적 안정성이 우수할 뿐만 아니라, 캐리어 수송능 및 발광능 등이 우수하다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자가 포함할 경우, 소자의 구동 전압을 낮추고, 발광 성능 및 효율은 높이며, 수명을 연장시킬 수 있다.
- [0107] 일반적으로 유기 전계 발광 소자의 인광 발광층에서, 호스트 물질은 이의 삼중항 에너지 갭이 도펀트의 삼중항 에너지 갭보다 높아야 한다. 즉, 호스트의 가장 낮은 여기 상태가 도펀트의 가장 낮은 방출 상태보다 에너지가 더 높은 경우, 인광 발광 효율이 향상될 수 있다.
- [0108] 한편, 본 발명에서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 삼중항 에너지가 높고, 넓은 일중항 에너지 준위와 높은 삼중항 에너지 준위를 가지는 인돌 유도체가 축합되어 있는 기본 골격에 특정의 치환기가 도입됨으로써, 에너지 준위가 도펀트보다 높게 조절될 수 있어 호스트 물질로 사용될 수 있다.
- [0109] 또한, 본 발명의 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기한 바와 같이 높은 삼중항 에너지를 갖기 때문에, 발광층에서 생성된 엑시톤이 발광층에 인접하는 전자 수송층 또는 정공 수송층으로 확산되는 것을 방지할 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 이용하여 정공 수송층과 발광층 사이에 유기물층(이하, '발광 보조층'이라 함)을 형성할 경우, 상기 화합물에 의해서 엑시톤의 확산이 방지되기 때문에, 상기 제1 엑시톤 확산 방지층을 포함하지 않은 종래의 유기 전계 발광 소자와 달리, 실질적으로 발광층 내에서 발광에 기여하는 엑시톤의 수가 증가되어 소자의 발광 효율이 개선될 수 있다.
- [0110] 또한, 상기 화학식 1의 화합물을 이용하여 발광층과 전자 수송층 사이에 유기물층(이하, '수명 개선층'이라 함)을 형성할 경우에도, 상기 화학식 1의 화합물에 의해 엑시톤의 확산이 방지됨으로써, 유기 전계 발광 소자의 내구성 및 안정성이 향상될 수 있고, 이로 인해 소자의 반감 수명이 효율적으로 증가될 수 있다. 따라서, 본 발명에서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 호스트 이외, 발광 보조층 재료 또는 수명 개선층 재료로 사용될 수 있다.
- [0111] 또한, 본 발명에서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 기본 골격에 도입되는 치환기의 종류에 따라 HOMO 및 LUMO 에너지 레벨을 조절할 수 있어, 넓은 밴드갭을 가질 수 있고, 높은 캐리어 수송성을 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 화합물은 상기한 바와 같은 기본 골격에 질소-함유 헤테로환(예컨대, 피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기등)과 같이 전자 흡수성이 큰 전자 끌개기(EWG)가 결합될 경우, 분자 전체가 양극성(bipolar)의 특성을 갖기 때문에, 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다. 이와 같이, 상기 기본 골격에 EWG가 도입된 본 발명의 상기 화학식 1의 화합물은 우수한 캐리어 수송성 및 발광 특성이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료 이외, 전자주입/수송층 재료, 또는 수명 개선층 재료로도 사용될 수 있다.
- [0112] 한편, 본 발명의 상기 화학식 1의 화합물이 상기 기본 골격에 아릴아민기, 카바졸기, 터페닐기, 트리페닐렌기 등과 같이 전자 공여성이 큰 전자 주개기(EDG)가 결합될 경우, 정공의 주입 및 수송이 원활하게 이루어지기 때문에, 발광층 재료 이외, 정공주입/수송층 또는 발광 보조층 재료로도 유용하게 사용될 수 있다.
- [0113] 이와 같이, 본 발명에서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광 특성을 향상시킴과 동시에, 정공 주입/수송 능력, 전자 주입/수송 능력, 발광 효율, 구동 전압, 수명 특성 등을 향상시킬 수 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 바람직하게는 발광층 재료(청색, 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트 재료), 전자 수송/주입층 재료, 정공 수송/주입층 재료, 발광보조층 재료 및 수명개선층 재료, 더 바람직하게는 발광층 재료, 전자 주입층 재료, 발광보조층 재료 및 수명 개선층 재료로 사용될 수 있다.
- [0114] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 다양한 치환기, 특히 아릴기 및/또는 헤테로아릴기가 도입되어 화합물의 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리전이온도를 보다 향상시킬 수 있고, 이로 인해 종래의 발광 재료(예를 들어, CBP)보다 높은 열적 안정성을 가질 수 있다. 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유

기물층의 결정화 억제에도 효과가 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 성능 및 수명 특성이 크게 향상될 수 있고, 이러한 유기 전계 발광 소자가 적용된 풀 칼라 유기 발광 패널도 성능이 극대화될 수 있다.

[0115] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 구체적으로 하기 화학식 C-1 내지 화학식 C-6 중 어느 하나로 나타낼 수 있다.



[0116]

상기 화학식 C-1 내지 화학식 C-6 에 있어서,

[0117]

X_1 , Ar_1 , Y_1 내지 Y_{12} 및 R_1 내지 R_8 은 상기 화학식 1 및 화학식 2에서 정의된 바와 같다.

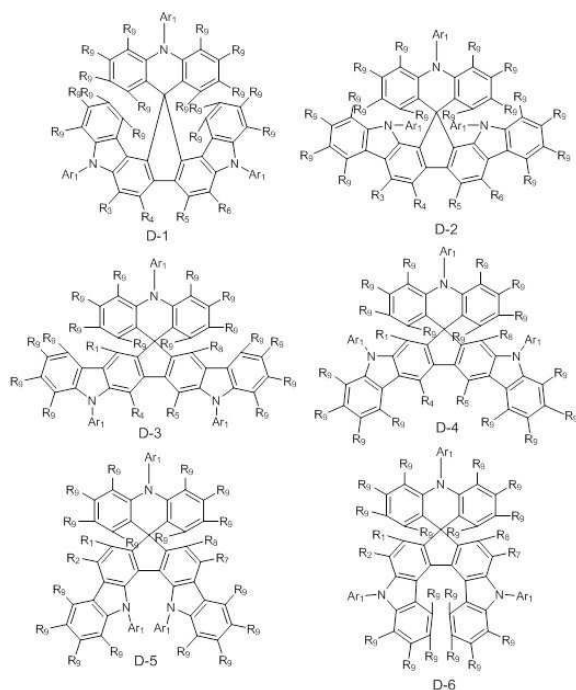
[0118]

다만, 상기 X_1 은 각각 독립적으로 O, S, Se, $N(Ar_2)$, $C(Ar_3)(Ar_4)$ 및 $Si(Ar_5)(Ar_6)$ 으로 구성된 군에서 선택되나, 바람직하게는 복수 개의 X_1 중 적어도 하나는 $N(Ar_2)$ 이고, 보다 바람직하게는 복수 개의 X_1 모두 $N(Ar_2)$ 일 수 있으며, 이때, 상기 Y_1 내지 Y_{12} 는 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_9)$ 이나, 바람직하게는 Y_1 내지 Y_{12} 중 하나는 N이거나, 모두가 $C(R_9)$ 일 수 있다.

[0119]

또한, 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 구체적으로 하기 화학식 D-1 내지 화학식 D-6 중 어느 하나로 나타낼 수 있다.

[0120]



[0121]

[0122]

상기 화학식 D-1 내지 화학식 D-6 에 있어서,

[0123]

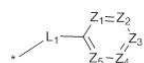
Ar₁ 및 R₁ 내지 R₉는 상기 화학식 1 및 화학식 2에서 정의된 바와 같다.

[0124]

또한, 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, 화학식 2로 표시되는 고리와 축합을 형성하지 않는 R₁ 내지 R₈와 R₉ 및 Ar₁ 내지 Ar₆ 중 적어도 하나는 페닐기 또는 하기 화학식 3으로 표시되는 치환기일 수 있다.

[0125]

[화학식 3]



[0126]

상기 화학식 3에서,

[0127]

*는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

[0128]

L₁은 단일결합, C₆~C₁₈의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게는 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기 및 카바졸렌기로 이루어진 군에서 선택되며;

[0129]

Z₁ 내지 Z₅는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 C(R₁₁)이되, 상기 Z₁ 내지 Z₅중 적어도 하나는 N이며;

[0130]

R₁₁이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기(예컨대, L, 인접하는 다른 R₁₁)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

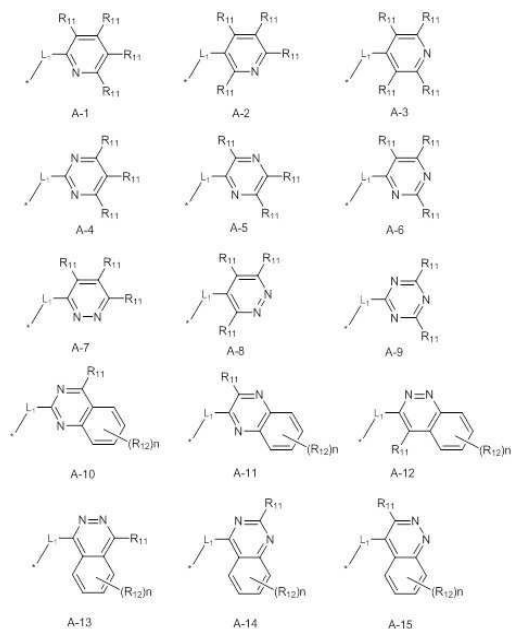
[0131]

상기 R₁₁의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬

옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0133]

또한, 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 3으로 표시되는 치환기의 예로는 하기 화학식 A-1 내지 화학식 A-15 중 어느 하나로 표시되는 치환기 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.



[0134]

상기 화학식 A-1 내지 화학식 A-15에서,

[0135]

*는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

[0136]

[0137]

n은 0 내지 4의 정수로서, 상기 n이 0인 경우, 수소가 치환기 R₁₂로 치환되지 않는 것을 의미하고, 상기 n이 1 내지 4의 정수인 경우, R₁₂는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기(예컨대, L₁, R₁₁ 또는 다른 R₁₂ 등)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

[0138]

상기 R₁₂의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;

[0139]

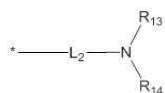
L₁ 및 R₁₁은 각각 상기 화학식 3에서 정의된 바와 같다.

[0140]

본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, 화학식 2로 표시되는 고리와 축합을 형성하지 않는 R₁ 내지 R₈과 R₉ 및 Ar₁ 내지 Ar₆ 중 적어도 하나는 하기 화학식 4로 표시되는 치환기일 수

있다.

[화학식 4]



상기 화학식 4에서,

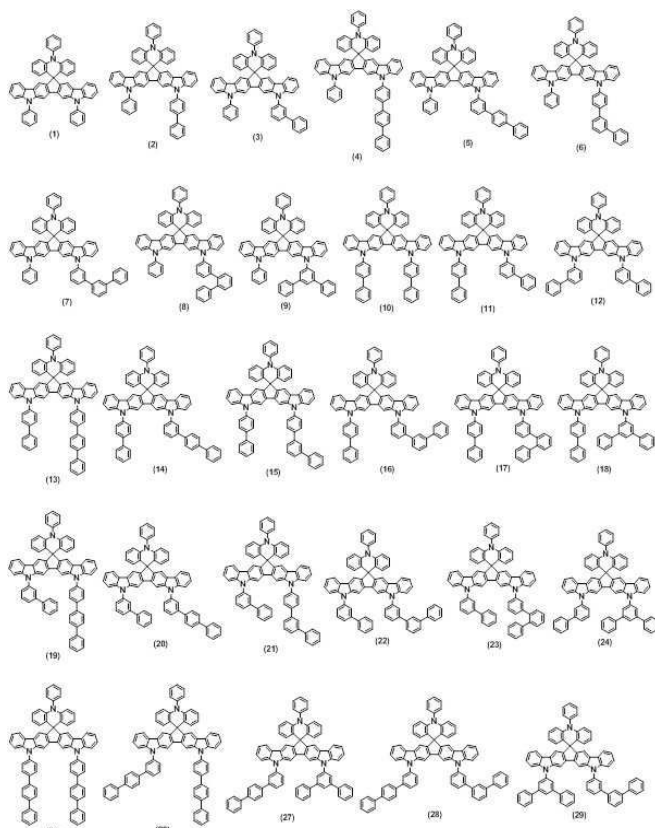
*는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

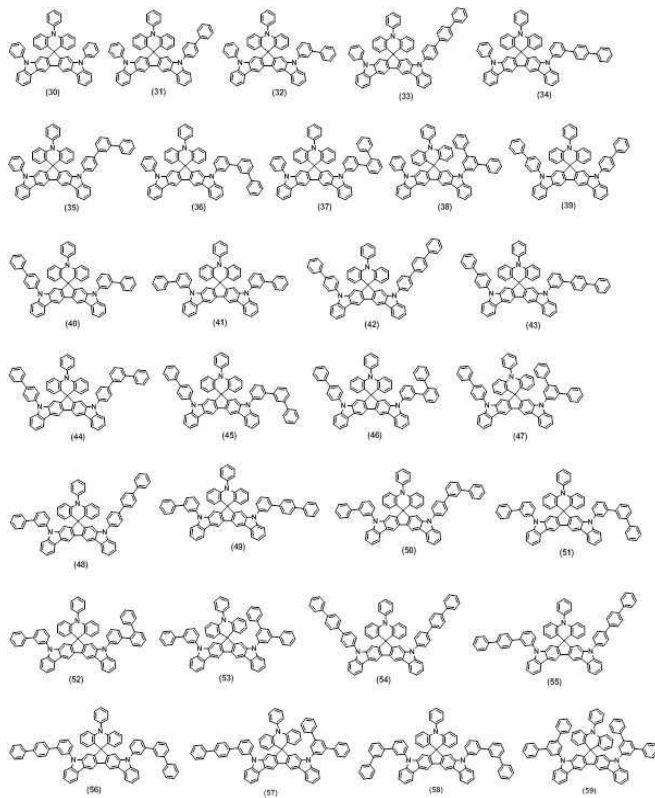
L₂은 단일결합, C₆~C₁₈의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게는 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기 및 카바졸릴기로 이루어진 군에서 선택되며;

R₁₃ 및 R₁₄는 각각 독립적으로 C₁~C₄₀의 알킬기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 상기 R₁₃ 및 R₁₄가 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

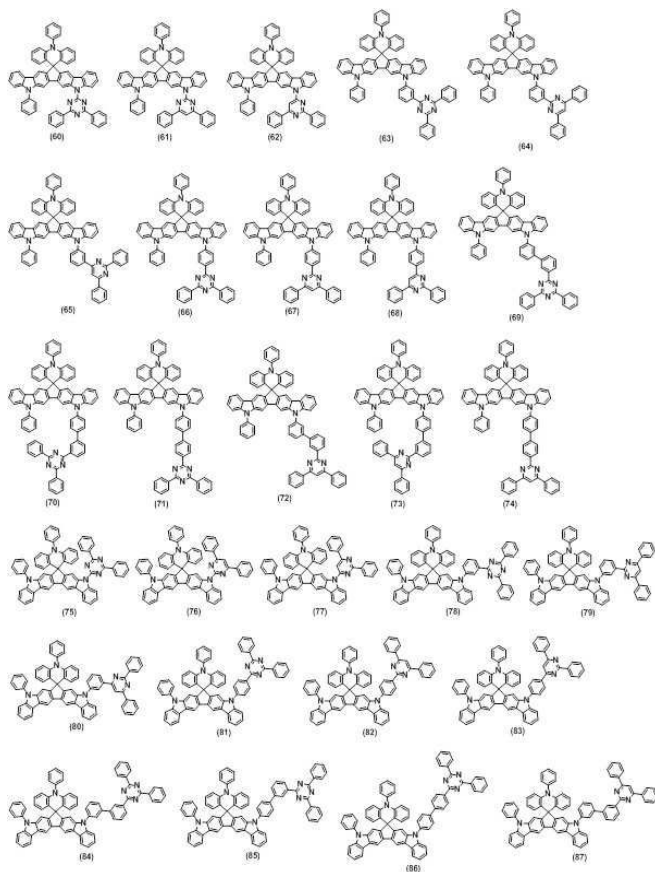
상기 R₁₃ 및 R₁₄의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알킬닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

본 발명의 화학식 1은 하기 화합물로 보다 구체적으로 하기 구조로 나타낼 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.





[0150]



[0151]

[0152]

본 발명의 화학식 1의 화합물은 일반적인 합성방법에 따라 합성될 수 있다. 본 발명의 화합물에 대한 상세한 합성 과정은 후술하는 합성예에서 구체적으로 기술하도록 한다.

[0153]

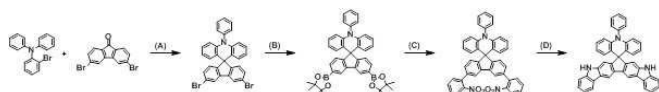
2. 유기 전계 발광 소자

- [0154] 한편, 본 발명의 다른 측면은 상기한 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자(유기 EL 소자)에 관한 것이다.
- [0155] 보다 구체적으로, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 (i) 양극(anode), (ii) 음극(cathode) 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 단독으로 사용되거나, 또는 2 이상이 혼합되어 사용될 수 있다.
- [0156] 본 발명의 일례에 따르면, 상기 1층 이상의 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 구체적으로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자 주입층 및 발광 보조층 중 어느 하나 이상인 것이 바람직하고, 보다 바람직하게는, 발광층일 수 있다.
- [0157] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료를 포함할 수 있는데, 이때 호스트 재료로서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 또한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 이외의 화합물을 호스트로 포함할 수 있다.
- [0158] 이러한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 기판, 양극, 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 이때, 상기 전자수송층 위에는 전자주입층이 추가로 적층될 수 있으며, 상기한 바와 같이, 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 하나 이상은 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0159] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.
- [0160] 또한, 상기 유기 전계 발광 소자는 발광층과 전자 수송층 사이에 수명 개선층 또는 전자 수송 보조층이 포함될 수 있다. 이때 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 수명 개선층 또는 전자 수송 보조층으로도 이용될 수 있다.
- [0161] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는, 당업계에 공지된 재료 및 방법으로 유기물층 및 전극을 형성하여 제조할 수 있다.
- [0162] 상기 유기물층은 진공 증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0163] 본 발명의 유기 전계 발광 소자 제조 시 사용되는 기판은 특별히 한정되지 않으나, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등을 사용할 수 있다.
- [0164] 또, 양극 물질로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 또는 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 및 카본블랙 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0165] 또, 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; 및 LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0166] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질을 사용할 수 있다.
- [0167] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐, 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.
- [0168] 이하 기재하는 준비예에서 Core I 및 II를 합성함에 있어서 사용되는 개략적인 반응스킴은 다음과 같다.
- [0169] [Core I 합성 반응식]



[0170]

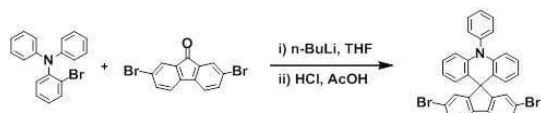
[0171] [Core II 합성 반응식]



[0172]

[0173] [준비에 1] Core I의 합성

[0174] <단계 1> 2',7'-디브로모-10-페닐-10H-스피로[아크리딘-9,9'-플루오렌]의 합성



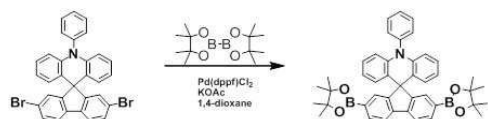
[0175]

[0176] 2-브로모-N,N-디페닐아닐린 40 g (0.12 mol)에 THF 500 mL를 가하였다. 반응액을 -70℃이하로 냉각하고 2.5M n-BuLi 54.3 mL (0.14 mol)를 1시간에 걸쳐 천천히 적가하였다. 동일 온도에서 1시간 교반 후 2,7-디브로모-9H-플루오렌-9-온 45.9 g (0.14 mol)을 THF 1.0 L에 용해시켜 반응액에 천천히 적가하였다. 동일 온도에서 1시간 교반 후 상온에서 12시간 교반하고 반응액에 염화암모늄 수용액 1.0 L로 반응을 종결하였다. 혼합액을 E.A 1.5 L로 추출한 후, 증류수로 세척하였다. 얻어진 유기층을 무수 MgSO₄로 건조하고, 감압증류 후 추가적인 정제 없이 중간체의 목적 화합물을 얻었다. 중간체 화합물에 36% HCl 4 mL와 AcOH 800 mL를 가하였다. 반응액을 100℃에서 12시간 동안 가열환류하고 상온으로 온도를 냉각하였다. NaOH 수용액 1.0 L로 중화하고 E.A 2.0 L로 추출한 후, 증류수로 세척하였다. 얻어진 유기층을 무수 MgSO₄로 건조하고, 감압증류하고 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 45.3 g (수율 65%)을 얻었다.

[0177] ¹H-NMR (300Mz, CDCl₃) : δ 7.72 (t, 2H), 7.60 (m, 3H), 7.48 (m, 5H), 6.96 (t, 2H), 6.61 (t, 2H), 6.38 (d, 4H)

[0178] [LCMS] : 565

[0179] <단계 2> 10-페닐-2',7'-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-10H-스피로[아크리딘-9,9'-플루오렌]의 합성



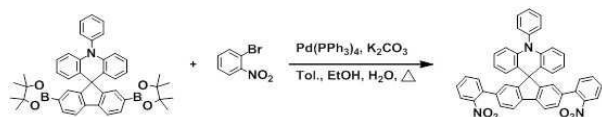
[0180]

[0181] 반응물인 2',7'-디브로모-10-페닐-10H-스피로[아크리딘-9,9'-플루오렌] 45.0 g (79.6 mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-옥타메틸-2,2'-비(1,3,2-디옥사보로란) 24.3 g (95.5 mmol)에 디옥산 1.0 L를 가하였다. Pd(dppf)Cl₂ 4.7 g (4.0 mmol), KOAc 23.4 g (239 mmol)을 반응액에 첨가하였다. 혼합액을 130℃에서 12시간 동안 가열환류하였다. 상온으로 온도를 냉각하고 반응액에 염화암모늄 수용액 1.0 L로 반응을 종결시켰다. 혼합액을 E.A 1.5 L로 추출한 후, 증류수로 세척하였다. 얻어진 유기층을 무수 MgSO₄로 건조하고, 감압증류하고 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 38.0 g (수율 72%)을 얻었다.

[0182] ¹H-NMR (300Mz, CDCl₃) : δ 8.11 (s, 1H), 7.92 (dd, 1H), 7.87 (s, 1H), 7.80 (m, 3H), 7.70 (t, 1H), 7.60 (dd, 2H), 7.54 (dd, 2H), 6.89 (t, 1H), 6.53 (t, 1H), 6.37 (m, 3H), 1.33 (s, 12H), 1.29 (s, 12H)

[0183] [LCMS] : 659

[0184] <단계 3> 2',7'-비스(2-니트로페닐)-10-페닐-10H-스피로[아크리딘-9,9'-플루오렌]의 합성



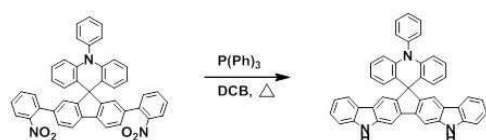
[0185]

[0186] 10-페닐-2',7'-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-10H-스피로[아크리딘-9,9'-플루오렌] 38.0 g (57.6 mmol)과 1-브로모-2-니트로벤젠 11.6g (57.6 mmol)에 톨루엔 800 mL, EtOH 200 mL, H₂O 200 mL를 가하였다. Pd(PPh₃)₄ 3.3 g (2.9 mmol), K₂CO₃ 23.9 g (173 mmol)을 첨가 후 120℃에서 6시간 가열환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 반응액에 정제수 500 mL로 반응을 종결하였다. 혼합액을 E.A 1.0 L로 추출한 후, 증류수로 세척하였다. 얻어진 유기층을 무수 MgSO₄로 건조하고, 감압증류하고 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 31.1 g (수율 83%)을 얻었다.

[0187] ¹H-NMR (300Mz, CDCl₃) : δ 7.82 (dd, 1H), 7.66 (t, 1H), 7.55 (d, 2H), 7.41 (m, 4H), 7.33 (d, 1H), 6.94 (t, 1H), 6.65 (t, 1H), 6.53 (t, 1H), 6.33 (d, 1H)

[0188] [LCMS] : 649

[0189] <단계 4> Core I의 합성



[0190]

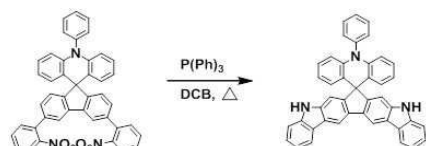
[0191] 2',7'-비스(2-니트로페닐)-10-페닐-10H-스피로[아크리딘-9,9'-플루오렌] 31.0 g (208 mmol)에 1,2-디클로로벤젠 600 mL를 가하였다. 반응액을 200℃에서 12시간 동안 가열환류하였다. 반응액을 상온으로 낮추고 정제수 500 mL를 가하여 반응을 종결하고 E.A 1.0 L로 추출한 후, 증류수로 세척하였다. 얻어진 유기층을 무수 MgSO₄로 건조하고, 감압증류하고 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 10.6 g (수율 38%)을 얻었다.

[0192] ¹H-NMR (300Mz, CDCl₃) : δ 8.29 (s, 1H), 8.14 (d, 2H), 8.05 (d, 1H), 7.92 (d, 1H), 7.88 (s, 1H), 7.82 (m, 3H), 7.75 (m, 2H), 7.41 (d, 2H), 7.33 (m, 3H), 7.18 (m, 3H), 6.95 (m, 3H), 6.52 (m, 5H)

[0193] ¹H-NMR (300Mz, DMSO-d₆) : δ 11.31 (s, 1H), 10.38 (s, 1H), 8.32 (d, 1H), 8.16 (d, 1H), 8.04 (d, 1H), 7.96 (t, 3H), 7.88 (d, 2H), 7.82 (d, 2H), 7.70 (d, 1H), 7.40 (t, 3H), 7.30 (m, 2H), 7.14 (t, 1H), 6.92 (t, 1H), 6.43 (t, 2H), 6.33 (d, 2H), 6.28 (d, 2H)

[0194] [LCMS] : 585

[0195] [준비예 2] Core II의 합성



[0196]

[0197] 준비예 1과 동일한 과정을 수행하되, 준비예 1의 단계 1에서 2,7-디브로모-9H-플루오렌-9-온 대신 3,6-디브로모-9H-플루오렌-9-온을 사용하여 목적 화합물 9.0 g (수율 32%)을 얻었다.

[0198] ¹H-NMR (300Mz, DMSO-d₆) : δ 11.95 (s, 1H), 9.32 (d, 1H), 8.68 (d, 1H), 8.55 (d, 1H), 8.27 (d, 1H), 7.84 (d, 1H), 7.72 (m, 6H), 7.62 (m, 2H), 7.48 (t, 1H), 7.35 (m, 4H), 7.26 (m, 2H)

[0199] [LCMS] : 585

[0200] **[준비예 3] 중간체 1의 합성**

[0201]

[0202] 반응물로 준비예 1에서 얻어진 Core I 6.0 g (10.2 mmol)과 요오드벤젠 2.1 g (10.2 mmol), Cu powder 0.33 g (5.1 mmol), K₂CO₃ 4.2 g (30.7 mmol)에 니트로벤젠 100 mL를 가하였다. 반응액을 210℃에서 12시간 동안 교반하고 반응 종결 후 니트로벤젠을 제거하고 정제수 500 mL와 E.A 1.0 L로 추출한 후, 증류수로 세척하였다. 얻어진 유기층을 무수 MgSO₄로 건조하고, 감압증류하고 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 4.4 g (수율 65%)을 얻었다.

[0203] [LCMS] : 661

[0204] **[준비예 4] 중간체 2의 합성**

[0205]

[0206] 요오드벤젠 대신 4-브로모비페닐을 사용한 것을 제외하고는, 상기 준비예 3 과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 3.5 g (수율 48%)을 얻었다.

[0207] [LCMS] : 737

[0208] **[준비예 5] 중간체 3의 합성**

[0209]

[0210] 반응물로 준비예 2에서 얻어진 Core II 6.0 g (10.2 mmol)과 요오드벤젠 2.1 g (10.2 mmol), Cu powder 0.33 g (5.1 mmol), K₂CO₃ 4.2 g (30.7 mmol)에 니트로벤젠 100 mL를 가하였다. 반응액을 210℃에서 12시간 동안 교반하고 반응 종결 후 니트로벤젠을 제거하고 정제수 500 mL와 E.A 1.0 L로 추출한 후, 증류수로 세척하였다. 얻어진 유기층을 무수 MgSO₄로 건조하고, 감압증류하고 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 8.5 g (수율 61%)을 얻었다.

[0211] [LCMS] : 661

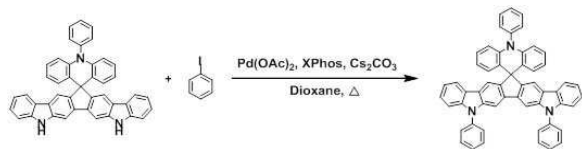
[0212] **[준비예 6] 중간체 4의 합성**

[0213]

[0214] 요오드벤젠 대신 4-브로모비페닐을 사용한 것을 제외하고는, 상기 준비예 5와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 6.0 g (수율 45%)을 얻었다.

[0215] [LCMS] : 737

[0216] **[합성예 1] 화합물 1의 합성**

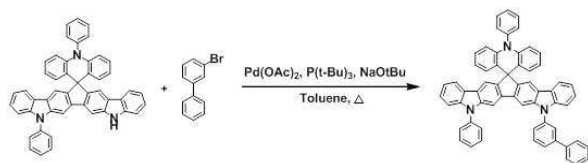


[0217]

[0218] 준비예 1에서 얻어진 Core I 4.0 g (6.8 mmol)과 요오드벤젠 3.1 g (15.0 mmol)에 디옥산 100 mL를 가하였다. Pd(OAc)₂ 0.08 g (0.34 mmol), XPhos 0.33 g (0.68 mmol), Cs₂CO₃ 4.4 g (13.7 mmol)을 반응액에 첨가하고 120 °C에서 12시간 가열환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 반응액에 정제수 300 mL로 반응을 종결하였다. 혼합액을 E.A 500 mL로 추출한 후, 증류수로 세척하였다. 얻어진 유기층을 무수 MgSO₄로 건조하고, 감압증류하고 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 2.7 g (수율 53%)을 얻었다.

[0219] [LCMS] : 737

[0220] **[합성예 2] 화합물 3의 합성**

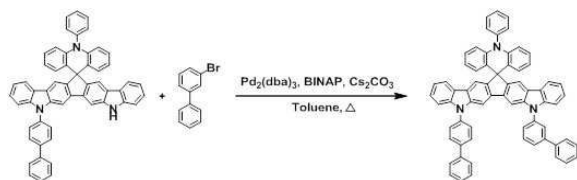


[0221]

[0222] 준비예 3에서 얻어진 중간체 1 5.5 g (8.3 mmol)과 3-브로모페닐 2.3 g (10.0 mmol)에 톨루엔 100 mL를 가하였다. Pd(OAc)₂ 0.09 g (0.42 mmol), P(t-Bu)₃ 0.34 g (0.83 mmol), NaOt-Bu 1.6 g (16.6 mmol)을 반응액에 첨가하고 120 °C에서 12시간 가열환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 반응액에 정제수 300 mL로 반응을 종결하였다. 혼합액을 E.A 500 mL로 추출한 후, 증류수로 세척하였다. 얻어진 유기층을 무수 MgSO₄로 건조하고, 감압증류하고 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 4.2 g (수율 62%)을 얻었다.

[0223] [LCMS] : 813

[0224] **[합성예 3] 화합물 11의 합성**

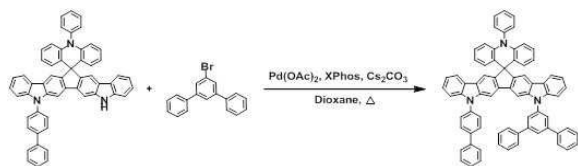


[0225]

[0226] 준비예 4에서 얻어진 중간체 2 3.5 g (4.7 mmol)과 3-브로모비페닐 1.3 g (5.7 mmol)에 톨루엔 50 mL를 가하였다. Pd₂(dba)₃ 0.22 g (0.24 mmol), BINAP 0.15 g (0.24 mmol), Cs₂CO₃ 3.1 g (9.5 mmol)을 반응액에 첨가하고 120 °C에서 12시간 가열환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 반응액에 염화암모늄 수용액 300 mL로 반응을 종결시켰다. 혼합액을 E.A 500 mL로 추출한 후, 증류수로 세척하였다. 얻어진 유기층을 무수 MgSO₄로 건조하고, 감압증류하고 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 2.8 g (수율 66%)을 얻었다.

[0227] [LCMS] : 890

[0228] **[합성예 4] 화합물 18의 합성**

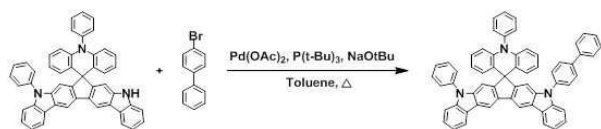


[0229]

[0230] 반응물로 Core I 과 요오드 벤젠 대신 준비예 4에서 얻어진 중간체 2 와 3-브로모-1,1':3',1''-터페닐을 사용한 것을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 4.0 g (수율 48%)을 얻었다.

[0231] [LCMS] : 966

[0232] **[합성예 5] 화합물 31의 합성**

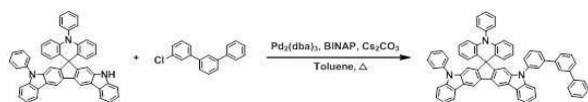


[0233]

[0234] 반응물로 준비예 3에서 얻어진 중간체 1과 3-브로모페닐 대신 준비예 5에서 얻어진 중간체 3과 4-브로모비페닐을 사용한 것을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.2 g (수율 47%)을 얻었다.

[0235] [LCMS] : 813

[0236] **[합성예 6] 화합물 36의 합성**

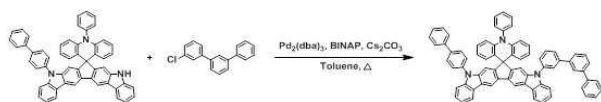


[0237]

[0238] 반응물로 준비예 4에서 얻어진 중간체 2와 3-브로모비페닐 대신 준비예 5에서 얻어진 중간체 3과 1,1':3',1''-터페닐-3-클로로-(9Cl)를 사용한 것을 제외하고는, 상기 합성예 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 2.8 g (수율 55%)을 얻었다.

[0239] [LCMS] : 890

[0240] **[합성예 7] 화합물 45의 합성**



[0241]

[0242] 반응물로 준비예 4에서 얻어진 중간체 2와 3-브로모비페닐 대신 준비예 6에서 얻어진 중간체 4와 1,1':3',1''-터페닐-3-클로로-(9Cl)를 사용한 것을 제외하고는, 상기 합성예 3과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 3.7 g (수율 43%)을 얻었다.

[0243] [LCMS] : 966

[0244] **[합성예 8] 화합물 60의 합성**



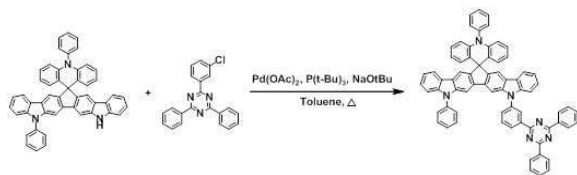
[0245]

[0246] 준비예 3에서 얻어진 중간체 1 5.2 g (7.9 mmol)과 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 2.7 g (10.2 mmol)에 DMF 100 mL를 가하였다. 60% NaH 0.41 g (10.2 mmol)을 반응액에 첨가하였다. 상온에서 12시간 동안 교반 후 정제수 100 mL를 가하여 반응을 종결하였다. 혼합액을 E.A 500 mL로 추출한 후, 증류수로 3회 세척하였다. 얻어진 유기층을 무수 $MgSO_4$ 로 건조하고, 감압증류하고 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 3.2 g (수율 45%)을 얻었다.

[0247]

[LCMS] : 893

[0248] **[합성예 9] 화합물 63의 합성**



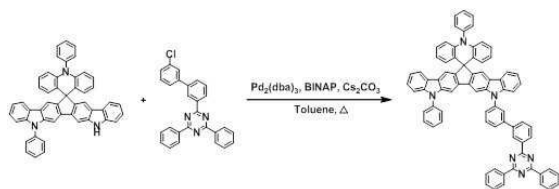
[0249]

[0250] 반응물로 3-브로모페닐 대신 2-(3-클로로페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진을 사용한 것을 제외하고는, 상기 합성예 2 와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 3.8 g (수율 56%)을 얻었다.

[0251]

[LCMS] : 969

[0252] **[합성예 10] 화합물 69의 합성**



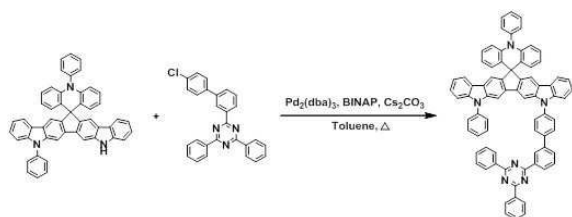
[0253]

[0254] 반응물로 준비예 4에서 얻어진 중간체 2와 3-브로모비페닐 대신 준비예 3에서 얻어진 중간체 1 과 2-(3'-클로로 비페닐-3-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진을 사용한 것을 제외하고는, 상기 합성예 3 와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.8 g (수율 65%)을 얻었다.

[0255]

[LCMS] : 1045

[0256] **[합성예 11] 화합물 70의 합성**



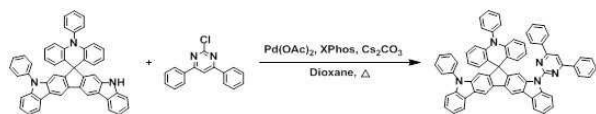
[0257]

[0258] 반응물로 준비예 4에서 얻어진 중간체 2와 3-브로모비페닐 대신 준비예 3에서 얻어진 중간체 1과 2-(4'-클로로 비페닐-3-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진을 사용한 것을 제외하고는, 상기 합성예 3 와 동일한 과정을 수행하여

목적 화합물 4.2 g (수율 57%)을 얻었다.

[LCMS] : 1045

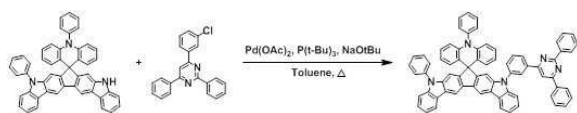
[합성예 12] 화합물 76의 합성



반응물로 Core I 과 요오드 벤젠 대신 준비예 5에서 얻어진 중간체 3과 2-클로로-4,6-디페닐피리미딘을 사용한 것을 제외하고는, 상기 합성예 1 과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 3.8 g (수율 44%)을 얻었다.

[LCMS] : 892

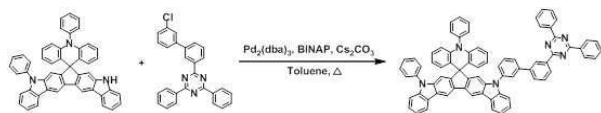
[합성예 13] 화합물 80의 합성



반응물로 준비예 3에서 얻어진 중간체 1과 3-브로모페닐 대신 준비예 5에서 얻어진 중간체 3과 4-(3-클로로페닐)-2,6-디페닐피리미딘을 사용한 것을 제외하고는, 상기 합성예 2 와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.0 g (수율 52%)을 얻었다.

[LCMS] : 968

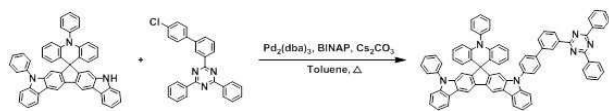
[합성예 14] 화합물 84의 합성



반응물로 준비예 4에서 얻어진 중간체 2와 3-브로모비페닐 대신 준비예 5에서 얻어진 중간체 3과 2-(3'-클로로비페닐-3-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진을 사용한 것을 제외하고는, 상기 합성예 3 과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 3.1 g (수율 42%)을 얻었다.

[LCMS] : 1045

[합성예 15] 화합물 85의 합성



반응물로 준비예 4에서 얻어진 중간체 2와 3-브로모비페닐 대신 준비예 5에서 얻어진 중간체 3과 2-(4'-클로로비페닐-3-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진을 사용한 것을 제외하고는, 상기 합성예 3 과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 3.8 g (수율 44%)을 얻었다.

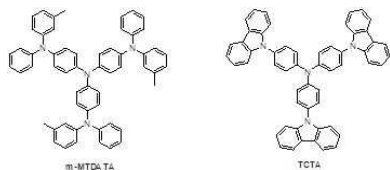
[LCMS] : 1045

[실시예 1] 녹색 유기 EL 소자의 제작

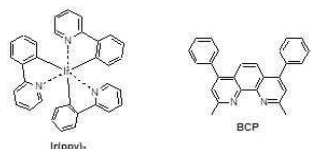
[0278] 합성에 1에서 합성된 화합물 1을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후, 아래의 과정에 따라 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[0279] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면, 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후, UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음, UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[0280] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 90%의 화합물 1 + 10 % Ir(ppy)₃ (30nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제작하였다. 사용된 m-MTDATA, TCTA, Ir(ppy)₃, 및 BCP의 구조는 하기와 같다.



[0281]



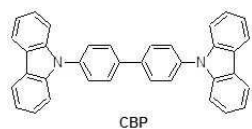
[0282]

[실시예 2] ~ [실시예 15] 녹색 유기 EL 소자의 제조

[0284] 실시예 1 에서 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 사용된 화합물 1 대신 하기 표 1에 나타낸 화합물을 사용하는 것을 제외하고는(표 1 참조), 상기 실시예 1과 동일하게 수행하여 녹색 유기 EL 소자를 제조하였다.

[비교예 1] 녹색 유기 EL 소자의 제작

[0286] 실시예 1 에서 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 1 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 1 과 동일한 과정으로 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다. 사용된 CBP의 구조는 다음과 같다.



[0287]

[평가예 1]

[0289] 실시예 1 내지 15, 및 비교예 1에서 각각 제조된 녹색 유기 EL 소자에 대하여, 전류밀도 (10) mA/cm²에서의 구동 전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

샘플	호스트	구동 전압(V)	EL 피크(nm)	전류효율(cd/A)
실시예 1	화합물 1	5.8	513	47.5
실시예 2	화합물 3	5.5	516	46.3
실시예 3	화합물 11	5.2	519	49.5
실시예 4	화합물 18	5.7	520	50.2
실시예 5	화합물 31	5.5	515	46.0
실시예 6	화합물 36	5.2	510	48.0
실시예 7	화합물 45	6.5	512	43.3
실시예 8	화합물 60	6.0	525	45.9

[0290]

실시예 9	화합물 63	5.8	514	46.0
실시예 10	화합물 69	5.0	518	47.5
실시예 11	화합물 70	4.8	520	50.2
실시예 12	화합물 76	5.8	515	41.0
실시예 13	화합물 80	6.2	510	42.5
실시예 14	화합물 84	6.0	512	44.8
실시예 15	화합물 85	5.5	515	43.0
비교예 1	CBP	6.3	516	43.0

[0291]

상기 표 1에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 발광층 재료로 사용한 실시예 1 내지 15의 녹색 유기 EL 소자의 경우, 종래 CBP를 사용한 비교예 2의 녹색 유기 EL 소자에 비해, 구동 전압은 낮고, 발광 성능 및 전류 효율은 우수한 것을 확인할 수 있었다.

专利名称(译)	标题：有机发光化合物和使用其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020160076884A	公开(公告)日	2016-07-01
申请号	KR1020140187482	申请日	2014-12-23
[标]申请(专利权)人(译)	株式会社斗山		
申请(专利权)人(译)	斗山公司		
当前申请(专利权)人(译)	斗山公司		
[标]发明人	SIM JAE YI 심재의		
发明人	심재의		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 C07D219/02		
CPC分类号	C09K11/06 C07D219/02 H01L51/50 Y10S428/917		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及一种新型化合物，其中载流子传输能力和辐射能力优异，并且通过将其包含在至少一个有机层中而驱动电压低，发光效率高，并且具有寿命特性的有机电致发光器件改善了。

