

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2015-0071624 (43) 공개일자 2015년06월26일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)	(71) 출원인 룸엔드하스전자재료코리아유한회사 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)	
(21) 출원번호 10-2014-0073623	(72) 발명자	
(22) 출원일자 2014년06월17일	이미자	
심사청구일자 없음	경기도 화성시 영통로26번길 24, 305동 1503호	
(30) 우선권주장	문두현	
1020130158371 2013년12월18일 대한민국(KR)	경기도 화성시 병점3로 117 906동 1304호 (뒷면에 계속)	
	(74) 대리인	
	장훈	

전체 청구항 수 : 총 7 항

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

(57) 요약

본 발명은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하면, 낮은 구동 전압 및 우수한 전류효율과 전력효율을 가지면서도 구동수명이 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 동탄반석로 71 솔빛마을쌍용예가아파트 441동 1201호

김남균

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

조영준

경기도 성남시 분당구 판교로 393 이지더원아파트 204-701

권혁주

서울특별시 강남구 삼성동 학동로 68길 29 105-2003

이경주

서울특별시 마포구 새창로 8길 72(도화동, 도화현대홈타운아파트) 210-1001

김빛나리

경기도 안양시 동안구 동안로 101 목련선경아파트 102동 2401호

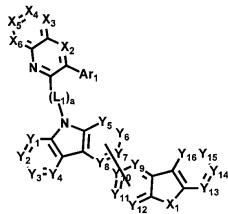
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

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

X₁는 -NR₁-, -CR₂R₃-, -O-, 또는 -S-이고;

X₂ 내지 X₆은 각각 독립적으로, -CR₄- 또는 -N-이며;

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

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

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

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

R₁ 내지 R₃은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 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;

R₄ 내지 R₆는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 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 (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;

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

a는 0 또는 1이다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 L₁, Ar₁, 및 R₁ 내지 R₆에서 치환 (C1-C30)알킬, 치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 (C6-C30)아릴(렌), 치환 (3-30원)헤테로아릴(렌), 치환 (C6-C30)아릴아미노 및 치환 (3-30원)의 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 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 중 하나가 $-N-$ 이고 나머지는 $-CR_4-$ 이고, 여기서, 상기 X_2 가 뺄-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 $\overset{\text{I}}{\underset{\text{I}}{\text{C}}}-$ 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 (C6-C21)아릴아미노이거나, 인접한 치환기와 융합되어 (5-21원)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 1 내지 2 개의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

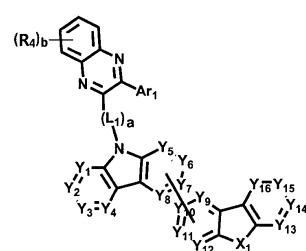
상기 헤테로아릴(렌) 및 헤테로시클로알킬은 각각 독립적으로, N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

a는 0 또는 1인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서, 상기 화합물이 하기 화학식 2로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 2]

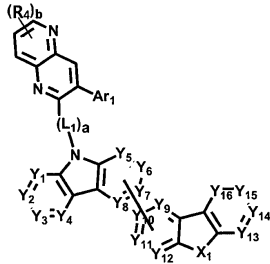


상기 화학식 2에서, X_1 , Ar_1 , Y_1 내지 Y_{16} , R_4 , L_1 , 및 a 는 제1항에서 정의한 바와 동일하고; b 는 1 내지 4의 정수이고, b 가 2 이상일 경우, 각각의 R_4 는 동일하거나 상이하다.

청구항 5

제1항에 있어서, 상기 화합물이 하기 화학식 3으로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

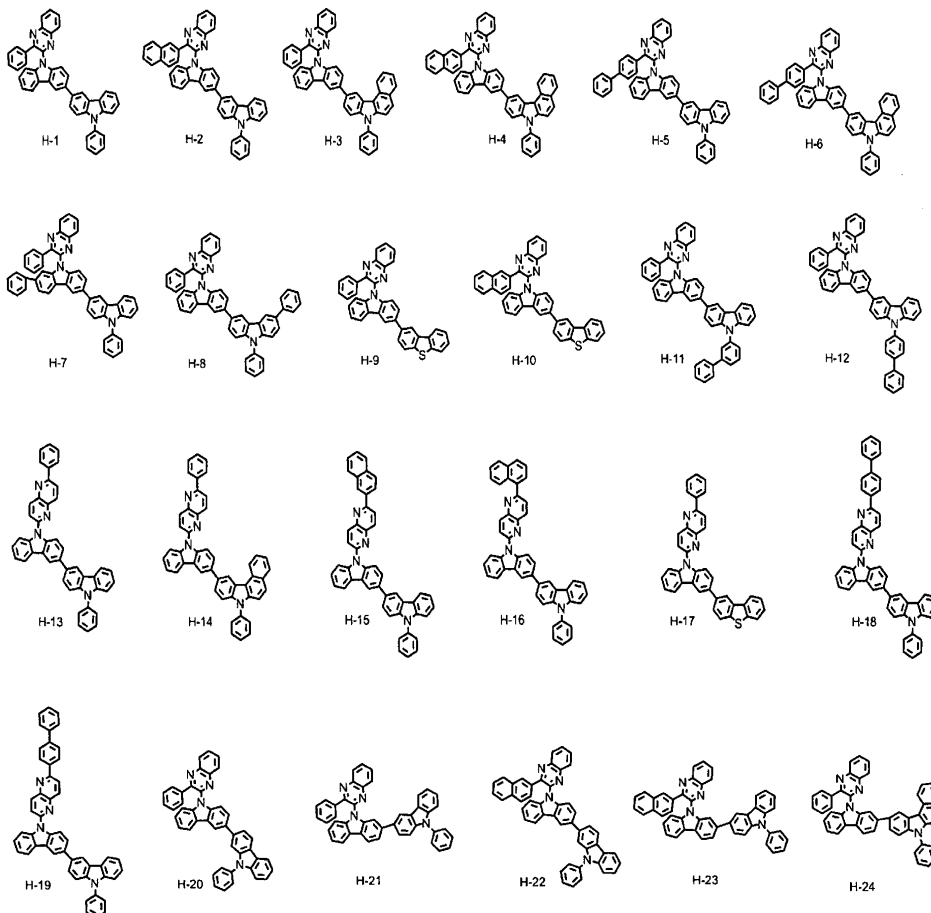
[화학식 3]

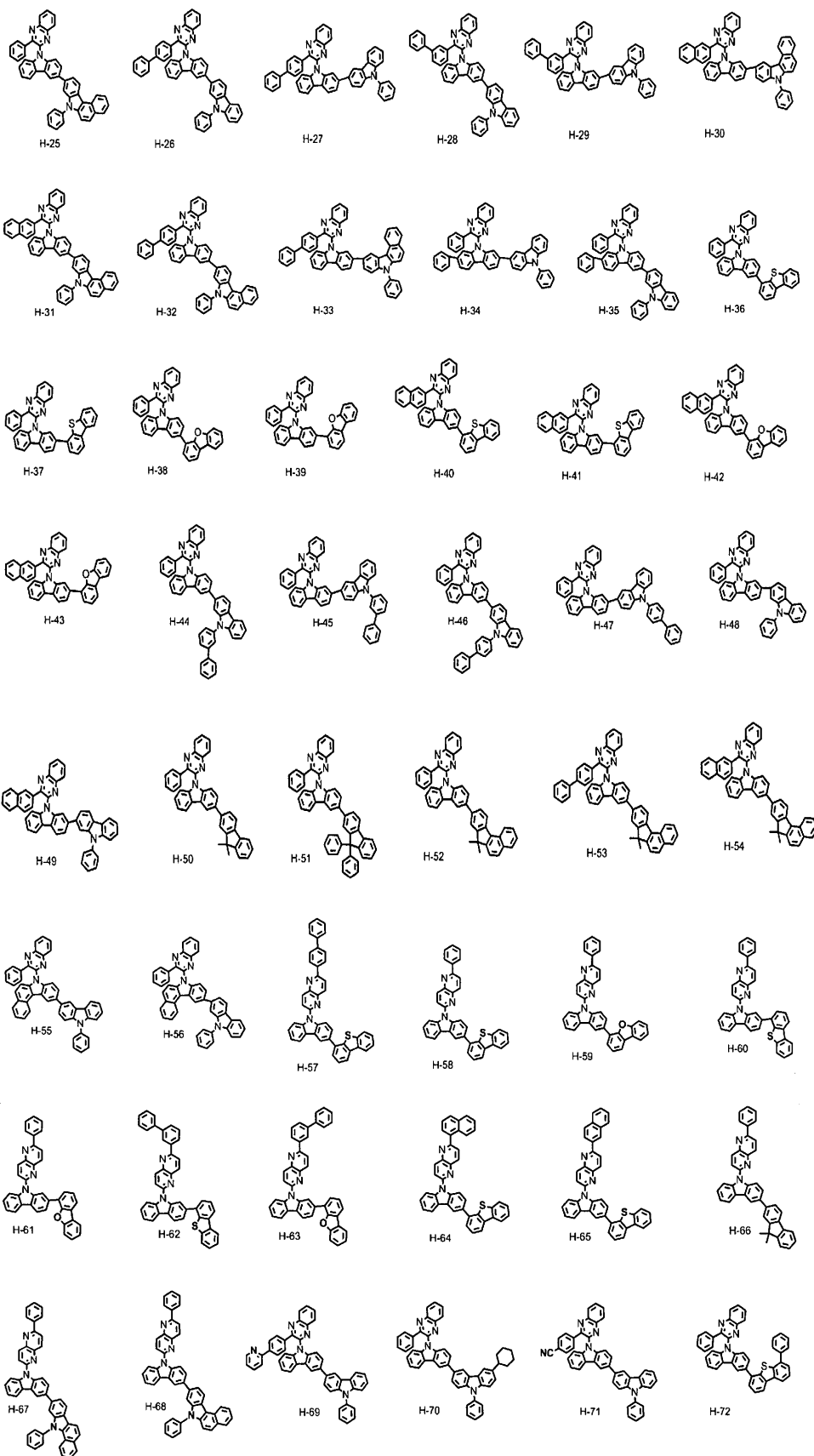


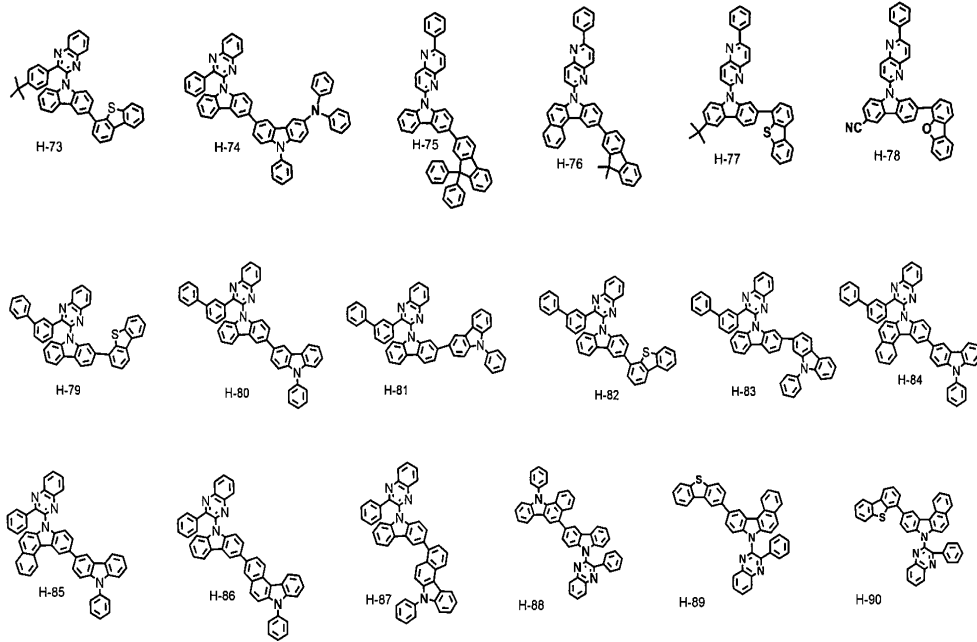
상기 화학식 3에서, X_1 , Ar_1 , Y_1 내지 Y_{16} , L_1 , R_4 , 및 a 는 제1항에서 정의한 바와 동일하고; b 는 1 내지 3의 정수이고, b 가 2 이상일 경우, 각각의 R_4 는 동일하거나 상이하다.

청구항 6

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







청구항 7

제1항에 기재된 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술분야

본 발명은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

표시 소자 중, 전기 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].

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 별로 비스(2-(2'-벤조티에닐)-피리디네이토-N,C-3')이리듐(아세틸아세토네이트) [(acac)Ir(btp)₂], 트리스(2-페닐피리딘)이리듐 [Ir(ppy)₃] 및 비스(4,6-디플루오로페닐피리디네이토-N,C2)피콜리네이토이리듐 (Firpic) 등의 재료가 알려져 있다.

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 바토크프로인(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.

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 페닐이 치환된 카바졸에 아릴아민이 연결되고, 아릴아민에 퀴녹살린이 치환되어있는 구조의 화합물을 유기 전계 발광 소자용 화합물로서 개시한다.

[0007] 그러나, 상기 문헌은 2개의 카바졸이 연결되어 있고 카바졸의 N 원자에 퀴녹살린 또는 나프티리딘이 치환된 것은 개시되어 있지 않다.

선행기술문헌

특허문헌

[0008] (특허문헌 0001) 한국 공개특허공보 제10-2010-0105501호 (2010.09.29 공개)

발명의 내용

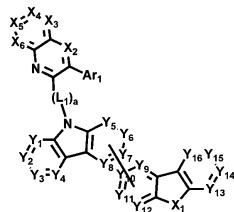
해결하려는 과제

[0009] 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 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0010] 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.

[0011] [화학식 1]



[0012]

[0013] 상기 화학식 1에서,

[0014] L_1 은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이고;

[0015] X_1 는 $-NR_1-$, $-CR_2R_3-$, $-O-$, 또는 $-S-$ 이고;

[0016] X_2 내지 X_6 은 각각 독립적으로, $-CR_4-$ 또는 $-N-$ 이며;

[0017] Ar_1 은 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고;

[0018] 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;

[0019] Y_1 내지 Y_4 및 Y_{13} 내지 Y_{16} 은 각각 독립적으로, $-N-$ 또는 $-CR_5-$ 이고;

[0020] Y_5 내지 Y_{12} 는 각각 독립적으로 $-\overset{\text{I}}{\underset{\text{I}}{\text{C}}}-$, $-N-$, 또는 $-CR_6-$ 이고;

[0021] 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;

[0022] 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)헤테로시클로

로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환기와 융합되어 (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;

[0023] 상기 헤테로아릴(렌) 및 헤테로시클로알킬은 각각 독립적으로 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

[0024] a는 0 또는 1이다.

발명의 효과

[0025] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 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

[0026] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.

[0027] 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.

[0028] 본 발명의 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

[0029] 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, 페릴레닐, 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, 푸라잔일, 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.

[0030] 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, L₁, Ar₁, R₁ 내지 R₆, R₂₁ 내지 R₂₇, R₃₁ 내지 R₃₃, R₁₀₀ 내지 R₁₀₉, R₁₁₁ 내지 R₁₂₇, L₄ 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 지환족 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, 할로젠, (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.

[0031] 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 결합이다.

[0032] 상기 X_1 은 $-NR_1-$, $-CR_2R_3-$, $-O-$, 또는 $-S-$ 이다. 구체적으로는, 상기 X_1 은 $-NR_1-$ 일 수 있다.

[0033] 상기 X_2 내지 X_6 은 각각 독립적으로, $-CR_4-$ 또는 $-N-$ 이고; 바람직하게는 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 결합이다.

[0034] 상기 Ar_1 은 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, Ar_1 은 수소; (C1-C4)알킬, 시아노 또는 피리딜로 치환 또는 비치환된 페닐; 비페닐; 또는 나프틸일 수 있다. 바람직하게는, 상기 Ar_1 이 수소일 경우, 상기 X_2 내지 X_6 중 적어도 하나는 R_4 가 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴인 $-CR_4-$ 이다. 더 바람직하게는, 상기 Ar_1 이 수소일 경우, 상기 X_2 내지 X_6 중 적어도 하나는 R_4 가 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴, 더더욱 바람직하게는 R_4 가 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴인 $-CR_4-$ 이다.

[0035] 상기 Y_1 내지 Y_4 및 Y_{13} 내지 Y_{16} 은 각각 독립적으로, $-N-$ 또는 $-CR_5-$ 이고; 바람직하게는 $-CR_5-$ 이다. 구체적으로는, 상기 Y_1 내지 Y_4 는 $-CH-$ 이거나; 상기 Y_1 내지 Y_4 중 하나가 $-CR_5-$ 이고(여기서, R_5 는 수소가 아님), 나머지는 $-CH-$ 이거나; 상기 Y_1 내지 Y_4 중 둘은 $-CH-$ 이고, 나머지 둘은 $-CR_5-$ (여기서, R_5 는 수소가 아님)일 수 있다. 또한, 구체적으로는, 상기 Y_{13} 내지 Y_{16} 는 $-CH-$ 이거나; 상기 Y_{13} 내지 Y_{16} 중 하나가 $-CR_5-$ 이고(여기서, R_5 는 수소가 아님), 나머지는 $-CH-$ 이거나; 상기 Y_{13} 내지 Y_{16} 중 둘은 $-CH-$ 이고, 나머지 둘은 $-CR_5-$ (여기서, R_5 는 수소가 아님)일 수 있다.

[0036] 상기 Y_5 내지 Y_{12} 는 각각 독립적으로, $\overset{\text{I}}{\underset{|}{\text{C}}}-$, $-N-$, 또는 $-CR_6-$ 이고; 바람직하게는, 상기 Y_5 내지 Y_{12} 는 각각 독립적으로 $\overset{\text{I}}{\underset{|}{\text{C}}}-$ 또는 $-CR_6-$ 이다. 구체적으로는, 상기 Y_5 내지 Y_8 중 하나는 $\overset{\text{I}}{\underset{|}{\text{C}}}-$ 이고, 상기 Y_5 내지 Y_8 중 나머지는 $-CH-$ 이다. 또한, 구체적으로는, 상기 Y_9 내지 Y_{12} 중 하나는 $\overset{\text{I}}{\underset{|}{\text{C}}}-$ 이고, 나머지는 $-CH-$ 이거나; 상기 Y_9 내지 Y_{12} 중 하나는 $\overset{\text{I}}{\underset{|}{\text{C}}}-$ 이고, 둘은 $-CR_6-$ (여기서, R_6 는 수소가 아님)이고, 나머지 하나는 $-CH-$ 일 수 있다.

[0037] 상기 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; 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; 더욱더 바람직하게는 비치환된 (C1-C10)알킬 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이다. 바람직하게는, 상기 R₂와 R₃가 서로 동일하다. 구체적으로는, 상기 R₁은 페닐 또는 비페닐일 수 있고; 상기 R₂는 (C1-C4)알킬 또는 페닐일 수 있고; 상기 R₃은 (C1-C4)알킬 또는 페닐일 수 있다.

[0038]

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 (C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환기와 융합되어 (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 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 (C6-C21)아릴아미노이거나, 인접한 치환기와 융합되어 (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 R₄는 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이다. 또한, 상기 R₅ 및 R₆는, 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 (C6-C18)아릴아미노이거나; 인접한 치환기와 융합되어 (5-18원)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리 중 하나의 탄소 원자는 질소로 대체될 수 있다. 구체적으로는, 상기 R₄는 수소, 페닐, 비페닐, 또는 나프틸일 수 있고; 상기 R₅는 수소, 시아노, (C1-C4)알킬, 페닐, 시클로헥실 또는 디(페닐)아미노일 수 있거나, 인접한 치환기와 융합되어 벤젠 고리를 형성할 수 있고; 상기 R₆는 수소이거나 인접한 치환기와 융합되어 벤젠 고리를 형성할 수 있다.

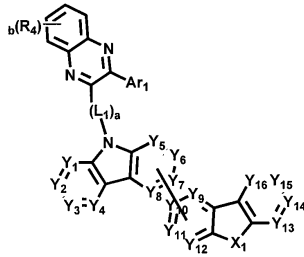
[0039]

본 발명의 일실시예에 따르면, 상기 L₁은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴렌이고; 상기 X₁은 -NR₁-, -CR₂R₃-, -O-, 또는 -S-이고; 상기 X₂ 내지 X₆ 중 하나가 -N-이고 나머지는 -CR₄-이고, 여기서, 상기 X₂가 -N-일 경우, 상기 L₁은 단일 결합이고; 상기 Ar₁은 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴이고, 여기서, 상기 Ar₁이 수소일 경우, 상기 R₄ 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴이고; 상기 Y₁ 내지 Y₄ 및 Y₁₃ 내지 Y₁₆은 각각 독립적으로 -CR₅-이고; 상기 Y₅ 내지 Y₁₂는 각각 독립적으로 $\overset{|}{\text{C}}$ 또는 -CR₆-이고; 상기 R₁ 내지 R₃은 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 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 (C6-C21)아릴아미노이거나, 인접한 치환기와 융합되어 (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; a는 0 또는 1이다.

[0040]

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

[0041] [화학식 2]

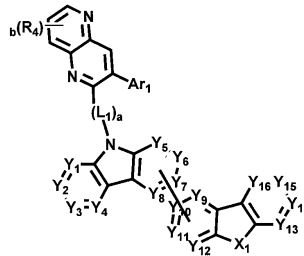


[0042]

[0043] 상기 화학식 2에서, X_1 , Ar_1 , Y_1 내지 Y_{16} , R_4 , L_1 , 및 a 는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하고; b 는 1 내지 4의 정수이고, b 가 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.

[0044] 본 발명의 또 다른 일실시예에 따르면, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 3으로 표시될 수 있다.

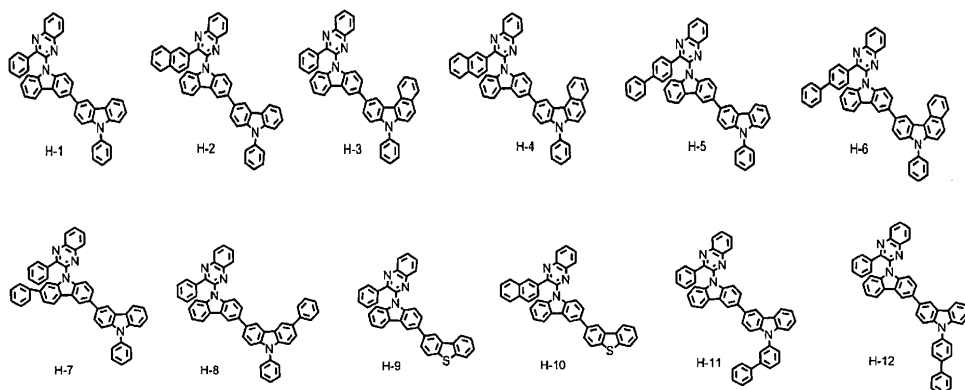
[0045] [화학식 3]



[0046]

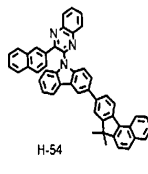
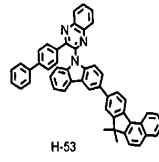
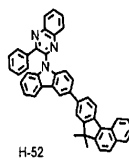
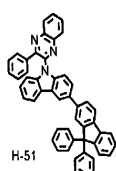
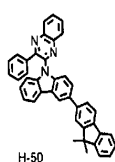
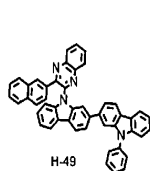
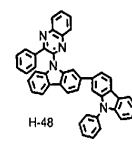
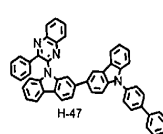
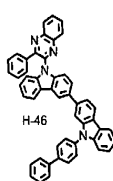
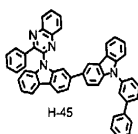
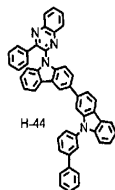
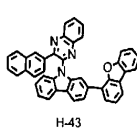
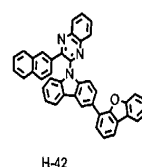
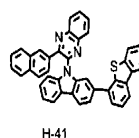
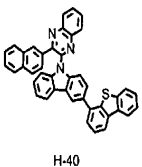
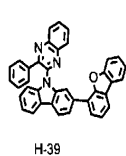
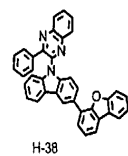
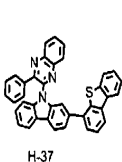
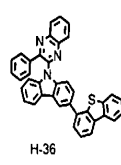
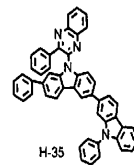
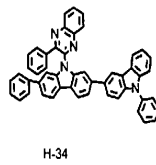
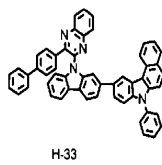
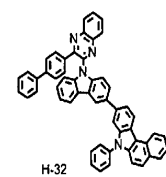
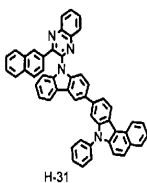
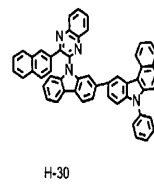
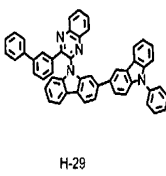
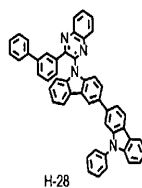
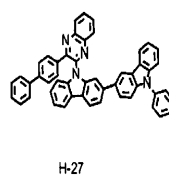
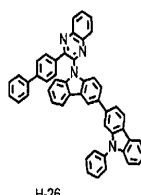
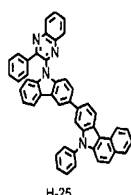
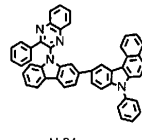
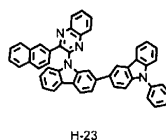
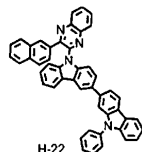
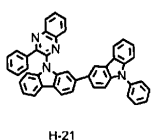
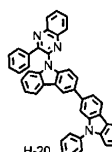
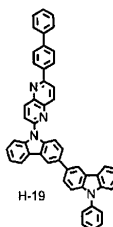
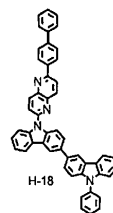
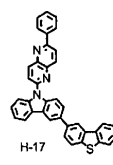
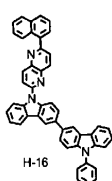
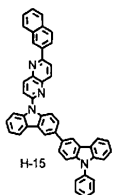
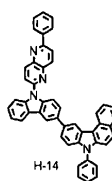
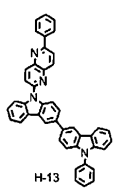
[0047] 상기 화학식 3에서, X_1 , Ar_1 , Y_1 내지 Y_{16} , L_1 , R_4 , 및 a 는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 동일하고; b 는 1 내지 3의 정수이고, b 가 2 이상일 경우, 각각의 R_4 는 동일하거나 상이하다. 상기 화학식 3에서, 바람직하게는, 상기 Ar_1 이 수소일 경우, 상기 R_4 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 (C6-C21)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴이고; 더 바람직하게는, 상기 Ar_1 은 수소이고; 상기 R_4 중 하나가 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이고, 나머지 R_4 는 수소이다.

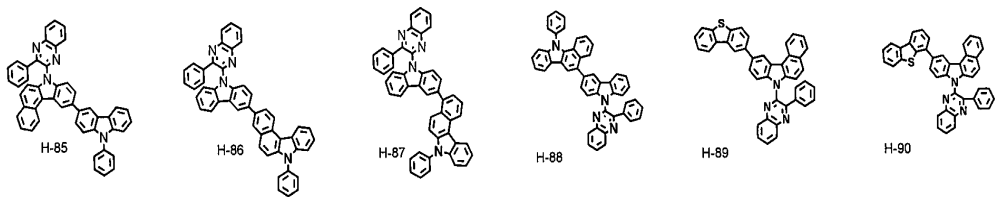
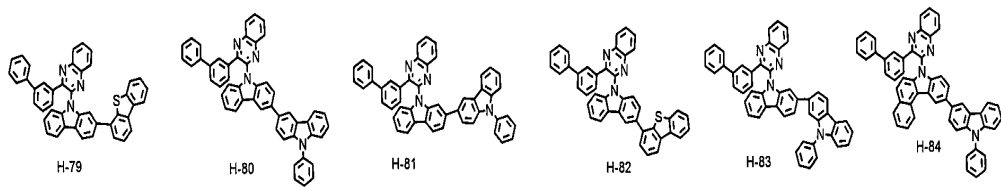
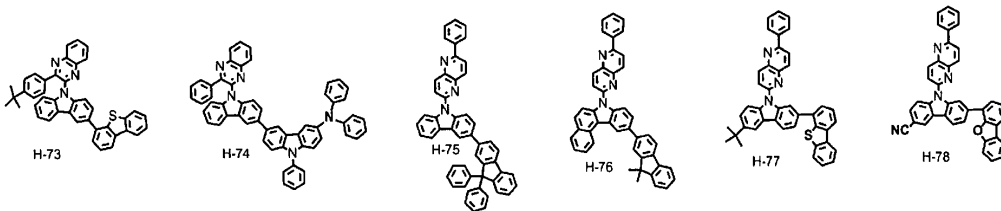
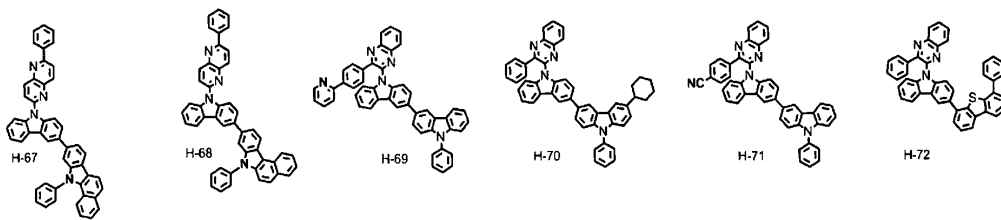
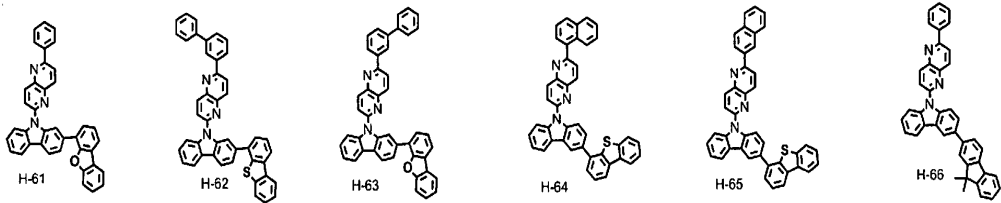
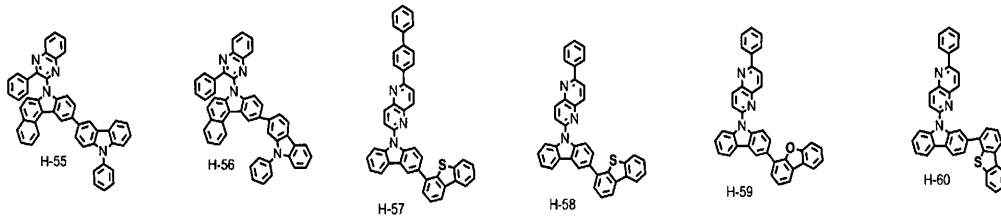
[0048] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



[0049]

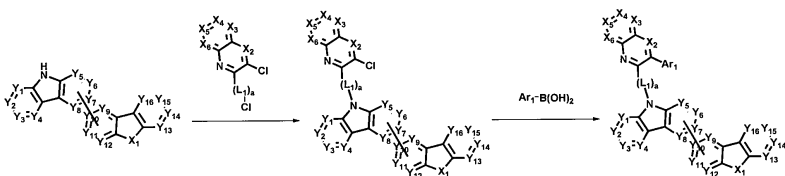
[0050]





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

[반응식 1]



또한, 본 발명은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는

유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0068] 상기 재료는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0069] 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.

[0070] 상기 제1전극과 제2전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공주입층, 정공전달층, 전자전달층, 전자주입층, 계면층(interlayer), 정공차단층 및 전자차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

[0071] 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 도펀트를 추가로 더 포함할 수 있으며, 필요한 경우, 본 발명의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다.

[0072] 상기 제2호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하나, 하기 화학식 4 내지 화학식 8로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 발광 효율 면에서 특히 바람직하다.

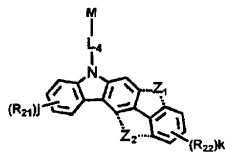
[0073] [화학식 4]

[0074] $H-(Cz-L_4)_n-M$

[0075] [화학식 5]

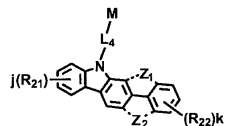
[0076] $H-(Cz)_i-L_4-M$

[0077] [화학식 6]



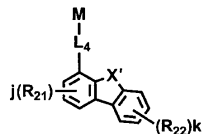
[0078]

[0079] [화학식 7]



[0080]

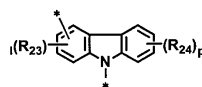
[0081] [화학식 8]



[0082]

[0083] 상기 화학식 4 내지 8에서,

[0084] Cz는 하기 구조이며,

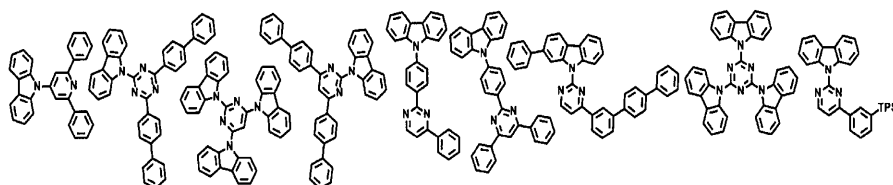


[0085]

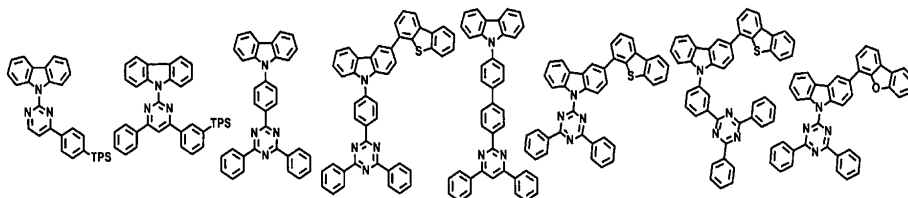
[0086] X'는 -O- 또는 -S-이고; R₂₁ 내지 R₂₄은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원) 헤테로아릴, 또는 R₂₅R₂₆R₂₇Si-이며; R₂₅ 내

지 R_{27} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; L_4 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원) 헤테로아릴렌이고; M 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원) 헤테로아릴이며; Z_1 및 Z_2 는 각각 독립적으로 -O-, -S-, -N(R_{31})- 또는 -C(R_{32})(R_{33})-이고, Z_1 과 Z_2 가 동시에 존재하지는 않으며; R_{31} 내지 R_{33} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원) 헤테로아릴이고, R_{32} 및 R_{33} 은 동일하거나 상이할 수 있으며; h 및 i 는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고; j , k , l 및 p 은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며; h , i , j , k , l 또는 p 가 2 이상의 정수인 경우 각각의 (Cz- L_4), 각각의 (Cz), 각각의 R_{21} , 각각의 R_{22} , 각각의 R_{23} 또는 각각의 R_{24} 는 동일하거나 상이할 수 있다.

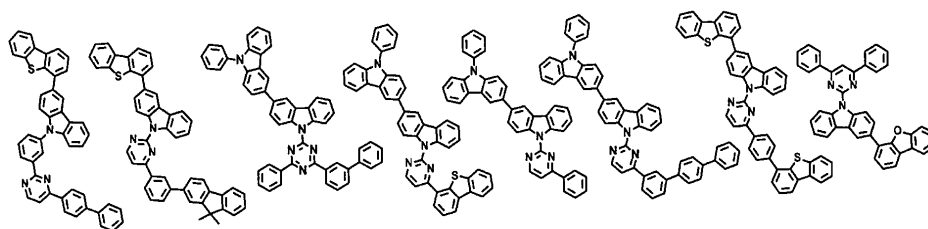
[0087] 구체적으로 상기 제2호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같다.



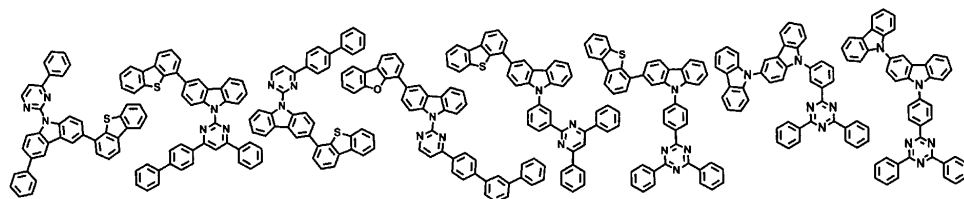
[0088]



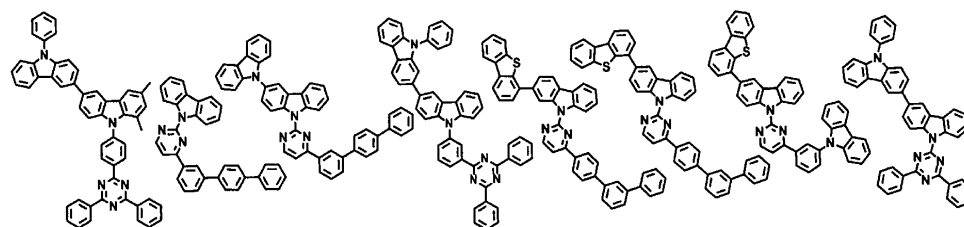
[0089]



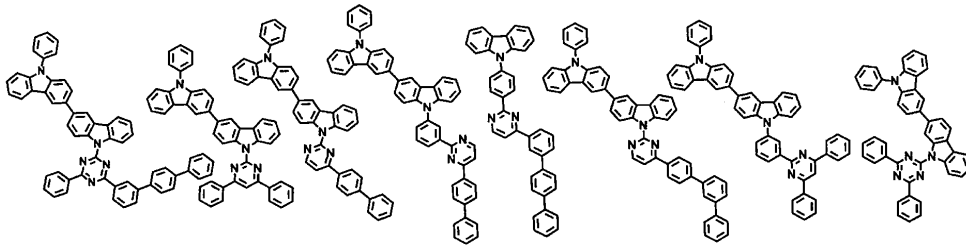
[0090]



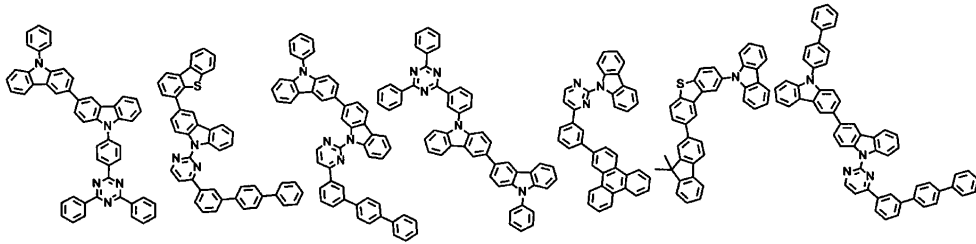
[0091]



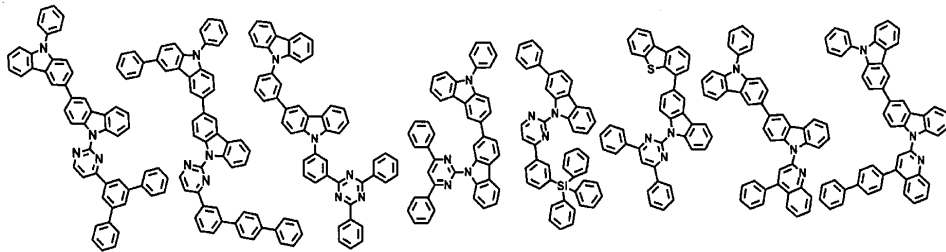
[0092]



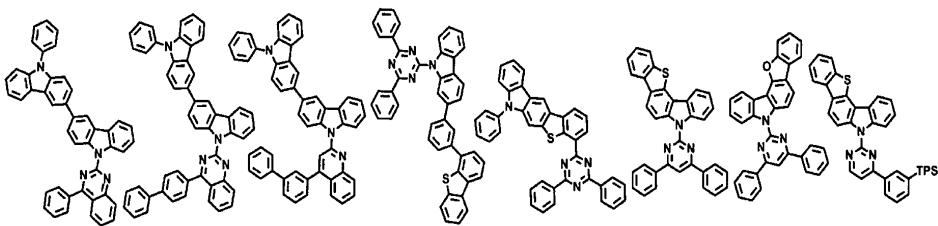
[0093]



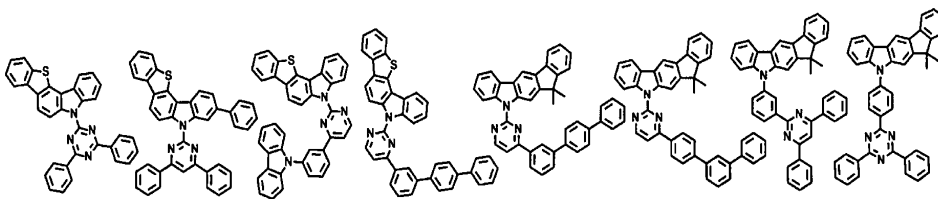
[0094]



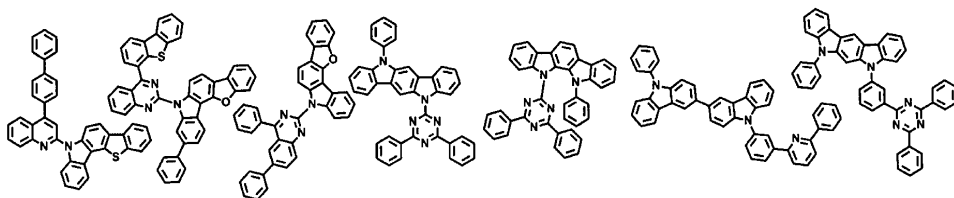
[0095]



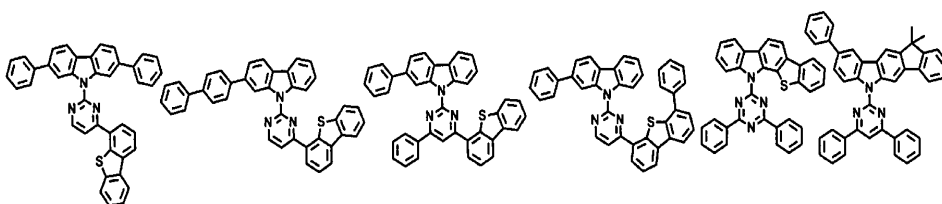
[0096]



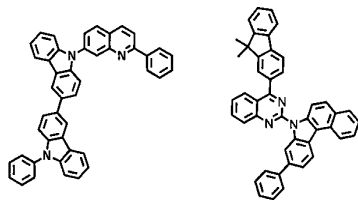
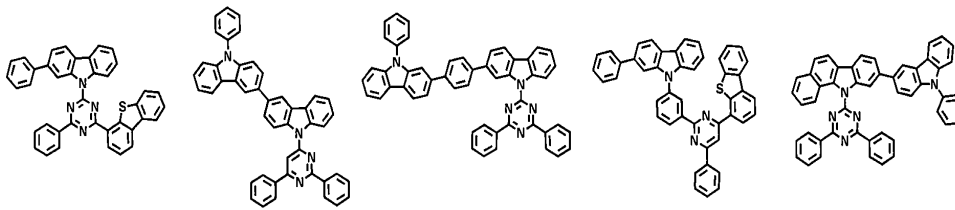
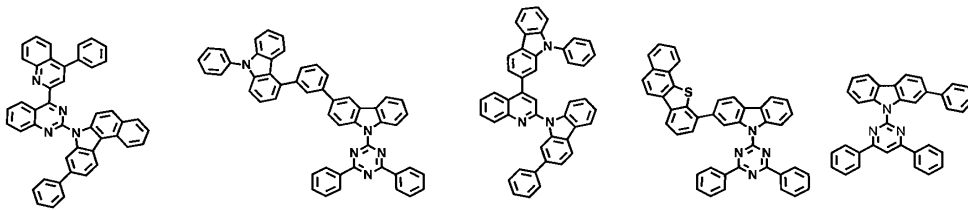
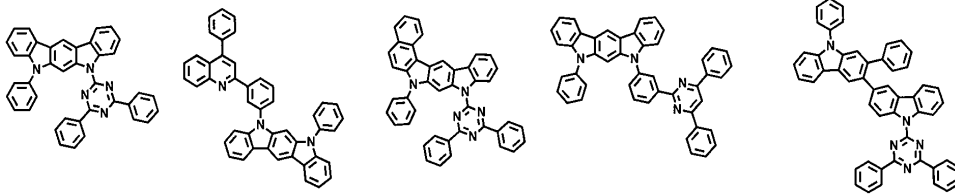
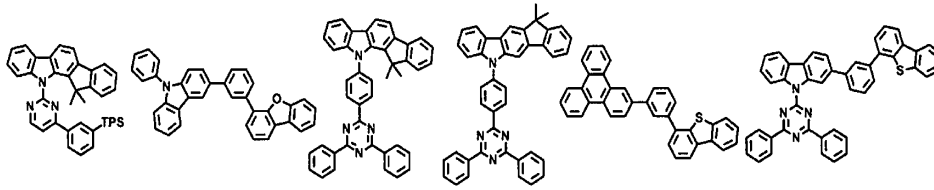
[0097]



[0098]



[0099]

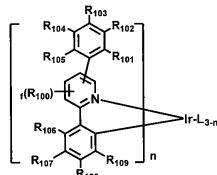


[여기서, TPS는 트리페닐실릴(triphenylsilyl)이다]

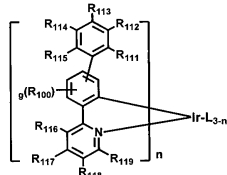
상기 도판트로로는 하나 이상의 인광 도판트가 바람직하다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물이 바람직하고, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물이 더욱 바람직하며, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물이 더더욱 바람직하다.

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 9 내지 11로 표시되는 화합물을 사용할 수 있다.

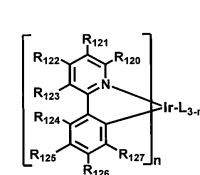
[화학식 9]



[화학식 10]

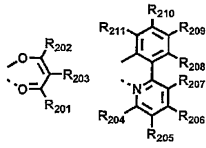


[화학식 11]



상기 화학식 9 내지 11에서,

[0110] L은 하기 구조에서 선택되고;



[0111]

[0112] R₁₀₀은 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이며;

[0113] 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, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; R₁₂₀ 내지 R₁₂₃는 인접 치환기가 서로 연결되어 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 퀴놀린 형성이 가능하며;

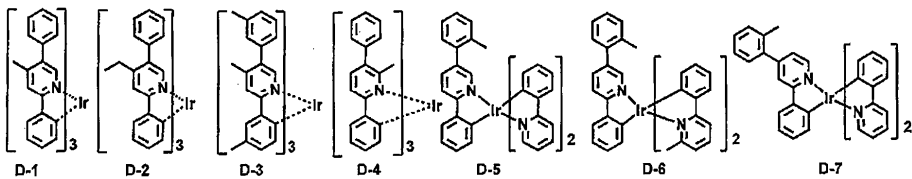
[0114] R₁₂₄ 내지 R₁₂₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; R₁₂₄ 내지 R₁₂₇가 아릴기인 경우 인접기가 서로 연결되어 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 플루오렌, 디벤조티오펜 또는 디벤조푸란의 형성이 가능하며;

[0115] R₂₀₁ 내지 R₂₁₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 또는 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 (C6-30)아릴이고;

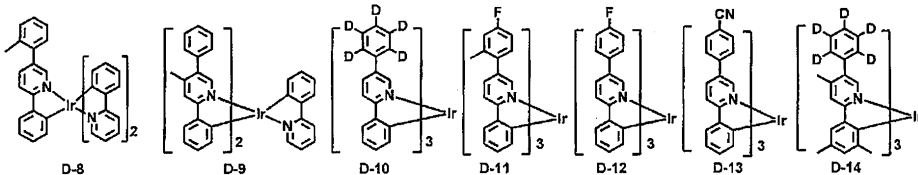
[0116] f 및 g는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며; f 또는 g가 각각 2 이상의 정수인 경우 각각의 R₁₀₀은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

[0117] n은 1 내지 3의 정수이다.

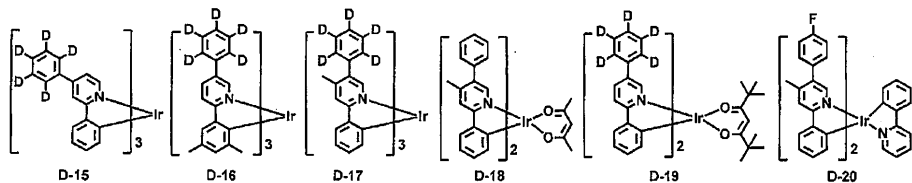
[0118] 상기 도판트 재료의 구체적인 예로는 다음과 같다.



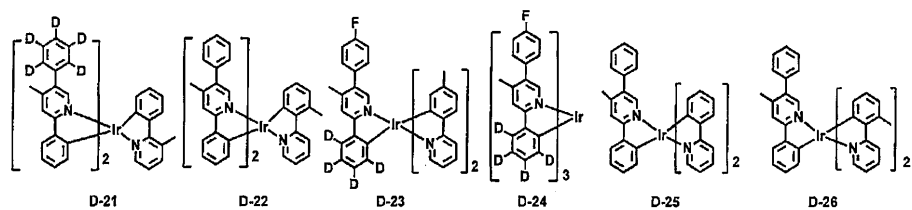
[0119]



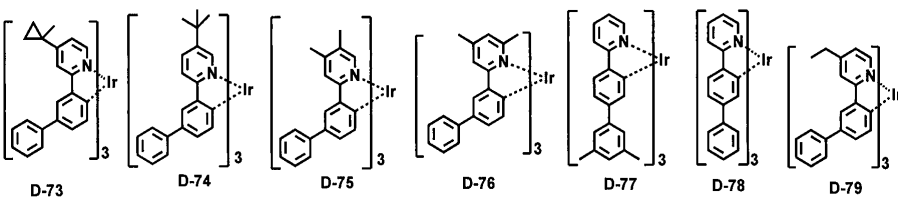
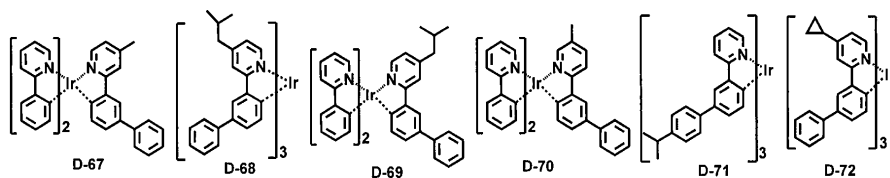
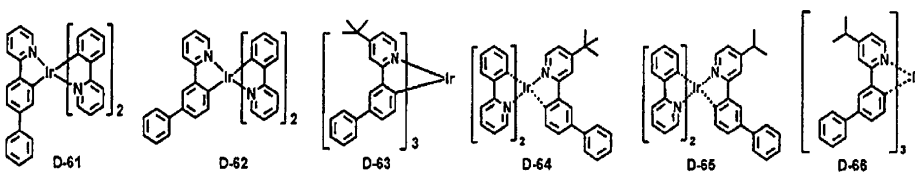
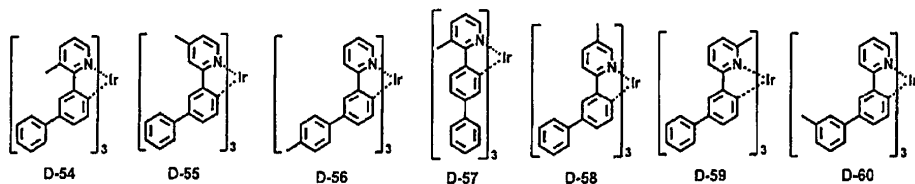
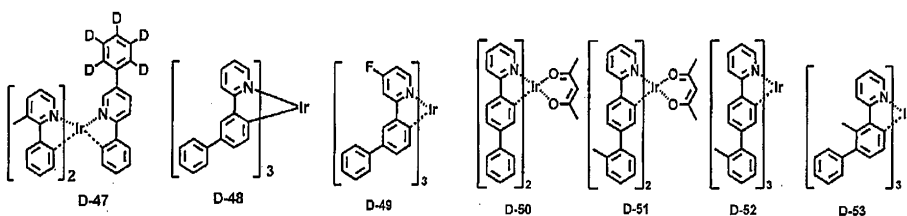
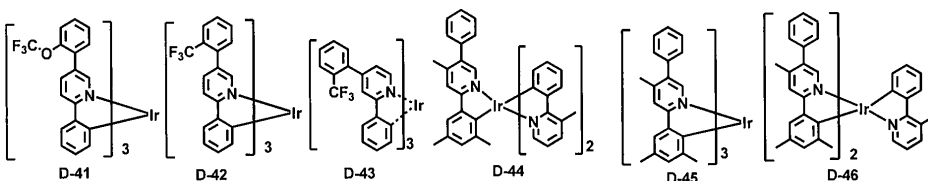
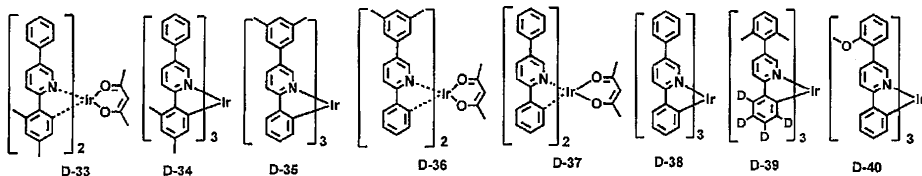
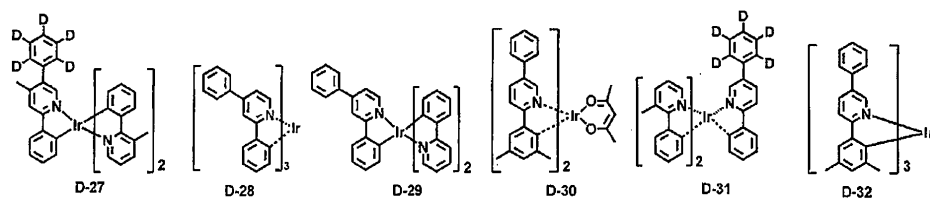
[0120]

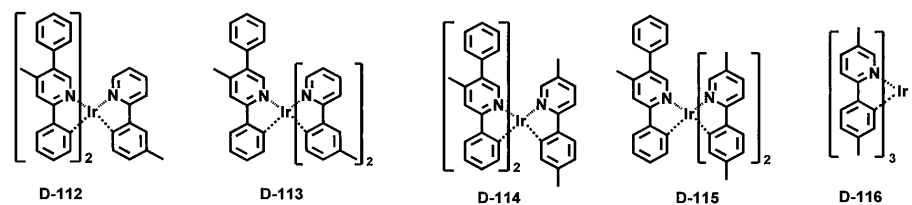
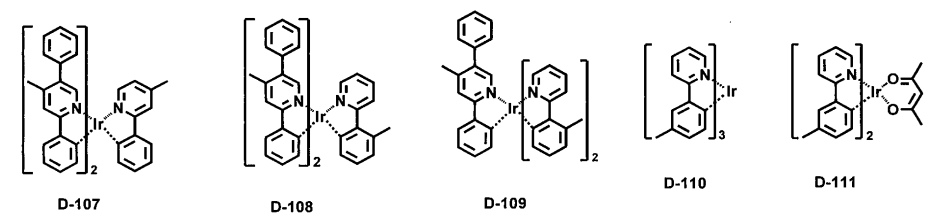
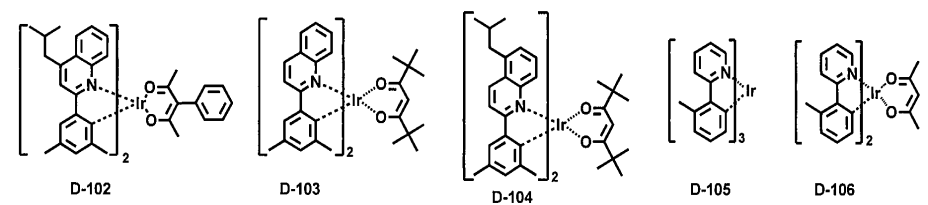
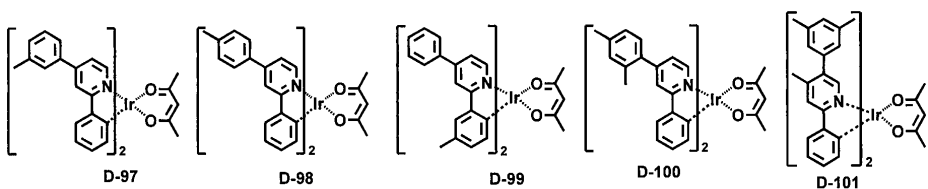
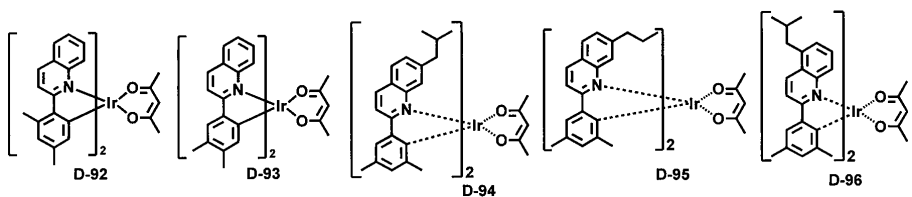
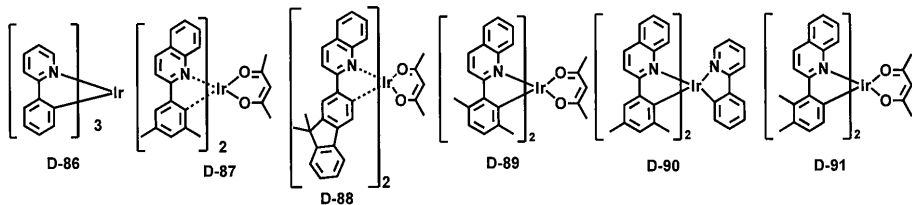
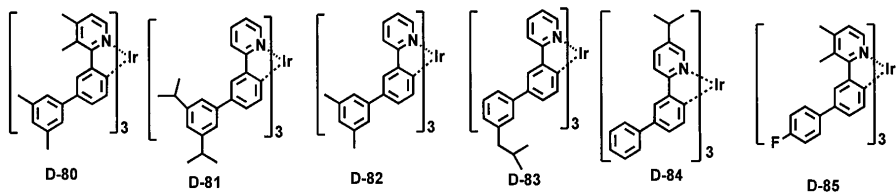


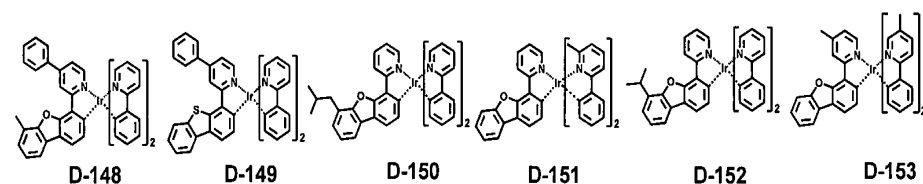
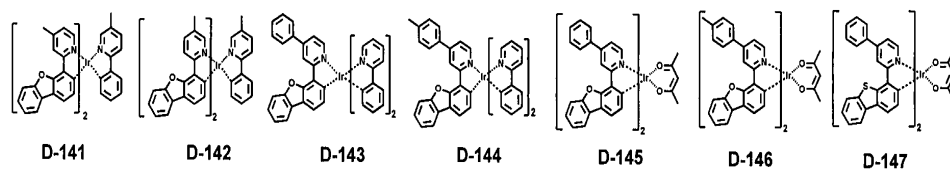
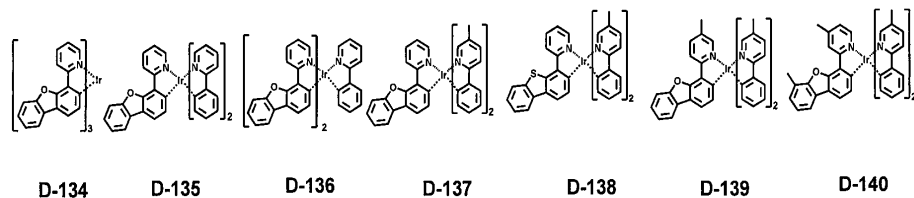
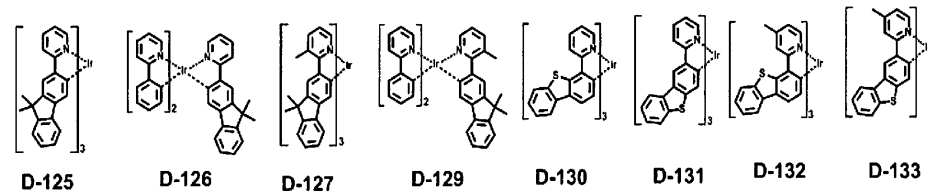
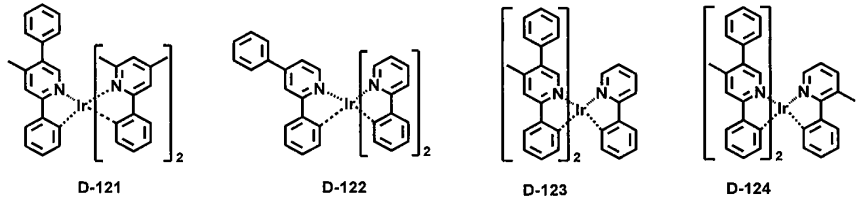
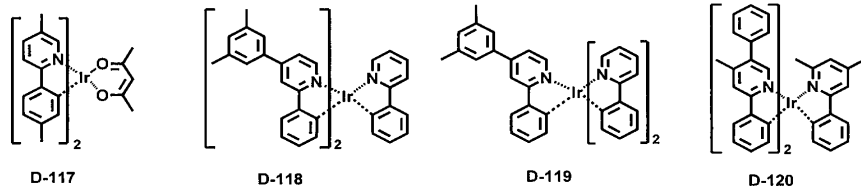
[0121]



[0122]







본 발명은 추가의 양태로 유기 전계 발광 소자 제조용 재료를 제공한다. 상기 재료는 호스트 재료 또는 전자전달재료로서 본 발명의 화합물을 포함한다. 본 발명의 화합물이 호스트 재료로 포함될 경우 상기 재료는 제2 호스트 재료를 추가로 포함할 수 있으며, 이때 제1호스트 재료와 제2호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 가지며, 상기 유기물층은 본 발명의 유기 전계 발광 소자용 재료를 포함할 수 있다.

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.

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.

[0148] 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.

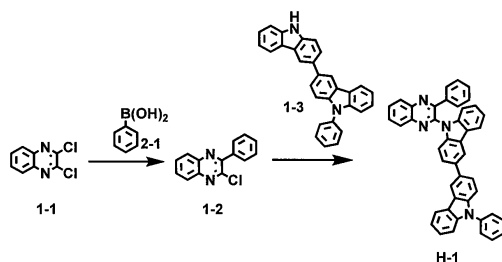
[0149] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측 표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 1층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함) 이상을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 금속의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광매체층 측의 음극 표면에 할로젠화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 이것에 의해 구동의 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 $\text{SiO}_x (1 \leq x \leq 2)$, $\text{AlO}_x (1 \leq x \leq 1.5)$, SiON 또는 SiAlON 등이 있고, 할로젠화 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.

[0150] 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 억셉터(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.

[0151] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막법이나 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

[0152] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광특성을 설명한다.

[0153] [실시예 1]



[0154]

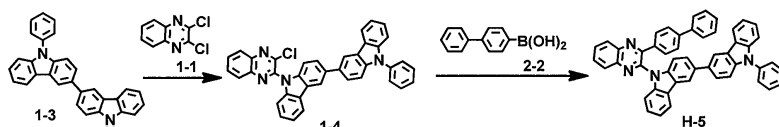
[0155] 화합물 1-2의 합성

[0156] 화합물 1-1 (20 g, 100.5 mmol), 화합물 2-1 (19 g, 150 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐($(\text{O})[\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4]$) (5.7 g, 5.0 mmol), Na_2CO_3 (31 g, 300 mmol)을 톨루엔 500 mL, 에탄올(EtOH) 250 mL, 정제수 250 mL에 투입 후 120℃에서 15 시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 정지하여 수층을 제거한 후, 유층은 농축하였다. 실리카 컬럼 정제하여 화합물 1-2 (20 g, 83%)을 얻었다.

[0157] 화합물 H-1의 합성

[0158] 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 실리카 컬럼 정제하여 화합물 H-1 (50 g, 82%)을 얻었다.

[실시예 2]



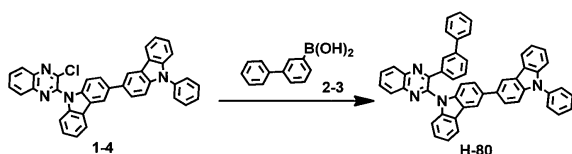
화합물 1-4의 합성

화합물 1-3 (30g, 73.44mmol)을 디메틸포름아마이드 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 컬럼크로마토그래피와 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 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼로 정제하여 화합물 H-5 (5.5g, 46%)를 얻었다.

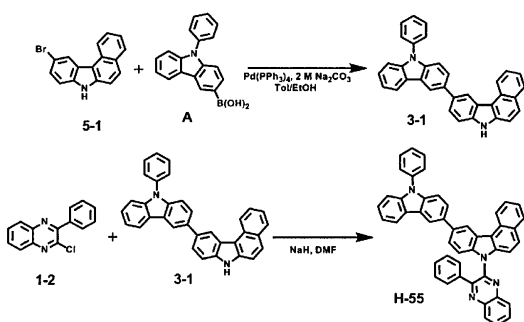
[실시예 3]



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 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼로 정제하여 화합물 H-80 (7.7g, 64%)를 얻었다.

[실시예 4]



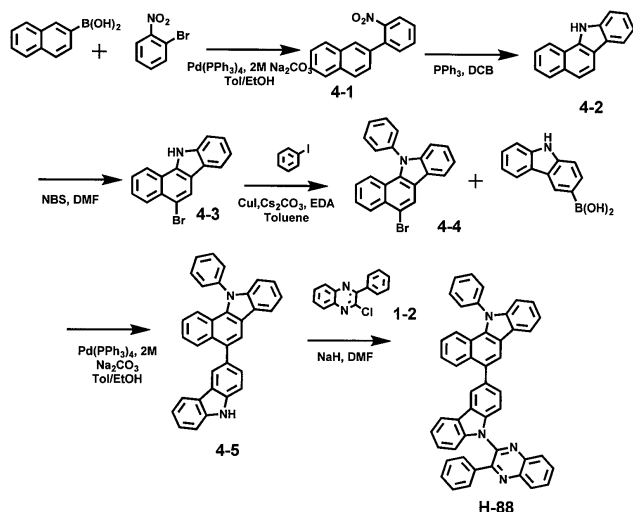
화합물 3-1의 합성

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 황산마그네슘을 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 3-1 15.4g (수율: 81 %)을 얻었다.

[0173] **화합물 H-55의 합성**

[0174] 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 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 H-55 2.5g (수율: 18%)을 얻었다.

[0175] [실시예 5]



[0176]

[0177] **화합물 4-1의 합성**

[0178] 플라스크에 나프탈렌-2-일 보론산30g (174.35 mmol), 2-브로모니트로벤젠 42g (209.22 mmol), Pd(PPh₃)₄ 10g (8.71 mmol), 및 2M Na₂CO₃ 425mL을 톨루엔 850mL 및 에탄올 425mL로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 황산마그네슘을 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 4-1 40g (수율: 93%)을 얻었다.

[0179] **화합물 4-2의 합성**

[0180] 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.

[0181] **화합물 4-3의 합성**

[0182] 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 여과 하였다. 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.

[0183] **화합물 4-4의 합성**

[0184] 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), Cs₂CO₃ (77g, 237.03 mmol), 및 톨루엔 400 mL으로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 황산마그네슘을 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 4-4 21.5g (수율: 74%)을 얻었다.

[0185] **화합물 4-5의 합성**

[0186] 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 황산마그네슘을 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크

로마토그래피로 분리하여 화합물 **4-5** 4.2g (수율: 17%)을 얻었다.

[0187] **화합물 H-88의 합성**

[0188] 화합물 1-2 2.6g(10.99 mmol), 화합물 4-5 4.2g(9.16 mmol), K_2CO_3 1.2g(9.16 mmol), 4-디메틸아미노피리딘(DMAP) 0.6g(4.58 mmol), 디메틸아세트아미드(DMA) 50mL를 4시간 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. 메틸렌 클로라이드(MC)로 추출하고 황산마그네슘으로 건조하였다. 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **H-88** 1.7 g(28 %)을 얻었다.

[0189] **[소자 실시예 1] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작**

[0190] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 구조의 OLED 소자를 제작하였다. 우선, OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터 얻어진 투명 전극 ITO 박막($15\Omega/\square$)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 $N^1, N^{1'}-([1,1'-\text{비페닐}]-4,4'-\text{디일})\text{비스}(N^1-(\text{나프탈렌-1-일})-N^4, N^4-\text{디페닐벤젠-1,4-디아민})$ 을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기관 위에 60nm 두께의 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 $N, N'-\text{디}(4-\text{비페닐})-N, N'-\text{디}(4-\text{비페닐})-4,4'-\text{디아미노비페닐}$ 을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 정공주입층 위에 20nm 두께의 정공전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 화합물 **H-1**을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 **D-88**을 넣은 후, 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)-1H-벤조[d]이미다졸을 넣고, 또 다른 셀에는 리튬 퀴놀레이트를 넣은 후, 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. 재료 별로 각 화합물은 10^{-6} torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0191] 그 결과, 4.1V의 전압에서 $11.1 \text{ mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며, $1050 \text{ cd}/\text{m}^2$ 의 적색 발광이 확인되었으며, 5000nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 90시간이었다.

[0192] **[소자 실시예 2] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작**

[0193] 발광재료로서 호스트에는 화합물 **H-2**, 도판트에는 화합물 **D-88**을 사용한것 외에는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다. 그 결과, 4.1V의 전압에서 $11.8 \text{ mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며, $1020 \text{ cd}/\text{m}^2$ 의 적색 발광이 확인되었다. 5000nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 100시간이었다.

[0194] **[소자 실시예 3] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작**

[0195] 발광재료로서 호스트에는 화합물 **H-3**, 도판트에는 화합물 **D-87**을 사용한것 외에는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다. 그 결과, 4.0V의 전압에서 $6.4 \text{ mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며, $1100 \text{ cd}/\text{m}^2$ 의 적색발광이 확인되었다. 5000nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 120시간이었다.

[0196] **[소자 실시예 4] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작**

[0197] 발광재료로서 호스트에는 화합물 **H-5**, 도판트에는 화합물 **D-88**을 사용한것 외에는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다. 그 결과, 4.1V의 전압에서 $12.2 \text{ mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며, $1150 \text{ cd}/\text{m}^2$ 의 적색발광이 확인되었다. 5000nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 100시간이었다.

[소자 실시예 5] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

발광재료로서 호스트에는 화합물 H-80, 도판트에는 화합물 D-87을 사용한것 외에는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다. 그 결과, 3.9V의 전압에서 6.7 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 1120 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 80시간이었다.

[소자 실시예 6] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

발광재료로서 호스트에는 화합물 H-88, 도판트에는 화합물 D-88을 사용한것 외에는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다. 그 결과, 3.7V의 전압에서 12.9 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 1200 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 최소 시간은 100시간이었다.

[소자 실시예 7] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

발광재료로서 호스트에는 화합물 H-55, 도판트에는 화합물 D-87을 사용한것 외에는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다. 그 결과, 3.8V의 전압에서 7.1 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 1100 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 120시간이었다.

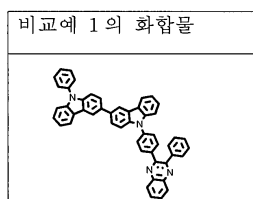
[소자 실시예 8] 본 발명에 따른 유기 전자재료용 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

발광재료로서 호스트에는 화합물 H-4, 도판트에는 화합물 D-88을 사용한것 외에는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다. 그 결과, 4.3V의 전압에서 11.4 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 1050 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 95시간이었다.

[비교예 1] 종래에 발광재료를 이용한 OLED 소자 제작

발광재료로서 호스트에는 하기 [표 1]의 화합물을 사용하고, 도판트에는 화합물 D-87을 사용한것 외에는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다. 그 결과, 3.5V의 전압에서 6.8 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 1000 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 20시간이었다.

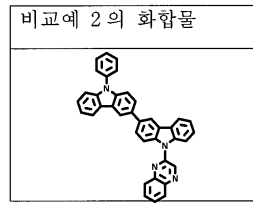
표 1



[비교예 2] 종래에 발광재료를 이용한 OLED 소자 제작

발광재료로서 호스트에는 화합물 [표 2]의 화합물을 사용하고, 도판트에는 화합물 D-88을 사용한것 외에는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다. 그 결과, 4.4V의 전압에서 11.8 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 1000 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 40시간이었다.

표 2



[0211]

[0212]

본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 우수한 구동 전압, 전류 효율 및 전력 효율을 유지하면서도, 구동 수명이 종래 기술에 비해 최소 400% 이상의 수준으로 현저히 탁월하게 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있었다.

专利名称(译)	标题：有机电致发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020150071624A	公开(公告)日	2015-06-26
申请号	KR1020140073623	申请日	2014-06-17
[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)	罗门哈斯电子材料KOREA LTD.		
当前申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料KOREA LTD.		
[标]发明人	LEE MI JA MOON DOO HYEON KANG HEE RYONG KANG HYUN JU KIM CHI SIK KIM NAM KYUN CHO YOUNG JUN KWON HYUCK JOO LEE KYUNG JOO KIM BITNARI		
发明人	LEE, MI JA MOON, DOO HYEON KANG, HEE RYONG KANG, HYUN JU KIM, CHI SIK KIM, NAM KYUN CHO, YOUNG JUN KWON, HYUCK JOO LEE, KYUNG JOO KIM, BITNARI		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C09K2211/1044 H01L51/0072 H01L51/50 H05B33/14		
代理人(译)	李昌勋		
优先权	1020130158371 2013-12-18 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

有机电致发光化合物和包括该有机电致发光器件的有机电致发光器件技术领域本发明涉及有机电致发光化合物和包括该有机电致发光化合物的有机电致发光器件。 当使用有机电致发光化合物时，可以制造需要低驱动电压并且具有优异的电流效率，优异的功率效率以及显著提高的工作寿命的有机电致发光器件。 有机电致发光化合物由化学式1表示。

