

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2017-0031019 (43) 공개일자 2017년03월20일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) <i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>C07D 401/04</i> (2006.01) <i>C07D 403/04</i> (2006.01) <i>C07D 487/14</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01) (52) CPC특허분류 <i>C09K 11/06</i> (2013.01) <i>C07D 401/04</i> (2013.01) (21) 출원번호 10-2016-0089063 (22) 출원일자 2016년07월14일 심사청구일자 없음 (30) 우선권주장 1020150128139 2015년09월10일 대한민국(KR)		(71) 출원인 롬엔드하스전자재료코리아유한회사 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동) (72) 발명자 문두현 경기도 화성시 병점3로 117 906동 1304호 심재훈 서울시 영등포구 국제금융로 7길 20, 1동 606호 (74) 대리인 장훈

전체 청구항 수 : 총 6 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 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 구동 전압이 낮고 전류 효율 및 전력 효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조하는데 효과적이다.

(52) CPC특허분류

C07D 403/04 (2013.01)

C07D 487/14 (2013.01)

H01L 51/50 (2013.01)

C09K 2211/1011 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

C09K 2211/1044 (2013.01)

C09K 2211/1059 (2013.01)

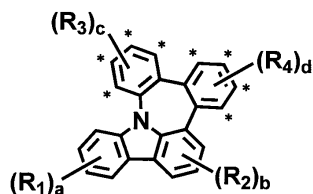
명세서

청구범위

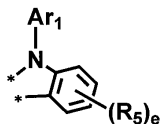
청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



[화학식 2]



상기 화학식 1에서의 하나의 페닐고리 중 각각의 인접한 두개의 *가, 상기 화학식 2에서의 두개의 *와 결합하고,

상기 화학식 1 및 2에서,

R₁ 내지 R₅는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 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, -NR₆R₇ 또는 -SiR₈R₉R₁₀이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 치환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

R₆ 내지 R₁₀은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 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, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이며;

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

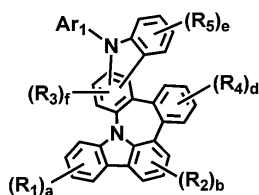
a, c, d 및 e는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이며, b는 1 내지 3의 정수이고;

상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

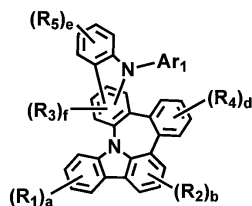
청구항 2

제1항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 화합물이 화학식 3 내지 6 중 어느 것으로 표시되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 3]

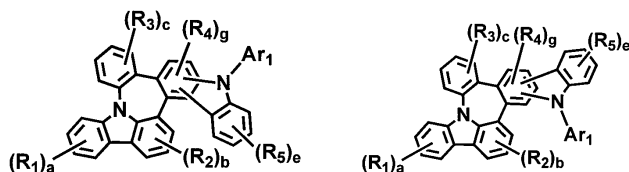


[화학식 4]



[화학식 5]

[화학식 6]



상기 화학식 3 내지 6에서,

f 및 g는 각각 독립적으로 1 또는 2의 정수이고,

R₁ 내지 R₅, Ar₁, a, b, c, d 및 e는 제1항에서 정의된 것과 같다.

청구항 3

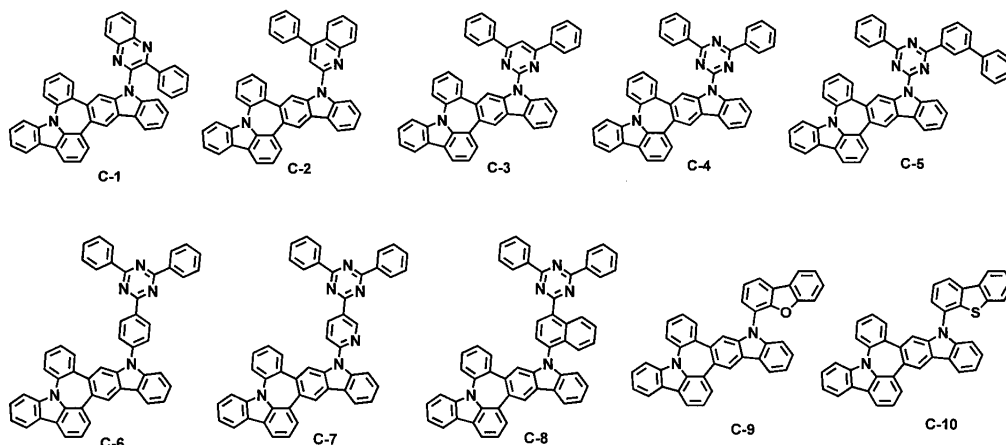
제1항에 있어서, 상기 R₁ 내지 R₁₀ 및 Ar₁에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환된 (3-7 원)헤테로시클로알킬, 치환된 (C6-C30)아릴, 치환된 (3-30원)헤테로아릴, 및 치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리의 치환체가 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30 원)헤테로아릴, (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는, 유기 전계 발광 화합물.

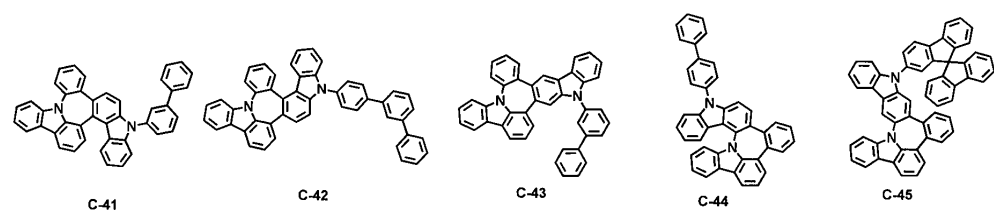
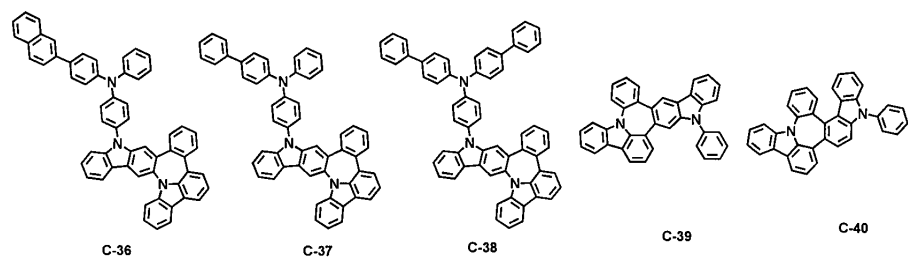
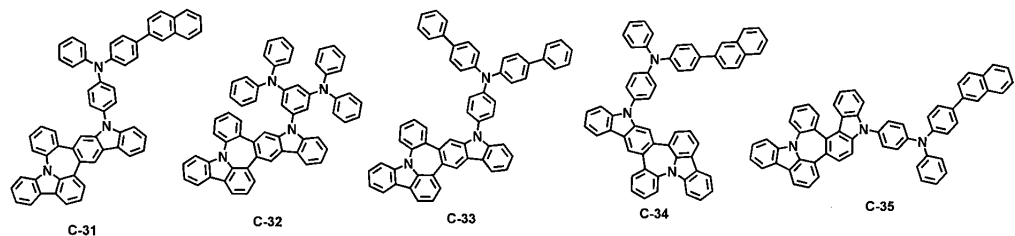
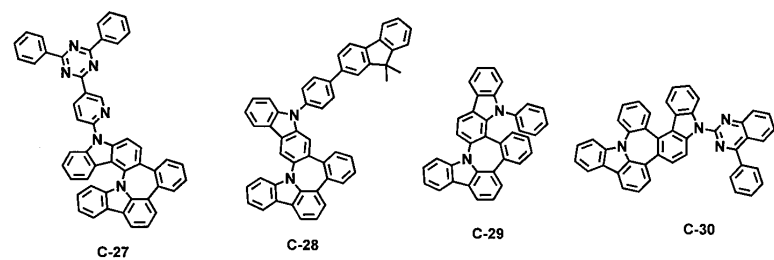
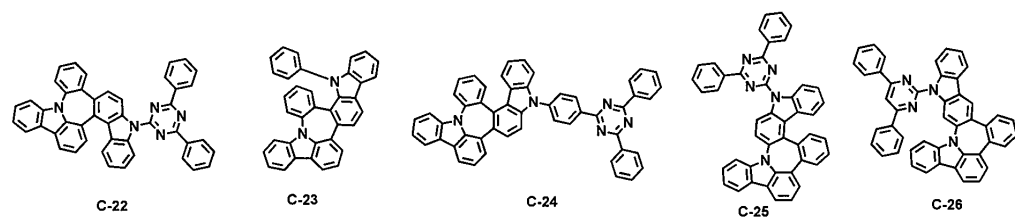
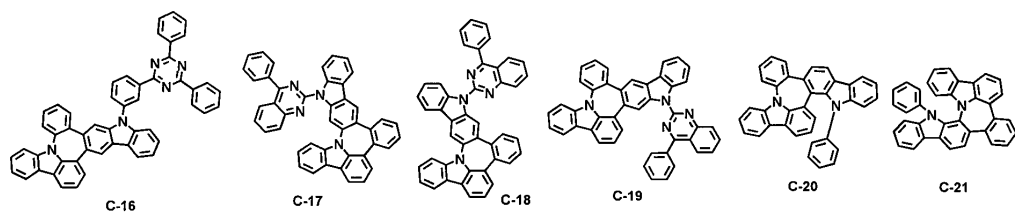
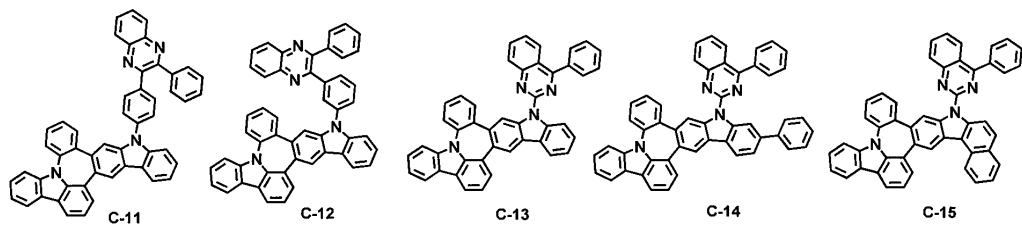
청구항 4

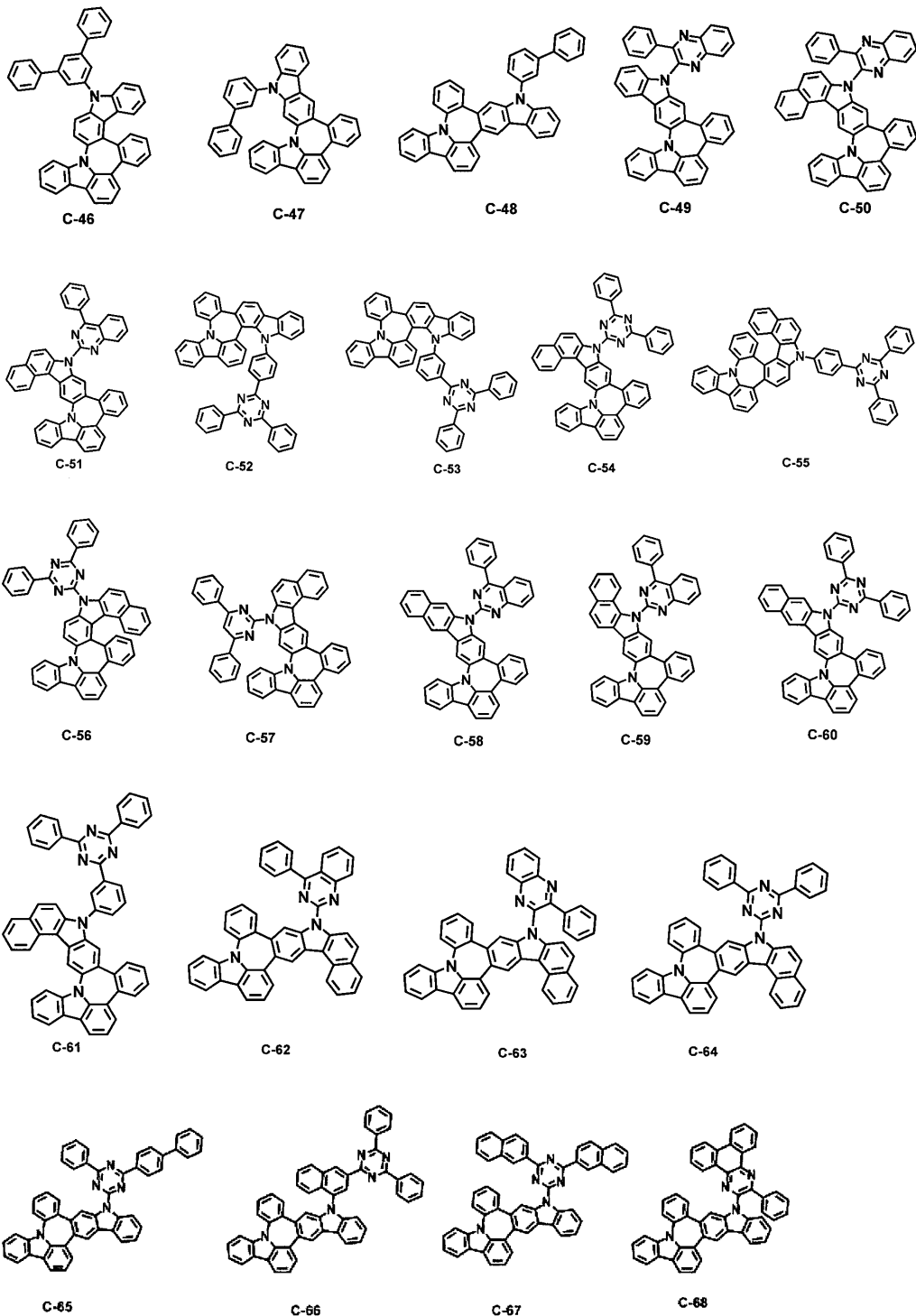
제 1항에 있어서, Ar₁은 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 안트라세닐, 치환 또는 비치환된 테페닐, 치환 또는 비치환된 페닐나프틸, 치환 또는 비치환된 나프틸페닐, 치환 또는 비치환된 플루오레닐, 치환 또는 비치환된 스피로 비플루오레닐, 치환 또는 비치환된 피리딜, 치환 또는 비치환된 피리미딘일, 치환 또는 비치환된 트리아진일, 치환 또는 비치환된 퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일에서 선택되는, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는, 유기 전계 발광 화합물.







청구항 6

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

발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

[0002] 전계 발광 소자(electroluminescence device: EL 소자)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트

가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 전계 발광 소자(organic electroluminescence device)는 유기 발광재료에 전기를 가해 전기 에너지를 빛으로 바꾸는 소자로서, 통상 양극(애노드) 및 음극과 이들 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 유기 전계 발광 소자의 유기물층은 정공 주입층, 정공 전달층, 전자 차단층, 발광층(호스트 및 도판트 재료 포함), 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층, 전자 주입층 등으로 이루어질 수 있으며, 유기물층에 사용되는 재료는 기능에 따라 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료, 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료 등으로 나뉜다. 이러한 유기 전계 발광 소자에서는 전압 인가에 의해 양극에서 정공이, 음극에서 전자가 발광층에 주입되고, 정공과 전자의 재결합에 의해 에너지가 높은 엑시톤이 형성된다. 이 에너지에 의해 유기 발광 화합물이 여기 상태로 되며, 유기 발광 화합물의 여기 상태가 기저 상태로 돌아가면서 에너지를 빛으로 방출하여 발광하게 된다.

[0004] 유기 전계 발광 소자의 발광재료는 소자의 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인으로서, 발광재료는 양자 효율이 높고 전자와 정공의 이동도가 커야 하고, 형성된 발광재료층은 균일하고 안정해야 한다. 이러한 발광재료는 발광색에 따라 청색, 녹색 또는 적색 발광재료로 나뉘고, 추가로 황색 또는 주황색 발광재료도 있다. 또한, 발광재료는 기능적인 측면에서 호스트 재료와 도판트 재료로 구분될 수 있다. 최근에 고효율 및 장수명의 유기 전계 발광 소자의 개발이 시급한 과제로 대두되고 있는데, 특히 중대형 OLED 패널에서 요구하고 있는 EL 특성 수준을 고려해 볼 때 기존의 발광재료에 비해 매우 우수한 재료의 개발이 시급한 실정이다. 이를 위하여 고체 상태의 용매 및 에너지 전달자 역할을 하는 호스트 물질의 바람직한 특성은 순도가 높아야 하며, 진공증착이 가능하도록 적당한 분자량을 가져야 한다. 또한 유리전이온도와 열분해온도가 높아 열적 안정성을 확보해야 하며, 장수명화를 위해 높은 전기화학적 안정성이 요구되며, 무정형 박막을 형성하기 용이해야 하며, 인접한 다른 층의 재료들과는 접착력이 좋은 반면 층간 이동은 하지 않아야 한다.

[0005] 일본 공개특허공보 제2014-160813호는 피롤환과 방향족 고리와 7 원 고리가 축합해서 이루어지는 질소 함유 헤테로 고리 화합물, 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 개시하고 있다. 그러나, 상기 문헌은 기본 골격에 아릴을 융합하거나, 본 발명과는 융합 위치가 다른 화합물을 개시하고 있을 뿐, 본원의 화합물에 대해서는 전혀 개시하고 있지 않다.

[0006] 이에, 본원 발명자들은 유기 전계 발광 소자에 종래의 유기 전계 발광 화합물에 비해 우수한 성능을 제공할 수 있는 새로운 화합물을 찾고자 연구한 결과, 본원 발명의 화합물이 발광 효율 및 전력 효율이 높고 우수한 소자 성능을 제공할 수 있음을 밝혀냈다.

선행기술문헌

특허문헌

[0007] (특허문헌 0001) 일본 공개특허공보 제2014-0160813호(2014. 9. 4. 발행)

발명의 내용

해결하려는 과제

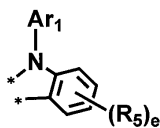
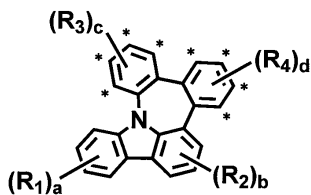
[0008] 본 발명의 목적은 구동 전압이 낮고 발광 효율 및 전력 효율이 우수하며 구동 수명이 현저히 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조하는데 효과적인 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

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

[0010] [화학식 1]

[화학식 2]



[0011]

[0012] 상기 화학식 1에서 하나의 페닐고리 중 각각의 인접한 두개의 *가, 상기 화학식 2에서의 두개의 *와 결합하고,

[0013] 상기 화학식 1 및 2에서,

[0014] R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 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, $-NR_6R_7$ 또는 $-SiR_8R_9R_{10}$ 이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

[0015] R_6 내지 R_{10} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 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, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이며;

[0016] Ar_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고;

[0017] a, c, d 및 e는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이며, b는 1 내지 3의 정수이고;

[0018] 상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

발명의 효과

[0019] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 발광층의 호스트로 사용했을 때 종래의 유기 전계 발광 화합물과 대비하여 구동 전압이 낮고, 발광 효율과 수명 면에서 상당히 개선되는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다는 장점을 보인다. 특히, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 구동 전압이 낮고 높은 전류 및 전력 효율을 나타내는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0020] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방식으로 해석되어서는 안된다.

[0021] 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물, 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

[0022] 상기 화학식 1 및 2에서, R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 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, $-NR_6R_7$ 또는 $-SiR_8R_9R_{10}$ 이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고; 바람직하게는, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C20)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C20)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴, 또는 $-NR_6R_7$ 이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C20) 단일환 또는

다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 치환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고; 더욱 바람직하게는, 각각 독립적으로 수소, 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이거나, 인접한 치환체와 연결되어 비치환된 (C3-C18) 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며; 구체적으로는, 각각 독립적으로 수소 또는 비치환된 페닐이거나, 인접한 치환체와 연결되어 비치환된 벤젠 고리를 형성할 수 있다.

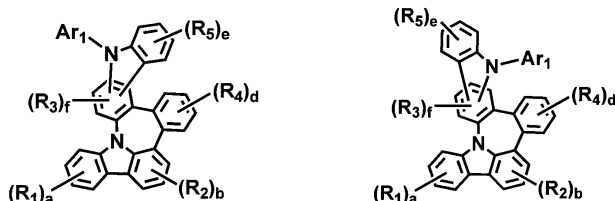
[0023] 상기 화학식 1 및 2에서, R_6 내지 R_{10} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이며; 바람직하게는, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C20)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C20)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴이다.

[0024] 상기 화학식 2에서, Ar_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고; 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴이고; 더욱 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 질소, 산소 또는 황 함유 (5-20원)헤테로아릴이고; 구체적으로는 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 안트라세닐, 치환 또는 비치환된 테페닐, 치환 또는 비치환된 페닐나프틸, 치환 또는 비치환된 나프틸페닐, 치환 또는 비치환된 플루오레닐, 치환 또는 비치환된 스피로 비플루오레닐, 치환 또는 비치환된 피리딜, 치환 또는 비치환된 피리미딘일, 치환 또는 비치환된 트리아진일, 치환 또는 비치환된 퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일일 수 있고, 이들의 치환기는 (C1-C10)알킬, 페닐, 비페닐, 나프틸, 안트라세닐, 테페닐, 페닐나프틸, 나프틸페닐, (C1-C10)알킬 또는 (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 플루오레닐, (C1-C10)알킬 또는 (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 피리딜, (C1-C10)알킬 또는 (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 피리미딘일, (C1-C10)알킬 또는 (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 트리아진일, (C1-C10)알킬 또는 (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 퀴놀릴, (C1-C10)알킬 또는 (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 이소퀴놀릴, (C1-C10)알킬 또는 (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐, (C1-C10)알킬 또는 (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 및 디(C6-C30)아릴 아미노에서 선택되는 1종 이상일 수 있다.

[0025] 상기 화학식 1 및 2에서, a, c, d 및 e는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이며, b는 1 내지 3의 정수이다. 바람직하게는, a 내지 e는 각각 독립적으로 1 또는 2일 수 있다.

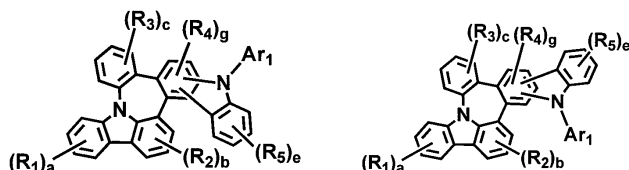
[0026] 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 3 내지 6으로 표시될 수 있다.

[0027] [화학식 3] [화학식 4]



[0028]

[0029] [화학식 5] [화학식 6]



[0030]

[0031] 상기 화학식 3 내지 6에서, f 및 g는 각각 독립적으로 1 또는 2의 정수이다.

[0032] 상기 화학식 3 내지 6에서, R_1 내지 R_5 , Ar_1 , a, b, c, d 및 e는 화학식 1에서 정의된 것과 같다.

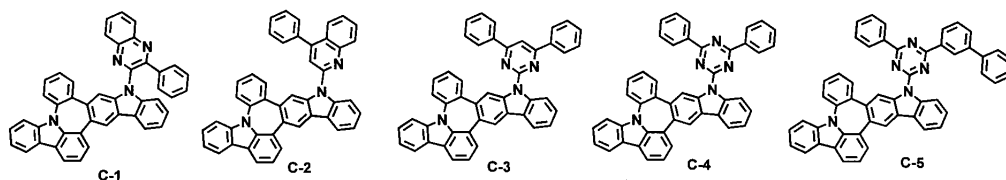
[0033] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은쇄를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 20개인 것이 바람직하고, 1 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 3급-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알케닐"은쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알키닐"은쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알키닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알키닐의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "(C1-C30)알콕시"는쇄를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알콕시를 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 20개인 것이 바람직하고, 1 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알콕시의 예로서, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로폭시, 1-에틸프로폭시 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 여기에서 환 골격 탄소수가 3 내지 20개인 것이 바람직하고, 3 내지 7개인 것이 더 바람직하다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(3-7원)헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 3 내지 7개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 O, S 및 N에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴(렌)"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일 환계 또는 융합 환계 라디칼을 의미하고, 여기에서 환 골격 탄소수가 6 내지 20개인 것이 바람직하고, 6 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 상기 아릴은 스피로 구조를 가진 것을 포함할 수 있다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 플루오레닐, 페난트레닐, 안트라세닐, 인테닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페틸레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐 등이 있다. 본원에서 "(3-30원)헤테로아릴(렌)"은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 여기에서 환 골격 원자수가 3 내지 20개인 것이 바람직하고, 3 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합 환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴기 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, 페녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로젠"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0034] 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. 본원의 R₁ 내지 R₁₀ 및 Ar₁에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환된 (3-7 원)헤테로시클로알킬, 치환된 (C6-C30)아릴, 치환된 (3-30원)헤테로아릴, 및 치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환체 또는 방향족 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30 원)헤테로아릴, (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이며, 바람직하게는, 각각 독립적으로 비치환된 (C6-C20)아릴, (C6-C20)아릴로 치환된 (5-20 원)헤테로아릴, 디(C6-C20)아릴아미노, 또는 디(C1-C20)알킬(C6-C20)아릴이고, 더욱 바람직하게는, 각각 독립적으로 비치환된 (C6-C18)아릴, (C6-C12)아릴로 치환된 (5-18 원)헤테로아릴, 디(C6-C18)아릴아미노, 또는 디(C1-C10)알킬(C6-C18)아릴이며, 더욱 구체적으로는, 각각 독립적으로 비치환된 페닐, 비치환된 비페닐, 페닐로 치환된 트리아진일, 페닐로 치환된 퀴녹살리닐, 디(C6-C18)아릴아미노, 또는 디메틸플루오레닐일 수 있다.

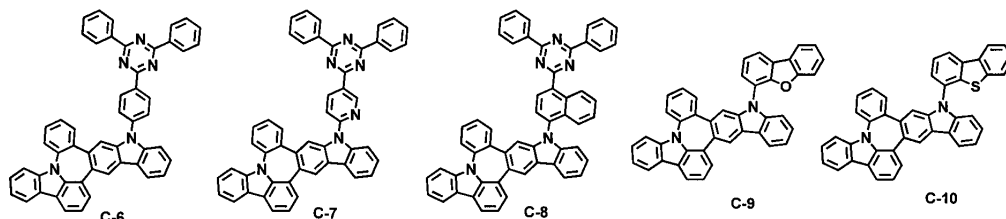
[0035] 본원 발명의 일 양태에 따르면, 상기 화학식 1 및 2에서, R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C20)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C20)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴, 또는 $-NR_6R_7$ 이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C20) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 치환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고; 여기서 R_6 및 R_7 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C20)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C20)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴이며; Ar_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴이고; a 내지 e는 각각 독립적으로 1 또는 2이다.

[0036] 본원 발명의 다른 일 양태에 따르면, 상기 화학식 1 및 2에서, R_1 내지 R_4 는 각각 독립적으로 수소이고; R_5 는 수소, 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이거나, 인접한 치환체와 연결되어 비치환된 (C3-C18) 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며; Ar_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고; a, c, d 및 e는 1이고, b는 2이다.

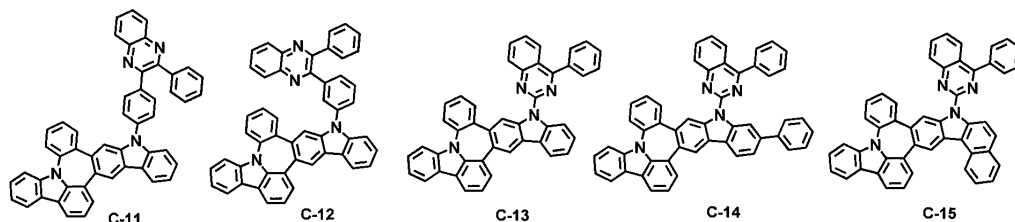
[0037] 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



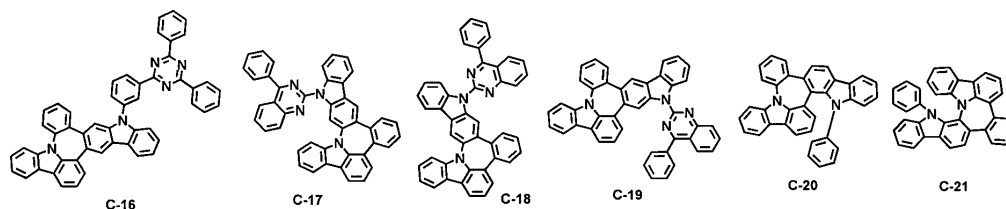
[0038]



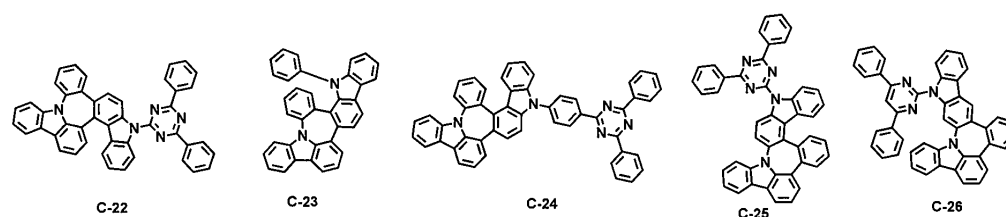
[0039]



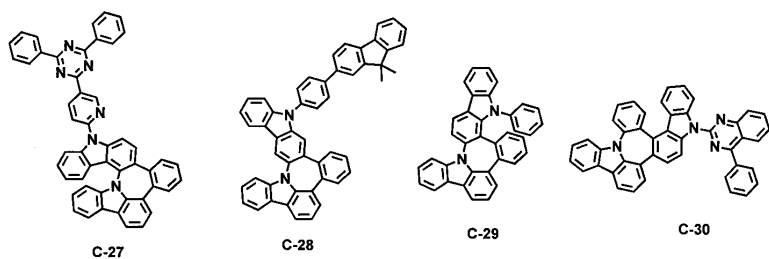
[0040]



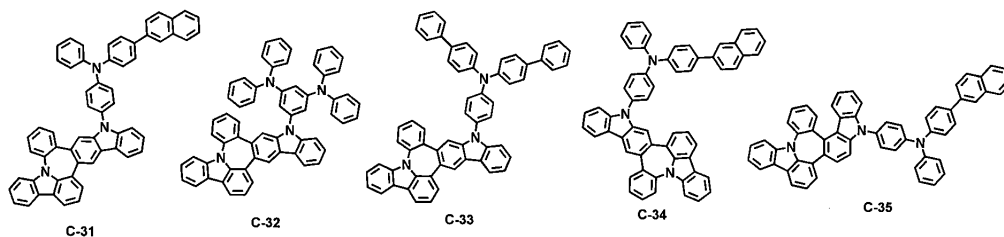
[0041]



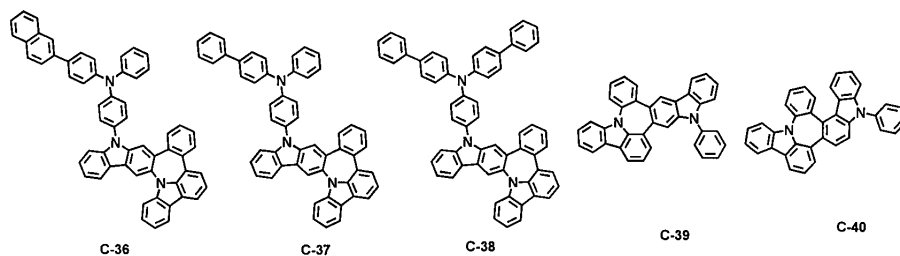
[0042]



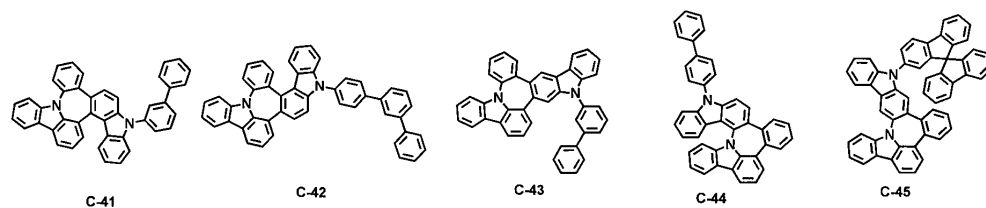
[0043]



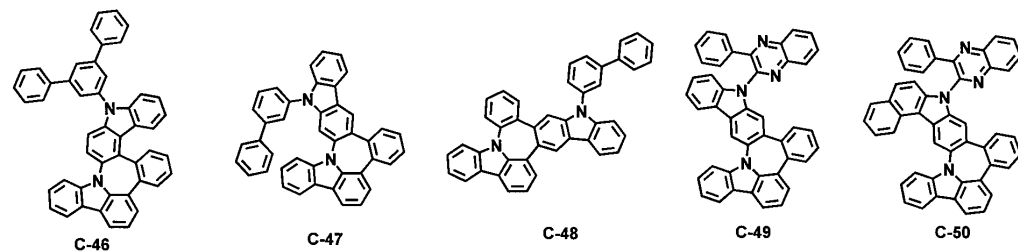
[0044]



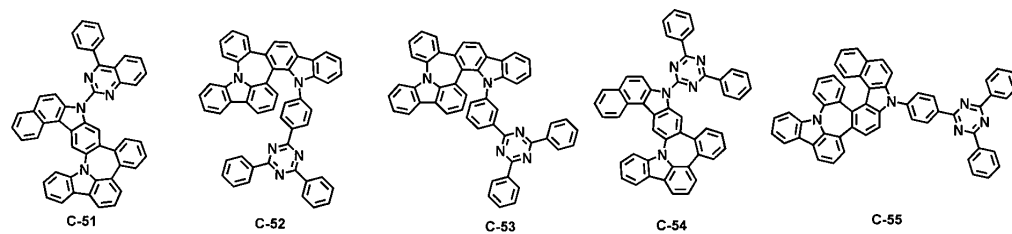
[0045]



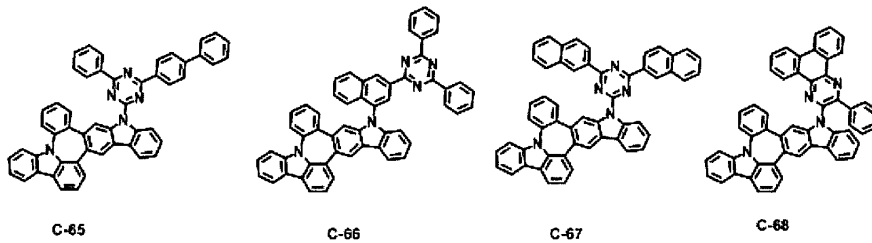
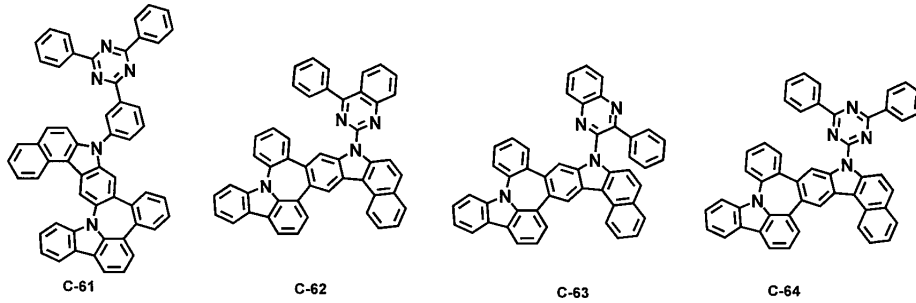
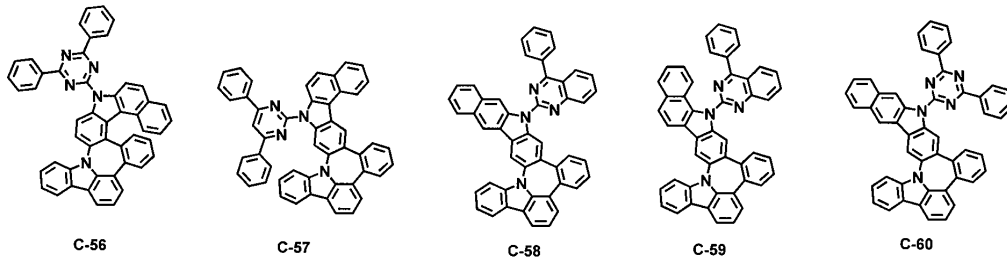
[0046]



[0047]



[0048]



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

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

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

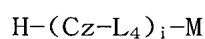
상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공주입층, 정공전달층, 정공보조층, 발광보조층, 전자전달층, 전자버퍼층, 전자주입층, 계면층(interlayer), 정공차단층 및 전자차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다. 여기서, 상기 정공보조층 또는 발광보조층은 정공전달층과 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도를 조절하는 층이다. 상기 정공보조층 또는 발광 보조층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및 수명의 개선 효과를 갖는다.

본 발명의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층에 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는 상기 발광층은 하나 이상의 도판트를 포함할 수 있으며, 필요한 경우, 본 발명의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다.

본 발명은 추가의 양태로 유기 전계 발광 소자 제조용 재료를 제공한다. 상기 재료는 제1 호스트 재료 및 제2 호스트 재료를 포함할 수 있으며, 상기 제1 호스트 재료는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 포함한다. 이때 제1 호스트 재료와 제2 호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

상기 제2 호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용가능하며, 바람직하게는 하기 화학식 7 내지 11로 표시되는 인광 호스트로부터 선택하여 사용할 수 있다.

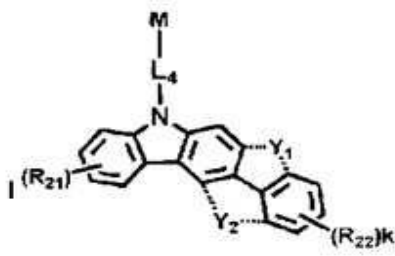
[화학식 7]



[0061] [화학식 8]

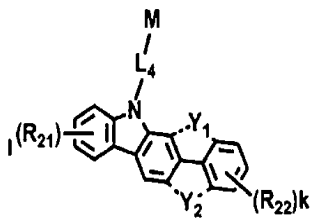
[0062] $H-(Cz)_j-L_4-M$

[0063] [화학식 9]



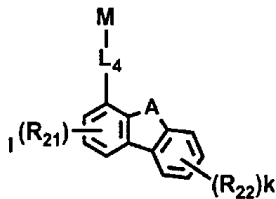
[0064]

[0065] [화학식 10]



[0066]

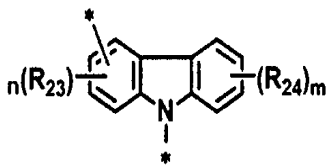
[0067] [화학식 11]



[0068]

[0069] 상기 화학식 7 내지 11에서,

[0070] Cz는 하기 구조이며,



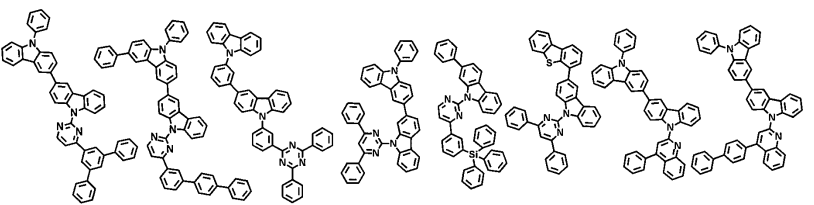
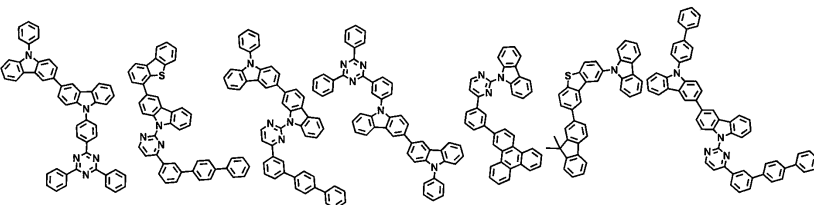
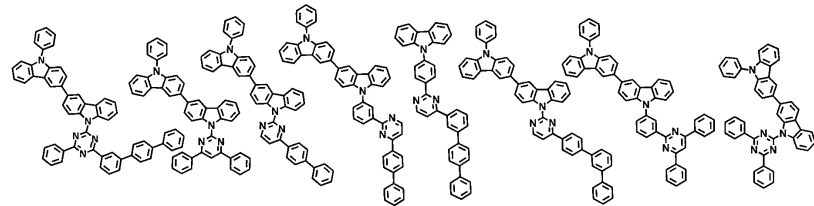
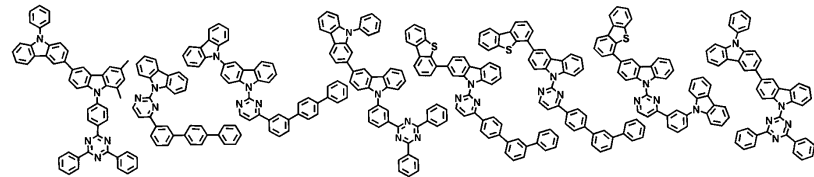
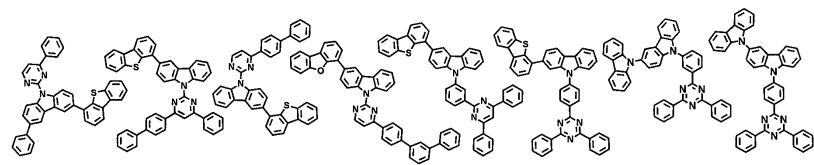
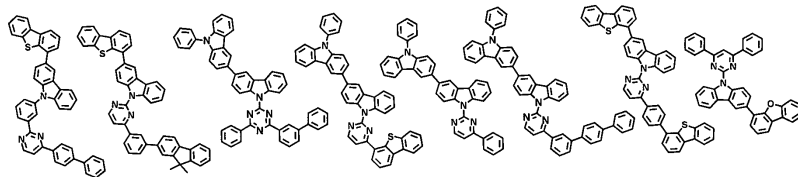
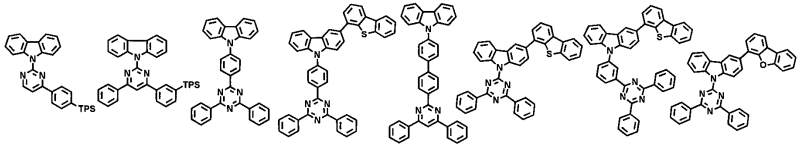
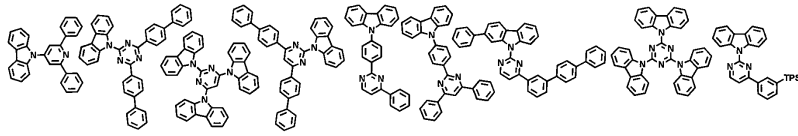
[0071]

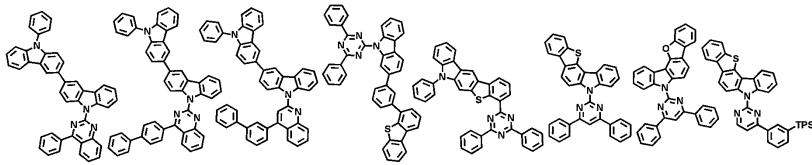
[0072] A는 -O- 또는 -S-이고;

[0073] R_{21} 내지 R_{24} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴 또는 $-SiR_{25}R_{26}R_{27}$ 이며, R_{25} 내지 R_{27} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; L_4 는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이며; M은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고; Y_1 및 Y_2 는 각각 독립적으로 -O-, -S-, -N(R_{41})- 또는 -C(R_{42})(R_{43})-이며, Y_1 과 Y_2 가 동시에 존재하지는 않고; R_{41} 내지 R_{43} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, R_{42} 및 R_{43} 은 동일하거나 상이할 수 있고; i 및 j는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고; k, l, m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며; i, j, k, l, m 또는 n이 2 이상의 정수인 경우 각각의 (Cz- L_4), 각각의 (Cz), 각각의

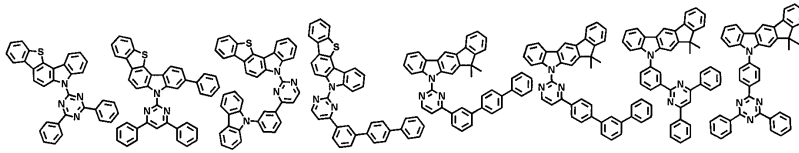
R₂₁, 각각의 R₂₂, 각각의 R₂₃ 또는 각각의 R₂₄는 동일하거나 상이할 수 있다.

구체적으로 상기 제2 호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같다.

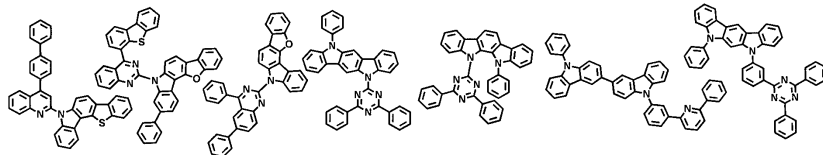




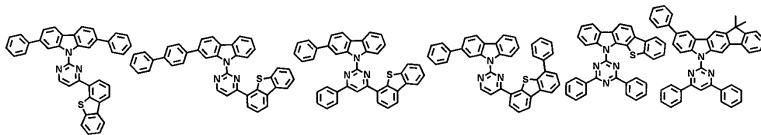
[0083]



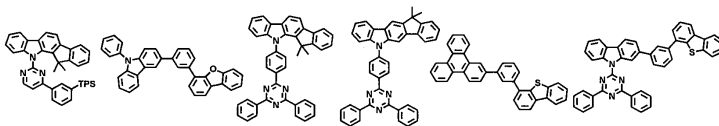
[0084]



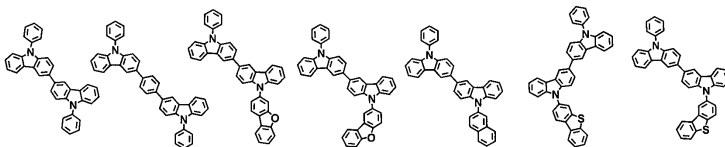
[0085]



[0086]



[0087]



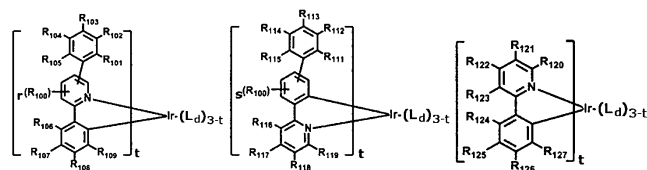
[0088]

[0089] [여기서, TPS는 트리페닐실릴기이다]

[0090] 본 발명에 사용되는 도판트로는 하나 이상의 인광 도판트가 바람직하다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물이 바람직하고, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물이 더욱 바람직하며, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물이 더더욱 바람직하다.

[0091] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 101 내지 103으로 표시되는 화합물을 사용할 수 있다.

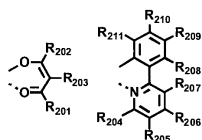
[0092] [화학식 101] [화학식 102] [화학식 103]



[0093]

[0094] 상기 화학식 101 내지 103에서,

[0095] L_d 는 하기 구조에서 선택되고;



[0096]

[0097] R_{100} 은 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이며;

[0098]

R_{101} 내지 R_{109} 및 R_{111} 내지 R_{123} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고; R_{106} 내지 R_{109} 는 각각 독립적으로 인접 치환기와 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어, 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며; R_{120} 내지 R_{123} 은 각각 독립적으로 인접 치환기와 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어, 알킬 또는 아릴로 치환 또는 비치환된 퀴놀린 형성이 가능하며;

[0099]

R_{124} 내지 R_{127} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이며; R_{124} 내지 R_{127} 은 각각 독립적으로 인접 치환기와 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어, 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

[0100]

R_{201} 내지 R_{211} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-30)아릴이고, R_{201} 내지 R_{211} 은 각각 독립적으로 인접 치환기와 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어, 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

[0101]

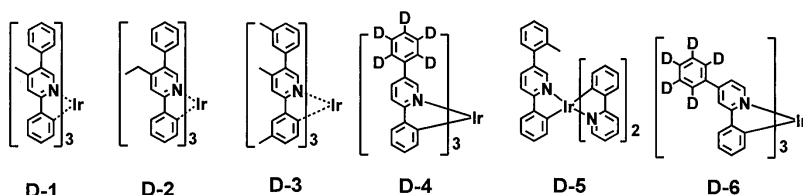
r 및 s 는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며, r 및 s 가 각각 2 이상의 정수인 경우 각각의 R_{100} 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

[0102]

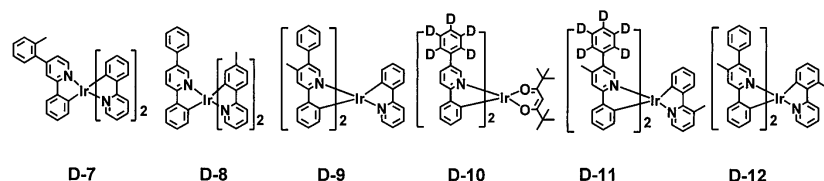
t 는 1 내지 3의 정수이다.

[0103]

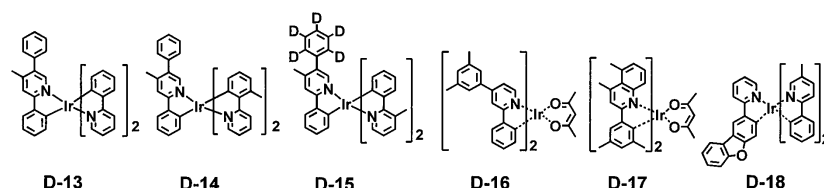
상기 인광 도판트의 구체적인 예로는 다음과 같다.



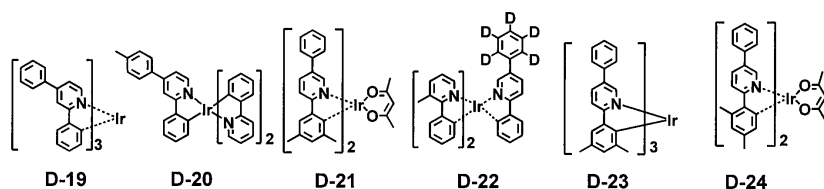
[0104]



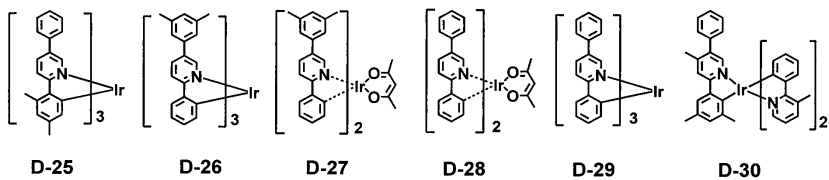
[0105]



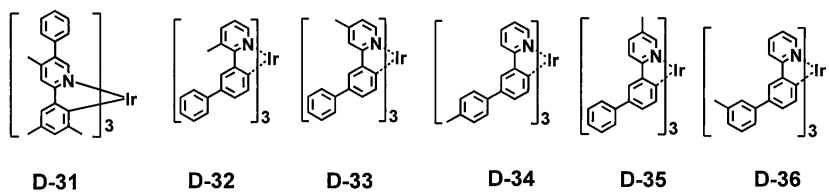
[0106]



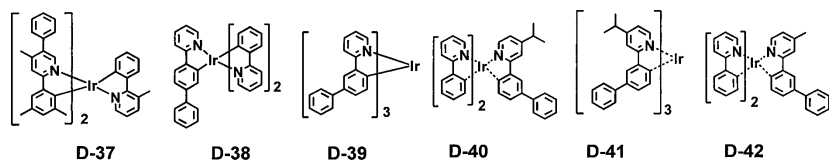
[0107]



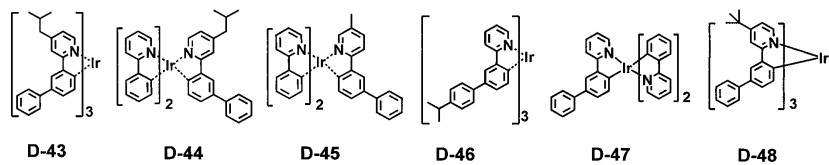
[0108]



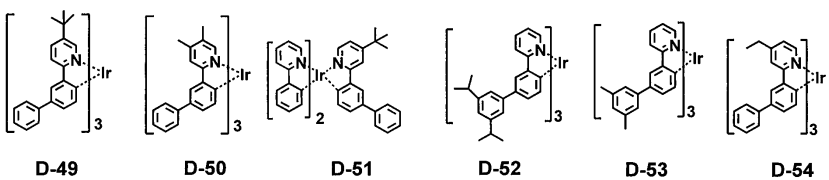
[0109]



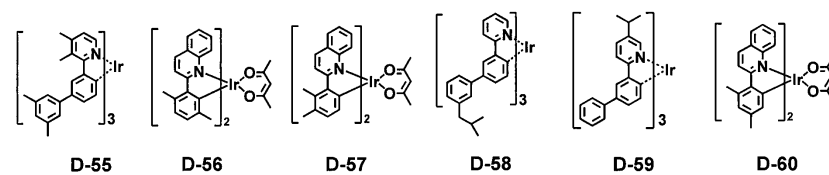
[0110]



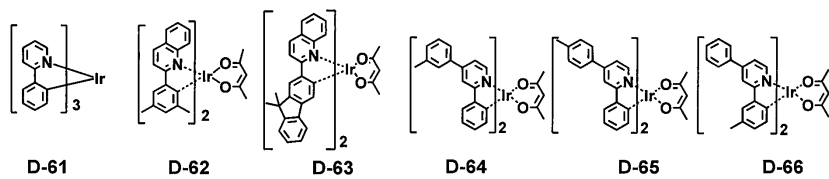
[0111]



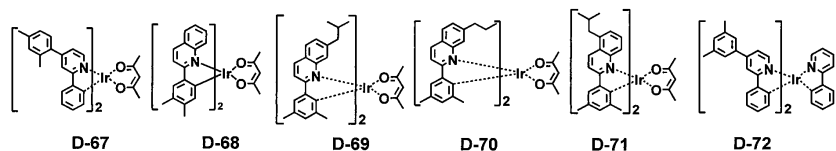
[0112]



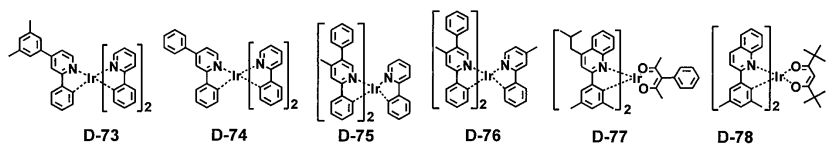
[0113]



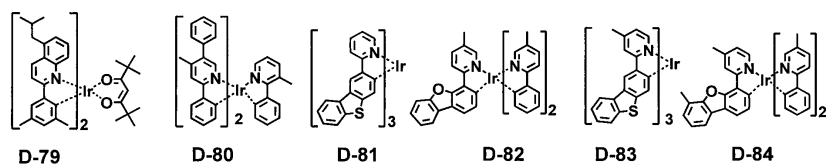
[0114]



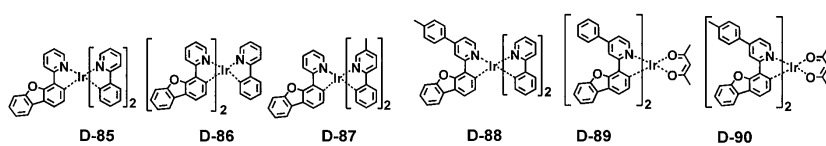
[0115]



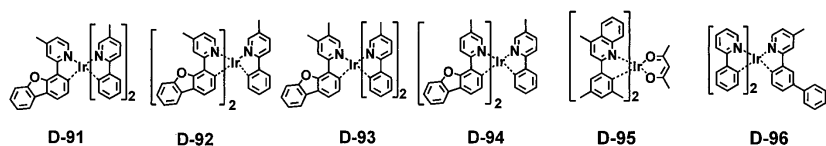
[0116]



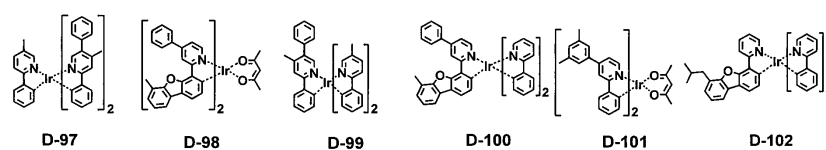
[0117]



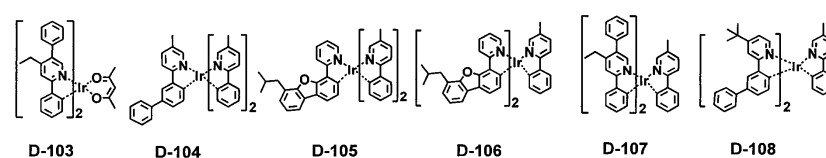
[0118]



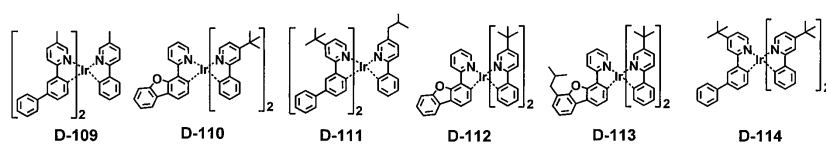
[0119]



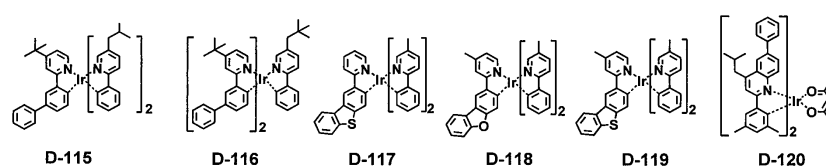
[0120]



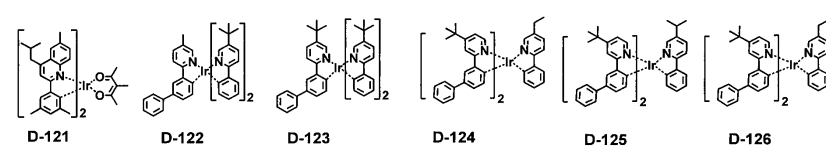
[0121]



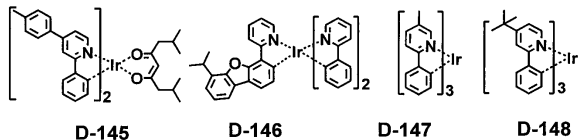
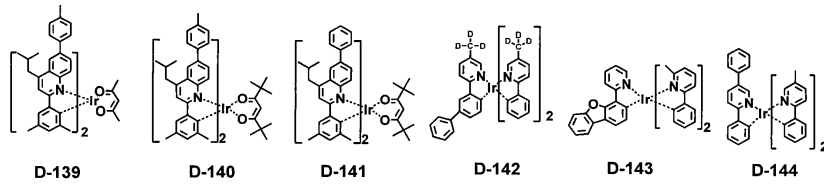
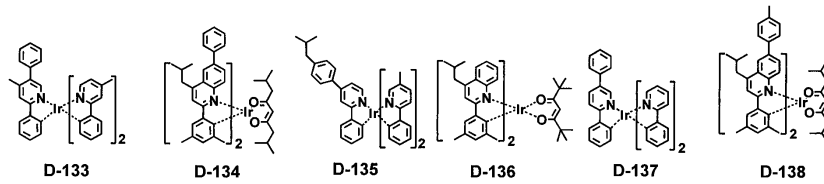
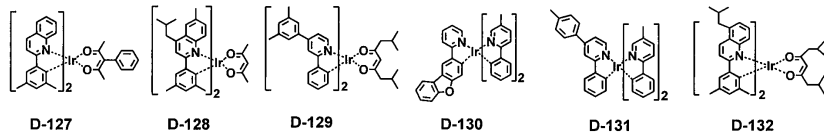
[0122]



[0123]



[0124]



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

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

또한, 본 발명의 상기 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 이외에 당업계에 알려진 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함하는 발광층을 하나 이상 더 포함함으로써 백색 발광을 할 수 있다. 또한, 필요에 따라, 황색 또는 오렌지색 발광층을 더 포함할 수도 있다.

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측 표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 하나 이상의 층(이하, 이들을 “표면층”이라고 지칭함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 음극 표면에 할로젠화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 소자의 구동 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 SiO_X ($1 \leq X \leq 2$), AlO_X ($1 \leq X \leq 1.5$), SiON , SiAlON 등이 있고, 할로젠화 금속의 바람직한 예로는 LiF , MgF_2 , CaF_2 , 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등이 있다.

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 수송 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 수송 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 수송 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 수송하기 용이해진다. 또한, 정공 수송 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 수송하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도판트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진 백색 발광의 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

본 발명의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막

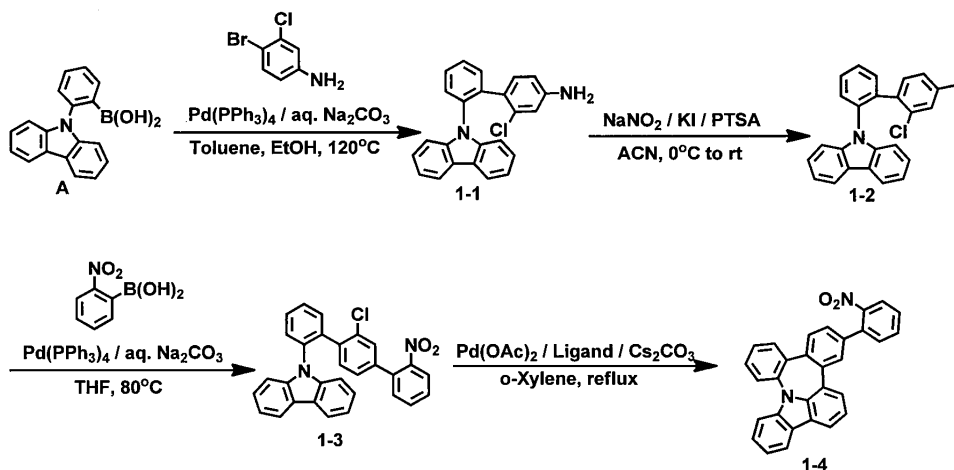
법이나 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

[0135] 습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로푸란, 디옥산 등의 적절한 용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 각 층을 형성하는 재료가 용해 또는 분산될 수 있고, 성막성에 문제가 없는 것이라면 어느 것이어도 된다.

[0136] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 화합물, 이의 제조 방법 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자의 발광 특성을 설명한다.

[실시예 1] 화합물 C-13의 합성

[0138]



[0139]

[0140]

1) 화합물 1-1의 합성

[0142] 반응용기에 화합물 A(22g, 74.88mmol), 4-브로모-3-클로로아닐린(13g, 62.40mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(2.2g, 1.87mmol), 탄산나트륨(17g, 156.00mmol), 톨루엔(310mL) 및 에탄올(80mL)을 넣고, 증류수(80mL)를 첨가한 후 120°C에서 6시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-1(14g, 수율: 61%)을 얻었다.

2) 화합물 1-2의 합성

[0144] 반응용기에 화합물 1-1(14g, 37.95mmol)을 아세트니트릴(380mL)에 넣은 뒤, 0°C에서 파라-톨루엔설폰산 모노수화물(22g, 113.86mmol)을 첨가하였다. 10분 후 아질산나트륨(5g, 75.90mmol) 및 요오드화칼륨(16g, 94.88mmol)을 증류수(280mL)에 녹인 후, 혼합물에 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 반응온도를 상온으로 서서히 올려주고 4시간 동안 추가로 교반하였다. 반응이 끝나면 반응 용액에 티오황산나트륨을 넣어 반응을 종료하고, 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-2(9.6g, 수율: 53%)를 얻었다.

3) 화합물 1-3의 합성

[0146] 반응용기에 화합물 1-2(8.5g, 17.72mmol), 2-니트로페닐 보론산(4.4g, 26.85mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.6g, 0.53mmol), 탄산나트륨(4.7g, 44.30mmol) 및 테트라하이드로푸란(90mL)을 넣고, 증류수(22 mL)를 첨가한 후 80°C로 4시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고

에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **1-3**(7.5g, 수율: 89%)를 얻었다.

[0147] 4) 화합물 1-4의 합성

[0148] 반응용기에 화합물 **1-3**(7g, 14.74mmol), 팔라듐(II) 아세테이트(0.4g, 1.47mmol), 트리시클로헥실포스포늄 테트라플루오로보레이트(1.1g, 2.94mmol), 탄산세슘(15g, 44.22mmol) 및 *o*-자일렌(74mL)를 넣고 4시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **1-4**(6.3g, 수율: 91%)를 얻었다.

[0149] 5) 화합물 1-5의 합성

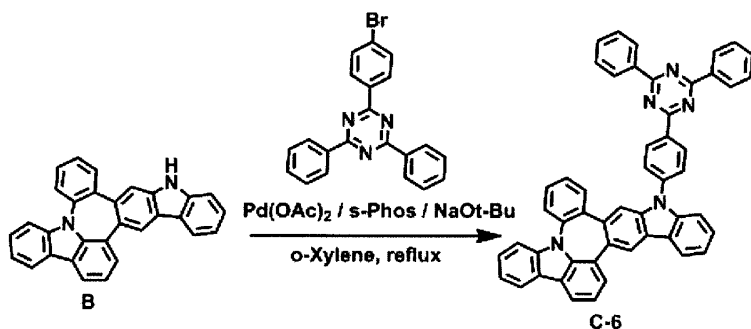
[0150] 반응용기에 화합물 **1-4**(6.3g, 14.37mmol), 트리페닐포스핀(11.3g, 43.10mmol) 및 1,2-디클로로벤젠(72mL)를 넣고, 200℃로 8시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 감압증류하여 용매를 제거한 후, 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **1-5**(1.2g, 수율: 21%)를 얻었다.

[0151] 6) 화합물 C-13의 합성

[0152] 반응용기에 화합물 **1-5**(1.2g, 2.95mmol)을 디메틸포름알데하이드(15mL)로 녹인 후, 0℃에서 수소화나트륨(0.2g, 4.43mmol)을 천천히 적가하였다. 30분 동안 교반 후 2-클로로-4-페닐퀴나졸린(0.9g, 3.54mmol)을 적가하였다. 적가가 끝나면 반응온도를 상온으로 올려주고 7시간 동안 추가로 교반하였다. 반응이 끝나면 반응 용액 메탄올을 넣어 반응을 종료하고, 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **C-13**(0.8g, 수율: 44%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
C-13	610.70	404nm	507nm	260℃

[0154] [실시예 2] 화합물 C-6의 합성

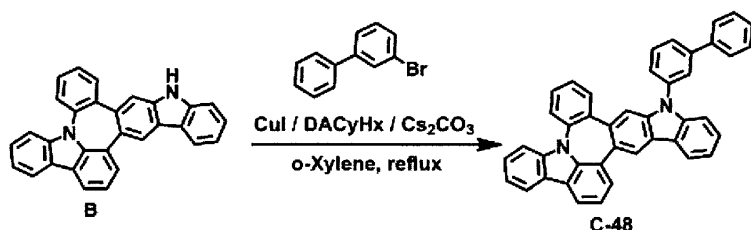


[0156] 1) 화합물 C-6의 합성

[0157] 반응용기에 화합물 **B**(2.5g, 6.15mmol), 2-(4-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진(2.9g, 7.38mmol), 팔라듐(II) 아세테이트(0.07g, 0.31mmol), 2-디시클로헥실포스포노-2',6'-디메톡시비페닐(0.3g, 0.62mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드(1.5g, 15.38mmol), *o*-자일렌(31 mL)를 넣고 10시간 환류교반 하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 **C-6**(0.8g, 수율: 18%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
C-6	713.84	406nm	453nm	356℃

[실시예 3] 화합물 C-48의 합성

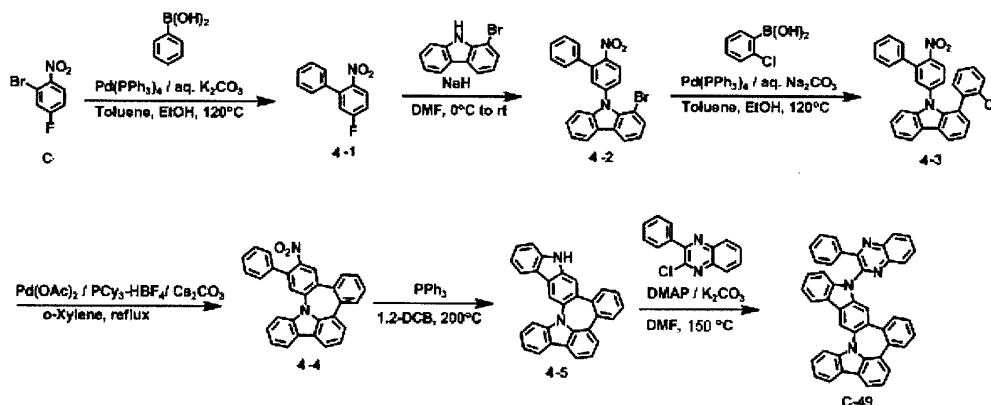


1) 화합물 C-48 의 합성

반응용기에 화합물 B(2g, 4.90mmol), 3-브로모-1-1'-비페닐(1.7g, 7.30mmol), 요오드화구리(0.5g, 15.04mmol), 디아미노시클로헥산(1.2 mL, 9.80mmol), 탄산 세슘(3.2g, 9.80mmol) 및 o-자일렌(25mL)을 넣고, 7시간 환류 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 C-48(1.2g, 수율: 89%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
C-48	558.67	386nm	457nm	221℃

[실시예 4] 화합물 C-49의 합성



1) 화합물 4-1의 합성

반응용기에 화합물 C(30g, 136.36mmol), 페닐보론산(20g, 163.64 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(4.7g, 4.09mmol), 탄산칼륨(47.1g, 340.90mmol), 톨루엔(680mL), 에탄올(170 mL)을 넣고, 증류수(170mL)를 첨가한 후 120℃로 4시간 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 4-1(28g, 수율: 96%)를 얻었다.

2) 화합물 4-2의 합성

반응용기에 화합물 4-1(28g, 128.91mmol), 1-브로모-9H-카바졸(24g, 97.52 mmol)을 디메틸포름알데하이드(600mL)에 녹이고 수소화 나트륨(6g, 146.28mmol, 미네랄 오일 중 60%)을 0℃에서 넣었다. 반응 혼합물을 상온에서 3시간 교반하였다. 반응이 끝나면 메탄올과 증류수를 넣었다. 생성된 고체를 감압 여과하고 컬럼 분리하여 화합물 4-2 (19g, 수율: 46%)을 얻었다.

3) 화합물 4-3의 합성

반응용기에 화합물 4-2(19g, 45.20mmol), 2-클로로페닐보론산(8.5g, 54.24 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(1.6g, 4.09mmol), 탄산나트륨(12g, 113.00 mmol), 톨루엔(230mL), 에탄올(56 mL)을 넣고, 증류수(56mL)를 첨가한 후 120℃로 2시간 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 4-3(20g,

수율: 93%)를 얻었다.

[0173] 4) 화합물 4-4의 합성

[0174] 반응용기에 화합물 4-3(20g, 41.90mmol), 팔라듐(II) 아세테이트(1g, 4.19mmol), 트리시클로헥실포스포늄 테트라플루오로보레이트(3.1g, 8.38mmol), 탄산세슘(41g, 125.70mmol), o-자일렌(210mL)를 넣고 3시간 환류교반 하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 4-4(14g, 수율: 78%)를 얻었다.

[0175] 5) 화합물 4-5의 합성

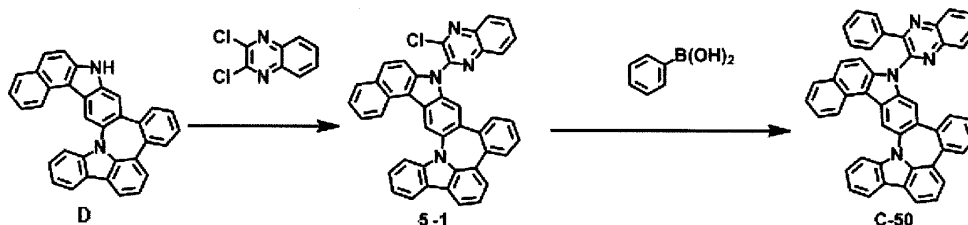
[0176] 반응용기에 화합물 4-4(14g, 32.75 mol), 트리페닐포스핀(26g, 98.25mmol), 1,2-디클로로벤젠(165mL)를 넣고, 200℃로 8시간 교반하였다. 반응이 끝나면 감압증류하여 용매를 제거 후, 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 4-5(10g, 수율: 75%)를 얻었다.

[0177] 6) 화합물 C-49의 합성

[0178] 반응용기에 화합물 4-5(2g, 4.90mmol), 2-클로로-3-페닐퀴놀린(1.8g, 7.30mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (0.3g, 2.45mmol), 탄산칼륨(1.0g, 7.30mmol), 디메틸포름아마이드(25 mL)를 넣고, 150℃로 9시간 교반하였다. 반응이 끝나면 반응 용액에 메탄올을 넣어 반응을 종료하고, 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 C-49(0.9g, 수율: 30%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
C-49	610.70	401nm	513nm	231℃

[0180] [실시예 5] 화합물 C-50의 합성



[0182] 1) 화합물 5-1의 합성

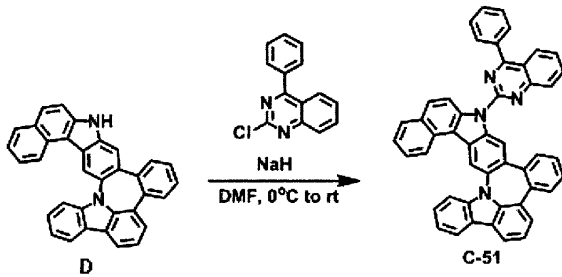
[0183] 반응용기에 화합물 D(5.0g, 10.95mmol)을 디메틸포름알데하이드(55mL)로 녹인 후, 0℃에서 수소화나트륨(0.7g, 16.43mmol)을 천천히 적가한다. 30분 동안 교반 후 2,3-디클로로퀴놀린(3.3g, 16.43mmol)을 적가한다. 적가가 끝나면 반응온도를 상온으로 올려주고 4 시간 동안 추가로 교반하였다. 반응이 끝나면 반응 용액에 메탄올을 넣어 반응을 종료하고, 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 5-1(5.1g, 수율: 75%)를 얻었다.

[0184] 2) 화합물 C-50의 합성

[0185] 반응용기에 화합물 5-1(5.1g, 8.24mmol), 페닐보론산(1.2g, 9.89mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 (0.3g, 0.25mmol), 탄산나트륨(2.2g, 20.60mmol), 톨루엔(42mL), 에탄올(10mL)를 넣고, 증류수(10mL)를 첨가한 후 120℃로 4시간 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 C-50(2.5g, 수율: 46%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
C-50	660.78	406nm	519nm	280℃

[0187] [실시예 6] 화합물 C-51의 합성



[0188]

[0189] 1) 화합물 C-51의 합성

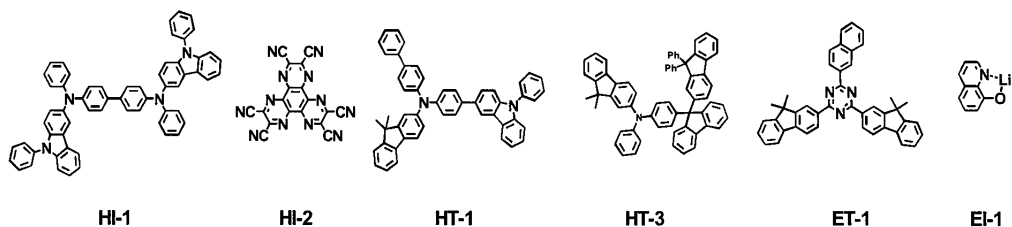
[0190] 반응용기에 화합물 D(3.0g, 6.57mmol)을 디메틸포름알데하이드(33mL)로 녹인 후, 0℃에서 수산화나트륨(0.4g, 9.86mmol)을 천천히 적가한다. 30분 동안 교반 후 2-클로로-4-페닐퀴나졸린(1.9g, 7.89mmol)을 적가한다. 적가가 끝나면 반응온도를 상온으로 올려주고 6 시간 동안 추가로 교반하였다. 반응이 끝나면 반응 용액 메탄올을 넣어 반응을 종료하고, 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 C-51(1.4g, 수율: 33%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
C-51	660.78	416 nm	527 nm	308℃

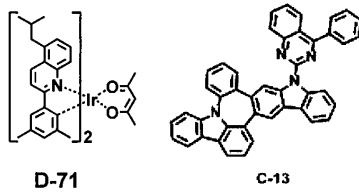
[0191]

[0192] [소자 제조에 1] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조

[0193] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조) 기판 상의 투명전극 ITO 박막(10/□)을 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 HI-1을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 80nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HI-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 HT-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HT-3을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 60nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착 하였다. 정공 주입층, 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀에 호스트로서 화합물 C-13을 넣고, 또 다른 셀에는 화합물 D-71을 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 함계량에 대해 도판트를 3중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 정공 전달층 위에 40nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ET-1과 화합물 EI-1을 1:1의 속도로 증발시켜 발광층 위에 30nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서, 전자 주입층으로 화합물 EI-1을 2nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 80nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다.



[0194]

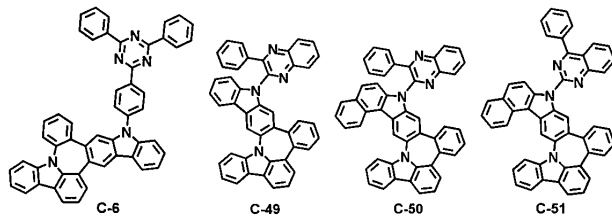


그 결과, 4.2V의 전압에서 24.1cd/A의 효율이 나왔으며, 1000cd/m²의 적색 발광을 보였다.

[소자 제조예 2, 3, 4, 5] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조

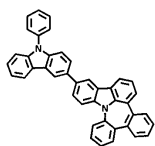
호스트로서 아래 표의 물질을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

	호스트	전압(V)	효율(cd/A)
제조예 2	C-6	3.3	27.6
제조예 3	C-49	3.7	28.6
제조예 4	C-50	4.1	28.1
제조예 5	C-51	4.2	23.8



[비교예] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조

발광 재료로서 호스트에 하기 화합물 B를 사용한 것 외에는 소자 실시예와 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.



Compound B

그 결과, 8.2V의 전압에서 3.3cd/A의 효율이 나왔으며, 1000cd/m²의 적색 발광을 보였다.

상기 소자 제조예 및 비교예로부터, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 종래의 유기 전계 발광 화합물과 대비하여 발광 효율이 우수하며, 특히 전류 효율 및 전력 효율이 뛰어난 것을 확인할 수 있다.

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	KR1020170031019A	公开(公告)日	2017-03-20
申请号	KR1020160089063	申请日	2016-07-14
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
当前申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	MOON DOO HYEON 문두현 SHIM JAE HOON 심재훈		
发明人	문두현 심재훈		
IPC分类号	C09K11/06 C07D487/14 C07D403/04 C07D401/04 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D487/14 C07D403/04 C07D401/04 H01L51/50 C09K2211/1011 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/1059 C09K2211/1088 C09K2211/1092		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020150128139 2015-09-10 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及有机电致发光化合物和包含其的有机电致发光器件。驱动电压低，根据本发明的有机电致发光化合物制造其中电流效率和功率效率优异但有效的有机电致发光器件。

