



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0003636
(43) 공개일자 2020년01월10일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/50 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2018-0076640
(22) 출원일자 2018년07월02일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
룸엔드하스전자재료코리아유한회사
충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)
(72) 발명자
김현
경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
전지송
경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
장훈

전체 청구항 수 : 총 9 항

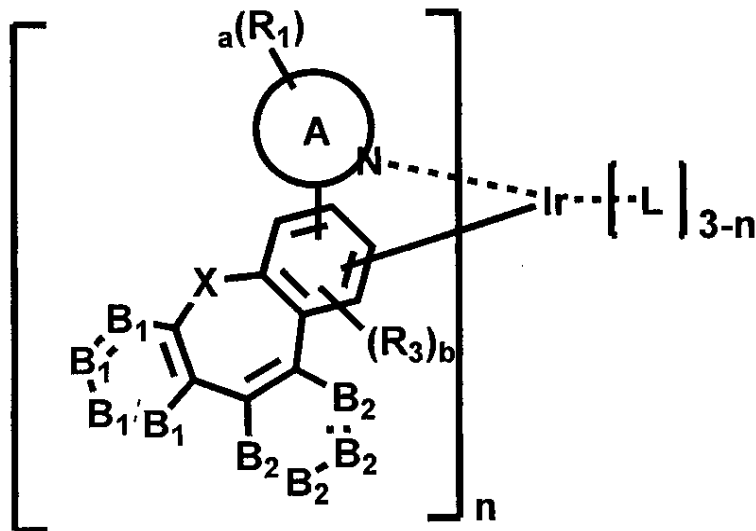
(54) 발명의 명칭 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

(57) 요약

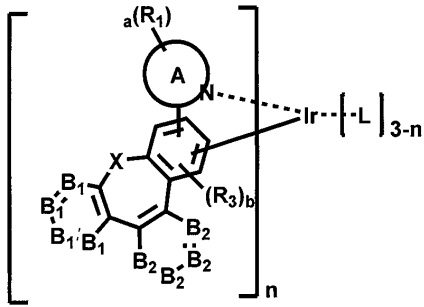
본원은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써 종래의 유기 전계 발광 소자에 비해 낮은 구동 전압, 높은 발광 효율 및/또는 장 수명의 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



[화학식 1]



상기 화학식 1에서 치환기들의 정의는 명세서에서 정의한 바와 같다.

(52) CPC특허분류

C09K 2211/185 (2013.01)

(72) 발명자

전정환

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

이연건

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

황선진

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

조영준

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

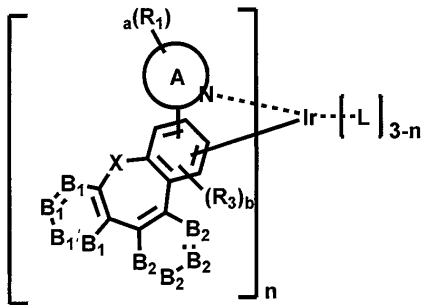
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

A 고리는 N 포함 (3-10원)헤테로아릴이며;

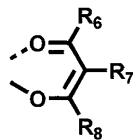
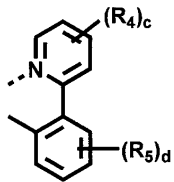
B₁ 및 B₂는 각각 독립적으로 CR₂ 또는 N이고, 각각의 B₁ 및 각각의 B₂는 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;

X는 0 또는 S 이고;

L은 하기 화학식 2-1 및 2-2에서 선택되는 어느 하나이며;

[화학식 2-1]

[화학식 2-2]



R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이고;

n은 1 내지 3의 정수이며;

a는 1 내지 6의 정수이고, b는 1 또는 2이며, c 및 d는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 내지 d가 각각 2 이상의 정수인 경우 각각의 R₁, 각각의 R₃, 각각의 R₄, 및 각각의 R₅는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 R₁ 내지 R₈에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C1-C30)알콕시, 치환된 (C2-C30)알케닐, 치환된 (C2-C30)알키닐, 치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 치환된 (C6-C30)아릴, 치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환된

(C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 및 치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노의 치환기는 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, (3-7 원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴, (3-30원)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, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 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 이상인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

A 고리는 이미다졸릴, 티아디아졸릴, 트리아졸릴, 피라졸릴, 피리딜, 퀴놀릴 또는 이소퀴놀릴이고,

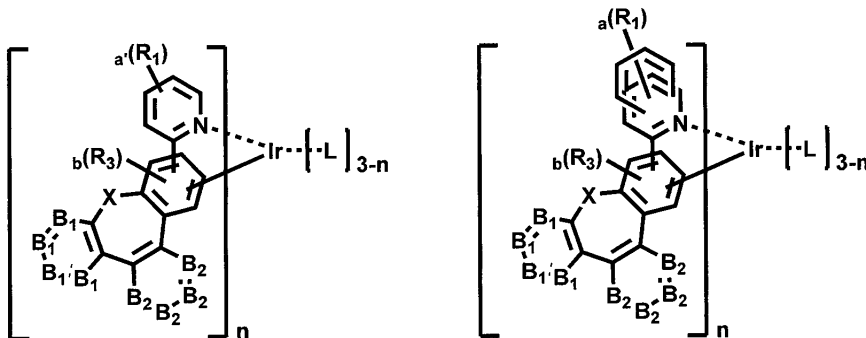
R₁ 내지 R₈는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 또는 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 3 및 4 중 어느 하나로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 3]

[화학식 4]



상기 화학식 3 및 4에서,

B₁, B₂, X, L, R₁, R₃, n, a 및 b는 각각 제1항에서의 정의와 동일하고,

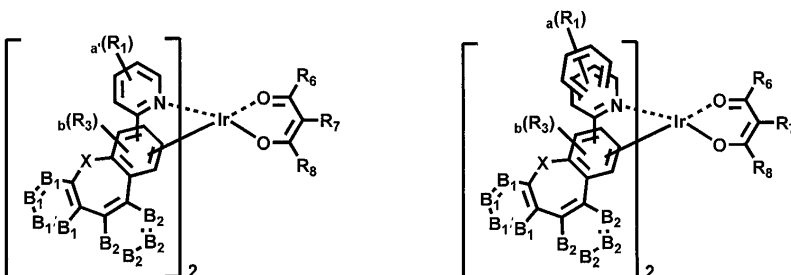
a'는 1 내지 4의 정수이며, a'가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 5

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 5 내지 8 중 어느 하나로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물:

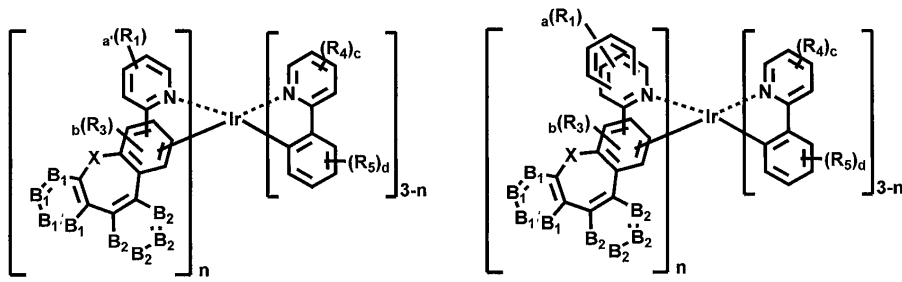
[화학식 5]

[화학식 6]



[화학식 7]

[화학식 8]



상기 화학식 5 내지 8에서,

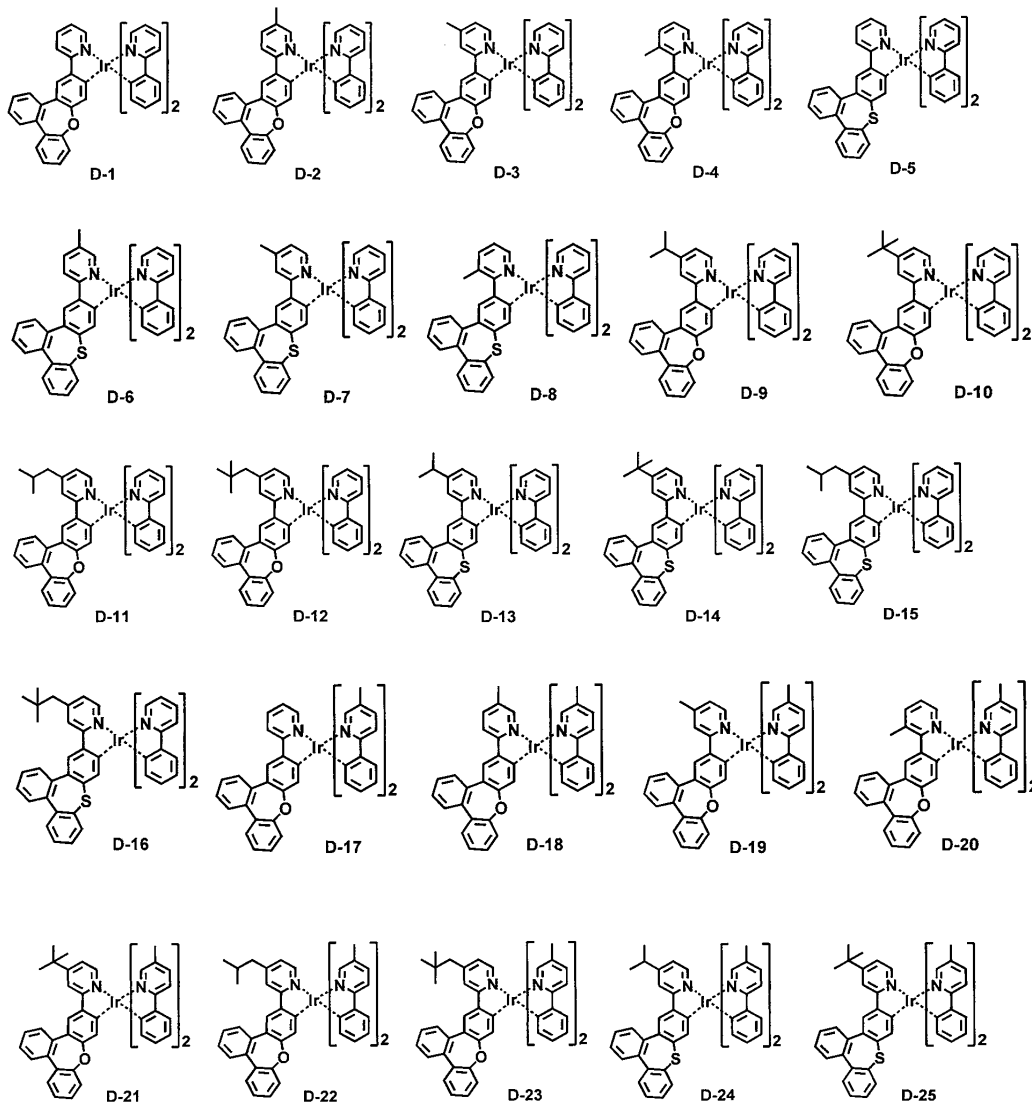
n 은 1 또는 3이고,

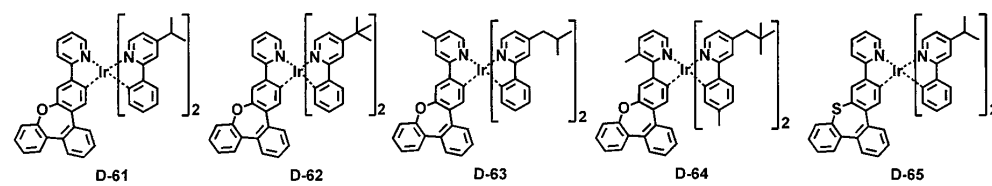
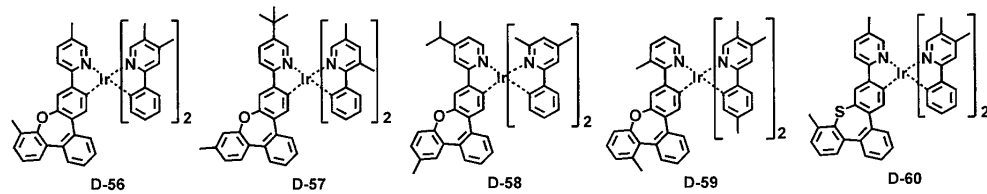
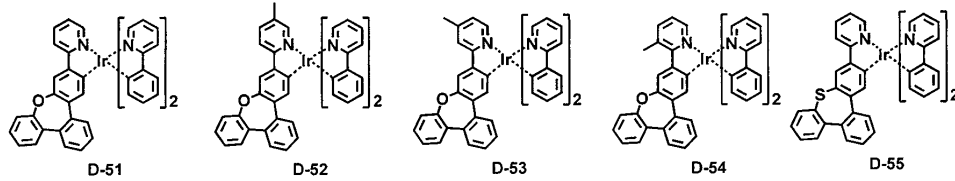
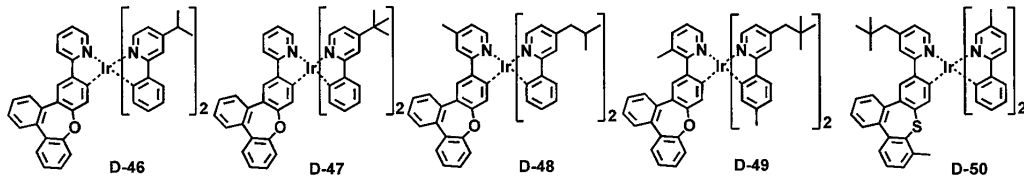
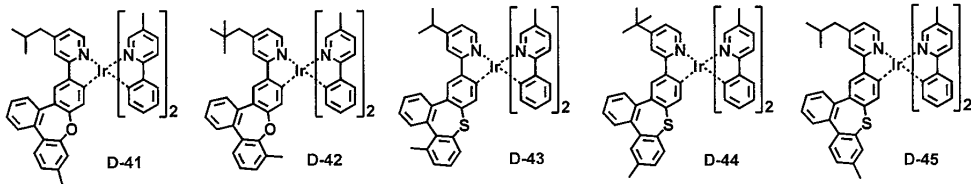
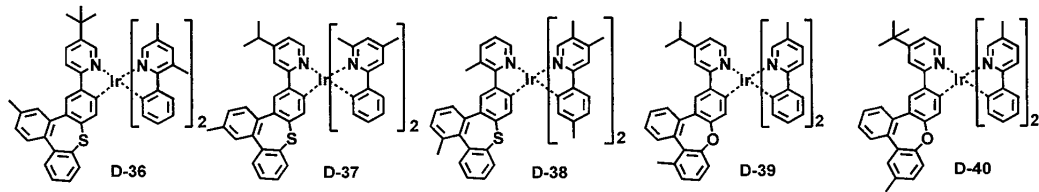
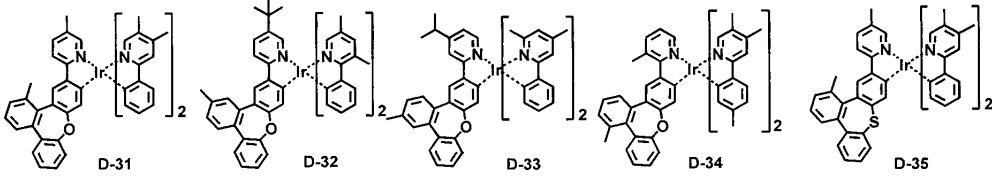
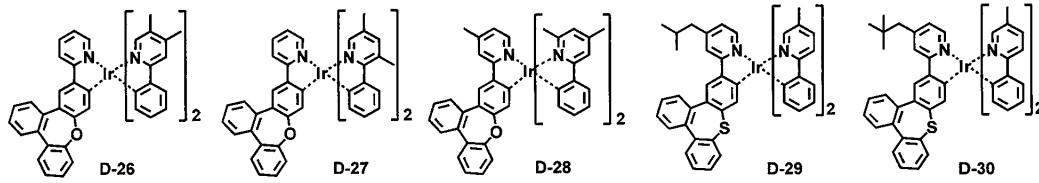
B_1 , B_2 , X , R_1 , R_3 내지 R_6 , 및 a 내지 d 는 각각 제1항에서의 정의와 동일하고,

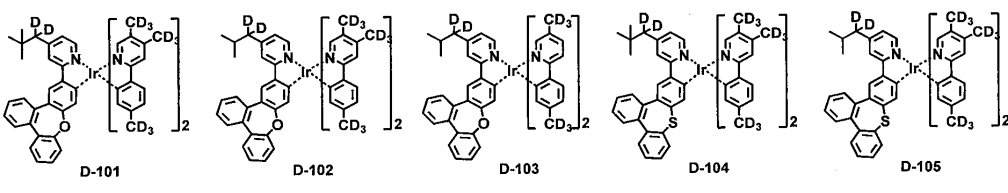
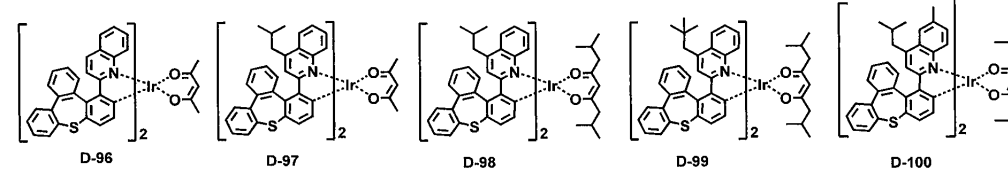
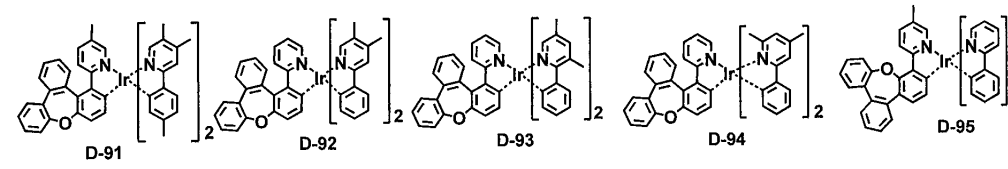
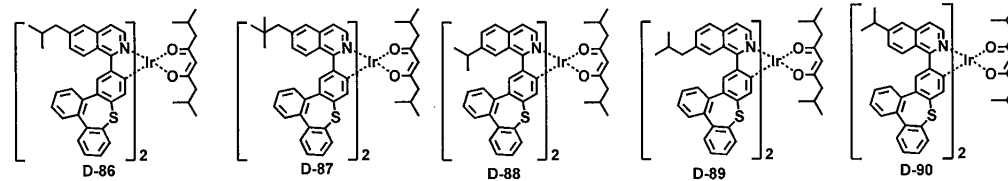
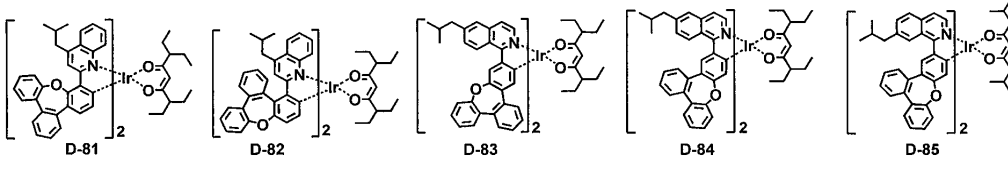
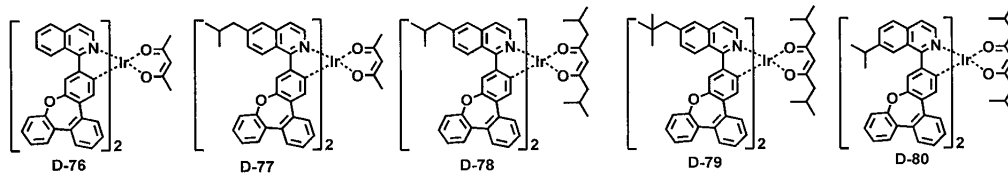
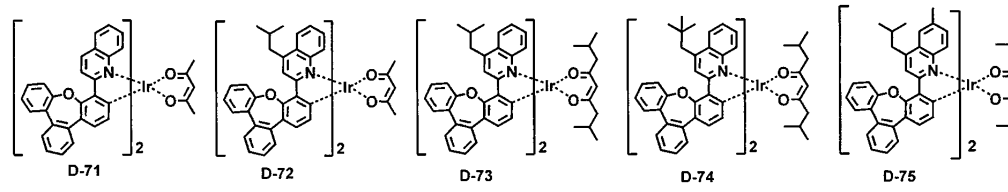
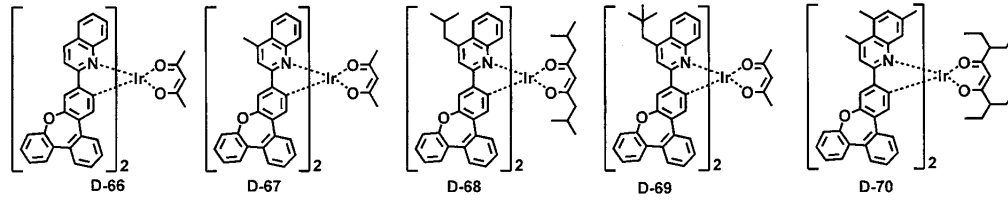
a' 는 1 내지 4의 정수이며, a' 가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

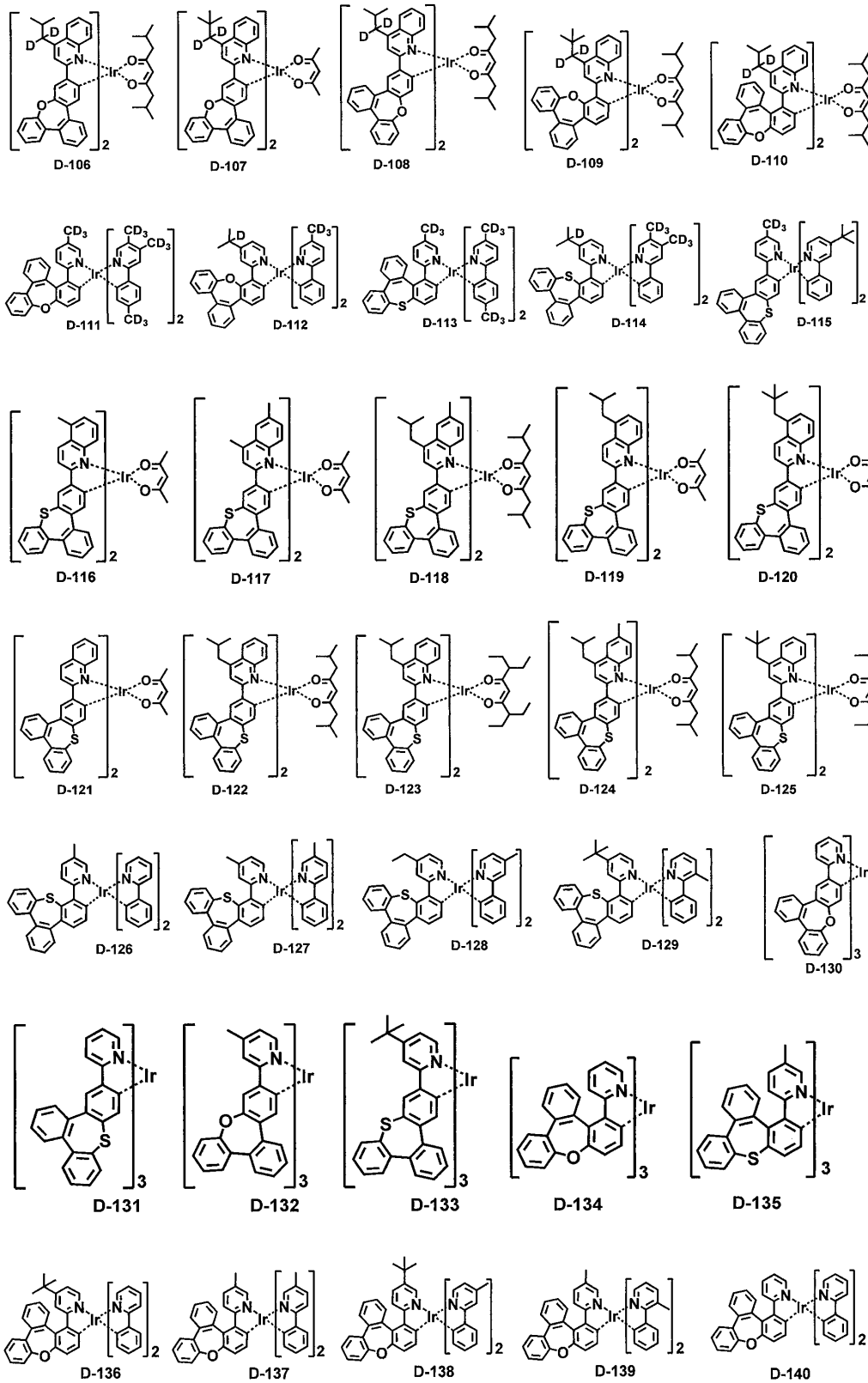
청구항 6

제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물로부터 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.









청구항 7

제1항의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 재료.

청구항 8

제1항의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

청구항 9

제8항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 화합물을 도판트로 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(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 다이아민과 알루미늄 착물을 이용하는 유기 전계 발광 소자를 처음으로 개발하였다[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 전계 발광 소자(organic electroluminescent device; OLED)는 유기 발광 재료에 전기를 가해 전기 에너지를 빛으로 바꾸는 소자로서, 통상 양극(애노드) 및 음극(캐소드)과 이들 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 유기 전계 발광 소자의 유기물층은 필요에 따라, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 차단층, 발광층, 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층, 전자 주입층 등을 포함할 수 있다. 상기 유기물층에 사용되는 재료는 기능에 따라 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료(호스트 및 도판트 재료 포함), 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료 등으로 나뉠 수 있다. 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 발광 유기 화합물이 여기 상태로 되며, 발광 유기 화합물의 여기 상태가 기저 상태로 돌아가면서 에너지를 빛으로 방출하여 발광하게 된다.

[0004] 유기 전계 발광 소자의 발광 재료는 소자의 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인으로서, 발광 재료는 양자 효율이 높고 전자와 정공의 이동도가 커야 하고, 형성된 발광 재료 층은 균일하고 안정해야 한다. 이러한 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색 또는 적색 발광 재료로 나뉘고, 추가로 황색 또는 주황색 발광 재료도 있다. 또한, 발광 재료는 기능적인 측면에서 호스트 재료와 도판트 재료로 구분될 수 있다. 일반적으로, EL 특성이 우수한 소자는 호스트에 도판트를 도핑하여 만들어진 발광층을 포함하는 구조이다.

[0005] 현재까지 이리듐(III)착물 계열이 인광 발광 재료의 도판트로 널리 알려져 있으며, 각각의 적색, 녹색 및 청색 발광별로 (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)피롤리네이토이리듐)(Firpic) 등의 재료가 알려져 있다. 그러나, 여전히 OLED 소자의 성능 향상을 위한 개발이 요구되고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0006] (특허문헌 0001) 한국 공개특허공보 제2002-0042763호 (2002. 6. 7. 공개)

발명의 내용

해결하려는 과제

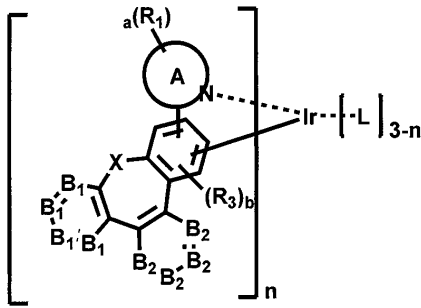
[0007] 본 발명의 목적은 낮은 구동 전압, 높은 발광 효율 및/또는 장 수명의 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조하는데 효과적인 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

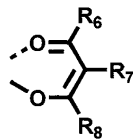
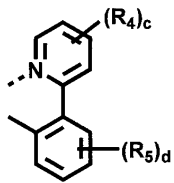
[0008] 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성할 수 있음을 발견하여

본 발명을 완성하였다.

[0009] [화학식 1]



[0010]
 [0011] 상기 화학식 1에서,
 [0012] A 고리는 N 포함 (3-10원)헤테로아릴이며;
 [0013] B₁ 및 B₂는 각각 독립적으로 CR₂ 또는 N이고, 각각의 B₁ 및 각각의 B₂는 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;
 [0014] X는 O 또는 S 이고;
 [0015] L은 하기 화학식 2-1 및 2-2에서 선택되는 어느 하나이며;
 [0016] [화학식 2-1] [화학식 2-2]



[0017]
 [0018] R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이고;
 [0019] n은 1 내지 3의 정수이며;
 [0020] a는 1 내지 6의 정수이고, b는 1 또는 2이며, c 및 d는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 내지 d가 각각 2 이상의 정수인 경우 각각의 R₁, 각각의 R₃, 각각의 R₄, 및 각각의 R₅는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

발명의 효과

[0021] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물은 낮은 구동 전압, 높은 발광 효율 및/또는 장 수명의 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0022] 도 1은, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물의 대표적인 화학식이다.
 도 2는, 본원의 일 양태에 따른 화합물 D-17과 비교예 화합물(Ir(ppy)₃)의 파장에 따른 PL 강도를 비교한 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0023] 이하에서 본원을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안된다.
- [0024] 본원에서 "유기 전계 발광 화합물"은 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 화합물을 의미하며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다.
- [0025] 본원에서 "유기 전계 발광 재료"는 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 재료를 의미하고, 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있으며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다. 예를 들면, 상기 유기 전계 발광 재료는 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료(호스트 재료 및 도판트 재료 포함), 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료 등 일 수 있다.
- [0026] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은 쇠를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 1 내지 20개, 더 바람직하게는 1 내지 10개이다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, *n*-프로필, 이소프로필, *n*-부틸, 이소부틸, *sec*-부틸, *tert*-부틸, *n*-펜틸, *tert*-펜틸, 네오펀틸, 이소펜틸, *sec*-펜틸 및 3-펜틸 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환의 탄화수소를 의미하고, 상기 탄소수는 바람직하게는 3 내지 20개, 더 바람직하게는 3 내지 7개이다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(3-7원)헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 3 내지 7개, 바람직하게는 5 내지 7개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군, 바람직하게는 O, S 및 N으로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라히드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 부분적으로 포화될 수도 있다. 상기 환 골격 탄소수는 바람직하게는 6 내지 25개, 더 바람직하게는 6 내지 18개이다. 상기 아릴은 스피로 구조를 가진 것을 포함한다. 상기 아릴의 예로서 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페틸레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 스피로비플루오레닐 등이 있다. 본원에서 "(3-30원)헤테로아릴"은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함하며, 스피로 구조를 가진 것도 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, 벤조인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 나프티리디닐, 카바졸릴, 벤조카바졸릴, 디벤조카바졸릴, 페녹사진일, 페노티아진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로겐"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.
- [0027] 또한, 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환기)로 대체되는 것을 뜻한다. 본원 화학식들에서 치환된 알킬, 치환된 알콕시, 치환된 알케닐, 치환된 알키닐, 치환된 아르알킬, 치환된 아릴, 치환된 헤테로아릴, 치환된 시클로알킬, 치환된 트리알킬실릴, 치환된 디알킬아릴실릴, 치환된 알킬디아릴실릴, 치환된 트리아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디-알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디-아릴아미노, 및 치환된 알킬아릴아미노의 치환기는 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 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴, (3-30원)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, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 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 이상이다. 예를 들면, 상기 치환기는 하나 이상의 중수소일 수 있다.

[0028] 본원에서, 헤테로아릴은 각각 독립적으로, B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다. 또한, 상기 헤테로원자는 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 및 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이 결합될 수 있다.

[0029] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

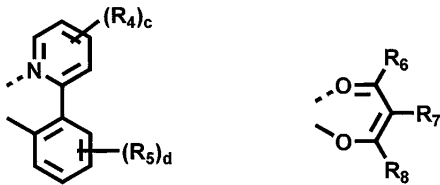
[0030] 상기 화학식 1에서, A 고리는 N 포함 (3-10원)헤테로아릴이다. 본원의 일 양태에 따르면, A 고리는 하나 이상의 질소 원자를 함유하는 (5-10원)헤테로아릴이다. 본원의 다른 일 양태에 따르면, A 고리는 하나의 질소 원자를 함유하는 6원 또는 10원 헤테로아릴이다. 구체적으로, A 고리는 이미다졸릴, 티아디아졸릴, 트리아졸릴, 피라졸릴, 피리딜, 퀴놀릴 및 이소퀴놀릴 중 어느 하나일 수 있다. 예를 들면, A 고리는 피리딜, 퀴놀릴 또는 이소퀴놀릴일 수 있다.

[0031] 상기 화학식 1에서, B₁ 및 B₂는 각각 독립적으로 CR₂ 또는 N이고, 각각의 B₁ 및 각각의 B₂는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, B₁ 및 B₂는 각각 독립적으로 CR₂이고, 각각의 B₁ 및 각각의 B₂는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0032] 상기 화학식 1에서, X는 O 또는 S 이며, n은 1 내지 3의 정수이다.

[0033] 상기 화학식 1에서, L은 하기 화학식 2-1 및 2-2에서 선택되는 어느 하나이다. 본원의 일 양태에 따르면, L이 하기 화학식 2-1인 경우, n은 1일 수 있고, L이 하기 화학식 2-2인 경우, n은 2일 수 있다.

[0034] [화학식 2-1] [화학식 2-2]

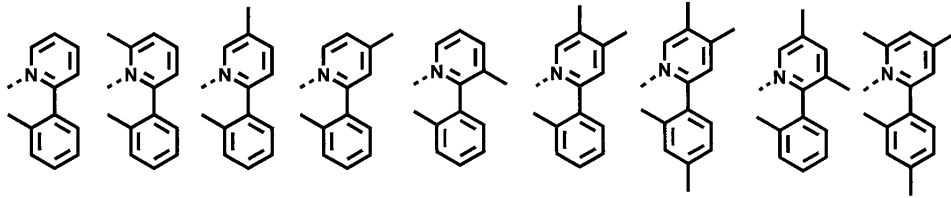


[0035]

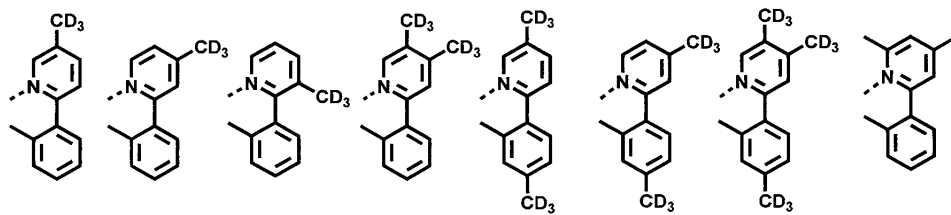
[0036] 상기 R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이다. 본원의 일 양태에 따르면, R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬이다. 본원의 다른 일 양태에 따르면, R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 또는 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬이다. R₆ 및 R₈은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며, 본원의 일 양태에 따르면, R₆ 및 R₈은 서로 동일하다. 구체적으로, R₁ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 메틸, 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 에틸, 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 이소프로필, 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 이소부틸, 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 tert-부틸, 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 네오펜틸, 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 3-펜틸 등 일 수 있다. 예를 들면, R₁은 수소, 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 메틸, 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 에틸, 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 이소프로필, 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 이소부틸, 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 tert-부틸, 또는 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치

환된 네오펜틸일 수 있고; R₂는 수소 또는 메틸일 수 있고; R₃은 수소일 수 있고; R₄는 수소, 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 메틸, 이소프로필, 이소부틸, *tert*-부틸, 또는 네오펜틸일 수 있고; R₅는 수소, 또는 하나 이상의 중수소로 치환 또는 비치환된 메틸일 수 있고; R₆ 및 R₈은 각각 메틸, 이소부틸 또는 3-펜틸일 수 있고, 서로 동일하거나 상이할 수 있으며; R₇은 수소일 수 있다.

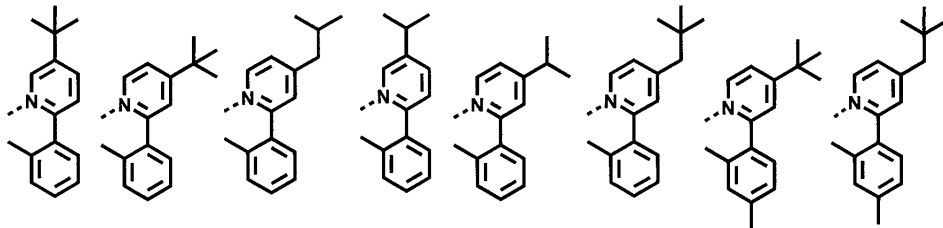
[0037] 상기 화학식 2-1은 하기로 이루어진 그룹에서 선택되는 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



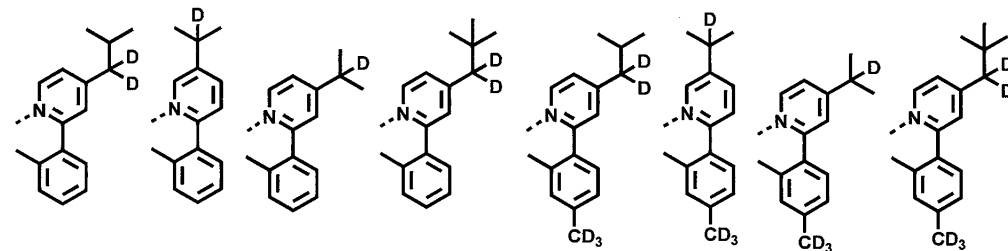
[0038]



[0039]



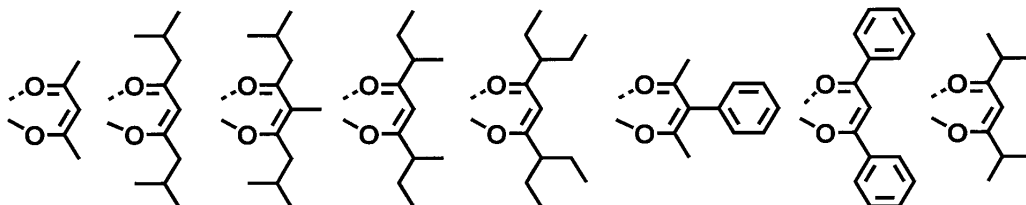
[0040]

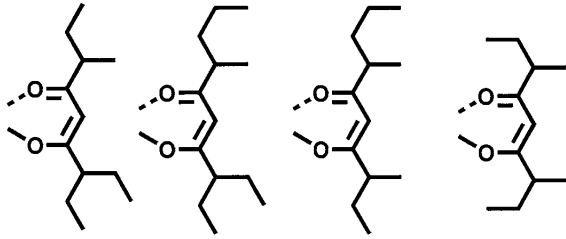


[0041]

[0042] 상기 화학식 2-2는 하기로 이루어진 그룹에서 선택되는 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[0043]





[0044]

[0045]

상기 화학식들에서, a는 1 내지 6의 정수이고, b는 1 또는 2이며, c 및 d는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 내지 d가 각각 2 이상의 정수인 경우 각각의 R₁, 각각의 R₃, 각각의 R₄, 및 각각의 R₅는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, a는 1 내지 3의 정수이고, c는 1 또는 2이며, b 및 d는 각각 1 일 수 있다.

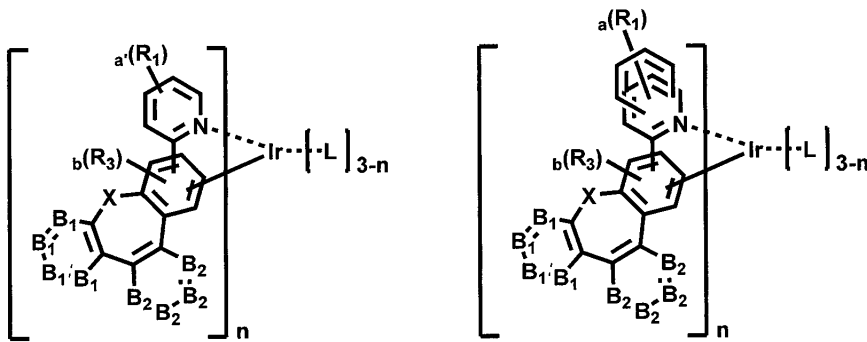
[0046]

본원의 일 양태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 3 및 4 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0047]

[화학식 3]

[화학식 4]



[0048]

[0049]

상기 화학식 3 및 4에서, B₁, B₂, X, L, R₁, R₃, n, a 및 b는 각각 화학식 1에서의 정의와 동일하고, a'는 1 내지 4의 정수이며, a'가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

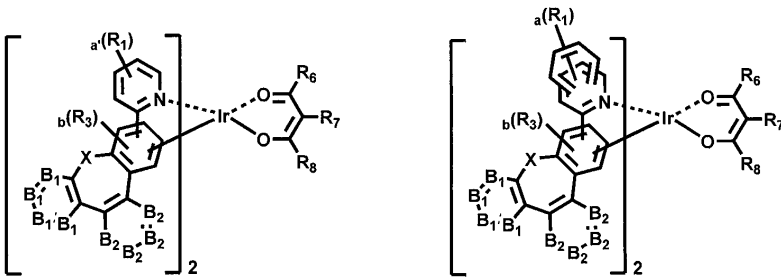
[0050]

본원의 다른 일 양태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 5 내지 8 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0051]

[화학식 5]

[화학식 6]

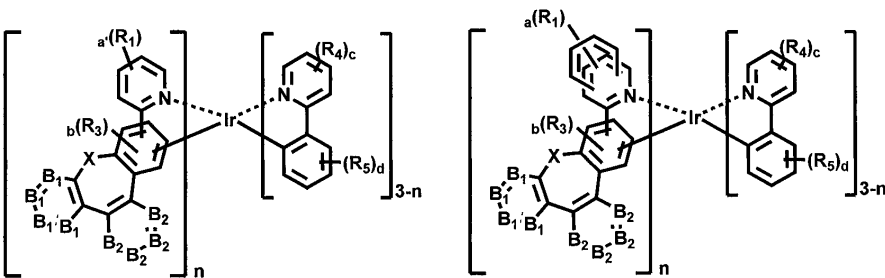


[0052]

[0053]

[화학식 7]

[화학식 8]



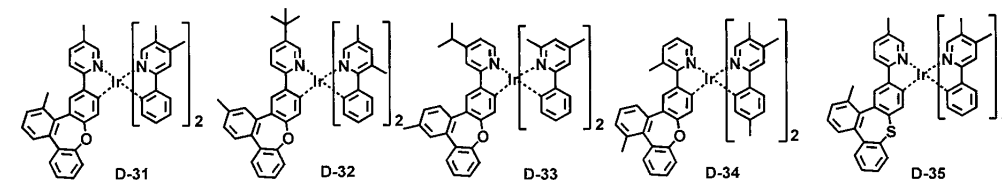
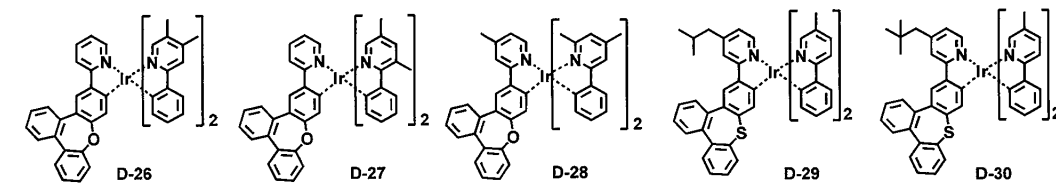
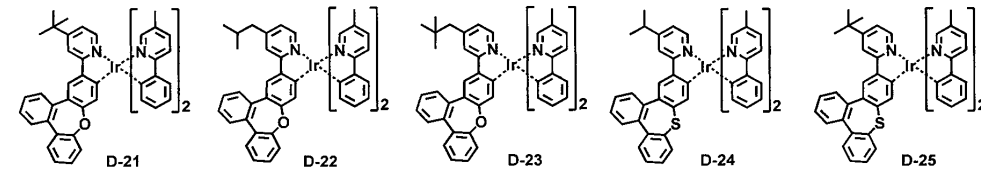
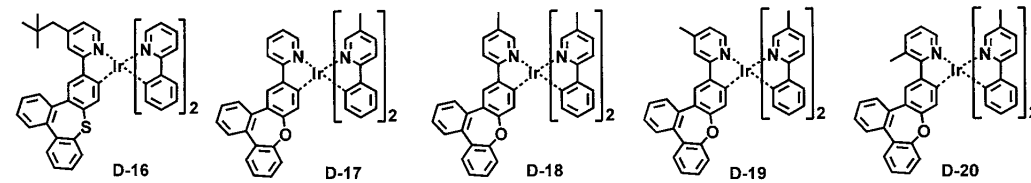
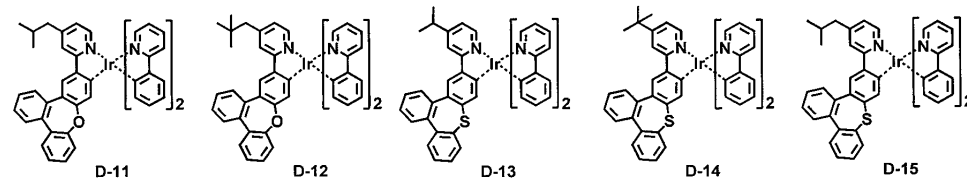
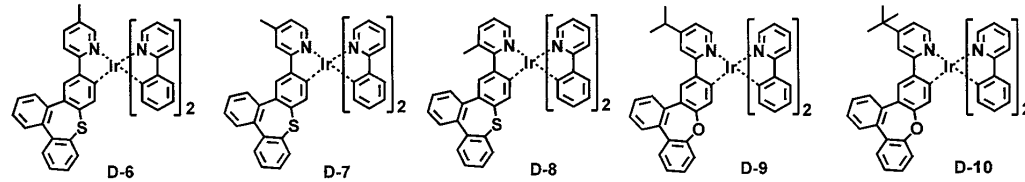
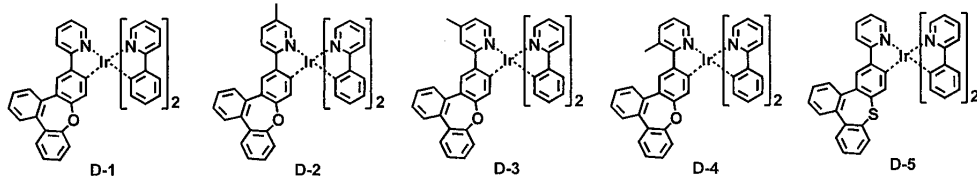
[0054]

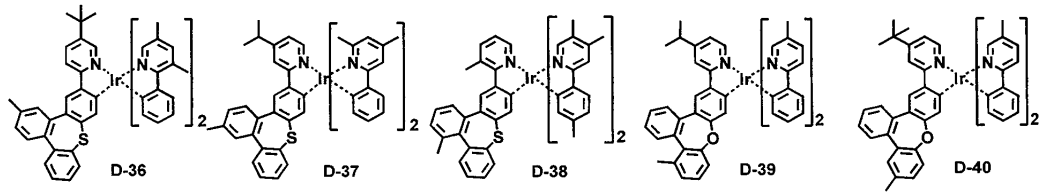
[0055]

상기 화학식 5 내지 8에서, n은 1 또는 3이고, B₁, B₂, X, R₁, R₃ 내지 R₈, a 내지 d는 각각 화학식 1, 화학식

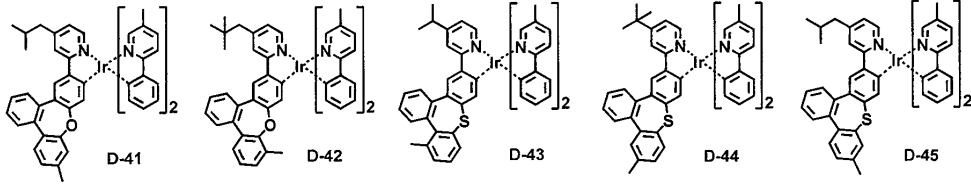
2-1 또는 화학식 2-2에서의 정의와 동일하고, a'는 1 내지 4의 정수이며, a'가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0056] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

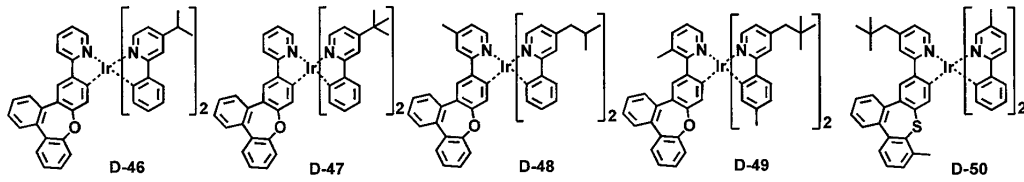




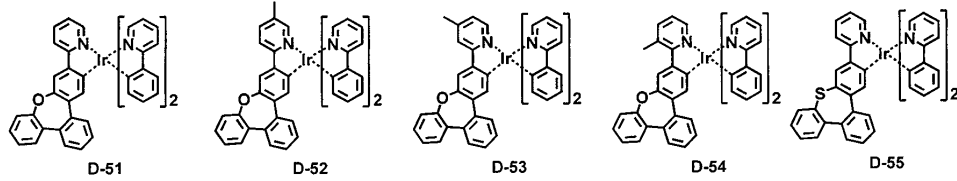
[0064]



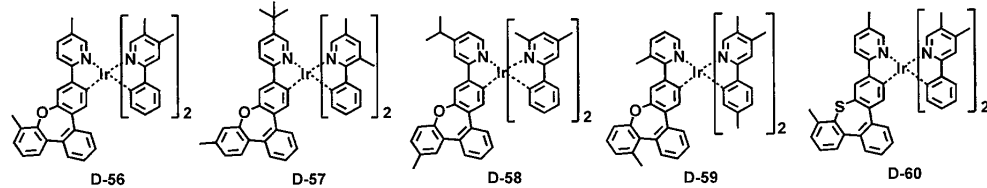
[0065]



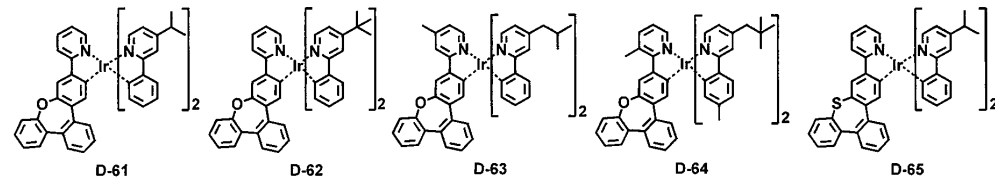
[0066]



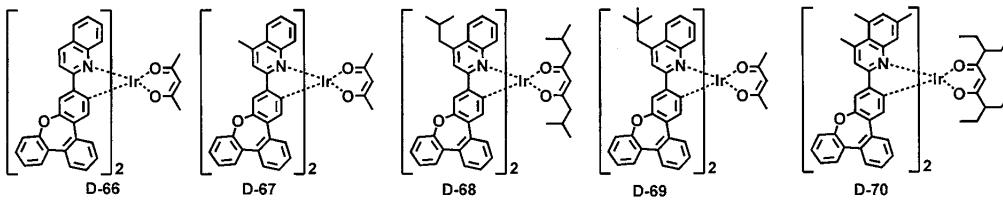
[0067]



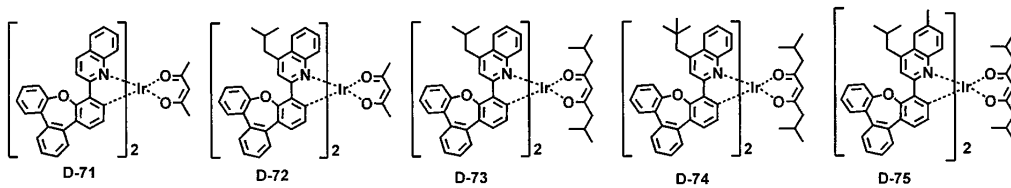
[0068]



[0069]

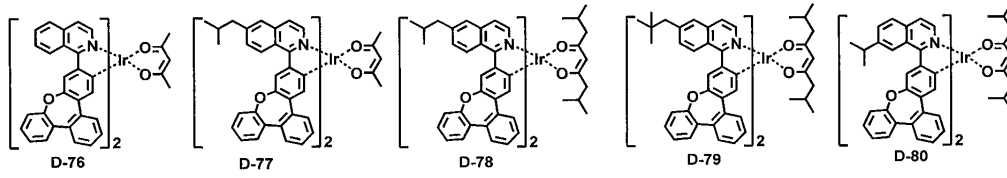


[0070]

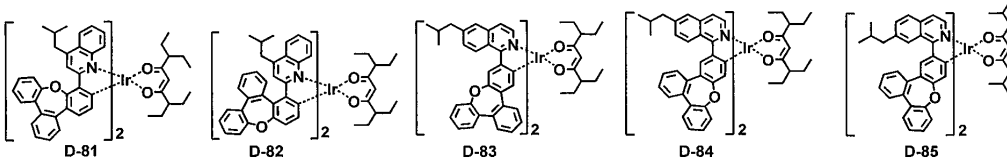


[0071]

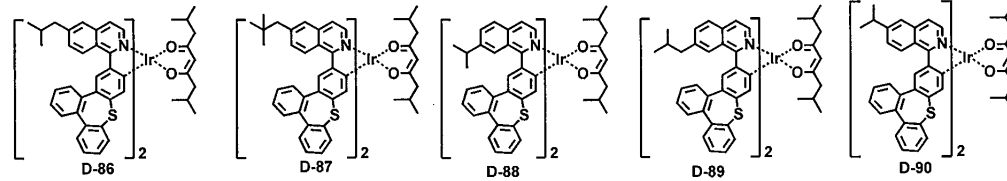
[0072]



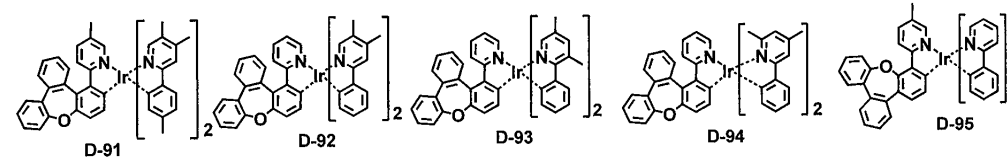
[0073]



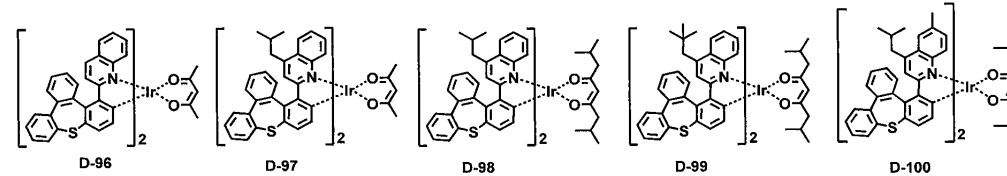
[0074]



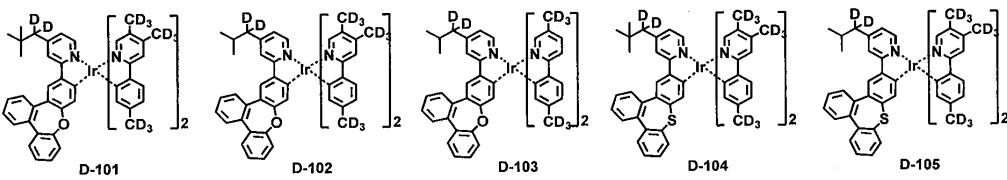
[0075]



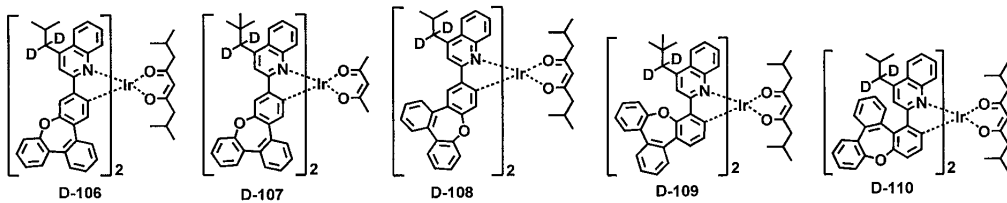
[0076]



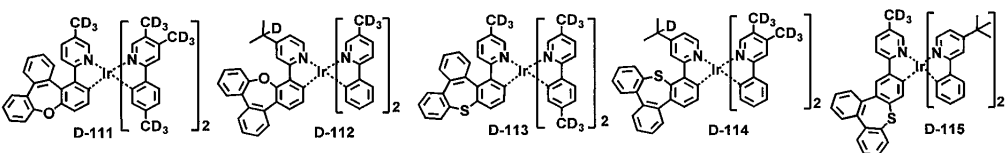
[0077]

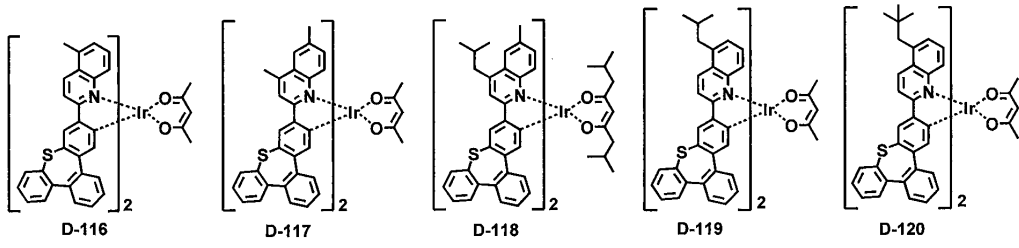


[0078]

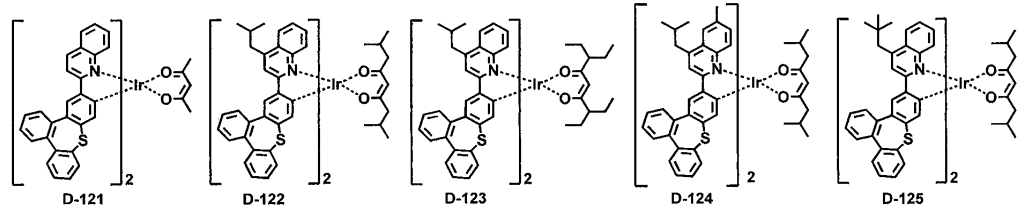


[0079]

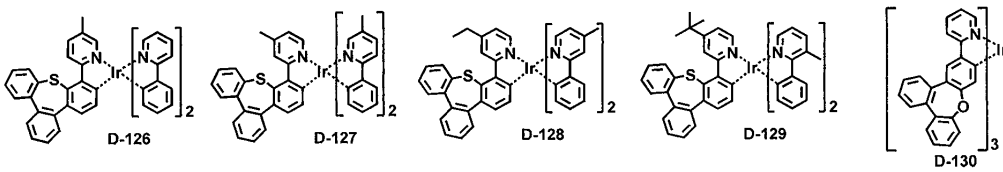




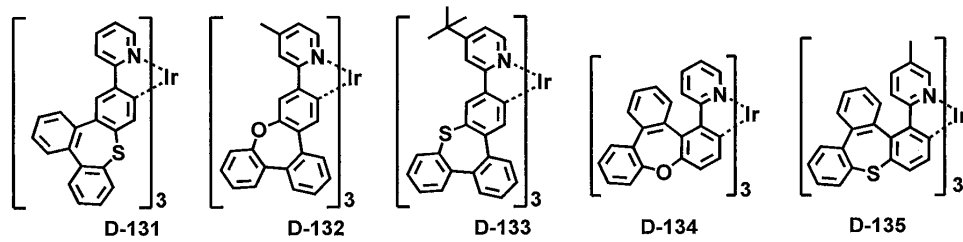
[0080]



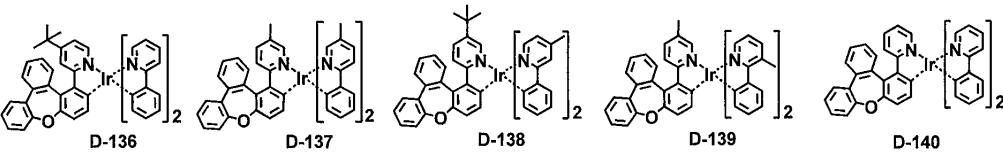
[0081]



[0082]



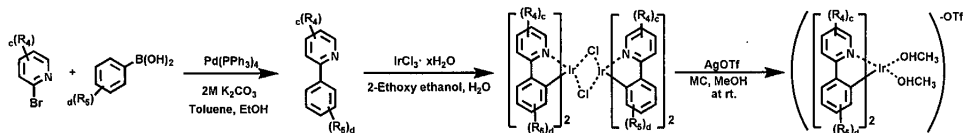
[0083]



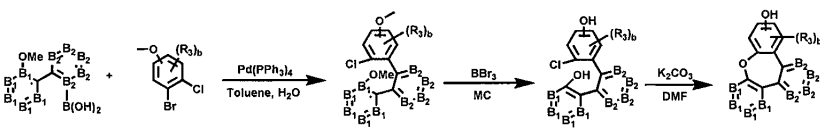
[0084]

[0085] 본원의 화학식 1로 표시되는 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있다. 예를 들면, 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 반응식 1 또는 2에 나타난 바와 같이 합성될 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

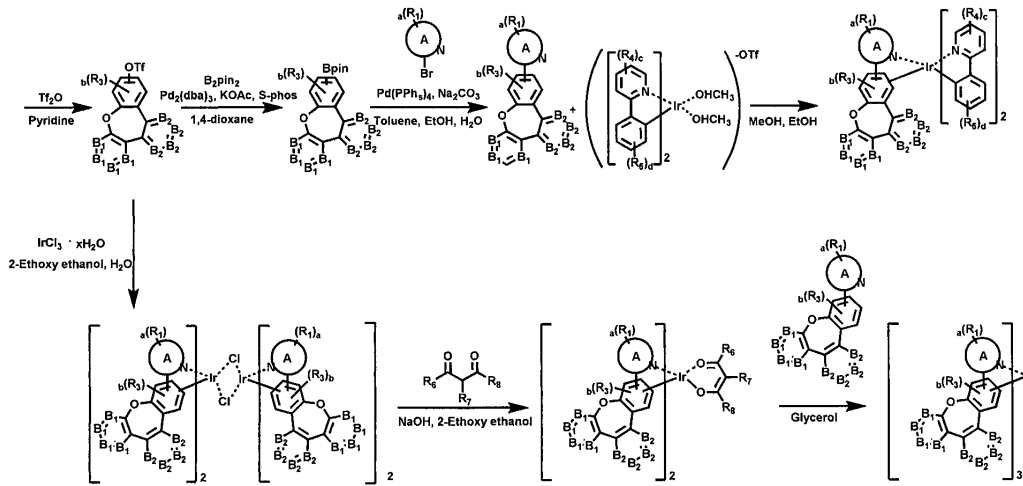
[0086] [반응식 1]



[0087]

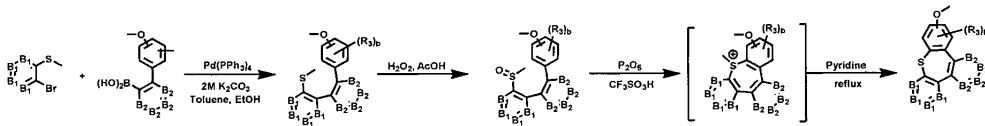


[0088]



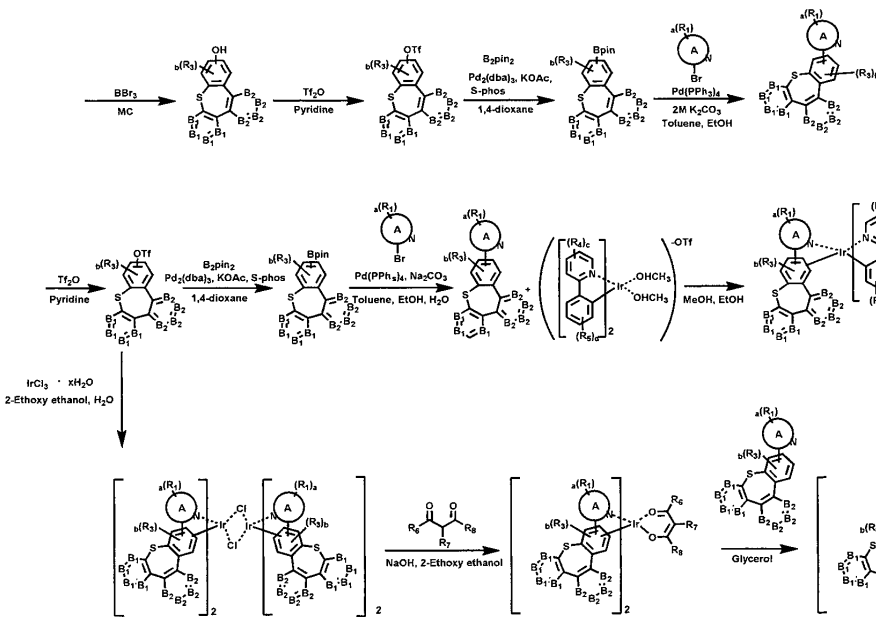
[0089]

[0090] [반응식 2]



[0091]

[0092]



[0093]

[0094] 상기 반응식 1 및 2에서, B₁, B₂, R₁, R₃ 내지 R₈, 및 a 내지 d는 각각 화학식 1, 화학식 2-1, 또는 화학식 2-2에서 정의된 바와 같다.

[0095] 본원의 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 전계 발광 소자를 구성하는 1 이상의 층에 포함될 수 있고, 예를 들어, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 버퍼층, 전자 주입층, 계면층 (interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층에서 선택되는 하나 이상의 층에 포함될 수 있다. 또한, 본원의 화학식 1로 표시되는 화합물은 이에 한정되는 것은 아니지만, 발광층에 포함될 수 있고, 발광층 중 도판트로 포함될 수도 있다.

[0096] 본원의 유기 전계 발광 재료, 예를 들어, 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료, 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료 및 전자 주입 재료 중 하나 이상의 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 상기 재료는 발광 재료, 예를 들면, 도판트 재료일 수 있다. 본원의 유기 전계 발광 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0097] 본원의 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 포함한다. 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 애노드이고, 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 1층 이상의 발광층을 포함하고, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 버퍼층, 전자 주입층, 계면층 (interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

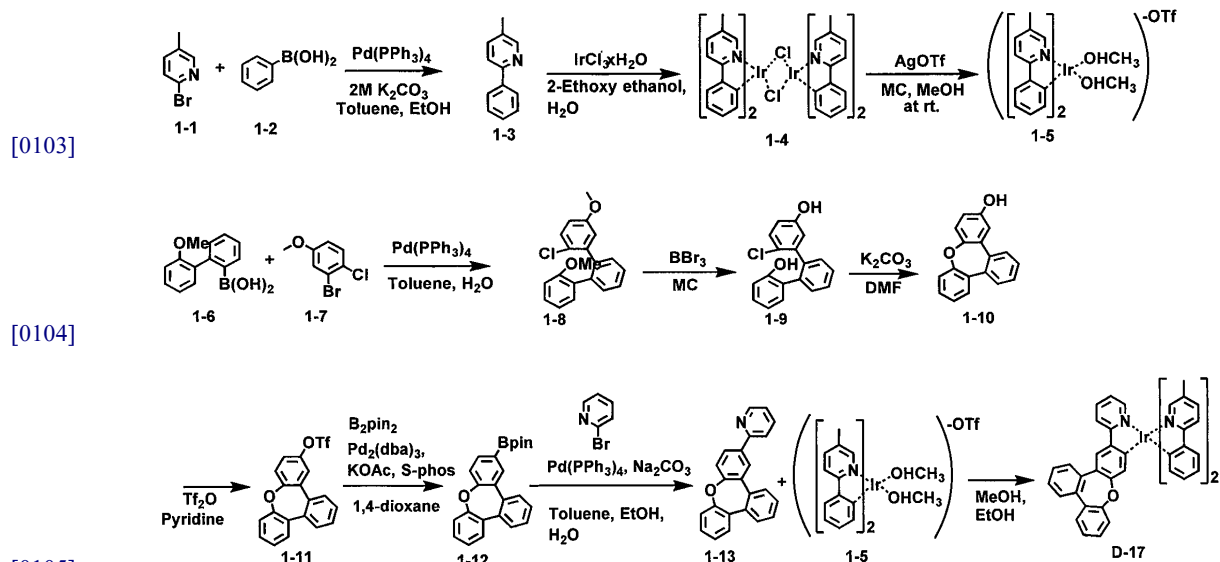
[0098] 본원의 유기 전계 발광 소자는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다. 예를 들면, 상기 통상의 물질은 1족, 2족, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란타넘계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속, 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체 화합물일 수도 있다. 또한, 본원의 상기 유기 전계 발광 소자는 당업계에 알려진 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함하는 발광층 하나 이상을 더 포함함으로써 백색 발광을 할 수 있다. 또한, 필요에 따라, 황색 또는 옐로우색 발광층을 더 포함할 수도 있다.

[0099] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 발광층에 포함할 수 있으며, 상기 발광층은 발광이 이루어지는 층으로서, 단일층이거나, 2개 이상의 층이 적층된 복수의 층일 수 있다. 또한, 상기 발광층의 호스트 화합물에 대한 도판트 화합물의 도핑농도는 20중량% 미만일 수 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 본원의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 낮은 구동 전압, 높은 발광 효율 및/또는 장 수명의 특성을 나타낼 수 있다.

[0100] 또한, 본원은 화학식 1로 표시되는 포함하는 화합물을 이용하여 디스플레이 장치를 제공할 수 있다. 즉, 본원의 화합물을 이용하여 표시 장치 또는 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다. 구체적으로, 본원의 화합물을 이용하여 디스플레이 장치, 예를 들면, 스마트폰, 태블릿, 노트북, PC, TV 또는 차량용의 디스플레이 장치, 또는 조명 장치, 예를 들면, 옥외 또는 옥내용 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

[0101] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본원에 따른 화합물의 합성 방법을 나타내었다. 그러나, 본 발명은 하기의 예들에 한정되는 것은 아니다.

[0102] [실시예 1] 화합물 D-17의 제조



[0106] 1) 화합물 1-3의 합성

[0107] 화합물 1-1 (15 g, 87 mmol), 화합물 1-2 (14 g, 114 mmol), Pd(PPh₃)₄ (3 g, 2.6 mmol), K₂CO₃ (36 g, 260 mmol), 톨루엔 (300 mL), EtOH (150 mL), 및 H₂O (130 mL)를 넣고, 100°C에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 에틸 아세테이트로 추출하고 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 이 후 메틸렌클로라이드:헥산 = 1:2로 컬럼 크로마토그래피를 통해 흰색 고체의 화합물 1-3 (10 g, 68 %)을 얻었다.

[0108] 2) 화합물 1-4의 합성

[0109] 화합물 1-3 (10 g, 30 mmol)과 IrCl₃·xH₂O (8 g, 27 mmol), 2-에톡시에탄올 (200 mL), 및 H₂O (70 mL)을 140°C

에서 24시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 식히고, 물과 MeOH로 세정한 후 건조하여 화합물 1-4 (11.4 g, 75%)를 얻었다.

[0110] **3) 화합물 1-5의 합성**

[0111] 화합물 1-4 (11 g, 10 mmol)를 메틸렌클로라이드(MC) 4 L에 녹이고, 여기에 은트리플루오로메탄술포산염 (AgOTf) (5 g, 20 mmol)을 MeOH (400 mL)에 녹인 것을 천천히 가하였다. 이 후 12시간 동안 실온에서 교반하였다. 반응 혼합물을 필터한 후 여과액을 건조하여 화합물 1-5 (13 g, 89%)을 얻었다.

[0112] **4) 화합물 1-8의 합성**

[0113] 화합물 1-6 (20 g, 90.3 mmol), 화합물 1-7 (21 g, 90.3 mmol), Pd(PPh₃)₄ (3.13 g, 2.71 mmol), Na₂CO₃ (28.71 g, 270.9 mmol), 톨루엔 (452 mL, 0.2 M), 및 H₂O (136 mL, 2 M)를 넣고, 120°C에서 2시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 에틸아세테이트로 추출하고 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 이후 메틸렌클로라이드:헥산 = 1:3으로 컬럼 크로마토그래피하여 흰색 오일의 화합물 1-8 (22.4 g, 76%)을 얻었다.

[0114] **5) 화합물 1-9의 합성**

[0115] 화합물 1-8 (22.4 g, 68.97 mmol) 및 MC (690 mL, 0.1 M)를 넣고 0°C로 냉각 후, BBr₃ (1M in MC, 206.9 mL, 206.9 mmol)을 가하고 12시간 동안 실온에서 교반하였다. 반응 혼합물을 포화된 Na₂S₂O₄ 용액을 가하고 메틸렌클로라이드로 추출하였다. MgSO₄로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 이후 메틸렌클로라이드:헥산 = 1:1로 컬럼크로마토그래피하여 노란색 오일의 화합물 1-9 (18.6 g, 91%)를 얻었다.

[0116] **6) 화합물 1-10의 합성**

[0117] 화합물 1-9 (17.6 g, 59.31 mmol), K₂CO₃ (8.2 g, 59.31 mmol) 및 DMF (297 mL, 0.2M)를 가하고 185°C에서 12시간 동안 환류교반하였다. 반응 혼합물을 에틸아세테이트로 추출하고 MgSO₄로 수분을 제거 후, 감압증류하였다. 이후 메틸렌클로라이드:헥산 = 2:1으로 컬럼 크로마토그래피하여 흰색 오일의 화합물 1-10 (10.1 g, 65%)을 얻었다.

[0118] **7) 화합물 1-11의 합성**

[0119] 화합물 1-10 (10.1 g, 38.8 mmol) 및 피리딘(78 mL, 0.5M)를 가하고 0°C로 냉각 후 Tf₂O (13.68 g, 48.5 mmol)을 천천히 가하였다. 반응 혼합물을 12시간 동안 교반한 후, 이를 물 (300 mL)에 가하였다. 생성된 고체를 CHCl₃로 녹이고 추출하여 물을 제거하였다. 메틸렌클로라이드:헥산= 1:1으로 컬럼 크로마토그래피하여 흰색 오일의 화합물 1-11 (13.9 g, 91%)을 얻었다.

[0120] **8) 화합물 1-12의 합성**

[0121] 화합물 1-11 (13.9 g, 35.43 mmol), 비스(피나콜라토)디보론 (B₂pin₂) (10.8 g, 42.51 mmol), KOAc (8.69 g, 88.58 mmol), s-phos (1.45 g, 3.543 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.62 g, 1.77 mmol), 및 1,4-디옥산 (177 mL, 0.2 M)을 가하고 130°C에서 3시간 동안 환류교반하였다. 반응 후 실온으로 냉각하고 반응혼합물을 셀라이트 필터한 후 메틸렌클로라이드:헥산 = 2:1으로 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 1-12 (7.0 g, 54%)을 얻었다.

[0122] **9) 화합물 1-13의 합성**

[0123] 화합물 1-12 (13.9 g, 35.43 mmol), 2-브로모피리딘 (2.89 g, 18.26 mmol), Pd(PPh₃)₄ (633 mg, 0.55 mmol), Na₂CO₃ (5.8 g, 54.78 mmol), 톨루엔 (90 mL, 0.2 M), EtOH (45 mL), 및 H₂O (27 mL, 2 M)를 넣고, 110°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 에틸아세테이트로 추출하고 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 이 후, 메틸렌클로라이드:헥산 = 3:1로 컬럼크로마토그래피하여 노란색 고체 화합물 1-13 (4.2 g, 45%)을 얻었다.

[0124] **10) 화합물 D-17의 합성**

[0125] 화합물 1-13 (4.2 g, 13.07 mmol), 화합물 1-5 (4.85 g, 6.53 mmol), MeOH (100 mL), 및 EtOH (50 mL)을 가하고 90°C에서 12시간 동안 환류교반하였다. 실온으로 냉각시킨 다음 여과한 후, 클로로포름으로 컬럼크로마토그

래피하여 화합물 D-17 (1.5 g, 27 %)를 얻었다.

[0126]

이상과 같이 제조된 화합물 D-17의 물성은 다음과 같다.

화합물	MW	UV	PL	M.P.
D-17	849.03 g/mol	290 nm	507 nm	400°C 초과

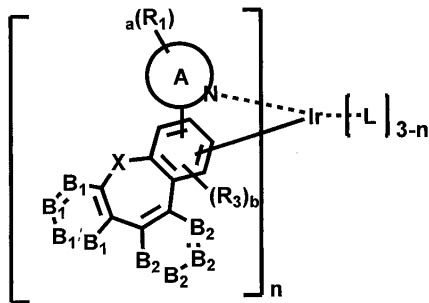
[0127]

[0128]

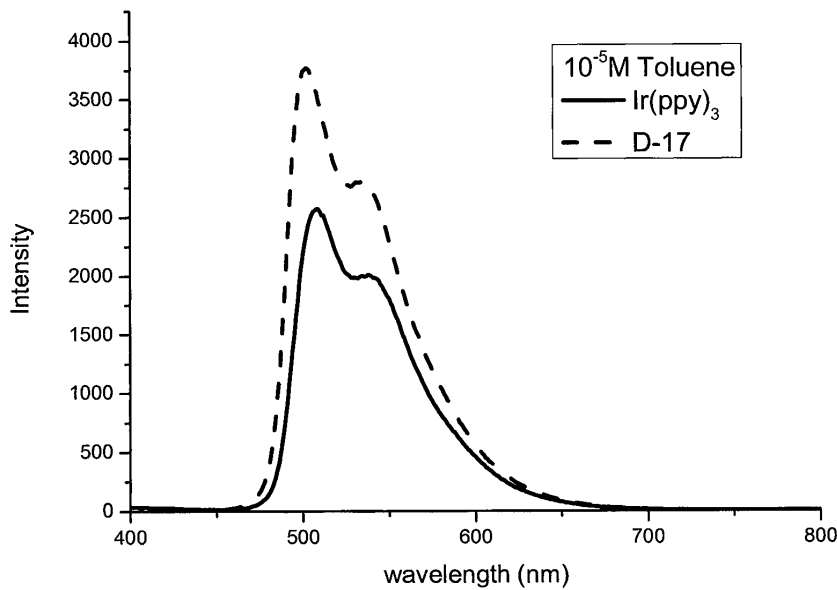
도 2는 본원의 일 양태에 따른 화합물 D-17과 비교예 화합물(Ir(ppy)₃)의 파장에 따른 PL 강도를 비교한 것이다. 본원의 화합물 D-17은 비교예 화합물 Ir(ppy)₃에 비해 동일 파장에서 높은 PL 강도를 보이는데, 대상물질의 양자효율은 대상물질과 표준(standard) 발광 스펙트럼의 비와 표준(standard) 양자효율과의 곱에 비례하기 때문에 PL 강도(intensity)가 높은 물질은 발광 스펙트럼의 적분값이 커서 보다 큰 양자 효율을 갖게 된다. 따라서 본원의 유기 전계 발광 화합물은 기존의 물질에 비해 발광 특성이 우수함을 확인할 수 있다.

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	有机电致发光化合物和包括该化合物的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020200003636A	公开(公告)日	2020-01-10
申请号	KR1020180076640	申请日	2018-07-02
[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		
[标]发明人	김현 전지송 전정환 이연건 황선진 조영준		
发明人	김현 전지송 전정환 이연건 황선진 조영준		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 C09K2211/185 H01L51/5012 H05B33/14 H01L51/0032		
代理人(译)	张本勋		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及由化学式1表示的有机电致发光化合物和包括该化合物的有机电致发光器件。通过包含根据本发明的有机电致发光化合物，与常规有机电致发光装置相比，该有机电致发光装置具有低驱动电压，高发光效率和/或使用寿命长的性质。化学式(1)中取代基的定义与说明书中定义相同。

