

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2014-0073193 (43) 공개일자 2014년06월16일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)	(71) 출원인 롬엔드하스전자재료코리아유한회사 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)	(72) 발명자 문두현 경기 화성시 병점중앙로 204, 104동 101호 (진안동, 월드메르디앙1단지아파트) 양수진 경기 화성시 동탄숲속로 95, 811동 1101호 (능동, 숲속마을광명메이루즈아파트) (뒷면에 계속)
(21) 출원번호 10-2012-0141109 (22) 출원일자 2012년12월06일 심사청구일자 없음	(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, 전류효율 및 발광효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

(72) 발명자

안희춘

경기 수원시 영통구 영통로174번길 62, 105호 (매포동, 신흥빌라)

전지송

경기 화성시 병점동로134번길 49, (진안동)

이경주

서울 마포구 새창로8길 72, 210동 1001호 (도화동, 도화현대홈타운아파트)

이태진

서울 동대문구 한천로11길 10, 109동 903호 (답십리동, 동아아파트)

권혁주

서울 강남구 학동로68길 29, 105동 2003호 (삼성동, 삼성동힐스테이트1단지아파트)

김봉옥

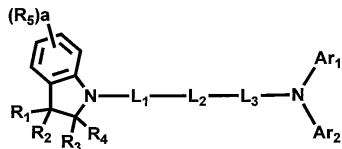
서울 강남구 삼성로111길 8, 208동 401호 (삼성동, 삼성동힐스테이트2단지아파트)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



L_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고;

L_2 및 L_3 은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이며;

Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고;

R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 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, $-NR_{11}R_{12}$, $-SiR_{13}R_{14}R_{15}$, $-SR_{16}$, $-OR_{17}$, $-COR_{18}$ 또는 $-B(OR_{19})(OR_{20})$ 이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 치환 또는 비치환된 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있는데, 이 때 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

R_2 와 R_3 는 서로 결합하여 이중결합을 형성할 수 있으며;

단, R_5 는 $-NR_{11}R_{12}$ 는 아니고;

R_{11} 내지 R_{20} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 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)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고; 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며;

a 는 1 내지 4의 정수이고, 2 이상의 정수인 경우 각각의 R_5 는 동일하거나 상이할 수 있으며;

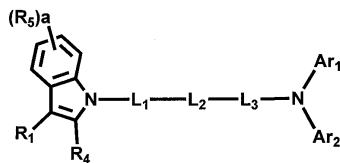
상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

상기 헤테로시클로알킬은 O, S 및 N에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 화합물은 하기 화학식 2로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 2]



상기 화학식 2에서, L_1 내지 L_3 , Ar_1 , Ar_2 , R_1 , R_4 , R_5 및 a 는 제1항에서의 정의와 동일하다.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 L_1 내지 L_3 , Ar_1 , Ar_2 , R_1 내지 R_5 , 및 R_{11} 내지 R_{20} 에서 치환 (C1-C30)알킬, 치환 (C2-C30)알케닐, 치환 (C2-C30)알키닐, 치환 (C1-C30)알콕시, 치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 (C6-C30)아릴(렌) 및 치환 (3-30원)헤테로아릴(렌)의 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 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 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서, 상기 L_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴렌이고;

상기 L_2 및 L_3 은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴렌이며;

상기 Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고;

상기 R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (5-20원) 단일환의 치환 또는 비치환된 치환족 고리를 형성할 수 있고; R_2 와 R_3 는 서로 결합하여 이중결합을 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서, 상기 L_1 은 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 비치환된 (5-7원)헤테로아릴렌이고;

상기 L_2 및 L_3 은 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴렌, 또는 비치환된 (5-7원)헤테로아릴렌이며;

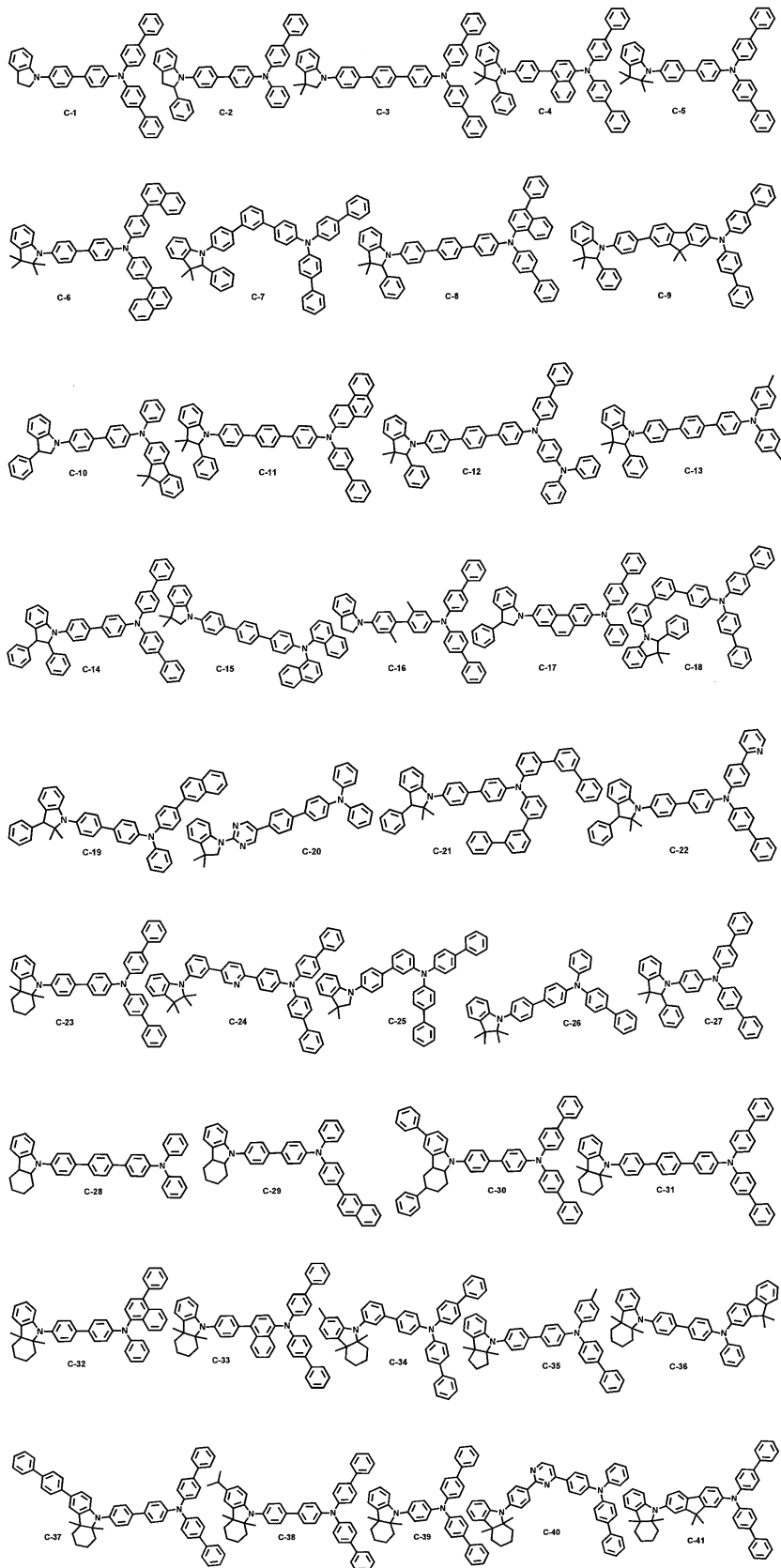
상기 Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬, (C6-C18)아릴, (5-15원)헤테로아릴 또는 디(C6-C10)아릴아미노로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴; 또는 (C6-C10)아릴 또는 (5-7원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (5-7원)헤테로아릴이고;

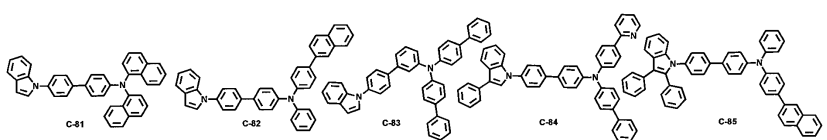
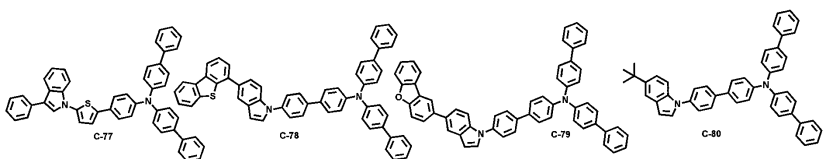
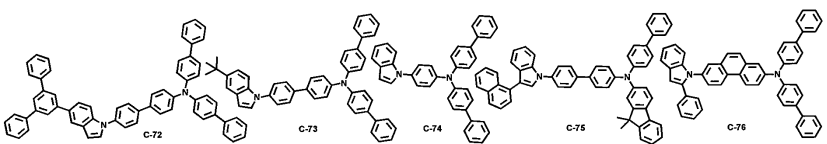
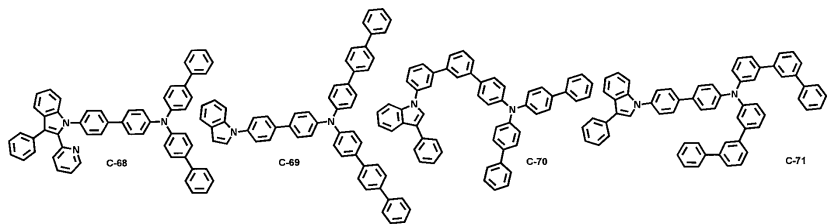
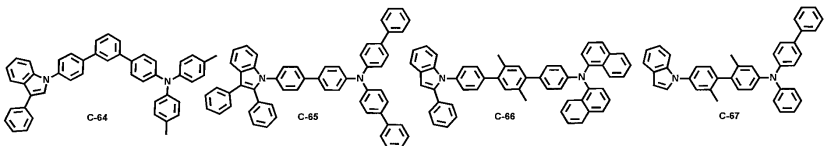
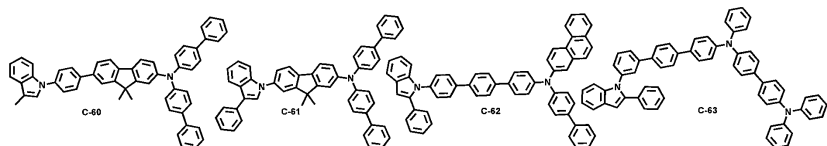
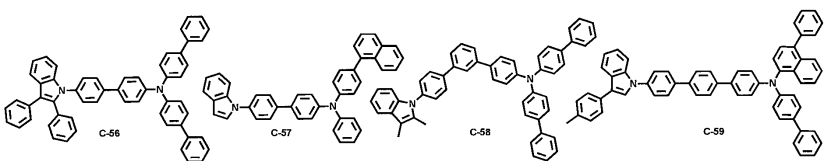
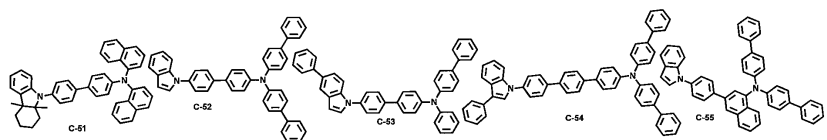
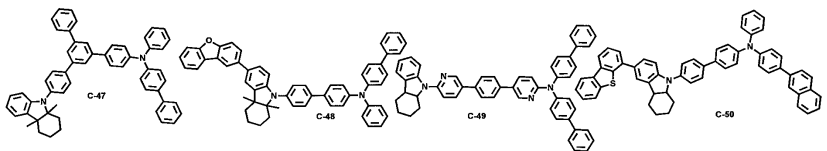
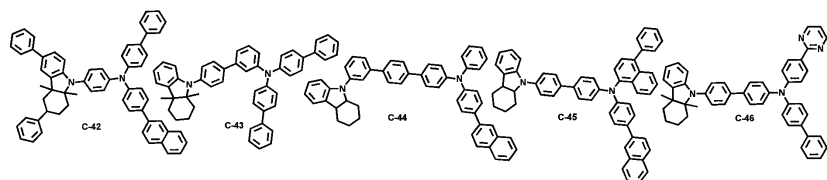
상기 R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소, 비치환된 (C1-C6)알킬, 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 시클로펜틸 또는 시클로헥실을 형성할 수

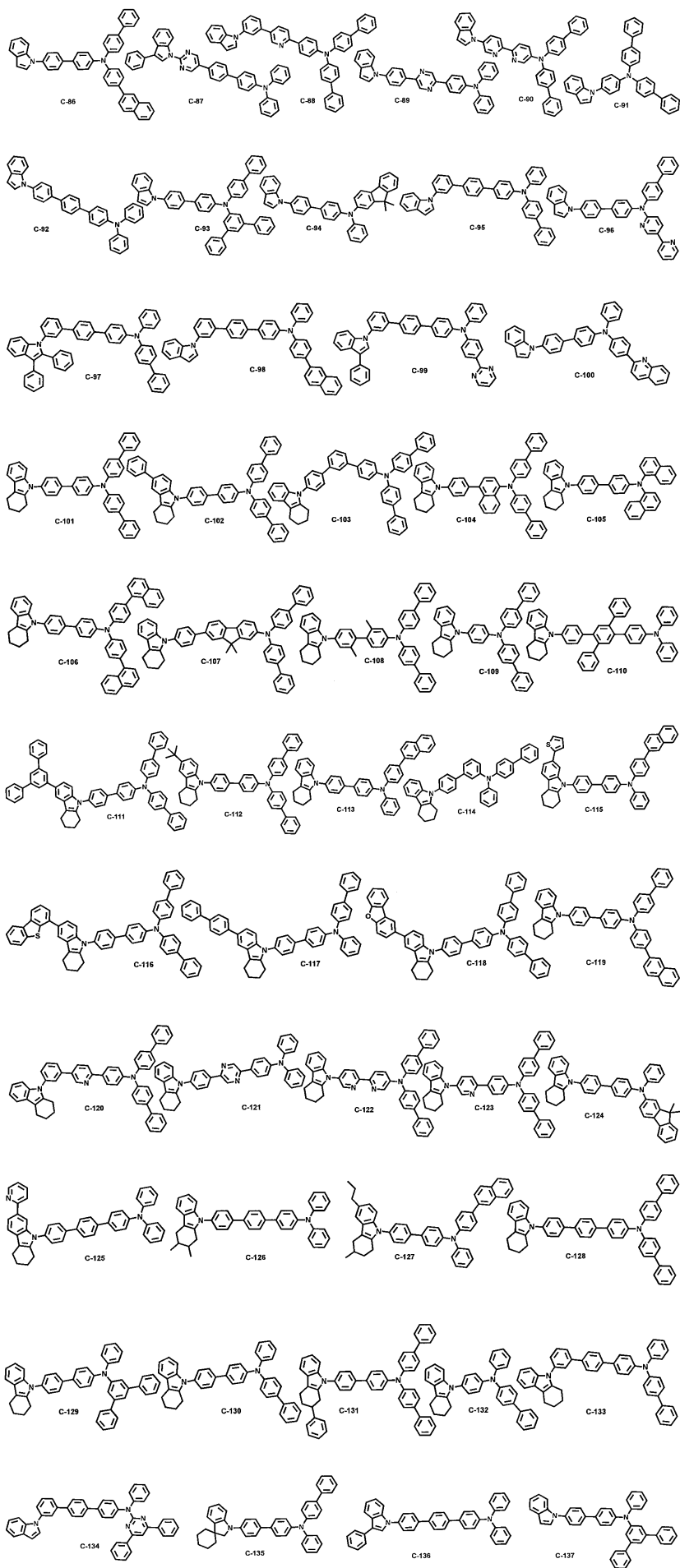
있고; R_2 와 R_3 는 서로 결합하여 이중결합을 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 화합물.

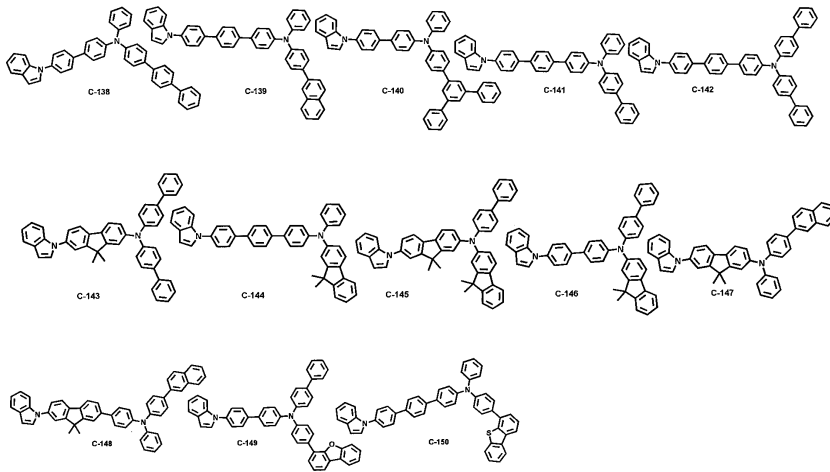
청구항 6

제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 화합물.









청구항 7

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

명세서

기술분야

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

배경기술

[0002] 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].

[0003] 유기 전계 발광 소자에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재까지 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 전계 발광의 메커니즘상 형광 발광 재료에 비해 인광 발광 재료가 이론적으로 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있다는 점에서 인광 발광 재료의 개발 연구가 널리 수행되고 있다. 현재까지 이리듐(III)착물 계열이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 각 RGB 별로는 비스(2-(2'-벤조티에닐)-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.

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

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

[0006] 한편, 유기 전계 발광 소자에서 정공 주입 및 수송 재료로서 구리 프탈로시아닌(CuPc), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB), N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민(TPD), 4,4',4"-트리스(3-메틸페닐페닐아미노)트리페닐아민(MTDATA) 등이 사용되어 왔으나, 이러한 물질을 사용한 경우 유기 전계 발광 소자는 양자 효율 및 수명이 저하되는 문제가 있었다. 그 이유는 유기 전계 발광 소자를 높은

전류에서 구동하게 되면, 양극과 정공 주입층 사이에서 열 스트레스(thermal stress)가 발생하고, 이러한 열 스트레스에 의해 소자의 수명이 급격히 저하되기 때문이다. 또한, 정공 주입층에 사용되는 유기물질은 정공의 운 동성이 매우 크기 때문에, 정공과 전자의 전하 밸런스(hole-electron charge balance)가 깨지고 이로 인해 양자 효율(cd/A)이 낮아지게 된다.

[0007] 한국 등록 특허공보 제10-1153910호 및 일본 공개 특허공보 제2008-133225호 등은 정공전달재료로서 인돌 골격 의 벤젠 고리 중 탄소 원자와 디아릴아민이 아릴렌 등의 링커에 의하여 결합된 화합물을 유기 전계 발광 소자용 화합물로 개시하고 있다.

[0008] 그러나, 상기 문헌들에는 인돌 골격의 질소 원자와 디아릴아민 또는 디히테로아릴아민이 아릴렌 등의 링커에 의 하여 결합된 화합물은 구체적으로 개시하고 있지 않다.

선행기술문헌

특허문헌

[0009] (특허문헌 0001) 한국등록특허 KR10-1153910 (2012.06.07 공고)
(특허문헌 0002) 일본공개특허 JP2012-133225 (2008.06.12 공개)

발명의 내용

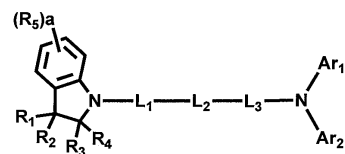
해결하려는 과제

[0010] 본 발명의 목적은 전류효율 및 발광효율이 우수한 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0011] 상기의 기술적 과제를 해결하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발 광 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0012] [화학식 1]



[0013]

상기 화학식 1에서,

[0015] L₁ 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고;

[0016] L₂ 및 L₃은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원) 헤테로아릴렌이며;

[0017] Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴 이고;

[0018] R₁ 내지 R₅는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30) 알콕시, 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)헤테 로아릴, -NR₁₁R₁₂, -SiR₁₃R₁₄R₁₅, -SR₁₆, -OR₁₇, -COR₁₈ 또는 -B(OR₁₉)(OR₂₀)이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (3-30 원) 단일환 또는 다환의 치환 또는 비치환된 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있는데, 이 때 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

- [0019] R_2 와 R_3 는 서로 결합하여 이중결합을 형성할 수 있으며;
- [0020] 단, R_5 는 $-NR_{11}R_{12}$ 는 아니고;
- [0021] R_{11} 내지 R_{20} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 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)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고; 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며;
- [0022] a는 1 내지 4의 정수이고, 2 이상의 정수인 경우 각각의 R_5 는 동일하거나 상이할 수 있으며;
- [0023] 상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;
- [0024] 상기 헤테로시클로알킬은 O, S 및 N에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

발명의 효과

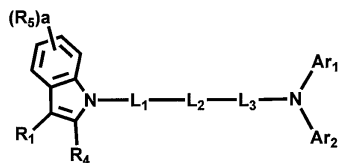
- [0025] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 전류효율 및 발광효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

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 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.
- [0028] 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 탄화수소에 서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 예로서 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐 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, 피리디, 비피리디, 피라진일, 피리미디, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인돌리닐, 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.

[0030] 본원 발명의 일실시예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[0031] [화학식 2]



[0032]

[0033] 상기 화학식 2에서, L₁ 내지 L₃, Ar₁, Ar₂, R₁, R₄, R₅ 및 a는 화학식 1에서의 정의와 동일하다.

[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. 상기 화학식 1의 L₁ 내지 L₃, Ar₁, Ar₂, R₁ 내지 R₅, 및 R₁₁ 내지 R₂₀에서 치환 (C1-C30)알킬, 치환 (C2-C30)알케닐, 치환 (C2-C30)알키닐, 치환 (C1-C30)알콕시, 치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 (C6-C30)아릴(렌) 및 치환 (3-30원)헤테로아릴(렌)의 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 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 하나 이상인 것을 의미하고, 각각 독립적으로 (C1-C30)알킬, (3-30원)헤테로아릴, (C6-C30)아릴 및 디(C6-C30)아릴아미노로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인 것이 바람직하다.

[0035]

상기 화학식 1에서, 상기 L₁ 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴렌이며, 더욱 바람직하게는 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 비치환된 (5-7원)헤테로아릴렌이다.

[0036]

상기 L₂ 및 L₃은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고, 바람직하게는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴렌이며, 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴렌, 또는 비치환된 (5-7원)헤테로아릴렌이다.

[0037]

상기 Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고, 바람직하게는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이며, 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬, (C6-C18)아릴, (5-15원)헤테로아릴 또는 디(C6-C10)아릴아미노로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴; 또는 (C6-C10)아릴 또는 (5-7원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (5-7원)헤테로아릴이다.

[0038]

상기 R₁ 내지 R₅는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 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, -NR₁₁R₁₂, -SiR₁₃R₁₄R₁₅, -SR₁₆, -OR₁₇, -COR₁₈ 또는 -B(OR₁₉)(OR₂₀)이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 치환 또는 비치환된 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있는데, 이 때 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, R₁ 내지 R₅는 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (5-20원) 단

일환의 치환 또는 비치환된 지환족 고리를 형성할 수 있으며, 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 비치환된 (C1-C6)알킬, 비치환된 (C6-C18)아릴, 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 시클로펜틸 또는 시클로헥실을 형성할 수 있고,

[0039] R_2 와 R_3 는 서로 결합하여 이중결합을 형성할 수 있고,

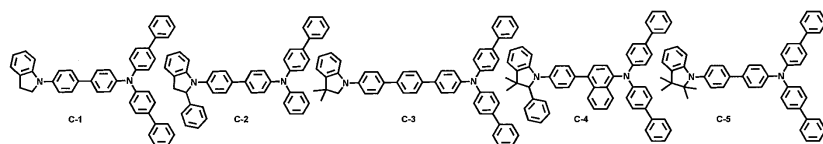
[0040] 단, R_5 는 $-NR_{11}R_{12}$ 는 아니다.

[0041] 상기 R_{11} 내지 R_{20} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 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)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고; 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있다.

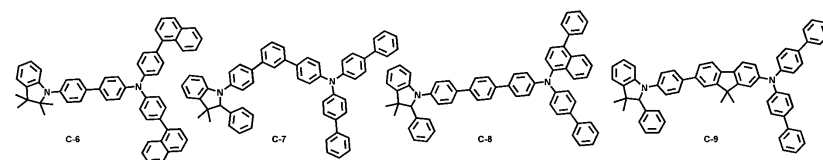
[0042] 본원 발명의 일실시예에 따르면, 상기 화학식 1에서, 상기 L_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴렌이고; L_2 및 L_3 은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴렌이며; Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고; R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (5-20원) 단일환의 치환 또는 비치환된 지환족 고리를 형성할 수 있고; R_2 와 R_3 는 서로 결합하여 이중결합을 형성할 수 있다.

[0043] 본원 발명의 다른 일실시예에 따르면, 상기 화학식 1에서, 상기 L_1 은 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 또는 비치환된 (5-7원)헤테로아릴렌이고; L_2 및 L_3 은 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 비치환된 (5-7원)헤테로아릴렌이며; Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬, (C6-C18)아릴, (5-15원)헤테로아릴 또는 디(C6-C10)아릴아미노로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴; 또는 (C6-C10)아릴 또는 (5-7원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (5-7원)헤테로아릴이고; R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소, 비치환된 (C1-C6)알킬, 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 시클로펜틸 또는 시클로헥실을 형성할 수 있고; R_2 와 R_3 는 서로 결합하여 이중결합을 형성할 수 있다.

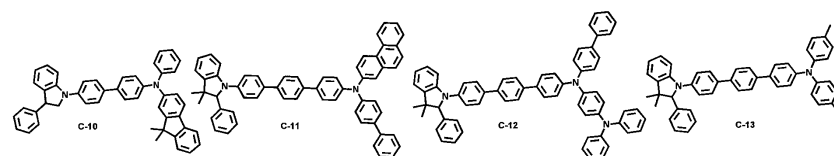
[0044] 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



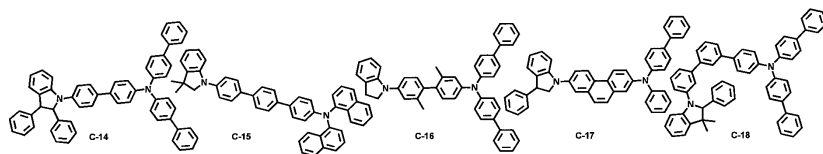
[0045]



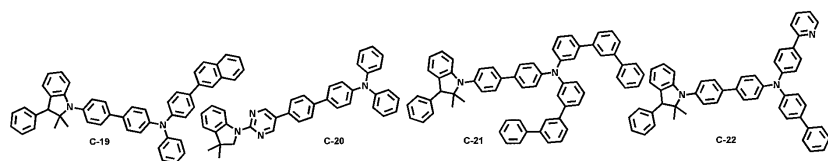
[0046]



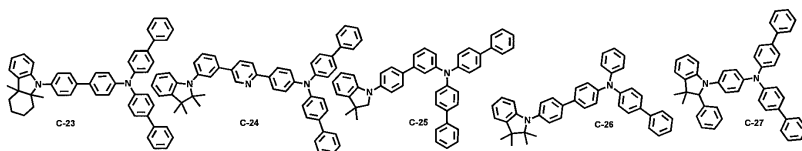
[0047]



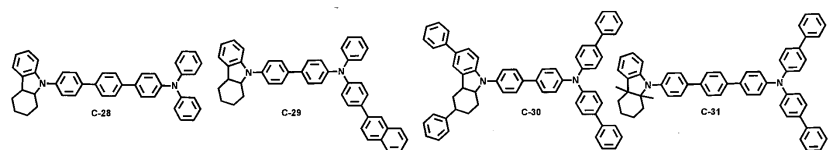
[0048]



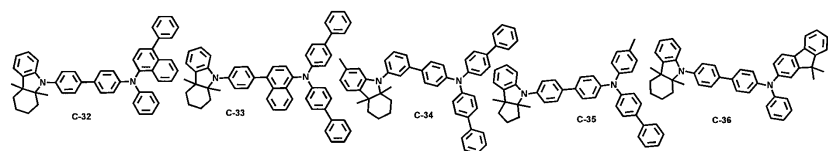
[0049]



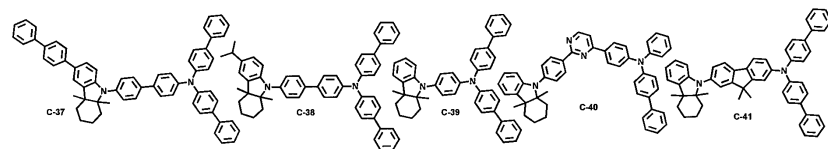
[0050]



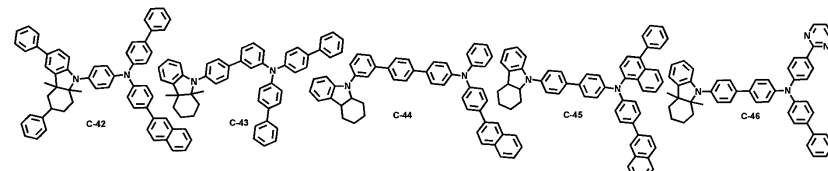
[0051]



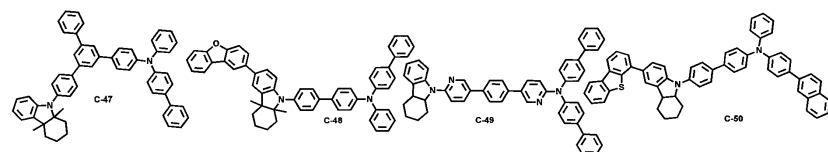
[0052]



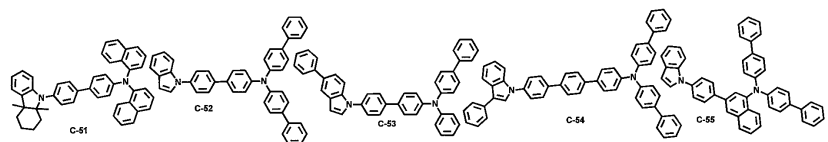
[0053]



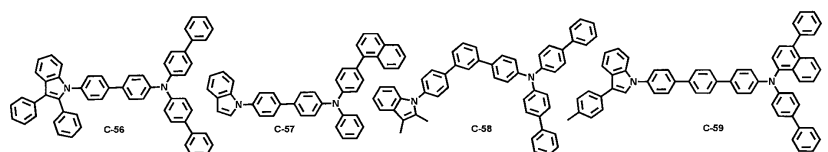
[0054]



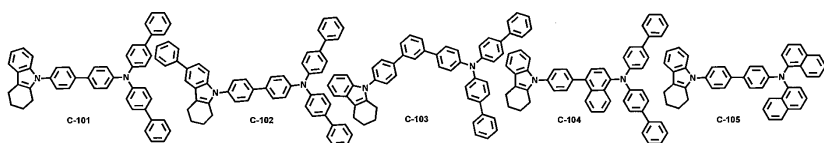
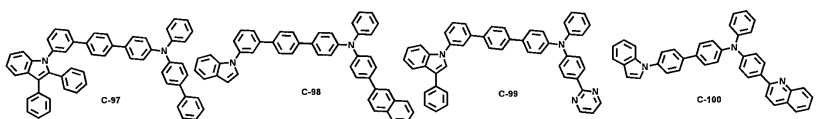
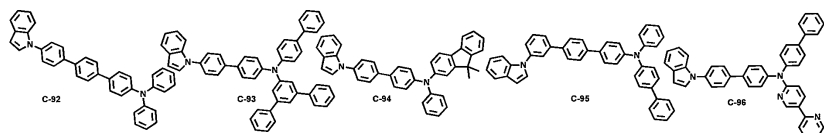
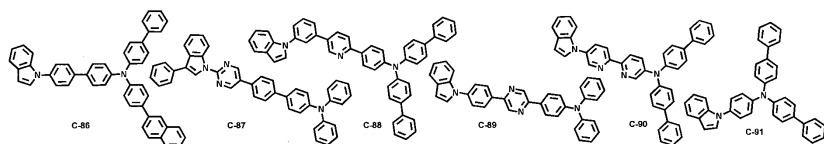
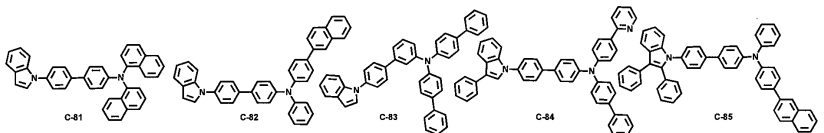
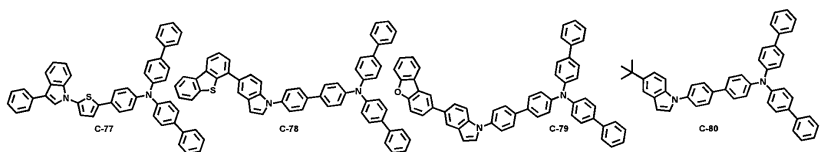
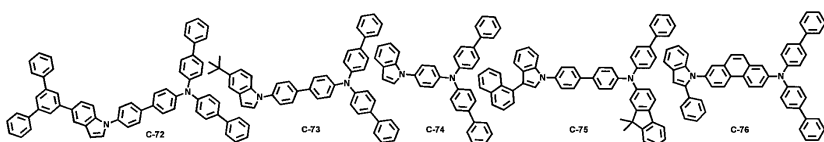
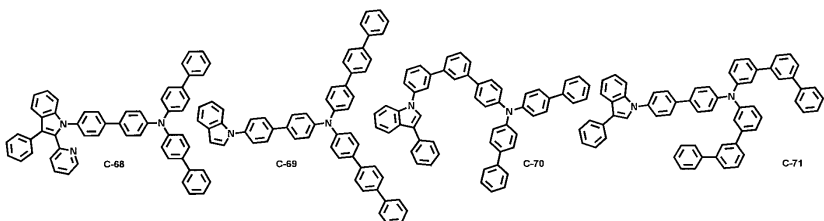
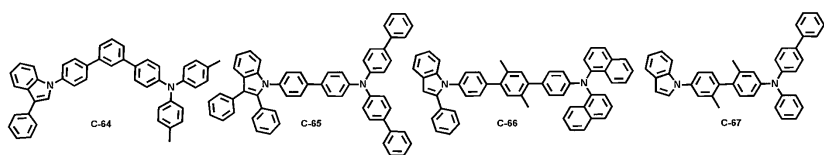
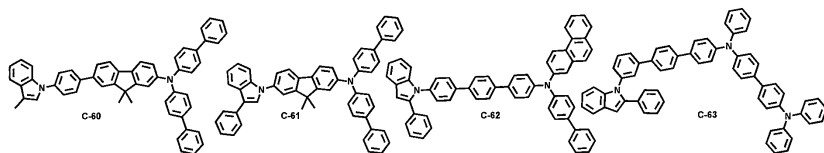
[0055]

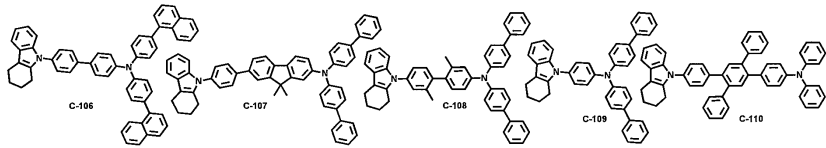


[0056]

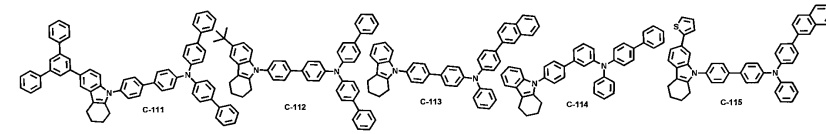


[0057]

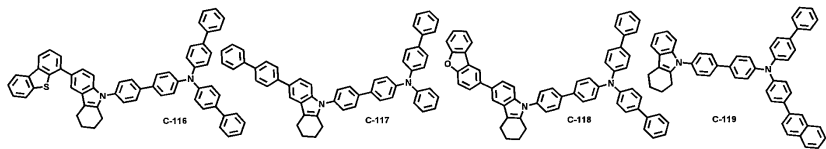




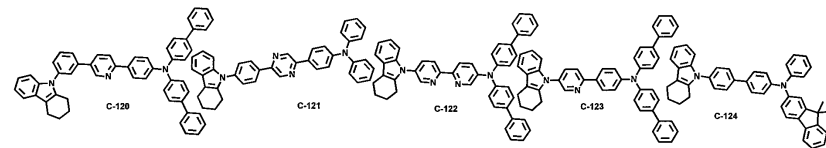
[0068]



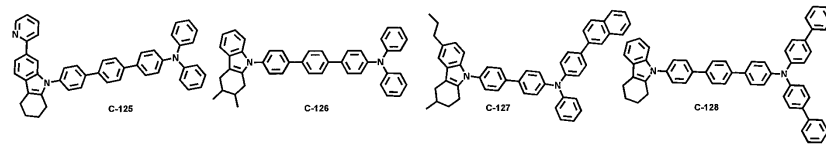
[0069]



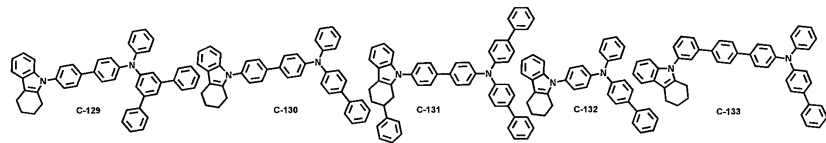
[0070]



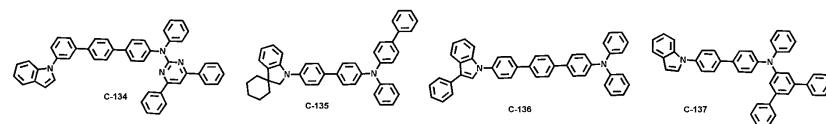
[0071]



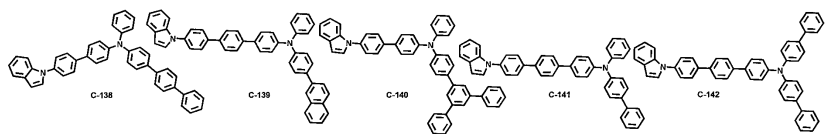
[0072]



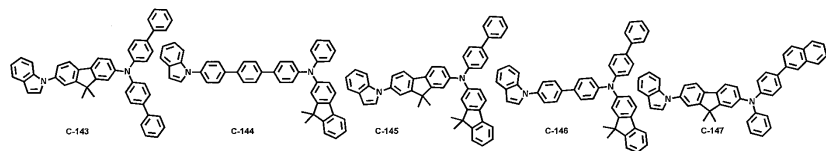
[0073]



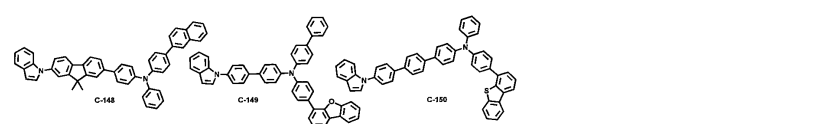
[0074]



[0075]



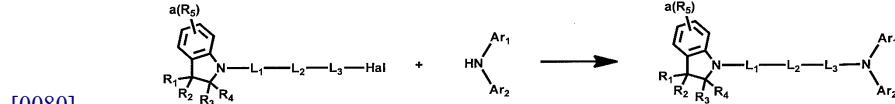
[0076]



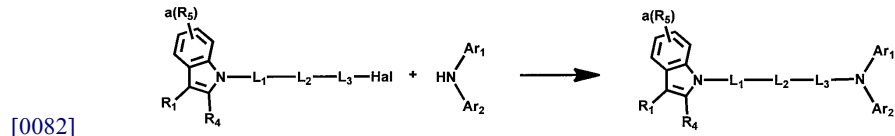
[0077]

[0078] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식에 나타난 바와 같이 제조할 수 있다.

[0079] [반응식 1]



[0081] [반응식 2]



[0083] 상기 반응식 1 및 2에서 L₁ 내지 L₃, Ar₁, Ar₂, R₁ 내지 R₅ 및 a는 상기 화학식1에서의 정의와 동일하고 Hal은 할로겐이다.

[0084] 또한, 본 발명은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0085] 상기 재료는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0086] 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.

[0087] 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.

[0088] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층 및 정공전달층 중 하나 이상에 포함될 수 있다. 정공전달층에 사용될 경우, 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 정공전달 재료로서 포함될 수 있다. 발광층에 사용될 경우, 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다.

[0089] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 이외의 하나 이상의 다른 화합물을 호스트 재료로서 더 포함할 수 있으며, 하나 이상의 도판트를 더 포함할 수 있다.

[0090] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물이 발광층의 호스트 재료(제1 호스트 재료)로서 포함되는 경우, 그 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 포함할 수 있다. 이 때, 제1 호스트 재료와 제 2호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

[0091] 상기 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 이외의 다른 화합물의 호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하나, 하기 화학식 3 내지 화학식 5로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 발광 효율 면에서 특히 바람직하다.

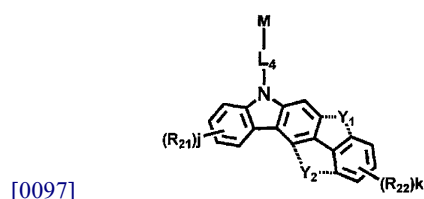
[0092] [화학식 3]



[0094] [화학식 4]

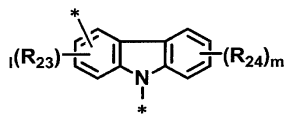


[0096] [화학식5]



[0098] 상기 화학식 3 내지 5에서,

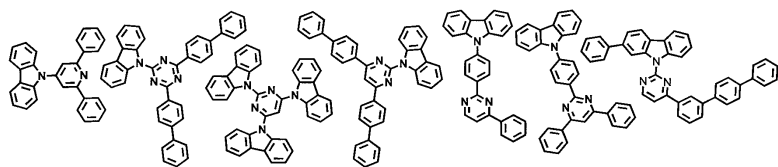
[0099] Cz는 하기 구조이며,



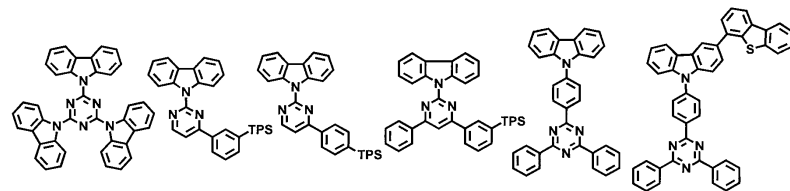
[0100]

[0101] 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 (3-30원)헤테로아릴 또는 $R_{25}R_{26}R_{27}Si-$ 이며, R_{25} 내지 R_{27} 는 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)헤테로아릴렌이고; M은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며; Y_1 및 Y_2 는 -O-, -S-, -N(R_{31})-, -C(R_{32})(R_{33})- 이고, Y_1 과 Y_2 가 동시에 존재하는 경우는 없으며; R_{31} 내지 R_{33} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, R_{32} 및 R_{33} 은 동일하거나 상이할 수 있으며; h 및 i는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, j, k, l 및 m은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, h, i, j, k, l 또는 m이 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.

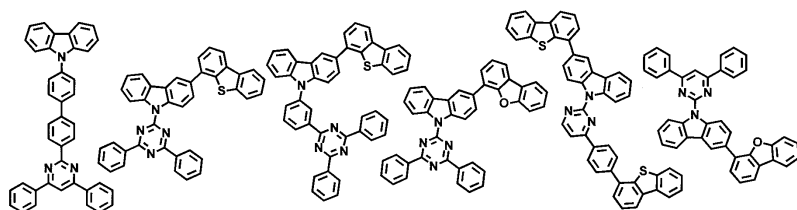
[0102] 구체적으로 상기 호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같다.



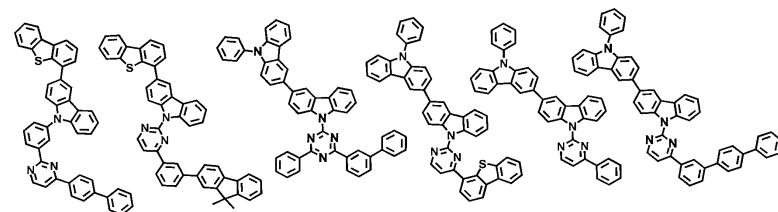
[0103]



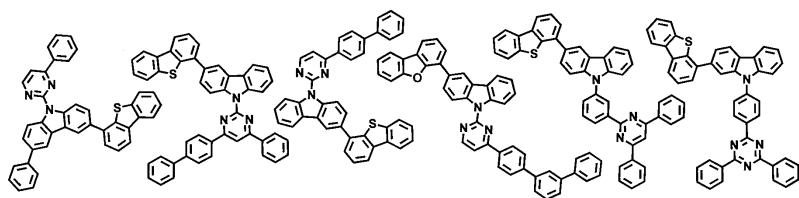
[0104]



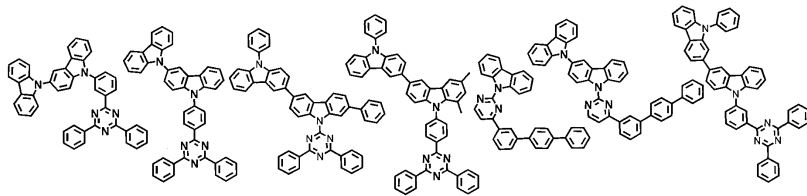
[0105]



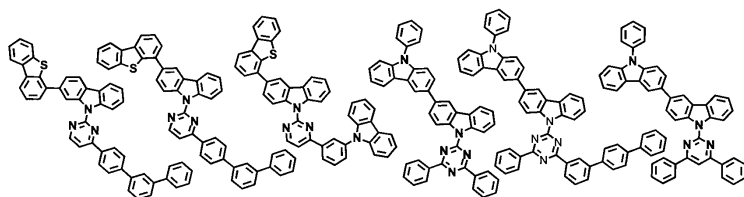
[0106]



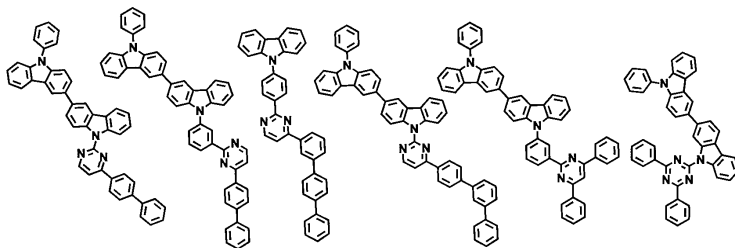
[0107]



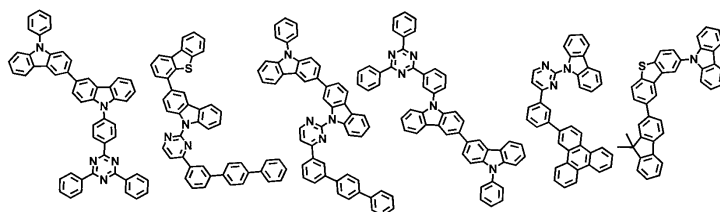
[0108]



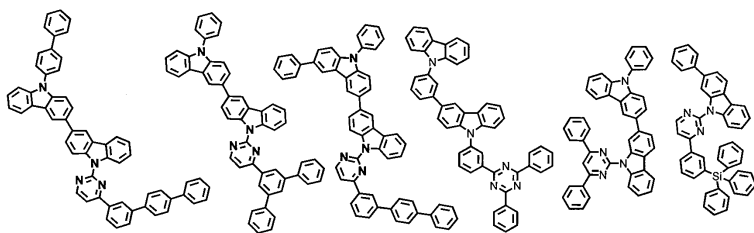
[0109]



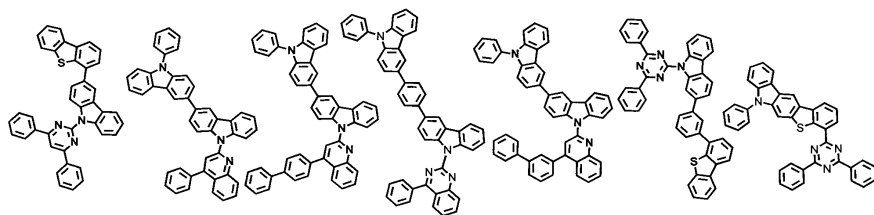
[0110]



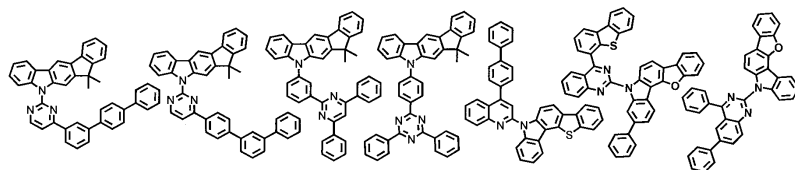
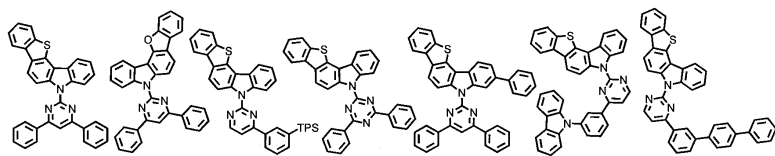
[0111]



[0112]



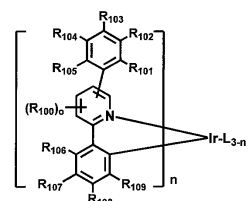
[0113]



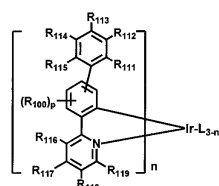
상기 도판트로는 하나 이상의 인광 도판트가 바람직하다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물이 바람직하고, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물이 더욱 바람직하며, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물이 더더욱 바람직하다.

상기 인광 도판트는 하기 화학식 6 내지 화학식 8로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.

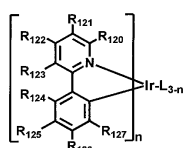
[화학식 6]



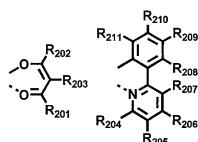
[화학식 7]



[화학식 8]



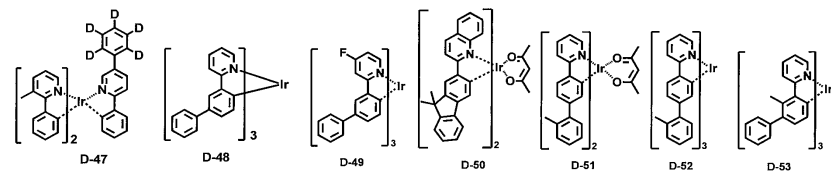
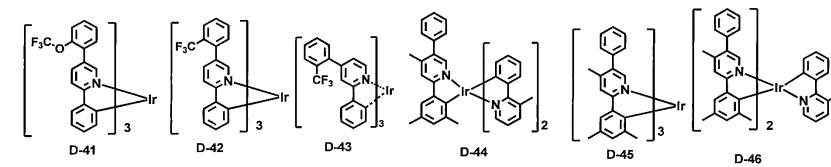
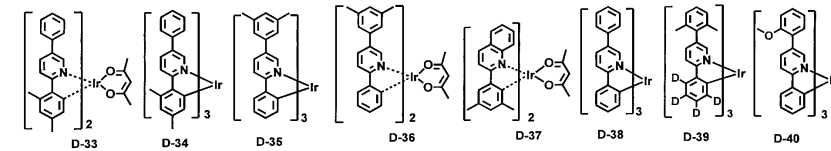
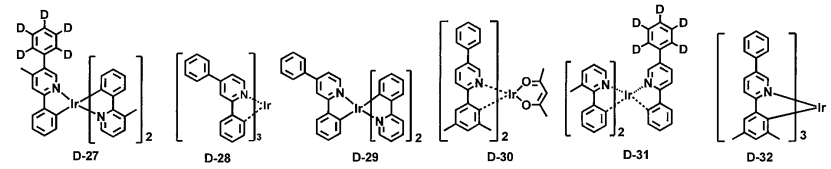
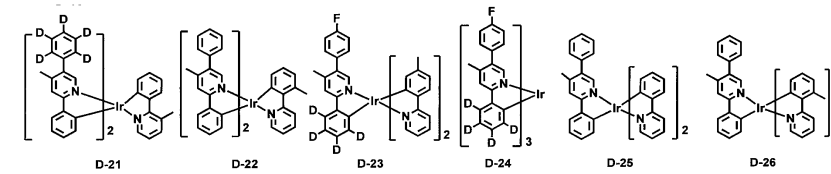
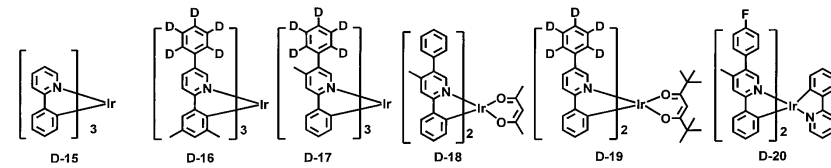
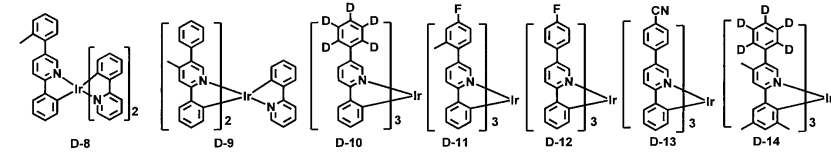
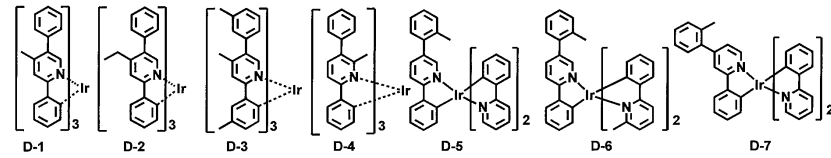
상기 화학식 6 내지 8에서, L은 하기구조에서 선택되고;

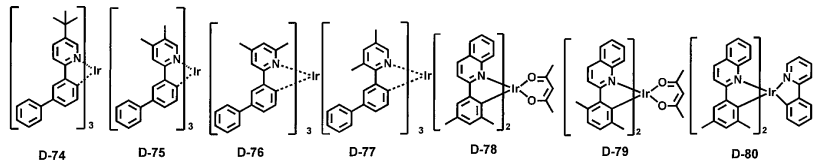
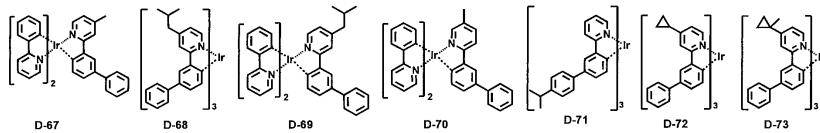
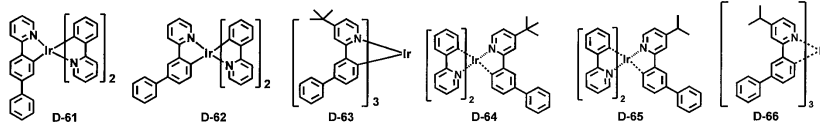
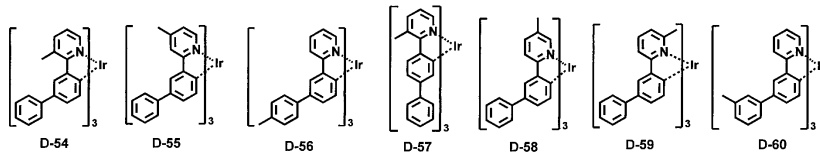


R₁₀₀은 수소, 또는 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬이며; R₁₀₁ 내지 R₁₀₉ 및 R₁₁₁ 내지 R₁₂₃은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠이 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬, 시아노, 또는 치환 또는 비치환 (C1-C30)알콕시이고; R₁₂₀ 내지 R₁₂₃는 인접 치환기간 융합고리를 이뤄 퀴놀린 형성이 가능하며; R₁₂₄ 내지 R₁₂₇는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환(C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환 (C1-C30)아틸이며; R₁₂₄ 내지 R₁₂₇가 아틸기인 경우 인접기와 융합고리를 이뤄 플루오렌 형성이 가능하며; R₂₀₁ 내지 R₂₁₁은 각각

독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 또는 할로젠이 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬이며; o 및 p는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며, o 또는 p가 각각 2이상의 정수인 경우 각각의 R₁₀₀은 서로 동일하거나 상이할 수 있고; n은 1 내지 3의 정수이다.

상기 인광 도판트 재료의 구체적인 예로는 다음과 같다.





본 발명은 추가의 양태로 유기 전계 발광 소자 제조용 조성물을 제공한다. 상기 조성물은 호스트 재료 또는 정공전달층 재료로서 본 발명의 화합물을 포함한다.

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

본 발명의 유기 전계 발광 소자는 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 유기 전계 발광 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타넘계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 착체화합물을 더 포함할 수도 있고, 나아가 상기 유기물층은 발광층 및 전하생성층을 더 포함할 수 있다.

또한, 상기 유기물층은 상기 유기 전계 발광 화합물 이외에 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함하는 유기 발광층 하나 이상을 동시에 포함하여 백색 발광을 하는 유기 전계 발광 소자를 형성할 수 있다.

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 일층(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 SiO_x ($1 \leq x \leq 2$), AlO_x ($1 \leq x \leq 1.5$), SiON 또는 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, 이렇게 제작된 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, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하생성층으로 사용하여 두 개 이

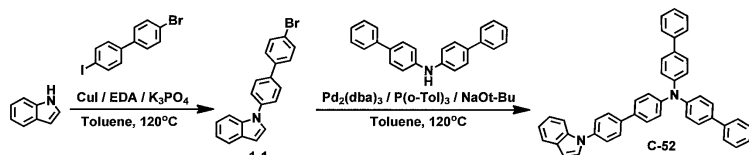
상의 발광층을 가진 백색 유기 전계 발광소자를 제작할 수 있다.

[0147] 본 발명의 유기전계발광소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막법이 나 스핀코팅, 디핑, 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

[0148] 습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로퓨란, 디옥산 등의 적절한 용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 각 층의 재료가 용해 또는 분산되는 것이라면 어느 것이어도 된다.

[0149] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광특성을 설명한다.

[0150] [실시예 1] 화합물 C-52의 제조



[0151]

[0152] 화합물 1-1의 제조

[0153] 1H-인돌 (20 g, 0.170 mol), 4-브로모-4'-아이오도-1,1'-비페닐 (61 g, 0.187 mol), 요오드화구리(CuI) (6.5 g, 0.034 mol), 에틸렌다이아민(EDA) (23 mL, 0.341 mol), 및 인산칼륨(K₃PO₄) (72.5 g, 0.341 mol)을 톨루엔 (Toluene) 0.9 L에 녹였다. 이 혼합물을 120°C에서 3시간 동안 교반 후 실온으로 식히고, 에틸아세테이트로 추출하고, 얻어진 유기층을 증류수로 씻어주었다. 유기용매는 감압 하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 메탄올로 씻어 필터한 후 건조하였다. 컬럼크로마토그래피하여 화합물 1-1 (39 g, 66 %)을 얻었다.

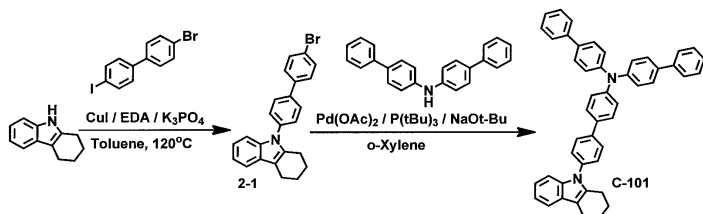
[0154] 화합물 C-52의 제조

[0155] 화합물 1-1 (10 g, 28 mmol), 디([1,1'-비페닐]-4-일)아민 (10.2 g, 32 mmol), 트리스-(디벤질리덴아세톤)-디팔라듐(Pd₂(dba)₃) (0.5 g, 0.57 mmol), 트리스(오르소-톨루일)포스핀(P(o-Tol)₃) (0.7 g, 2.28 mmol) 및 나트륨부톡사이드(NaOt-Bu) (4.1 g, 43.08 mmol)을 톨루엔 150 mL에 녹였다. 이 혼합물을 120°C에서 3시간 동안 교반하여 주었다. 반응물을 실온으로 식힌 후 에틸아세테이트로 추출하고, 얻어진 유기층을 증류수로 씻어주었다. 유기용매는 감압 하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 메탄올로 씻어 필터한 후 건조하였다. 컬럼크로마토그래피하여 화합물 C-52 (2.7 g, 16 %)을 얻었다.

[0156] 물성데이터: 녹는점 195°C, UV 386 nm (톨루엔 내에서),

[0157] PL 405 nm (톨루엔 내에서), 분자량 588.74

[0158] [실시예 2] 화합물 C-101의 제조



[0159]

[0160] 화합물 2-1의 제조

[0161] 1H-인돌 대신 2,3,4,9-테트라하이드로카바졸 (20 g, 170 mmol)를 사용한 것 외에는 상기 실시예 1에서 화합물 1-1의 제조방법과 동일하게 제조하여 화합물 2-1 (31 g, 66 %)을 얻었다.

[0162] 화합물 C-101의 제조

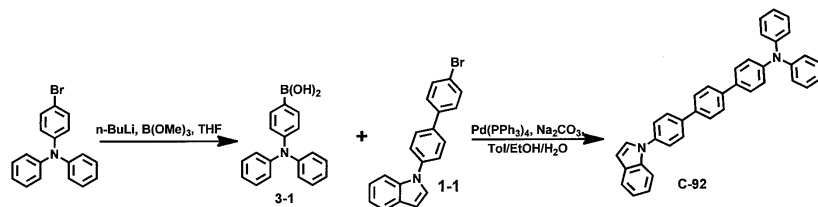
[0163] 화합물 2-1 (10 g, 25 mmol), 디([1,1'-비페닐]-4-일)아민 (8 g, 25 mmol), 팔라듐아세테이트(Pd(OAc)₂) (0.11 g, 0.5 mmol), P(t-Bu)₃ (0.4 mL, 1 mmol), NaOt-Bu (3.6 g, 38 mmol)을 자일렌(o-xylene) 150 mL에 녹였다.

이 혼합물을 120℃에서 3시간 동안 교반하여 주었다. 반응물을 실온으로 식힌 후 에틸아세테이트로 추출하고, 얻어진 유기층을 증류수로 씻어주었다. 유기용매는 감압 하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 메탄올로 씻어 필터한 후 건조하였다. 컬럼크로마토그래피하여 화합물 **C-101** (6.5 g, 44 %)을 얻었다.

물성데이터: 녹는점 304℃, UV 346 nm (톨루엔 내에서)

PL 396 nm (톨루엔 내에서), 분자량 642.83

[실시예 3] 화합물 C-92의 제조



화합물 3-1의 제조

플라스크에 테트라하이드로퓨란(THF) (700 mL, 4-브로모-N,N-디페닐아닐린 (30 g, 0.093 mmol) 을 넣은 후 질소 하에서 교반하면서 -78℃에서 노르말-부틸리튬(n-BuLi) (55 mL, 2.25 M)을 천천히 넣어주었다. -78℃에서 1시간 교반하고, -78℃에서 트리메톡시보란(B(OMe)₃) (21 mL, 0.19 mol) 을 천천히 넣은 후 상온으로 온도를 올려 12시간 반응시켰다. 반응 후 에틸아세테이트를 사용하여 추출하고, 얻어진 유기층을 무수황산마그네슘(MgSO₄)로 건조하였고, 거른 후 감압 하에서 용매를 제거한 후, 재결정하여 흰색 고체, 화합물 3-1 (17 g, 62 %)를 얻었다.

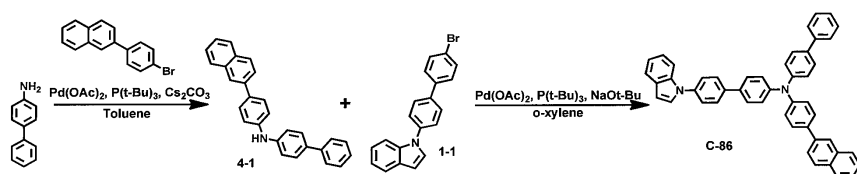
화합물 C-92의 제조

플라스크에 화합물 1-1 (7 g, 0.02 mol), 화합물3-1 (7 g, 0.02 mol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐(Pd(PPh₃)₄) (0.7 g, 0.6 mol), 탄산나트륨 (5.3 g, 0.05 mol), 톨루엔 (100mL), 에탄올 (25 mL), 증류수 (25 mL)을 넣은 후 120℃에서 12시간 교반하였다. 반응 후 에틸아세테이트를 사용하여 추출하고, 얻어진 유기층을 무수 MgSO₄으로 건조하였고, 거른 후 감압 하에서 용매를 제거한 후, 컬럼크로마토그래피하여 흰색 고체, 화합물 **C-92** (4.6 g, 45 %)을 얻었다.

물성데이터: 녹는점 205℃, UV 390 nm (톨루엔 내에서),

PL 411 nm (톨루엔 내에서), 분자량 512.64

[실시예 4] 화합물 C-86의 제조



화합물 4-1의 제조

플라스크에 4-아미노비페닐 (19 g, 112 mmol), 2-(4-브로모페닐)나프탈렌 (26 g, 94 mmol), Pd(OAc)₂ 0.5g (1.9 mmol), P(t-Bu)₃ (5 mL, 9.4 mmol), 세슘카보네이트(Cs₂CO₃) (60 g, 190 mmol) 및 톨루엔 500 mL을 넣고, 18시간 동안 환류반응시켰다. 반응이 완료된 후, 정제수를 천천히 가하여 반응을 종결시킨 후 증류수와 에틸아세테이트로 추출하였다. 유기층을 무수 MgSO₄로 건조시킨 후 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피하여 화합물 4-1 (18 g, 52 %)를 얻었다.

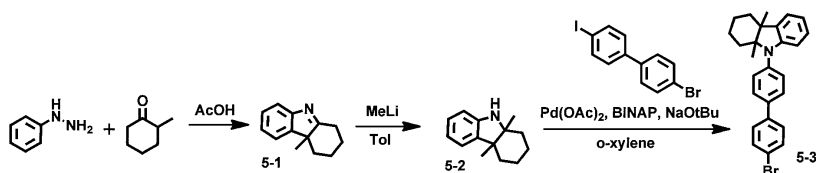
화합물 C-86의 제조

[0179] 플라스크에 화합물 4-1 (9 g, 24 mmol), 화합물 1-1 (8.4 g, 24 mmol), Pd(OAc)₂ (0.16 g, 0.72 mmol), P(t-Bu)₃ (1 mL, 2.4 mmol), NaOt-Bu (3.5 g, 36 mmol), o-자일렌 (50 mL)을 넣고, 1시간 동안 환류반응시켰다. 반응이 완료된 후, 정제수를 천천히 가하여 반응을 종결시킨 후 증류수와 에틸아세테이트로 추출하였다. 유기층을 무수 MgSO₄로 건조시키고 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피하여 화합물 **C-86** (9.1 g, 59 %)를 얻었다.

[0180] 물성데이터: 녹는점 235℃, UV 346 nm (톨루엔 내에서),

[0181] PL 404nm (톨루엔 내에서), 분자량 638.80

[실시예 5] 화합물 C-23의 제조



[0183]

화합물 5-1의 제조

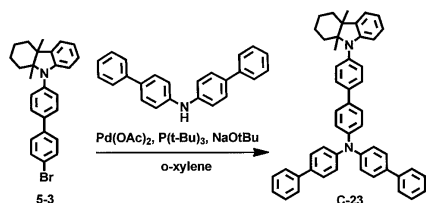
[0185] 페닐히드라진 (60 g, 415 mmol), 2-메틸시클로헥사논 (47 g, 415 mmol)과 아세트산(AcOH) (270 mL)을 120℃에서 5시간 동안 교반시켰다. 교반 완료 후, 냉각된 1 M 수산화나트륨 수용액으로 천천히 염기화한 뒤, 메틸렌클로라이드(MC)로 추출하고, 얻어진 유기층을 농축시킨 후 컬럼크로마토그래피하여 화합물 5-1 (64 g, 84 %)를 얻었다.

화합물 5-2의 제조

[0187] 질소 분위기에서 화합물 5-1 (43 g, 230 mmol)과 톨루엔 (130 mL)을 넣은 뒤, -20℃로 냉각하고, 3 M 메틸리튬(Me-Li) (100 mL)를 천천히 적가한 뒤, 동일 온도에서 3시간 교반하였다. 반응 후, 톨루엔 (150 mL)와 증류수 (150 mL)를 천천히 붓고, 유기층을 추출하여 농축한 후, 농축된 혼합물을 컬럼크로마토그래피하여 화합물 5-2 (36 g, 62 %)를 얻었다.

화합물 5-3의 제조

[0189] 화합물 5-2 (36 g, 138 mmol), 4-브로모-4'-아이오도비페닐 (74 g, 207 mmol), Pd(OAc)₂ (1.2 g, 5.54 mmol), 2,2'-비스디페닐포스피노-1,1'-비나프탈렌(BINAP) (3.45 g, 5.54 mmol), NaOt-Bu (53 g, 554 mmol)을 자일렌 (700 mL)에 녹인 뒤, 1시간 동안 환류반응시켰다. 반응 후 필터하여 여액을 농축하였다. 농축된 혼합물을 컬럼크로마토그래피하여 화합물 5-3 (28 g, 50 %)를 얻었다.



[0190]

화합물 C-23의 제조

[0192] 화합물 2-1 대신에 화합물 5-3 (10 g, 23.1 mmol)를 사용하는 것 외에는 실시예 2에서 화합물 **C-101**의 제조방법과 동일하게 제조하여 화합물 **C-23** (5.4 g, 37 %)를 얻었다.

[0193] 물성데이터: 녹는점 232℃, UV 356 nm (톨루엔 내에서),

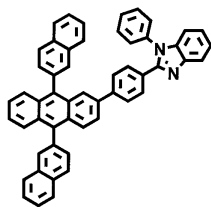
[0194] PL 404 nm (톨루엔 내에서), 분자량 672.90

[소자 제조예 1] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0196] 본 발명의 발광 재료를 이용한 구조의 OLED 소자를 제작하였다. 우선, OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터

연어진 투명전극 ITO 박막($15\Omega/\square$)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기관 홀더에 ITO 기관을 장착한 후, 진공 증착장비 내의 셀에 $N^1, N^{1'}-([1,1'-\text{비페닐}]-4,4'-\text{디일})\text{비스}(N^1-(\text{나프탈렌}-1\text{-일})-N^4, N^4\text{-디페닐벤젠}-1,4\text{-디아민})$ 을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기관 위에 60 nm 두께의 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **C-23**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 정공주입층 위에 20 nm 두께의 정공전달층을 증착하였다. 정공주입층, 정공전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 9-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-7,9'-디페닐-9H,9'H-3,3'-비카바졸을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 **D-1**을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 도판트와 호스트 전체에 대하여 도판트를 15 중량%로 도핑함으로써 상기 정공전달층 위에 30 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 상기 발광층 위에 전자전달층으로서 한쪽 셀에 하기 화합물 **E-1**을 넣고, 또 다른 셀에는 리튬 퀴놀레이트(Lithium quinolate)를 각각 넣은 후, 두 물질을 같은 속도로 증발시켜 각각 50 중량%로 도핑함으로써 30 nm의 전자전달층을 증착하였다. 이어서 전자주입층으로 리튬 퀴놀레이트를 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착장비를 이용하여 Al 음극을 150 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제작하였다. 재료 별로 각 화합물은 10^{-6} torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0197] [화합물 E-1]



[0198]

[0199] 그 결과, 7.7 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 3660 cd/m^2 의 녹색발광이 확인되었다.

[0200] [소자 제조예 2] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0201] 정공전달층으로서 화합물 **C-52**를 20 nm 두께로 증착하고 발광층으로서 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 9-페닐-3-(4-(9-(4-페닐퀴나졸린-2-일)-9H-카바졸-3-일)페닐)-9H-카바졸을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 **D-78**을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 도판트와 호스트 전체에 대하여 도판트를 3 중량%로 도핑함으로써 상기 정공전달층 위에 30 nm 두께의 발광층을 증착한 것 이외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0202] 그 결과, 10.8 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 1500 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다.

[0203] [소자 제조예 3] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0204] 정공전달층으로서 화합물 **C-92**를 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0205] 그 결과, 5.8 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 2800 cd/m^2 의 녹색발광이 확인되었다.

[0206] [소자 제조예 4] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0207] 정공전달층으로서 화합물 **C-86**을 사용한 것 외에는 소자 제조예 2와 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0208] 그 결과, 19.7 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 2600 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다.

[0209] [비교예 1] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0210] 정공전달층으로서 하기 화합물 **R-1**을 20 nm 두께로 증착한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소

자를 제작하였다.

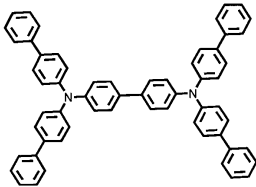
[0211] 그 결과, 21.4 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 8730 cd/m^2 의 녹색발광이 확인되었다.

[0212] [비교예 2] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0213] 정공전달층으로서 하기 화합물 R-2를 20 nm 두께로 증착한 것 외에는 소자 제조예 2와 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

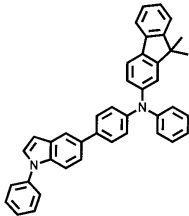
[0214] 그 결과, 59.3 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 4800 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다.

[0215] [화합물 R-1]



[0216]

[0217] [화합물 R-2]



[0218]

[0219] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 전류효율 및 발광효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 장점이 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	KR1020140073193A	公开(公告)日	2014-06-16
申请号	KR1020120141109	申请日	2012-12-06
[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 YANG SOO JIN 양수진 AHN HEE CHOON 안희춘 JUN JI SONG 전지송 LEE KYUNG JOO 이경주 LEE TAE JIN 이태진 KWON HYUCK JOO 권혁주 KIM BONG OK 김봉옥		
发明人	문두현 양수진 안희춘 전지송 이경주 이태진 권혁주 김봉옥		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	C07D209/04 C07D403/04 C07D209/56 C09K2211/1044 C07D403/10 C09K2211/1007 C07D403/14 C09K2211/1014 C07D209/02 H01L51/5012 C09K11/06 C09K2211/1029 C09K2211/1011 C07D209/14 C09B57/008 H01L51/0052 H01L51/0059 H01L51/0072 H01L51/5056 H01L51/006		
代理人(译)	李昌勋		
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该化合物的有机电致发光器件。通过使用本发明的有机电致发光化合物，可以制造具有优异电流效率和发光效率的有机电致发光器件。

