

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2014-0082351 (43) 공개일자 2014년07월02일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)		(71) 출원인 롬엔드하스전자재료코리아유한회사 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)
(21) 출원번호	10-2012-0152219	(72) 발명자 강희룡 서울 관악구 인현길 151-8, 301호 (봉천동, 세신주택)
(22) 출원일자	2012년12월24일	강현주 경기 광명시 사성로34번길 63-16, (광명동) (뒷면에 계속)
심사청구일자	없음	(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 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하면, 구동전압이 낮고, 작동수명이 길며, 소자의 전력효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

(72) 발명자

김희숙

경기 수원시 영통구 신원로 150-1, 101호 (신동)

김남균

경기 용인시 수지구 심곡로 16, 510동 1601호 (상현동, 금호베스트빌5차아파트)

이경주

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

권혁주

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

김봉옥

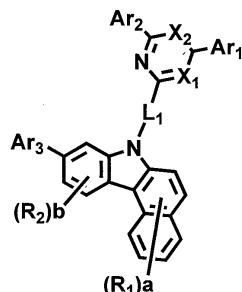
서울 강남구 삼성로111길 8, 208동 401호 (삼성동, 삼성동힐스테이트2단지아파트)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

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

X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 CH 또는 N이며;

Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴이고;

Ar_3 는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 헥사하이드로카바졸, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴이고;

R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (5-7 원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, $-NR_3R_4$, $-SiR_5R_6R_7$, $-SR_8$, $-OR_9$, 시아노, 나이트로 또는 하이드록시이며;

R_3 내지 R_9 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (5-7 원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 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;

a 는 1 내지 6의 정수이며, b 는 1 내지 3의 정수이고, a 또는 b 가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R_1 및 R_2 는 동일하거나 상이할 수 있으며;

상기 헤테로아릴렌, 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 L_1 , Ar_1 내지 Ar_3 및 R_1 내지 R_9 에서 더 치환되는 치환기는 각각 독립적으로 중수소; 할로젠; 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬; (C1-C30)알콕시; (C6-C30)아릴; (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴; (C3-C30)시클로알킬; (5-7 원)헤테로시클로알킬; 트리(C1-C30)알킬실릴; 트리(C6-C30)아릴실릴; 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴; (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴; (C2-C30)알케닐; (C2-C30)알킬닐; 시아노; 디(C1-C30)알킬아미노; 디(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노; 디(C6-C30)아릴보로닐; 디(C1-C30)알킬보로닐; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐; (C6-C30)아르(C1-C30)알킬; (C1-

C30)알킬(C6-C30)아릴; 카르복실; 니트로; 및 히드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 L_1 은 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴렌이고;

상기 X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 CH 또는 N이며;

상기 Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴이고;

상기 Ar_3 는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 치환 또는 비치환된 헥사하이드로카바졸, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴이고;

상기 R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된(C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서, 상기 L_1 은 단일결합, 또는 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴렌이고;

상기 X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 CH 또는 N이며;

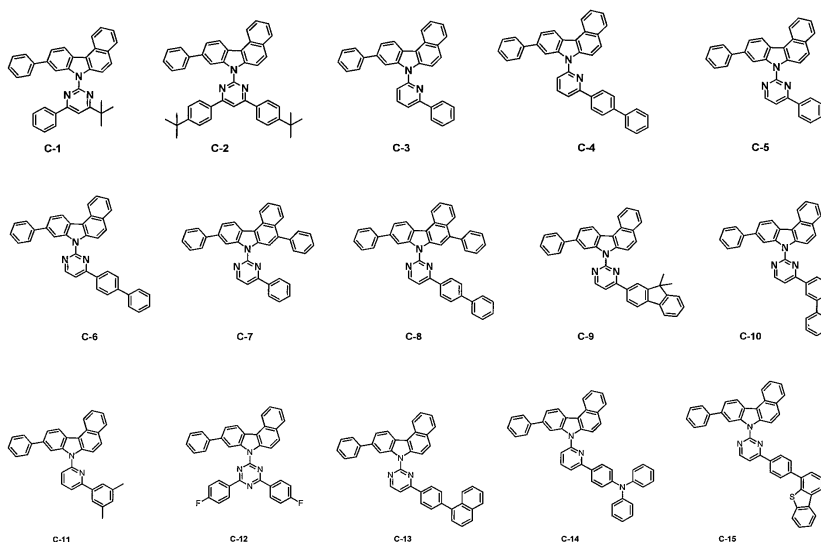
상기 Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 수소; (C1-C6)알킬; 중수소, 할로젠, (C1-C6)알킬, (C1-C6)알콕시, (5-15 원)헤테로아릴, 트리(C6-C10)아릴실릴, (C1-C6)알킬디(C6-C10)아릴실릴, 디(C6-C10)아릴아미노 또는 (C1-C6)알킬(C6-C15)아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C19)아릴; 또는 (C1-C6)알킬 또는 (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴이고;

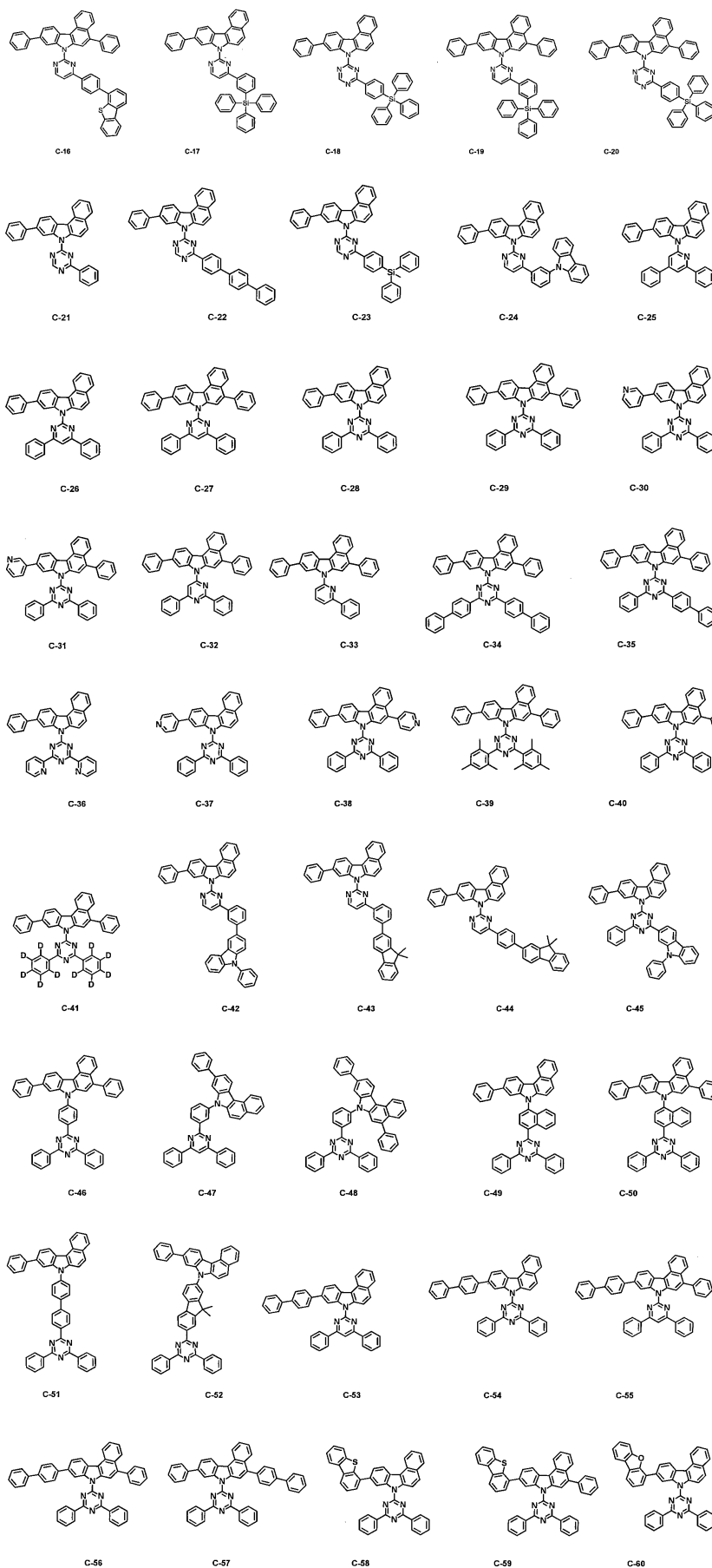
상기 Ar_3 는 (C1-C6)알킬, (5-15 원)헤테로아릴 또는 디(C6-C10)아릴아미노로 치환 또는 비치환된 (C6-C19)아릴; (C1-C6)알킬 또는 (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 헥사하이드로카바졸; 또는 (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-19 원)헤테로아릴이고;

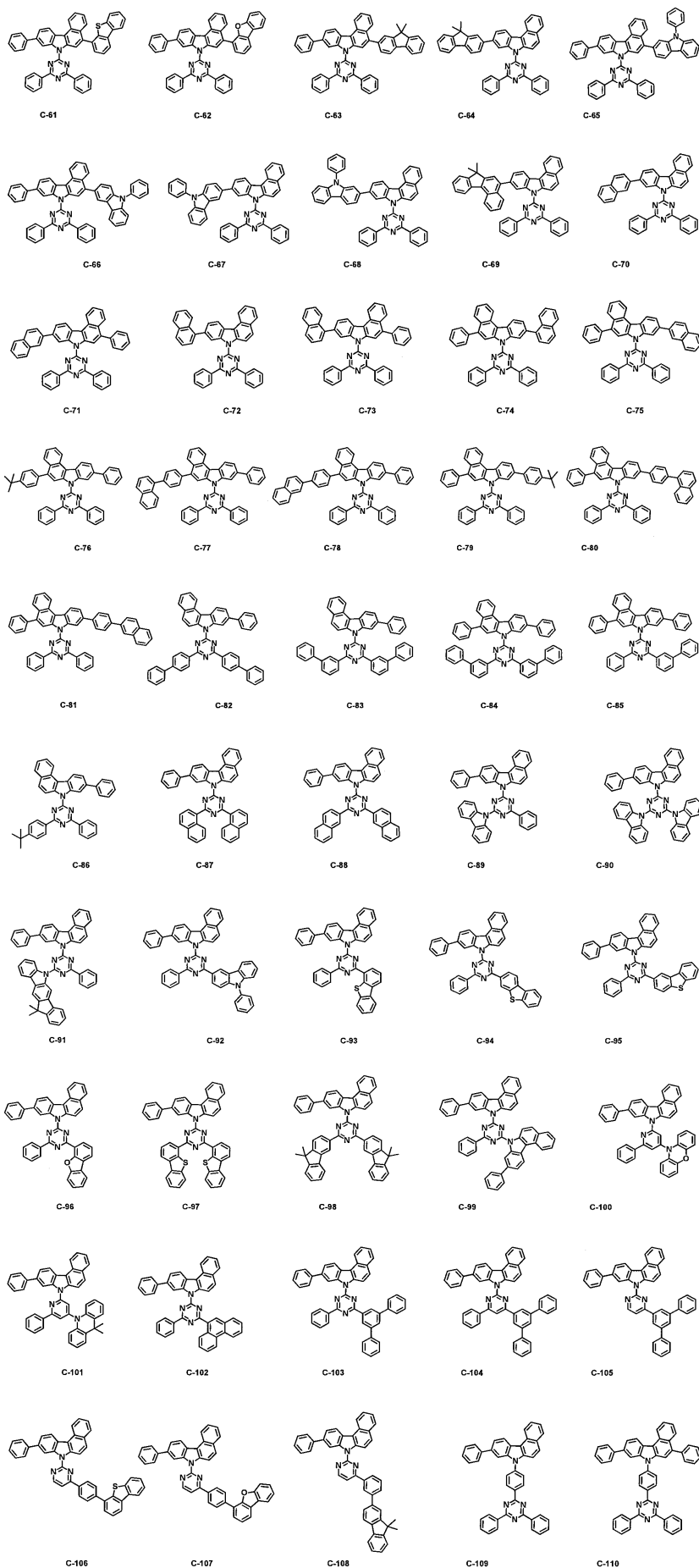
상기 R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, (C1-C6)알킬, (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C19)아릴, 또는 (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-19 원)헤테로아릴인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 화합물.

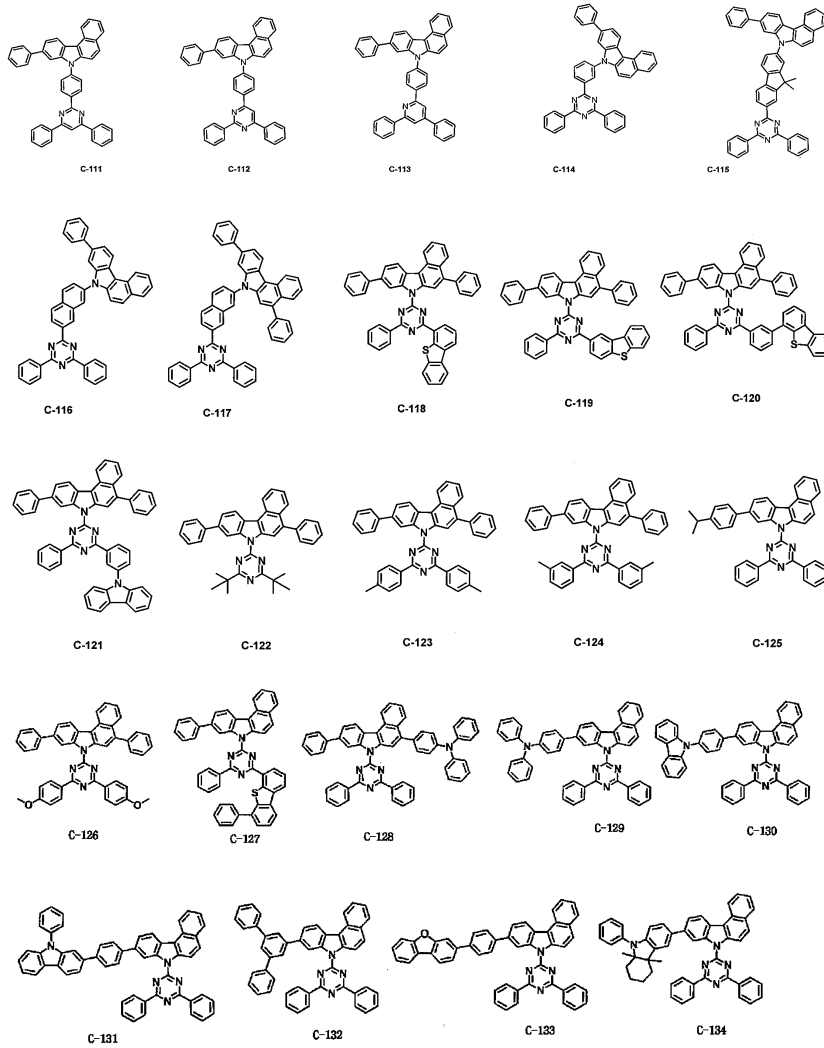
청구항 5

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









청구항 6

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

[0004] 종래 기술에서, 인광용 호스트 재료로는 4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐(CBP)이 가장 널리 알려져 있었다. 최근에

는, 일본의 파이오니어 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 = $[(\pi/\text{전압}) \times \text{전류효율}]$ 의 관계에 있으므로 전력 효율은 전압에 반비례하는데, 인광용 호스트 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자는 형광 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자에 비해 전류 효율(cd/A)은 높으나, 구동 전압 역시 상당히 높기 때문에 전력 효율(lm/w) 면에서 큰 이점이 없다. (3) 또한, 유기 전계 발광 소자에 사용할 경우, 작동 수명 측면에서도 만족스럽지 못하며, 발광 효율도 여전히 개선이 요구된다.

[0006] 한국 공개 특허공보 제10-2005-0100694호는 벤조카바졸 골격에 아릴기가 치환된 화합물을, 제2010-0015581호에는 디벤조카바졸 골격에 질소를 포함하는 헤테로아릴이 치환된 화합물을 유기 전계 발광 소자용 화합물로 개시하고 있다.

[0007] 그러나, 상기 문헌들에는 벤조카바졸 골격의 탄소 원자 중 하나에 시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴기가 결합되고, 질소 위치에 질소를 포함하는 헤테로아릴기가 결합된 구조를 갖는 유기 전계 발광 화합물을 구체적으로 개시하고 있지 않다.

[0008] 한편, 한국 공개 특허공보 제10-2010-0108924호는 벤조카바졸의 탄소 위치에 페닐기가 결합되고, 질소 위치에 질소를 포함하는 헤테로아릴기가 결합된 화합물을 개시하고 있으나, 소자의 구동전압, 작동수명 및 전력효율 면에서 개선이 요구된다.

선행기술문헌

특허문헌

- [0009] (특허문헌 0001) 한국공개특허 KR10-2005-0100694 A (2005.10.19 공개)
(특허문헌 0002) 한국공개특허 KR10-2010-0015581 A (2010.02.12 공개)
(특허문헌 0003) 한국공개특허 KR10-2010-0108924 A (2010.10.08 공개)

발명의 내용

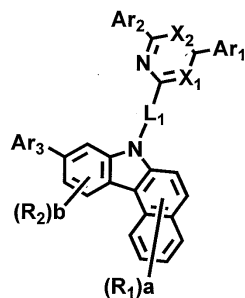
해결하려는 과제

[0010] 본 발명의 목적은 소자의 구동전압이 낮고, 작동수명이 길며, 소자의 전력효율이 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 발광 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0012] [화학식 1]



[0013]

[0014] 상기 화학식 1에서,

- [0015] L_1 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)시클로알킬렌이고;
- [0016] X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 CH 또는 N이며;
- [0017] Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴이고;
- [0018] Ar_3 는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 헥사하이드로카바졸, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴이고;
- [0019] R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (5-7 원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, $-NR_3R_4$, $-SiR_5R_6R_7$, $-SR_8$, $-OR_9$, 시아노, 나이트로 또는 하이드록시이며;
- [0020] R_3 내지 R_9 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (5-7 원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 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;
- [0021] a 는 1 내지 6의 정수이며, b 는 1 내지 3의 정수이고, a 또는 b 가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R_1 및 R_2 는 동일하거나 상이할 수 있으며;
- [0022] 상기 헤테로아릴렌, 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

발명의 효과

- [0023] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 소자의 구동전압이 낮고, 작동수명이 길며, 전력효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0024] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.
- [0025] 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.
- [0026] 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.
- [0027] 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 "(5-7원) 헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 5 내지 7개이고, B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 O, S 및 N에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라히드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 등이 있다. 본원에서 "아릴(렌)"은 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 예로서 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 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, P(=O), Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1

내지 4개이고, 단일 환계가거나 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, 피리딘, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로겐"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0028] 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 L_1 , Ar_1 내지 Ar_3 및 R_1 내지 R_9 에서 더 치환되는 치환기는 각각 독립적으로 중수소; 할로겐; 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬; (C1-C30)알콕시; (C6-C30)아릴; (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴; (C3-C30)시클로알킬; (5-7 원)헤테로시클로알킬; 트리(C1-C30)알킬실릴; 트리(C6-C30)아릴실릴; 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴; (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴; (C2-C30)알케닐; (C2-C30)알키닐; 시아노; 디(C1-C30)알킬아미노; 디(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노; 디(C6-C30)아릴보로닐; 디(C1-C30)알킬보로닐; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐; (C6-C30)아르(C1-C30)알킬; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴; 카르복실; 니트로; 및 히드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인 것을 의미하고, 각각 독립적으로 중수소; 할로겐; (C1-C6)알킬; (C1-C6)알콕시; (C6-C15)아릴; (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15 원)헤테로아릴; 트리(C6-C10)아릴실릴; (C1-C6)알킬디(C6-C10)아릴실릴; 디(C6-C10)아릴아미노; 및 (C1-C6)알킬(C6-C15)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인 것이 바람직하다.

[0029] 상기 화학식 1에서, 상기 L_1 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)시클로알킬렌이고, 바람직하게는 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴렌이며, 더욱 바람직하게는 단일결합, 또는 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴렌이다.

[0030] 상기 X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 CH 또는 N이다.

[0031] 상기 Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴이고, 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴이며, 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 수소; (C1-C6)알킬; 중수소, 할로겐, (C1-C6)알킬, (C1-C6)알콕시, (5-15 원)헤테로아릴, 트리(C6-C10)아릴실릴, (C1-C6)알킬디(C6-C10)아릴실릴, 디(C6-C10)아릴아미노 또는 (C1-C6)알킬(C6-C15)아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C19)아릴; 또는 (C1-C6)알킬 또는 (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴이다.

[0032] 상기 Ar_3 는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 헥사하이드로카바졸, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴이고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 치환 또는 비치환된 헥사하이드로카바졸, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴이며, 더욱 바람직하게는 (C1-C6)알킬, (5-15 원)헤테로아릴 또는 디(C6-C10)아릴아미노로 치환 또는 비치환된 (C6-C19)아릴; (C1-C6)알킬 또는 (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 헥사하이드로카바졸; 또는 (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-19 원)헤테로아릴이다.

[0033] 상기 R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (5-7 원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, $-NR_3R_4$, $-SiR_5R_6R_7$, $-SR_8$, $-OR_9$, 시아노, 나이트로 또는 하이드록시이고, 바람직하게는 수소, 치환 또는 비치환된(C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴이며, 더욱 바람직하게는 수소, (C1-C6)알킬, (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C19)아릴, 또는 (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-19

원)헤테로아릴이다.

[0034] 상기 R_3 내지 R_9 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (5-7 원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 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 있다.

[0035] 본원 발명의 일실시예에 따르면, 상기 화학식 1에서, 상기 L_1 은 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴렌이고; X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 CH 또는 N이며; Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴이고; Ar_3 는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 치환 또는 비치환된 헥사하이드로카바졸, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴이고; R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된(C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴이다.

[0036] 본원 발명의 다른 일실시예에 따르면, 상기 화학식 1에서, 상기 L_1 은 단일결합, 또는 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴렌이고; X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 CH 또는 N이며; Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 수소; (C1-C6)알킬; 중수소, 할로젠, (C1-C6)알킬, (C1-C6)알콕시, (5-15 원)헤테로아릴, 트리(C6-C10)아릴실릴, (C1-C6)알킬디(C6-C10)아릴실릴, 디(C6-C10)아릴아미노 또는 (C1-C6)알킬(C6-C15)아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C19)아릴; 또는 (C1-C6)알킬 또는 (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴이고; Ar_3 는 (C1-C6)알킬, (5-15 원)헤테로아릴 또는 디(C6-C10)아릴아미노로 치환 또는 비치환된 (C6-C19)아릴; (C1-C6)알킬 또는 (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 헥사하이드로카바졸; 또는 (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-19 원)헤테로아릴이고; R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, (C1-C6)알킬, (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C19)아릴, 또는 (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-19 원)헤테로아릴이다.

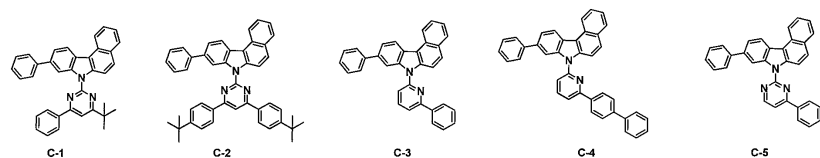
[0037] 구체적으로, 상기 L_1 은 단일결합, (3-30 원)헤테로아릴렌 또는 (C6-C30)아릴렌이고; X_1 및 X_2 은 각각 독립적으로 CH 또는 N이며; Ar_1 및 Ar_2 은 각각 독립적으로 수소, (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴 또는 (3-30 원)헤테로아릴이고; Ar_3 은 (C6-C30)시클로알킬, (C6-C30)아릴 또는 (3-30 원)헤테로아릴이고; R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (3-30 원)헤테로아릴, $-NR_3R_4$ 또는 $-SiR_5R_6R_7$ 이며; R_3 내지 R_7 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴 또는 (3-30 원)헤테로아릴이고; 상기 L_1 의 아릴렌 및 헤테로아릴렌, Ar_1 , Ar_2 , R_1 내지 R_9 의 알킬, 시클로알킬, 아릴 및 헤테로아릴은 각각 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬아미노, 디(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노 및(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.

[0038] 보다 구체적으로 상기 L_1 은 단일결합, 페닐렌, 비페닐렌, 터페닐렌, 인데닐렌, 플루오레닐렌, 트리페닐레닐렌, 피렌일렌, 페틸렌일렌, 크라이세닐렌, 나프타세닐렌, 플루오란텐일렌, 티오펜일렌, 피롤릴렌, 피라졸릴렌, 티아졸릴렌, 옥사졸릴렌, 옥사디아졸릴렌, 트리아진일렌, 테트라진일렌, 트리아졸릴렌, 퓨라잔일렌, 피리딜렌, 벤조퓨란일렌, 벤조티오펜일렌, 인돌릴렌, 벤조이미다졸릴렌, 벤조티아졸릴렌, 벤조이소티아졸릴렌, 벤조이속사졸릴렌, 벤조옥사졸릴렌, 벤조티아디아졸릴렌, 디벤조퓨란닐렌 또는 디벤조티오펜닐렌이고; Ar_1 및 Ar_2 은 각각 독립적으로 수소, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, n-펜틸, i-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, n-노닐, 데실, 도데실, 헥사데실, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르메틸, 트리플루오르에틸, 퍼플루오르프로필, 퍼플루오르부틸, 페닐, 비페닐, 플루오레닐, 플루오란텐일, 터페닐일, 피렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 페틸렌일, 피리딜, 피롤릴, 퓨란일, 티오펜일, 이미다졸릴, 벤조이미다졸릴, 퀴놀릴, 트리아진일, 벤조퓨란일, 디벤조퓨란일, 벤조티오펜일, 디벤조티오펜일, 피라졸릴, 인돌릴, 카바졸릴, 티아졸릴, 옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조옥사졸릴, 페난트롤린일 또는 퀴놀살리닐이고; R_1 내지 R_2 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 클로로, 플루오르, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, n-펜틸, i-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, n-노닐, 데실, 도데실, 헥사데실, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르메틸, 트리플루오르에틸,

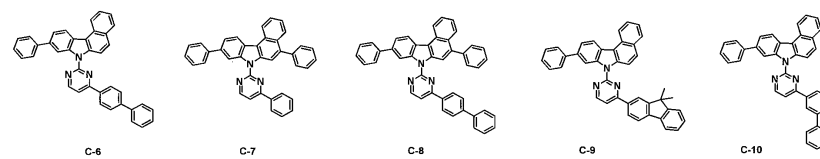
퍼플루오르프로필, 퍼플루오르부틸, 페닐, 나프틸, 안트릴, 비페닐, 플루오레닐, 플루오란테닐, 트리페닐렌일, 피렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 페틸렌일, 피리딜, 피롤릴, 퓨란일, 티오펜일, 이미다졸릴, 벤조이미다졸릴, 인데닐, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일, 퀴놀릴, 트리아진일, 벤조퓨란일, 디벤조퓨란일, 벤조티오펜일, 디벤조티오펜일, 피라졸릴, 인돌릴, 카바졸릴, 티아졸릴, 옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조옥사졸릴, 페난트롤린일, 디메틸아미노, 디에틸아미노, 메틸페닐아미노, 디페닐아미노, 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리프로필실릴, 트리(t-부틸)실릴, t-부틸디메틸실릴, 디메틸페닐실릴 또는 트리페닐실릴이고; 상기 L_1 , Ar_1 , Ar_2 , R_1 및 R_2 의 치환기는 각각 중수소, 클로로, 플루오르, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, t-부틸, n-펜틸, i-펜틸, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, n-노닐, 데실, 도데실, 헥사데실, 트리플루오르메틸, 퍼플루오르에틸, 트리플루오르에틸, 퍼플루오르프로필, 퍼플루오르부틸, 페닐, 나프틸, 비페닐, 9,9-디메틸플루오레닐, 9,9-디페닐플루오레닐, 플루오란테닐, 트리페닐렌일, 피렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 페틸렌일, 피리딜, 피롤릴, 퓨란일, 티오펜일, 이미다졸릴, 벤조이미다졸릴, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일, 퀴놀릴, 트리아진일, 벤조퓨란일, 디벤조퓨란일, 디벤조티오펜일, 벤조티오펜일, 피라졸릴, 인돌릴, 카바졸릴, 티아졸릴, 옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조옥사졸릴, 페난트롤린일, 디메틸아미노, 디에틸아미노, 메틸페닐아미노, 디페닐아미노, 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리프로필실릴, 트리(t-부틸)실릴, t-부틸디메틸실릴, 디메틸페닐실릴 및 메틸디페닐실릴, 트리페닐실릴, N-카바졸릴 및 N-페닐카바졸릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.

[0039]

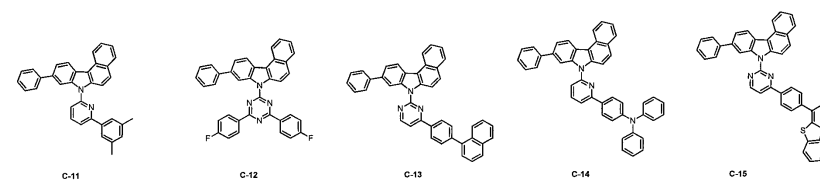
상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



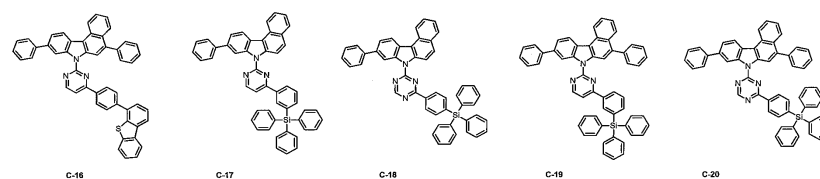
[0040]



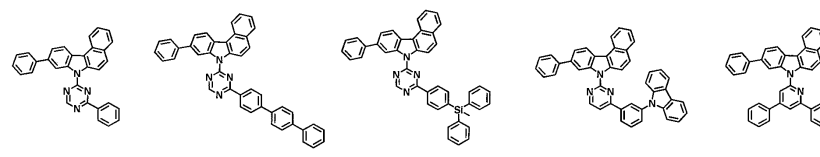
[0041]



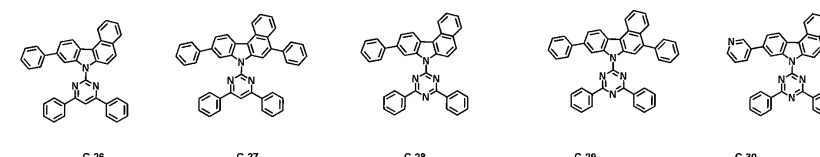
[0042]



[0043]

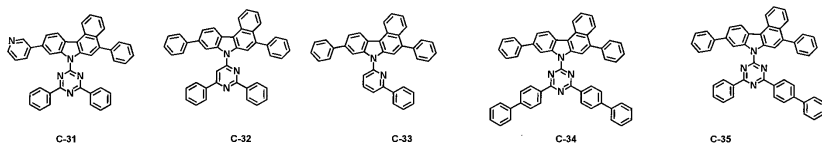


[0044]

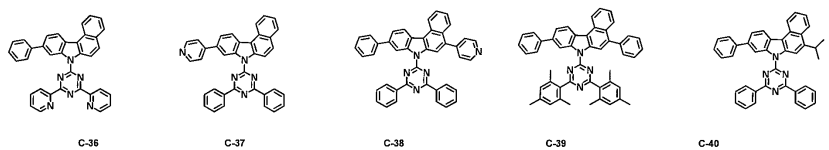


[0045]

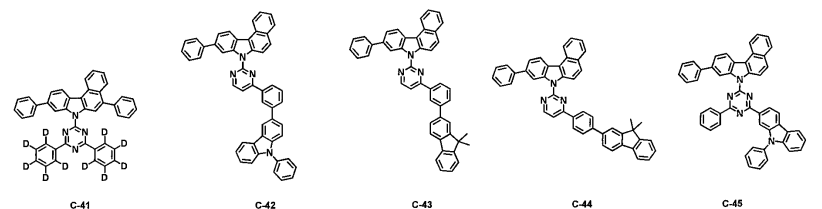
[0046]



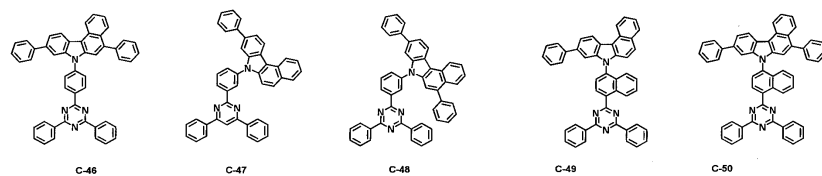
[0047]



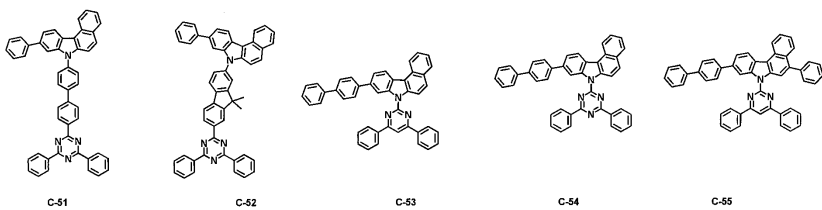
[0048]



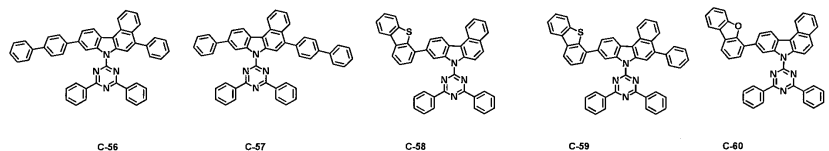
[0049]



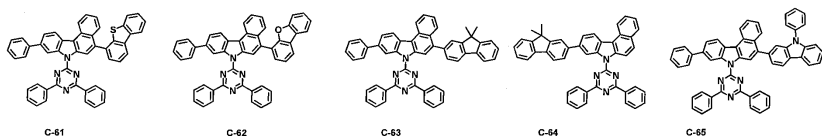
[0050]



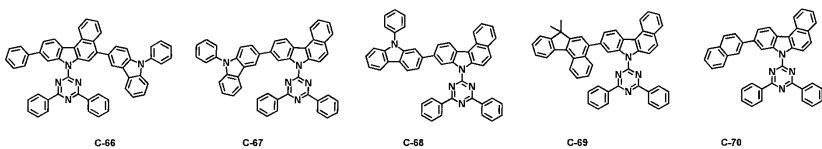
[0051]



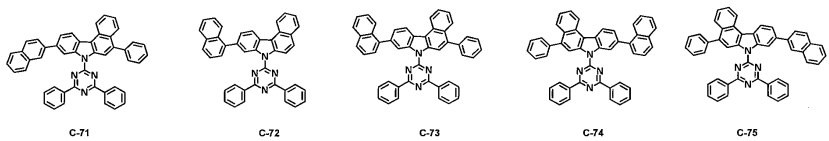
[0052]



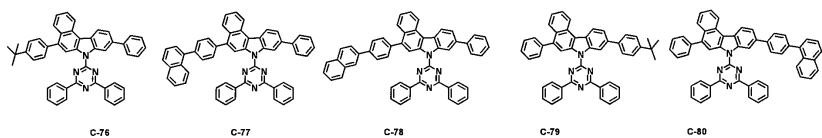
[0053]

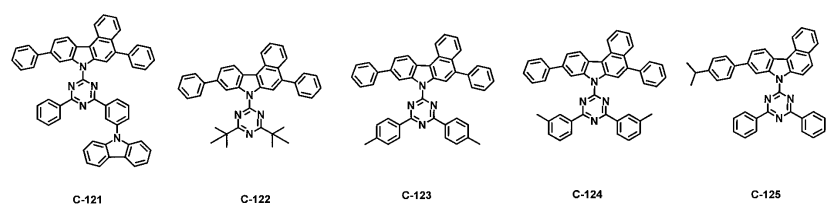
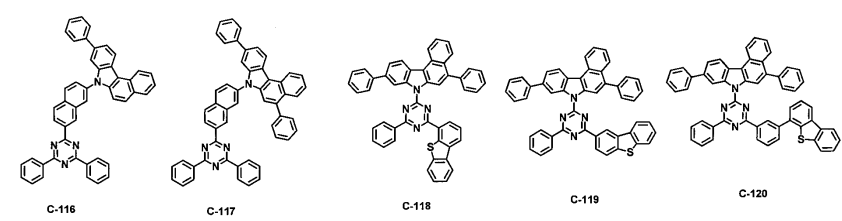
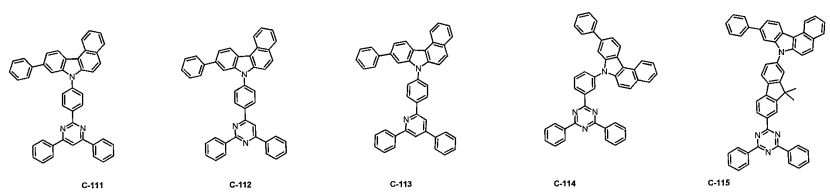
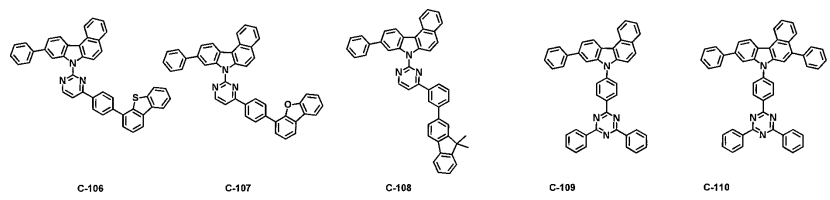
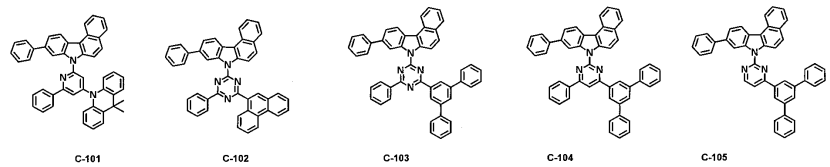
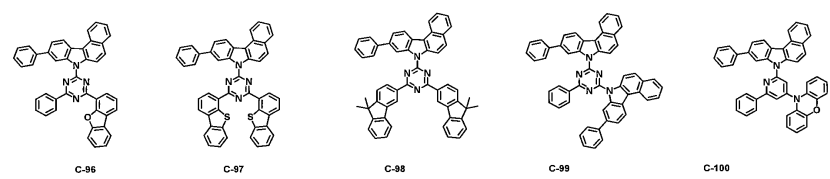
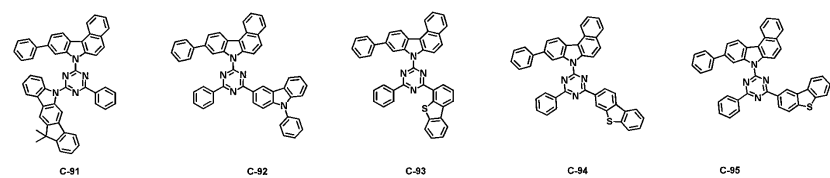
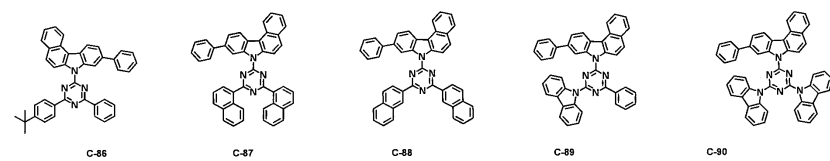
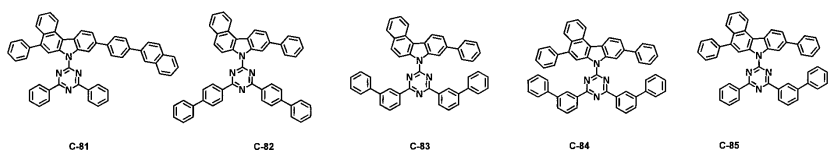


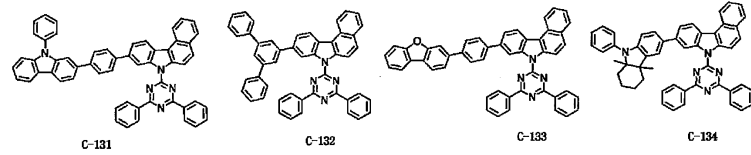
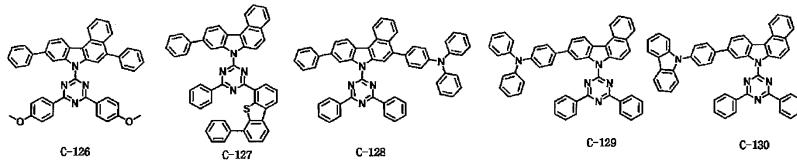
[0054]



[0055]

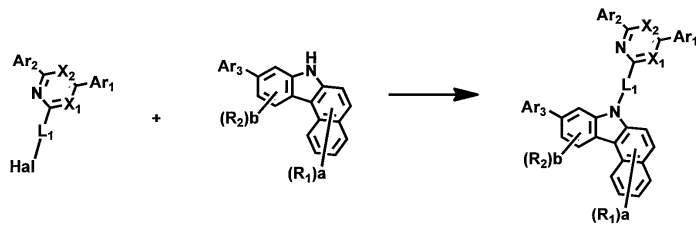






본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식에 나타난 바와 같이 제조할 수 있다.

[반응식 1]



상기 반응식 1에서 L_1 , X_1 , X_2 , Ar_1 내지 Ar_3 , R_1 , R_2 , a 및 b는 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하고 Hal은 할로젠이다.

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.

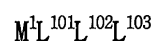
본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖고, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다.

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.

또한 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 이 발광층에서 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 호스트 물질로 사용할 수 있으며 상기 화학식 1의 화합물에 다른 호스트 물질을 추가하여 사용할 수 있다.

또한 본 발명에 따른 호스트 물질과 함께 사용되는 유기 전계 발광 소자용 인광 도판트에는 대표적으로 하기 화학식 2의 화합물이 있다.

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

여기서 M^1 은 Ir, Pt, Pd 및 Os으로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[0081] 리간드 L^{101} , L^{102} 및 L^{103} 는 서로 독립적으로 하기 구조로부터 선택되고,

[0082]

[0083]

[0084]

[0085]

[0086] R_{201} 내지 R_{203} 은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C30)아릴 또는 할로겐이고;

[0087] R_{204} 내지 R_{219} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, SF_5 , 치환 또는 비치환 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환 트리(C6-C30)아릴실릴, 시아노 또는 할로겐이고;

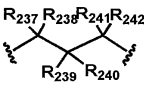
[0088] R_{220} 내지 R_{223} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬 또는 (C1-C30)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C30)아릴이고;

[0089] R_{224} 및 R_{225} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴 또는 할로겐이거나, R_{224} 와 R_{225} 는 인접한 치환체와 함께 단일환 또는 다환의 (C5-C30) 지환족 또는 방향족 고리를 형성하며;

[0090] R_{226} 은 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환 (5-30원)헤테로아릴 또는 할로겐이고;

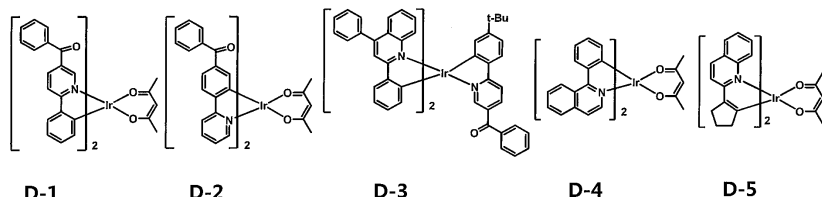
[0091] R_{227} 내지 R_{229} 은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴 또는 할로겐이고;

[0092]

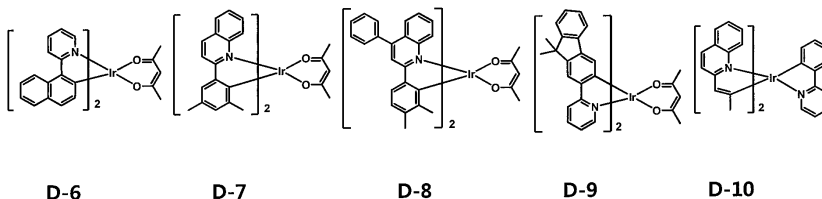
Q는 ,  또는  이며, R_{231} 내지 R_{242} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알콕시, 할로겐, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴, 시아노, 치환

또는 비치환 (C5-C30)시클로알킬이거나, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로 고리 또는 융합고리를 형성할 수 있거나, R₂₀₇ 또는 R₂₀₈과 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 포화 또는 불포화의 융합고리를 형성할 수 있다.

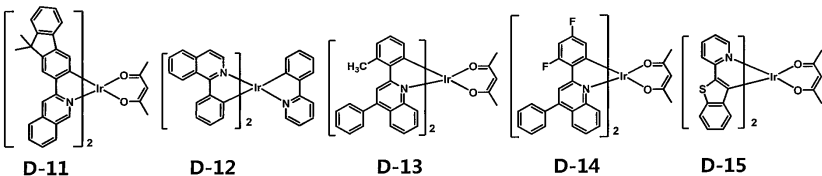
[0093] 구체적으로 상기 화학식 2의 도판트 화합물로서 다음과 같은 화합물을 사용하는 것이 바람직하다.



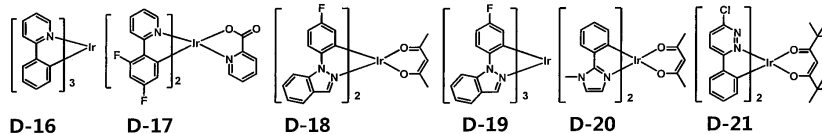
[0094]



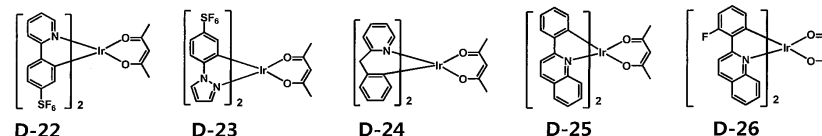
[0095]



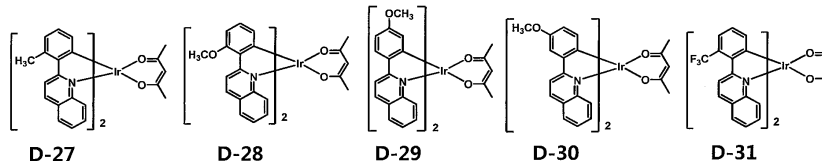
[0096]



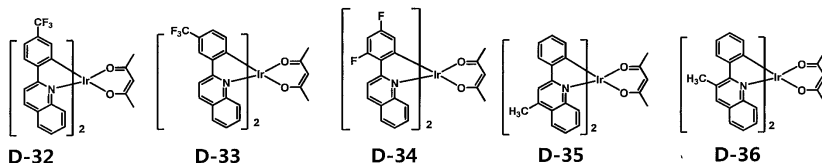
[0097]



[0098]



[0099]



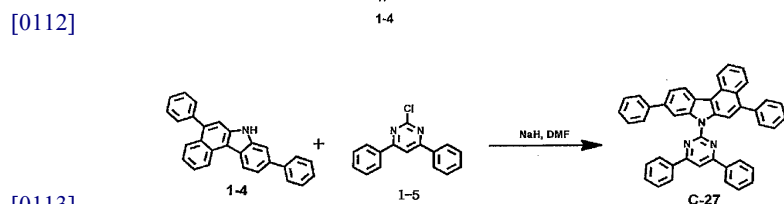
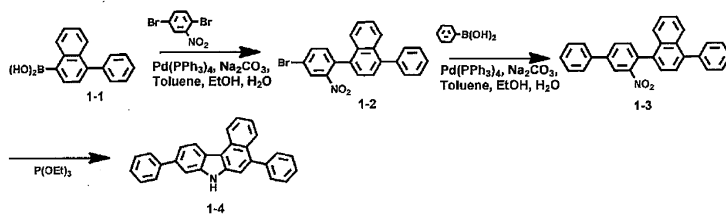
[0100]

[0101] 본 발명은 추가의 양태로 유기 전계 발광 소자 제조용 조성물을 제공한다. 상기 조성물은 호스트 재료로서 본 발명의 화합물을 포함할 수 있다.

[0102] 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.

- [0103] 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.
- [0104] 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.
- [0105] 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.
- [0106] 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.
- [0107] 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 이상의 발광층을 가진 백색 유기 전계 발광소자를 제작할 수 있다.
- [0108] 본 발명의 유기전계발광소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막법이나 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.
- [0109] 습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로퓨란, 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.
- [0110] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광특성을 설명한다.

[0111] [실시예 1] 화합물 C-27의 제조



[0114] 화합물 1-2의 제조

[0115] 화합물 1-1 (18.5 g, 66 mmol), 2,5-디브로모니트로벤젠 (18 g, 72.6 mmol), Na₂CO₃ (16.8 g, 158.4 mmol) 및 Pd(PPh₃)₄ (3.8 g, 3.3 mmol)을 톨루엔 320 mL, 에탄올 80 mL 및 정제수 80 mL의 혼합 용액에 투입 후 90~100℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 실온으로 냉각한 뒤 정치하여 수층을 제거하였다. 유층을 농축한 후 메틸렌 클로라이드(MC)로 트리츄레이션(trituration)한 후 여과하여 화합물 1-2 (19 g, 71.2 %)를 얻었다.

[0116] 화합물 1-3의 제조

[0117] 화합물 1-2 (10 g, 24.7 mmol), 페닐보론산 (3.6 g, 29.7 mmol), Na₂CO₃ (7.8 g, 74.1 mmol) 및 Pd(PPh₃)₄ (1.4 g, 1.2 mmol)을 톨루엔 150 mL, 에탄올 37 mL, 정제수 37 mL의 혼합 용액에 투입 후 90~100℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 실온으로 냉각한 뒤 정치하여 수층을 제거하였다. 유층을 농축한 후 MC로 트리츄레이션한 후 여과하여 화합물 1-3 (9 g, 90.9 %)을 얻었다.

[0118] 화합물 1-4의 제조

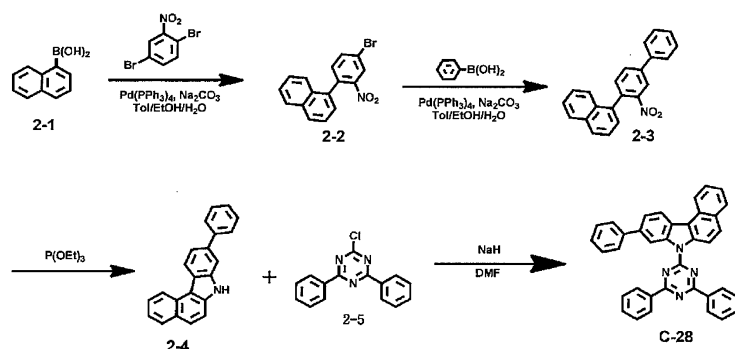
[0119] 화합물 1-3 (9 g, 22.4 mmol)을 P(OEt)₃ 100 mL에 녹여 160℃로 하루 동안 교반하였다. 진공 하에서 증류하여 P(OEt)₃를 제거한 후 MC와 증류수로 추출하였다. MC로 트리츄레이션한 후 여과하여 화합물 1-4 (4.9 g, 60 %)를 얻었다.

[0120] 화합물 C-27의 제조

[0121] 화합물 1-4 (4.0 g, 10.83 mmol) 및 화합물 1-5 (3.1 g, 11.91 mmol)을 디메틸포름아미드(DMF) 80 mL에 현탁한 뒤 60% NaH (702 mg, 16.1 mmol)를 상온에서 투입한 후, 12시간 동안 교반하였다. 정제수 1L를 투입한 후 감압 여과하였다. 얻어진 고체를 메탄올/에틸아세테이트(EA)로 트리츄레이션하고 MC로 녹여 실리카 여과한 후 MC/n-헥산으로 트리츄레이션하여 화합물 C-27 (4.5 g, 69 %)을 얻었다.

[0122] MW : 600.71, UV : 382 nm, PL : 493 nm, 녹는점 : 324℃

[0123] [실시예 2] 화합물 C-28의 제조



[0126] 화합물 2-2의 제조

[0127] 화합물 2-1 (22 g, 128.16 mmol) 및 2,5-디브로모니트로벤젠 (30 g, 106.80 mmol)을 상기 실시예 1의 화합물 1-2의 제조방법과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 2-2 (14.2 g, 41 %)를 얻었다.

[0128] 화합물 2-3의 제조

[0129] 화합물 2-2 (14.2 g, 43.27 mmol) 및 페닐보론산 (5.3 g, 43.27 mmol)을 상기 실시예 1의 화합물 1-2의 제조방법과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 2-3 (12 g, 92 %)을 얻었다.

[0130] 화합물 2-4의 제조

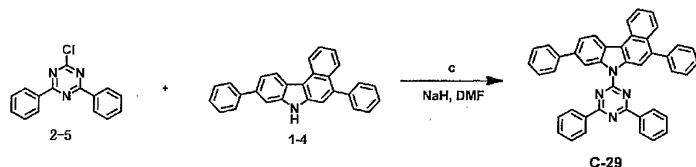
[0131] 화합물 2-3 (12 g, 36.88 mmol)을 트리에틸포스페이트 120 mL로 녹인 후 상기 실시예 1의 화합물 1-3의 제조방법과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 2-4 (6.4 g, 62 %)를 얻었다.

[0132] 화합물 C-28의 제조

[0133] 화합물 2-4 (6.4 g, 21.81 mmol) 및 화합물 2-5 (5.8 g, 23.99 mmol)을 상기 실시예 1의 화합물 C-27의 제조방법과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 C-28 (6.4 g, 58 %)을 얻었다.

[0134] MW : 524.61, UV : 334 nm, PL : 495 nm, 녹는점 : 273℃

[0135] [실시예 3] 화합물 C-29의 제조

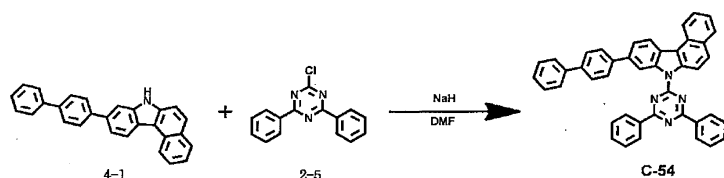


[0136]

[0137] 화합물 2-5 (3.6 g, 13.4 mmol) 및 화합물 1-4 (4.8 g, 13.4 mmol)를 상기 실시예 1의 화합물 C-27의 제조방법과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 C-29 (6.5 g, 81 %)를 얻었다.

[0138] MW : 600.71, UV : 334 nm, PL : 385 nm, 녹는점 : 349℃

[0139] [실시예 4] 화합물 C-54의 제조

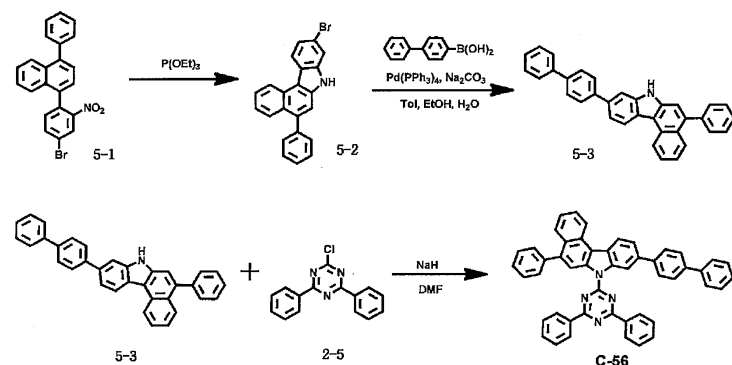


[0140]

[0141] 화합물 4-1 (6.4 g, 17.30 mmol) 및 화합물 2-5 (5.1 g, 19.10 mmol)를 상기 실시예 1의 화합물 C-27의 제조방법과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 C-54 (6.0 g, 60 %)를 얻었다.

[0142] MW : 676.81, UV : 344 nm, PL : 495 nm, 녹는점 : 336℃

[0143] [실시예 5] 화합물 C-56의 제조



[0144]

[0145]

[0146] 화합물 5-2의 제조

[0147] 화합물 5-1 (35 g, 86.60 mmol)을 트리에틸 포스페이트 350 mL로 녹인 후 상기 실시예 1의 화합물 1-4의 제조방법과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 5-2 (7.0 g, 22 %)를 얻었다.

[0148] 화합물 5-3의 제조

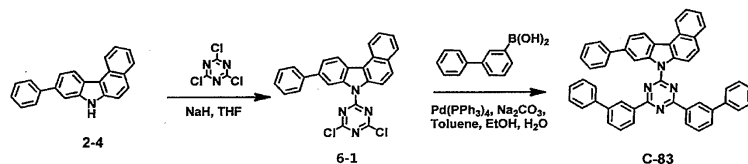
[0149] 화합물 5-2 (7.0 g, 18.80 mmol) 및 [1,1'-비페닐]-4-일 보론산 (4.1 g, 20.70 mmol)을 상기 실시예 1의 화합물 1-2의 제조방법과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 5-3 (7.6 g, 92 %)를 얻었다.

[0150] 화합물 C-56의 제조

[0151] 화합물 5-3 (3.8 g, 8.53 mmol) 및 화합물 2.5 (2.5 g, 9.38 mmol)를 상기 실시예 1의 화합물 C-27의 제조방법과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 C-56 (4 g, 70 %)을 얻었다.

[0152] MW : 599.72, UV : 324 nm, PL : 485 nm, 녹는점 : 264℃

[0153] [실시예 6] 화합물 C-83의 제조



[0154]

[0155] 화합물 6-1의 제조

[0156] 화합물 2-4 (3.7 g, 13 mmol) 및 시아누르산 (12 g, 63 mmol)을 테트라히드로퓨란(THF) 300 mL에 녹여 상기 실시예 1의 화합물 C-27의 제조방법과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 6-1 (4.3 g, 77 %)을 얻었다.

[0157] 화합물 C-83의 제조

[0158] 화합물 6-1 (4 g, 9 mmol) 및 3-비페닐 보론산 (7.2 g, 36 mmol)을 상기 실시예 1의 화합물 1-2의 제조방법과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 C-83 (37 g, 62 %)을 얻었다.

[0159] MW : 599.72, UV : 324 nm, PL : 485 nm, 녹는점 : 264℃

[0160] [소자 제조예 1] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0161] 본 발명의 발광 재료를 이용한 구조의 OLED 소자를 제작하였다. 우선, OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막(15Ω/□)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 N¹,N^{1'}-([1,1'-비페닐]-4,4'-디일)비스(N¹-(나프탈렌-1-일)-N⁴,N⁴-디페닐벤젠-1,4-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 N,N'-디(4-비페닐)-N,N'-디(4-비페닐)-4,4'-디아미노비페닐을 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 본 발명의 화합물 C-28을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-11을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 도판트와 호스트 전체에 대하여 도판트를 4 중량%로 도핑함으로써 상기 정공전달층 위에 30 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 상기 발광층 위에 전자전달층으로서 한쪽 셀에 2-(4-(9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센-2-일)페닐)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸을 넣고, 또 다른 셀에는 리튬 퀴놀레이트를 각각 넣은 후, 두 물질을 같은 속도로 증발시켜 각각 50 중량%의 양으로 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.

[0162] 그 결과, 4.1 V의 전압에서 8.7 mA/cm²의 전류가 흘렀으며, 1030 cd/m²의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 시간이 60 시간 이상이었다.

[0163] [소자 제조예 2] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0164] 발광재료로서 호스트에는 화합물 C-29, 도판트에는 화합물 D-7을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0165] 그 결과, 3.8 V의 전압에서 5.5 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 980 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 시간이 90 시간 이상이었다.

[0166] [소자 제조예 3] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0167] 발광재료로서 호스트에는 화합물 C-54, 도판트에는 화합물 D-11을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0168] 그 결과, 3.7 V의 전압에서 11.0 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 1020 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 시간이 60 시간 이상이었다.

[0169] [소자 제조예 4] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0170] 발광재료로서 호스트에는 화합물 C-83, 도판트에는 화합물 D-11을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0171] 그 결과, 3.8 V의 전압에서 10.7 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 950 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 시간이 75 시간 이상이었다.

[0172] [소자 제조예 5] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0173] 발광재료로서 호스트에는 화합물 C-56, 도판트에는 화합물 D-7을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0174] 그 결과, 3.5 V의 전압에서 7.2 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 980 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 시간이 90 시간 이상이었다.

[0175] [소자 제조예 6] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

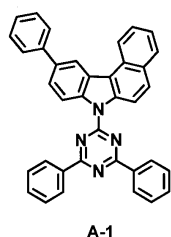
[0176] 발광재료로서 호스트에는 화합물 C-27, 도판트에는 화합물 D-7을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0177] 그 결과, 3.7 V의 전압에서 6.6 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 1050 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 시간이 90 시간 이상이었다.

[0178] [비교예 1] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자의 발광 특성

[0179] 발광재료로서 호스트에는 하기 화합물 A-1, 도판트에는 화합물 D-11을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0180] 그 결과, 4.7 V의 전압에서 10.6 mA/cm^2 의 전류가 흘렀으며, 1000 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 90%로 떨어지는데 걸린 시간이 20 시간 이상이었다.



[0181]

[0182] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 구동수명이 매우 우수하고, 구동전압이 낮아 전력효율이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 장점이 있으며, 기존의 유기 전계 발광 화합물은 정공저지층이 필요했으나 본원 화합물들을 이용하는 경우 정공저지층이 필요없는 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	KR1020140082351A	公开(公告)日	2014-07-02
申请号	KR1020120152219	申请日	2012-12-24
[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	KANG HEE RYONG 강희룡 KANG HYUN JU 강현주 KIM HEE SOOK 김희숙 KIM NAM KYUN 김남균 LEE KYUNG JOO 이경주 KWON HYUCK JOO 권혁주 KIM BONG OK 김봉옥		
发明人	강희룡 강현주 김희숙 김남균 이경주 권혁주 김봉옥		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	C09K2211/1011 H01L51/5012 H01L51/0067 H01L51/0072 C09K2211/1029 C07D413/14 H01L51/0074 C07D403/04 C07D403/14 C07D409/14 H01L51/0094 C07D401/04 C07D401/14 C09K2211/1007 H05B33/14 C09K11/06 C07D407/14 C07F7/10 H01L51/0073 C09K2211/1059 C09K2211/1044 C07D401/10 C07D403/10 C07D405/14 C07F15/0033		
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有机电致发光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，可以制造具有低驱动电压，长操作时间和高功率效率的有机电致发光器件。根据本发明的有机电致发光化合物具有低驱动电压，长使用寿命和优异的功率效率。

