

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2015-0135109 (43) 공개일자 2015년12월02일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) <i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>C07D 209/82</i> (2006.01) <i>C07D 403/04</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01) (52) CPC특허분류 <i>C09K 11/06</i> (2013.01) <i>C07D 209/82</i> (2013.01) (21) 출원번호 10-2015-0069705 (22) 출원일자 2015년05월19일 심사청구일자 없음 (30) 우선권주장 1020140062390 2014년05월23일 대한민국(KR) (뒷면에 계속)		(71) 출원인 룸엔드하스전자재료코리아유한회사 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동) (72) 발명자 강희룡 서울특별시 관악구 인현12나길 31 (봉천동, 삼성 그린맨) 강현주 경기도 광명시 하안로 198, 205동1001호 (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

본 발명은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 구동 전압이 낮고 전류 효율 및 전력 효율이 우수하면서도, 구동 수명이 현저히 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

(52) CPC특허분류

C07D 403/04 (2013.01)
H01L 51/50 (2013.01)
C09K 2211/1029 (2013.01)
C09K 2211/1044 (2013.01)

(30) 우선권주장

1020140117773 2014년09월04일 대한민국(KR)
 1020140136149 2014년10월08일 대한민국(KR)

(72) 발명자

홍진리

경기도 부천시 원미구 지봉로 143번길 38

문두현

경기도 화성시 병점3로 117 안화동마을주공9단지
 906동 1304호

임영목

경기도 용인시 기흥구 동백1로 12, 5101동 201호

김빛나리

경기도 안양시 동안구 동안로 101 목련선경아파트
 102동 2401호

김남균

경기도 용인시 수지구 포은대로 219 (상현동 서원
 마을3단지 아이파크 아파트) 302동 1801호

이미자

경기도 화성시 영통로26번길 24, 305동 1304호

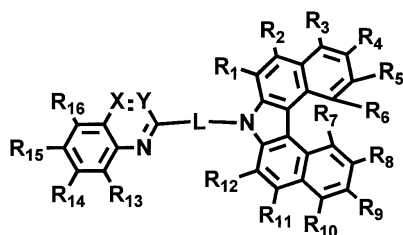
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고;

X 및 Y는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁₇이며;

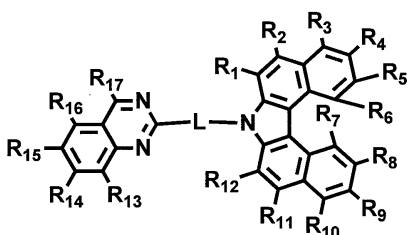
R₁ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소, 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

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

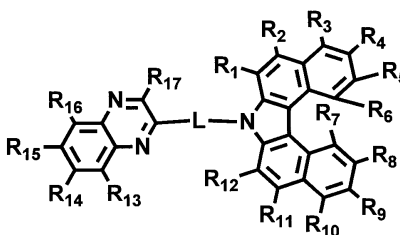
청구항 2

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 2]



[화학식 3]



상기 화학식 2 및 3에서,

L 및 R₁ 내지 R₁₇은 청구항 1에서 정의된 것과 같다.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 L 및 R₁ 내지 R₁₇에서 치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 (C6-C30)아릴(렌), 치환 (3-30원)헤테로아릴(렌), 치환 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환 (C1-C30)알킬(C6-

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

청구항 4

제1항에 있어서,

L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴렌이고;

X 및 Y는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁₇이며;

R₁ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C20) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소, 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있는, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

L은 단일 결합, 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴렌이고;

X 및 Y는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁₇이며;

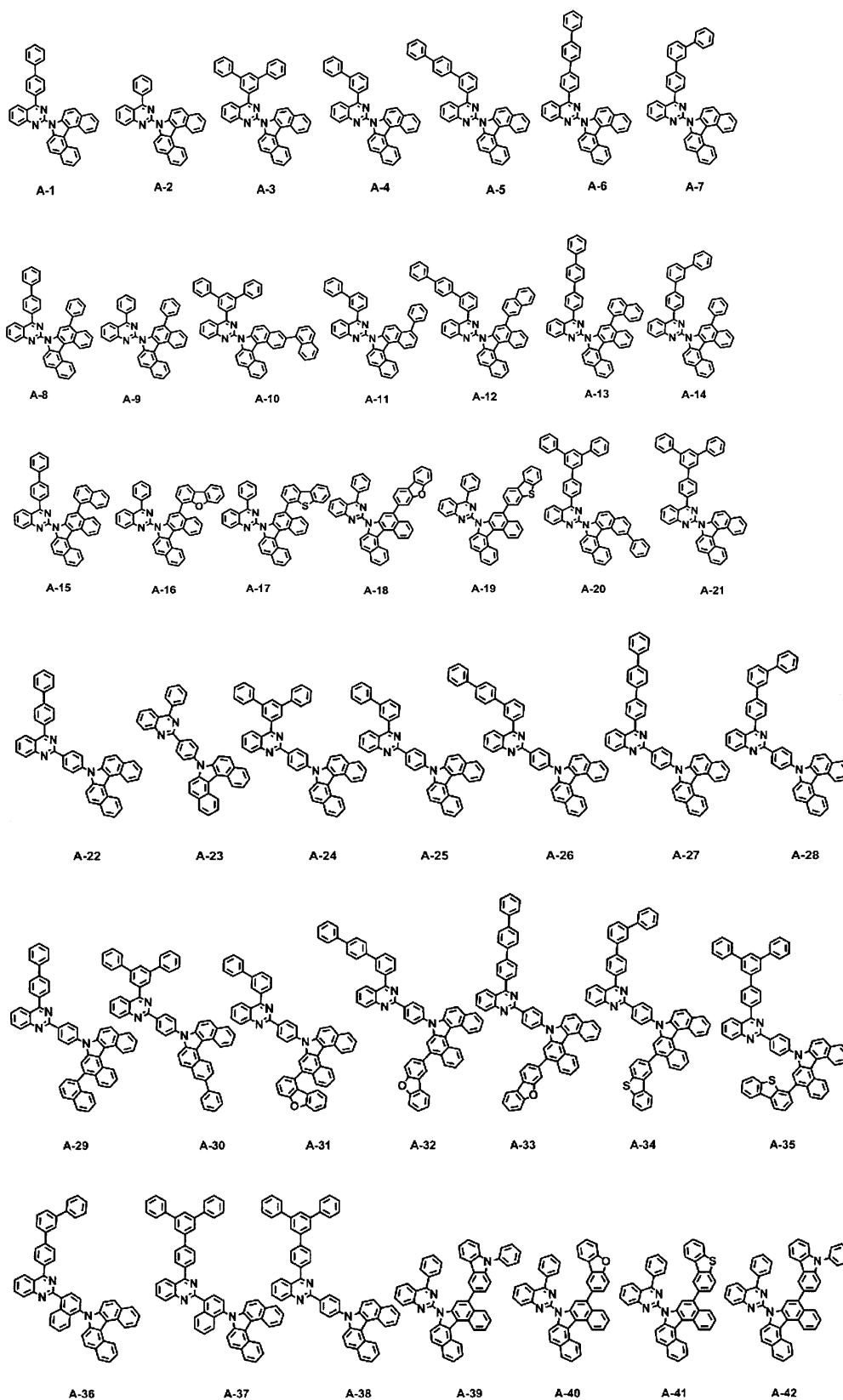
R₁ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, (C6-C20)아르(C1-C6)알킬 또는 (C6-C25)아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (C3-C20) 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소, 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있는, 유기 전계 발광 화합물.

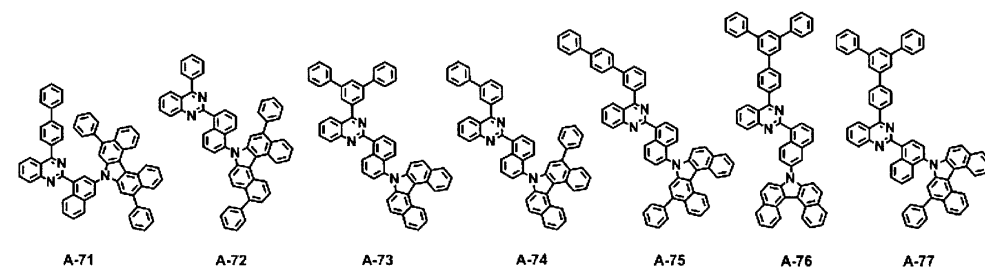
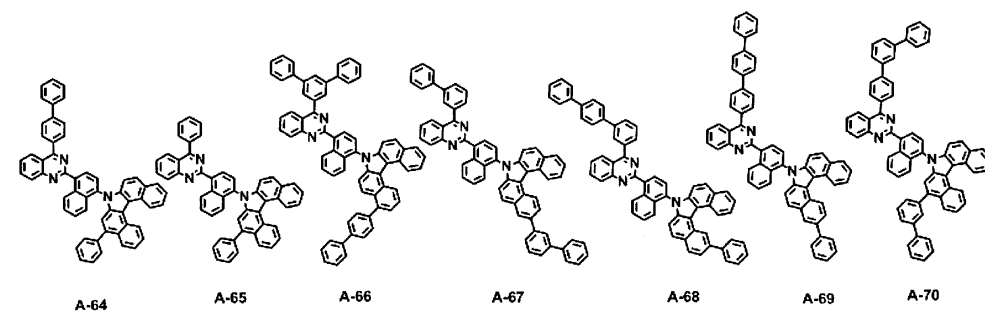
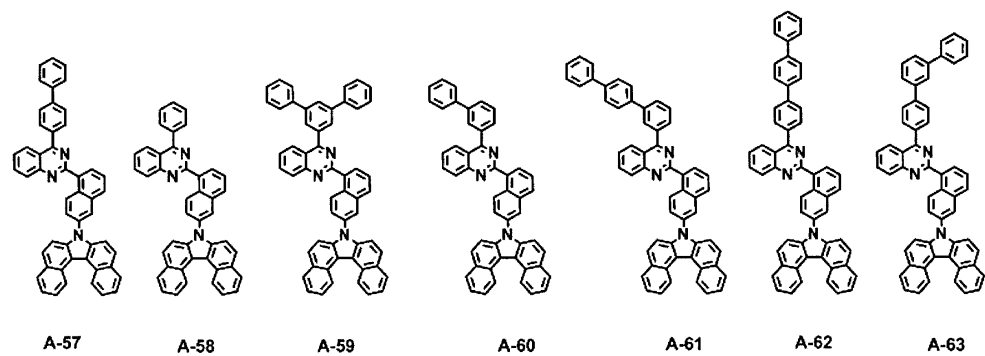
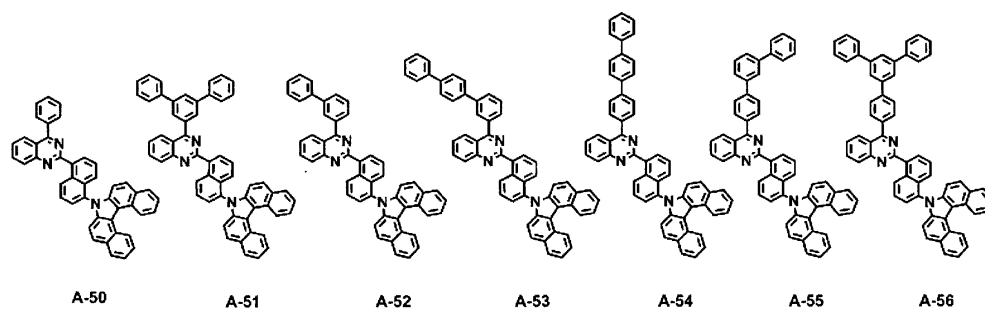
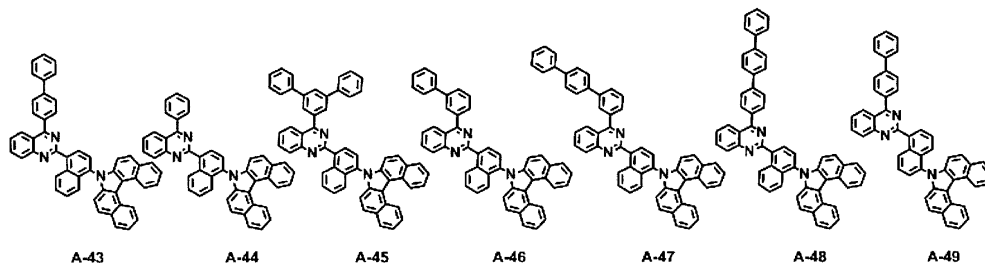
청구항 6

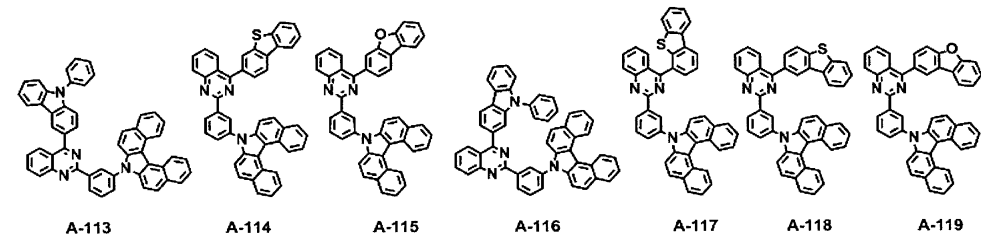
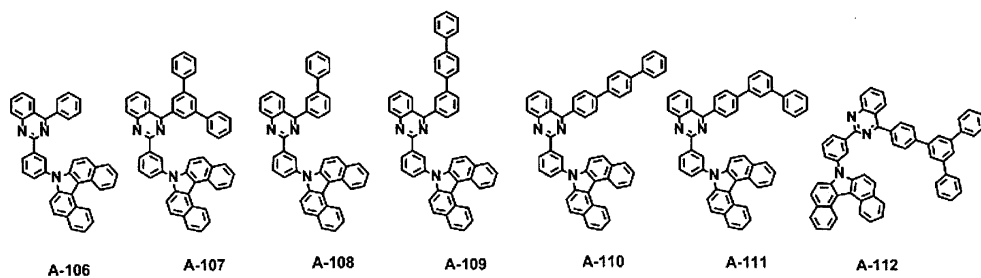
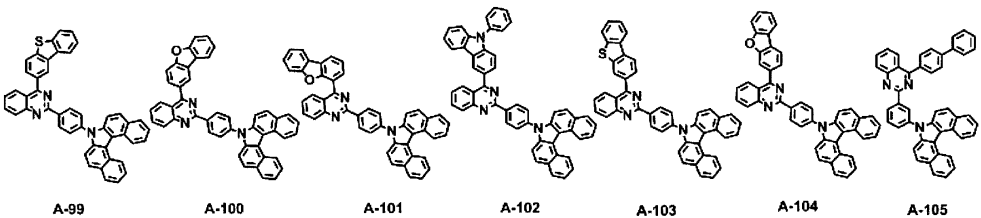
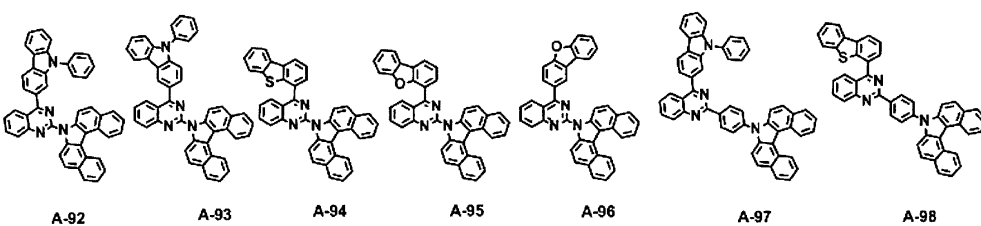
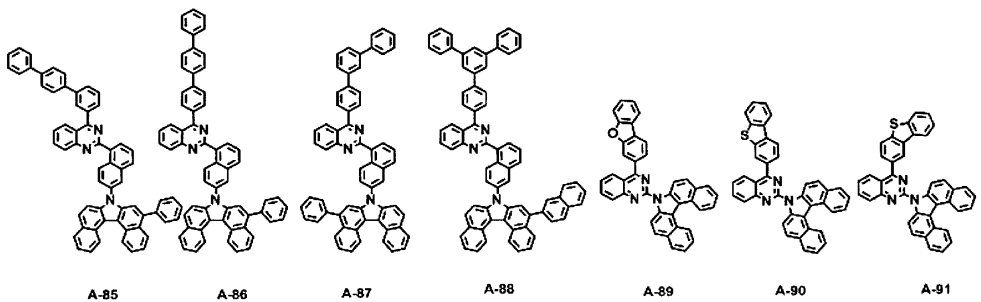
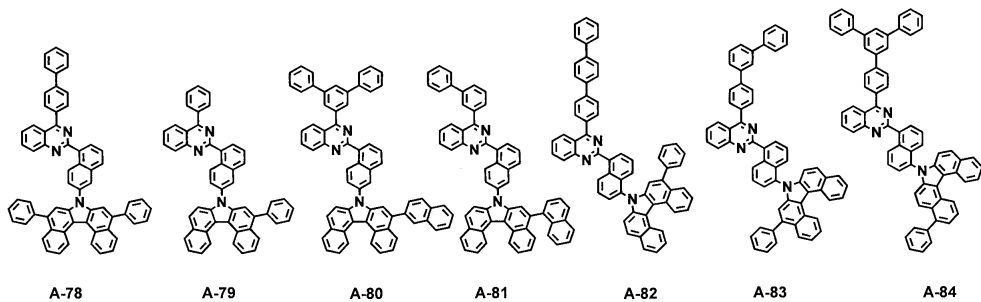
제1항에 있어서, 상기 L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 테페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 플루오레닐, 치환 또는 비치환된 페난트레닐, 치환 또는 비치환된 안트라세닐, 치환 또는 비치환된 인데닐, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐, 치환 또는 비치환된 피레닐, 치환 또는 비치환된 테트라세닐, 치환 또는 비치환된 페릴레닐, 치환 또는 비치환된 크라이세닐, 치환 또는 비치환된 나프타세닐, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐, 치환 또는 비치환된 카바줄, 또는 치환 또는 비치환된 벤조카바줄을 나타내는, 유기 전계 발광 화합물.

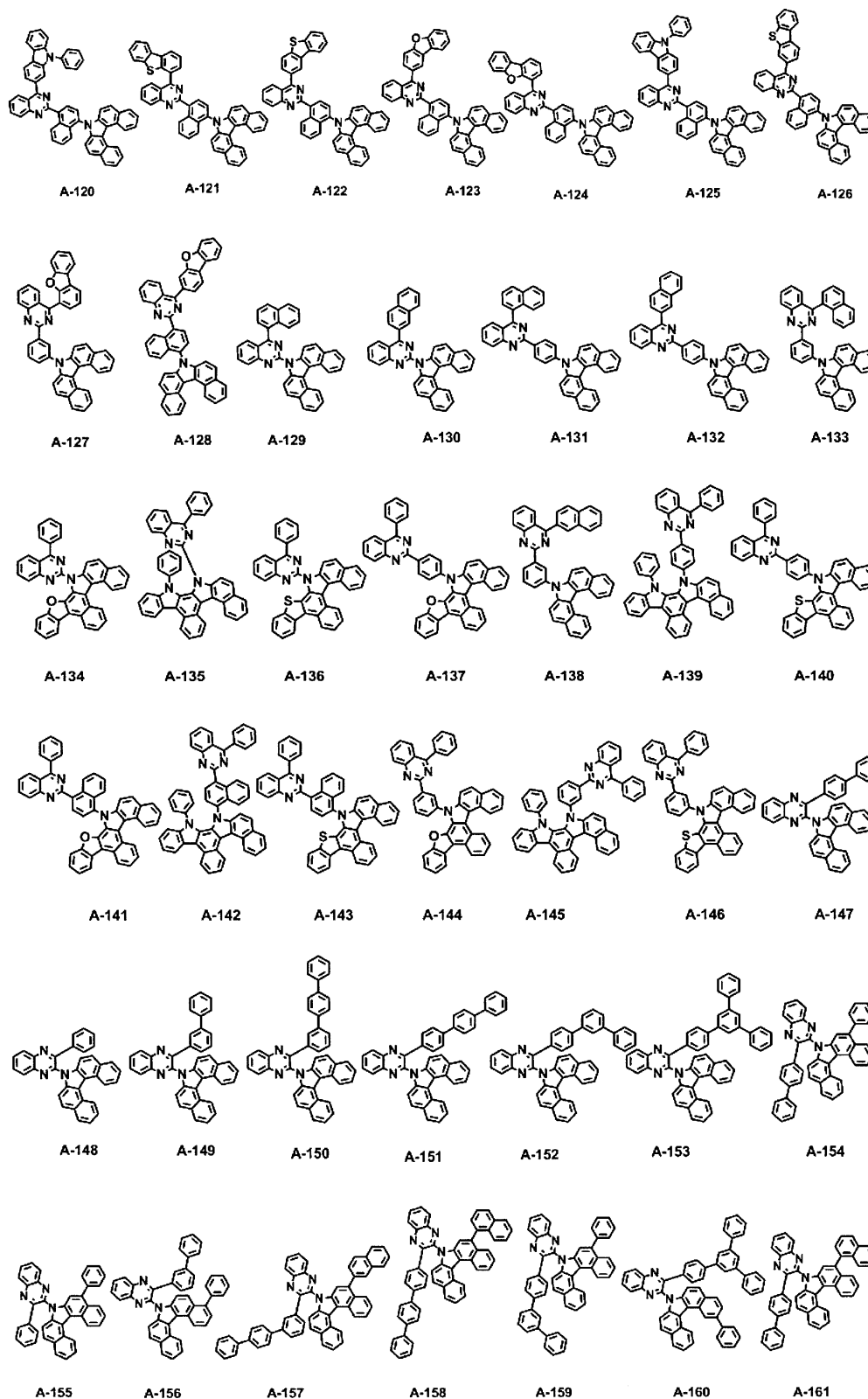
청구항 7

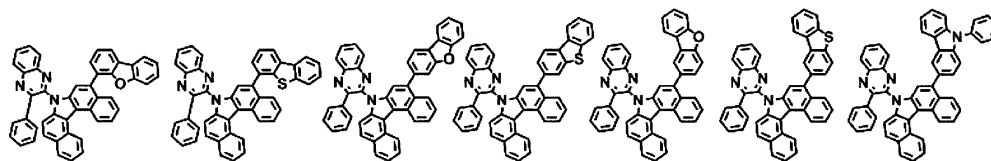
제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기에서 선택되는, 유기 전계 발광 화합물.











A-162

A-163

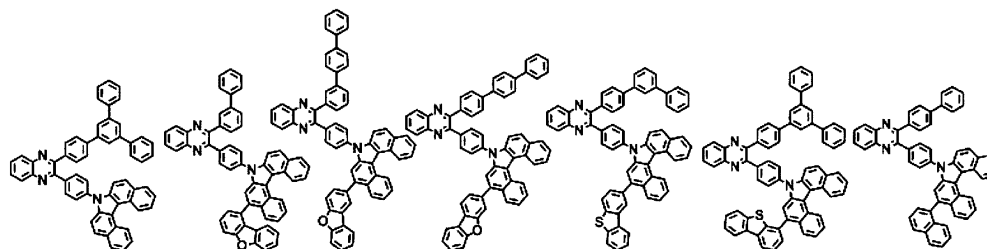
A-164

A-165

A-166

A-167

A-168



A-169

A-170

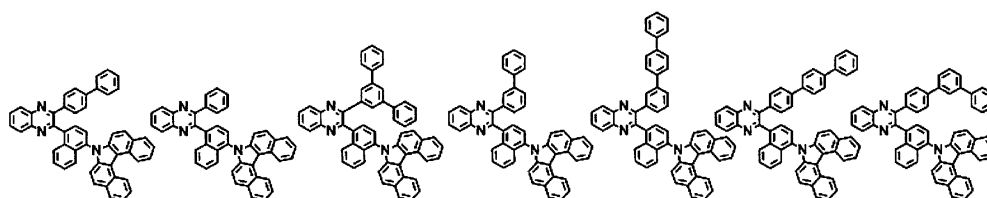
A-171

A-172

A-173

A-174

A-175



A-176

A-177

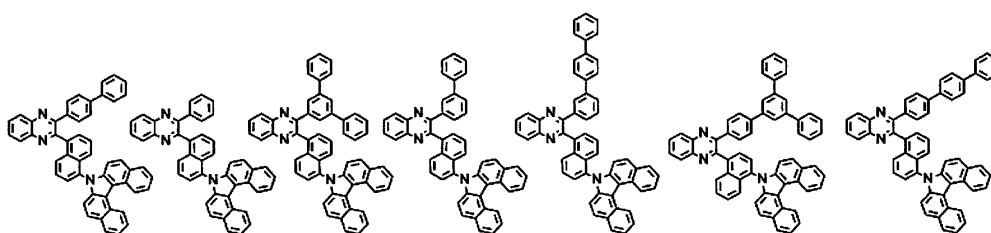
A-178

A-179

A-180

A-181

A-182



A-183

A-184

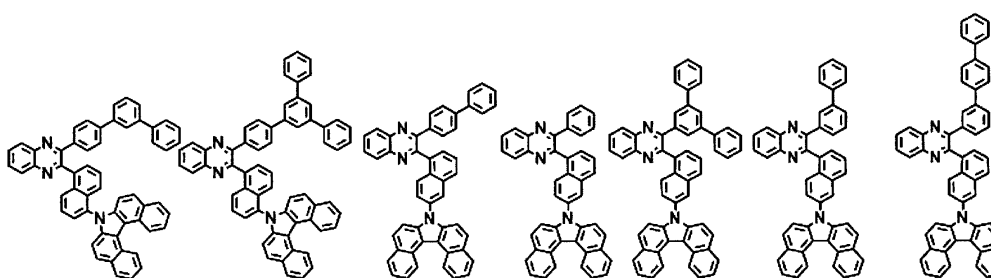
A-185

A-186

A-187

A-188

A-189



A-190

A-191

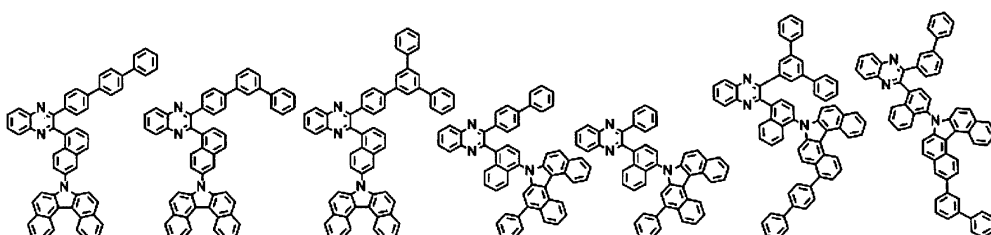
A-192

A-193

A-194

A-195

A-196



A-197

A-198

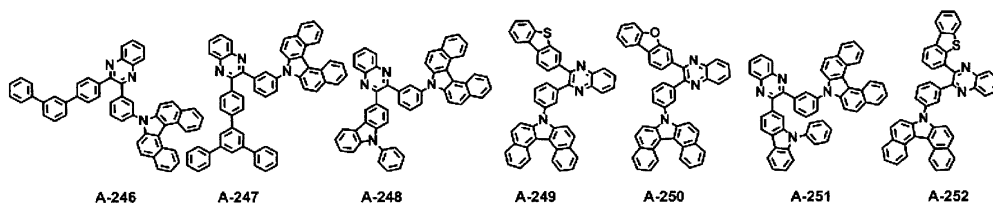
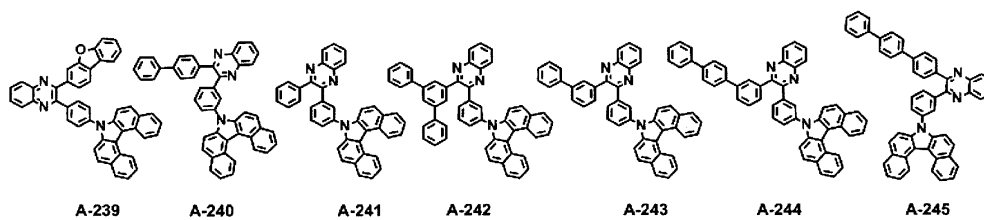
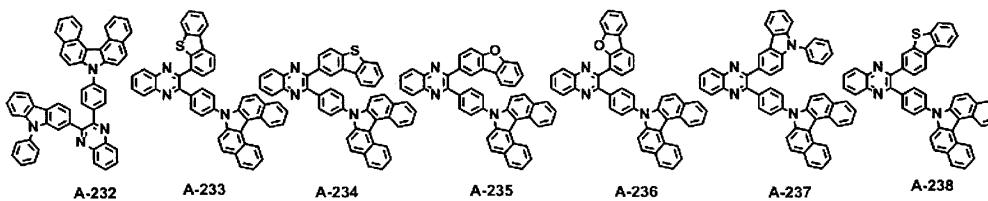
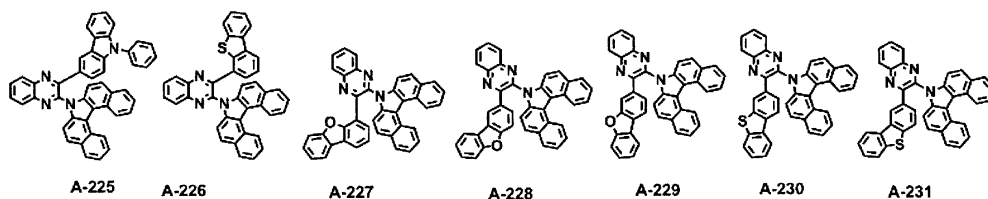
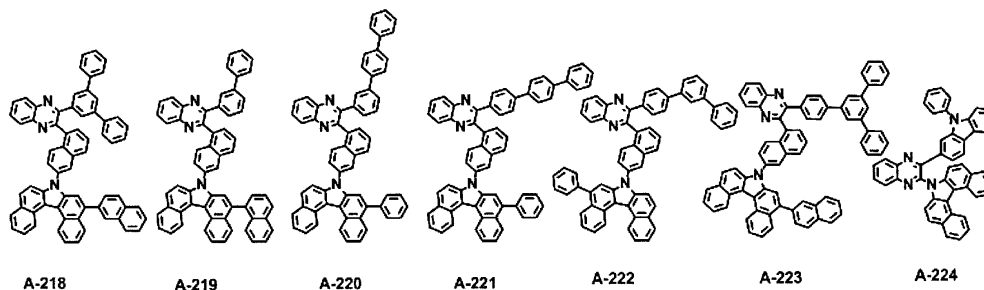
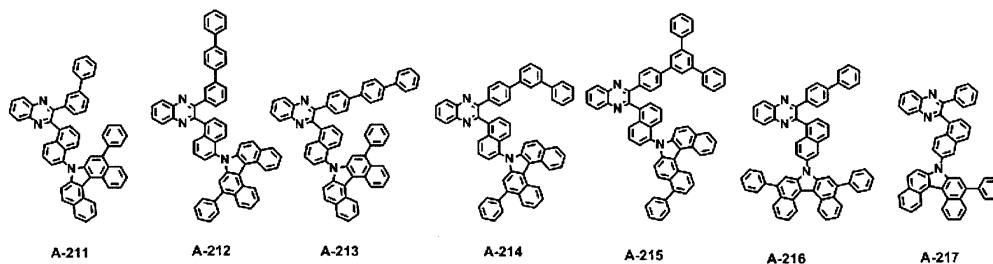
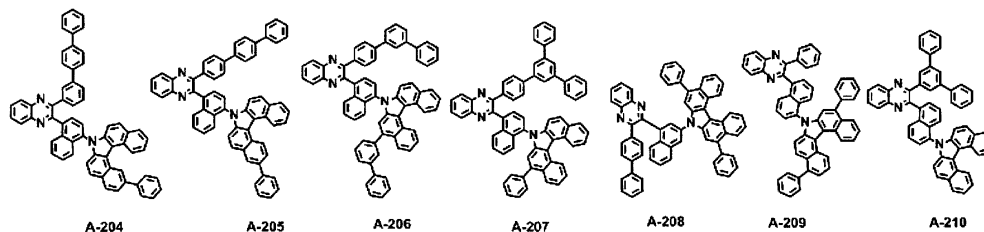
A-199

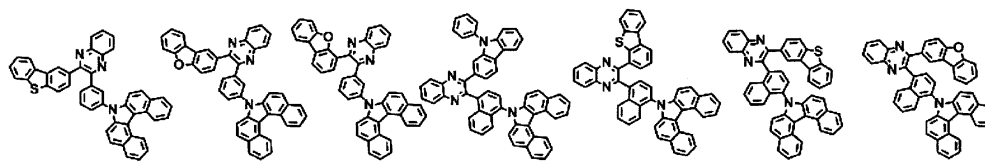
A-200

A-201

A-202

A-203





A-253

A-254

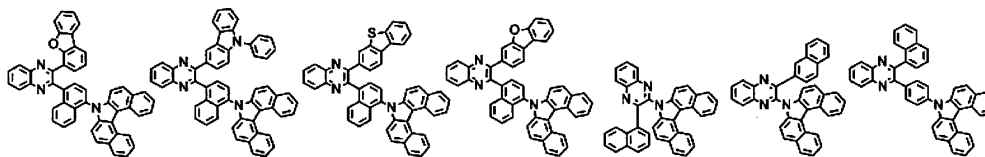
A-255

A-256

A-257

A-258

A-259



A-260

A-261

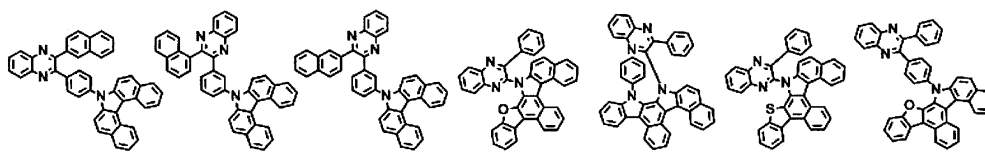
A-262

A-263

A-264

A-265

A-266



A-267

A-268

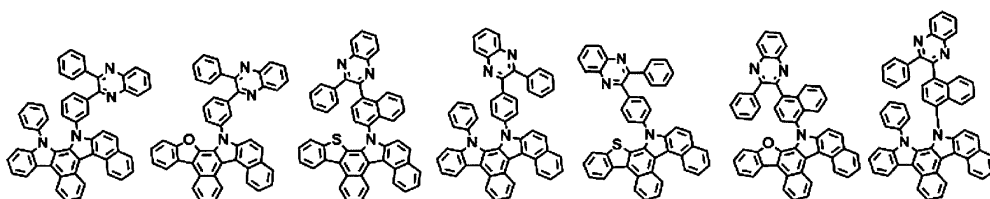
A-269

A-270

A-271

A-272

A-273



A-274

A-275

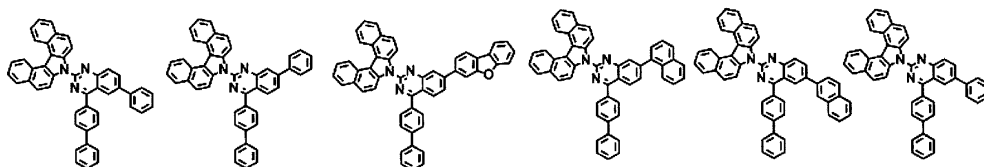
A-276

A-277

A-278

A-279

A-280



A-281

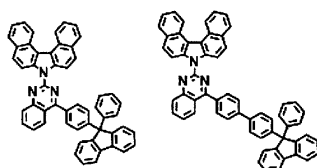
A-282

A-283

A-284

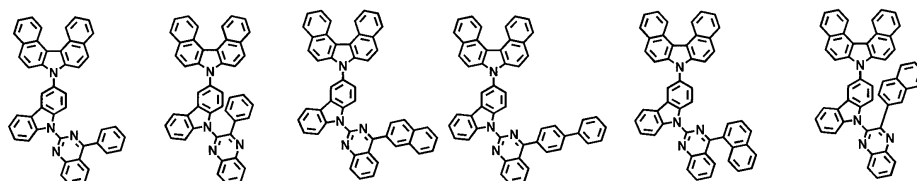
A-285

A-286



A-287

A-288



A-289

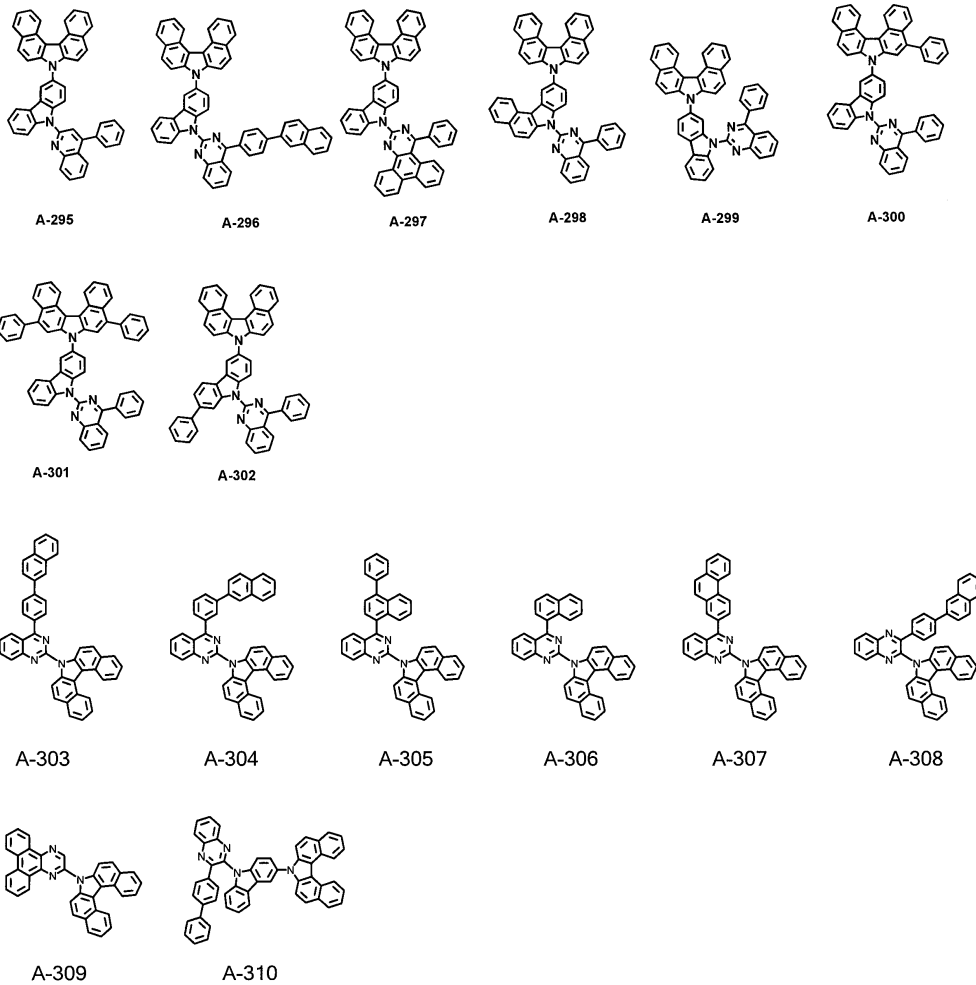
A-290

A-291

A-292

A-293

A-294



청구항 8

제1항의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 9

제8항에 있어서, 상기 화합물은 인광 호스트 재료로 사용되는, 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] 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 파이오니어 등이 정공 차단층의 재료로 사용되던 바토크프로인(Bathocuproine, BCP) 및 알루미늄(III)비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)(4-페닐페놀레이트)(Balq)등을 호스트 재료로 이용해 고성능의 유기 전계 발광 소자를 개발한 바 있다.

[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 공정시 열화되며, 소자의 수명이 저하된다. (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]

한편, 유기 전계 발광 소자는 이의 효율성 및 안정성을 높이기 위해 정공 주입층, 정공 전달층, 발광층, 전자 전달층 및 전자 주입층 등을 포함하는 다층 구조로 이루어진다. 이 때, 정공 전달층 등에 포함되는 화합물의 선정이 발광층으로의 정공 전달 효율, 발광 효율 및 수명 시간과 같은 소자 특성을 향상시킬 수 있는 수단으로 인식되고 있다.

[0007]

이와 관련해, 유기 전계 발광 소자에서 정공 주입 및 전달 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 운동성이 매우 크기 때문에, 정공과 전자의 전하 밸런스(hole-electron charge balance)가 깨지고 이로 인해 양자 효율(cd/A)이 낮아지게 된다.

[0008]

따라서, 유기 전계 발광 소자의 내구성 향상을 위한 정공 전달층의 개발이 여전히 요구되고 있다.

[0009]

미국 등록특허공보 US 8,227,798 B2 및 한국 특허공개공보 제10-2010-0108924호는 디벤조카바졸의 질소 위치에 트리아진 등의 질소 함유 헤테로아릴이 결합된 화합물을 유기 전계 발광 소자용 화합물로 개시하고 있고, 한국 등록특허공보 제10-1074193호는 벤조카바졸의 질소 위치에 트리아진 등의 질소 함유 헤테로아릴이 결합된 화합물을 유기 전계 발광 소자용 화합물로 개시하고 있으며, 한국 특허공개공보 제10-2014-0015259호는 디벤조카바졸의 질소 위치에 안트라센을 포함하는 아릴이 결합된 화합물을 유기 전계 발광 소자용 화합물로 개시하고 있다. 그러나, 상기 문헌들은 디벤조카바졸의 질소 위치에 퀴나졸린 또는 퀴녹살린이 직접 또는 링커에 의해 결합된 유기 전계 발광 화합물을 구체적으로 개시하고 있지 않다.

선행기술문헌

특허문헌

[0010]

(특허문헌 0001) 미국 등록특허공보 US 8,227,798 B2 (2012. 7. 24 발행)

(특허문헌 0002) 한국 특허공개공보 제10-2010-0108924호 (2010. 10. 8 발행)

(특허문헌 0003) 한국 등록특허공보 제10-1074193호 (2011. 10. 14 발행)

(특허문헌 0004) 한국 특허공개공보 제10-2014-0015259호 (2014. 2. 6 발행)

발명의 내용

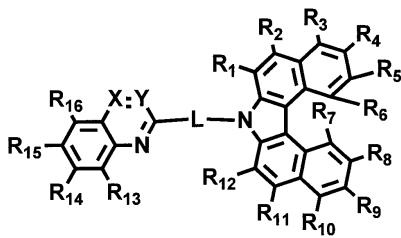
해결하려는 과제

[0011] 본 발명의 목적은, 첫째로 구동 수명이 길고, 구동 전압이 낮고, 전류 효율 및 전력 효율과 같은 발광 효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며, 둘째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0012] 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.

[0013] [화학식 1]



[0014]

[0015] 상기 화학식 1에서,

[0016] L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고;

[0017] X 및 Y는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁₇이며;

[0018] R₁ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환측 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환측 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소, 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

[0019] 상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

발명의 효과

[0020] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 구동 전압이 낮고 전류 효율 및 전력 효율이 우수하면서도, 구동 수명이 현저히 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0021] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.

[0022] 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.

[0023] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은, 신규 골격을 가지면서 이를 이용하면 좋은 소자 성능을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다. 종래에 카바졸, α-벤조카바졸 및 c-벤조카바졸의 구조를 갖는 화합물들이 개시되어 있었지만, 그러한 구조의 화합물들은 전자와 정공 이동도의 균형이 맞지 않아서 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제조하였을 때 효율, 수명, 구동 전압 등의 성능이 좋지 못하였다. 본 발명에서는 c-벤조카바졸에서 한층 더 축합환을 갖는 디-c-벤조카바졸 형태의 구조를 갖는 화합물이 정공과 전자의 주입, 이동도를 개선하여 좋은 효율, 수명을 나타내고 낮은 구동 전압을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있음을 발명하였다. 구조적 특징의 측면에서도 카바졸이나 c-벤조카바졸과는 다르게 두 개의 한층 더 축합된 나프틸 형태가 되면서 이면각

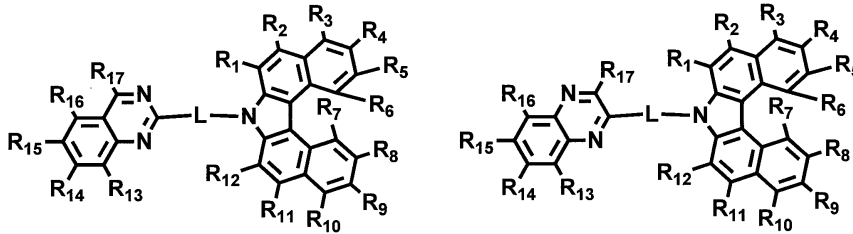
(dihedral angle)이 약간 뒤틀어져 카바졸이나 c-벤조카바졸과는 전혀 다른 구조적 특징을 갖고, 유리전이온도가 올라가는 열안정성도 개선되었다.

상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 2 또는 3으로 표시될 수 있다.

[화학식 2]

[화학식 3]



상기 화학식 2 및 3에서,

L 및 R₁ 내지 R₁₇은 화학식 1에서 정의된 것과 같다.

본 발명에 기재되어 있는 "(C1-C30)알킬"은 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 10개인 것이 바람직하고, 1 내지 6개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알케닐"은 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알키닐"은 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알키닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알키닐의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 여기에서 탄소수가 3 내지 20개인 것이 바람직하고, 3 내지 7개인 것이 더 바람직하다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(3-7원)헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 3 내지 7개이고, B, N, O, S, 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, 테트라하이드로퓨란, 피롤리딘, 티올란, 테트라하이드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴(렌)"은 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 여기에서 환 골격 탄소수가 6 내지 20개인 것이 바람직하고, 6 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 페닐터페닐, 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, 단일환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴(렌)은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로겐"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

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 상기 L 및 R₁ 내지 R₁₇에서 치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 (C6-C30)아릴(렌), 치환 (3-30원)헤테로아릴(렌), 치환

트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 (C1-C30)알킬 디(C6-C30)아릴실릴, 치환 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, 및 치환 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30 원)헤테로아릴, (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인 것을 의미하고, 각각 독립적으로 (C6-C25)아릴 또는 (C6-C20)아르(C1-C6)알킬인 것이 바람직하다.

[0032] 상기 화학식 1에서, L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고, 바람직하게는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴렌이며, 더욱 바람직하게는 단일 결합, 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴렌이다.

[0033] 본원 발명의 일양태에서 상기 L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 터페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 플루오레닐, 치환 또는 비치환된 페난트레닐, 치환 또는 비치환된 안트라세닐, 치환 또는 비치환된 인데닐, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐, 치환 또는 비치환된 피레닐, 치환 또는 비치환된 테트라세닐, 치환 또는 비치환된 페릴레닐, 치환 또는 비치환된 크라이세닐, 치환 또는 비치환된 나프타세닐, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐, 치환 또는 비치환된 카바졸, 또는 치환 또는 비치환된 벤조카바졸이다.

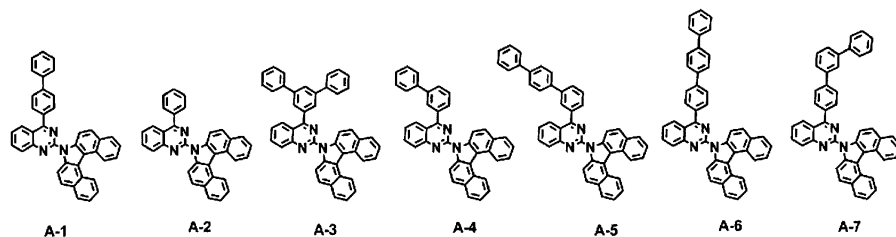
[0034] 상기 X 및 Y는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁₇이다.

[0035] 상기 R₁ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소, 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C20) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, (C6-C20)아르(C1-C6)알킬 또는 (C6-C25)아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (C3-C20) 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있다.

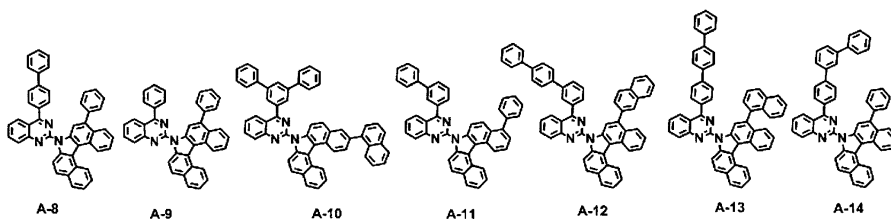
[0036] 본원 발명의 일양태에 따르면, 상기 화학식 1에서, L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴렌이고; X 및 Y는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁₇이며; R₁ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C20) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소, 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있다.

[0037] 본원 발명의 다른 일양태에 따르면, 상기 화학식 1에서, L은 단일 결합, 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴렌이고; X 및 Y는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁₇이며; R₁ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, (C6-C20)아르(C1-C6)알킬 또는 (C6-C25)아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-20원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (C3-C20) 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소, 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있다.

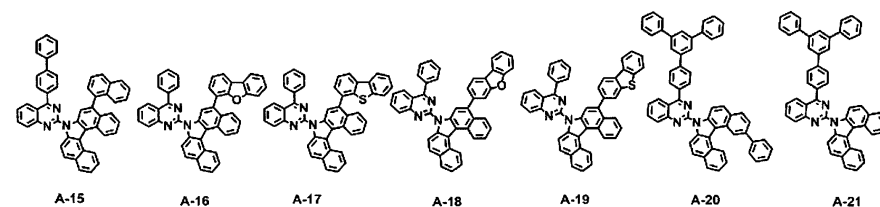
[0038] 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



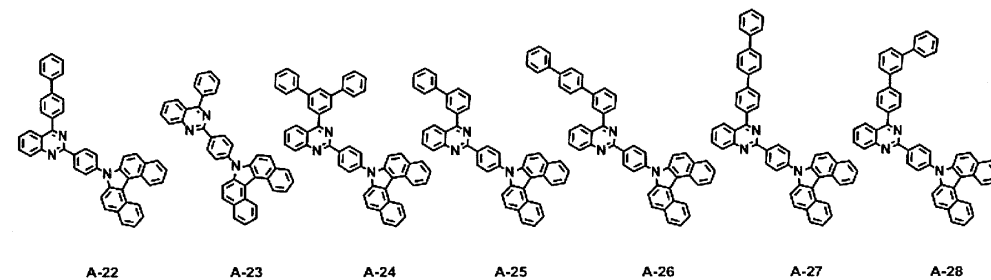
[0039]



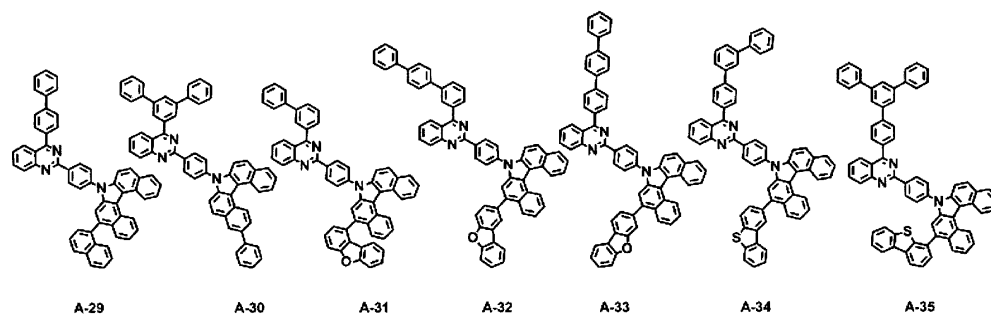
[0040]



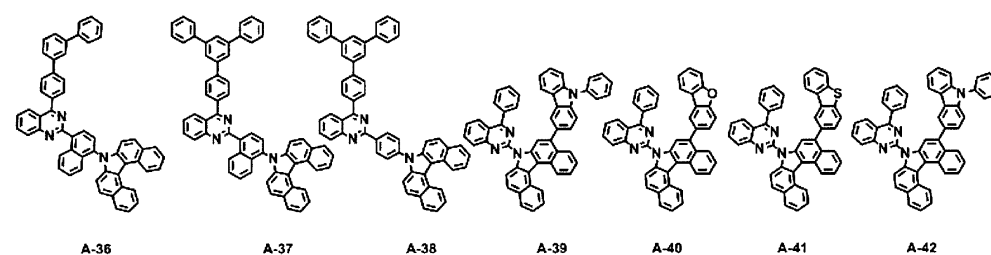
[0041]



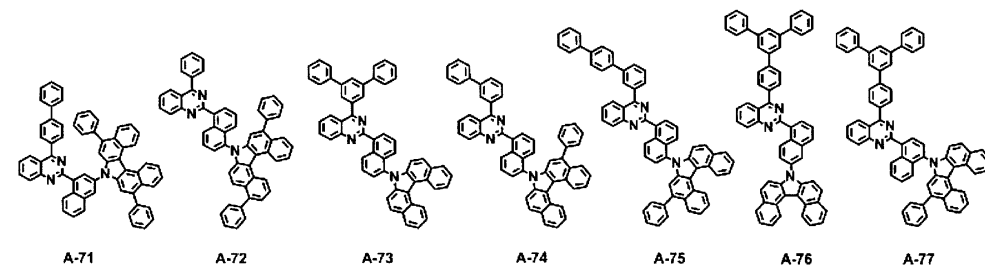
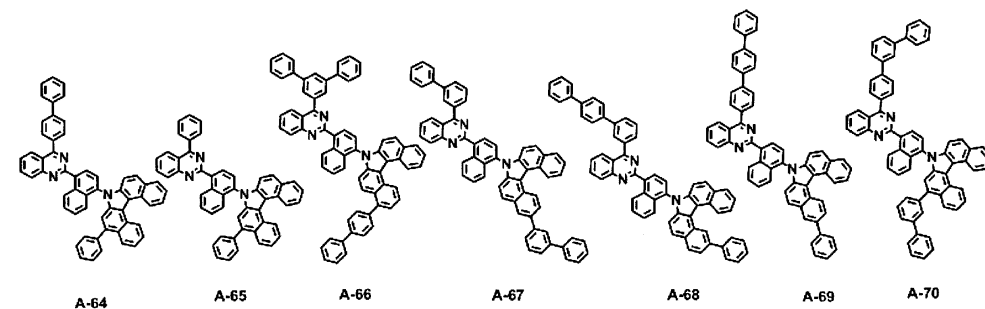
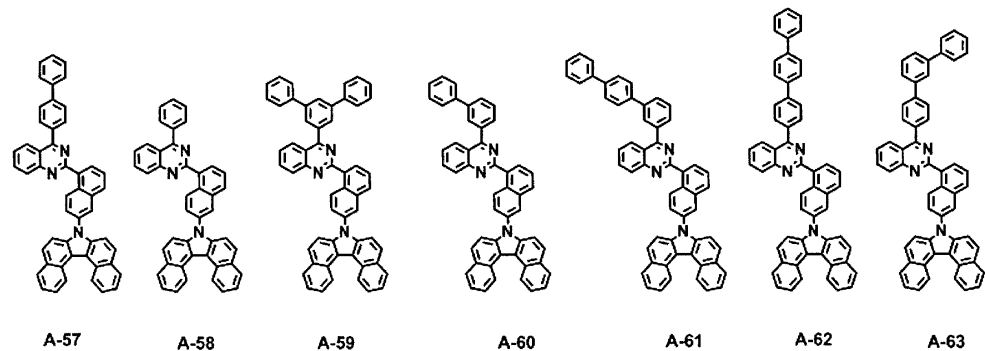
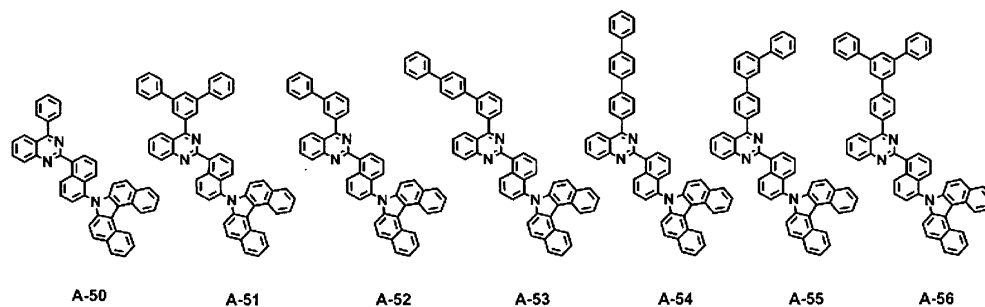
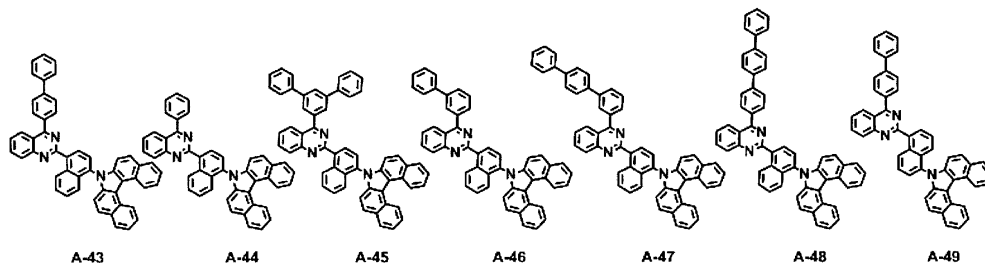
[0042]

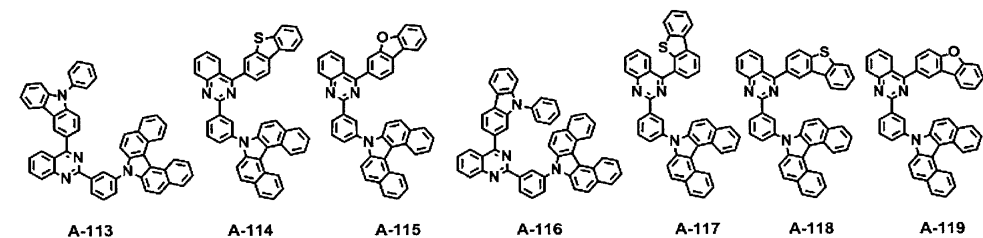
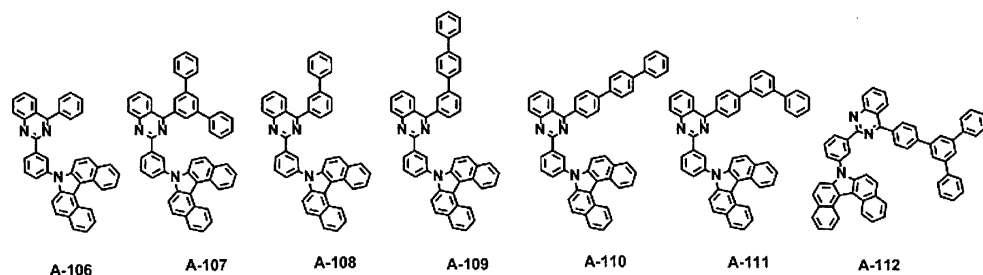
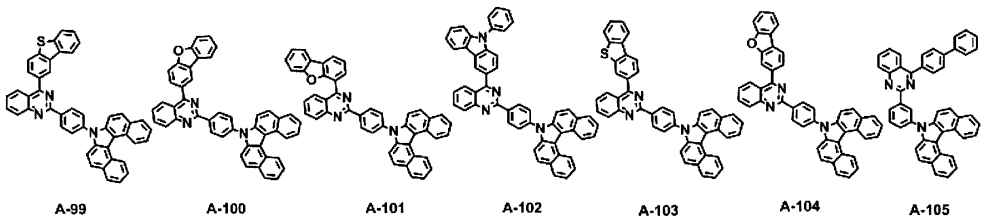
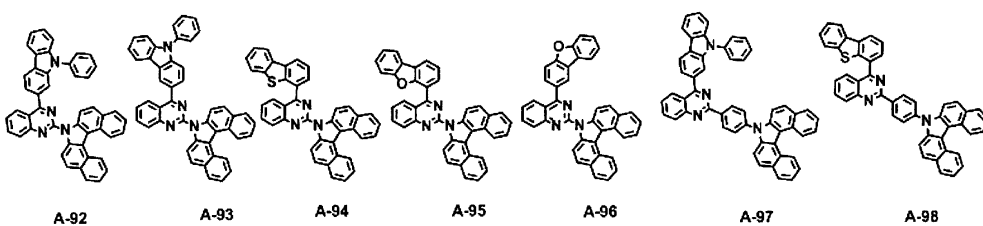
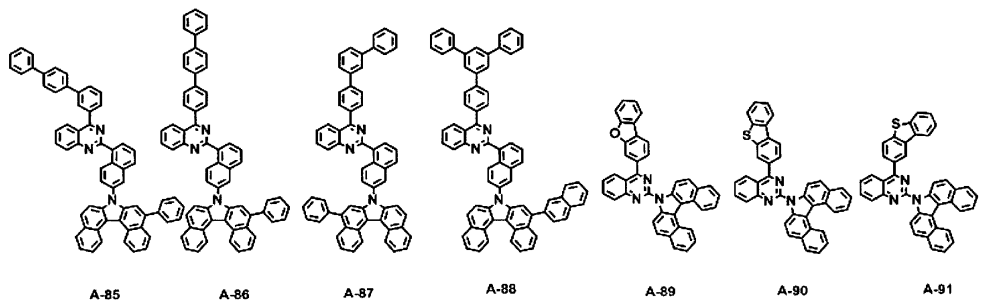
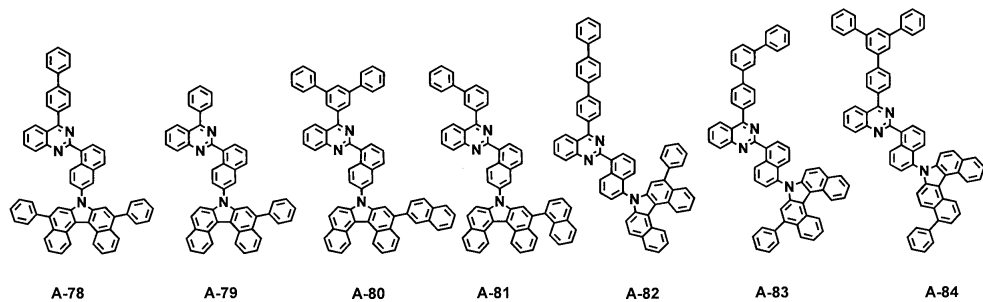


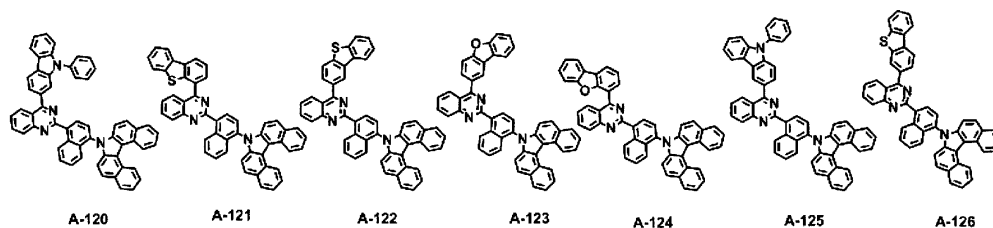
[0043]



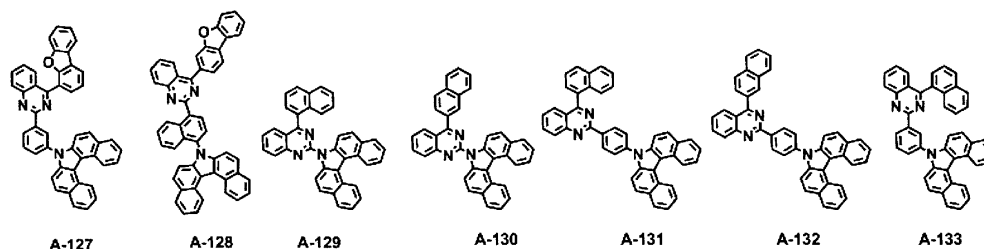
[0044]



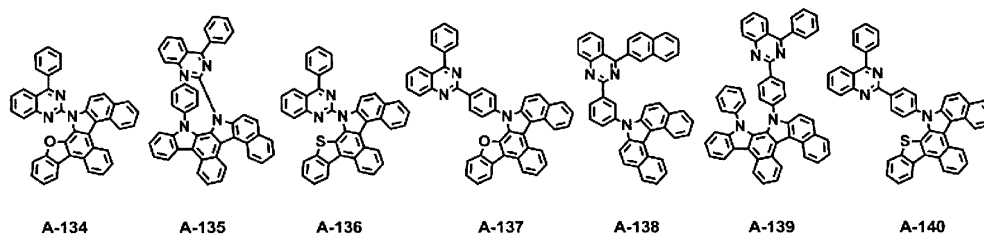




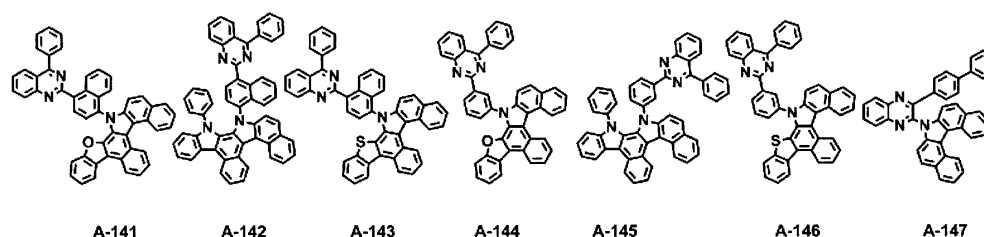
[0056]



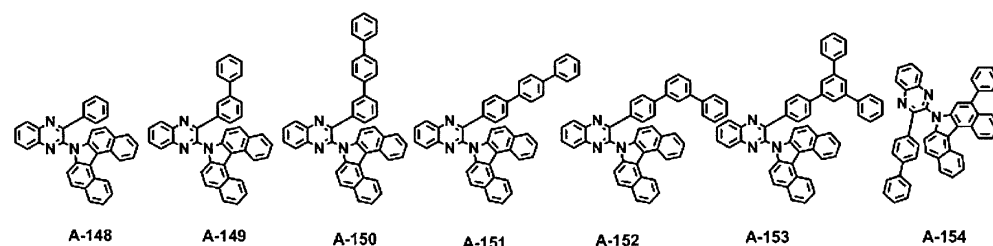
[0057]



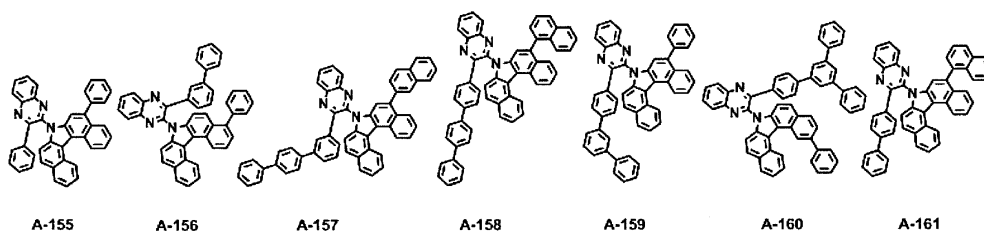
[0058]



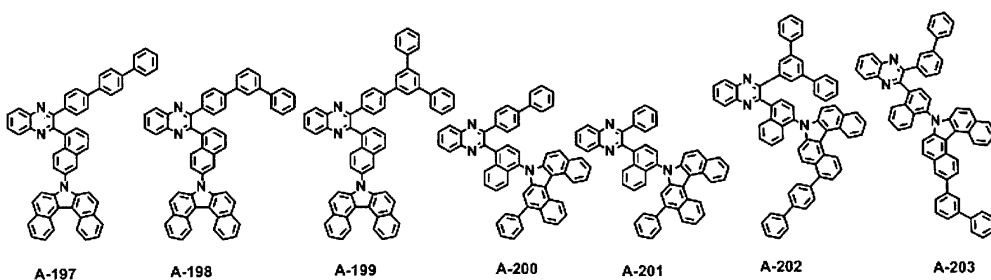
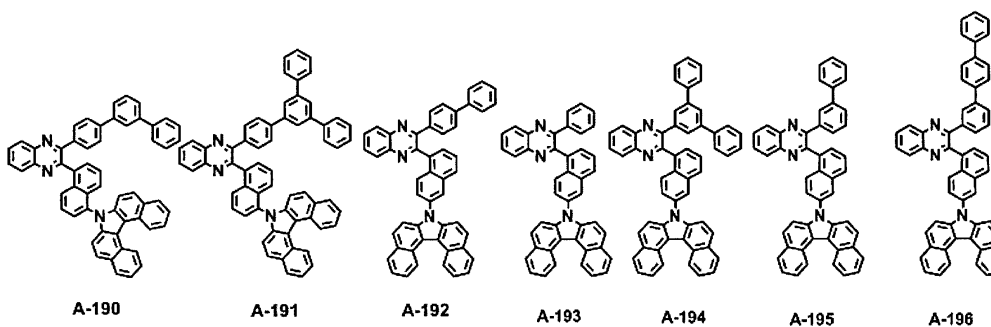
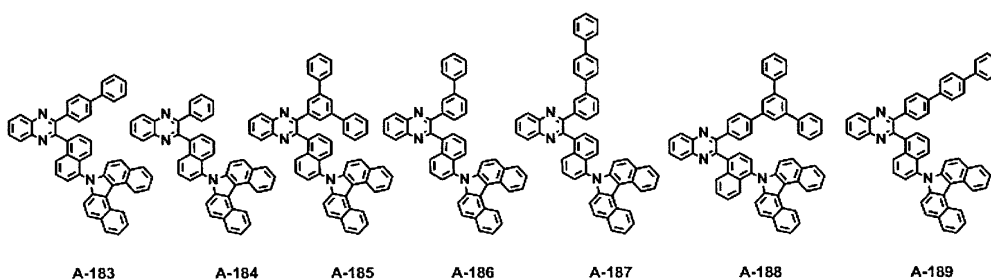
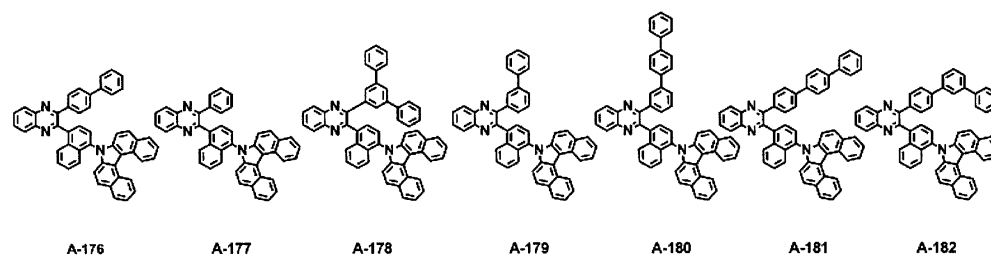
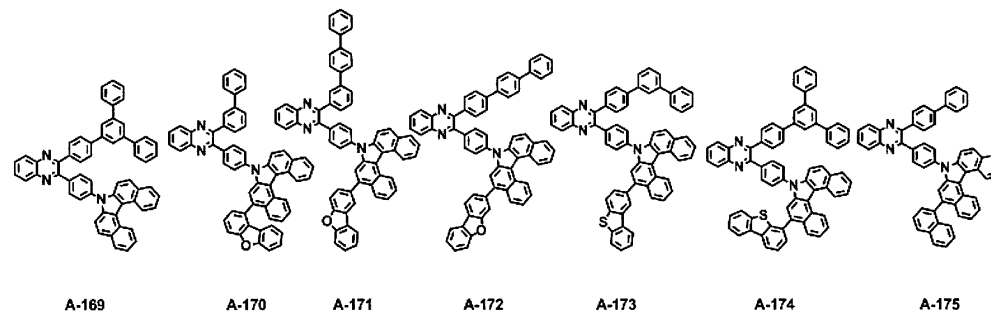
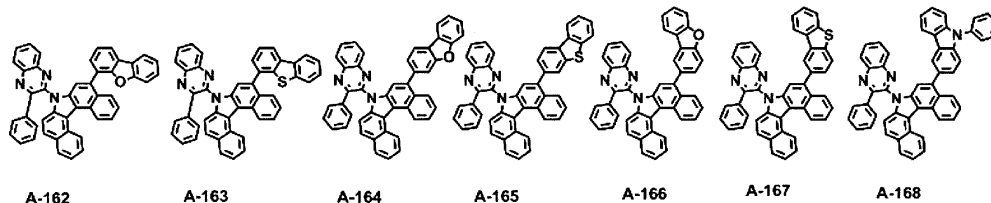
[0059]

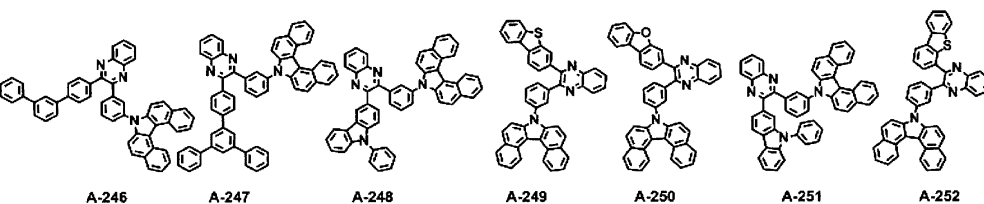
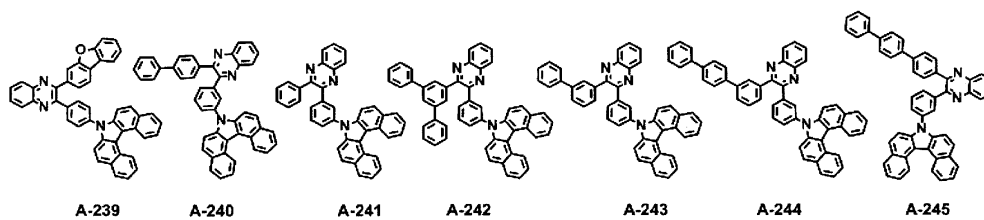
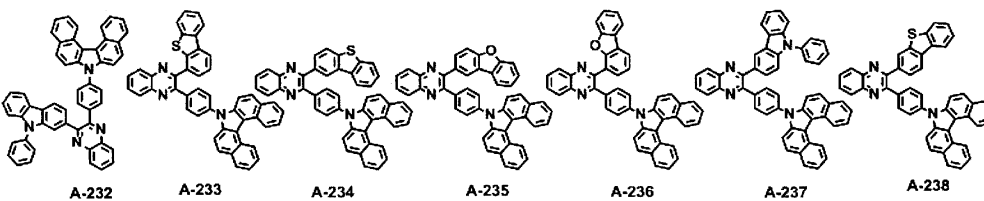
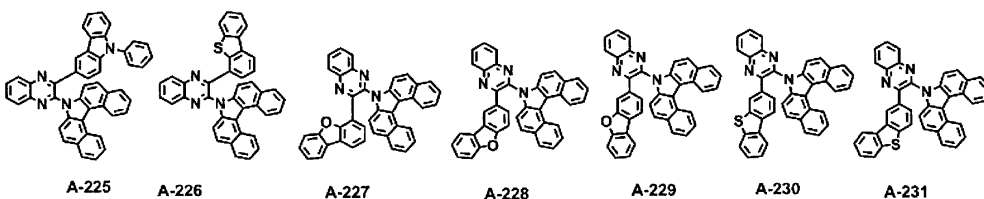
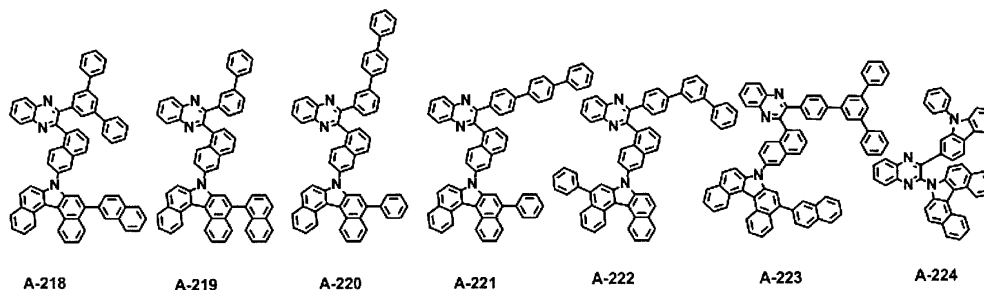
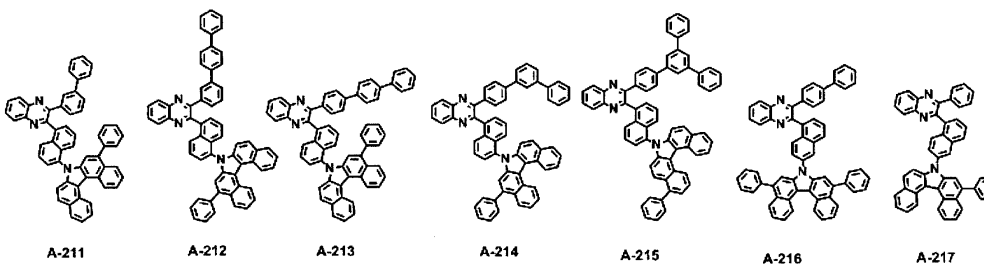
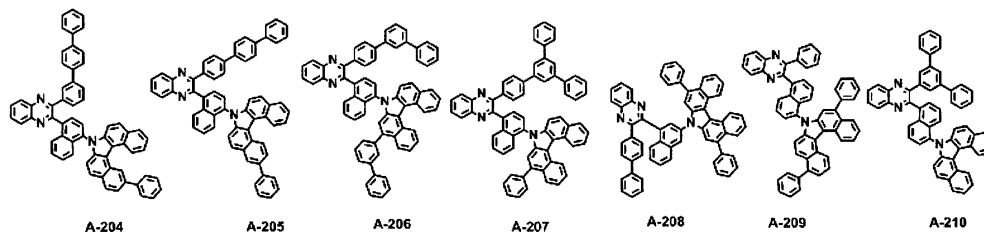


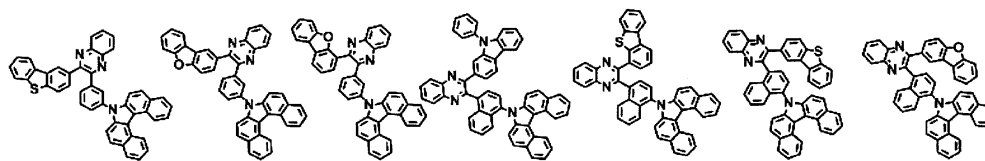
[0060]



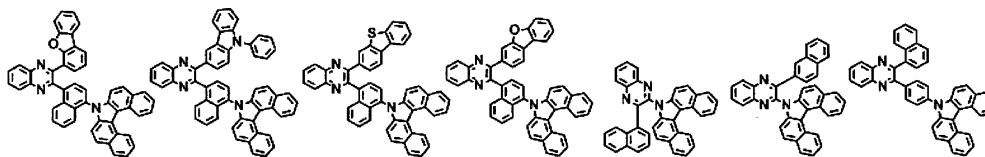
[0061]



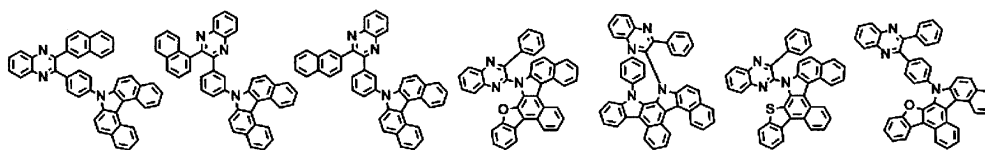




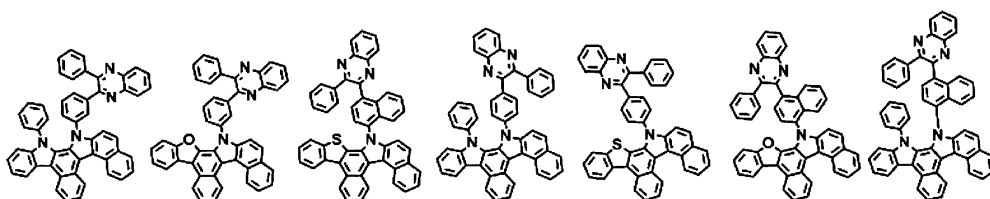
A-253 A-254 A-255 A-256 A-257 A-258 A-259



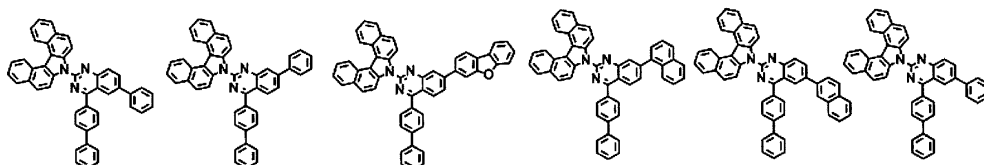
A-260 A-261 A-262 A-263 A-264 A-265 A-266



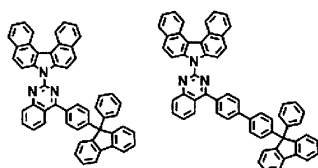
A-267 A-268 A-269 A-270 A-271 A-272 A-273



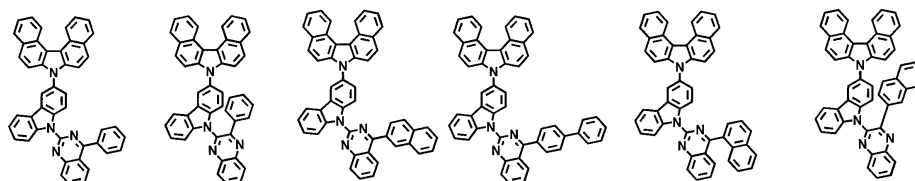
A-274 A-275 A-276 A-277 A-278 A-279 A-280



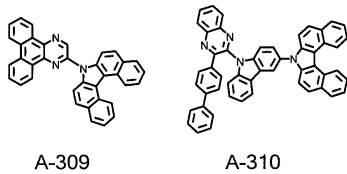
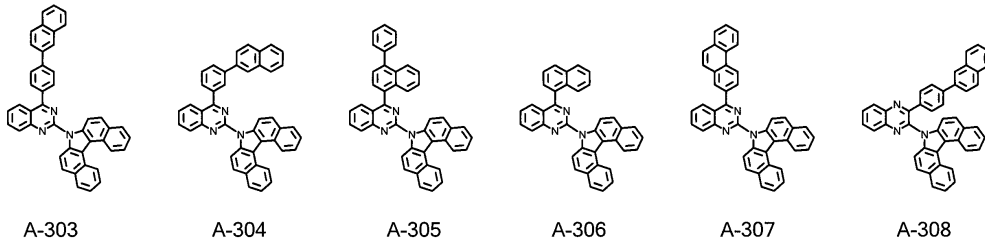
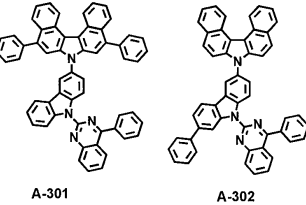
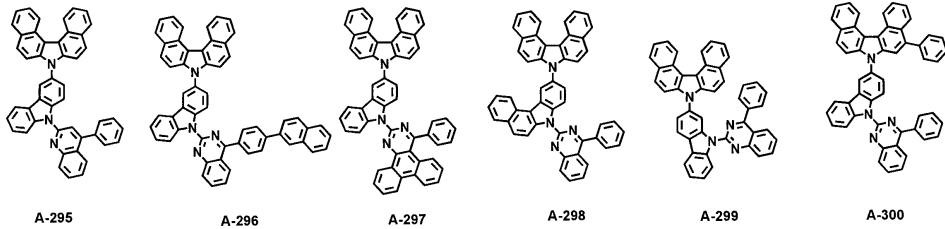
A-281 A-282 A-283 A-284 A-285 A-286



A-287 A-288

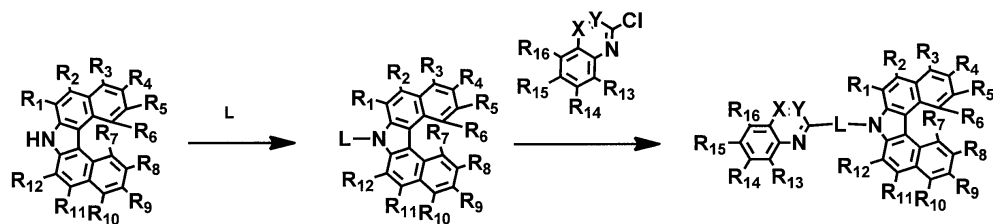


A-289 A-290 A-291 A-292 A-293 A-294



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, X, Y 및 R₁ 내지 R₁₆은 화학식 1에서의 정의와 동일하다.

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.

[0093] 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.

[0094] 본 발명의 화학식 1의 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다. 발광층에 사용될 경우, 본 발명의 화학식 1의 화합물은 인광 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는, 상기 발광층은 하나 이상의 도펀트를 추가로 더 포함할 수 있으며, 필요한 경우, 본 발명의 화학식 1의 화합물 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다. 이 때, 제1 호스트 재료와 제 2호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

[0095] 상기 제2 호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하나, 하기 화학식 11 내지 화학식 15로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 발광 효율 면에서 특히 바람직하다.

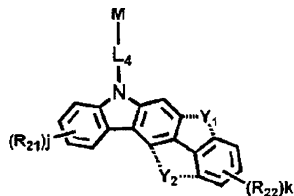
[0096] [화학식 11]

[0097] $H-(Cz-L_4)_h-M$

[0098] [화학식 12]

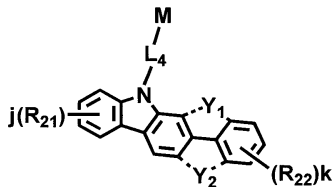
[0099] $H-(Cz)_i-L_4-M$

[0100] [화학식13]



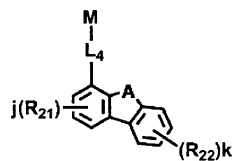
[0101]

[0102] [화학식14]



[0103]

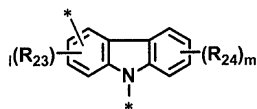
[0104] [화학식15]



[0105]

[0106] 상기 화학식 11 내지 15에서,

[0107] Cz는 하기 구조이며,



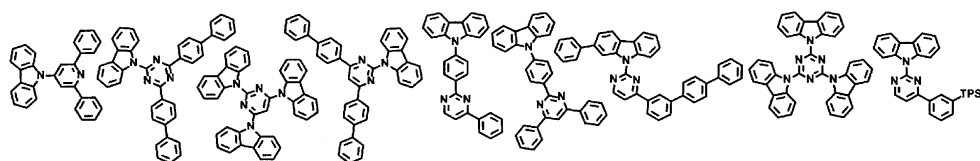
[0108]

[0109] A는 -O- 또는 -S-이고;

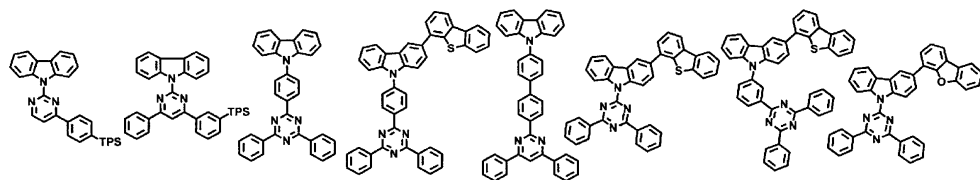
[0110] R21 내지 R24은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된

(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴 또는 $-\text{SiR}_{25}\text{R}_{26}\text{R}_{27}$ 이며, R_{25} 내지 R_{27} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; L_4 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고; M은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며; Y_1 및 Y_2 는 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{N}(\text{R}_{31})-$, $-\text{C}(\text{R}_{32})(\text{R}_{33})-$ 이고, Y_1 과 Y_2 가 동시에 존재하지는 않으며; R_{31} 내지 R_{33} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 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-L₄), 각각의 (Cz), 각각의 R_{21} , 각각의 R_{22} , 각각의 R_{23} 또는 각각의 R_{24} 는 동일하거나 상이할 수 있다.

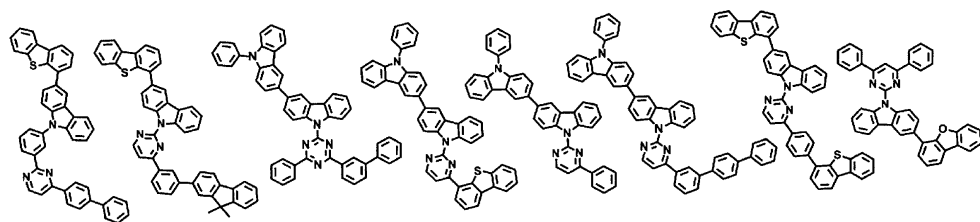
[0111] 구체적으로 상기 제2 호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같다.



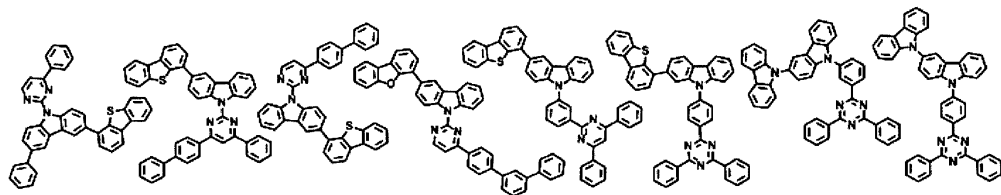
[0112]



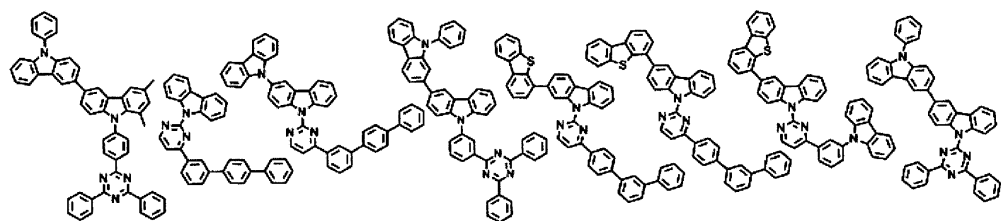
[0113]



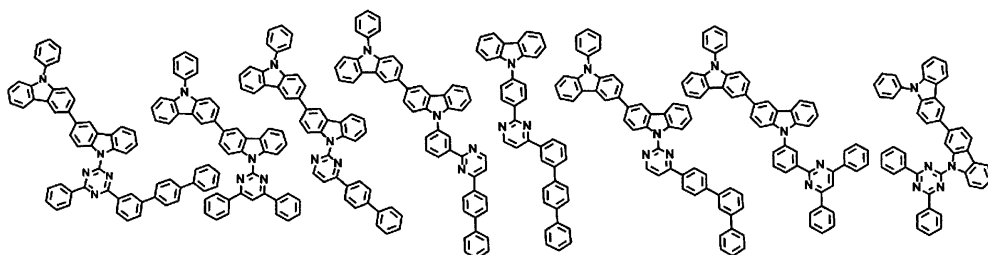
[0114]



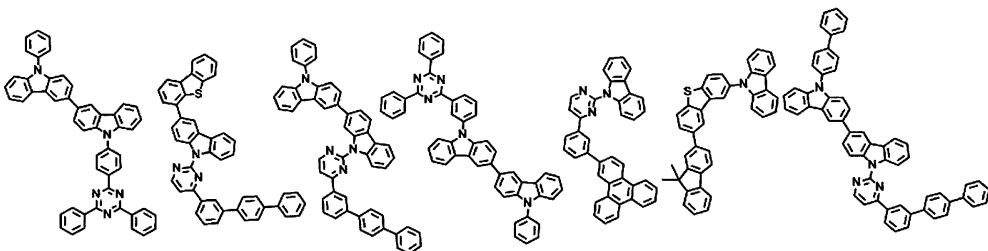
[0115]



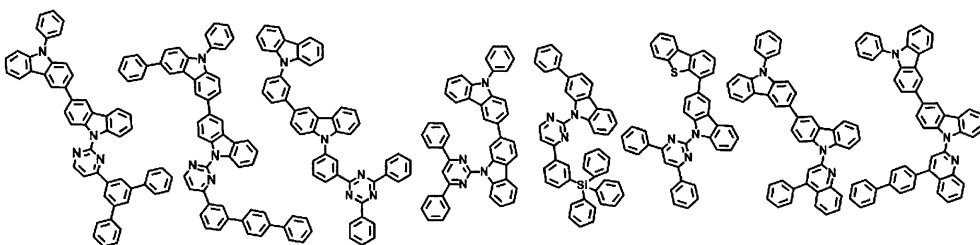
[0116]



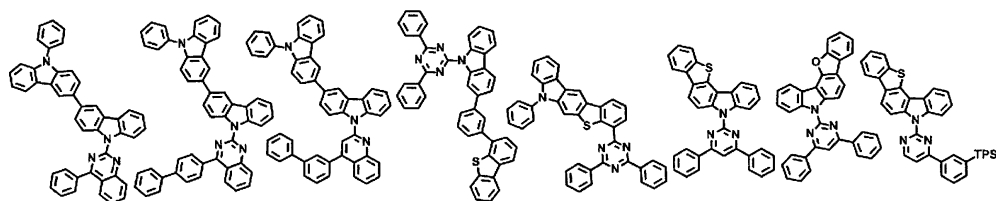
[0117]



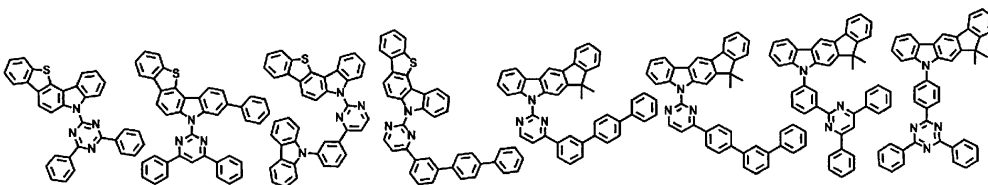
[0118]



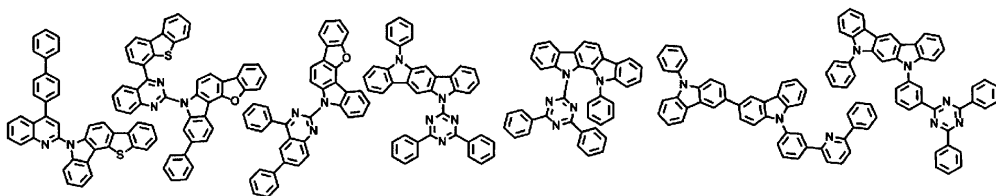
[0119]



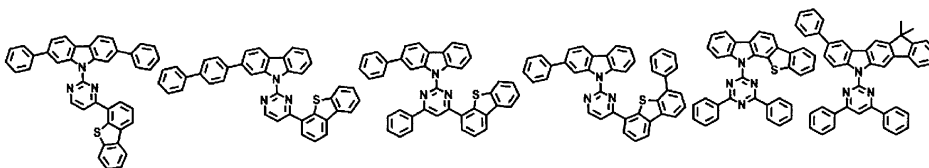
[0120]



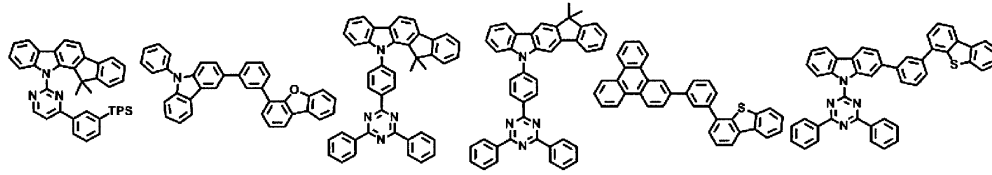
[0121]



[0122]



[0123]

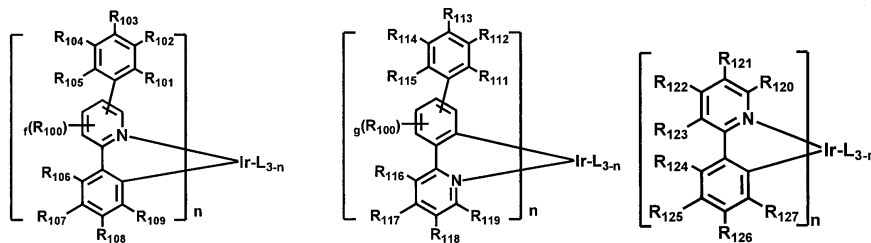


[여기서, TPS는 트리페닐실릴(triphenylsilyl)이다]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 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.

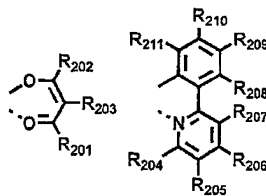
본 발명의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 101 내지 103으로 표시되는 화합물을 사용할 수 있다.

[화학식 101] [화학식 102] [화학식 103]



상기 화학식 101 내지 103에서,

L은 하기 구조에서 선택되고;



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

R₁₀₁ 내지 R₁₀₉ 및 R₁₁₁ 내지 R₁₂₃은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 중수소 또는 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; R₁₀₆ 내지 R₁₀₉는 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며; R₁₂₀ 내지 R₁₂₃는 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 할로젠, 알킬 또는 아릴로 치환 또는 비치환된 퀴놀린 형성이 가능하며;

R₁₂₄ 내지 R₁₂₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; R₁₂₄ 내지 R₁₂₇은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

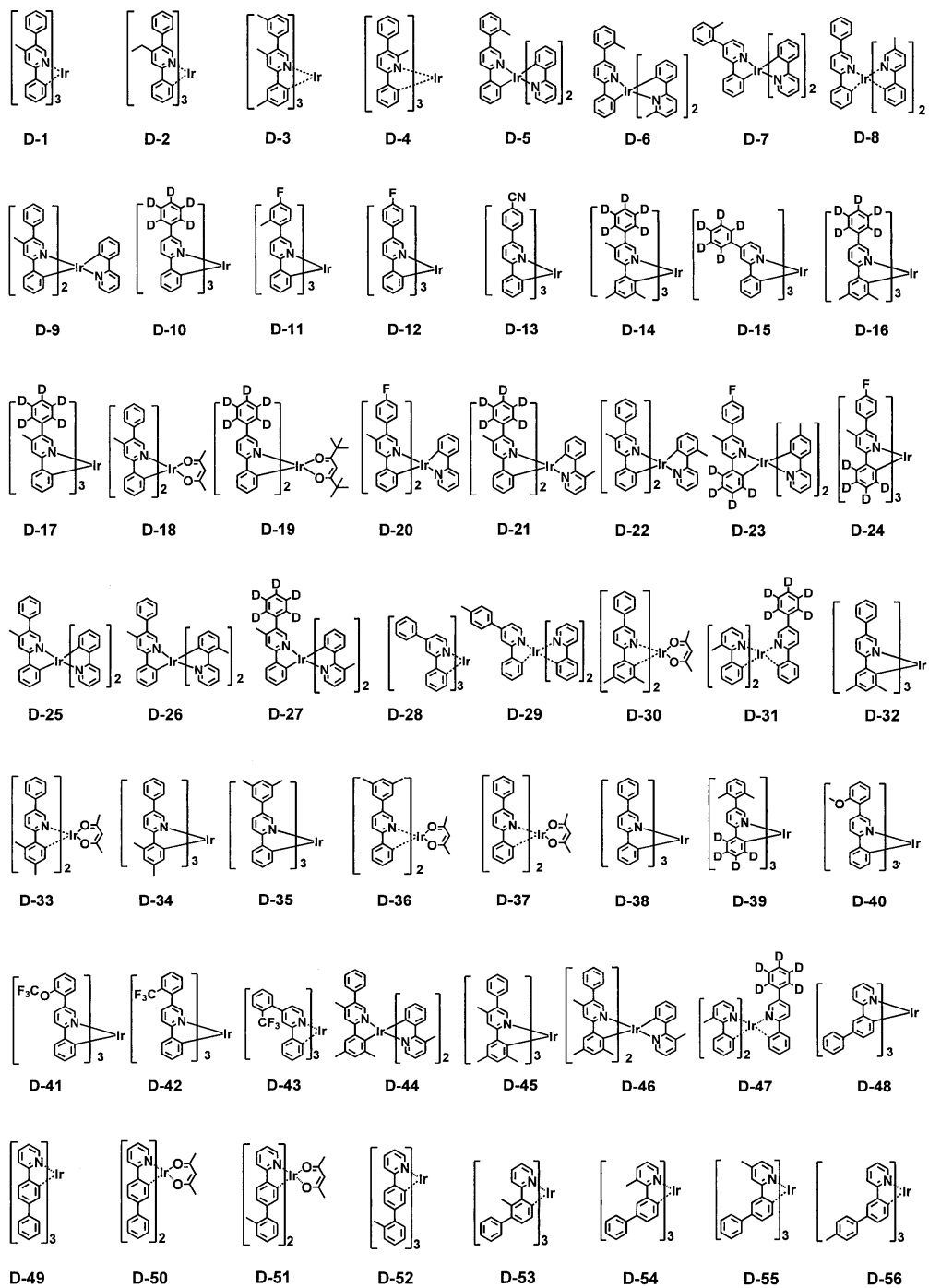
R₂₀₁ 내지 R₂₁₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 중수소 또는 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-

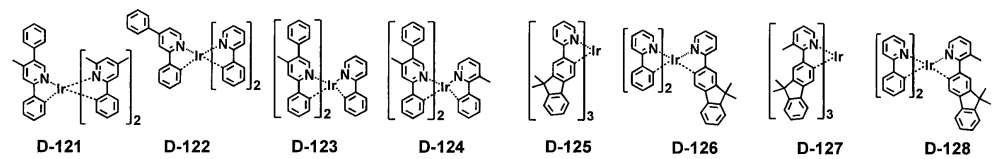
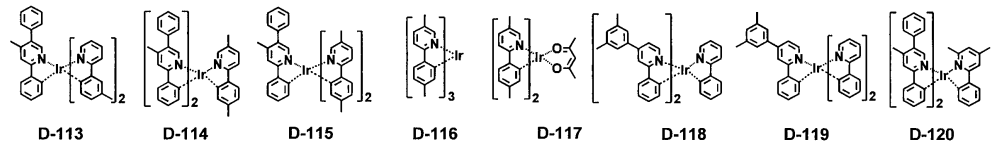
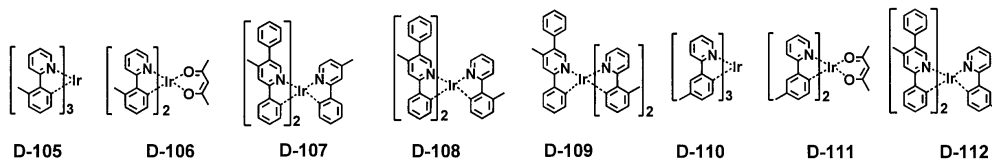
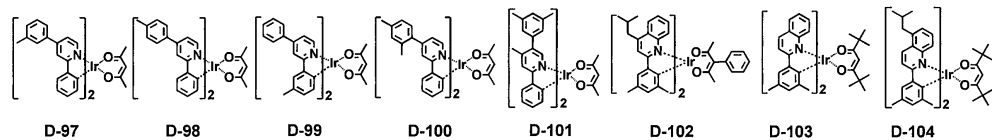
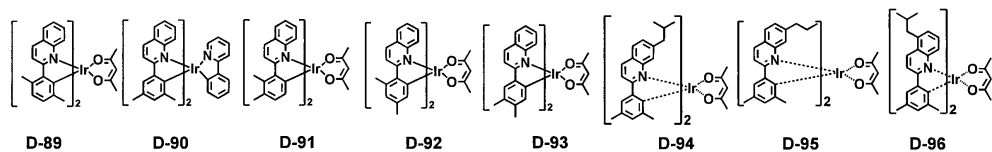
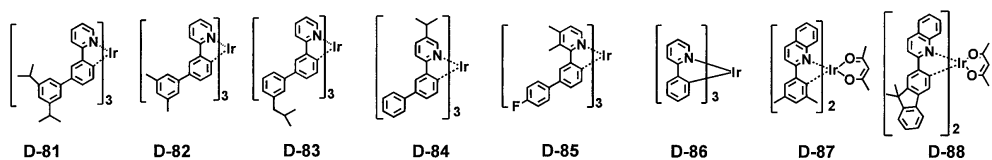
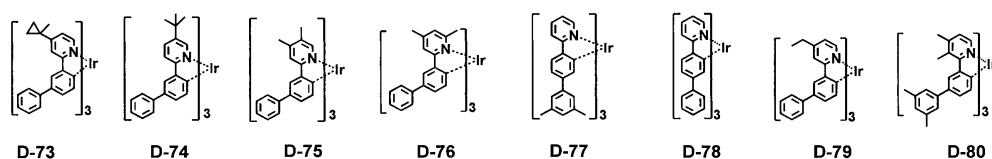
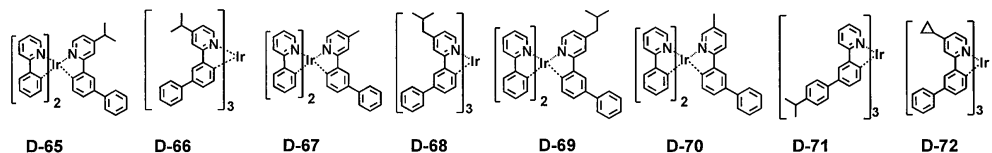
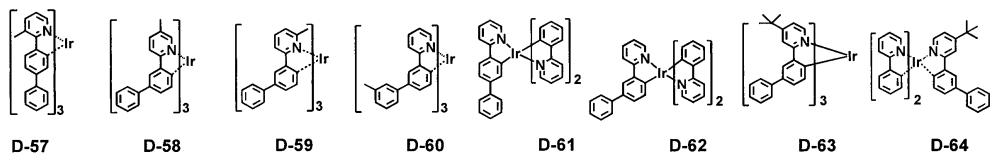
C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고, R_{208} 내지 R_{211} 은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

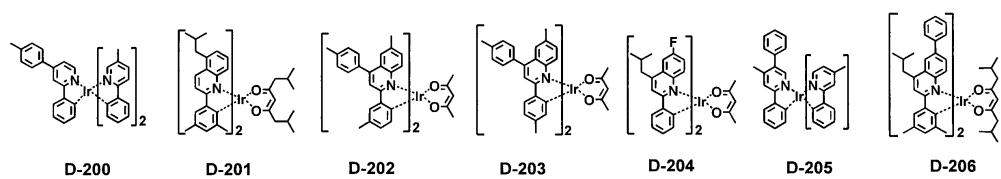
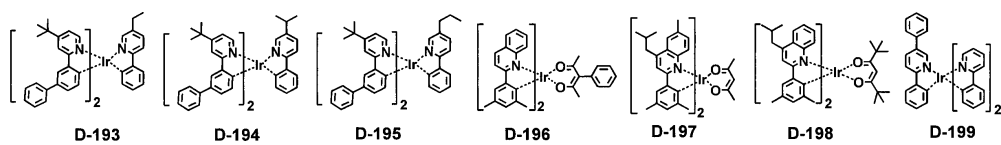
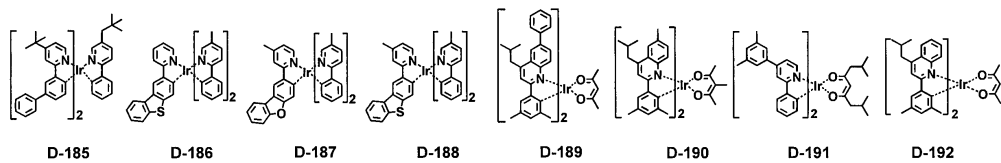
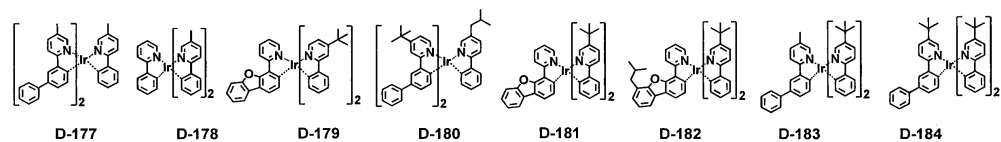
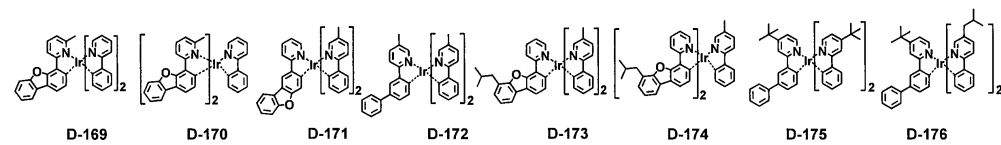
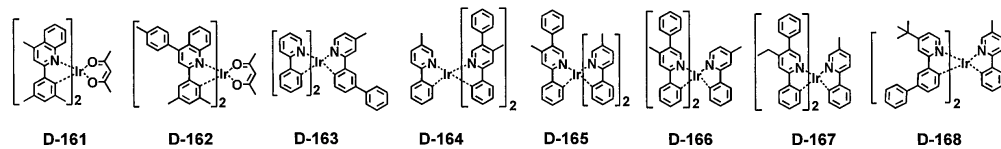
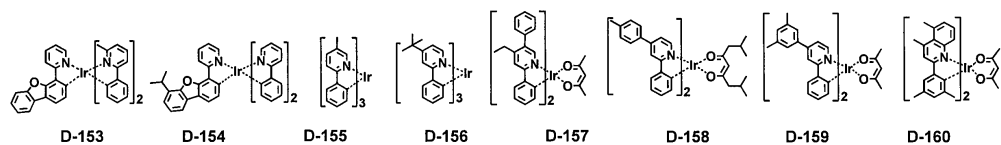
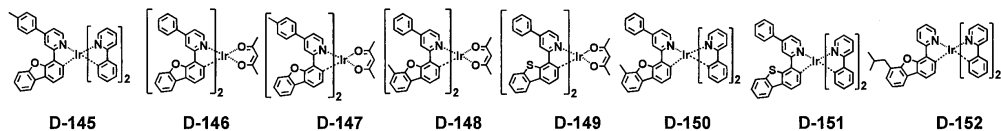
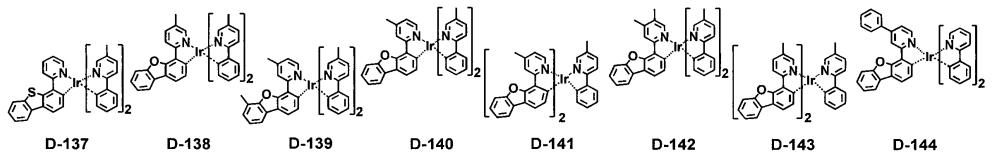
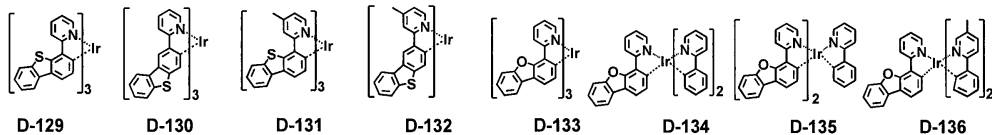
f 및 g는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며; f 또는 g가 각각 2이상의 정수인 경우 각각의 R_{100} 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

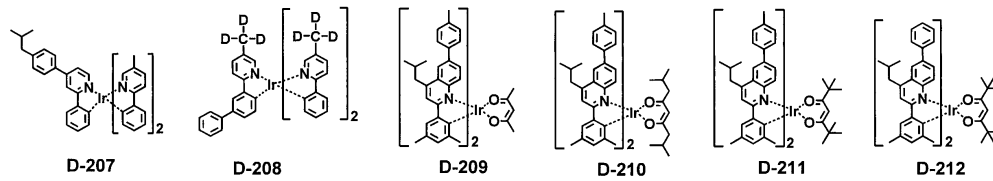
n은 1 내지 3의 정수이다.

상기 도판트 화합물의 구체적인 예는 다음과 같다.









[0166]

[0167]

[0168]

[0169]

[0170]

[0171]

[0172]

[0173]

[0174]

[0175]

[0176]

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

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 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 할로겐화 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, 할로겐화 금속의 바람직한 예로는 LiF , MgF_2 , CaF_2 , 불화 회토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등이 있다.

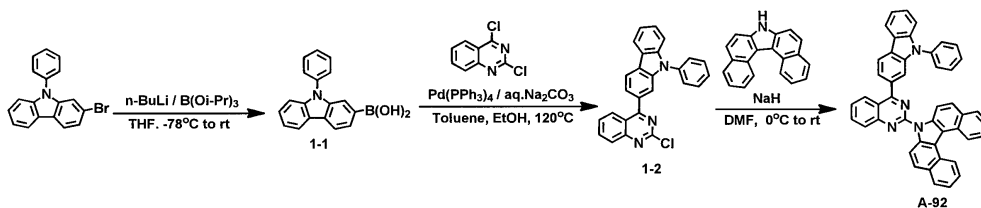
또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 이렇게 제조된 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 액셉터(acceptor)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

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

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

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

[실시예 1] 화합물 A-92의 제조



화합물 1-1의 합성

플라스크 안에서 2-브로모-9-페닐-9H-카바졸 (25 g, 77.59 mmol)을 테트라하이드로푸란(THF) 400 mL로 녹인 후, -78°C에서 n-BuLi (2.5 M)을 천천히 적가하였다. 혼합물을 1시간 동안 교반한 후 트리이소프로필 보레이트를 적가하였다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 회전증발하여 화합물 1-1 (15.5 g, 70%)을 얻었다.

화합물 1-2의 합성

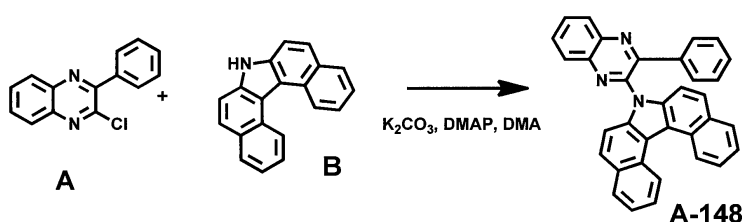
플라스크 안에서 화합물 1-1 (15.5 g, 53.98 mmol), 2,4-디클로로퀴나졸린 (10.7 g, 53.98 mmol) 및 Pd(PPh₃)₄ (1.9 g, 1.62 mmol)을 2 M Na₂CO₃ 67 mL, 톨루엔 270 mL 및 에탄올 67 mL의 혼합 용매로 녹인 후, 120°C에서 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-2 (13.5 g, 61%)을 얻었다.

화합물 A-92의 합성

플라스크 안에서 화합물 1-2 (13.5 g, 33.26 mmol), 7H-디벤조[c,g]카바졸 (8.1 g, 30.24 mmol)을 N,N-디메틸포름아미드(DMF) 500 mL로 녹이고, 혼합물에 NaH (1.8 g, 45.36 mmol, 미네랄 오일 내에서 60%)을 넣었다. 혼합물을 3시간 동안 상온에서 교반하고 메탄올과 증류수를 넣었다. 생성된 고체를 감압 여과하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 A-92 (11 g, 55%)을 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
A-92	636.74	408 nm	545 nm	263 °C

[실시예 2] 화합물 A-148의 제조

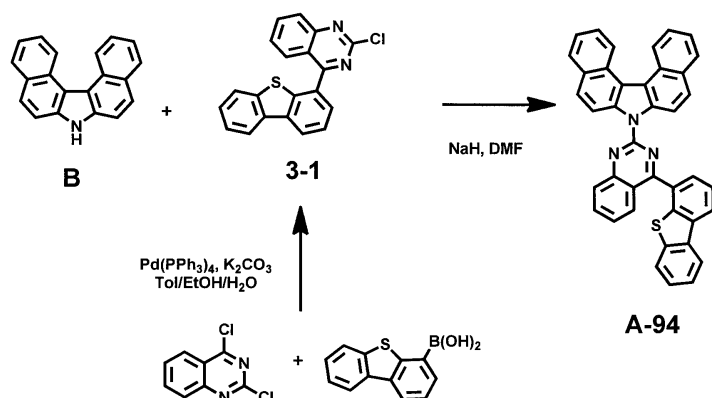


화합물 A-148의 합성

플라스크 안에서 화합물 A (11 g, 44.89 mmol), 7H-디벤조[c,g]카바졸 (10 g, 37.40 mmol), K₂CO₃ (5.1 g, 37.40 mmol) 및 디메틸아미노피리딘(DMAP) (2.2 g, 18.70 mmol)을 N,N-디메틸아세트아미드(DMA) 200 mL로 녹인 후 220°C에서 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 A-148 (3.2 g, 18%)을 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
A-148	471.55	413 nm	539 nm	255.6 °C

[실시예 3] 화합물 A-94의 제조



화합물 3-1의 합성

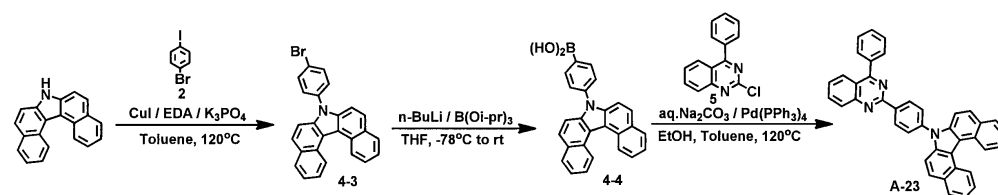
플라스크 안에서 2,4-클로로퀴나졸린 (70 g, 306.9 mmol), 디벤조티오펜-4-일 보론산 (61 g, 306.9 mmol) 및 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (17.7 g, 15.34 mmol)을 2 M K_2CO_3 수용액 300 mL, 톨루엔 1000 mL 및 에탄올 300 mL의 혼합 용매로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 3-1 (77.7 g, 73%)을 얻었다.

화합물 A-94의 합성

플라스크 안에서 화합물 B (7H-디벤조[c,g]카바졸) (10 g, 37.4 mmol) 및 화합물 3-1 (14.3 g, 41.15 mmol)을 DMF 200 mL로 녹이고, 혼합물에 NaH (1.8 g, 44.88 mmol, 미네랄 오일 내에서 60%)을 넣었다. 혼합물을 150℃에서 4시간 교반하고 메탄올과 증류수를 넣었다. 생성된 고체를 감압 여과하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 A-94 (13.3 g, 56%)을 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
A-94	577.7	418 nm	577 nm	272.3℃

[실시예 4] 화합물 A-23의 제조



화합물 4-3의 합성

반응용기에 7H-디벤조[c,g]카바졸 (10 g, 37.41 mmol), 1-브로모-4-아이오도벤젠(21 g, 74.82 mmol), 구리(I) 요오드화물 (3.6 g, 18.71 mmol), 인산칼륨 (20 g, 93.53 mmol), 에틸렌디아민 (2.5 mL, 37.41 mmol) 및 톨루엔 200 mL를 첨가한 후 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면, 혼합물을 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 4-3 (11.4 g, 72%)을 얻었다.

화합물 4-4의 합성

반응용기에 화합물 4-3 (11.4 g, 26.99 mmol) 및 테트라하이드로푸란 210 mL을 넣고, 질소 조건을 만든 뒤 -78℃로 온도를 내렸다. 여기에 n부틸 리튬 (16 mL, 2.5 M, 40.49 mmol)을 천천히 적가하였다. 1 시간 동안 -78℃에서 교반한 후, 트리이소프로필 보레이트 (9.3 mL, 40.49 mmol)을 천천히 적가하였다. 반응이 끝난 후 혼합물에 염화암모늄 수용액을 첨가하였다. 이후, 혼합물을 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시키고 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 4-4

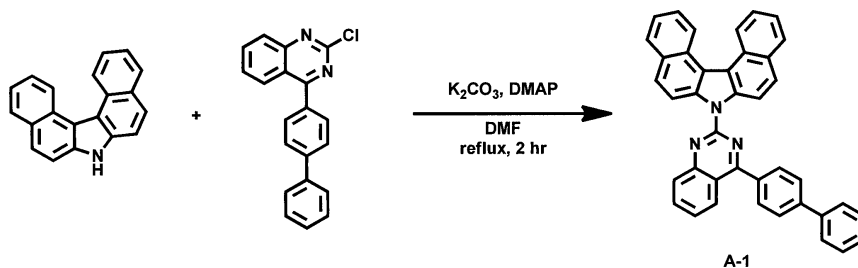
(8.3 g, 79%)를 얻었다.

[0204] 화합물 A-23의 합성

[0205] 반응용기에 화합물 4-4 (8.3 g, 21.43 mmol), 2-클로로-4-페닐퀴나졸린 (4.3 g, 17.86 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 (0.6 g, 0.54 mmol) 및 탄산나트륨 (4.7 g, 44.65 mmol)에 톨루엔 90 mL, 에탄올 22 mL 및 증류수 22 mL의 혼합 용매를 첨가한 후 120℃에서 5시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면, 혼합물을 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 A-23 (4.5 g, 46%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
A-23	547.65	390 nm	437 nm	232℃

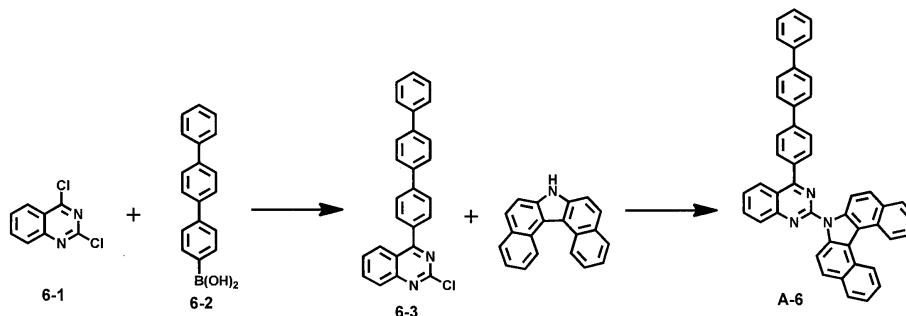
[0207] [실시예 5] 화합물 A-1의 제조



[0209] 7H-디벤조[c,g]카바졸 (5.00 g, 18.70 mmol), 4-([1,1'-비페닐]-4-일)-2-클로로퀴나졸린 (7.11 g, 22.45 mmol), K₂CO₃ (2.58 g, 18.70 mmol) 및 DMAP (1.14 g, 9.35 mmol)을 DMF 100 mL에 넣고 2시간 환류교반시켰다. 혼합물을 상온으로 냉각시키고 MeOH 400 mL에 역적가한 뒤 감압여과하여 황토색의 고체를 얻었다. 이 고체를 CHCl₃ 140 mL에 온도를 가하여 용해한 뒤 실리카로 여과하였다. 감압증류한 뒤 메탄올을 넣어 고체화한 후 감압여과를 통해 레몬색의 고체를 얻었다. 이 고체를 DMF로 재결정하여 화합물 A-1 (4.8 g, 46.9%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
A-1	547.65	431 nm	558 nm	231℃

[0211] [실시예 6] 화합물 A-6의 제조



[0213] 화합물 6-3의 합성

[0214] 플라스크 안에서 화합물 6-1 (9.4 g, 47.42 mmol), 화합물 6-2 (13 g, 47.42 mmol) 및 Pd(PPh₃)₄ (1.6 g, 1.422 mmol)을 2 M Na₂CO₃ 수용액 120 mL, 톨루엔 250 mL 및 에탄올 120 mL의 혼합 용매로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 6-3 (7.5 g, 42%)를 얻었다.

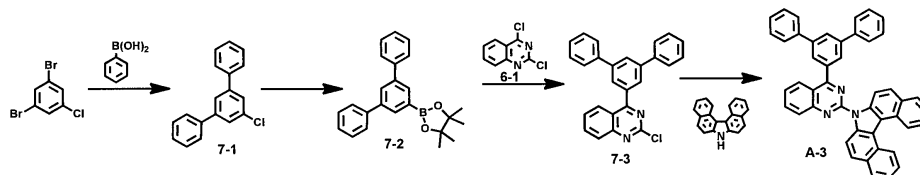
[0215] 화합물 A-6의 합성

[0216] 플라스크 안에서 화합물 6-3 (7.5 g, 19.80 mmol), 7H-디벤조[c,g]카바졸 (4.3 g, 15.90 mmol), K₂CO₃ (2.2 g,

15.90 mmol) 및 DMAP (0.9 g, 7.950 mmol)을 DMA 100 mL로 녹인 후 220℃에서 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 A-6 (5.8 g, 58%)을 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
A-6	623.73	354 nm	557 nm	269.3℃

[실시예 7] 화합물 A-3의 제조



화합물 7-1의 합성

플라스크 안에서 1,3-디브로모-5-클로로벤젠 (20 g, 73.98 mmol), 페닐보론산 (22 g, 177.55 mmol) 및 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (4.3 g, 3.699 mmol)을 2 M K_3PO_4 수용액 100 mL, 톨루엔 400 mL 및 1,4-디옥산 100 mL의 혼합 용매로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 7-1 (23 g, 70%)을 얻었다.

화합물 7-2의 합성

플라스크 안에서 화합물 7-1 (11 g, 44.89 mmol), 디보란 (33 g, 130.31 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.4 g, 2.606 mmol), 에스-포스 (3.6 g, 8.687 mmol) 및 KOAc (21.3 g, 217.17 mmol)을 1,4-디옥산 500 mL로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 7-2 (20 g, 67%)을 얻었다.

화합물 7-3의 합성

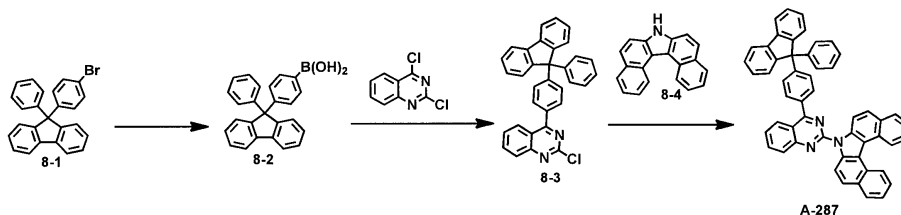
플라스크 안에서 화합물 6-1 (5.6 g, 28.06 mmol), 화합물 7-2 (10 g, 28.06 mmol) 및 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (1.6 g, 1.403 mmol)을 2 M Na_2CO_3 수용액 75 mL 및 톨루엔 150 mL의 혼합 용매로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 7-3 (10 g, 91%)을 얻었다.

화합물 A-3의 합성

플라스크 안에서 화합물 7-3 (7.5 g, 19.30 mmol), 7H-디벤조[c,g]카바졸 (4.3 g, 16.08 mmol), K_2CO_3 (2.2 g, 1.608 mmol) 및 DMAP (0.9 g, 1.608 mmol)을 DMA 100 mL로 녹인 후 220℃에서 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 A-3 (5.3 g, 54%)을 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
A-3	623.73	344 nm	560 nm	244.8℃

[실시예 8] 화합물 A-287의 제조



화합물 8-2의 합성

반응용기에 화합물 8-1 (20 g, 50.34 mmol) 및 테트라하이드로푸란 250 mL를 넣고, -78℃에서 노르말 부틸 리튬 (30 mL, 75.51 mmol)을 천천히 적가하였다. 1시간 동안 교반한 후, 트라이소프로필 보레이트 (8.5 mL, 75.51 mmol)을 적가하였다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 회전 증발기로 용매를 제거하여 화합물 8-2 (12.8 g, 70%)을 얻었다.

화합물 8-3의 합성

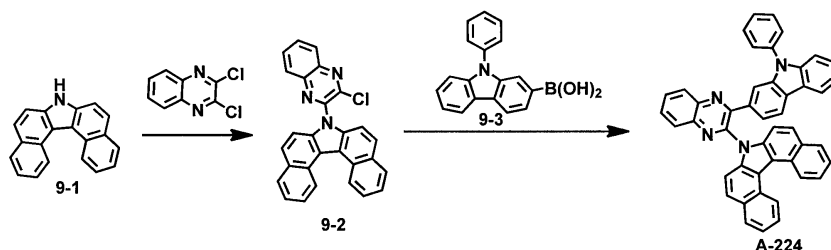
반응용기에 화합물 8-2 (10 g, 27.61 mmol), 2,4-디클로로퀴나졸린 (5.5 g, 27.61 mmol), 테트라키스(트리페닐 포스핀)팔라듐 (1 g, 0.83 mmol) 및 탄산나트륨 (7.3 g, 69.03 mmol)에 톨루엔 160 mL, 에탄올 40 mL 및 증류수 40 mL의 혼합 용매를 첨가한 후 120℃에서 4시간 교반하였다. 반응이 끝나면, 혼합물을 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 8-3 (9.3 g, 70%)를 얻었다.

화합물 A-287의 합성

반응용기에 화합물 8-3 (9.3 g, 19.34 mmol), 화합물 8-4 (4.3 g, 16.11 mmol), 탄산칼륨 (2.2 g, 16.11 mmol), N,N-4-디메틸아미노피리딘 (1.0 g, 8.06 mmol) 및 N,N-디메틸포름아미드 81 mL를 넣은 후, 100℃에서 4시간 교반하였다. 반응이 끝나면, 혼합물을 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 A-287 (6 g, 52%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
A-287	711.85	374 nm	592 nm	351℃

[실시예 9] 화합물 A-224의 제조



화합물 9-2의 합성

반응용기에 화합물 9-1 (11.5 g, 43.02 mmol) 및 DMF 220 mL를 넣고, 0℃에서 수소화나트륨 (2.6 g, 64.53 mmol)을 천천히 적가하였다. 30분 동안 교반한 후, 2,3-디클로로퀴놀린 (10.3 g, 51.62 mmol)을 적가하였다. 3시간 동안 상온에서 교반하고 혼합물에 메탄올과 증류수를 넣었다. 생성된 고체를 감압 여과하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 9-2 (12.4 g, 67%)를 얻었다.

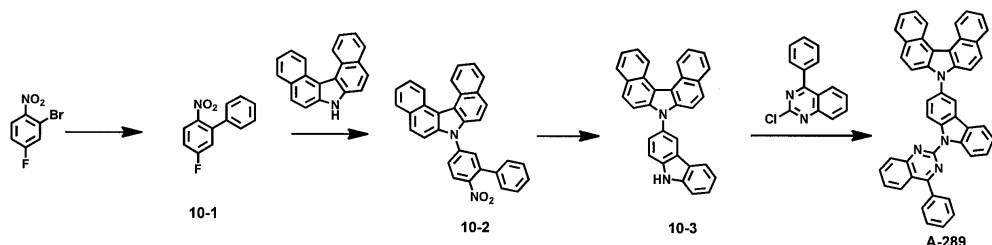
화합물 A-224의 합성

반응용기에 화합물 9-2 (12.4 g, 28.84 mmol), 화합물 9-3 (10 g, 34.61 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 (1 g, 0.87 mmol) 및 탄산나트륨 (7.6 g, 72.10 mmol)에 톨루엔 160 mL, 에탄올 40 mL 및 증류수 40 mL의 혼합 용매를 첨가한 후 120℃에서 4시간 교반하였다. 반응이 끝나면, 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추

출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 A-224 (5 g, 27%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
A-224	636.78	332 nm	597 nm	293℃

[실시예 10] 화합물 A-289의 제조



화합물 10-1의 합성

2-브로모-4-플루오로-1-니트로벤젠 (50 g, 227.3 mmol), 페닐보론산 (30.5 g, 250 mmol), Pd(PPh₃)₄ (13.1 g, 11.37 mmol), K₂CO₃ (62.8 g, 454.6 mmol), 톨루엔 600 mL, EtOH 200 mL 및 정제수 200 mL를 반응용기에 넣고 교반하였다. 6시간 동안 환류 교반하고, 상온으로 냉각한 후, 에틸아세테이트(EA)와 증류수로 추출하였다. 유기층을 감압증류하고, 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 10-1 (49 g, 99%)을 얻었다.

화합물 10-2의 합성

7H-디벤조[c,g]카바졸 (34.5 g, 128.9 mmol), 화합물 10-1 (28 g, 128.9 mmol), NaH (6.7 g, 167.6 mmol) 및 DMF 600 mL를 반응용기에 넣고 75℃에서 2시간 동안 교반하였다. 상온으로 냉각한 후, 혼합물에 MeOH 1 L 및 정제수를 넣고 고체를 여과하였다. 감압 건조하여 화합물 10-2 (52 g, 86.8%)을 얻었다.

화합물 10-3의 합성

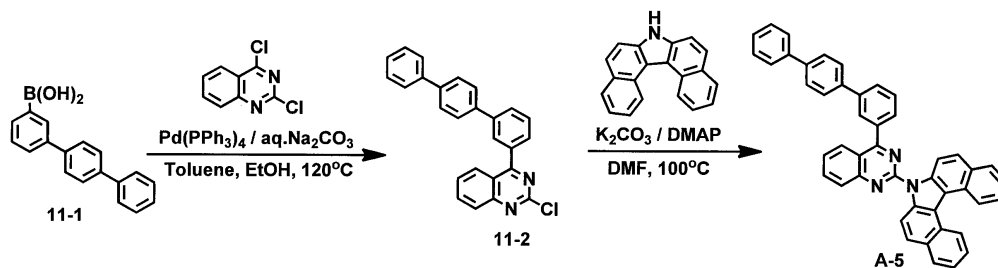
화합물 10-2 (52 g, 111.9 mmol), PPh₃ (88 g, 335.8 mmol) 및 1,2-디클로로벤젠 500 mL를 반응용기에 넣고 교반하였다. 6시간 동안 환류 교반하고, 1,2-디클로로벤젠을 증류한 후, 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 10-3 (39 g, 75.9%)을 얻었다.

화합물 A-289의 합성

화합물 10-3 (10 g, 23.12 mmol), 2-클로로-4-페닐퀴나졸린 (6.1 g, 25.43 mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (1.4 g, 11.56 mmol), K₂CO₃ (3.2 g, 23.12 mmol) 및 DMF 100 mL를 반응용기에 넣고 교반하였다. 3시간 동안 환류 교반하고, 상온으로 냉각하였다. 혼합물에 MeOH 200 mL 및 정제수를 넣고 고체를 여과하였다. 건조된 고체를 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 A-289 (5.5 g, 37.4%)을 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
A-289	636.74	400 nm	491 nm	268℃

[실시예 11] 화합물 A-5의 제조



[0258] 화합물 11-2의 합성

[0259] 반응용기에 화합물 11-1 (7.6 g, 27.61 mmol), 2,4-디클로로퀴나졸린 (5.5 g, 27.61 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 (1 g, 0.83 mmol), 탄산나트륨 (7.3 g, 69.03 mmol), 톨루엔 160 mL 및 에탄올 40 mL를 넣고, 증류수 40 mL를 첨가한 후 120℃에서 4시간 교반하였다. 반응이 끝나면, 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 11-2 (9.3 g, 86%)를 얻었다.

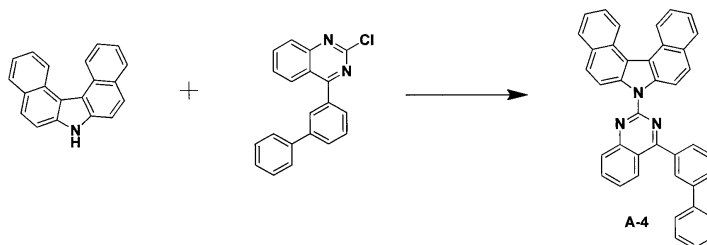
[0260] 화합물 A-5의 합성

[0261] 화합물 11-2 (2.6 g, 6.62 mmol), 7H-디벤조[c,g]카바졸 (1.7 g, 6.30 mmol), 탄산칼륨 (0.9 g, 6.30 mmol) 및 N,N-4-디메틸아미노피리딘 (0.4 g, 3.15 mmol)에 N,N-디메틸포름아미드 32 mL를 넣은 후, 100℃에서 4시간 교반하였다. 반응이 끝나면, 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 A-5 (1.6 g, 41%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
A-5	623.74	392 nm	557 nm	198℃

[0262]

[0263] [실시예 12] 화합물 A-4의 제조



[0264]

[0265] 7H-디벤조[c,g]카바졸 (5.00 g, 18.70 mmol), 4-(비페닐-3-일)-2-클로로퀴나졸린 (7.11 g, 22.45 mmol), K₂CO₃ (2.58 g, 18.70 mmol) 및 DMAP (1.14 g, 9.35 mmol)을 DMF 100 mL에 넣고 2시간 환류 교반하였다. 혼합물을 상온으로 냉각시키고 MeOH 400 mL에 역적가한 뒤 감압여과하여 황토색의 고체를 얻었다. 건조된 고체는 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 A-4 (7.2 g, 70%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
A-4	547.65	395 nm	523 nm	180℃

[0266]

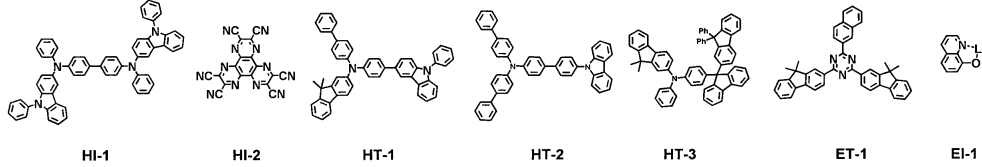
[0267] [소자 제조예 1] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조

[0268] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조)로부터 얻어진 투명 전극 ITO 박막(10Ω/□)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기관홀더에 ITO 기관을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 제1 정공주입층으로 화합물 HI-1을 넣고 챔버 내의 진공도가 10⁻⁶ torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기관 위에 80 nm 두께의 제1 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 제2 정공주입층으로 화합물 HI-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공주입층 위에 5 nm 두께의 제2 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 제1 정공전달층으로 화합물 HT-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공주입층 위에 10 nm 두께의 제1 정공전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 제2 정공전달층으로 화합물 HT-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공전달층 위에 60 nm 두께의 제2 정공전달층을 증착하였다. 정공주입층, 정공전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 호스트로서 화합물 A-14를 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-96을 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 도판트와 호스트 전체에 대하여 도판트를 3 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ET-1과 화합물 EI-1을 1:1의 속도로 증발시켜 각각 50 중량%의 양으로 상기 발광층 위에 30 nm 두께의 전자전달층을 증착하였다. 이어서, 전자주입층으로 화합물 EI-1을 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하

였다. 재료 별로 각 화합물은 10^{-6} torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0269]

그 결과, 5.0 V의 전압에서 26.5 cd/A의 효율이 나왔으며, 1800 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 178시간 이상이었다.



[0270]

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

[0271]

발광 재료로서 호스트에 화합물 A-94를 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0272]

[0273]

그 결과, 6.0 V의 전압에서 25.5 cd/A의 효율이 나왔으며, 1750 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 153시간 이상이었다.

[0274]

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

[0275]

발광 재료로서 호스트에 화합물 A-92를 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0276]

그 결과, 4.6 V의 전압에서 25.8 cd/A의 효율이 나왔으며, 1850 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 170시간 이상이었다.

[0277]

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

[0278]

발광 재료로서 호스트에 화합물 A-148을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0279]

그 결과, 5.4 V의 전압에서 28.6 cd/A의 효율이 나왔으며, 1900 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 68시간 이상이었다.

[0281]

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

[0282]

발광 재료로서 호스트에 화합물 A-6을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0283]

그 결과, 5.0 V의 전압에서 27.5 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 170시간 이상이었다.

[0284]

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

[0285]

발광 재료로서 호스트에 화합물 A-3을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0286]

그 결과, 4.1 V의 전압에서 26.3 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 236시간 이상이었다.

- [0287] **[소자 제조예 7] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**
- [0288] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-287을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.
- [0289] 그 결과, 5.1 V의 전압에서 26.4 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m²의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 66시간 이상이었다.
- [0290] **[소자 제조예 8] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**
- [0291] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-224를 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.
- [0292] 그 결과, 4.2 V의 전압에서 28.4 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m²의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 74시간 이상이었다.
- [0293] **[소자 제조예 9] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**
- [0294] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-289를 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.
- [0295] 그 결과, 4.1 V의 전압에서 28.9 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m²의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 53시간 이상이었다.
- [0296] **[소자 제조예 10] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**
- [0297] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-5를 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.
- [0298] 그 결과, 4.9 V의 전압에서 30.3 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m²의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 306시간 이상이었다.
- [0299] **[소자 실시예 11] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**
- [0300] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-4 를 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.
- [0301] 그 결과, 4.4 V의 전압에서 29.9 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m²의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 300시간 이상이었다.
- [0302] **[소자 실시예 12] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**
- [0303] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-303을 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.
- [0304] 그 결과, 4.6 V의 전압에서 29.4 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000cd/m²의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 323시간 이상이었다.
- [0305] **[소자 실시예 13] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**
- [0306] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-304를 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자

제조에 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0307] 그 결과, 5.1 V의 전압에서 29.4 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 320시간 이상이었다.

[0308] **[소자 실시예 14] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**

[0309] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-305를 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0310] 그 결과, 3.9 V의 전압에서 28.5 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 172시간 이상이었다.

[0311] **[소자 실시예 15] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**

[0312] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-306을 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0313] 그 결과, 4.5 V의 전압에서 30.5 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 294시간 이상이었다.

[0314] **[소자 실시예 16] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**

[0315] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-307을 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0316] 그 결과, 4.2 V의 전압에서 29.0 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 319시간 이상이었다.

[0317] **[소자 실시예 17] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**

[0318] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-7을 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0319] 그 결과, 4.5 V의 전압에서 29.8 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 328시간 이상이었다.

[0320] **[소자 실시예 18] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**

[0321] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-308을 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0322] 그 결과, 4.9 V의 전압에서 29.9 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 93시간 이상이었다.

[0323] **[소자 실시예 19] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**

[0324] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-309를 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0325] 그 결과, 5.3 V의 전압에서 29.8 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m^2 의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘

도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 52시간 이상이였다.

[0326] [소자 실시예 20] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조

[0327] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-290을 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0328] 그 결과, 4.0 V의 전압에서 30.7 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m²의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 99시간 이상이였다.

[0329] [소자 실시예 21] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조

[0330] 발광 재료로서 호스트에 화합물 A-310을 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0331] 그 결과, 4.4 V의 전압에서 29.6 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m²의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 51시간 이상이였다.

[0332] [비교예 1] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조

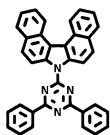
[0333] 발광 재료로서 호스트에 4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐을 사용하고, 제2 정공전달층으로 화합물 HT-3을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.

[0334] 그 결과, 10 V의 전압에서 14.3 cd/A의 효율이 나왔으며, 1000 cd/m²의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 1시간 미만이었다.

[0335] [비교예 2] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조

[0336] 발광 재료로서 호스트에 하기 화합물을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

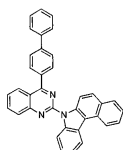
[0337] 그 결과, 4.6 V의 전압에서 24.1 cd/A의 효율이 나왔으며, 1500 cd/m²의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 25시간 미만이었다.



[0338] [비교예 3] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조

[0340] 발광 재료로서 호스트에 하기 화합물을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0341] 그 결과, 4.6 V의 전압에서 24.5 cd/A의 효율이 나왔으며, 1500 cd/m²의 적색발광이 확인되었다. 5000 nit의 휘도에서 발광이 95%로 떨어지는데 걸린 시간은 39시간 미만이었다.



[0343]

본원 발명의 화합물과 유사한 구조를 갖는 화합물을 인광 레드 호스트 재료로 사용한 결과, 본원 발명의 화합물들이 비교 화합물들보다 우수한 효율과 수명 성능을 갖는다는 것을 확인하였다. 그 원인으로서는 본원 발명 화합물의 구조가 비교 화합물들보다 인광 레드 호스트 재료에 적합한 HOMO (highest occupied molecular orbital) 에너지 준위 및 LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) 에너지 준위를 갖는다는 것을 계산을 통하여도 확인할 수 있었다.

[0344]

본원 발명의 유기 전계 발광 화합물들은 발광 효율이 종래의 유기 전계 발광 화합물과 대비하여 우수하며, 구동 수명이 길다는 것을 확인할 수 있었다. 또한, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 사용한 소자는 종래의 유기 전계 발광 화합물을 사용한 소자와 대비하여 고휘도에서도 발광 효율을 유지하는 특성이 있어 높은 해상도를 요구하고 있는 시장 트렌드에 더 적합하다는 장점이 있다.

专利名称(译)	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	KR1020150135109A	公开(公告)日	2015-12-02
申请号	KR1020150069705	申请日	2015-05-19
[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 HONG JIN RI 홍진리 MOON DOO HYEON 문두현 LIM YOUNG MOOK 임영묵 KIM BITNARI 김빛나리 KIM NAM KYUN 김남균 LEE MI JA 이미자		
发明人	강희룡 강현주 홍진리 문두현 임영묵 김빛나리 김남균 이미자		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 C07D403/04 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 C07D403/04 H01L51/50 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C07D403/10 C07D403/14 C07D405/14 C07D409/14 C07D487/04 C07D491/048 C07D495/04 C09K11/02 C09K2211 /1007 C09K2211/1011 C09K2211/1088 C09K2211/1092 H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/0074 H01L51/0085 H01L51/5016 H01L51/0052		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020140062390 2014-05-23 KR 1020140117773 2014-09-04 KR 1020140136149 2014-10-08 KR		
其他公开文献	KR101884173B1		
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。
当使用根据本发明的有机电致发光化合物时，产生有机电致发光器件，
其具有显著改善的驱动寿命以及具有低驱动电压，以及优异的电流效率和功率效率。

