



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호

10-2015-0141147

(43) 공개일자

2015년12월17일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01)

C07D 401/04 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C09K 11/06 (2013.01)

C07D 209/82 (2013.01)

(21) 출원번호

10-2015-0080294

(22) 출원일자

2015년06월08일

심사청구일자

없음

(30) 우선권주장

1020140069488 2014년06월09일 대한민국(KR)

(71) 출원인

룸엔드하스전자재료코리아유한회사

충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)

(72) 발명자

이수현

경기도 수원시 장안구 수일로 205 105동 1102호

김치식

경기도 화성시 동탄반석로 71 솔빛마을쌍용예가아파트 441동 1201호

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

장훈

전체 청구항 수 : 총 8 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 수명 특성이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

(52) CPC특허분류

C07D 401/04 (2013.01)
C07D 403/04 (2013.01)
C07D 403/14 (2013.01)
C07D 405/14 (2013.01)
C07D 409/14 (2013.01)
H01L 51/50 (2013.01)
C09K 2211/1029 (2013.01)
C09K 2211/1044 (2013.01)

(72) 발명자

전지송

경기도 수원시 영통구 덕영대로1483번길 97(신동)

박경진

경기도 성남시 중원구 원터로 31

도유진

경기도 과천시 별양로 85 주공아파트 408동 204호

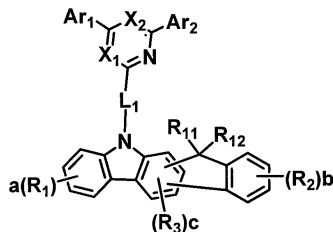
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 CH 또는 N이고;

L_1 은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이며;

Ar_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이고;

Ar_2 는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고;

단, Ar_1 과 Ar_2 는 서로 다르며;

R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬 (C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

R_3 은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며;

R_{11} 및 R_{12} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나; 서로 연결되어 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

a 및 b 는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 또는 b 가 2 이상인 경우 각각의 R_1 및 각각의 R_2 는 동일하거나 상이할 수 있으며;

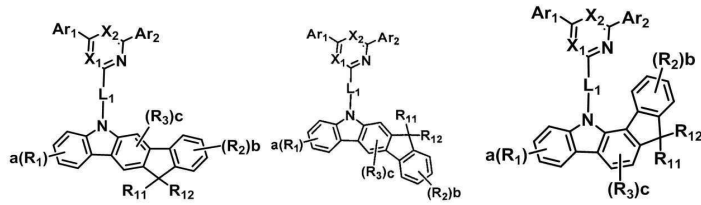
c 는 1 내지 2의 정수이고, c 가 2인 경우 각각의 R_3 는 동일하거나 상이할 수 있고;

상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

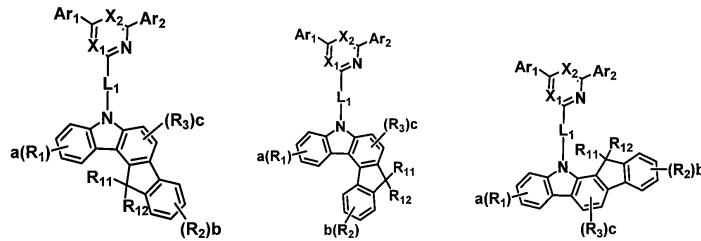
청구항 2

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 7 중 하나로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 2] [화학식 3] [화학식 4]



[화학식 5] [화학식 6] [화학식 7]



상기 화학식 2 내지 7에서,

X_1 , X_2 , L_1 , Ar_1 , Ar_2 , R_1 내지 R_3 , R_{11} , R_{12} , a , b 및 c 는 청구항 1에서의 정의와 동일하다.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 L_1 , Ar_1 , Ar_2 , R_1 내지 R_3 , R_{11} 및 R_{12} 에서 치환 (C1-C30)알킬, 치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 (C6-C30)아릴(렌), 치환 (5-30 원)헤테로아릴(렌), 치환 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 치환 (C1-C30)알콕시, 치환 (C1-C30)알킬실릴, 치환 (C6-C30)아릴실릴, 치환 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬실릴, 치환 (C1-C30)알킬아미노, 치환 (C6-C30)아릴아미노 및 치환 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노의 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, (3-7 원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30원)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, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 CH 또는 N이고;

L_1 은 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌이며;

Ar_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이고;

Ar_2 는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고;

단, Ar_1 과 Ar_2 는 서로 다르며;

R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로

아릴이고;

R₃은 수소이며;

R₁₁ 및 R₁₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C6)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴이거나; 서로 연결되어 (C3-C15) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있는, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

X₁ 및 X₂는 각각 독립적으로 CH 또는 N이고;

L₁은 단일 결합, 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌이며;

Ar₁은 시아노, (C1-C6)알킬, (C6-C12)아릴 또는 (5-15원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이고;

Ar₂는 시아노, (C1-C6)알킬, (C6-C12)아릴 또는 (5-15원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴; 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고;

단, Ar₁과 Ar₂는 서로 다르며;

R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 수소, 비치환된 (C6-C12)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고;

R₃은 수소이며;

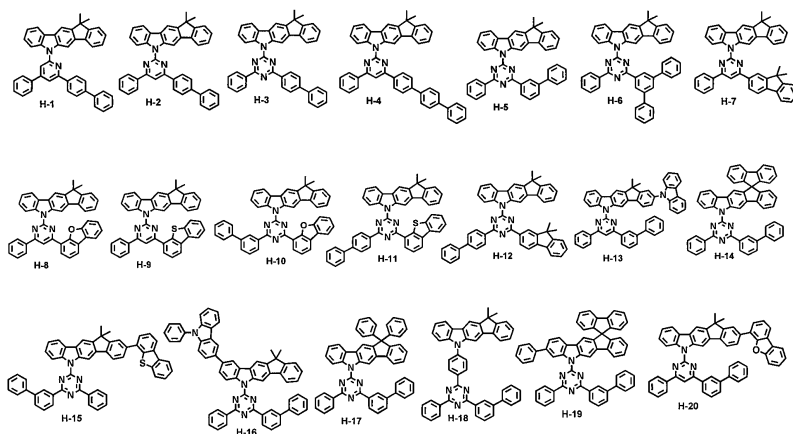
R₁₁ 및 R₁₂는 각각 독립적으로 비치환된 (C1-C6)알킬, 또는 비치환된 (C6-C12)아릴이거나; 서로 연결되어 (C3-C15) 단일환 또는 다환의 방향족 환을 형성할 수 있는, 유기 전계 발광 화합물.

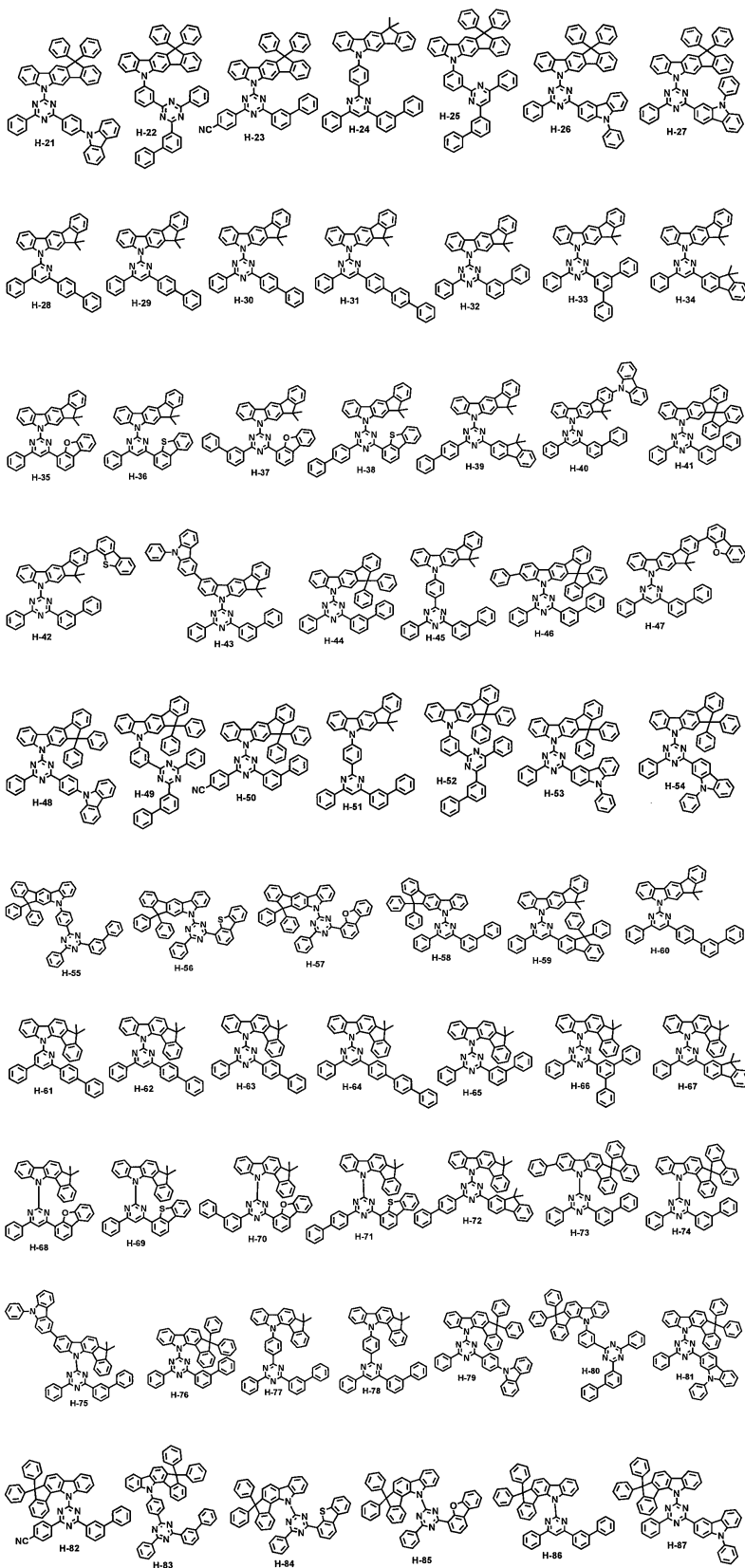
청구항 6

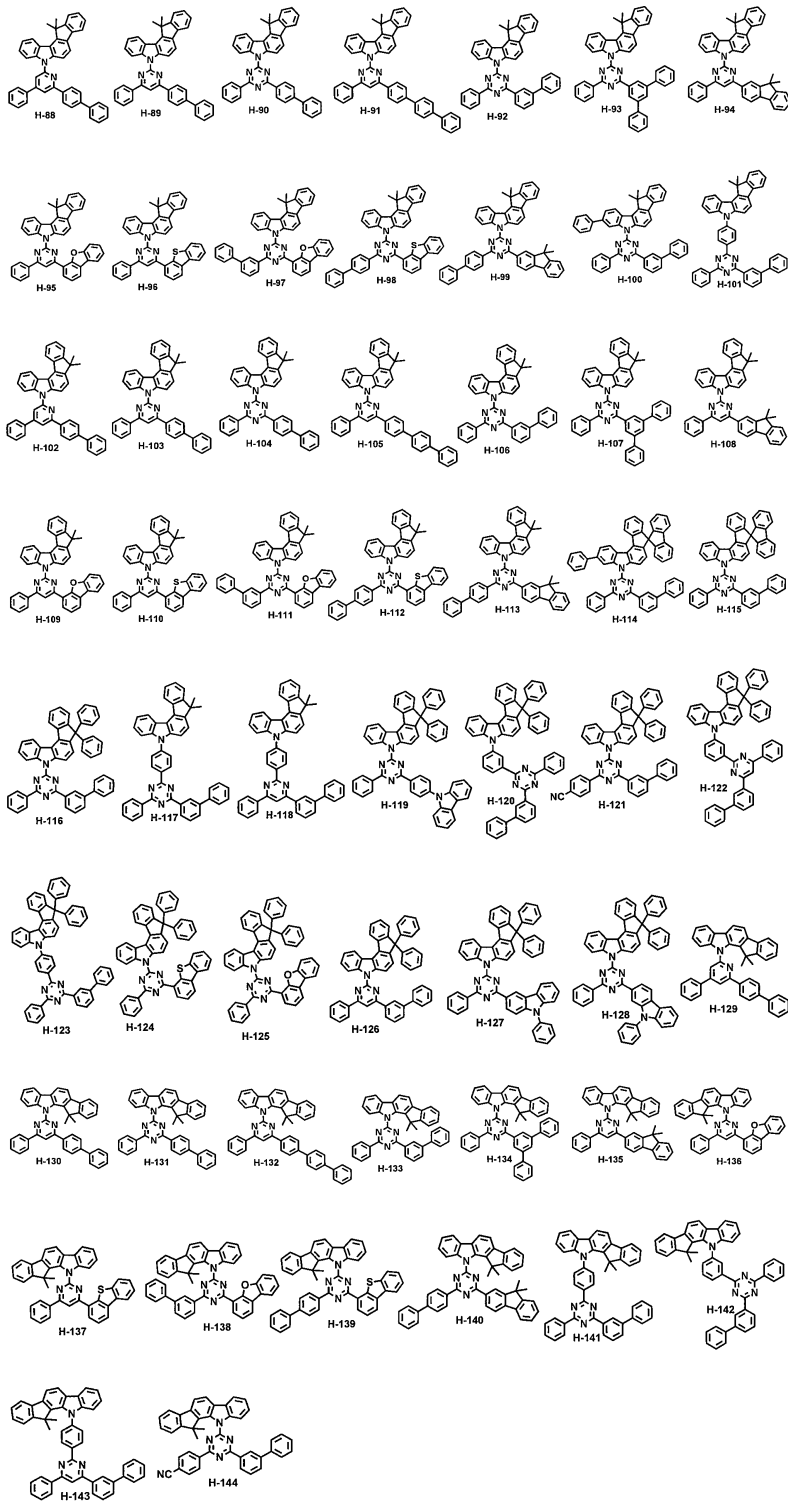
제1항에 있어서, 상기 Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 테페닐, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란, 치환 또는 비치환된 카바졸, 또는 치환 또는 비치환된 플루오렌인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 7

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







청구항 8

제1항의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

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

[0001]

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 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'-디카르바졸-비페닐(CBP)가 가장 널리 알려져 있었다. 최근에는, 일본의 파이오니아 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 이동성이 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] 한국 특허공개공보 제2010-0130197호는 인텐이 융합된 카바졸의 질소 위치에 트리아진 등의 질소 함유 헤테로아릴기가 결합된 화합물을 유기 전계 발광 소자용 화합물로 개시하고 있다. 그러나, 상기 문헌들에 개시된 유기 전계 발광 소자는 수명 특성이 만족스럽지 못하다.

선행기술문헌

특허문헌

- [0010] (특허문헌 0001) 한국 특허공개공보 제2010-0130197호 (2010. 12. 10 발행)

발명의 내용

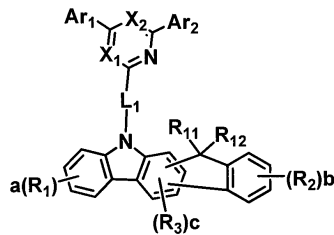
해결하려는 과제

[0011] 본 발명의 목적은, 첫째로 수명 특성이 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] X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 CH 또는 N이고;

[0017] L_1 은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이며;

[0018] Ar_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이고;

[0019] Ar_2 는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고;

[0020] 단, Ar_1 과 Ar_2 는 서로 다르며;

[0021] R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬 (C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

[0022] R_3 은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며;

[0023] R_{11} 및 R_{12} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나; 서로 연결되어 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

[0024] a 및 b 는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 또는 b 가 2 이상인 경우 각각의 R_1 및 각각의 R_2 는 동일하거나 상이할 수 있으며;

[0025] c 는 1 내지 2의 정수이고, c 가 2인 경우 각각의 R_3 는 동일하거나 상이할 수 있고;

[0026] 상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

발명의 효과

[0027] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 수명 특성이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0028] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.

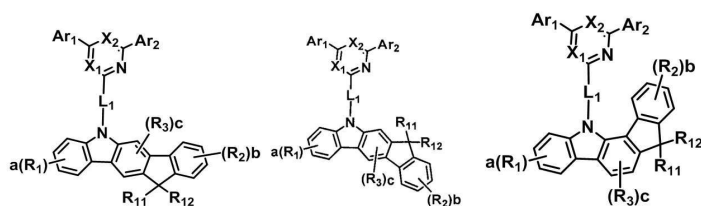
[0029] 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물, 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

[0030] 일반적으로, 유기 전계 발광 소자의 열안정성을 증가시키기 위하여 발광 재료에 사용되는 호스트 화합물의 Tg (유리전이온도)를 올릴 수 있다. Tg를 올리기 위한 방법으로 호스트 화합물에 여러 가지 치환기를 도입할 수 있다. 그렇지만 치환기를 과도하게 도입하면 호스트 화합물의 증착 온도가 너무 높아지게 되고, 증착 과정에서 재료가 분해되거나 손상된다. 즉, 치환기를 적절하게 도입하여 적절한 Tg를 확보하고, 분자량을 조절하여 낮은 증착 온도를 유지해야 한다. 이에, 본원 발명은 LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) 에너지 준위를 결정하는 질소-포함 헤테로환에 두 개의 치환기를 비대칭으로 결합시켜 이러한 문제점을 해결하였다. 즉, 치환기로서 분자량이 작은 페닐을 대칭으로 도입하면 열안정성은 확보가 되지만 소자 특성이 떨어지는 단점이 있다. 그래서 페닐보다 분자량이 큰 아릴 또는 헤테로아릴을 대칭으로 결합시켜 소자 특성을 향상시키고자 하였지만 열안정성에 문제가 생겼다. 따라서, 소자 특성과 열안정성을 동시에 개선하기 위해 질소-포함 헤테로환에 비대칭으로 치환기를 결합시켜 결정성이 줄어들어 소자 특성이 향상되었고 분자량도 작아서 열안정성도 개선되었다.

[0031] 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

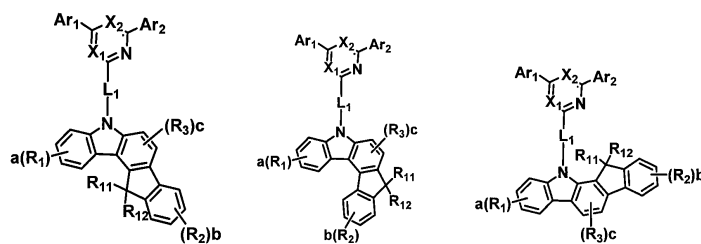
[0032] 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 2 내지 7 중 하나로 표시될 수 있다.

[0033] [화학식 2] [화학식 3] [화학식 4]



[0034]

[0035] [화학식 5] [화학식 6] [화학식 7]



[0036]

[0037] 상기 화학식 2 내지 7에서,

[0038] X₁, X₂, L₁, Ar₁, Ar₂, R₁ 내지 R₃, R₁₁, R₁₂, a, b 및 c는 화학식 1에서 정의된 것과 같다.

[0039] 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 알킬닐의 예로서, 에틸닐, 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, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 O, S 및 N에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라하이드로푸란, 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 "(5-30원)헤테로아릴(렌)"은 환 골격 원자수가 5 내지 30개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴(렌)은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 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, 폐녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로젠"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0040]

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_1 , Ar_1 , Ar_2 , R_1 내지 R_3 , R_{11} 및 R_{12} 에서 치환 (C1-C30)알킬, 치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 (C6-C30)아릴(렌), 치환 (5-30 원)헤테로아릴(렌), 치환 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 치환 (C1-C30)알콕시, 치환 (C1-C30)알킬실릴, 치환 (C6-C30)아릴실릴, 치환 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬실릴, 치환 (C1-C30)알킬아미노, 치환 (C6-C30)아릴아미노 및 치환 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노의 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 (5-30원)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 시아노, (C1-C6)알킬, (C6-C12)아릴 및 (5-15원)헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인 것이 바람직하다.

[0041]

상기 화학식 1에서, X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 CH 또는 N이다.

[0042]

상기 L_1 은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고, 바람직하게는 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌이며, 더욱 바람직하게는 단일 결합, 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌이다.

[0043]

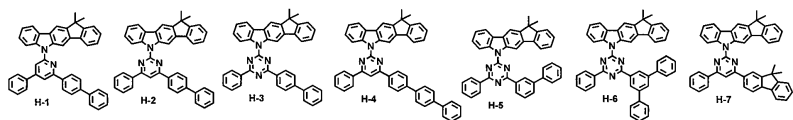
상기 Ar_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이고, 바람직하게는 시아노, (C1-C6)알킬, (C6-C12)아릴 또는 (5-15원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이다.

[0044]

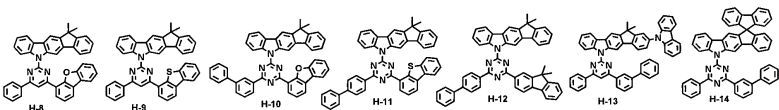
상기 Ar_2 는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고, 바람직하게는 시아노, (C1-C6)알킬, (C6-C12)아릴 또는 (5-15원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴; 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이다.

- [0045] 본원 발명의 일양태에서 상기 Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 터페닐, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란, 치환 또는 비치환된 카바졸, 또는 치환 또는 비치환된 플루오렌이다.
- [0046] 상기 Ar_1 과 Ar_2 는 서로 다르다.
- [0047] 상기 R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이며, 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 비치환된 (C6-C12)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이다.
- [0048] 상기 R_3 은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, 바람직하게는 수소이다.
- [0049] 상기 R_{11} 및 R_{12} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나; 서로 연결되어 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, 바람직하게는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C6)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴이거나; 서로 연결되어 (C3-C15) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있으며, 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 비치환된 (C1-C6)알킬, 또는 비치환된 (C6-C12)아릴이거나; 서로 연결되어 (C3-C15) 단일환 또는 다환의 방향족 환을 형성할 수 있다.
- [0050] 본원 발명의 일양태에 따르면, 상기 화학식 1에서, X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 CH 또는 N이고; L_1 은 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌이며; Ar_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이고; Ar_2 는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고; 단, Ar_1 과 Ar_2 는 서로 다르며; R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고; R_3 은 수소이며; R_{11} 및 R_{12} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C6)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴이거나; 서로 연결되어 (C3-C15) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있다.
- [0051] 본원 발명의 다른 일양태에 따르면, 상기 화학식 1에서, X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 CH 또는 N이고; L_1 은 단일 결합, 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌이며; Ar_1 은 시아노, (C1-C6)알킬, (C6-C12)아릴 또는 (5-15원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이고; Ar_2 는 시아노, (C1-C6)알킬, (C6-C12)아릴 또는 (5-15원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴; 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고; 단, Ar_1 과 Ar_2 는 서로 다르며; R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 수소, 비치환된 (C6-C12)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고; R_3 은 수소이며; R_{11} 및 R_{12} 는 각각 독립적으로 비치환된 (C1-C6)알킬, 또는 비치환된 (C6-C12)아릴이거나; 서로 연결되어 (C3-C15) 단일환 또는 다환의 방향족 환을 형성할 수 있다.
- [0052] 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

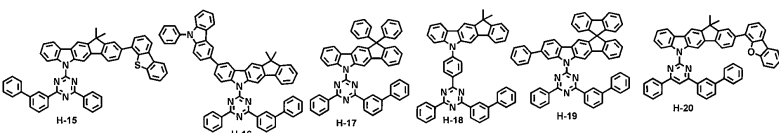
[0053]



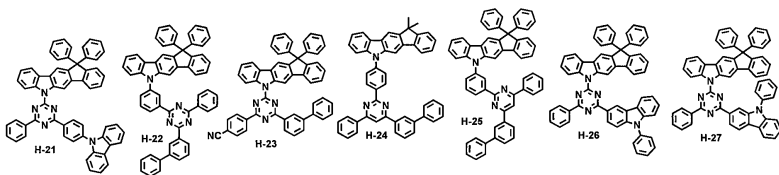
[0054]



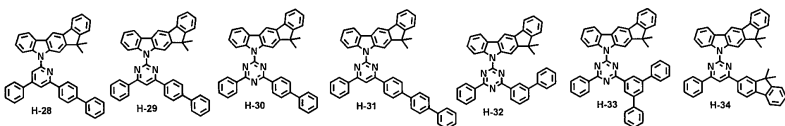
[0055]



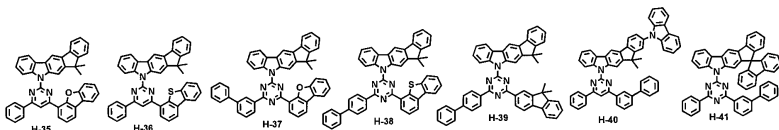
[0056]



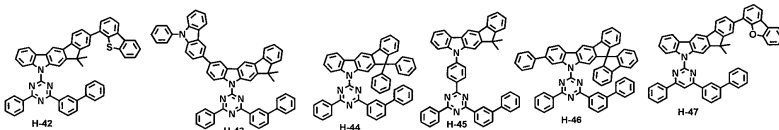
[0057]



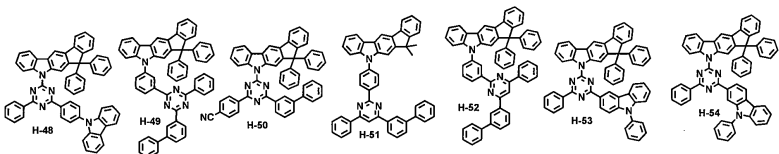
[0058]



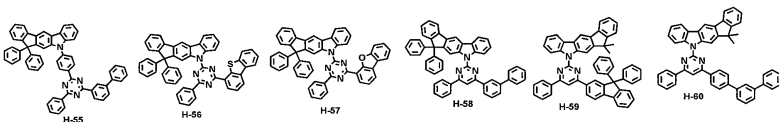
[0059]



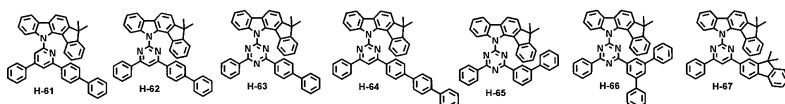
[0060]



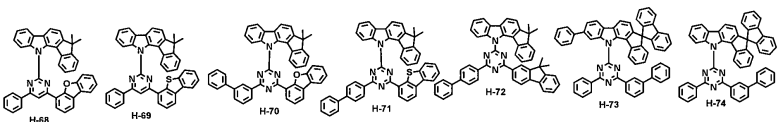
[0061]

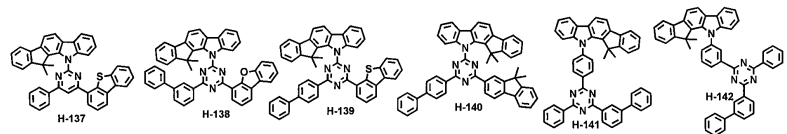
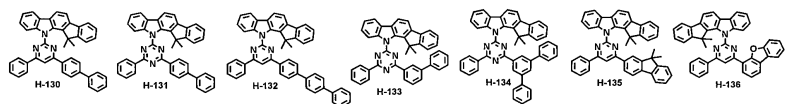
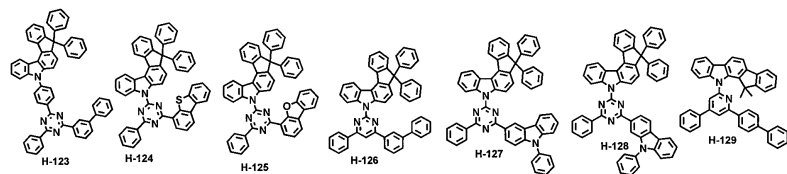
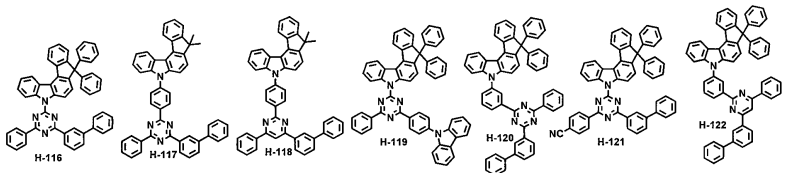
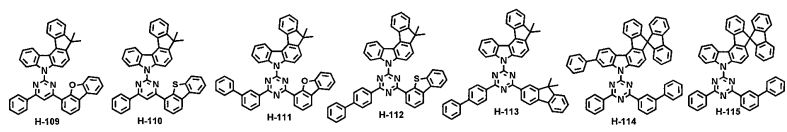
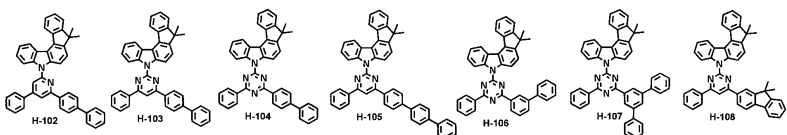
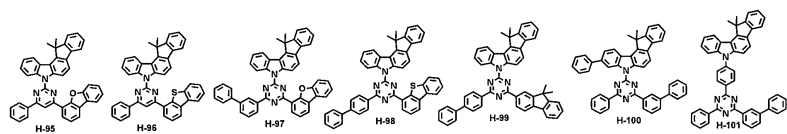
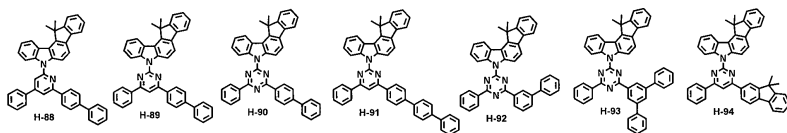
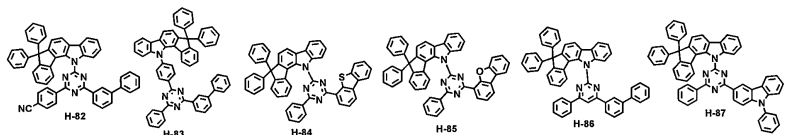
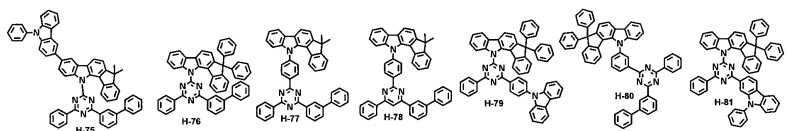


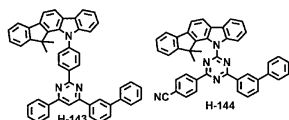
[0062]



[0063]







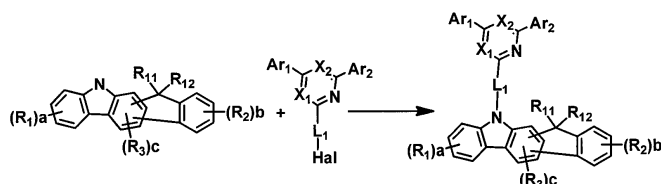
[0074]

[0075]

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

[0076]

[반응식 1]



[0077]

[0078]

상기 반응식 1에서 X_1 , X_2 , L_1 , Ar_1 , Ar_2 , R_1 내지 R_3 , R_{11} , R_{12} , a , b 및 c 는 화학식 1에서의 정의와 동일하고, Hal은 할로젠이다.

[0079]

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

[0080]

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

[0081]

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.

[0082]

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.

[0083]

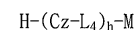
본 발명의 화학식 1의 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다. 발광층에 사용될 경우, 본 발명의 화학식 1의 화합물은 인광 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는, 상기 발광층은 하나 이상의 도펀트를 추가로 더 포함할 수 있으며, 필요한 경우, 본 발명의 화학식 1의 화합물 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다. 이 때, 제1 호스트 재료와 제2 호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

[0084]

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.

[0085]

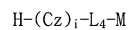
[화학식 11]



[0086]

[0087]

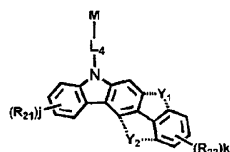
[화학식 12]



[0088]

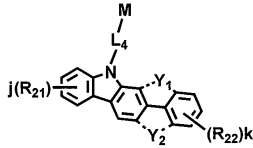
[0089]

[화학식 13]



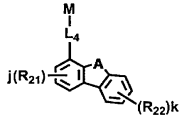
[0090]

[0091] [화학식 14]



[0092]

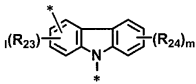
[0093] [화학식 15]



[0094]

[0095] 상기 화학식 11 내지 15에서,

[0096] Cz는 하기 구조이며,

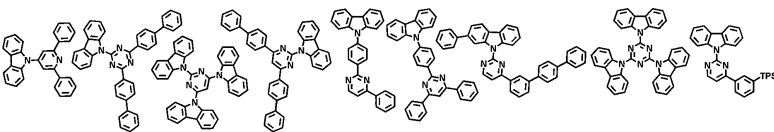


[0097]

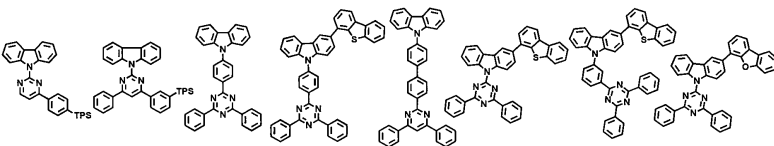
[0098] A는 -O- 또는 -S-이고;

[0099] 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 -SiR₂₅R₂₆R₂₇이며, R₂₅ 내지 R₂₇는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; L₄은 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; Y₁ 및 Y₂는 -O-, -S-, -N(R₃₁)-, -C(R₃₂)(R₃₃)- 이고, Y₁과 Y₂가 동시에 존재하지는 않으며; R₃₁ 내지 R₃₃은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, R₃₂ 및 R₃₃은 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 R₂₁, 각각의 R₂₂, 각각의 R₂₃ 또는 각각의 R₂₄는 동일하거나 상이할 수 있다.

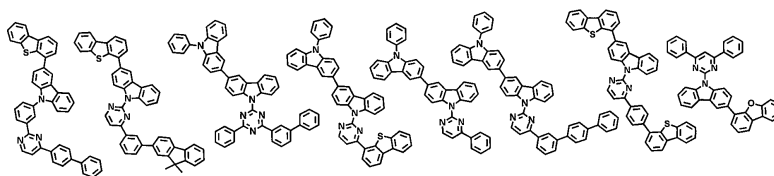
[0100] 구체적으로 상기 제2 호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같다.



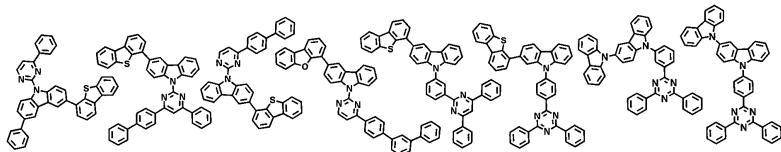
[0101]



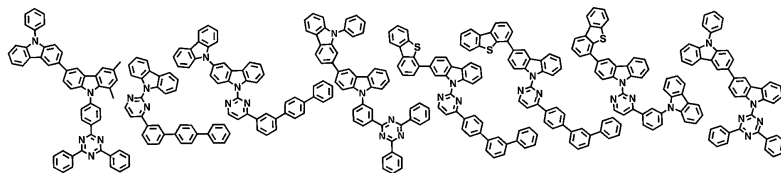
[0102]



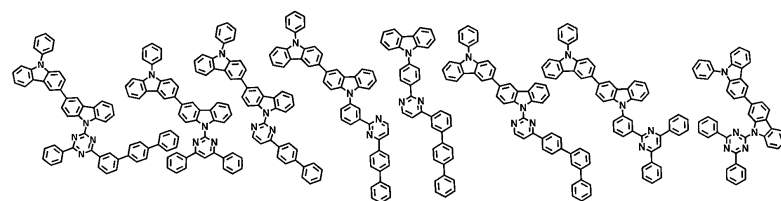
[0103]



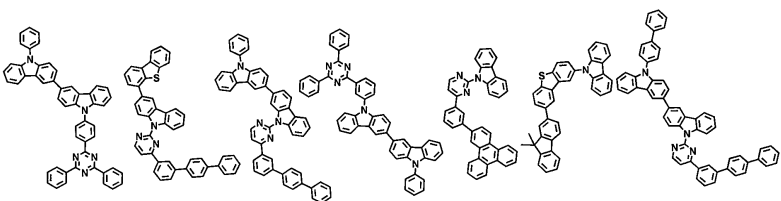
[0104]



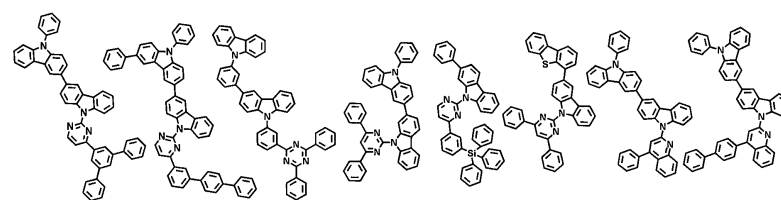
[0105]



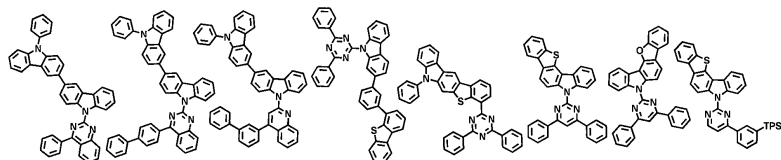
[0106]



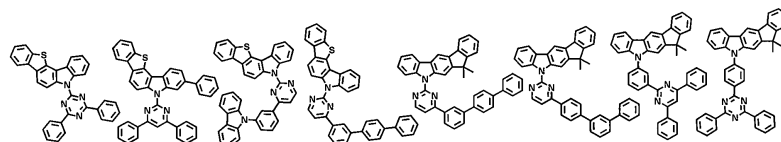
[0107]



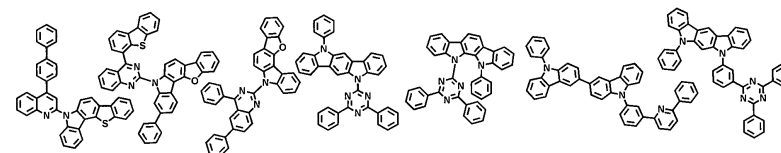
[0108]



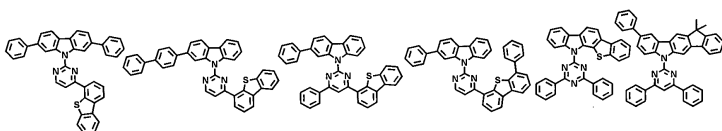
[0109]



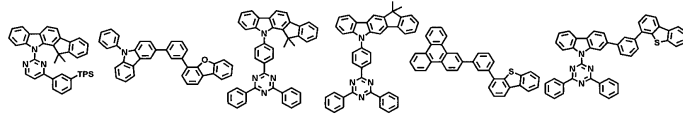
[0110]



[0111]



[0112]

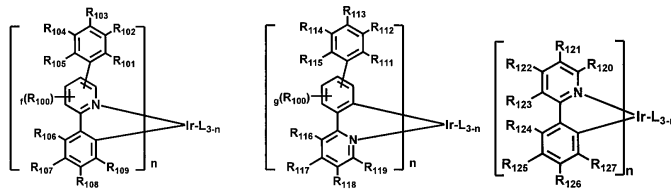


[여기서, TPS는 트리페닐실릴(triphenylsilyl)기이다]

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.

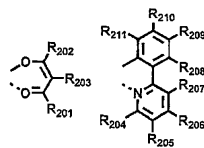
본 발명의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 101 내지 103으로 표시되는 화합물을 사용할 수 있다.

[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 R₁₁₉는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 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 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;

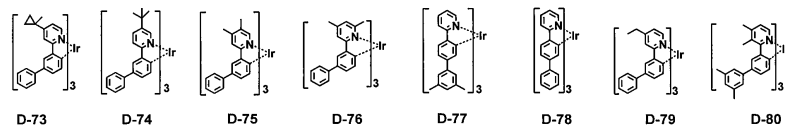
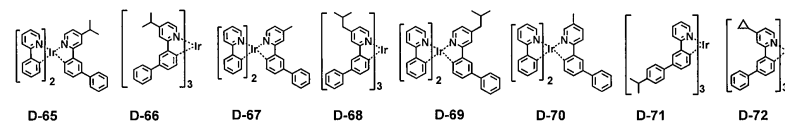
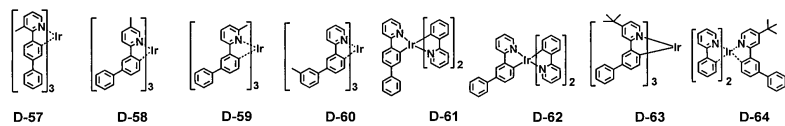
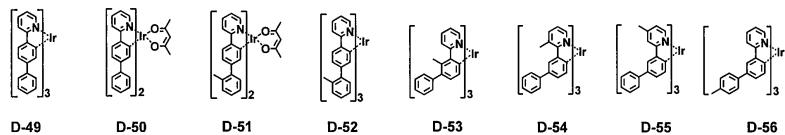
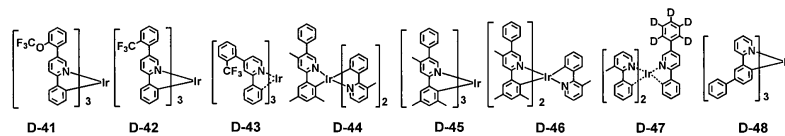
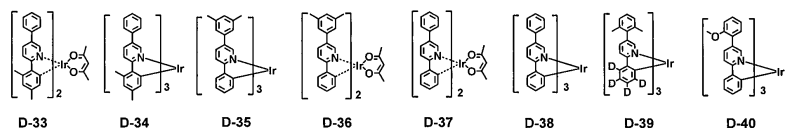
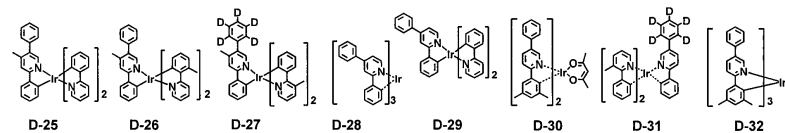
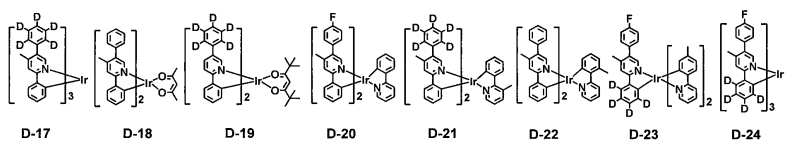
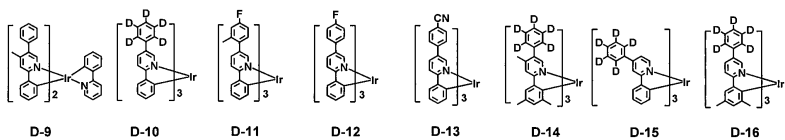
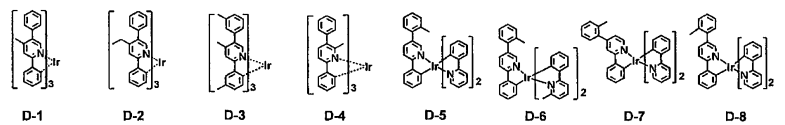
R₂₀₁ 내지 R₂₁₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고, R₂₀₈ 내지 R₂₁₁은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

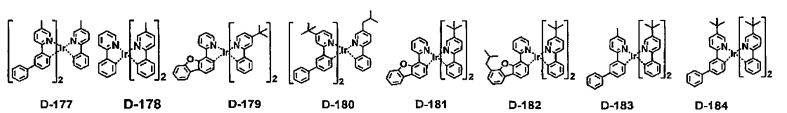
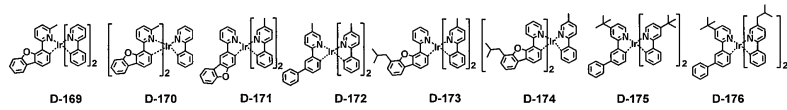
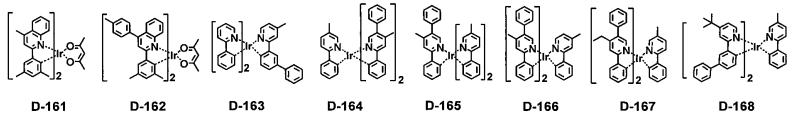
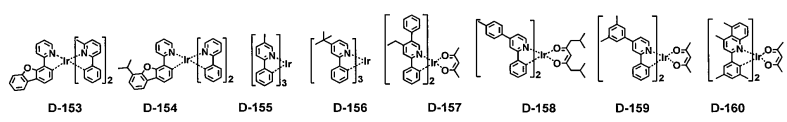
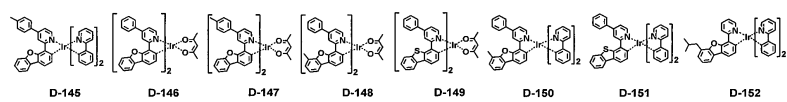
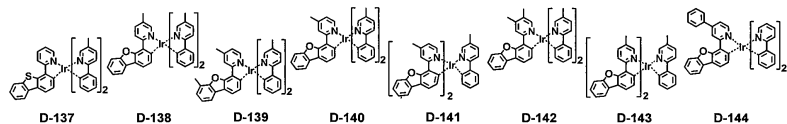
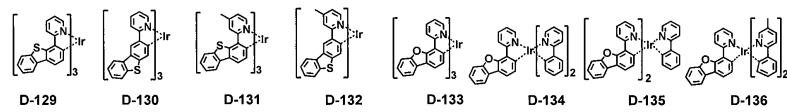
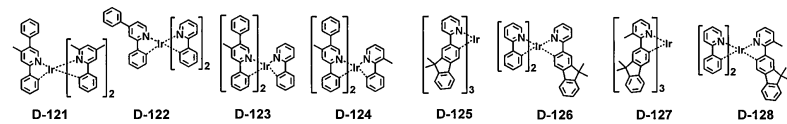
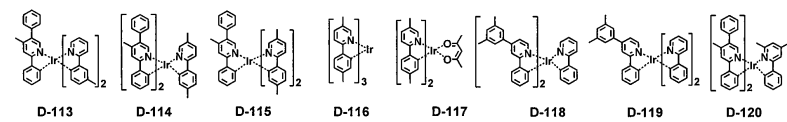
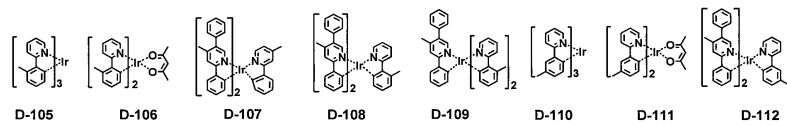
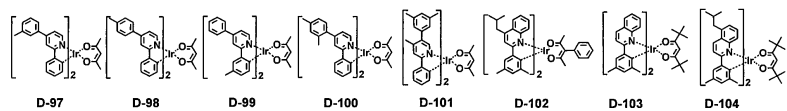
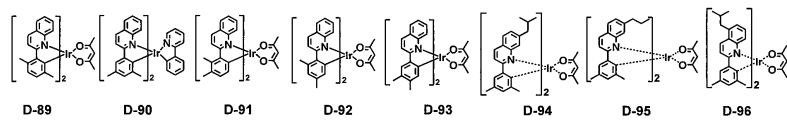
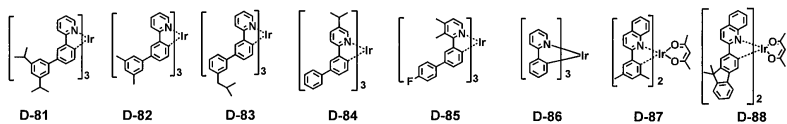
f 및 g는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며; f 또는 g가 각각 2이상의 정수인 경우 각각의 R₁₀₀은 서로 동일

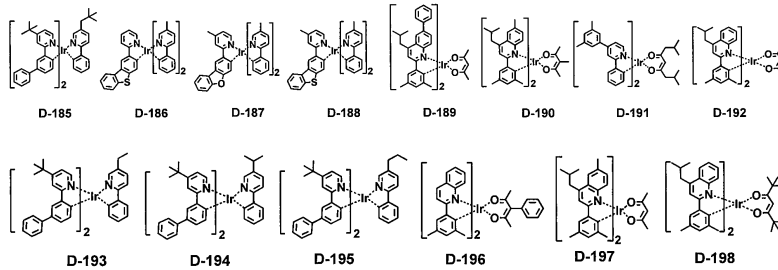
하거나 상이할 수 있고;

n은 1 내지 3의 정수이다.

상기 도판트 화합물의 구체적인 예는 다음과 같다.







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

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

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

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 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 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등이 있다.

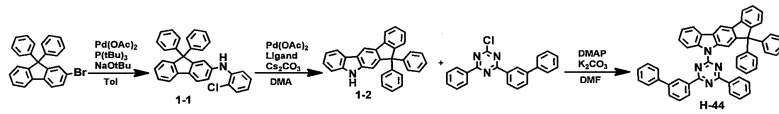
또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 이렇게 제조된 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 액셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도판트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 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 H-44의 제조



화합물 1-1의 제조

2-브로모-9,9-디페닐-9H-플루오렌 (8 g, 0.020 mol), 2-클로로아닐린 (3.1 mL, 0.030 mol), Pd(OAc)₂ (181 mg, 0.805 mmol), P(t-Bu)₃ (톨루엔 중 50 %) (0.8 mL, 1.61 mmol), NaOt-Bu (4.8 g, 0.056 mol) 및 톨루엔 58 mL 을 플라스크에 넣고 140℃에서 4시간 교반하였다. 반응이 끝나고, 혼합물을 증류수로 씻어주고 에틸아세테이트(EA)로 추출한 뒤 유기층을 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-1 (7.3 g, 82 %)를 얻었다.

화합물 1-2의 제조

화합물 1-1 (7.3 g, 0.016 mol)을 플라스크에 넣고, Pd(OAc)₂ (190 mg, 0.84 mmol), 트리시클로헥실포스포늄테트라플루오로보레이트 (620 mg, 0.0016 mol), Cs₂CO₃ (16 g, 0.050 mol) 및 디메틸아세트아미드(DMA) 85 mL를 첨가한 후, 반응 혼합물을 190℃로 가열시키고, 5시간 교반하였다. 반응이 끝나고, 혼합물을 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-2 (4.8 g, 59 %)를 얻었다.

화합물 H-44의 제조

화합물 1-2 (4.8 g, 0.011 mol)을 플라스크에 넣고, 2-([1,1'-비페닐]-3-일)-4-클로로-6-페닐-1,3,5-트리아진 (4.8 g, 0.014 mol), 디메틸아미노피리딘(DMAP) (720 mg, 0.005 mmol), K₂CO₃ (4.0 g, 0.029 mol) 및 디메틸포름아미드(DMF) 120 mL를 첨가한 후, 반응 혼합물을 120℃로 가열시키고, 3시간 교반하였다. 반응이 끝나고, 혼합물을 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 H-44 (6.9 g, 82 %)를 얻었다.

상기 실시예 1의 방법을 이용하여 화합물 H-32, H-44, H-55, H-56, H-57 및 H-58을 제조하였고, 하기 표에 제조된 화합물들의 수율(%), 녹는점(℃), UV 스펙트럼 (nm), PL 스펙트럼 (nm) 및 분자량을 나타내었다.

화합물	수율 (%)	녹는점 (℃)	UV 스펙트럼 (nm, 톨루엔)	PL 스펙트럼 (nm, 톨루엔)	분자량
H-32	23	198	258(MC)	535(MC)	590.00
H-44	47	326	334	486	714
H-55	47	382	361(MC)	514(MC)	790
H-56	29	371	257(MC)	543(MC)	744.80
H-57	57	363	238(MC)	532(MC)	728.00
H-58	30	267	254(MC)	493(MC)	713.00

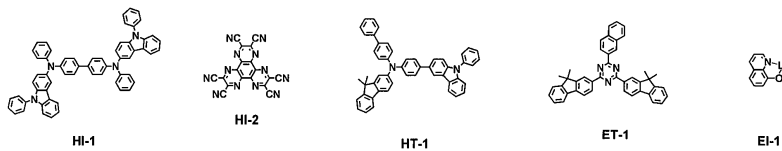
[여기서, MC는 메틸렌클로라이드이다]

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

본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(GEOMATEC사 제조) 기판 상의 투명 전극 ITO 박막(15Ω/□)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 N⁴,N^{4'}-디페닐-N⁴,N^{4'}-비스(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민 (화합물 HI-1)을 넣고 챔버 내의 진공도가 10⁻⁶ torr에 도달할 때까지 배기시킨 후,

셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 80 nm 두께의 제1 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 1,4,5,8,9,12-헥사아자트리페닐렌-헥사카르보니트릴 (화합물 HI-2)를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공주입층 위에 3 nm 두께의 제2 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 N-([1,1'-비페닐]-4-일)-9,9-디메틸-N-(4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐)-9H-플루오렌-2-아민 (화합물 HT-1)을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공주입층 위에 40 nm 두께의 정공전달층을 증착하였다. 제1 및 제2 정공주입층, 정공전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 화합물 H-44를 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-1을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 도판트와 호스트 전체에 대하여 도판트를 15 중량%로 도핑함으로써 상기 정공전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 각각 2,4-비스(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-6-(나프탈렌-2-일)-1,3,5-트리아진 (화합물 ET-1)과 리튬 퀴놀레이트 (화합물 EI-1)을 4:6의 속도로 증발시켜 발광층 위에 35 nm 두께의 전자전달층을 증착하였다. 이어서, 전자주입층으로 리튬 퀴놀레이트를 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다. 재료 별로 각 화합물은 10^{-6} torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0177] 그 결과, 15,000 nits 휘도 기준 정전류에서 발광이 100%부터 95%까지 떨어지는 수명 시간이 13.7 시간의 수명 특성을 보이는 녹색 발광이 확인되었다.



[0178]

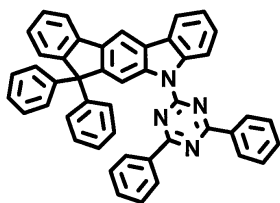
[0179] [소자 제조예 2] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조

[0180] 발광 재료로서 호스트에 화합물 H-58을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0181] 그 결과, 15,000 nits 휘도 기준 정전류에서 발광이 100%부터 95%까지 떨어지는 수명 시간이 8.9 시간의 수명 특성을 보이는 녹색 발광이 확인되었다.

[0182] [비교예 1] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조

[0183] 발광 재료로서 호스트에 하기 화합물을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.



[0184]

[0185] 그 결과, 15,000 nits 휘도 기준 정전류에서 발광이 100%부터 95%까지 떨어지는 수명 시간이 6.6 시간의 수명 특성을 보이는 녹색 발광이 확인되었다.

[0186] 본 발명에서 개발한 유기 전계 발광 화합물들의 발광 특성이 종래의 재료 대비 우수한 수명 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다.

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	KR1020150141147A	公开(公告)日	2015-12-17
申请号	KR1020150080294	申请日	2015-06-08
[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	LEE SU HYUN 이수현 KIM CHI SIK 김치식 JUN JI SONG 전지송 PARK KYOUNG JIN 박경진 DOH YOO JIN 도유진		
发明人	이수현 김치식 전지송 박경진 도유진		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 C07D401/04		
CPC分类号	H01L51/0072 C07D401/04 C07D403/04 C07D403/10 C07D403/14 C07D405/14 C07D409/14 C09K11/025 C09K11/06 H01L51/0061 H01L51/0067 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/5016 H05B33/14		
代理人(译)	李昌勋		
优先权	1020140069488 2014-06-09 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及有机电致发光化合物和包含该化合物的有机电致发光器件。
 根据本发明，有机电致发光化合物能够制造具有改善的寿命特性的有机电致发光器件。有机电致发光化合物由化学式1表示。

