



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0039020
(43) 공개일자 2017년04월10일

- | | |
|---|---|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
 <i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>C07D 307/91</i> (2006.01)
 <i>C07D 407/10</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
 <i>C09K 11/06</i> (2013.01)
 <i>C07D 307/91</i> (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2015-0138084
 (22) 출원일자 2015년09월30일
 심사청구일자 2015년09월30일</p> | <p>(71) 출원인
 주식회사 스킨앤스킨
 경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)</p> <p>(72) 발명자
 강지승
 경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)
 서하나
 경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)
 (뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인
 특허법인 대아</p> |
|---|---|

전체 청구항 수 : 총 14 항

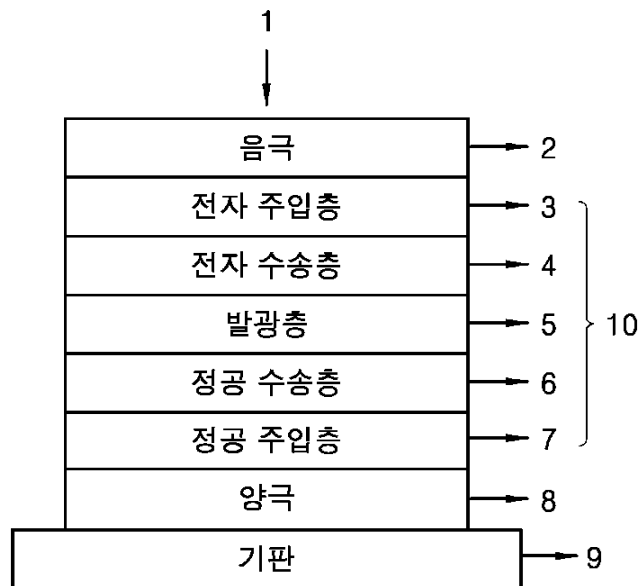
(54) 발명의 명칭 **유기 전계발광 화합물 및 유기 전계발광 소자**

(57) 요약

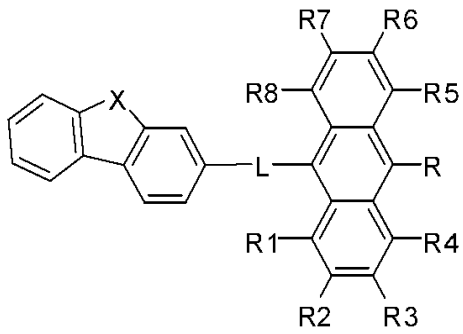
하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계발광 화합물이 제공된다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



<화학식 1>



상기 식에서, R, R1 내지 R8, L 및 X는 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

(52) CPC특허분류

C07D 407/10 (2013.01)

H01L 51/50 (2013.01)

C09K 2211/1088 (2013.01)

(72) 발명자

이희진

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

안준수

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

임현철

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

민병우

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

안도환

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

이대균

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

배호기

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

안중복

경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)

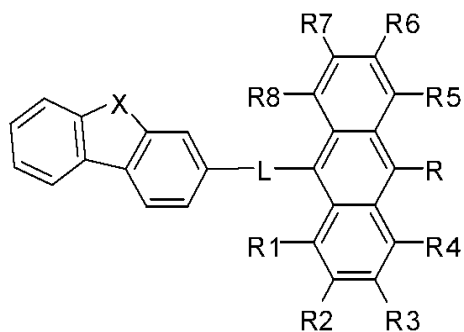
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계발광 화합물:

<화학식 1>



상기 식에서,

R1 내지 R8은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1~C20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1~C20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6~C20의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C6~C20의 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 원자수 C6~C20의 헤테로아릴기를 나타내고,

상기 R1 내지 R8이 치환된 경우의 치환기는 C1~C30의 알킬기 및 C6~C30의 아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나이고,

L은 단일 결합 또는 연결기를 나타내고, 상기 연결기는 치환 또는 비치환된 C6~C60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C3~C60의 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C3~C60의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C2~C60의 헤테로시클로알킬렌기 및 이들의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나이고,

상기 L이 치환된 경우의 치환기는 C1~C30의 알킬기 및 C6~C30의 아릴기로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나이고;

R은 치환 또는 비치환된 C6~C60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3~C60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C3~C60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~C60의 헤테로시클로알킬기, 또는 C3~C50의 헤테로아릴기이고,

상기 R이 치환된 경우의 치환기는 C1~C30의 알킬기 및 C6~C30의 아릴기 아릴기로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나이고,

X는 산소원자이다.

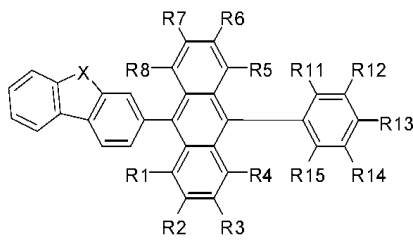
청구항 2

제1항에 있어서,

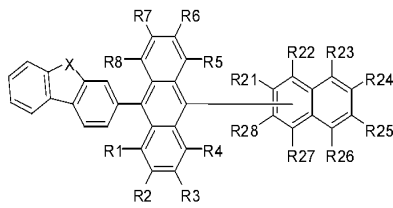
상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 8 중 어느 하나로 표시되는

유기 전계발광 화합물.

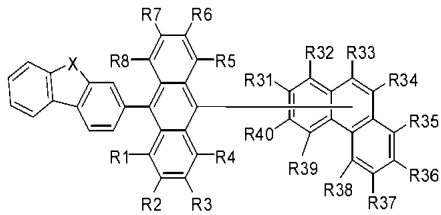
<화학식 2>



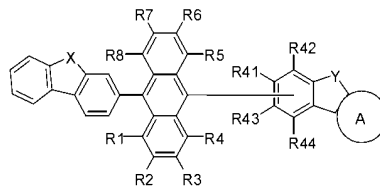
<화학식3>



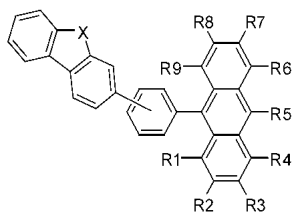
<화학식 4>



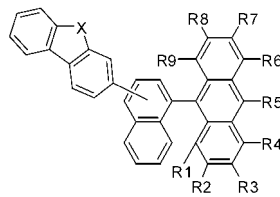
<화학식5>



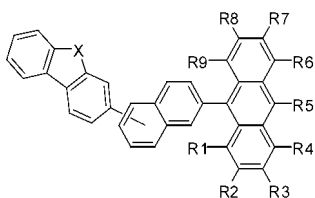
<화학식 6>



<화학식7>



<화학식8>



상기 A는 페닐기, 나프틸기 또는 페난트렌기이고,

상기 R1 내지 R44는, 각각 독립적으로, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 페난트렌기, 플로렌기, 디벤조퓨란기, 콤파이렌기, 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6-C60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 헤테로시클로알킬기, 또는 C3-C50의 헤테로아릴기이고,

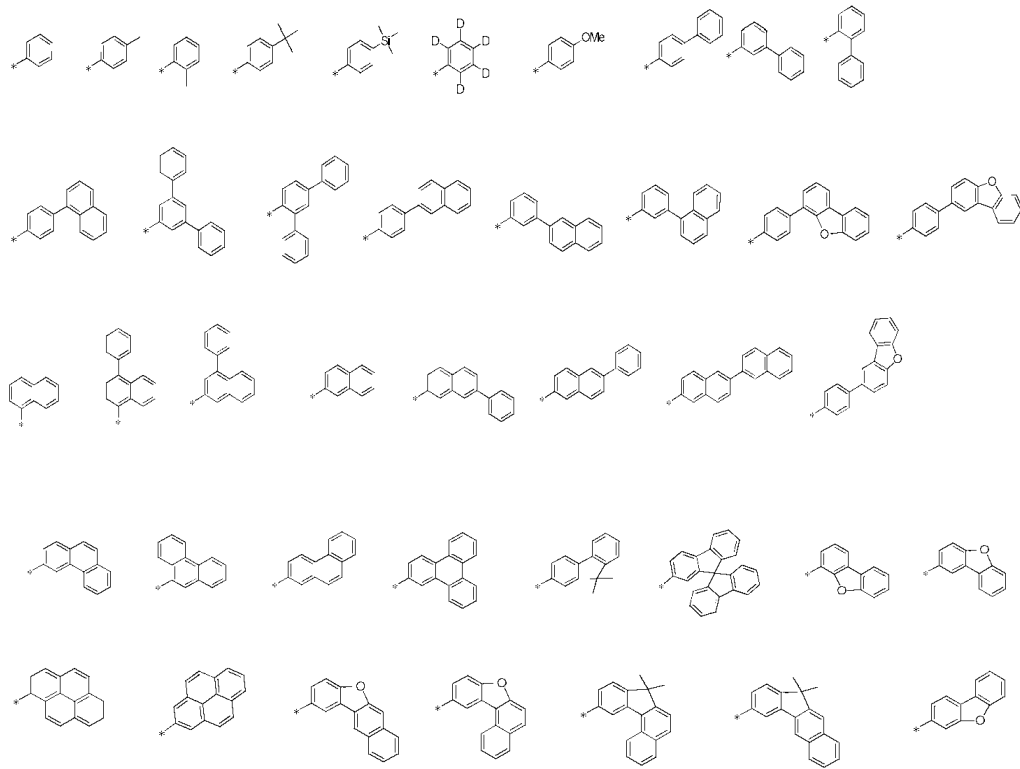
상기 R1 내지 R44가 치환된 경우의 치환기는 C1-C30의 알킬기 또는 C6-C30의 아릴기이다.

청구항 3

제1항에 있어서,

R이 하기 구조식으로 표시되는 기 중 어느 하나인

유기 전계발광 화합물.

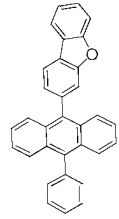
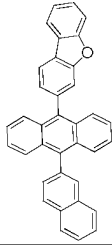
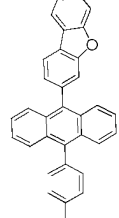
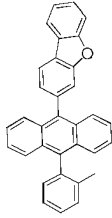
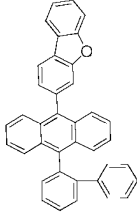
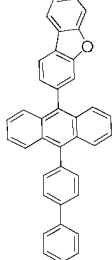
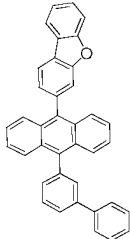
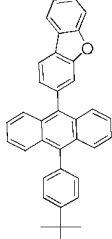
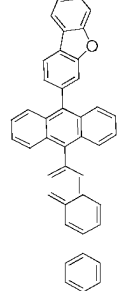
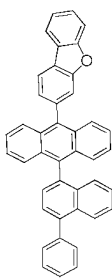


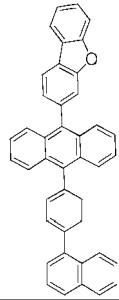
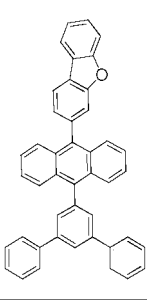
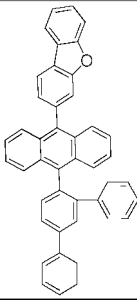
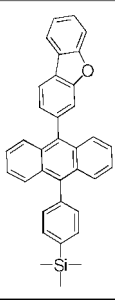
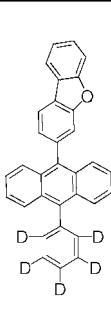
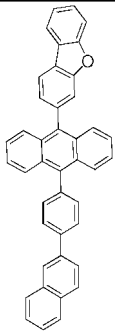
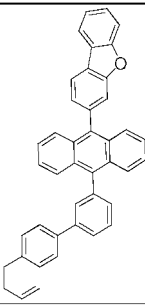
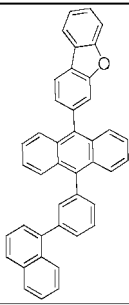
청구항 4

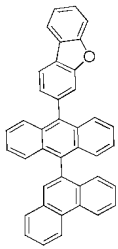
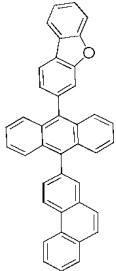
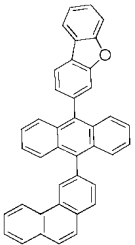
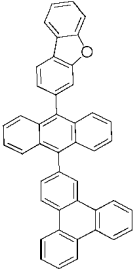
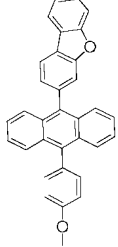
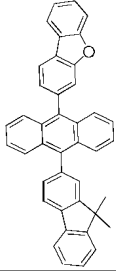
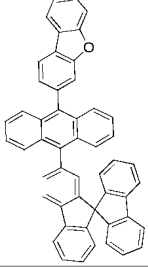
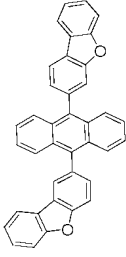
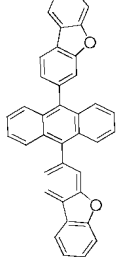
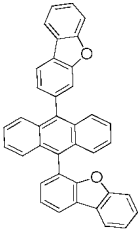
제1항에 있어서,

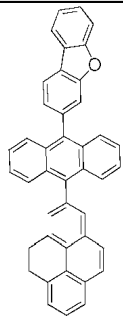
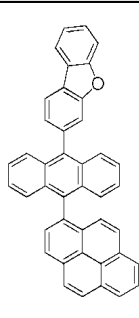
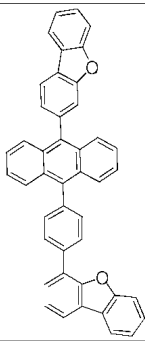
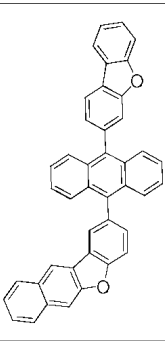
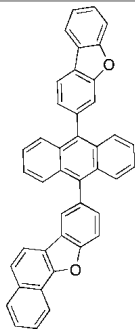
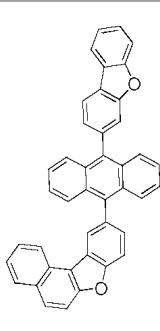
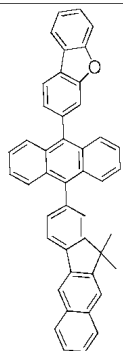
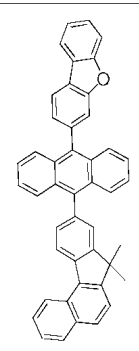
상기 유기 전계발광 화합물은 하기 1 내지 112 중의 어느 하나의 화합물인

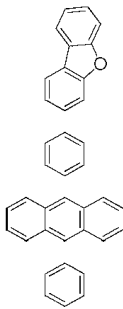
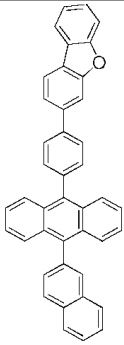
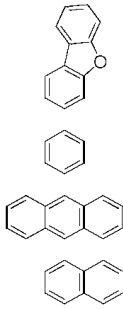
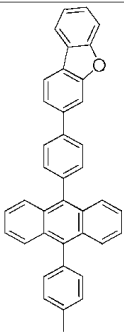
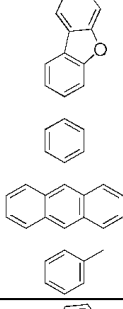
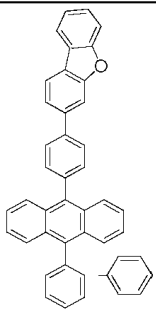
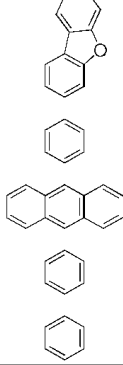
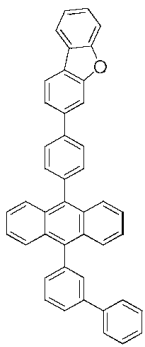
유기 전계발광 화합물.

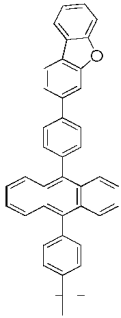
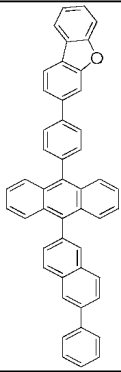
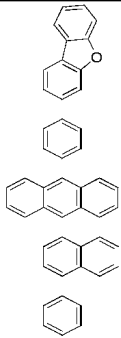
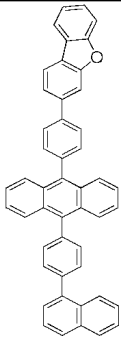
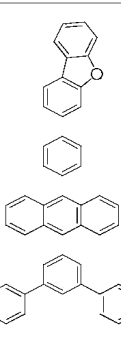
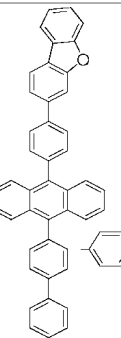
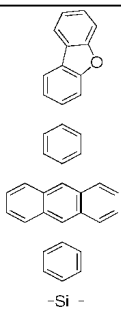
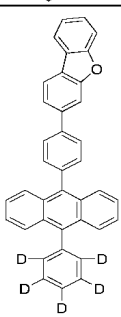
1		2	
3		4	
5		6	
7		8	
9		10	

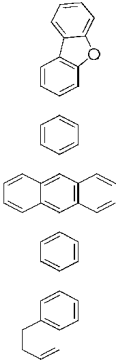
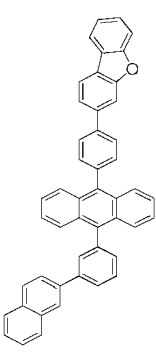
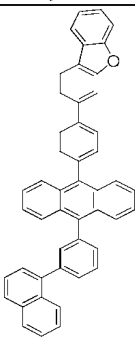
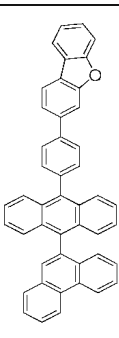
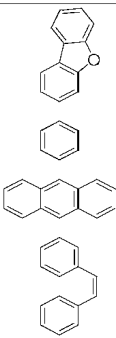
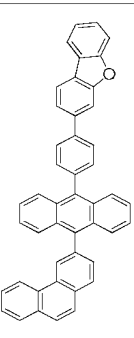
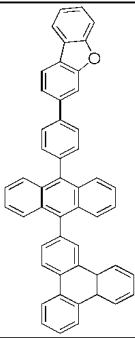
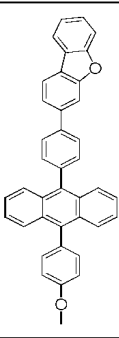
11		12	
13		14	
15		16	
17		18	

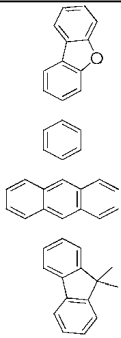
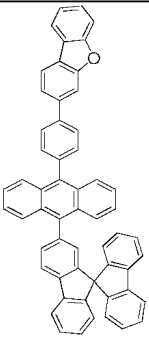
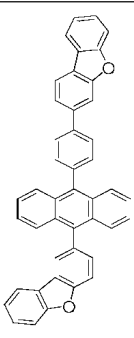
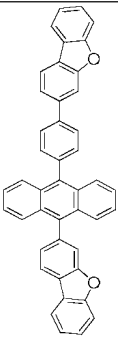
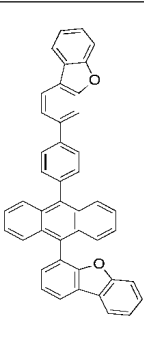
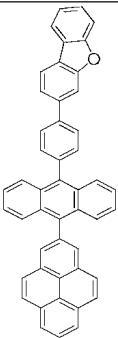
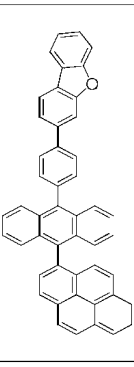
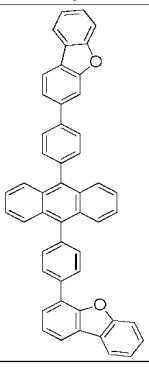
19		20	
21		22	
23		24	
25		26	
27		28	

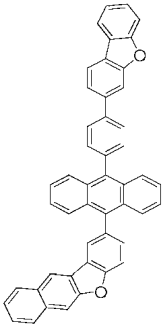
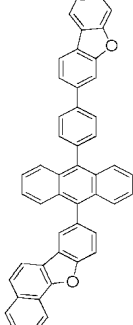
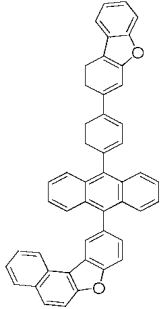
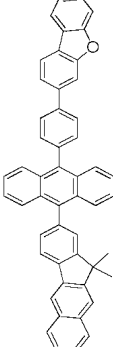
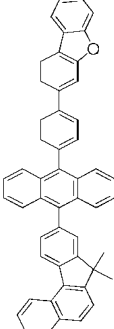
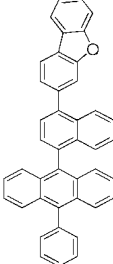
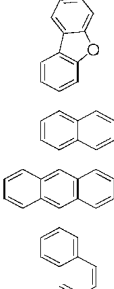
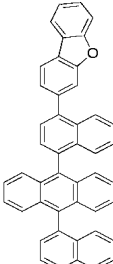
29		30	
31		32	
33		34	
35		36	

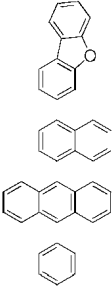
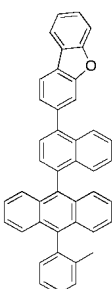
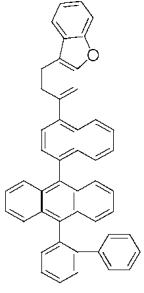
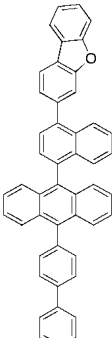
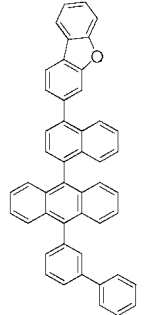
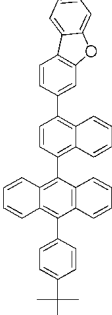
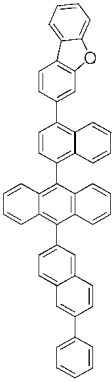
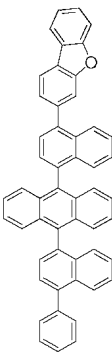
37		38	
39		40	
41		42	
43		44	

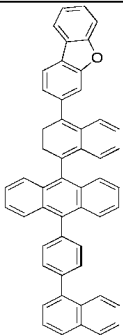
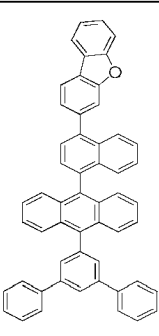
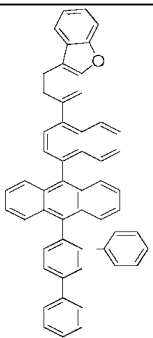
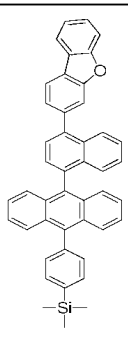
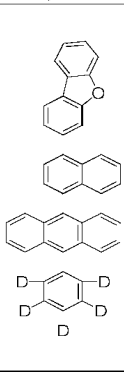
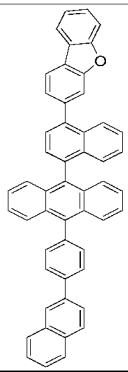
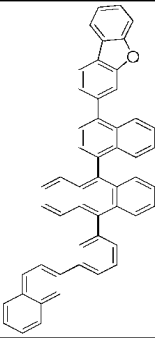
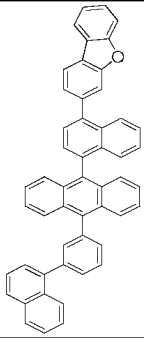
45		46	
47		48	
49		50	
51		52	

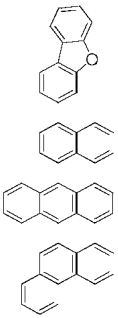
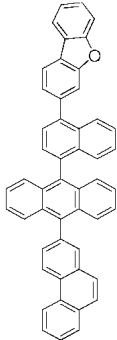
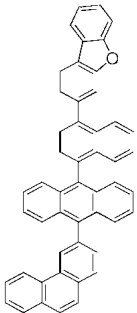
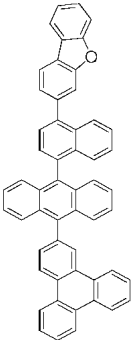
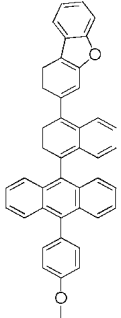
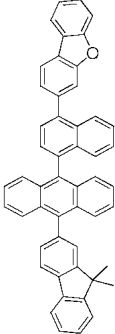
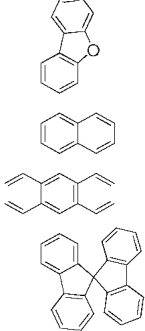
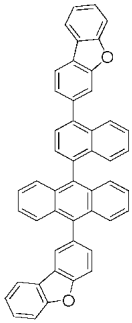
53		54	
55		56	
57		58	
59		60	

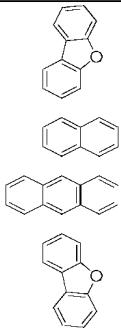
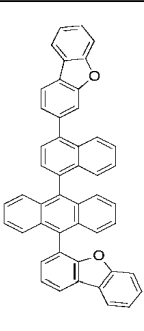
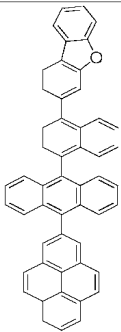
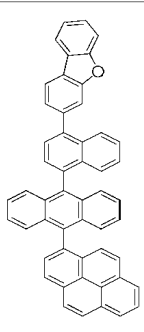
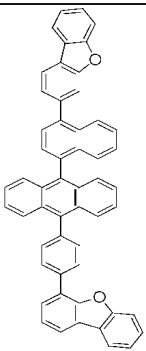
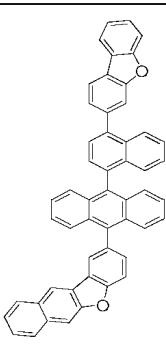
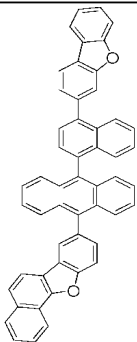
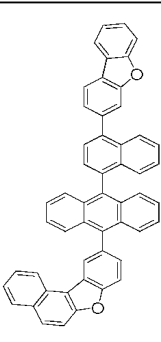
61		62	
63		64	
65		66	
67		68	

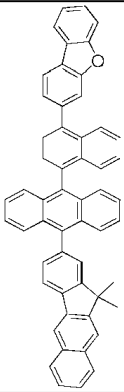
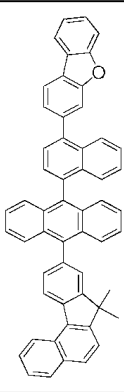
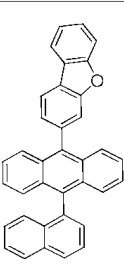
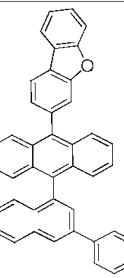
69		70	
71		72	
73		74	
75		76	

77		78	
79		80	
81		82	
83		84	

85		86	
87		88	
89		90	
91		92	

93		94	
95		96	
97		98	
99		100	

101		102	
103		104	
105		106	
107		108	

109		110	
111		112	

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서,
상기 유기 전계발광 화합물이 유기 전계발광 소자용 유기막 재료로 사용되는
유기 전계발광 화합물.

청구항 6

음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 포함하는 1 이상의 유기 박막층이 형성되어 있는 유기 전계발광 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 한 층이 제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 따른 유기 전계발광 화합물을 단독 또는 이들의 2종 이상의 조합을 포함하는 발광층을 포함하는 유기 전계발광 소자.

청구항 7

제6항에 있어서,
상기 발광층은 상기 유기 전계발광 화합물을 호스트 재료로서 적어도 1종 이상 포함하고, 상기 발광층은 적어도 1종 이상의 도펀트 재료를 더 포함하는
유기 전계발광 소자.

청구항 8

제7항에 있어서,
상기 도펀트 재료가 아릴아민 화합물인
유기 전계발광 소자.

청구항 9

제8항에 있어서,

상기 도펀트 재료가 스티릴아민 화합물인

유기 전계발광 소자.

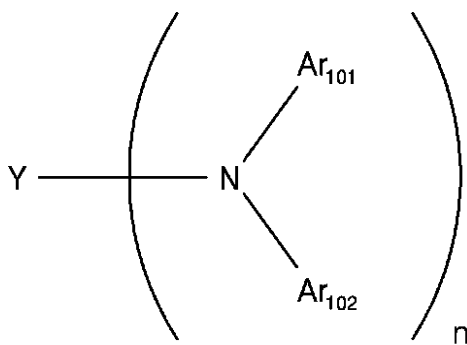
청구항 10

제7항에 있어서,

상기 도펀트 재료가 하기 화학식 9로 표시되는 축합 다환 아민 유도체인

유기 전계 발광소자:

<화학식 9>



상기 화학식 9에서,

Y는 C10~50의 치환 또는 비치환된 축합아릴기를 나타내고,

Ar101 및 Ar102는, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6~40의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C5 내지 C50의 헤테로아릴기를 나타내고,

상기 Ar101 및 Ar102가 치환된 경우의 치환기는 C1~C30의 알킬, C6~C30의 아릴기, 알콕시, 니트릴, 할로겐 및 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나이고,

n은 1 내지 4의 정수이다.

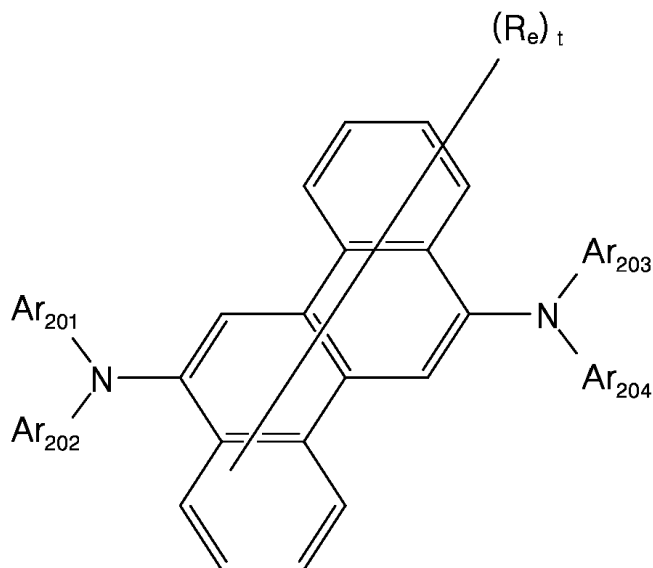
청구항 11

제10항에 있어서,

상기 축합 다환 아민 유도체가 하기 화학식 10으로 표시되는 축합 다환 아민 유도체인

유기 전계발광 소자:

<화학식 10>



상기 화학식 10에서,

Re는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 또는 비치환된 C1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C2~50의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2~50의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C1~20의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~20의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1~20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 환 형성 C6~20의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 환 형성 C6~40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 C1~40의 알킬게르마늄기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 C6~50의 아릴게르마늄기를 나타내고,

상기 Re가 치환된 경우의 치환기는 C1~C30의 알킬, C6~C30의 아릴기, 알콕시, 니트릴, 할로젠 및 아미노기로부터 선택된 적어도 하나이고,

t는 1 내지 10의 정수를 나타내고,

Ar201 내지 Ar204는 각각 치환 또는 비치환된 환 형성 C6~40의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자 수 5 내지 50의 복소환기를 나타내고,

상기 Ar201 내지 Ar204가 치환된 경우의 치환기는 C1~C30의 알킬, C6~C30의 아릴기, 알콕시, 니트릴, 할로젠 및 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나이다.

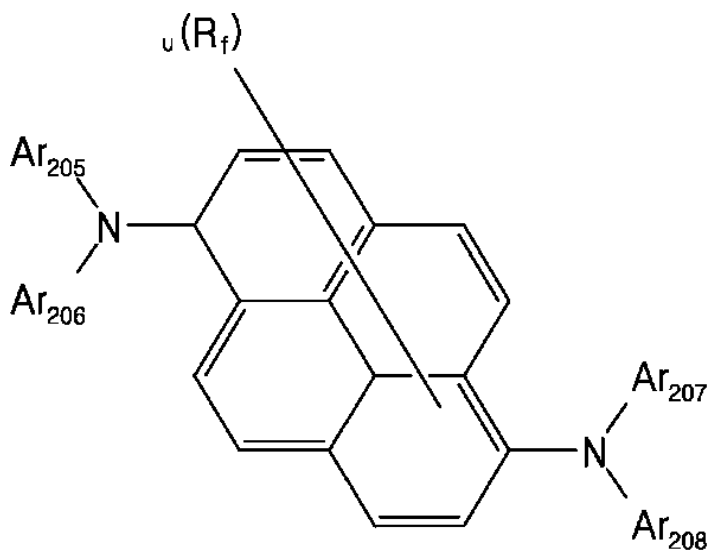
청구항 12

제10항에 있어서,

상기 축합 다환 아민 유도체가 하기 화학식 11으로 표시되는 축합 다환 아민 유도체인

유기 전계발광 소자:

<화학식 11>



상기 화학식 11에서,

Rf는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 또는 비치환된 C1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C2~40의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2~40의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C2~20의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~20의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1~20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6~20의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C6~20의 아릴기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 C1~40의 알킬게르마늄기, 또는 치환 또는 비치환된 C6~50의 아릴게르마늄기를 나타내고,

상기 Rf가 치환된 경우의 치환기는 C1~C30의 알킬, C6~C30의 아릴기, 알콕시, 니트릴, 할로젠 및 및 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나이고,

u는 1 내지 8의 정수를 나타내고,

Ar205 내지 Ar208은, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6~50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2~50의 헤테로아릴기를 나타내고,

상기 Ar201 내지 Ar204가 치환된 경우의 치환기는 C1~C30의 알킬, C6~C30의 아릴기, 알콕시, 니트릴, 할로젠, 및 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나이다.

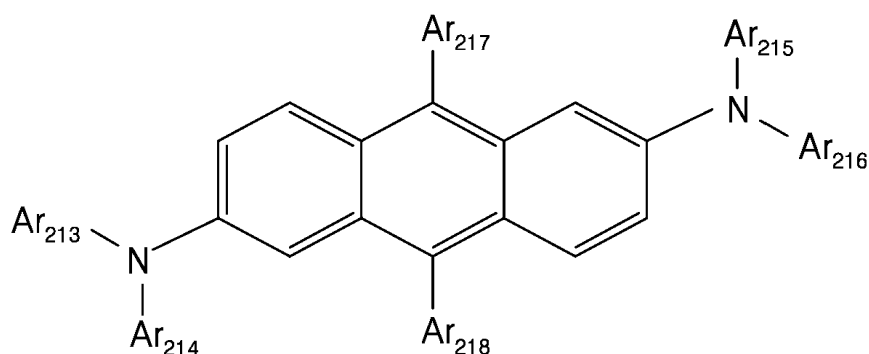
청구항 13

제10항에 있어서,

상기 축합 다환 아민 유도체가 하기 화학식 12로 표시되는 축합 다환 아민 유도체인

유기 전계발광 소자:

<화학식 12>



상기 화학식 12 에서,

Ar213 내지 Ar218은, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6~50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2~50의 헤테로아릴기를 나타내고,

상기 Ar213 내지 Ar218이 치환된 경우의 치환기는 C1~C30의 알킬, C6~C30의 아릴기, 알콕시, 니트릴, 할로젠 및 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나이다.

청구항 14

제6항에 있어서,

상기 유기 전계발광 소자는 상기 유기 전계발광 화합물을 포함하는 상기 발광층에 대하여 추가적으로 청색, 적색, 또는 녹색 발광을 하는 추가적인 발광층을 적어도 하나를 더 포함하여 백색 발광을 하는

유기 전계발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 유기 전계발광 화합물 및 유기 전계발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 전계발광 소자(electroluminescence device: EL device)는 자체 발광형 표시 소자로서 응답 속도가 빠르고, 시야각이 넓은 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발광층 재료로서 저분자 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용한 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] OLED에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료인데, 발광 재료 중 인광 재료는 이론적으로 형광 재료 대비 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있다. 현재까지 이리듐(III) 착물 계열과 카바졸 계열의 재료들이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 최근 새로운 인광 재료들이 연구되고 있다.

[0004] 유기 전계발광 현상의 원리는, 음극과 양극 사이에 유기물 층이 있을 때 두 전극 사이에 전압을 걸어주면 음극과 양극으로부터 각각 전자와 정공이 유기물 층으로 주입된다. 유기물 층으로 주입된 전자와 정공은 재결합하여 엑시톤(exciton)을 형성하고, 이 엑시톤이 다시 바닥 상태로 떨어지면서 빛이 나게 된다. 이러한 원리를 이용하는 유기 전계발광 소자는 일반적으로 음극과 양극 및 그 사이에 위치한 유기물층, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층을 포함하는 유기물 층으로 구성될 수 있다.

[0005] 유기 전계발광 소자에서 사용되는 재료로는 순수 유기물 또는 유기물과 금속이 착물을 이루는 착화합물이 대부분을 차지하고 있으며, 용도에 따라 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 구분될 수 있다. 여기서, 정공주입 재료나 정공수송 재료로는 p-타입의 성질을 가지는 유기 재료, 즉 쉽게 산화가 되고 산화시에 전기화학적으로 안정한 상태를 가지는 유기물이 주로 사용되고 있다. 한편, 전자주입 재료나 전자수송 재료로는 n-타입 성질을 가지는 유기 재료, 즉 쉽게 환원이 되고 환원시에 전기화학적으로 안정한 상태를 가지는 유기물이 주로 사용되고 있다. 발광층 재료로는 p-타입 성질과 n-타입 성질을 동시에 가진 재료, 즉 산화와 환원 상태에서 모두 안정한 형태를 갖는 재료가 바람직하며, 엑시톤이 형성되었을 때 이를 빛으로 전환하는 발광 효율이 높은 재료가 바람직하다. 따라서, 당 기술 분야에서는 상기와 같은 요건을 갖춘 새로운 유기 재료의 개발이 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0006] 본 발명의 일 구현예는 적절한 에너지 준위, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성을 가지는 신규한 유기 전계발광

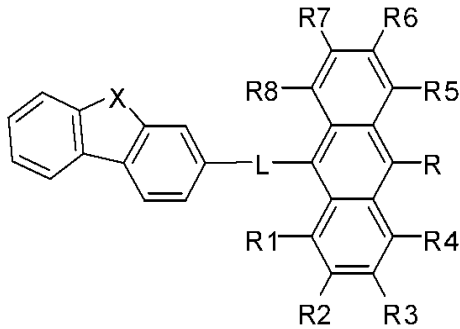
화합물을 제공한다.

[0007] 본 발명의 다른 구현예에는 상기 유기 전계발광 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자를 제공한다.

과제의 해결 수단

[0008] 본 발명의 일 구현예에서, 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계발광 화합물을 제공한다.

[0009] <화학식 1>



[0010]

[0011] 상기 식에서,

[0012] R1 내지 R8은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1-C20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6-C20의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C6-C20의 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C6-C50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 원자수 C6-C20의 헤테로아릴기를 나타내고,

[0013] 상기 R1 내지 R8이 치환된 경우의 치환기는 C1-C30의 알킬기 및 C6-C30의 아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나이고,

[0014] L은 단일 결합 또는 연결기를 나타내고, 상기 연결기는 치환 또는 비치환된 C6-C60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C2-C60의 헤테로시클로알킬렌기 및 이들의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나이고,

[0015] 상기 L이 치환된 경우의 치환기는 C1-C30의 알킬기 및 C6-C30의 아릴기로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나이고;

[0016] R은 치환 또는 비치환된 C6-C60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 헤테로시클로알킬기, 또는 C3-C50의 헤테로아릴기이고,

[0017] 상기 R이 치환된 경우의 치환기는 C1-C30의 알킬기 및 C6-C30의 아릴기 아릴기로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나이고,

[0018] X는 산소원자이다.

[0019] 본 발명의 다른 구현예에서, 음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 포함하는 1 이상의 유기 박막층이 협지되어 있는 유기 전계발광 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 한 층이 제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 따른 유기 전계발광 화합물을 단독 또는 이들의 2종 이상의 조합을 포함하는 발광층을 포함하는 유기 전계발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

[0020] 상기 유기 전계발광 화합물은 유기 전계발광 소자에서 사용 가능한 물질에 요구되는 조건, 예컨대 적절한 에너지

지 준위, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성 등을 모두 우수하게 만족시킬 수 있으며, 치환기에 따라 유기 전계 발광 소자에서 요구되는 다양한 역할을 할 수 있다.

도면의 간단한 설명

도 1은 일 구현예에 따른 상기 유기 전계발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

도 2는 비교합성에 1에서 제조된 화합물 [a]의 $^1\text{H-NMR}$ 측정 결과이다.

도 3은 합성에 1에서 제조된 화합물 [2]의 $^1\text{H-NMR}$ 측정 결과이다.

도 4는 실시예 및 비교예에서 제조된 유기 전계발광 소자에 대하여 휘도를 측정하여 얻은 수명 특성을 나타낸 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구항의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

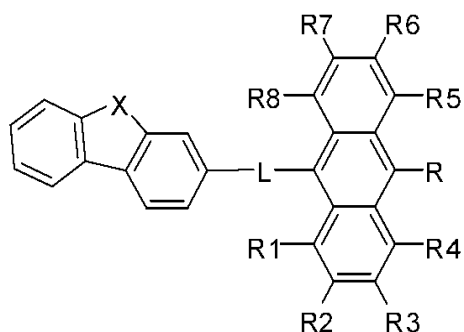
본 명세서에서 "치환"된 경우는 별도의 정의가 없는 한, 중수소, 할로젠 원자, C1~C30의 알킬기, C3~C50의 사이클로알킬기, C2~C30의 알케닐기, C3~C50의 사이클로알케닐기, C2~C30의 알키닐기, C5~C50의 사이클로알키닐기, 시아노기, 실릴기, C1~C20의 알콕시기, C6~C60의 아릴기, C3~C60의 헤테로아릴기 및 C7~C60의 아릴알킬기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환된 경우를 포함한다.

본 명세서에서 "이들의 조합"이란 별도의 정의가 없는 한, 둘 이상의 치환기가 연결되거나 축합되어 결합되어 있는 것을 의미한다.

본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 화합물 또는 치환기 내에 헤테로 원자를 포함함을 의미하고, 상기 헤테로 원자는 N, O, S, P 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 하나일 수 있다. 예를 들어, 상기 하나의 화합물 또는 치환기 내에 헤테로 원자를 1 내지 3 포함하고, 나머지는 탄소인 경우를 의미할 수 있다.

본 발명의 일 구현예에서, 신규한 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계발광 화합물을 제공한다.

<화학식 1>



상기 식에서,

R1 내지 R8은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1~C20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1~C20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6~C20의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C6~C20의 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 원자수 C6~C20의 헤테로아릴기를 나타내고,

상기 R1 내지 R8이 치환된 경우의 치환기는 C1~C30의 알킬기 및 C6~C30의 아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된

적어도 하나이고,

[0032] L은 단일 결합 또는 연결기를 나타내고, 상기 연결기는 치환 또는 비치환된 C6-C60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C2-C60의 헤테로시클로알킬렌기 및 이들의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나이고,

[0033] 상기 L이 치환된 경우의 치환기는 C1-C30의 알킬기 및 C6-C30의 아릴기로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나이고;

[0034] R은 치환 또는 비치환된 C6-C60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 헤테로시클로알킬기, 또는 C3-C50의 헤테로아릴기이고,

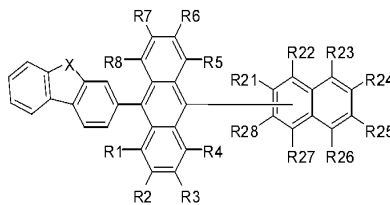
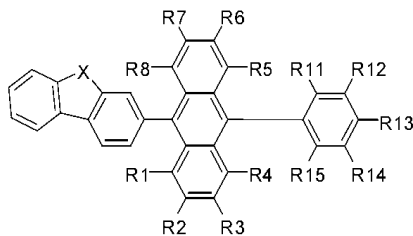
[0035] 상기 R이 치환된 경우의 치환기는 C1-C30의 알킬기 및 C6-C30의 아릴기 아릴기로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나이고,

[0036] X는 산소원자이다.

[0037] 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 8 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0038] <화학식 2>

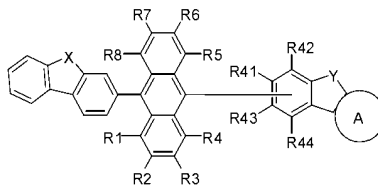
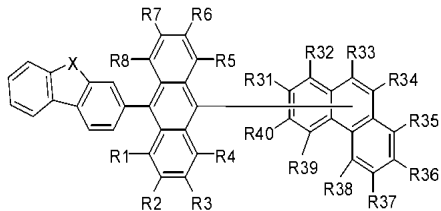
<화학식3>



[0039]

[0040] <화학식 4>

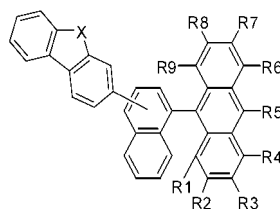
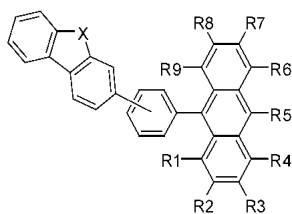
<화학식5>



[0041]

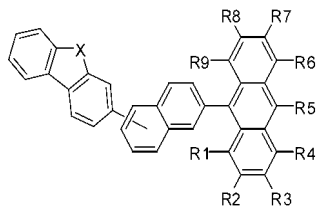
[0042] <화학식 6>

<화학식7>



[0043]

[0044] <화학식8>



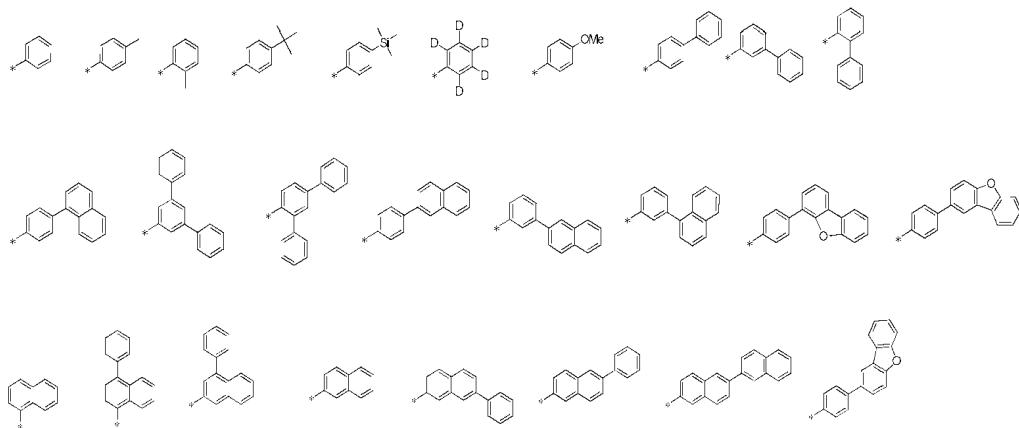
[0045]

[0046] 상기 A는 페닐기, 나프틸기 또는 페난트렌기이고,

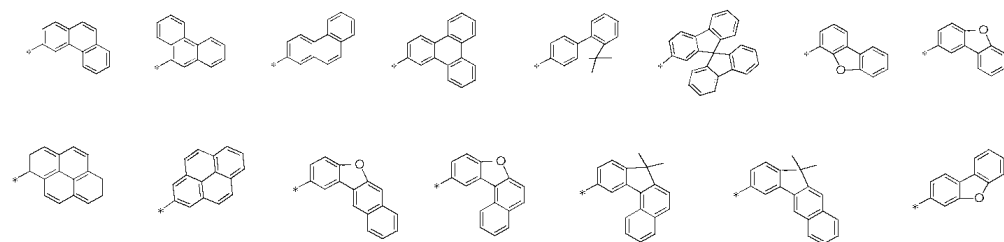
[0047] 상기 R1 내지 R44는, 각각 독립적으로, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 페난트렌기, 플로렌기, 디벤조퓨란기, 콰이렌기, 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6-C60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C3-C60의 헤테로시클로알킬기, 또는 C3-C50의 헤테로아릴기이고,

[0048] 상기 R1 내지 R44가 치환된 경우의 치환기는 C1-C30의 알킬기 또는 C6-C30의 아릴기이다.

[0049] 상기 화학식 1에서, 상기 R은, 구체적으로, 하기 구조식으로 표시되는 기 중 어느 하나일 수 있다.



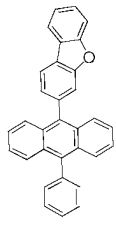
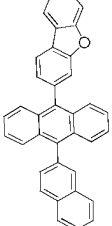
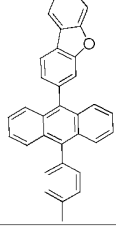
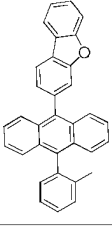
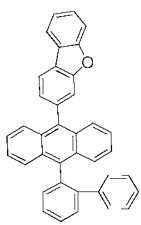
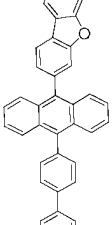
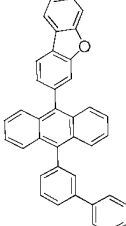
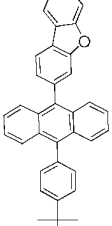
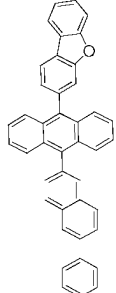
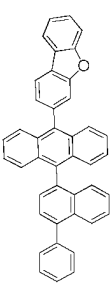
[0050]



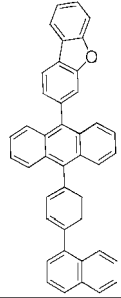
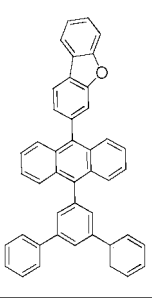
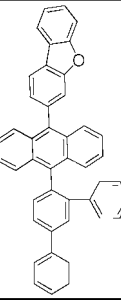
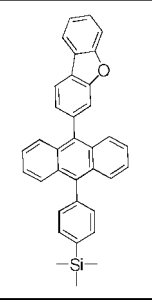
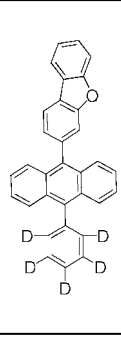
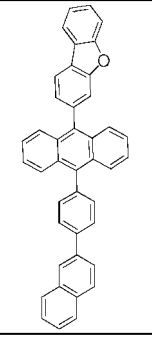
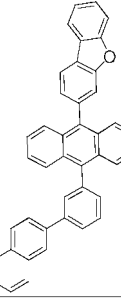
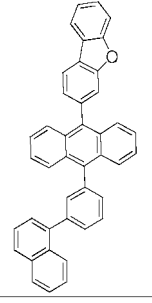
[0051]

[0052] 예를 들어, 상기 유기 전계발광 화합물은 하기 표 1에 기재된 1 내지 112 중의 어느 하나의 화합물 (이하, 화합물 1 등이라 함)일 수 있다.

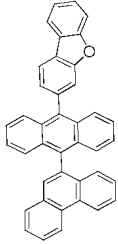
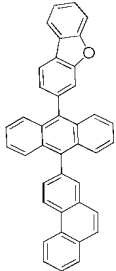
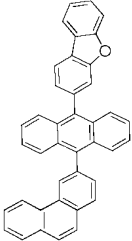
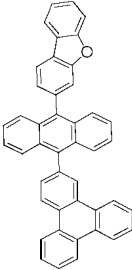
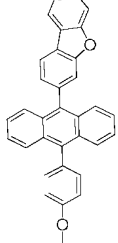
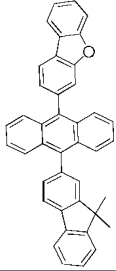
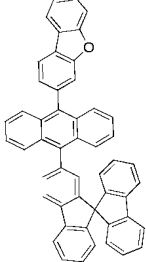
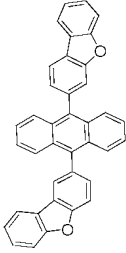
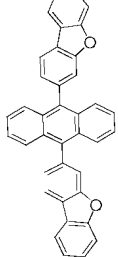
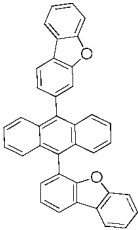
표 1

1		2	
3		4	
5		6	
7		8	
9		10	

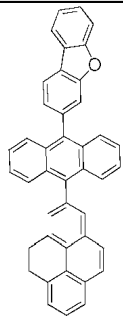
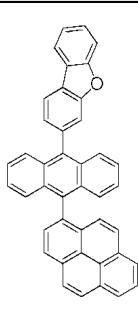
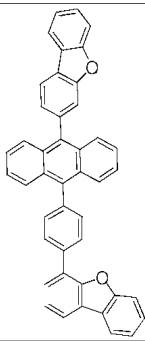
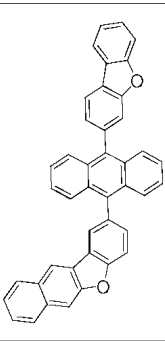
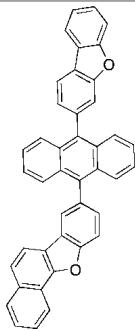
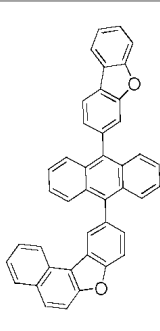
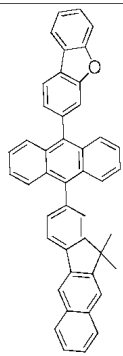
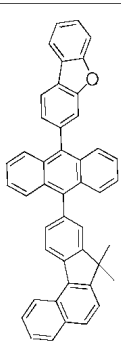
[0053]

11		12	
13		14	
15		16	
17		18	

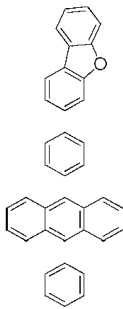
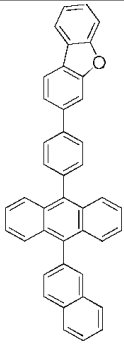
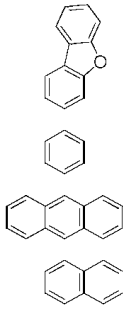
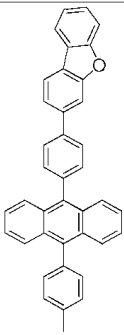
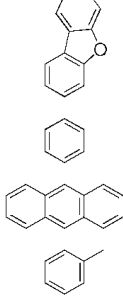
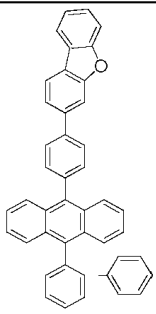
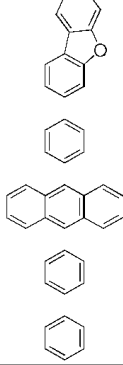
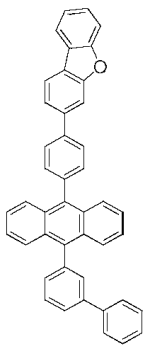
[0054]

19		20	
21		22	
23		24	
25		26	
27		28	

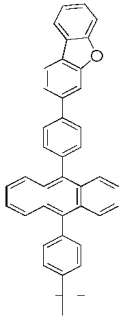
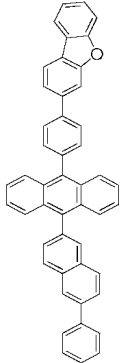
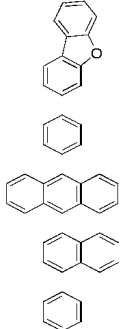
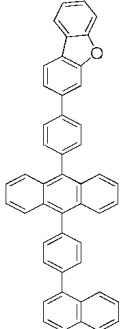
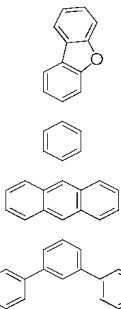
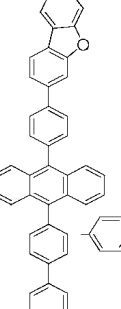
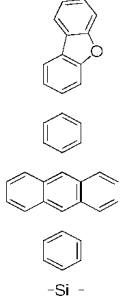
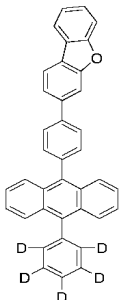
[0055]

29		30	
31		32	
33		34	
35		36	

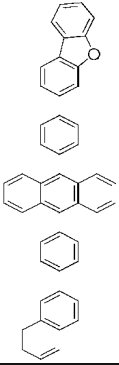
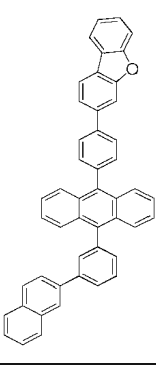
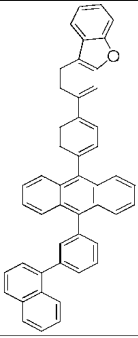
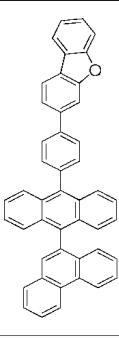
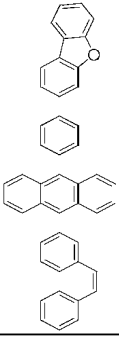
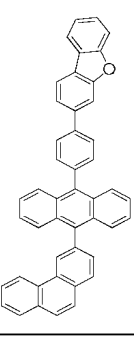
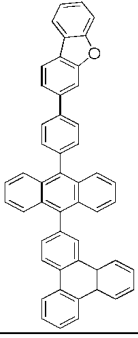
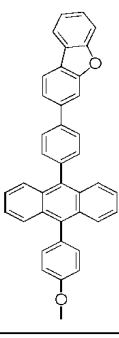
[0056]

37		38	
39		40	
41		42	
43		44	

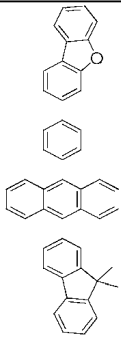
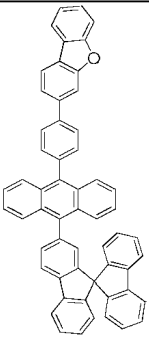
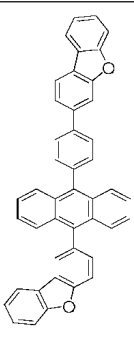
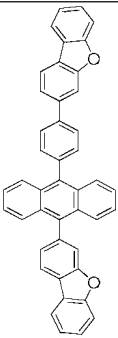
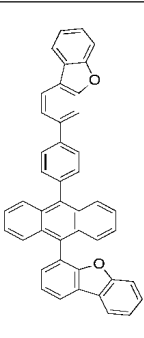
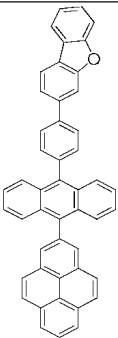
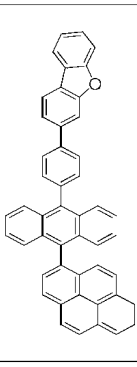
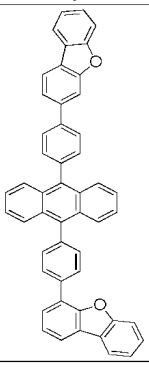
[0057]

45		46	
47		48	
49		50	
51		52	

[0058]

53		54	
55		56	
57		58	
59		60	

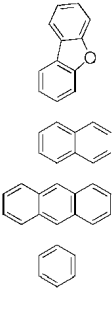
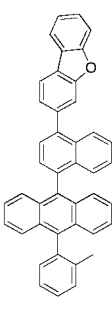
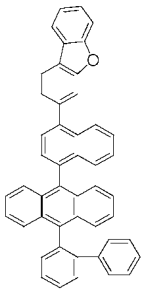
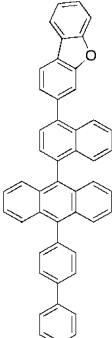
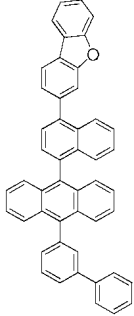
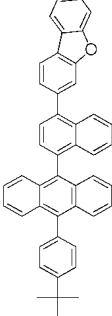
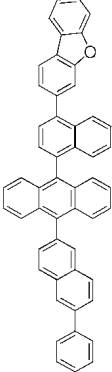
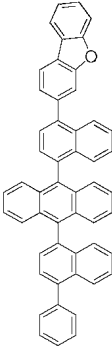
[0059]

61		62	
63		64	
65		66	
67		68	

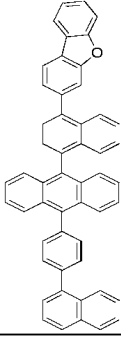
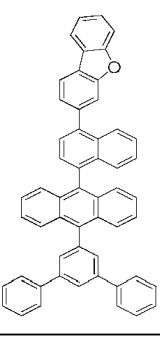
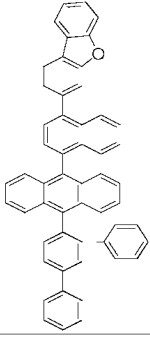
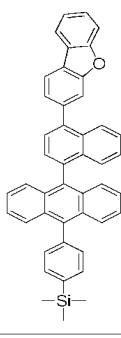
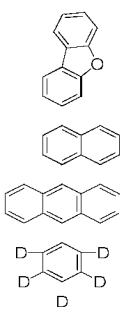
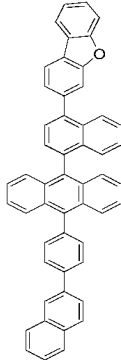
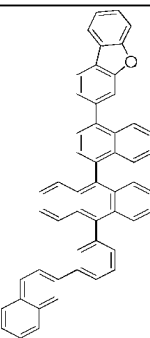
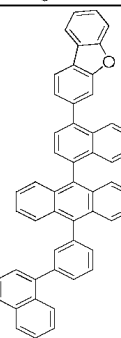
[0060]

69		70	
71		72	
73		74	
75		76	

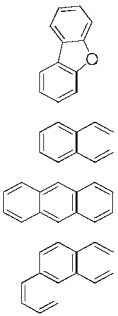
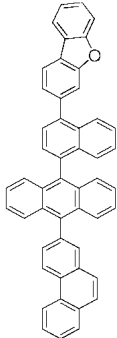
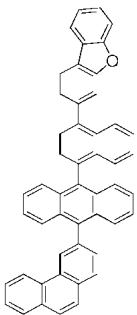
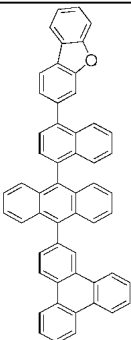
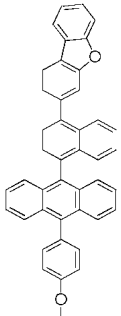
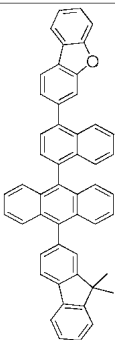
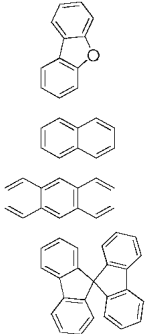
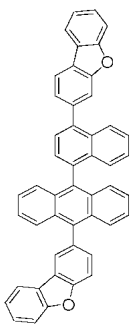
[0061]

77		78	
79		80	
81		82	
83		84	

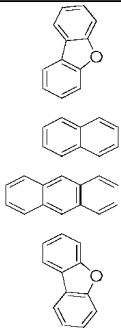
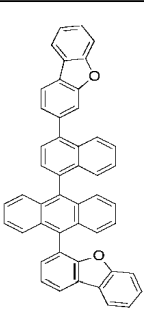
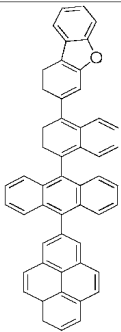
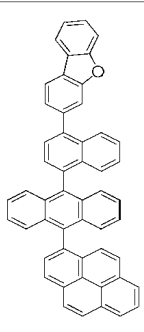
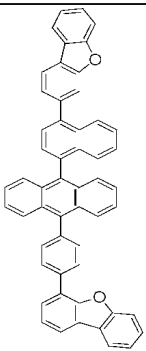
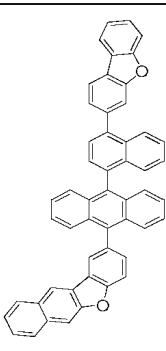
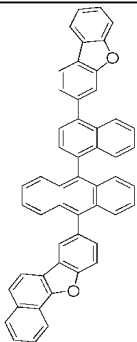
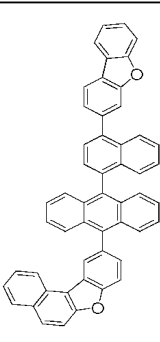
[0062]

85		86	
87		88	
89		90	
91		92	

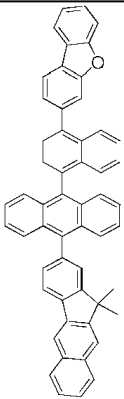
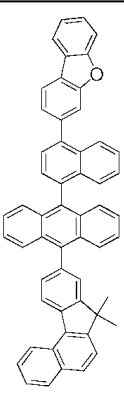
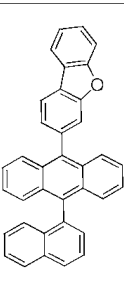
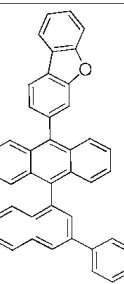
[0063]

93		94	
95		96	
97		98	
99		100	

[0064]

101		102	
103		104	
105		106	
107		108	

[0065]

109		110	
111		112	

[0066]

[0067] 상기 유기 전계발광 화합물은 유기 전계발광 소자용 유기막 재료로 사용될 수 있다.

[0068] 상기 유기막 재료는, 구체적으로, 발광 호스트, 발광 도판트, 정공수송층, 전자수송층, 정공차단층 또는 전자차단층 재료일 수 있다.

[0069] 본 발명의 다른 구현예에서, 음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 포함하는 1 이상의 유기 박막층이 형성되어 있는 유기 전계발광 소자에 있어서, 상기 유기 박막층의 적어도 한 층이 상기 유기 전계발광 화합물을 단독 또는 이들의 2종 이상의 조합을 포함하는 발광층을 포함하는 유기 전계발광 소자를 제공한다.

[0070] 상기 유기 전계발광 소자의 유기 박막층에 포함되는 상기 유기 전계발광 화합물은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이고, 그에 대한 상세한 설명은 전술한 바와 같다.

[0071] 상기 유기 박막층은 공지된 제조 방법에 따라서 제조될 수 있다.

[0072] 일 구현예에서, 상기 유기 박막층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 유기 전계발광 화합물을 포함할 수 있고, 상기 유기 전계발광 화합물은 발광층 중 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도판트, 또는 형광 도판트 재료로서 포함될 수 있다.

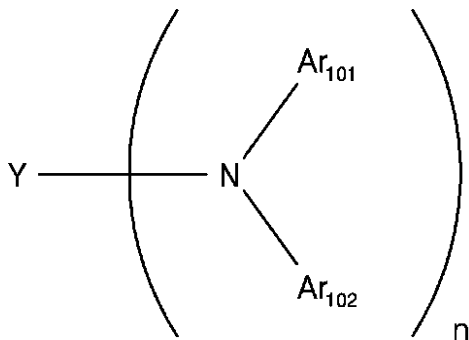
[0073] 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물, 이외에, 추가적으로, 공지된 재료의 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도판트, 또는 형광 도판트 재료를 더 포함할 수 있다.

[0074] 다른 구현예에서, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계발광 화합물을 호스트 재료로서 적어도 1종 이상 포함하고, 상기 발광층은 적어도 1종 이상의 도판트 재료를 더 포함할 수 있다.

[0075] 구체적으로, 상기 도판트 재료가 아릴아민 화합물, 더욱 구체적으로, 스티릴아민 화합물, 일 수 있다.

[0076] 예를 들어, 상기 도판트 재료가 하기 화학식 9로 표시되는 축합 다환 아민 유도체일 수 있다.

[0077] <화학식 9>



[0078]

[0079] 상기 화학식 9에서,

[0080] Y는 C10~50의 치환 또는 비치환된 축합아릴기를 나타내고,

[0081] Ar101 및 Ar102는, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6~40의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C5 내지 C50의 헤테로아릴기를 나타내고,

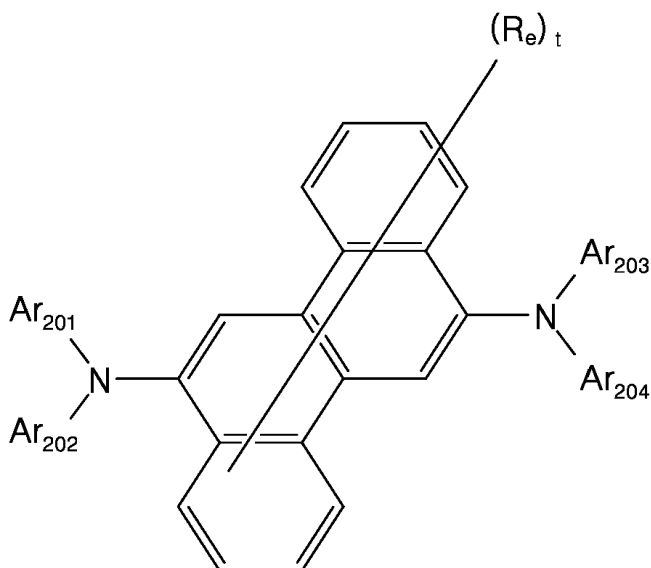
[0082] 상기 Ar101 및 Ar102가 치환된 경우의 치환기는 C1~C30의 알킬, C6~C30의 아릴기, 알콕시, 니트릴, 할로젠 및 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나이고,

[0083] n은 1 내지 4의 정수이다.

[0084] 상기 n이 2 이상인 경우 2개 이상의 Ar101는 각각 서로 독립적으로 정의되고, 마찬가지로, 2개 이상의 Ar102 역시 각각 서로 독립적으로 정의된다.

[0085] 예를 들어, 상기 축합 다환 아민 유도체가 하기 화학식 10으로 표시되는 축합 다환 아민 유도체일 수 있다.

[0086] <화학식 10>



[0087]

[0088] 상기 화학식 10에서,

[0089] Re는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 또는 비치환된 C1~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C2~50의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2~50의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C1~20의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~20의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1~20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 환 형성 C6~20의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 환 형성 C6~40의 아릴기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 C1~40의 알킬케르마늄기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 C6~50의 아릴케르마늄기를 나타내고,

[0090] 상기 Re가 치환된 경우의 치환기는 C1~C30의 알킬, C6~C30의 아릴기, 알콕시, 니트릴, 할로젠 및 아미노기로부

터 선택된 적어도 하나이고,

[0091] t는 1 내지 10의 정수를 나타내고,

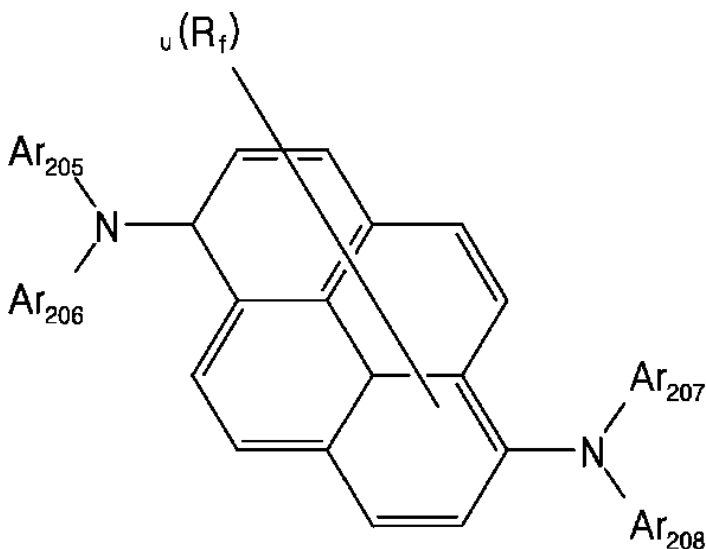
[0092] Ar₂₀₁ 내지 Ar₂₀₄는 각각 치환 또는 비치환된 환 형성 C₆~40의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 환 형성 원자 수 5 내지 50의 복소환기를 나타내고,

[0093] 상기 Ar₂₀₁ 내지 Ar₂₀₄가 치환된 경우의 치환기는 C₁~C₃₀의 알킬, C₆~C₃₀의 아릴기, 알콕시, 니트릴, 할로젠 및 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나이다.

[0094] 상기 Re가 2 이상 포함된 경우 2개 이상의 Re는 각각 서로 독립적으로 정의된다.

[0095] 예를 들어, 상기 축합 다환 아민 유도체가 하기 화학식 11으로 표시되는 축합 다환 아민 유도체일 수 있다.

[0096] <화학식 11>



[0097]

[0098] 상기 화학식 11에서,

[0099] R_f는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 또는 비치환된 C₁~20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂~40의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂~40의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₂~20의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃~20의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁~20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₆~20의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆~20의 아릴기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 C₁~40의 알킬게르마늄기, 또는 치환 또는 비치환된 C₆~50의 아릴게르마늄기를 나타내고,

[0100] 상기 R_f가 치환된 경우의 치환기는 C₁~C₃₀의 알킬, C₆~C₃₀의 아릴기, 알콕시, 니트릴, 할로젠 및 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나이고,

[0101] u는 1 내지 8의 정수를 나타내고,

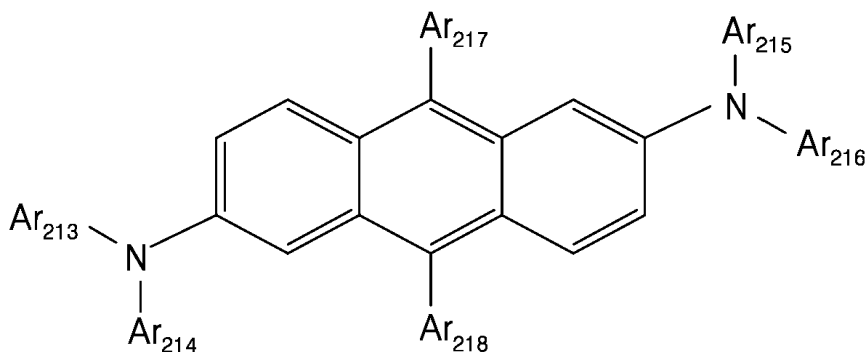
[0102] Ar₂₀₅ 내지 Ar₂₀₈는, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₆~50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂~50의 헤테로아릴기를 나타내고,

[0103] 상기 Ar₂₀₁ 내지 Ar₂₀₄가 치환된 경우의 치환기는 C₁~C₃₀의 알킬, C₆~C₃₀의 아릴기, 알콕시, 니트릴, 할로젠, 및 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나이다.

[0104] 상기 R_f가 2 이상 포함된 경우 2개 이상의 R_f는 각각 서로 독립적으로 정의된다.

[0105] 예를 들어, 상기 축합 다환 아민 유도체가 하기 화학식 12로 표시되는 축합 다환 아민 유도체일 수 있다.

[0106] <화학식 12>



[0107]

[0108] 상기 화학식 12 에서,

[0109] Ar213 내지 Ar218은, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6~50의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2~50의 헤테로아릴기를 나타내고,

[0110] 상기 Ar213 내지 Ar218이 치환된 경우의 치환기는 C1~C30의 알킬, C6~C30의 아릴기, 알콕시, 니트릴, 할로젠 및 아미노기로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나이다.

[0111] 상기 유기 박막층은 필요한 용도에 따라서 적절히 정공수송층, 정공주입층, 정공차단층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자차단층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상을 포함할 수 있다.

[0112] 상기 정공수송층, 정공주입층, 정공차단층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자차단층은, 각각, 공지된 물질을 사용하여 형성되거나, 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계발광 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다.

[0113] 도 1은 일 구현예에 따른 상기 유기 전계발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

[0114] 상기 유기 전계발광 소자는 상기 유기 전계발광 화합물을 포함하는 상기 발광층에 대하여 추가적으로 청색, 적색, 또는 녹색 발광을 하는 추가적인 발광층을 적어도 하나를 더 포함하여 백색 발광을 할 수 있다.

[0115] 본 발명의 또 다른 구현예에서, 상기 유기 전계발광 소자를 포함하는 전자 기기를 제공한다.

[0116] 상기 유기 전계발광 소자는 다양한 응용분야에 적용될 수 있다. 예를 들어, 상기 유기 전계발광 소자가 적용된 상기 전자 기기는 유기 집적 회로 (O-IC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-캐치 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 또는 유기 전계발광 소자 (OLED)일 수 있다.

[0117] 이하 본 발명의 실시예 및 비교예를 기재한다. 그러한 하기한 합성예는 본 발명의 일 합성예일뿐, 본 발명이 하기한 합성예에 한정되는 것은 아니다.

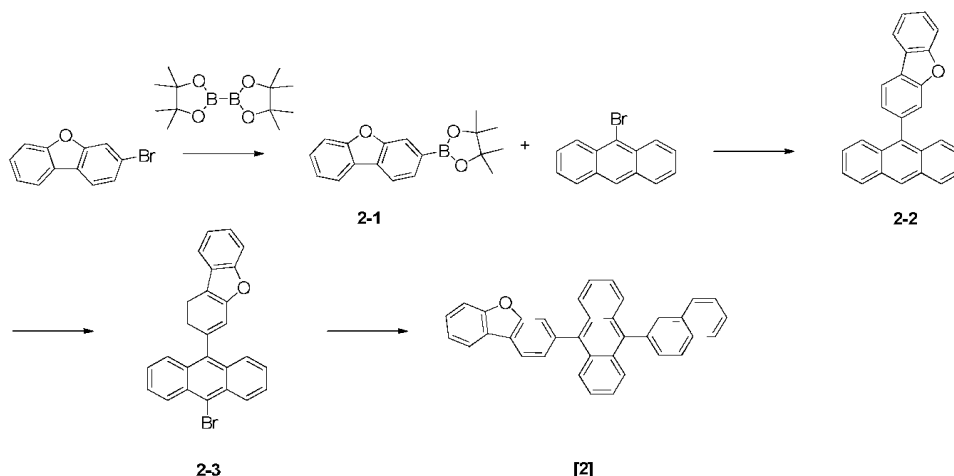
[0118] (실시예)

[0119] 이하에서, 반응예 및 비교예를 구체적으로 예시하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다. 이하의 반응예에서 중간체 화합물은 최종 생성물의 번호에 일련번호를 추가하는 방식으로 표기한다. 예를 들어, 화합물 1은 화합물 [1] 로 상기 화합물의 중간체 화합물은 [1-1] 등으로 표기한다. 본 명세서에서 화합물의 번호는 상기 표 1에 기재된 화학식의 번호로서 표기한다. 예를 들어, 표 1에서 1로 표시된 화합물은 화합물 1로 표기한다.

[0120] **합성예 1: 화합물 [2]의 제조**

[0121] 하기 반응식 1에 따라 화합물 [2]를 합성하였다.

[0122] [반응식 1]



[0123]

[0124] **중간체 화합물 [2-1]의 제조**

[0125] 1L 반응플라스크에 3-브로모디벤조[b,d]퓨란 20g(80.94mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-옥타메틸-2,2'-bi(1,3,2-옥사보레인) 26.7g(105.22mmol), [1,1'-비스 (디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐 1.2g(1.62mmol), 포타슘 아세테이트 23.8g(242.83mmol), 1,4-디옥세인 400ml, 증류수 100ml를 가하고 24시간 환류 교반하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트, 증류수로 추출, 무수황산 마그네슘 처리하여 여과하고, 여과액은 감압 농축한 뒤, 디클로로메탄, 헥산, 아세톤, 메탄올을 이용하여 재결정화 하여 미색고체의 목적화합물 [2-1] 16.3g (69%)을 제조하였다.

[0126] **중간체 화합물 [2-2]의 제조**

[0127] 500mL 반응플라스크에 9-브로모안트라센 10g(38.89mmol), 화합물 [2-1] 14.9g(50.56mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 0.9g(0.78mmol), 포타슘카보네이트 10.75g(77.78mmol), 톨루엔 200ml, 증류수 40ml를 가하고 24시간 환류 교반하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트, 증류수로 추출, 무수황산 마그네슘 처리하여 여과하고, 여과액은 감압 농축한 뒤, 디클로로메탄, 헥산, 아세톤, 메탄올을 이용하여 재결정화하여 미색고체의 목적화합물 [2-2] 11.1g (83%)을 제조하였다.

[0128] **중간체 화합물 [2-3]의 제조**

[0129] 500mL 반응플라스크에 화합물 [2-2] 11g(31.94mmol), N-브로모석신이미드 6.3g(35.13mmol)에 디클로로메탄 250ml를 가하고 10시간 실온에서 교반하였다. 반응 종료 후 디클로로메탄, 증류수로 추출하여 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과하고, 실리카겔 크로마토그래프로 분리정제하여, 밝은 노란색 고체의 중간체 화합물 [2-3] 12.3g (91%)을 제조하였다.

[0130]

[0131] **화합물 [2]의 제조**

[0132] 500mL 반응플라스크에 화합물 [2-3] 12g(28.35mmol), 2-나프탈렌 보론산 5.4g(31.18mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 0.66g(0.02mmol), 포타슘카보네이트 7.8g(56.70mmol), 톨루엔 150ml, 증류수 30ml를 가하고 24시간 환류 교반하였다. 반응 종료 후 여과하고, 아세톤, 톨루엔을 이용하여 재결정화 하여 미색고체의 목적 화합물 [2] 6.9g (52%)을 제조하였다.

[0133] ^1H NMR (400 MHz, THF-d_8): δ 8.33(d, 1H), 8.21~8.15(m, 2H), 8.09~7.97(m, 3H), 7.78~7.52(m, 11H), 7.45(t, 1H), 7.37~7.31.(m, 4H)

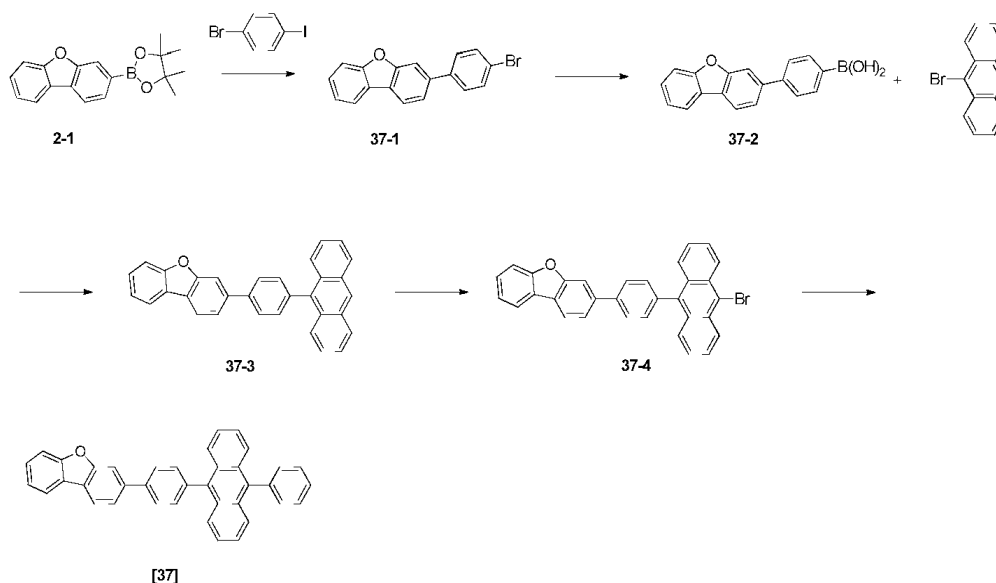
[0134] MS/FAB : 470(M^+)

[0135] 도 3은 상기와 같이 제조된 화합물 [2]의 ^1H -NMR 측정 결과이다.

[0136] [합성예 2] 화합물 [37]의 제조

[0137] 하기 반응식 2에 따라 화합물 [37]을 합성하였다.

[0138] [반응식 2]



[0139]

[0140] 중간체 화합물 [37-1]의 제조

[0141] 1L 반응플라스크에 1-브로모-4-아이오도벤젠 28.8g(101.99mmol), 화합물 [2-1] 20g(67.99mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 1.6g(1.36mmol), 포타슘카보네이트 14.1g(101.99mmol), 톨루엔 400ml, 증류수 50ml를 가하고 24시간 환류 교반하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트, 증류수로 추출, 무수황산 마그네슘 처리하여 여과하고, 여과액은 감압 농축한 뒤, 디클로로메탄, 헥산을 이용하여 실리카겔 크로마토그래프로 분리정제하여, 미색고체의 중간체 화합물 [37-1] 13.6g (62%)을 제조하였다.

[0142] 중간체 화합물 [37-2]의 제조

[0143] 1L 반응플라스크에 화합물 [37-1] 13.6g(42.08mmol) 을 무수테트라히드로퓨란 400mL로 녹인 후 -78°C 에서 교반하였다. n-부틸리튬(2.5M in hexane) 20.2mL(50.50mmol)를 동온도에서 적가시키고 30분 후에 트리메틸 보레이트 5.6mL(50.50mmol)을 적가하였다. 반응온도를 상온까지 올리고 에틸아세테이트와 포화암모늄 수용액으로 추출한 후 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과하고, 여과액을 감압 농축한 뒤 디클로로메탄, 헥산을 이용하여 재결정화하여 미색고체의 중간체 화합물 [37-2] 7.0g(58%)을 제조하였다

[0144] 중간체 화합물 [37-3]의 제조

[0145] 중간체 화합물 [37-2] 6.7g(23.33mmol), 9-브로모안트라센 5g(19.45mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 0.4g(0.39mmol), 포타슘카보네이트 4.0g(29.17mmol), 톨루엔 150ml, 증류수 30ml를 가하고 [합성예 1]의 방법을 이용하여 미색 고체의 중간체 화합물 [37-3] 7.1g (87%)을 제조하였다.

[0146]

[0147] **중간체 화합물 [37-4]의 제조**

[0148] 중간체 화합물 [37-3] 7.1g(16.88mmol), N-브로모석신이미드 3.6g(20.26mmol)에 디클로로메탄 150ml를 가하여 합성예 1의 방법을 이용하여 밝은 노란색 고체의 중간체 화합물 [37-4] 7.7g (91%)을 제조하였다.

[0149] **화합물 [37]의 제조**

[0150] 250mL 반응플라스크에 화합물 [37-4] 7.7g(15.42mmol), 페닐 보론산 2.3g(18.50mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 0.36g(0.02mmol), 포타슘카보네이트 7.8g(56.70mmol), 톨루엔 150ml, 증류수 30ml를 [합성예 1]의 방법을 이용하여 미색고체의 목적 화합물 [37] 3.5g (45%)을 제조하였다.

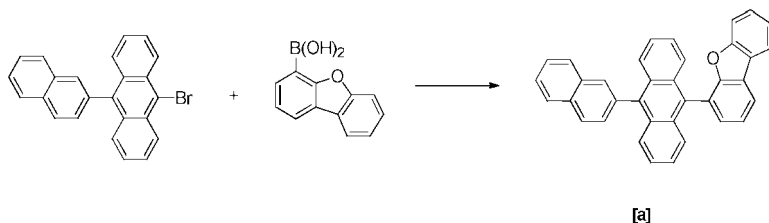
[0151] ^1H NMR (400 MHz, THF- d_8): δ 7.85~7.79(m, 6H), 7.65(d, 1H), 7.57~7.56(d, 2H), 7.42~7.15(m, 15H)

[0152] MS/FAB : 496(M^+)

[0153] **비교합성예 1: 비교 화합물 [a]의 제조**

[0154] 하기 반응식 3에 따라 화합물 [a]를 합성하였다.

[0155] [반응식 3]



[0156]

[0157] **화합물 [a]의 제조**

[0158] 250mL 반응플라스크에 화합물 9-브로모-10-(나프탈렌-2-yl)안트라센 5g(13.05mmol), 디벤조[b,d]퓨란-4-일]보론산 3.3g(15.65mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 0.30g(0.26mmol), 포타슘카보네이트 2.7g(19.57mmol), 톨루엔 100ml, 증류수 20ml를 합성예 1의 방법을 이용하여 미색고체의 목적 화합물 [a] 3.1g (51%)을 제조하였다.

[0159] ^1H NMR (400 MHz, THF- d_8): δ 8.34(d, 1H), 8.22~7.97(m, 5H), 7.82~7.60(m, 9H), 7.47~7.28(m, 7H)

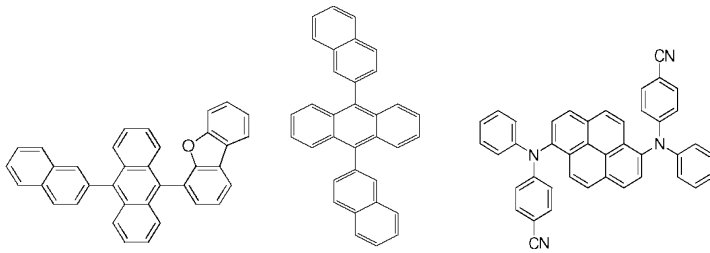
[0160] MS/FAB : 470(M^+)

[0161] 도 2는 상기와 같이 제조된 화합물 [a]의 ^1H -NMR 측정 결과이다.

[0162] **비교예 1-2**

[0163] 하기 화학식 a 및 b로 표시되는 화합물 a 및 b를 형광 청색 호스트로 사용하고, 하기 화학식 d로 표시되는 화합물 d를 형광 청색 도판트로 사용하고, 2-TNATA(4,4',4''-tris(N-naphthalen-2-yl)-N-phenylamino)-triphenylamine)을 정공주입층 물질로 사용하고, α-NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)을 정공수송층 물질로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기발광소자를 제작하였다: ITO/2-TNATA(60 nm)/α-NPD(30 nm)/화합물 a 또는 화합물 b + 화합물 c(30 nm)/Alq₃(25 nm)/Liq(1 nm)/Al(100 nm).

[0164] <화학식 a> <화학식 b> <화학식 c>



[0165]

[0166] (비교예 1)

[0167] 애노드는 코닝(Corning)사의 15Ω/cm² (1000Å) ITO 유리 기판을 25 mm x 25 mm x 0.7 mm크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수한 물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TNATA를 진공 증착하여 60 nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α-NPD를 진공 증착하여 30 nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화학식 a로 표시되는 화합물 및 화학식 c로 표시되는 화합물(도핑율:4wt%)를 진공 증착하여 30 nm두께의 발광층을 형성하였다. 이후, 상기 발광층 상부에 Alq₃ 화합물을 25 nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 Liq 1 nm (전자주입층)과 Al 100 nm (캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 도 1에 나타난 바와 같은 유기 전계발광 소자를 제조하였다. 이를 비교샘플 1이라고 한다.

[0168] (비교예 2)

[0169] 애노드는 코닝(Corning)사의 15Ω/cm² (1000Å) ITO 유리 기판을 25 mm x 25 mm x 0.7 mm크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수한 물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TNATA를 진공 증착하여 60 nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α-NPD를 진공 증착하여 30 nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화학식 b로 표시되는 화합물 및 화학식 c로 표시되는 화합물(도핑율:4wt%)를 진공 증착하여 30 nm두께의 발광층을 형성하였다. 이후, 상기 발광층 상부에 Alq₃ 화합물을 25 nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 Liq 1 nm (전자주입층)과 Al 100 nm (캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 도 1에 나타난 바와 같은 유기 전계발광 소자를 제조하였다. 이를 비교샘플 2이라고 한다.

[0170] **실시예 1~14**

[0171] 상기 비교예 1-2 중에서, 실시예 1-14에서는 형광 청색 호스트 화학식 a 및 b 대신 상기 표 1의 화합물 2, 5, 6, 7, 10, 11, 12, 13, 16, 17, 28, 38, 39 및 111들을 형광 청색 호스트로 각각 이용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 ITO/2-TNATA(60nm)/α-NPD(30 nm)/[화합물 2, 5, 6, 7, 10, 11, 12, 13, 16, 17, 28, 38, 39 또는 111 + 화합물 c(4wt%)](30 nm)/Alq₃(25 nm)/Liq(1 nm)/Al(100 nm)의 구조를 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조하였다. 이를 각각 샘플 1 내지 14 이라고 한다.

[0172] **평가예 1: 비교샘플 1-2 및 샘플 1-10의 발광 특성 평가**

[0173] 비교샘플 1-2 및 샘플 1-14 에 대하여, Keithley sourcemeter “2400”, KONIKA MINOLTA “CS-2000” 을 이용하여 발광휘도, 발광효율, 발광피크를 각각 평가하여, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다. 상기 샘플들은 455~463nm 범위에서 청색 발광피크값을 보여주었다.

표 2

[0174]

샘플 No.	형광 청색 호스트 No.	형광 청색 도판트 No.	전압 OP. V	휘도 [cd/m ²]	효율 [cd/A]	발광피크 [nm]
비교샘플 1	a	c	4.6	460	4.60	463
비교샘플 2	b	c	5.1	435	4.35	456, 484
1	2	c	4.4	509	5.09	457
2	5	c	4.6	482	4.82	455
3	6	c	4.8	489	4.89	462
4	7	c	4.5	534	5.34	462
5	10	c	4.4	505	5.05	456
6	11	c	4.5	524	5.24	461
7	12	c	4.4	493	4.93	458
8	13	c	4.6	475	4.75	461
9	16	c	4.5	513	5.13	460
10	17	c	4.5	471	4.71	455
11	28	c	4.6	512	5.12	457
12	38	c	4.4	529	5.29	461
13	39	c	4.6	523	5.23	459
14	111	c	4.4	476	4.76	462

[0175] 상기 표 2에 보여지는 바와 같이 샘플 1-14는 비교샘플 1-2 에 비하여 향상된 발광 특성을 나타내었다.

[0176] **평가예 2: 비교샘플 1-2 및 샘플 1-14의 수명 특성 평가**

[0177] 또한, 비교샘플 1-2 및 샘플 1-14에 대하여, 맥사이언스사의 M6000S 수명측정장치를 이용하여 초기휘도 700 nit 를 기준으로 휘도가 97%에 도달하는 시간(LT97)을 각각 측정하여, 그 결과를 하기 표 3에 나타내었다.

[0178] 도 4는 비교샘플 1-2 및 샘플 1, 3, 4, 6 및 8에 대한 결과로서 초기 휘도에 대한 % 휘도가 97%에 도달하기 까 지를 시간에 따라 나타낸 그래프이다.

표 3

[0179]

샘플 No.	형광 청색 호스트 No.	형광 청색 도판트 No.	수명 Time[Hours]
비교샘플 1	a	c	55
비교샘플 2	b	c	45
1	2	c	72
2	5	c	65
3	6	c	86
4	7	c	85
5	10	c	76
6	11	c	61
7	12	c	69
8	13	c	80
9	16	c	87

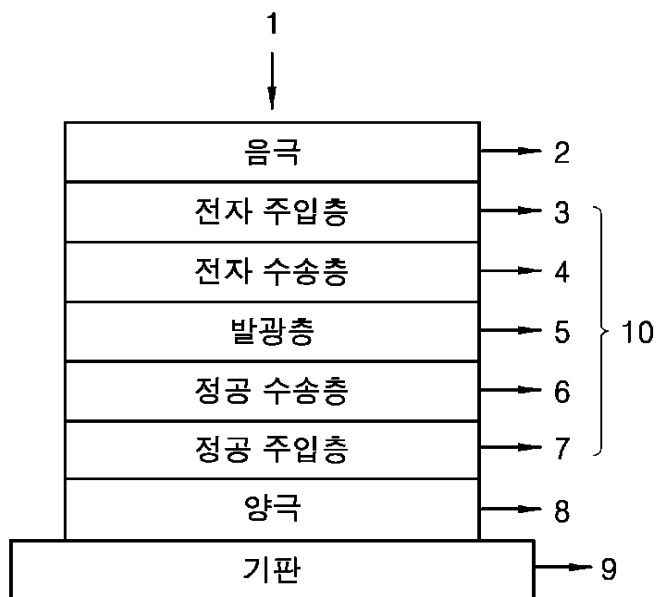
10	17	c	67
11	28	c	73
12	38	c	60
13	39	c	89
14	111	c	70

[0180] 상기 표 2 에 보여지는 바와 같이 샘플 1-14는 비교샘플 1-2 에 비하여 향상된 수명 특성을 나타내었다. 특히 디벤조퓨란의 위치에 따라 평가 결과 4번 위치 보다는 3번 위치로 치환된 상기 화합물들이 우수한 성능과 수명을 나타내었다.

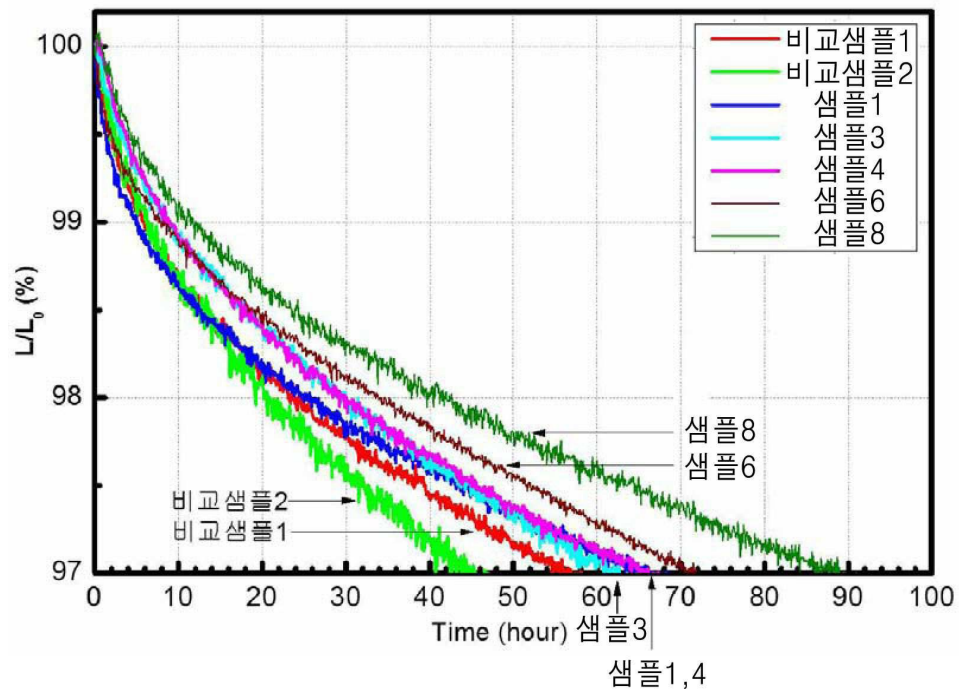
[0181] 이상에서 본 발명의 바람직한 실시예들에 대하여 상세하게 설명하였지만 본 발명의 권리 범위는 이에 한정되는 것은 아니고 다음의 청구 범위에서 정의하고 있는 본 발명의 기본 개념을 이용한 당업자의 여러 변형 및 개량 형태 또한 본 발명의 권리 범위에 속하는 것이다.

도면

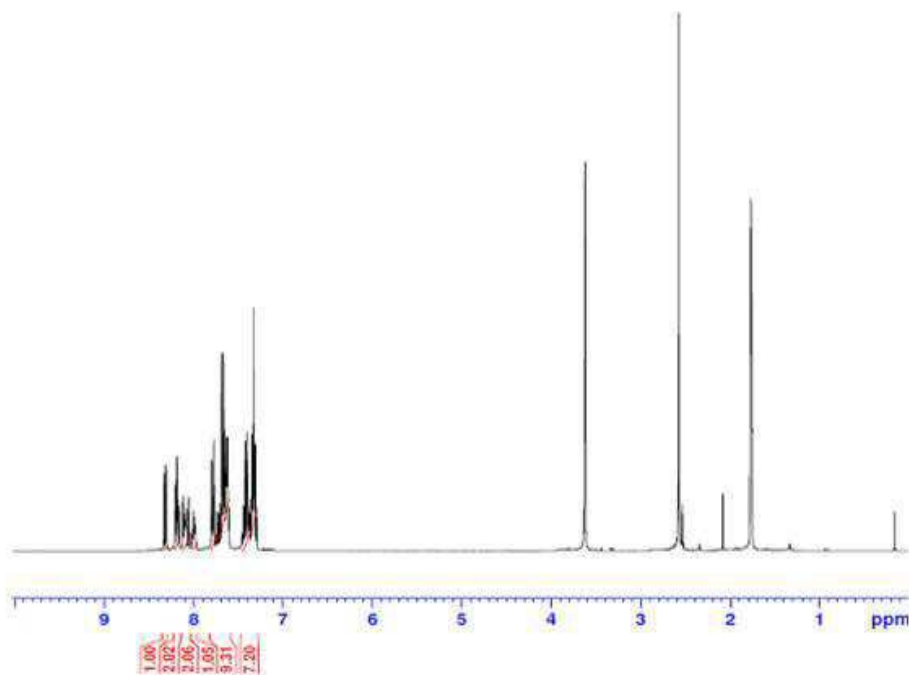
도면1



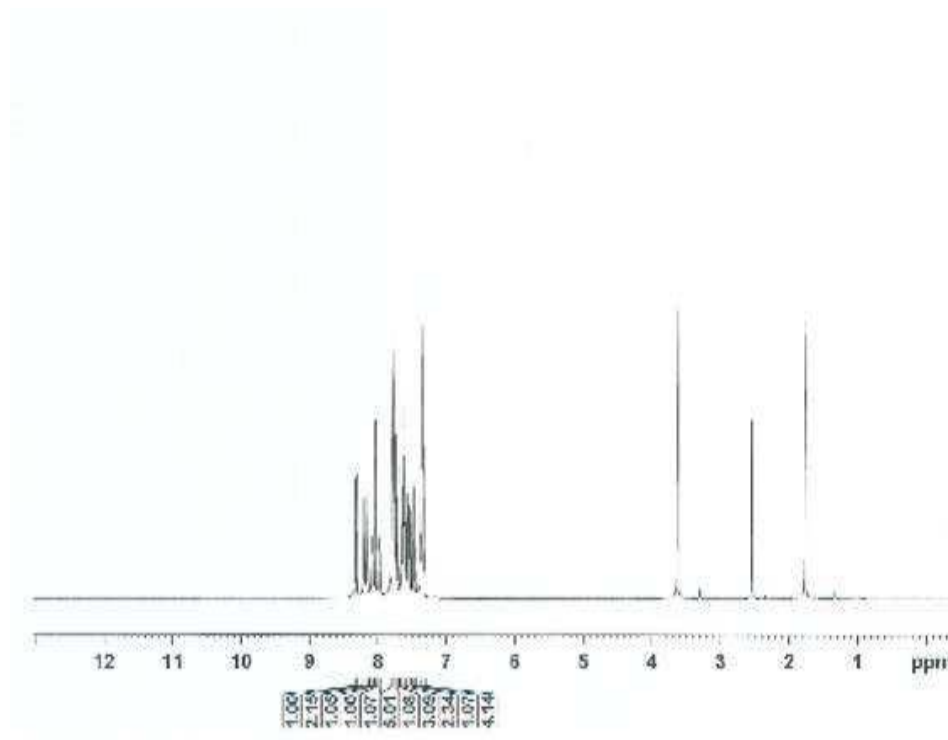
도면2



도면3



도면4



专利名称(译)	标题：有机电致发光化合物和有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020170039020A	公开(公告)日	2017-04-10
申请号	KR1020150138084	申请日	2015-09-30
[标]申请(专利权)人(译)	皮皮有限公司		
申请(专利权)人(译)	公司与皮肤接触.		
当前申请(专利权)人(译)	公司与皮肤接触.		
[标]发明人	JI SOUNG KANG 강지승 HA NA SEO 서하나 HEE JIN LEE 이희진 JUN SU AHN 안준수 HYUN CHUL LIM 임현철 BYUNG WOO MIN 민병우 DO HWAN AHN 안도환 DAE KYUN LEE 이대균 HO GI BAE 배호기 JUNG BOK AN 안중복		
发明人	강지승 서하나 이희진 안준수 임현철 민병우 안도환 이대균 배호기 안중복		
IPC分类号	C09K11/06 C07D307/91 C07D407/10 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D307/91 C07D407/10 H01L51/50 C09K2211/1088		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

提供如下化学式1所示的有机电致发光化合物。003c # 化学式10 03e # imgtagRe @, 在上式中, R 1, R 1至R 8, L和X与化学式1中的定义相同。

