



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2012-0021203  
 (43) 공개일자 2012년03월08일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C09K 11/06* (2006.01) *H01L 51/54* (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2011-0083751  
 (22) 출원일자 2011년08월23일  
 심사청구일자 없음  
 (30) 우선권주장  
 1020100084658 2010년08월31일 대한민국(KR)

(71) 출원인  
**롬엔드하스전자재료코리아유한회사**  
 충남 천안시 백석동 736  
 (72) 발명자  
**안희춘**  
 서울특별시 노원구 노원로 564, 주공아파트 1002  
 동 407호 (상계동)  
**문두현**  
 경기도 화성시 병점중앙로 204, 104동 101호 (진  
 안동, 월드메르디앙)  
 (뒷면에 계속)  
 (74) 대리인  
**김종관, 권오식, 박창희**

전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 발명의 명칭 **신규한 유기 전자재료용 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자**

**(57) 요약**

본 발명은 신규한 유기 전자재료용 화합물 및 이를 포함하고 있는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 본 발명에 따른 유기 전자재료용 화합물은 기존 재료에 비해 발광 효율이 좋고 소자의 구동전압을 저하시키고 동시에 전력효율이 향상된 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

(72) 발명자

**윤석근**

경기도 수원시 영통구 신동 캐슬 205

**김남균**

경기도 용인시 수지구 용구대로 2720, 동성2차아파트 105동 1101호 (죽전동)

**조영준**

경기도 성남시 분당구 동판교로 275, 2단지 더이지더원 204-701 (삼평동, 봇들마을)

**권혁주**

서울특별시 강남구 학동로68길 29, - 105동 2003호 (삼성동, 삼성동 힐스테이트)

**이경주**

서울특별시 마포구 새창로8길 72, 210동 1001호 (도화동, 현대홈타운)

**김봉욱**

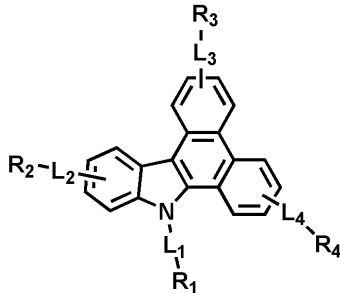
서울특별시 강남구 삼성로111길 8, - 208동 401호 (삼성동, 삼성동 힐스테이트)

**특허청구의 범위**

**청구항 1**

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전자재료용 화합물.

[화학식 1]



[상기 화학식 1에서,

L<sub>1</sub> 내지 L<sub>4</sub>는 서로 독립적으로 단일결합, (C6-C30)아릴렌 또는 (C2-C30)헤테로아릴렌이며;

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, 할로젠, 시아노, (C3-C30)시클로알킬, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C6-C30)아릴, (C1-C30)알콕시, (C6-C30)아릴옥시, (C2-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴티오, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 나이트로 또는 하이드록실이며;

상기 L<sub>1</sub> 내지 L<sub>4</sub>의 아릴렌, 헤테로아릴렌 및 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>의 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴은 서로 독립적으로 중수소, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, 할로젠, 시아노, (C3-C30)시클로알킬, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C6-C30)아릴, (C1-C30)알콕시, (C6-C30)아릴옥시, (C2-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴티오, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 나이트로 및 하이드록실로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상으로 더 치환될 수 있으며;

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

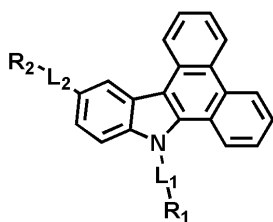
단, \*-L<sub>1</sub>-R<sub>1</sub> 이 수소인 경우는 제외된다.]

**청구항 2**

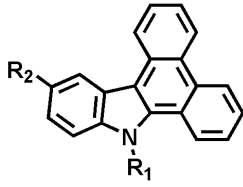
제 1항에 있어서,

하기 화학식 2 내지 5로부터 선택되는 유기 전자재료용 화합물.

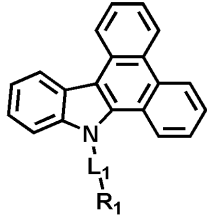
[화학식 2]



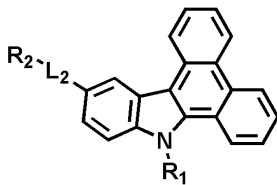
[화학식 3]



[화학식 4]



[화학식 5]

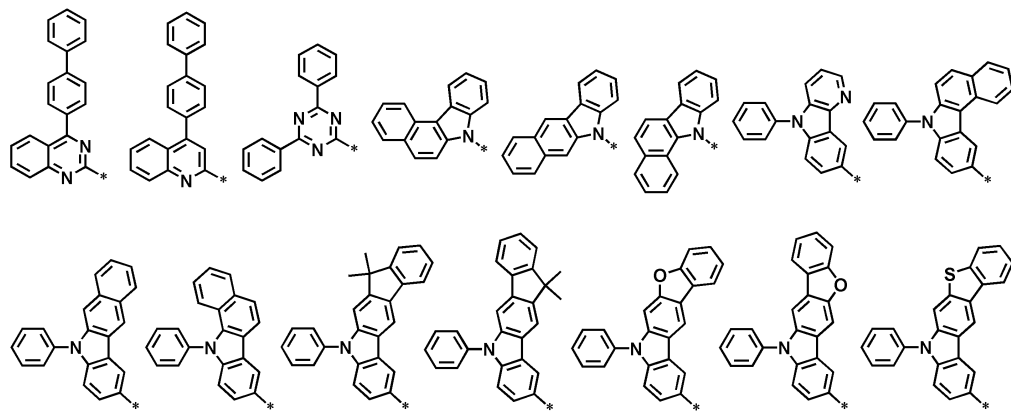


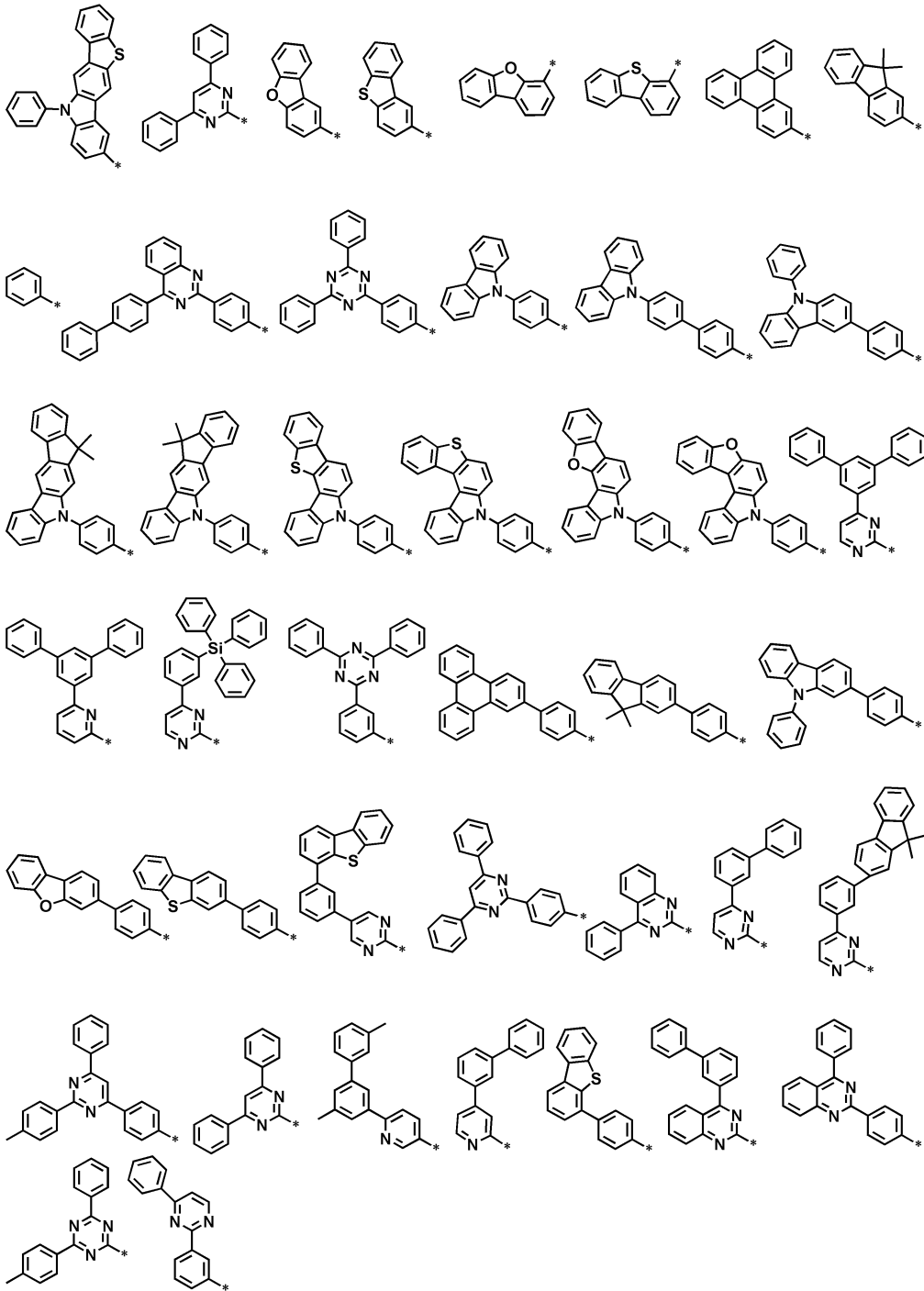
[상기 L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 서로 독립적으로 (C6-C30)아릴렌 또는 (C2-C30)헤테로아릴렌이고; R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 독립적으로 (C6-C30)아릴 또는 (C2-C30)헤테로아릴이며, 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>의 아릴 및 헤테로아릴은 서로 독립적으로 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C2-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴 및 트리(C6-C30)아릴실릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상으로 더 치환될 수 있다.]

### 청구항 3

제 1항에 있어서,

상기 치환체  $*-L_1-R_1$ ,  $*-L_2-R_2$ ,  $*-L_3-R_3$  및  $*-L_4-R_4$  는 서로 독립적으로 수소 또는 하기 구조로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전자재료용 화합물.

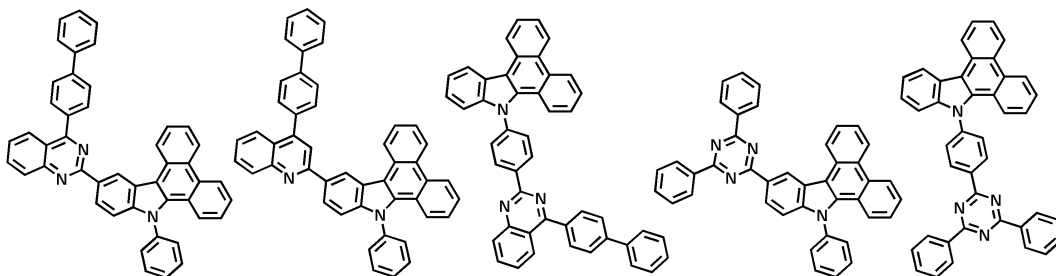


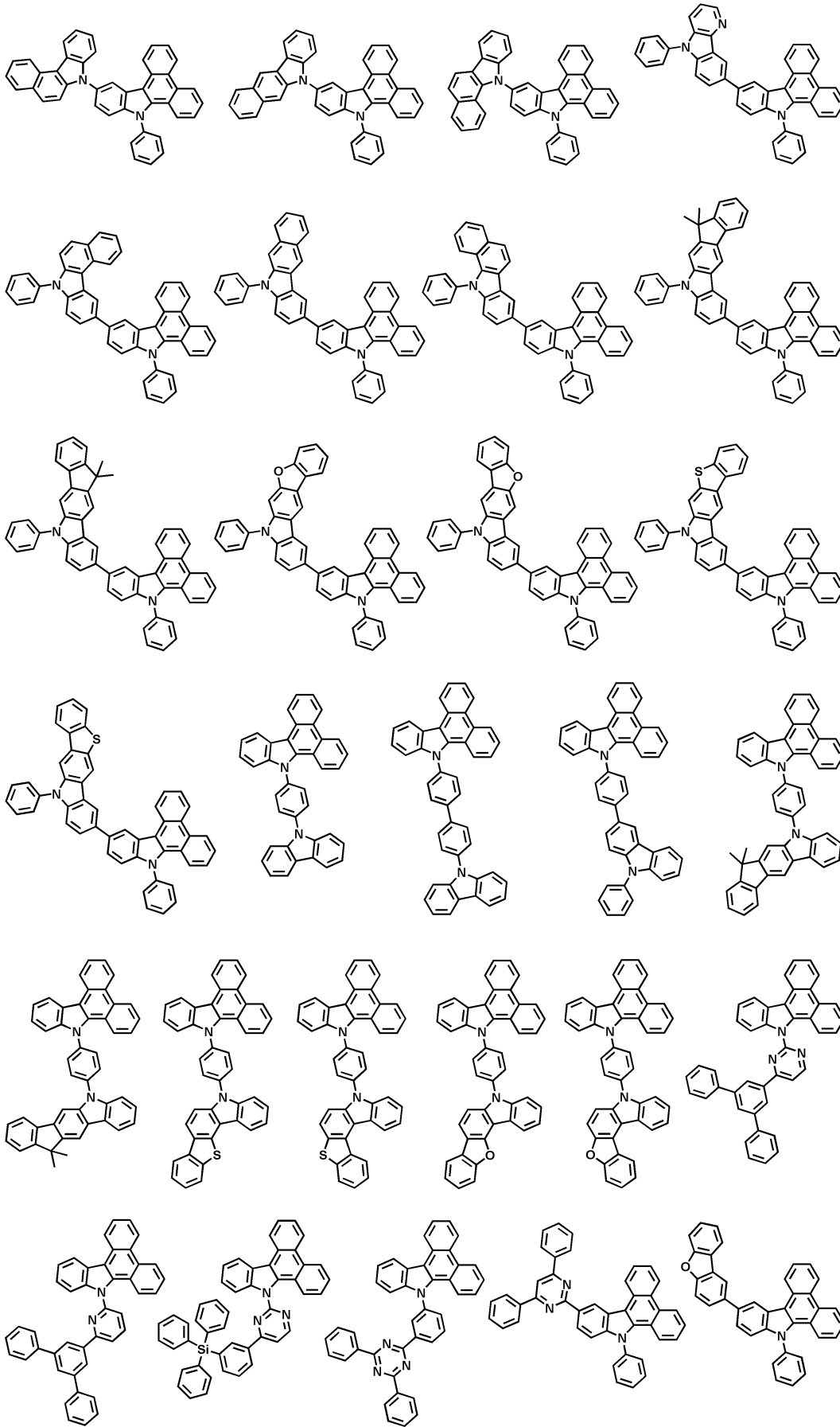


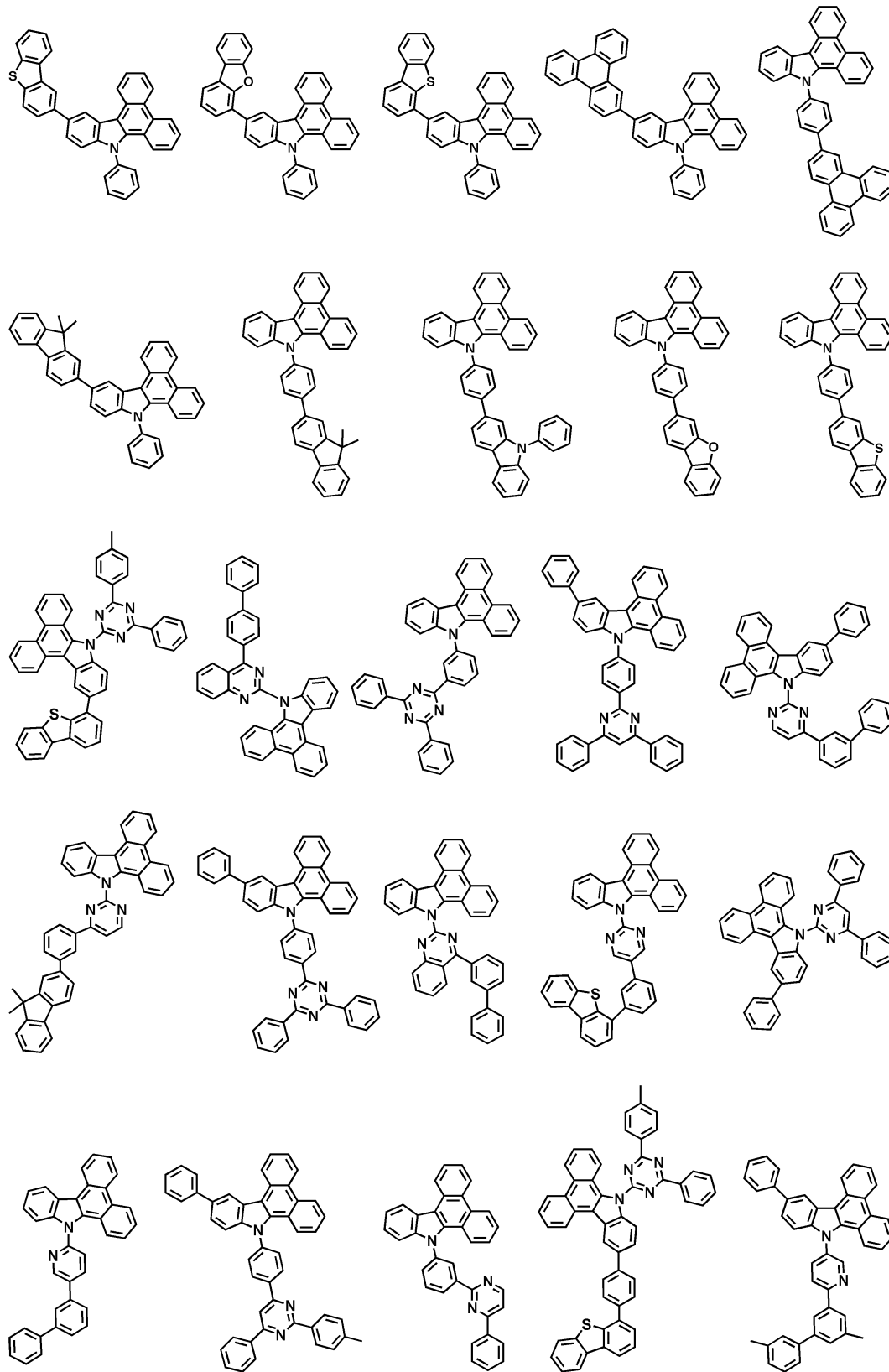
청구항 4

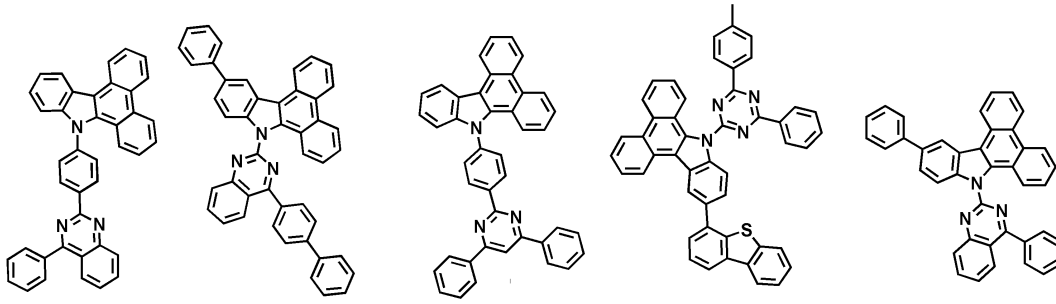
제 1항에 있어서,

하기 화합물들로부터 선택되는 유기 전자재료용 화합물.









**청구항 5**

제 1항 내지 제 4항에서 선택되는 어느 한 항에 따른 유기 전자재료용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 6**

제 5항에 있어서,

상기 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어져 있으며, 상기 유기물층은 상기 유기 전자재료용 화합물 하나 이상과 인광 도판트 하나 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 7**

제 6항에 있어서,

상기 유기물층에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 아민계 화합물을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 8**

제 6항에 있어서,

상기 유기물층에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 착체화합물을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 9**

제 6항에 있어서,

상기 유기물층은 발광층 및 전하생성층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 10**

제 6항에 있어서,

상기 유기물층에 청색, 적색 또는 녹색 발광을 하는 유기발광층 하나 이상을 더 포함하여 백색 발광을 하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**명세서**

**기술분야**

[0001] 본 발명은 신규한 유기 전자재료용 화합물 및 이를 포함하고 있는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

**배경기술**

[0002] 표시 소자 중, 전기 발광 소자(electroluminescence device: EL device)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있으며, 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사에서는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유

기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 EL 소자는 전자 주입 전극(음극) 과 정공 주입 전극(양극) 사이에 형성된 유기막에 전하를 주입하면 전자와 정공이 쌍을 이루어 여기자를 생성한다. 여기자의 비활성시의 발광(인광 또는 형광)을 이용함으로써 빛이 방출된다. 유기 EL 소자는 약 10V의 전압과 약 100~10,000cd/m<sup>2</sup>의 높은 휘도로 편광을 방출하며, 단순히 형광물질을 선택함으로써 과란색에서 빨간색까지의 스펙트럼으로 빛을 방출한다는 특징이 있다. 플라스틱 같이 휘 수 있는(flexible) 투명 기판 위에도 소자를 형성할 수 있을 뿐 아니라, 플라즈마 디스플레이 패널(Plasma Display Panel)이나 무기 EL 디스플레이에 비해 낮은 전압에서 (10V이하) 구동이 가능하고, 전력 소모가 비교적 적으며, 색감이 뛰어나다는 장점이 있다.

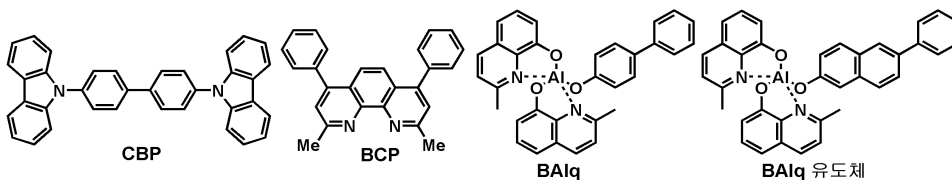
[0004] 유기 EL 소자에서 발광 효율, 수명 등의 성능을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료로서, 이러한 발광 재료에 요구되는 몇 가지 특성으로는 고체상태에서 형광 양자 수율이 커야하고, 전자와 정공의 이동도가 높아야 하며, 진공 증착시 쉽게 분해되지 않아야 하고, 균일한 박막을 형성, 안정해야 한다.

[0005] 유기 발광 재료는 크게 고분자 재료와 저분자 재료로 나눌 수 있는데, 저분자 계열의 재료는 분자 구조 면에서 금속 착화합물과 금속을 포함하지 않는 순수 유기 발광 재료가 있다. 이러한 발광 재료로는 트리스(8-퀴놀리놀라토)알루미늄 착체 등의 킬레이트 착체, 쿠마린 유도체, 테트라페닐부타디엔 유도체, 비스스타이릴아틸렌 유도체, 옥사디아아졸 유도체 등의 발광 재료가 알려져 있고, 이들로부터는 청색에서 적색까지의 가시 영역 발광을 얻을 수 있다고 보고되었다.

[0006] 풀칼라 OLED 디스플레이의 구현을 위해서는 RGB 3가지의 발광재료를 사용하게 되는데 유기 EL 전체의 특성을 향상시키는데 고효율 장수명의 RGB 발광재료의 개발이 중요한 과제라고 할 수 있다. 발광재료는 기능적인 측면에서 호스트 재료와 도판트 재료로 구분될 수 있는데 일반적으로 EL 특성이 가장 우수한 소자 구조로는 호스트에 도판트를 도핑하여 발광층을 만드는 것으로 알려져 있다. 최근에 고효율, 장수명 유기 EL 소자의 개발이 시급한 과제로 대두되고 있으며, 특히 중대형 OLED 패널에서 요구하고 있는 EL 특성 수준을 고려해 볼 때 기존의 발광 재료에 비해 매우 우수한 재료의 개발이 시급한 실정이다. 이러한 측면에서 호스트 재료의 개발이 해결해야 할 가장 중요한 요소 중의 하나이다. 이때 고체 상태의 용매 및 에너지 전달자 역할을 하는 호스트 물질의 바람직한 특성은 순도가 높아야하며, 진공증착이 가능하도록 적당한 분자량을 가져야 한다. 또한 유리 전이온도와 열분해온도가 높아 열적 안정성을 확보해야하며, 장수명화를 위해 높은 전기화학적 안정성이 요구되며, 무정형박막을 형성하기 용이해야 하며, 인접한 다른 층의 재료들과는 접착력이 좋은 반면 층간이동은 하지 않아야 한다.

[0007] 유기 EL 소자를 도핑기술을 사용하여 제조하는 경우 여기상태에서 호스트분자로부터 도판트로의 에너지전달은 100%가 되지 못하고, 도판트뿐만 아니라 호스트물질도 빛을 방출하게 된다. 특히 적색발광소자인 경우에는 호스트물질이 도판트보다 가시성이 큰 파장범위에서 빛을 방출하기 때문에 색순도가 호스트물질의 흐린 광방출에 의해 악화된다. 또 실제로 적용하는 경우 발광수명 및 지속성이 개선될 필요가 있다.

[0008] 한편, 인광 발광체의 호스트 재료로는 현재까지 CBP가 가장 널리 알려져 있으며, BCP 및 BAlq 등의 정공차단층을 적용한 고효율의 OLED가 공지되어 있으며, 일본의 파이오니어 등에서는 BAlq 유도체를 호스트로 이용한 고성능의 OLED가 공지되어 있다.



[0009] 그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 매우 좋지 않아서, 진공 하에서 고온 증착 공정을 거칠 때, 물질이 변하는 등 단점을 갖고 있다. OLED에서 전력효율 = (π/전압) × 전류효율 이므로, 전력효율은 전압에 반비례하는데, OLED의 소비 전력이 낮으려면 전력 효율이 높아야한다. 실제 인광 발광 재료를 사용한 OLED는 형광 발광 재료를 사용한 OLED에 비해 전류 효율(cd/A)이 상당히 높으나, 인광 발광 재료의 호스트로 BAlq 나 CBP 등 종래의 재료를 사용할 경우, 형광재료를 사용한 OLED에 비해 구동 전압이 높아서 전력 효율(1m/w)면에서 큰 이점이 없었다. 또한, OLED 소자에서의 수명 측면에서도 결코 만족할만한 수준이 되지 못하여 더욱 안정되고, 더욱 성능이 뛰어난 호스트 재료의 개발이 요구되고 있다.

**선행기술문헌**

**비특허문헌**

[0011] (비특허문헌 0001) Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987

**발명의 내용**

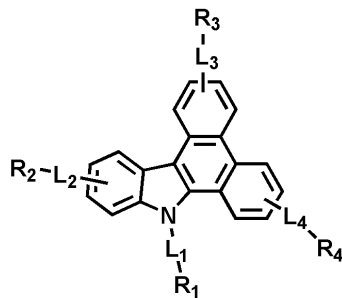
**해결하려는 과제**

[0012] 따라서 본 발명의 목적은 첫째로, 상기한 문제점들을 해결하기 위하여 기존의 재료보다 발광 효율 및 소자 수명이 좋으며, 적절한 색좌표를 갖는 우수한 골격의 유기 전자재료용 화합물을 제공하는 것이며 둘째로, 상기 유기 전자재료용 화합물을 발광 재료로서 채용하는 고효율 및 장수명의 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

**과제의 해결 수단**

[0013] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전자재료용 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 유기 전자재료용 화합물은 기존 재료에 비해 발광 효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 우수할 뿐만 아니라 전력효율의 상승을 유도하여 소비전력이 개선된 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

[0014] [화학식 1]



[0015]

[0016] [상기 화학식 1에서,

[0017] L<sub>1</sub> 내지 L<sub>4</sub>는 서로 독립적으로 단일결합, (C6-C30)아릴렌 또는 (C2-C30)헤테로아릴렌이며;

[0018] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, 할로젠, 시아노, (C3-C30)시클로알킬, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C6-C30)아릴, (C1-C30)알콕시, (C6-C30)아릴옥시, (C2-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴티오, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 나이트로 또는 하이드록실이며;

[0019] 상기 L<sub>1</sub> 내지 L<sub>4</sub>의 아릴렌, 헤테로아릴렌 및 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>의 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴은 서로 독립적으로 중수소, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, 할로젠, 시아노, (C3-C30)시클로알킬, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C6-C30)아릴, (C1-C30)알콕시, (C6-C30)아릴옥시, (C2-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴티오, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 나이트로 및 하이드록실로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상으로 더 치환될 수 있으며;

[0020] 상기 헤테로아릴렌, 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

[0021] 단, \*-L<sub>1</sub>-R<sub>1</sub> 이 수소인 경우는 제외된다.]

[0022] 본 발명에 기재된 「알킬」, 「알콕시」 및 그 외 「알킬」부분을 포함하는 치환체는 직쇄 또는 분쇄 형태를 모두 포함하고, 「시클로알킬」은 단일 고리계 뿐만 아니라 치환 또는 비치환된 아다만틸 또는 치환 또는 비치환

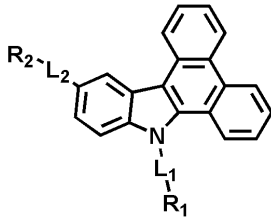
된 (C7-C30)바이시클로알킬과 같은 여러 고리계 탄화수소도 포함한다. 본 발명에 기재된 「아릴」은 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로, 각 고리에 적절하게는 4 내지 7개, 바람직하게는 5 또는 6개의 고리원자를 포함하는 단일 또는 융합고리계를 포함하며, 다수개의 아릴이 단일결합으로 연결되어 있는 형태까지 포함한다. 구체적인 예로 페닐, 나프틸, 비페닐, 터페닐, 안트릴, 인데닐(indenyl), 플루오레닐, 페난트릴, 트리페닐레닐, 피렌일, 페릴렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다. 상기 나프틸은 1-나프틸 및 2-나프틸을 포함하며, 안트릴은 1-안트릴, 2-안트릴 및 9-안트릴을 포함하며, 비페닐은 2-비페닐, 3-비페닐, 4-비페닐을 포함하며, 터페닐은 p-터페닐-4-일, p-터페닐-3-일, p-터페닐-2-일, m-터페닐-4-일, m-터페닐-3-일, m-터페닐-2-일을 포함하며, 플루오레닐은 1-플루오레닐, 2-플루오레닐, 3-플루오레닐, 4-플루오레닐 및 9-플루오레닐을 포함하며, 페난트릴은 1-페난트릴, 2-페난트릴, 3-페난트릴, 4-페난트릴, 9-페난트릴을 포함하며, 피렌일은 1-피렌일, 2-피렌일, 4-피렌일을 포함하며, 나프타세닐은 1-나프타세닐, 2-나프타세닐, 9-나프타세닐을 모두 포함한다. 본 발명에 기재된 「헤테로아릴」은 방향족 고리 골격 원자로서 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택되는 1 내지 4개의 헤테로원자를 포함하고, 나머지 방향족 고리 골격 원자가 탄소인 아릴 그룹을 의미하는 것으로, 5 내지 6원 단환 헤테로아릴, 및 하나 이상의 벤젠 환과 축합된 다환식 헤테로아릴이며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본 발명에서의 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴이 단일결합으로 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아릴기는 고리내 헤테로원자가 산화되거나 사원화되어, 예를 들어 N-옥사이드 또는 4차 염을 형성하는 2가 아릴 그룹을 포함한다. 구체적인 예로 퓨릴, 티오펜일, 피롤, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 퓨라잔일, 피리디, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단환 헤테로아릴, 벤조퓨란일, 다이벤조퓨란일, 벤조티오펜일, 다이벤조티오펜일, 이소벤조퓨란일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 아크리디닐, 페난트리딘일, 페난트롤리닐, 페녹사지닐, 페나지닐, 페노티아지닐, 벤조디옥솔릴 등의 다환식 헤테로아릴 및 이들의 상응하는 N-옥사이드(예를 들어, 피리디 N-옥사이드, 퀴놀릴 N-옥사이드), 이들의 4차 염 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다. 상기 피롤릴은 1-피롤릴, 2-피롤릴, 3-피롤릴을 포함하며, 피리디닐은 2-피리디닐, 3-피리디닐, 4-피리디닐을 포함하며, 인돌릴은 1-인돌릴, 2-인돌릴, 3-인돌릴, 4-인돌릴, 5-인돌릴, 6-인돌릴, 7-인돌릴을 포함하며, 이소인돌릴은 1-이소인돌릴, 2-이소인돌릴, 3-이소인돌릴, 4-이소인돌릴, 5-이소인돌릴, 6-이소인돌릴, 7-이소인돌릴을 포함하며, 퓨릴은 2-퓨릴, 3-퓨릴을 포함하며, 벤조퓨란일은 2-벤조퓨란일, 3-벤조퓨란일, 4-벤조퓨란일, 5-벤조퓨란일, 6-벤조퓨란일, 7-벤조퓨란일을 포함하며, 이소벤조퓨란일은 1-이소벤조퓨란일, 3-이소벤조퓨란일, 4-이소벤조퓨란일, 5-이소벤조퓨란일, 6-이소벤조퓨란일, 7-이소벤조퓨란일을 포함하며, 퀴놀릴은 3-퀴놀릴, 4-퀴놀릴, 5-퀴놀릴, 6-퀴놀릴, 7-퀴놀릴, 8-퀴놀릴을 포함하며, 이소퀴놀릴은 1-이소퀴놀릴, 3-이소퀴놀릴, 4-이소퀴놀릴, 5-이소퀴놀릴, 6-이소퀴놀릴, 7-이소퀴놀릴, 8-이소퀴놀릴기를 포함하며, 퀴녹살리닐은 2-퀴녹살리닐, 5-퀴녹살리닐, 6-퀴녹살리닐을 포함하며, 카바졸릴은 1-카바졸릴, 2-카바졸릴, 3-카바졸릴, 4-카바졸릴, 9-카바졸릴을 포함하며, 페난트리딘일은 1-페난트리딘일, 2-페난트리딘일, 3-페난트리딘일, 4-페난트리딘일, 6-페난트리딘일, 7-페난트리딘일, 8-페난트리딘일, 9-페난트리딘일, 10-페난트리딘일을 포함하며, 아크리디닐은 1-아크리디닐, 2-아크리디닐, 3-아크리디닐, 4-아크리디닐, 9-아크리디닐을 포함하며, 페난트롤리닐은 1,7-페난트롤린-2-일기, 1,7-페난트롤린-3-일기, 1,7-페난트롤린-4-일기, 1,7-페난트롤린-5-일기, 1,7-페난트롤린-6-일기, 1,7-페난트롤린-8-일기, 1,7-페난트롤린-9-일기, 1,7-페난트롤린-10-일기, 1,8-페난트롤린-2-일기, 1,8-페난트롤린-3-일기, 1,8-페난트롤린-4-일기, 1,8-페난트롤린-5-일기, 1,8-페난트롤린-6-일기, 1,8-페난트롤린-7-일기, 1,8-페난트롤린-9-일기, 1,8-페난트롤린-10-일기, 1,9-페난트롤린-2-일기, 1,9-페난트롤린-3-일기, 1,9-페난트롤린-4-일기, 1,9-페난트롤린-5-일기, 1,9-페난트롤린-6-일기, 1,9-페난트롤린-7-일기, 1,9-페난트롤린-8-일기, 1,9-페난트롤린-10-일기, 1,10-페난트롤린-2-일기, 1,10-페난트롤린-3-일기, 1,10-페난트롤린-4-일기, 1,10-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-1-일기, 2,9-페난트롤린-3-일기, 2,9-페난트롤린-4-일기, 2,9-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-6-일기, 2,9-페난트롤린-7-일기, 2,9-페난트롤린-8-일기, 2,9-페난트롤린-10-일기, 2,8-페난트롤린-1-일기, 2,8-페난트롤린-3-일기, 2,8-페난트롤린-4-일기, 2,8-페난트롤린-5-일기, 2,8-페난트롤린-6-일기, 2,8-페난트롤린-7-일기, 2,8-페난트롤린-9-일기, 2,8-페난트롤린-10-일기, 2,7-페난트롤린-1-일기, 2,7-페난트롤린-3-일기, 2,7-페난트롤린-4-일기, 2,7-페난트롤린-5-일기, 2,7-페난트롤린-6-일기, 2,7-페난트롤린-8-일기, 2,7-페난트롤린-9-일기, 2,7-페난트롤린-10-일기를 포함하며, 페나지닐은 1-페나지닐, 2-페나지닐을 포함하며, 페노티아지닐은 1-페노티아지닐, 2-페노티아지닐, 3-페노티아지닐, 4-페노티아지닐, 10-페노티아지닐을 포함하며, 페녹사지닐은 1-페녹사지닐, 2-페녹사지닐, 3-페녹사지닐, 4-페녹사지닐, 10-페녹사지닐을 포함하며, 옥사졸릴은 2-옥사졸릴, 4-옥사졸릴, 5-옥사졸릴을 포함하며, 옥사디아졸릴은 2-옥사디아졸릴, 5-옥사디아졸릴을 포함하며, 퓨라잔일은 3-퓨라잔일을 포함하며, 다이벤조퓨란일은 1-다이벤조퓨란일, 2-다이벤조퓨란일, 3-다이벤조

퓨란일, 4-다이벤조퓨란일을 포함하며, 다이벤조티오펜일은 1-다이벤조티오펜일, 2-다이벤조티오펜일, 3-다이벤조티오펜일, 4-다이오벤조티오펜일을 모두 포함한다.

[0023] 또한, 본 발명에 기재되어 있는 ‘(C1-C30)알킬’ 기는 (C1-C20)알킬 또는 (C1-C10)알킬을 포함하고, ‘(C6-C30)아릴’ 기는 (C6-C20)아릴 또는 (C6-C12)아릴을 포함한다. ‘(C2-C30)헤테로아릴’ 기는 (C2-C20)헤테로아릴 또는 (C2-C12)헤테로아릴을 포함하고, ‘(C3-C30)시클로알킬’ 기는 (C3-C20)시클로알킬 또는 (C3-C7)시클로알킬을 포함한다. ‘(C2-C30)알케닐 또는 알키닐’ 기는 (C2-C20)알케닐 또는 알키닐, (C2-C10)알케닐 또는 알키닐을 포함한다.

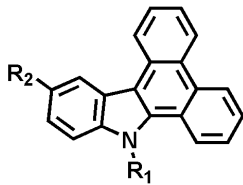
[0024] 본 발명에 따른 유기 전자재료용 화합물은 하기 화학식 2 내지 5로부터 선택될 수 있으며, 이에 한정되지는 않는다.

[0025] [화학식 2]



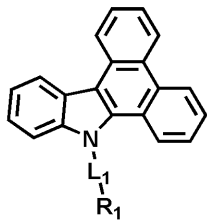
[0026]

[0027] [화학식 3]



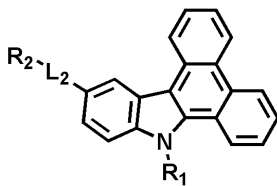
[0028]

[0029] [화학식 4]



[0030]

[0031] [화학식 5]

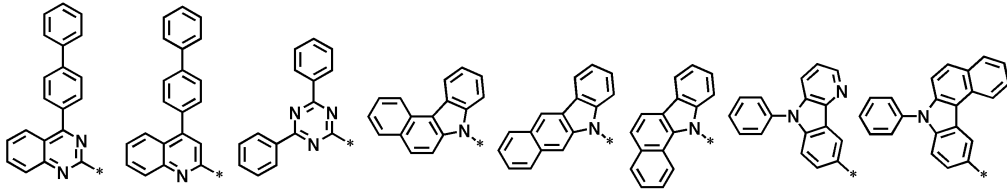


[0032]

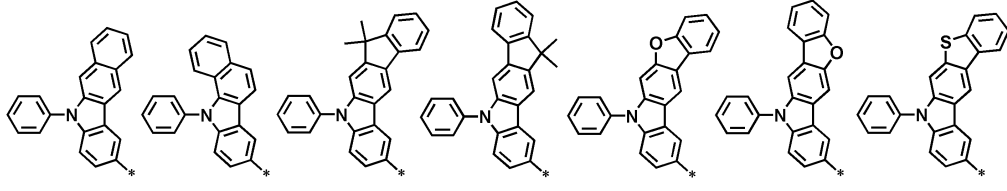
[0033] [상기 L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 서로 독립적으로 (C6-C30)아릴렌 또는 (C2-C30)헤테로아릴렌이고; R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 독립적으로 (C6-C30)아릴 또는 (C2-C30)헤테로아릴이며, 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>의 아릴 및 헤테로아릴은 서로 독립적으로 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C2-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴 및 트리(C6-C30)아릴실릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상으로 더 치환될 수 있다.]

[0034] 구체적으로, 상기 치환체 \*—L<sub>1</sub>—R<sub>1</sub>, \*—L<sub>2</sub>—R<sub>2</sub>, \*—L<sub>3</sub>—R<sub>3</sub> 및 \*—L<sub>4</sub>—R<sub>4</sub>는 서로 독립적으로 수소 또는 하기 구조로부터 선택될 수 있으며, 이에 한정되지는 않는다.

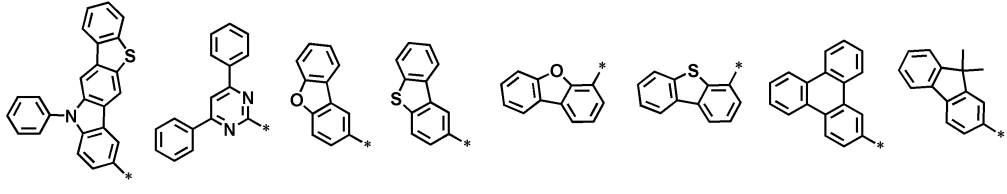
[0035]



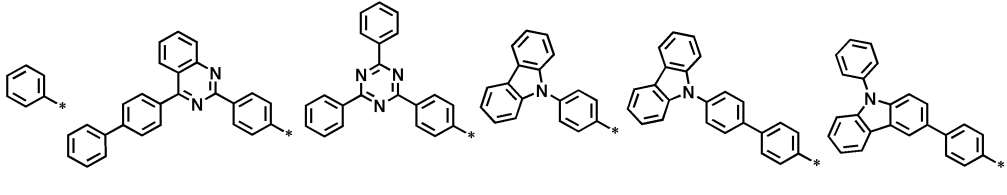
[0036]



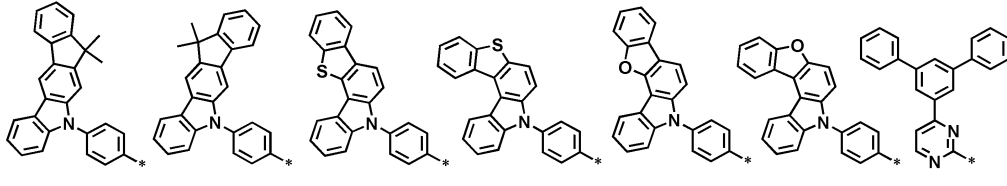
[0037]



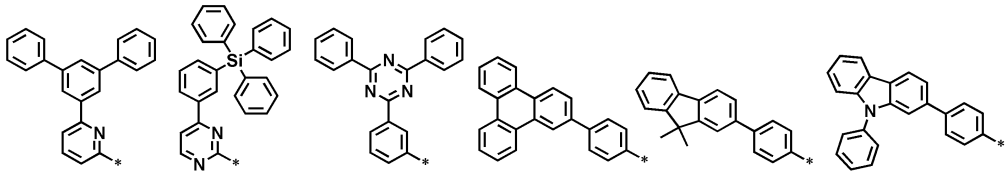
[0038]



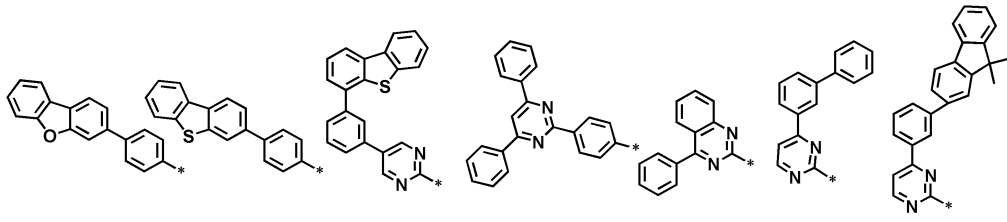
[0039]



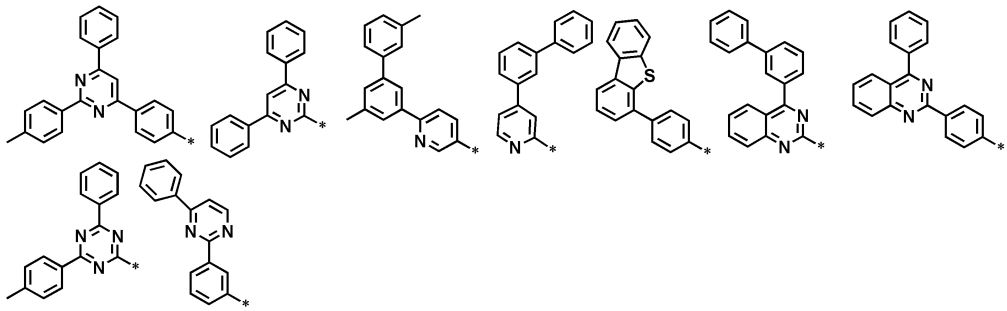
[0040]



[0041]



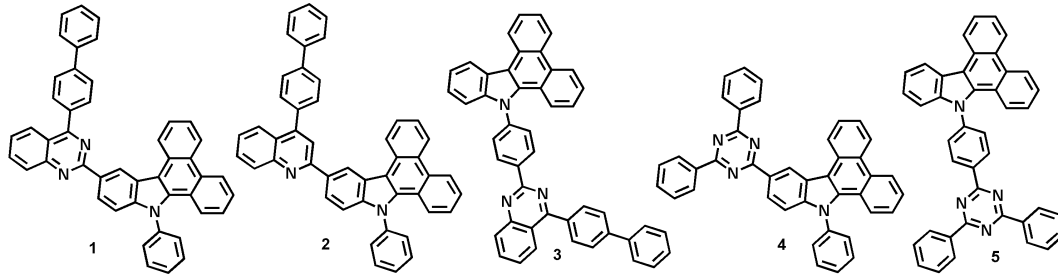
[0042]



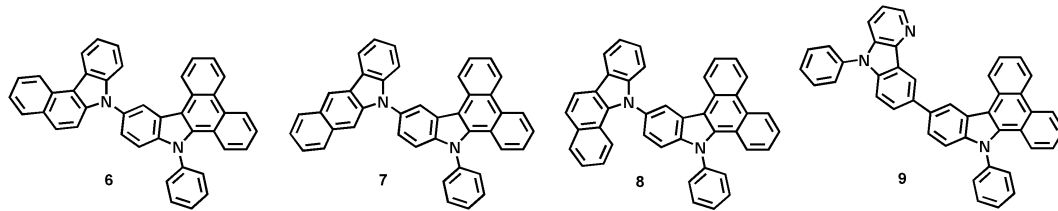
[0043]

본 발명에 따른 유기 전자재료용 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 하기 화합물

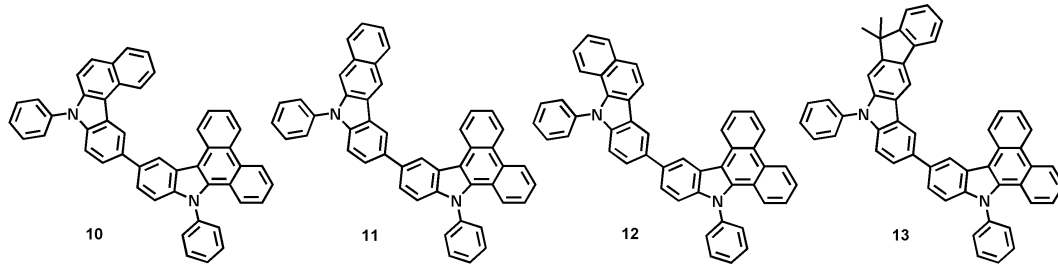
이 본 발명을 한정하는 것은 아니다.



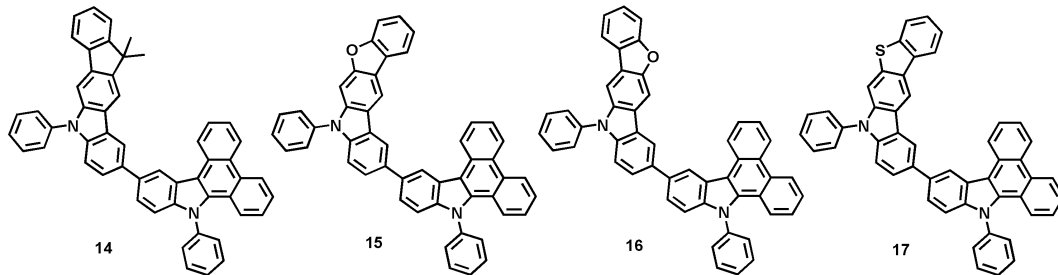
[0044]



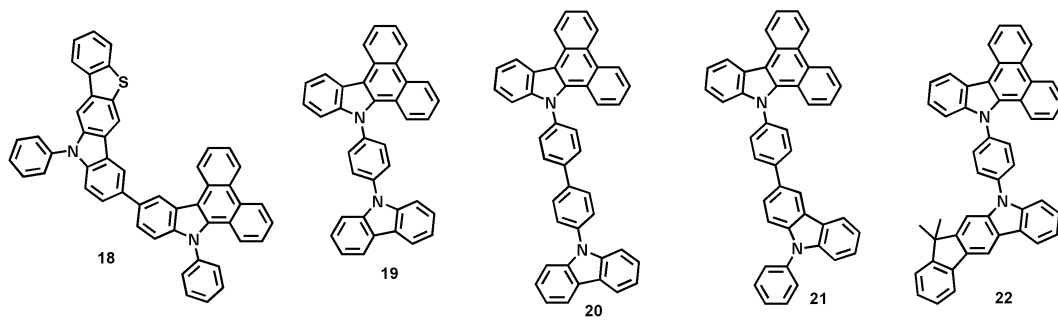
[0045]



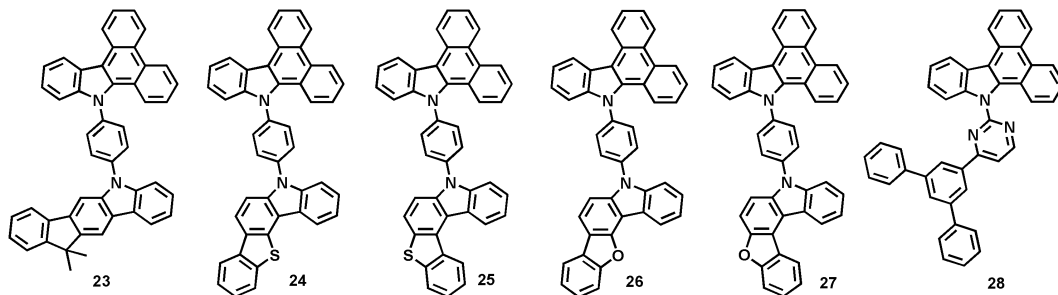
[0046]



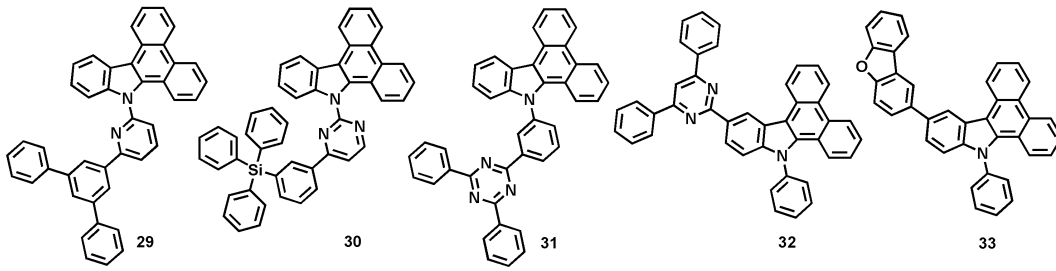
[0047]



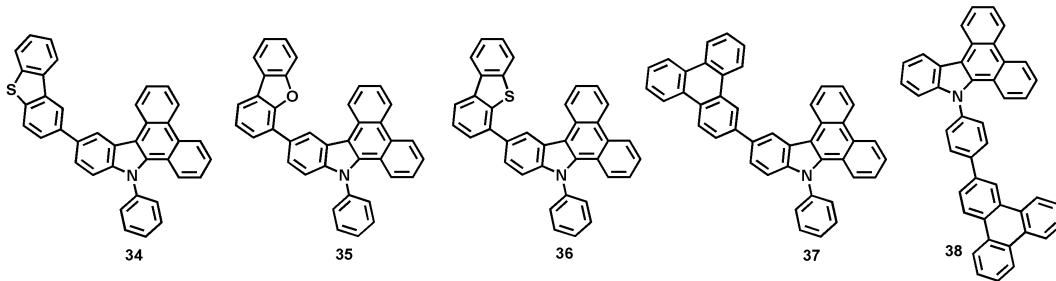
[0048]



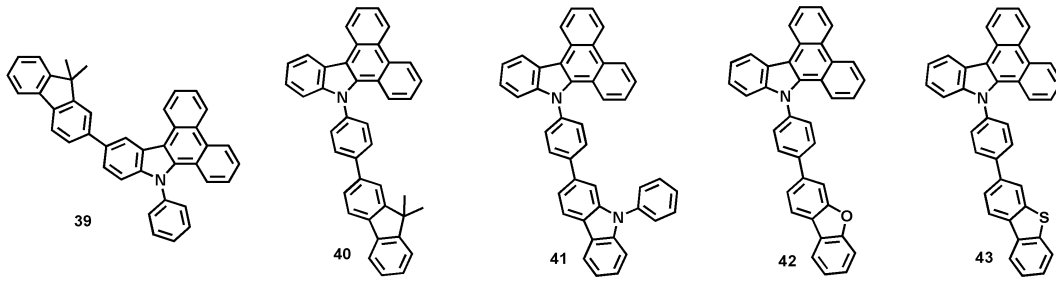
[0049]



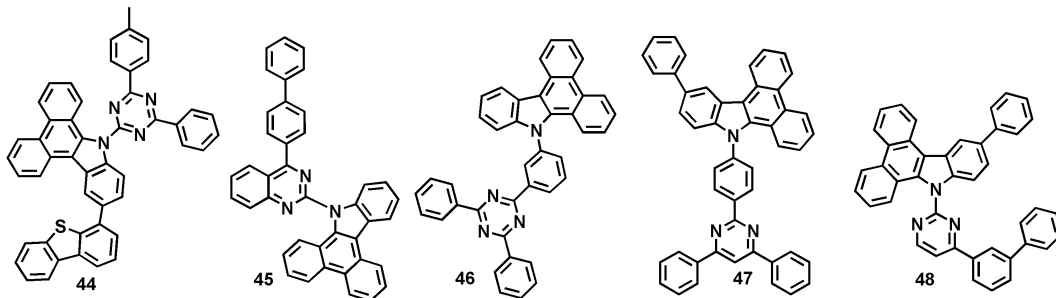
[0050]



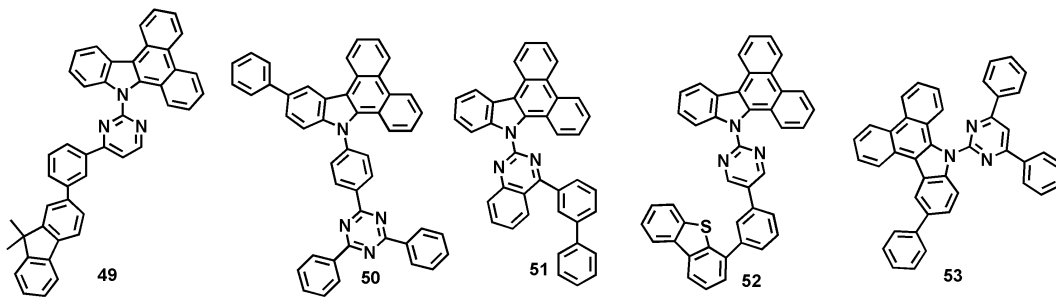
[0051]



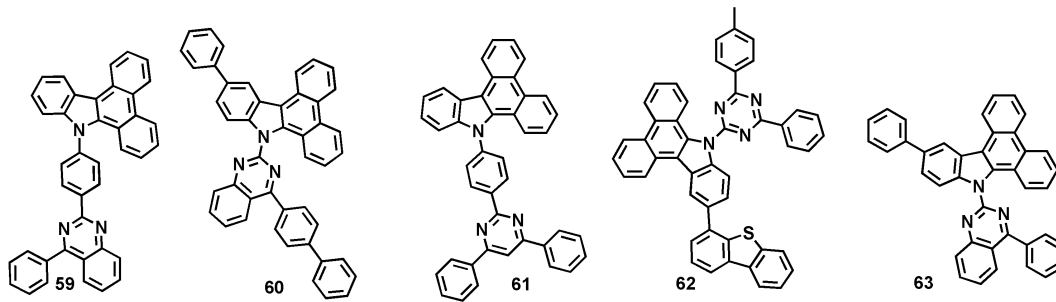
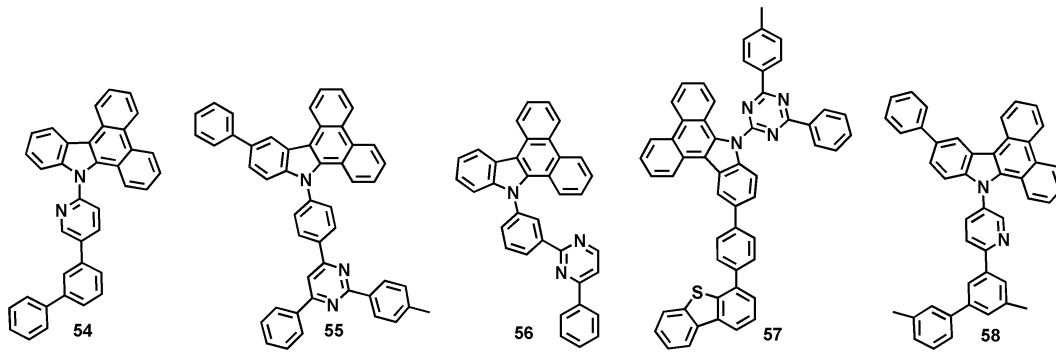
[0052]



[0053]

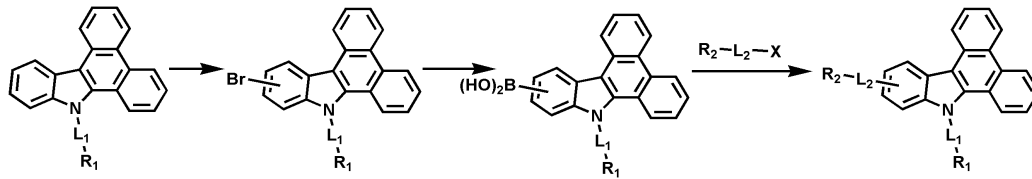


[0054]



[0057] 본 발명에 따른 유기 전자재료용 화합물 중 -L<sub>3</sub>-R<sub>3</sub>과 -L<sub>4</sub>-R<sub>4</sub>가 수소인 경우의 제조방법을 하기 반응식 1에 나타내었으며, -L<sub>3</sub>-R<sub>3</sub>과 -L<sub>4</sub>-R<sub>4</sub>가 수소가 아닌 경우 역시 공지의 방법을 통하여 제조될 수 있다.

[0058] [반응식 1]

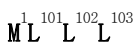


[0060] [상기 반응식 1에서 X는 할로젠이고; R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>은 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하다.]

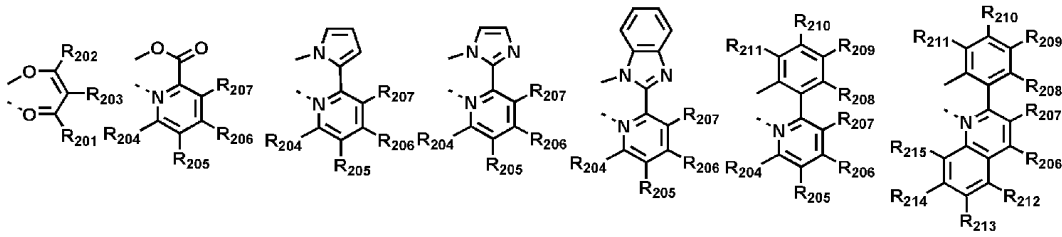
[0061] 또한, 본 발명은 유기 전계 발광 소자를 제공하며, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어진 유기 전계 발광 소자에 있어서, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 전자재료용 화합물을 하나 이상 포함하는 것을 특징으로 한다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층에서 상기 화학식 1의 유기 전자재료용 화합물은 호스트 물질로 사용되어진다.

[0062] 상기 발광층에서 상기 화학식 1의 유기 전자재료용 화합물이 호스트로 사용되어질 때 하나 이상의 인광도판트를 포함하는 것을 특징으로 한다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광도판트는 특별히 제한되지는 않으나, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광도판트는 하기 화학식 6으로 표시되는 화합물로부터 선택되는 것이 바람직하다.

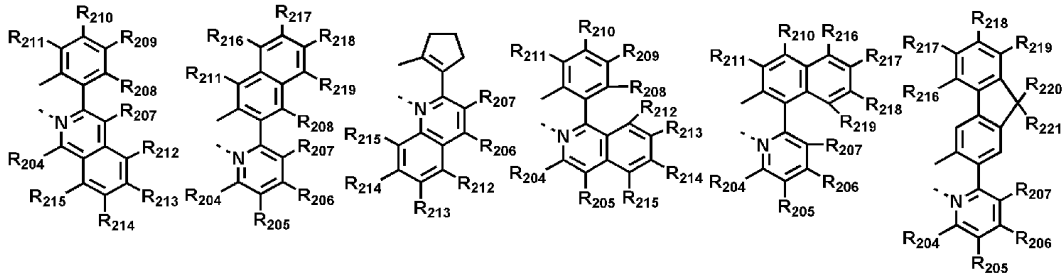
[0063] [화학식 6]



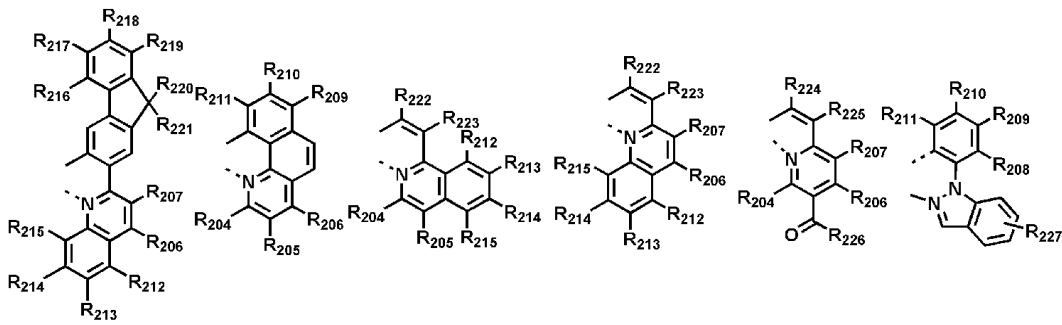
[0065] 여기서 M<sup>1</sup>은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 리간드 L<sup>101</sup>, L<sup>102</sup> 및 L<sup>103</sup>는 서로 독립적으로 하기 구조로부터 선택되어진다.



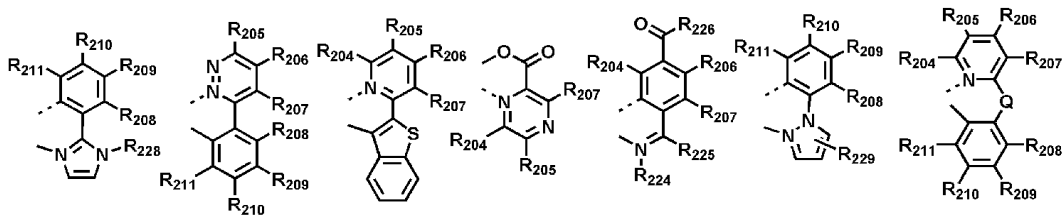
[0066]



[0067]



[0068]



[0069]

[0070] [상기 화학식 6에서,

[0071] R<sub>201</sub> 내지 R<sub>203</sub>은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C30)아릴 또는 할로젠이고;

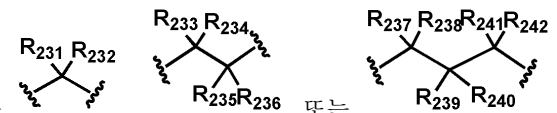
[0072] R<sub>204</sub> 내지 R<sub>219</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된(C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된(C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 모노 또는 치환 또는 비치환된 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, SF<sub>5</sub>, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 시아노 또는 할로젠이고;

[0073] R<sub>220</sub> 내지 R<sub>223</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬 또는 (C1-C30)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C30)아릴이고;

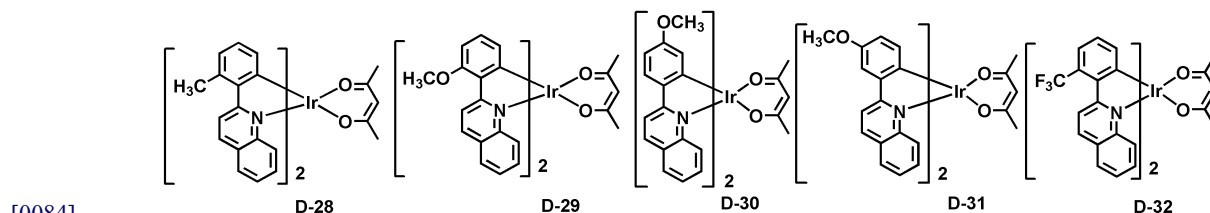
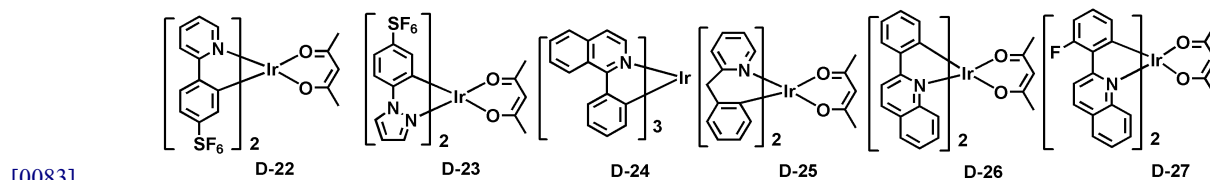
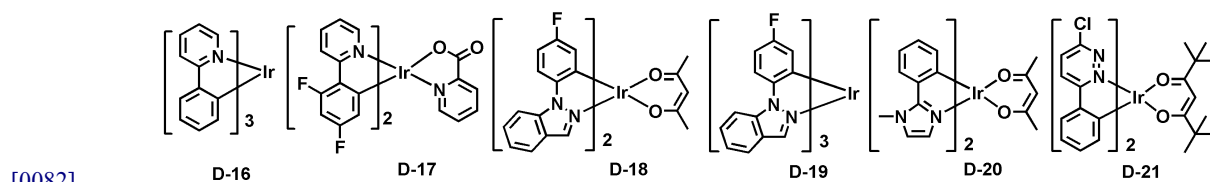
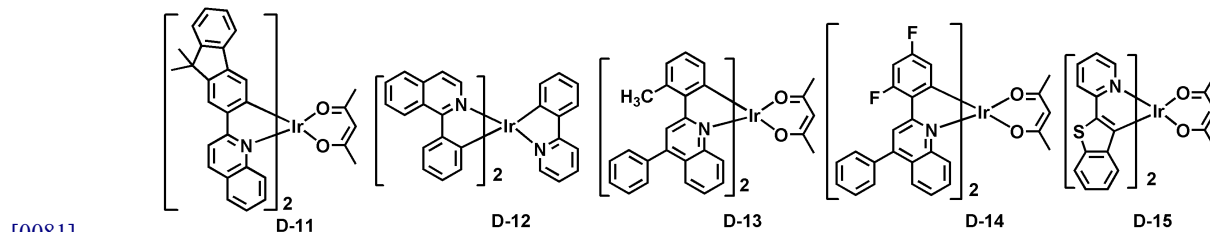
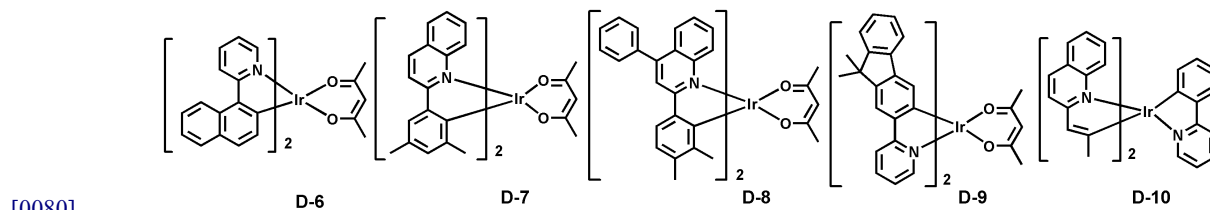
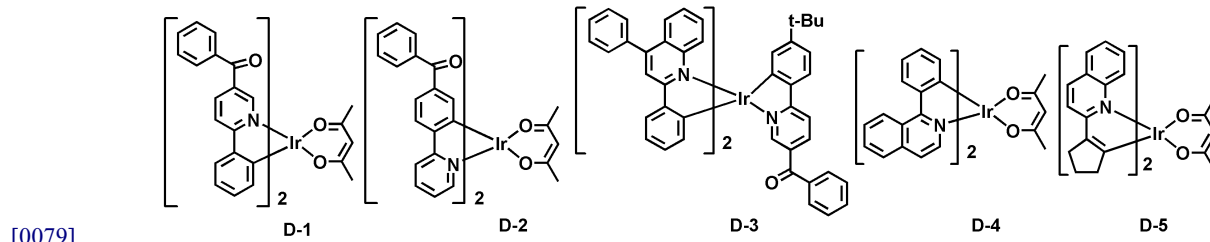
[0074] R<sub>224</sub> 및 R<sub>225</sub>는 서서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴 또는 할로젠이거나, R<sub>224</sub>와 R<sub>225</sub>는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C12)알킬렌 또는 (C3-C12)알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하며;

[0075] R<sub>226</sub>은 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된(C5-C30)헤테로아릴 또는 할로젠이고;

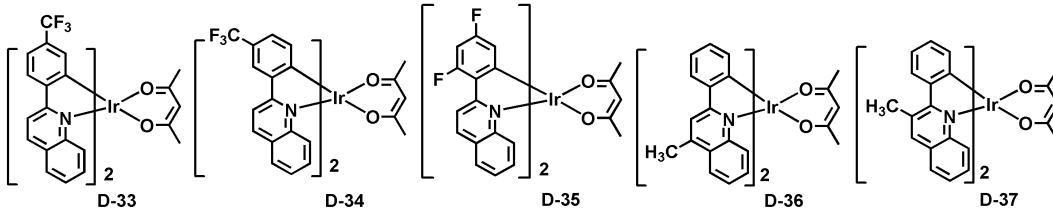
[0076] R<sub>227</sub> 내지 R<sub>229</sub>은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴 또는 할로젠이고;

[0077] Q는  이며, R<sub>231</sub> 내지 R<sub>242</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알콕시, 할로젠, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된(C5-C30)시클로알킬이거나, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로고리 또는 융합고리를 형성할 수 있거나, R<sub>207</sub> 또는 R<sub>208</sub>과 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 포화 또는 불포화의 융합고리를 형성할 수 있다.]

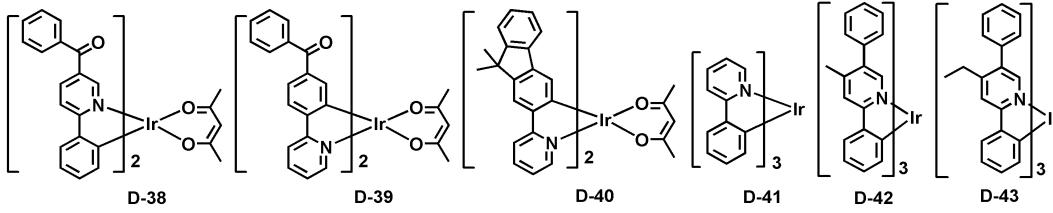
[0078] 상기 화학식 6의 인광도판트 화합물은 하기 구조의 화합물로 예시될 수 있으나 이에 한정하는 것은 아니다.



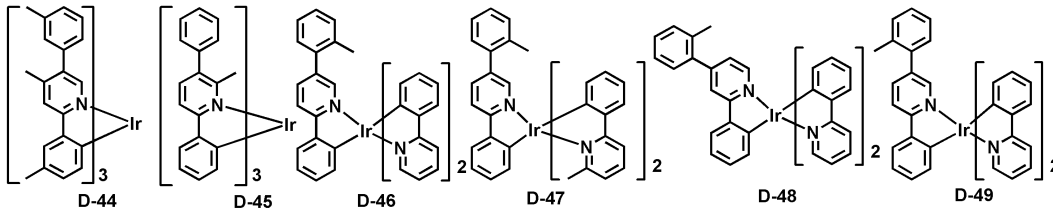
[0085]



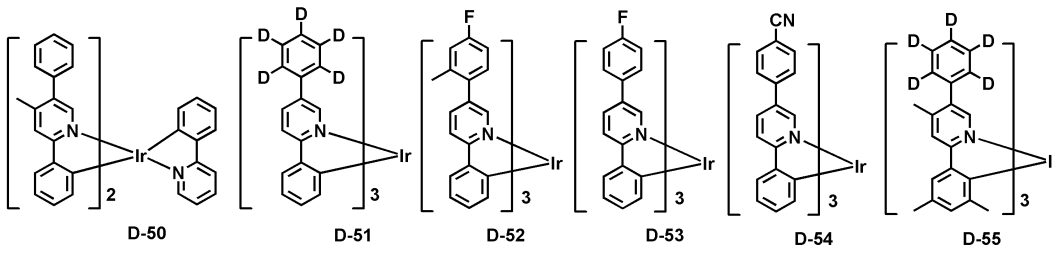
[0086]



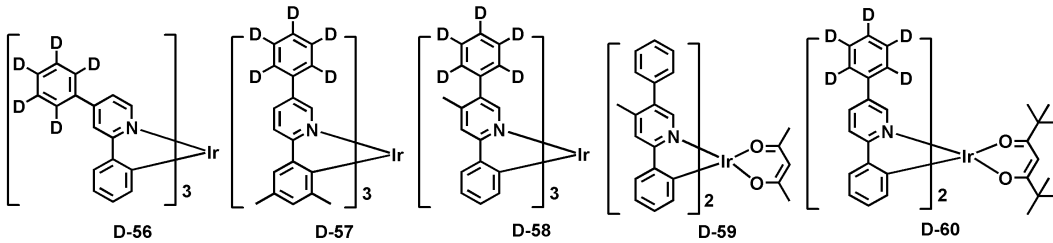
[0087]



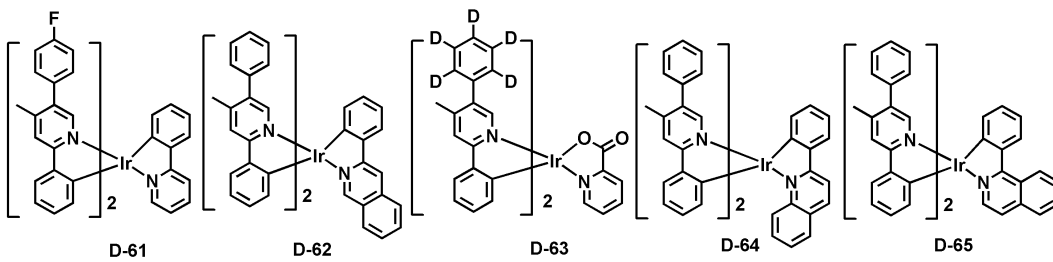
[0088]



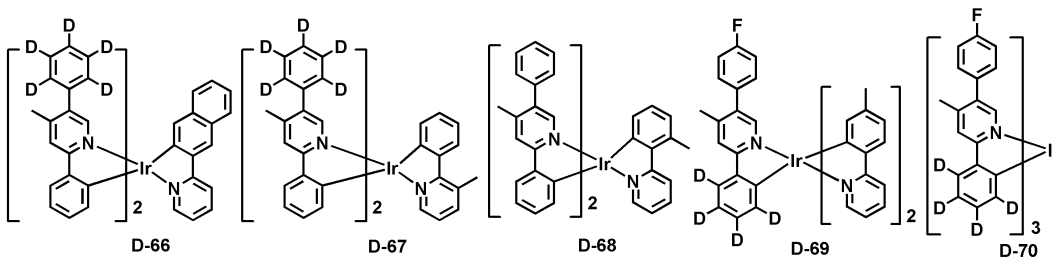
[0089]

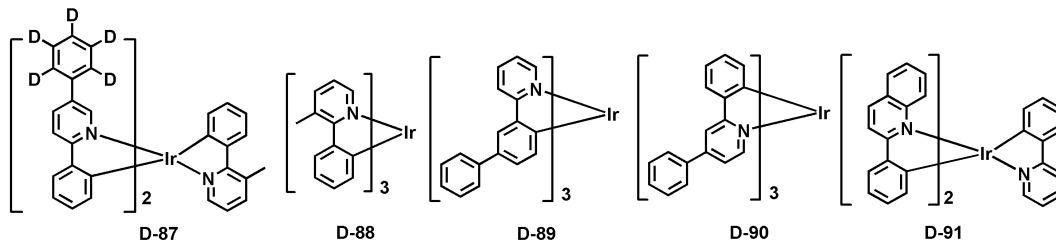
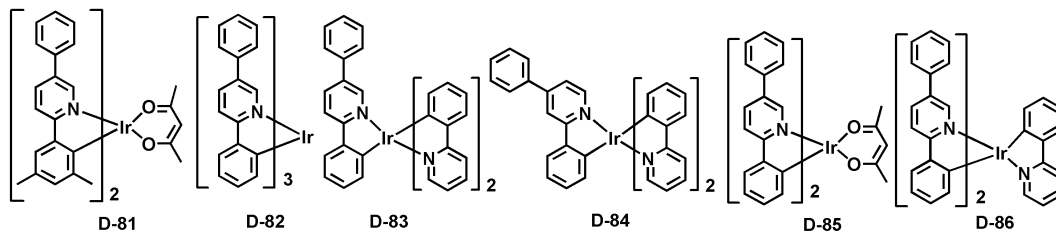
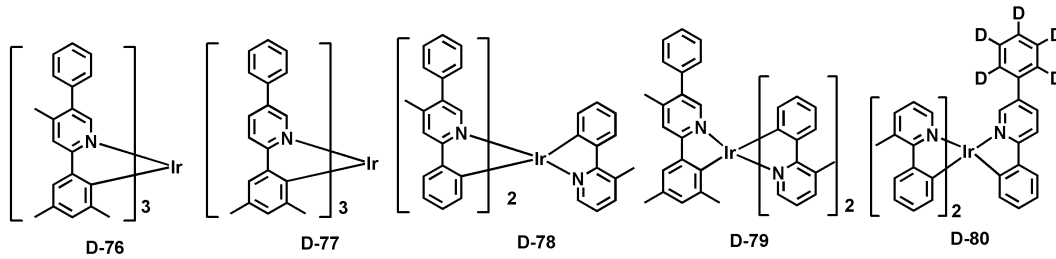
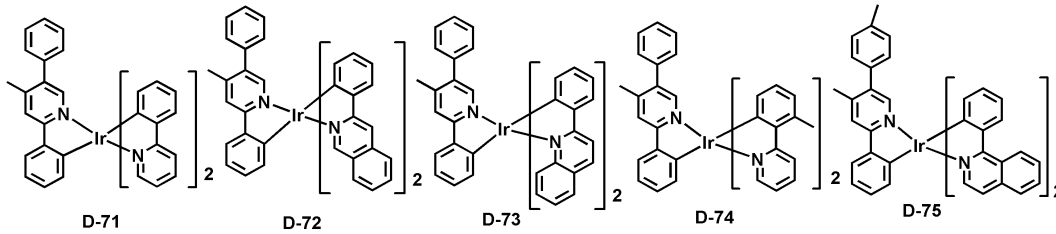


[0090]



[0091]





[0092]

[0093]

[0094]

[0095]

[0096]

[0097]

[0098]

[0099]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 화학식 1의 유기 전자재료용 화합물을 포함하고, 동시에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 상기 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물은 출원번호 제10-2008-0123276호, 제10-2008-0107606호 또는 제10-2008-0118428호에 예시되어 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

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

또한, 상기 유기물층에 상기 유기 전자재료용 화합물 이외에 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함하는 유기발광층 하나 이상을 동시에 포함하여 백색 발광을 하는 유기 전계 발광 소자를 형성할 수 있다. 상기 청색, 녹색 또는 적색 발광을 하는 화합물은 출원번호 제10-2008-0123276호, 제10-2008-0107606호 또는 제10-2008-0118428호에 예시되어 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 일층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함) 이상을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 금속의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광매체층 측의 음극 표면에 할로젠화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 이것에 의해, 구동의 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드로서는 예컨대  $\text{SiO}_x$  ( $1 \leq x \leq 2$ ),  $\text{AlO}_x$  ( $1 \leq x \leq 1.5$ ),  $\text{SiON}$ ,  $\text{SiAlON}$  등을 바람직하게 들 수 있으며, 할로젠화 금속으로서는 예컨대  $\text{LiF}$ ,  $\text{MgF}_2$ ,  $\text{CaF}_2$ , 불화 희토류 금속 등을 바람직하게 들 수 있으며, 금속 산화물로서는 예컨대  $\text{Cs}_2\text{O}$ ,  $\text{Li}_2\text{O}$ ,

MgO, SrO, BaO, CaO 등을 바람직하게 들 수 있다.

[0100] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 이렇게 제작된 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식으로, 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있다. 바람직한 환원성 도판트로서는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전자생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진 백색 유기 전계 발광소자를 제작할 수도 있다.

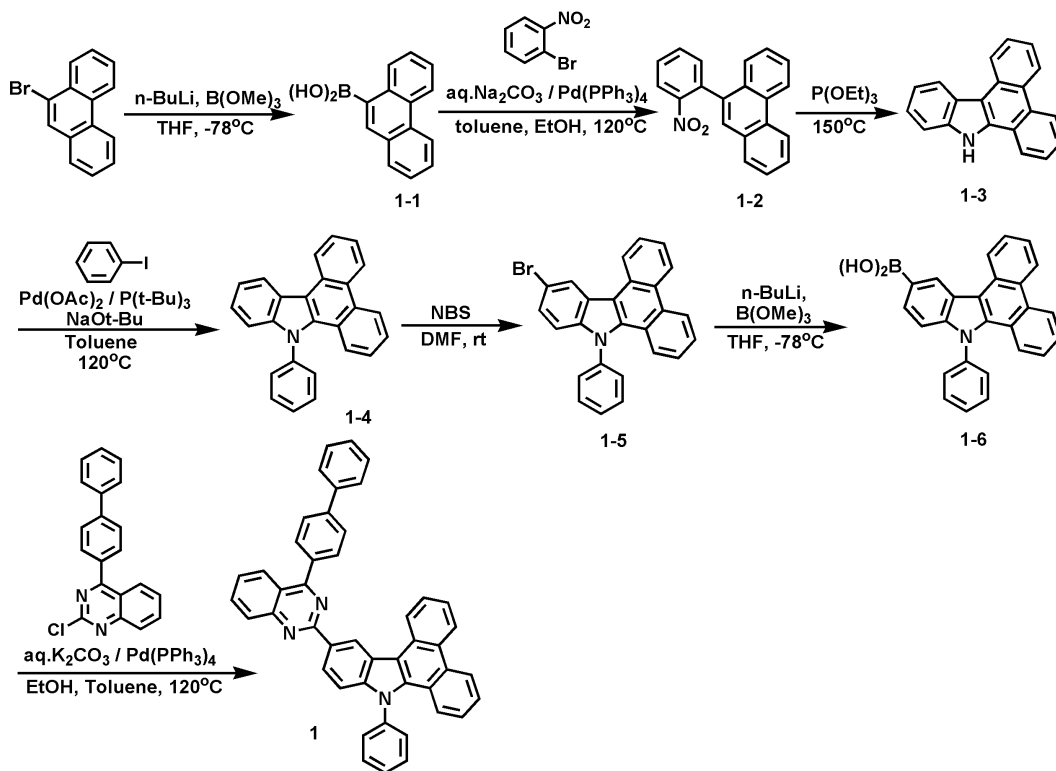
**발명의 효과**

[0101] 본 발명에 따른 유기 전자재료용 화합물은 발광 효율이 좋고 소자의 구동전압을 저하시키고 동시에 전력효율이 향상된 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0102] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 유기 전자재료용 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광특성을 설명하나, 이는 단지 그 실시 양태를 예시하기 위한 것일 뿐, 본 발명의 범위를 한정하는 것은 아니다.

[0103] [제조예 1] 화합물 1의 제조



[0104]

[0105] 화합물 1-1의 제조

[0106] 9-브로모페난스렌 70g(0.272mol)을 THF 1200mL에 녹인 후  $n\text{-BuLi}$ (2.5 M in hexane) 164mL를  $-78^\circ\text{C}$ 에서 첨가하였다. 이 혼합물을  $-78^\circ\text{C}$ 에서 1시간동안 교반한 후  $\text{B}(\text{OMe})_3$  46mL를 첨가하였다. 전체 반응물을 2시간동안 교반한 후 염화암모늄 수용액 50mL로 반응을 종결시켰다. 상기 혼합물을 EA 1L로 추출한 후, 증류수 200mL로 씻어주었다. 얻어진 유기층을 무수 $\text{MgSO}_4$ 로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 재결정방법으로 분리하여 화합물 1-1 (42g, 70%)을 얻었다.

[0107] 화합물 1-2의 제조

[0108] 2-브로모나이트로벤젠 27.4g(0.135mol), 화합물 1-1 42g(0.189mol), Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 42.9g(0.405mol), 톨루엔 400mL, 에탄올200mL 및 증류수 200mL를 혼합한 후, Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 8.1g(0.007mol)을 첨가하였다. 상기 혼합물을 120℃에서 5시간 동안 교반한 다음, 실온으로 식히고 EA 1L로 추출한 후, 증류수 200mL로 씻어주었다. 얻어진 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 실리카겔 컬럼크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 1-2 (28.6g, 71%)을 얻었다.

[0109] 화합물 1-3의 제조

[0110] 화합물 1-2 28g(91.5mmol)에 P(OEt)<sub>3</sub> 230mL을 가하고 150℃에서 10시간 동안 교반하였다. 상기 반응물은 80℃로 식힌 후 감압증류 하여 과량의 트리에틸포스파이트를 제거하였다. 얻어진 고체는 실리카겔 컬럼크로마토그래피에 의해서 분리하여 화합물 1-3 (15g, 61%)을 얻었다.

[0111] 화합물 1-4의 제조

[0112] 화합물 1-3 15g(56.11mmol), Pd(OAc)<sub>2</sub> 1.3g(5.6mmol)과 NaOt-Bu 26.9g(280.56mmol)을 톨루엔 300mL에 녹인 후, P(t-Bu)<sub>3</sub> 15.8mL(67.34mmol)과 아이오도벤젠 31.3mL(280.56mmol)을 가하였다. 상기 혼합물을 100℃에서 24시간동안 교반한 다음, 실온으로 식히고 EA 400mL로 추출한 후, 증류수 100mL로 씻어주었다. 얻어진 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 실리카겔 컬럼크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 1-4 (14.7g, 76%)을 얻었다.

[0113] 화합물 1-5의 제조

[0114] 화합물 1-4 14.2g(41.35mmol)을 DMF 110mL에 녹인 후, DMF 100mL에 녹인 N-브로모석신이미드 8.8g(49.62mmol)을 0℃에서 가하였다. 실온에서 2시간 교반한 후 반응이 종결되면 EA 400mL로 추출한 후, 증류수 100mL로 씻어주었다. 얻어진 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 실리카겔 컬럼크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 1-5 (9.3g, 53%)을 얻었다.

[0115] 화합물 1-6의 제조

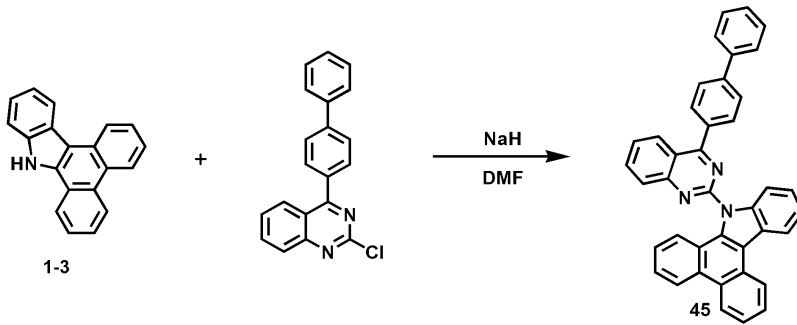
[0116] 화합물 1-5 9.3g(22.02mmol)을 THF 120mL에 녹인 후 n-BuLi(2.5 M in hexane) 13.2mL를 -78℃에서 가하였다. 상기 혼합물을 -78℃에서 1시간동안 교반한 후 B(OMe)<sub>3</sub> 7.6 mL(33.03mmol)를 가하였다. 전체 반응물을 2시간동안 교반하여준 후 염화암모늄 수용액 10mL로 반응을 종결시키고, EA 200mL로 추출한 후, 증류수 100mL로 씻어주었다. 얻어진 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 재결정법으로 분리하여 화합물 1-6 (6.3g, 74%)을 얻었다.

[0117] 화합물 1의 제조

[0118] 4-[1,1'-바이페닐]-4-일)-2클로로퀴나졸린 4.3g(13.5mmol), 화합물 1-6 6.3g(12.9mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 3.4g(40.5mmol), 톨루엔 100mL, 에탄올 30mL과 증류수 30mL를 혼합한 후, Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.8g(0.7mmol)을 첨가하였다. 상기 혼합물을 120℃에서 5시간동안 교반한 다음, 실온으로 식히고 EA 300mL로 추출한 후, 증류수 50mL로 씻어주었다. 얻어진 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 실리카겔 컬럼크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 1 (3.2g, 40%)을 얻었다.

[0119] MS/FAB: 623.74(found), 623.24(calculated)

[0120] [제조예 2] 화합물 45의 제조

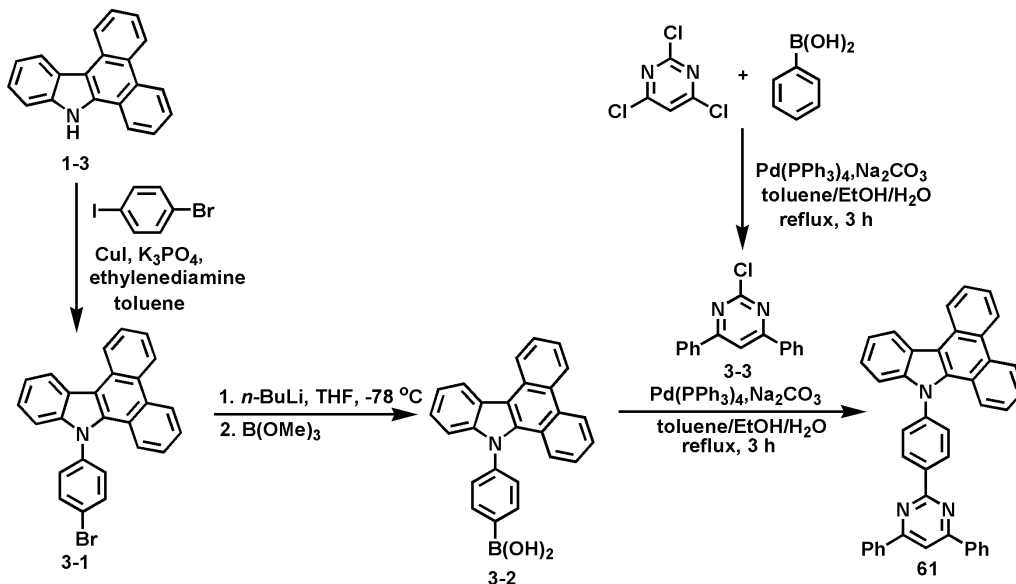


[0121]

[0122] 250mL RBF에 화합물 1-3 5g(19mmol)와 DMF 95mL를 넣고, NaH 1.1g(28.5mmol, 60% dispersion in mineral oil)을 천천히 넣어주었다. 상기 혼합물을 상온에서 40분간 교반한 후, 4-(바이페닐-4-일)-2-클로로퀴나졸린 6g(19mmol)을 천천히 넣어주었다. 반응 혼합물을 50℃에서 3시간동안 교반하고, 반응이 종결되면 MeOH과 H<sub>2</sub>O를 넣어 생긴 고체를 여과하여, 밤새 진공건조하였다. 얻어진 고체는 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 분리하여 화합물 45 (6.3g, 61%)를 얻었다.

[0123] MS/FAB: 547.65(found), 547.20(calculated)

[0124] [제조예 3] 화합물 61의 제조



[0125]

[0126] 화합물 3-1의 제조

[0127] 화합물 1-3 8.1g(30.4mmol)과 1-브로모-4-아이오도벤젠 17.2g(60.8mmol)을 톨루엔 150mL에 녹인 후 CuI 2.9g(15.2mmol), 1,2-다이아미노에탄 1mL(15.2mmol)과 탄산세슘 29.7g(91.2mmol)을 첨가하였다. 이 반응 혼합물을 20시간동안 환류시킨 다음, 상기 반응 혼합물을 상온으로 냉각시켰다. 그런 다음, 10% 염산 수용액으로 반응을 종결시킨 후 EA 300 mL 로 추출한 후, 증류수 40 mL로 씻어주었다. 얻어진 유기층을 무수황산마그네슘으로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 실리카겔 컬럼크로마토그래피에 의해서 분리하여 화합물 3-1 (10g, 78%)을 얻었다.

[0128] 화합물 3-2의 제조

[0129] 화합물 3-1 10g(23.7mmol)을 THF 100mL에 녹인 후 n-BuLi (2.5 M in hexane) 11.4mL를 -78℃에서 첨가하였다. 이 혼합물을 -78℃에서 1시간동안 교반한 후 B(OMe)<sub>3</sub> 4mL를 첨가하였다. 전체 반응물을 2시간동안 교반한 후 염화암모늄 수용액 20mL로 반응을 종결시켰다. 상기 혼합물을 EA 250mL로 추출한 후, 증류수 50mL로 씻어주었다. 얻어진 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 재결정방법으로 분리하여 화합물 3-2 (7.5g, 82%)을 얻었다.

- [0130] 화합물 3-3의 제조
- [0131] 2,4,6-트리클로로피리미딘 20g(109mmol)과 페닐보론산 31.9g(262mmol)을 톨루엔 600mL, 에탄올 125mL, 물 125mL의 혼합용액에 녹인 후 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 12.6g(10.9mmol)과 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 69.3g(654mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물을 120 °C에서 3시간 동안 교반한 다음, 실온으로 식히고 염화암모늄 수용액 150mL로 반응을 종결시켰다. 이 혼합물을 EA 1.5L로 추출한 후, 증류수 300mL로 씻어주었다. 얻어진 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>으로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 혼합물은 실리카겔 컬럼으로 분리하여 화합물 **3-3** (20.9g, 72%)을 얻었다.
- [0132] 화합물 61의 제조
- [0133] 화합물 **3-2** 10g(25.8mmol)과 화합물 **3-3** 5.7g(21.5mmol)을 톨루엔 160mL, 에탄올 40mL, 물 40mL의 혼합용액에 녹인 후 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1.5g(1.3mmol)과 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 6.8g(64.5mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물을 120 °C에서 3시간 동안 교반한 다음, 실온으로 식히고 염화암모늄 수용액 50mL로 반응을 종결시켰다. 이 혼합물을 EA 500mL로 추출한 후, 증류수 100mL로 씻어주었다. 얻어진 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>으로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 혼합물은 실리카겔 컬럼으로 분리하여 화합물 **61** (10.1g, 82%)을 얻었다.
- [0134] MS/FAB: 573.68(found), 573.22(calculated)
- [0135] [실시에 1] 본 발명에 따른 유기 전자재료용 화합물을 이용한 OLED 소자 제작
- [0136] 본 발명의 발광 재료를 이용한 구조의 OLED 소자를 제작하였다. 우선, OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막(15 Ω/□)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로, 진공 증착 장비의 기관 폴더에 ITO 기판을 설치하고, 진공 증착 장비 내의 셀에 2-TNATA (4,4',4"-tris(N,N-(2-naphthyl)-phenylamino)triphenylamine)을 넣고, 챔버 내의 진공도가 10<sup>-6</sup> torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 2-TNATA를 증발시켜 ITO 기판 상에 60 nm 두께의 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 N,N'-다이(4-바이페닐)-N,N'-다이(4-바이페닐)-4,4'-다이아미노바이페닐 (N,N'-di(4-biphenyl)-N,N'-di(4-biphenyl)-4,4'-diaminobiphenyl)을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 정공주입층 위에 20 nm 두께의 정공전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트 재료로 10<sup>-6</sup> torr하에서 진공 승화 정제된 본 발명에 따른 화합물 **1**을 넣고, 다른쪽 셀에는 발광 도판트로서 Ir(piq)<sub>3</sub> [tris(1-phenylisoquinoline)iridium]를 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 4 중량%로 도핑함으로써 상기 정공 전달층 위에 30 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 상기 발광층 위에 전자전달층으로써 Alq (tris(8-hydroxyquinoline)-aluminum(III))를 20 nm 두께로 증착한 다음, 전자주입층으로 Liq (lithium quinolate)를 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 150 nm의 두께로 증착하여 OLED를 제작하였다.
- [0137] 재료 별로 각 화합물은 10<sup>-6</sup> torr 하에서 진공 승화 정제하여 OLED 발광재료로 사용하였다.
- [0138] 그 결과, 6.4V의 전압에서 15.4mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 1070cd/m<sup>2</sup>의 적색발광이 확인되었다.
- [0139] [실시에 2]
- [0140] 발광층에서 호스트 재료로서 본 발명의 화합물 **45**를 이용하고 도판트로는 **D-7**을 이용한 것 외에는, 실시에 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0141] 그 결과, 5.7V의 전압에서 5.7mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 450cd/m<sup>2</sup>의 적색발광이 확인되었다.
- [0142] [실시에 3]
- [0143] 발광층에서 호스트 재료로서 본 발명의 화합물 **61**를 이용하고 도판트를 **D-88**을 15중량%로 도핑한 것 외에는, 실시에 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0144] 그 결과, 5.6V의 전압에서 4.8mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 1992cd/m<sup>2</sup>의 녹색발광이 확인되었다.

- [0145] [비교예 1] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제작
- [0146] 발광층에서 호스트 재료로서 본 발명에 따른 유기 전자재료용 화합물 대신에 CBP (4,4'-bis(carbazol-9-yl)biphenyl)를 사용하고, 발광층과 전자전달층 사이에 정공차단층으로 BALq (Bis(2-methyl-8-quinolinato)(p-phenyl-phenolato)aluminum(III))을 10nm 두께로 증착한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0147] 그 결과, 7.8V의 전압에서  $18.5\text{mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $1185\text{cd}/\text{m}^2$ 의 적색발광이 확인되었다.
- [0148] [비교예 2] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제작
- [0149] 도판트로  $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ 를 15중량%로 도핑한 것을 제외하고는 비교예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0150] 그 결과, 7.5 V의 전압에서  $3.8\text{mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $1000\text{cd}/\text{m}^2$ 의 녹색발광이 확인되었다.
- [0151] 본 발명에서 개발한 유기 전자재료용 화합물들의 발광 특성이 종래의 재료 대비 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다. 또한 본 발명에 따른 유기 전자재료용 화합물을 발광용 호스트 재료로 사용한 소자는 발광특성이 뛰어난 뿐만 아니라 구동전압을 0.9~1.3V 강화시켜줌으로써 전력효율의 상승을 유도하여 소비전력을 개선시킬 수 있었다.

专利名称(译)	发明背景1.发明领域本发明涉及用于有机电子材料和有机电致发光器件的新型化合物		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020120021203A</a>	公开(公告)日	2012-03-08
申请号	KR1020110083751	申请日	2011-08-23
[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	AHN HEE CHOON 안희춘 MOON DOO HYEON 문두현 YOON SEOK KEUN 윤석근 KIM NAM KYUN 김남균 CHO YOUNG JUN 조영준 KWON HYUCK JOO 권혁주 LEE KYUNG JOO 이경주 KIM BONG OK 김봉옥		
发明人	안희춘 문두현 윤석근 김남균 조영준 권혁주 이경주 김봉옥		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/54		
CPC分类号	C09K11/06 C09K2211/1029 C09K2211/1033 C09K2211/1037 C09K2211/1044 C09K2211/1051 C09K2211/1059 C09K2211/1066 H01L51/0071 H01L51/50		
代理人(译)	李昌勋		
优先权	1020100084658 2010-08-31 KR		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

#### 摘要(译)

本发明涉及用于正电子材料的新型化合物和包括其的有机电致发光器件。并且根据本发明的用于正电子材料的化合物具有以下优点：可以制造具有改进的功率效率，与预备材料相比发光效率好的OLED器件，并且降低器件的驱动电压。

