



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2017년02월03일
(11) 등록번호 10-1701246
(24) 등록일자 2017년01월24일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2012-0002021
(22) 출원일자 2012년01월06일
심사청구일자 2014년05월27일
(65) 공개번호 10-2013-0016032
(43) 공개일자 2013년02월14일
(30) 우선권주장
1020110078200 2011년08월05일 대한민국(KR)
(56) 선행기술조사문헌
KR101042954 B1
JP4458361 B2
KR1020110088898 A
KR1020110086043 A

(73) 특허권자
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(72) 발명자
이선영
경기 용인시 기흥구 삼성2로 95, (농서동)
곽윤현
경기 용인시 기흥구 삼성2로 95, (농서동)
(74) 대리인
리앤목특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

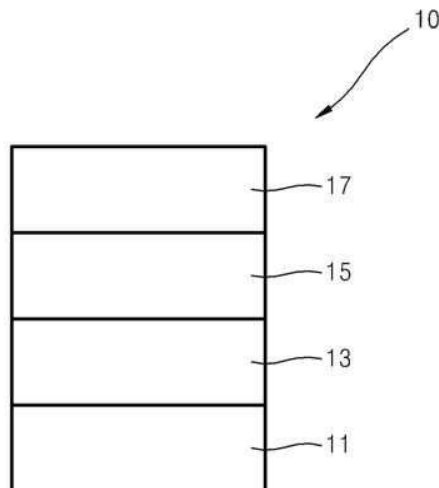
심사관 : 지무근

(54) 발명의 명칭 카바졸계 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자

(57) 요약

카바졸계 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

박범우

경기 용인시 기흥구 삼성2로 95, (농서동)

신대엽

경기 용인시 기흥구 삼성2로 95, (농서동)

이관희

경기 용인시 기흥구 삼성2로 95, (농서동)

정혜인

경기 용인시 기흥구 삼성2로 95, (농서동)

고삼일

경기 용인시 기흥구 삼성2로 95, (농서동)

박미화

경기 용인시 기흥구 삼성2로 95, (농서동)

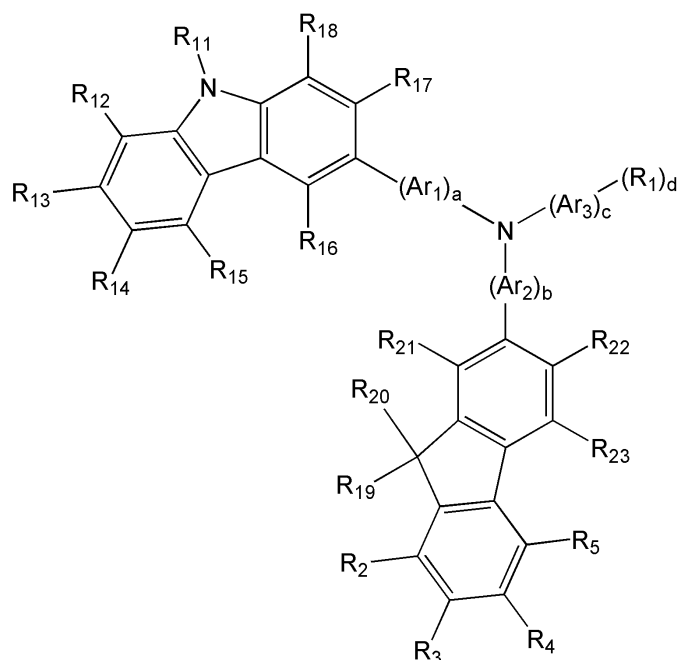
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 인데닐렌기(indenylene), 치환 또는 비치환된 나프틸렌기(naphthylene), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐렌기(heptalenylene), 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기(indacenylene), 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기(acenaphthylene), 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기(fluorenylene), 치환 또는 비치환된 페나레닐렌기(phenalenylene), 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기(phenanthrenylene), 치환 또는 비치환된 안트릴렌기(anthrylene), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기(fluoranthenylene), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기(triphenylenylene), 치환 또는 비치환된 파이레닐렌기(pyrenylene), 치환 또는 비치환된 크라이세닐렌기(chrysenylene), 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기(naphthacenylene), 치환 또는 비치환된 피세닐렌기(picenylene), 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기(peryleneylene), 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기(pentaphenylene), 또는 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기(hexacenylene)이고;

a 및 b는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수이고;

c는 1 내지 5의 정수이고;

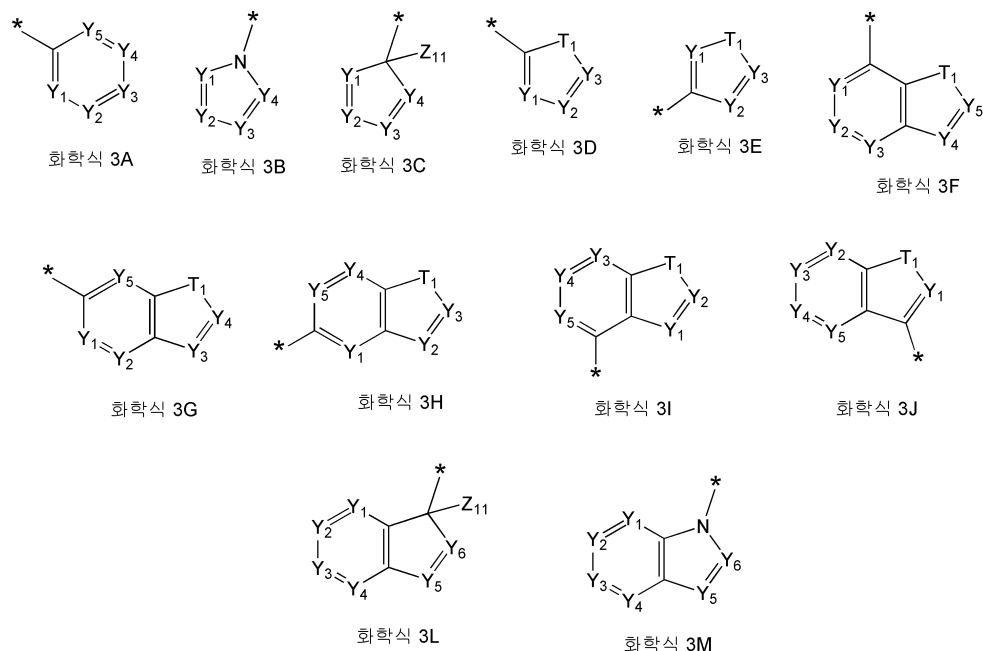
R₁ 내지 R₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₂₀아릴기, 또는 질소-함유 그룹이되, 상기 R₁ 내지 R₅ 중 적어도 하나는 질소-함유 그룹이고;

d는 0 내지 5의 정수이고;

R₁₁ 내지 R₂₃ 및 R₃₁ 내지 R₄₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기,

아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알콕시기, 또는 치환 또는 비치환된 C₆-C₂₀아릴기이고;

상기 질소-함유 그룹은, 하기 화학식 3A 내지 3J, 3L 및 3M 중 어느 하나이다:



하기 화학식 3A 내지 3J, 3L 및 3M 중,

Y₁ 내지 Y₆은 서로 독립적으로, =N- 또는 =C(Z₁₂)-이고;

T₁은 -N(Z₁₃)- 또는 -C(Z₁₄)(Z₁₅)-이고;

Z₁₁ 내지 Z₁₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기이되,

상기 화학식 3F, 3G, 3H 및 3I 중 T₁은 -C(Z₁₄)(Z₁₅)-이고,

상기 화학식 1 및 3A 내지 3J, 3L 및 3M 중 치환된 페닐렌기, 치환된 펜타레닐렌기, 치환된 인데닐렌기, 치환된 나프틸렌기, 치환된 아줄레닐렌기, 치환된 헵탈레닐렌기, 치환된 인다세닐렌기, 치환된 아세나프틸렌기, 치환된 플루오레닐렌기, 치환된 페나레닐렌기, 치환된 페난트레닐렌기, 치환된 안트릴렌기, 치환된 플루오란테닐렌기, 치환된 트리페닐레닐렌기, 치환된 파이레닐렌기, 치환된 크라이세닐렌기, 치환된 나프타세닐렌기, 치환된 피세닐렌기, 치환된 페릴레닐렌기, 치환된 펜타세닐렌기, 치환된 헥사세닐렌기, 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기 및 치환된 C₆-C₆₀아릴기의 치환기 중 적어도 하나는, 중수소, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₆-C₆₀아릴기, C₂-C₆₀헤테로아릴기, -N(Q₁₁)(Q₁₂), 및 -Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅)(여기서, Q₁₁ 내지 Q₁₅는 서로 독립적으로 수소, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₆-C₆₀아릴기, 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택됨)에서 선택된다.

청구항 2

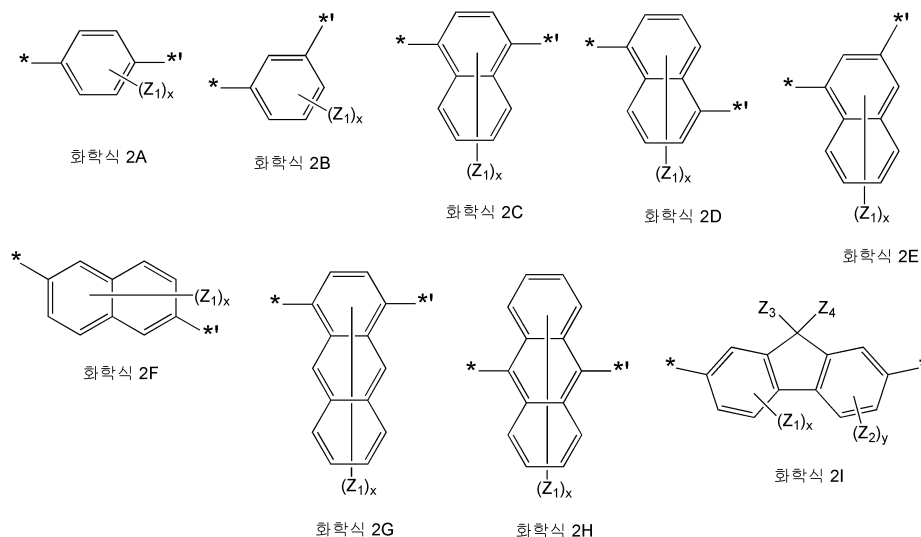
제1항에 있어서,

상기 질소-함유 그룹은, 상기 화학식 3A 내지 3E 및 3M 중 하나인, 카바졸계 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 Ar₁ 내지 Ar₃가 서로 독립적으로, 하기 화학식 2A 내지 2I 중 하나로 표시되는, 카바졸계 화합물:



상기 화학식 2A 내지 2I 중,

Z₁ 내지 Z₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, 또는 C₆-C₆₀아릴기이고;

x는 1 내지 8의 정수이고;

y는 1 내지 3의 정수이다.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 Z₁₁ 내지 Z₁₅가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알콕시기 또는 치환 또는 비치환된 C₆-C₂₀아릴기인, 카바졸계 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 Z₁₁ 내지 Z₁₅가 서로 독립적으로,

수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, 및 C₁-C₁₀알콕시기;

중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 하나 이상으로 치환된, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기;

페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기 및 파이레닐기; 및

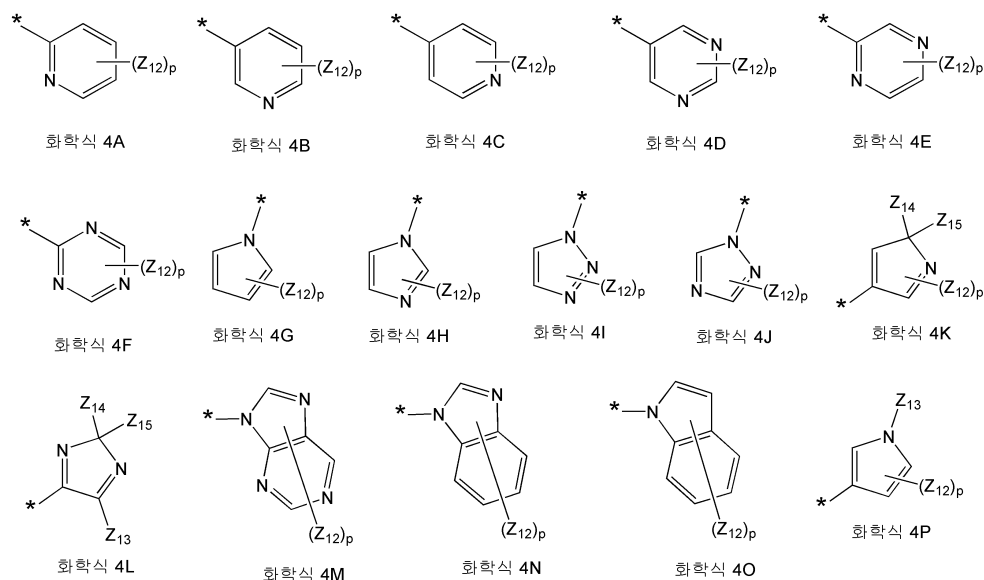
중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기 및 파이레닐기;

중에서 선택된, 카바졸계 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 질소-함유 그룹이, 하기 화학식 4A 내지 4P 중 어느 하나인, 카바졸계 화합물:



상기 화학식 4A 내지 4P 중,

Z₁₂, Z₁₃, Z₁₄ 및 Z₁₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기이고;

p는 1 내지 6의 정수이다.

청구항 7

제1항에 있어서,

R₁이 질소-함유 그룹이고, c 및 d가 서로 독립적으로 1 또는 2인, 카바졸계 화합물.

청구항 8

제1항에 있어서,

R₂ 내지 R₅ 중 적어도 하나가 질소-함유 그룹인, 카바졸계 화합물.

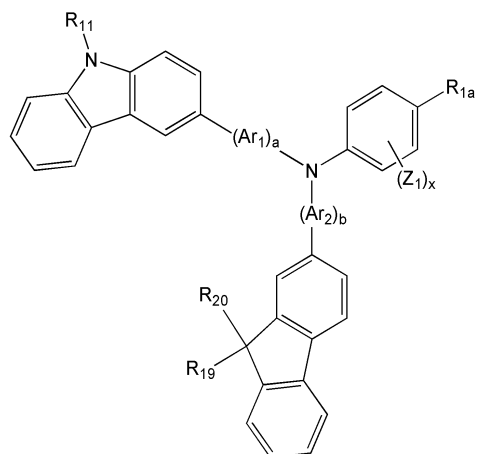
청구항 9

제1항에 있어서,

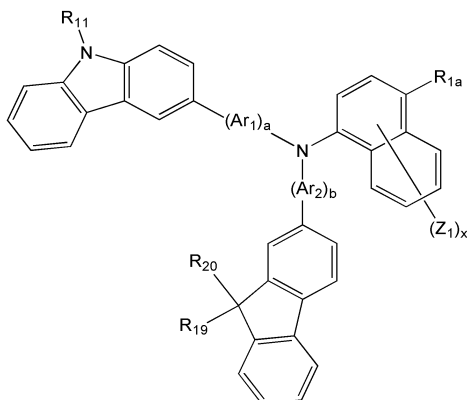
하기 화학식 1A 내지 1K 중 어느 하나로 표시되는, 카바졸계 화합물:

<화학식 1A>

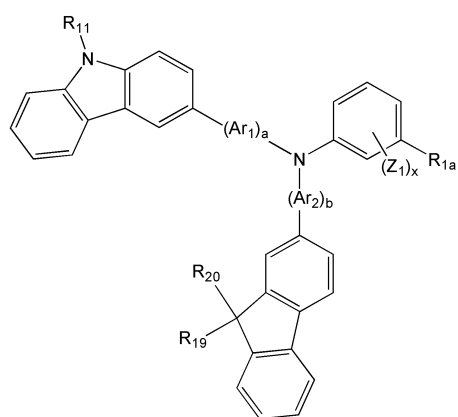
<화학식 1B>



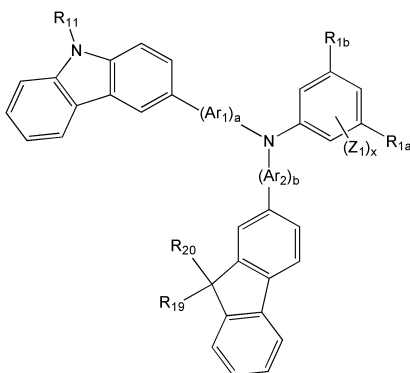
<화학식 1C>



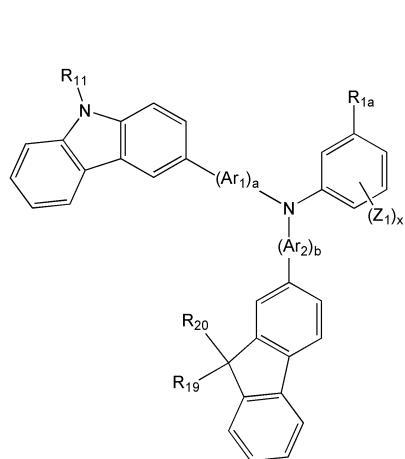
<화학식 1D>



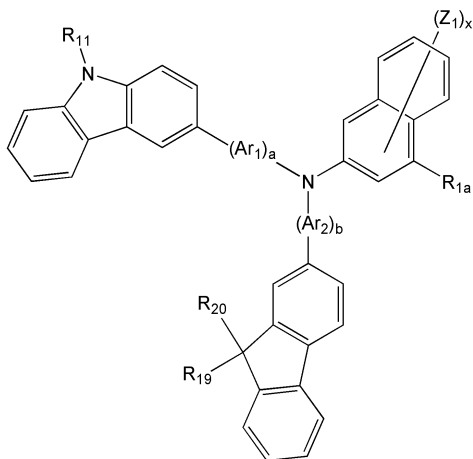
<화학식 1E>



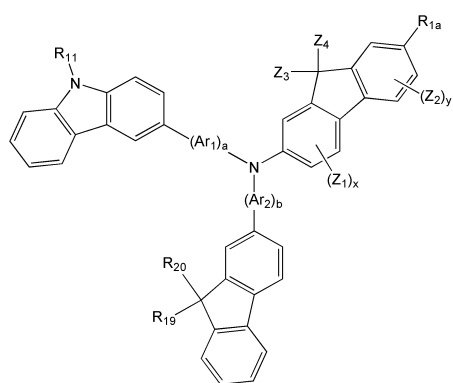
<화학식 1F>



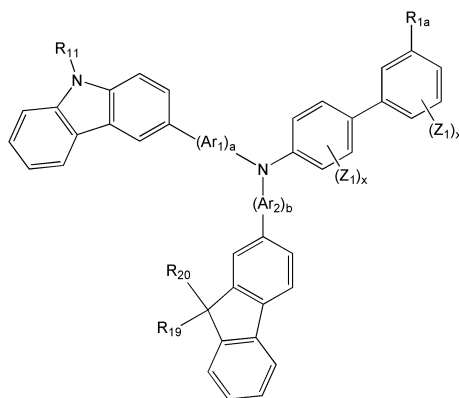
<화학식 1G>



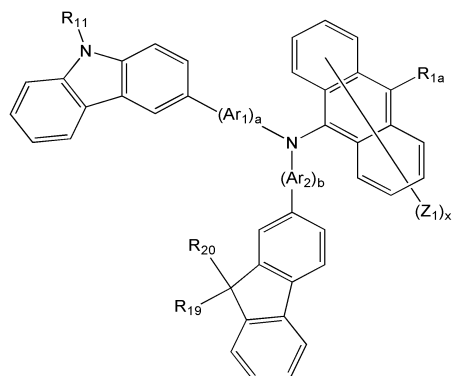
<화학식 1H>



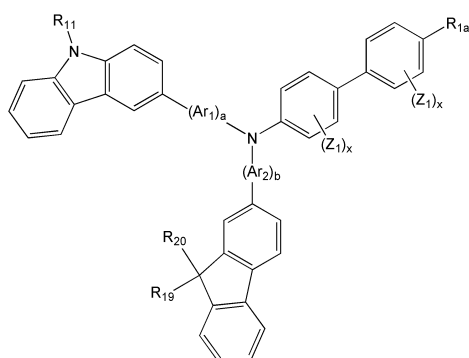
<화학식 1I>



<화학식 1J>



<화학식 1K>



상기 화학식 1A 내지 1K 중,

Ar₁ 및 Ar₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기(pentalenylene), 치환 또는 비치환된 인데닐렌기(indenylene), 치환 또는 비치환된 나프틸렌기(naphthylene), 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기(azulenylene), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐렌기(heptalenylene), 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기(indacenylene), 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기(acenaphthylene), 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기(fluorenylene), 치환 또는 비치환된 페나레닐렌기(phenalenylene), 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기(phenanthrenylene), 치환 또는 비치환된 안트릴렌기(anthrylene), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기(fluoranthenylene), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기(triphenylenylene), 치환 또는 비치환된 파이레닐렌기(pyrenylene), 치환 또는 비치환된 크라이세닐렌기(chrysenylene), 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기(naphthacenylene), 치환 또는 비치환된 피세닐렌기(picenylene), 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기(peryleneylene), 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기(pentaphenylene), 또는 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기(hexacenylene)이고;

a 및 b는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수이고;

R_{1a} , R_{1b} 및 R_3 는 상기 질소-함유 그룹이고;

R_{11} , R_{19} 및 R_{20} 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 아릴기이고;

Z_1 내지 Z_4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기, C_1 - C_{60} 알콕시기, C_6 - C_{60} 아릴기이고;

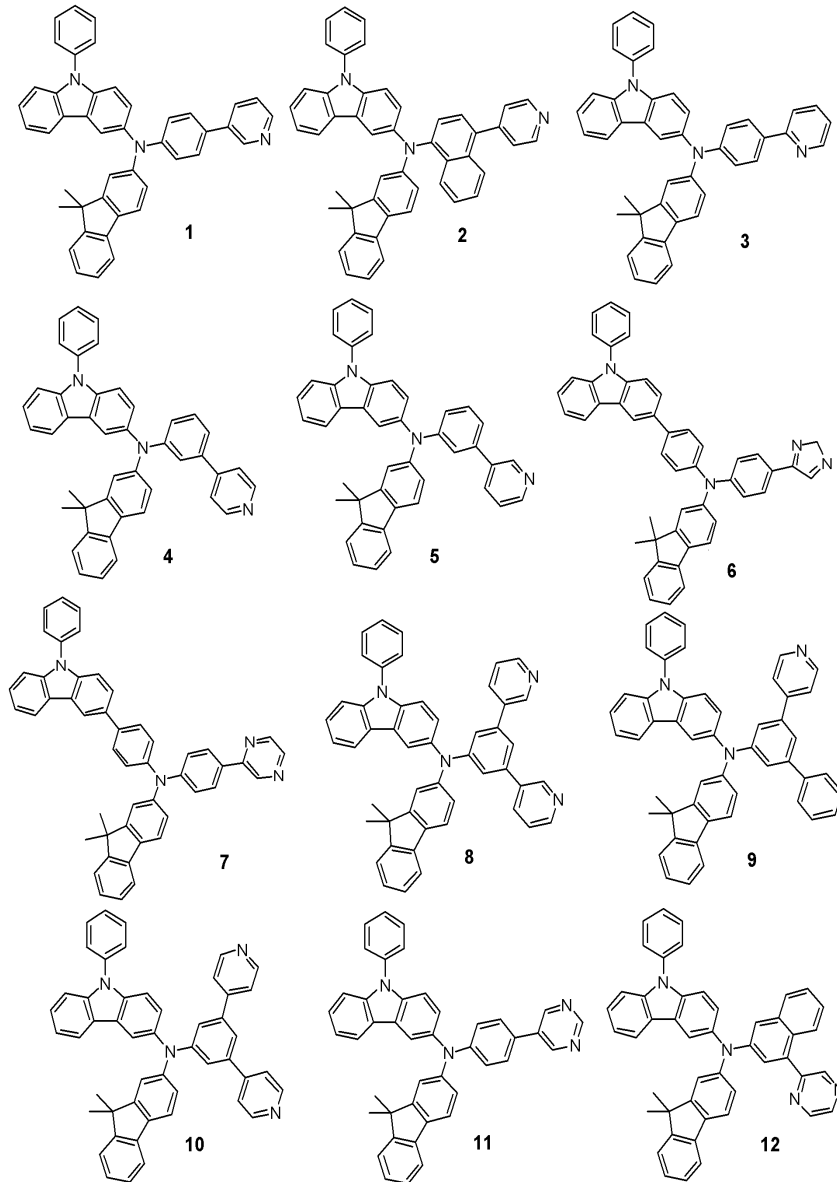
x는 1 내지 8의 정수이고;

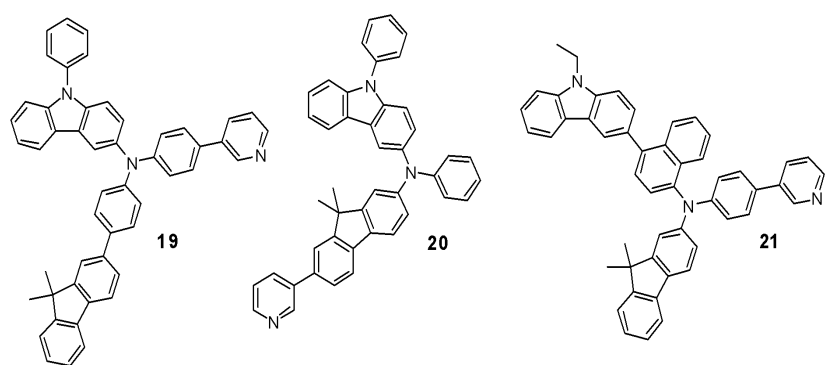
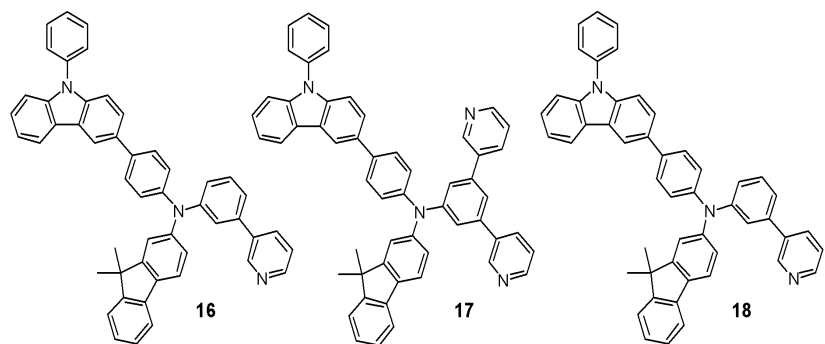
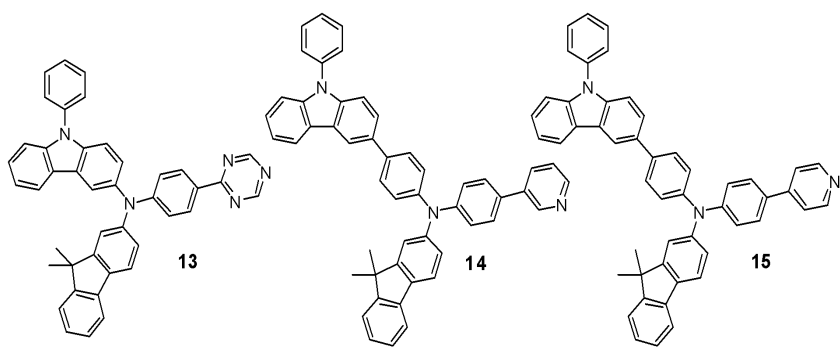
y는 1 내지 3의 정수이다.

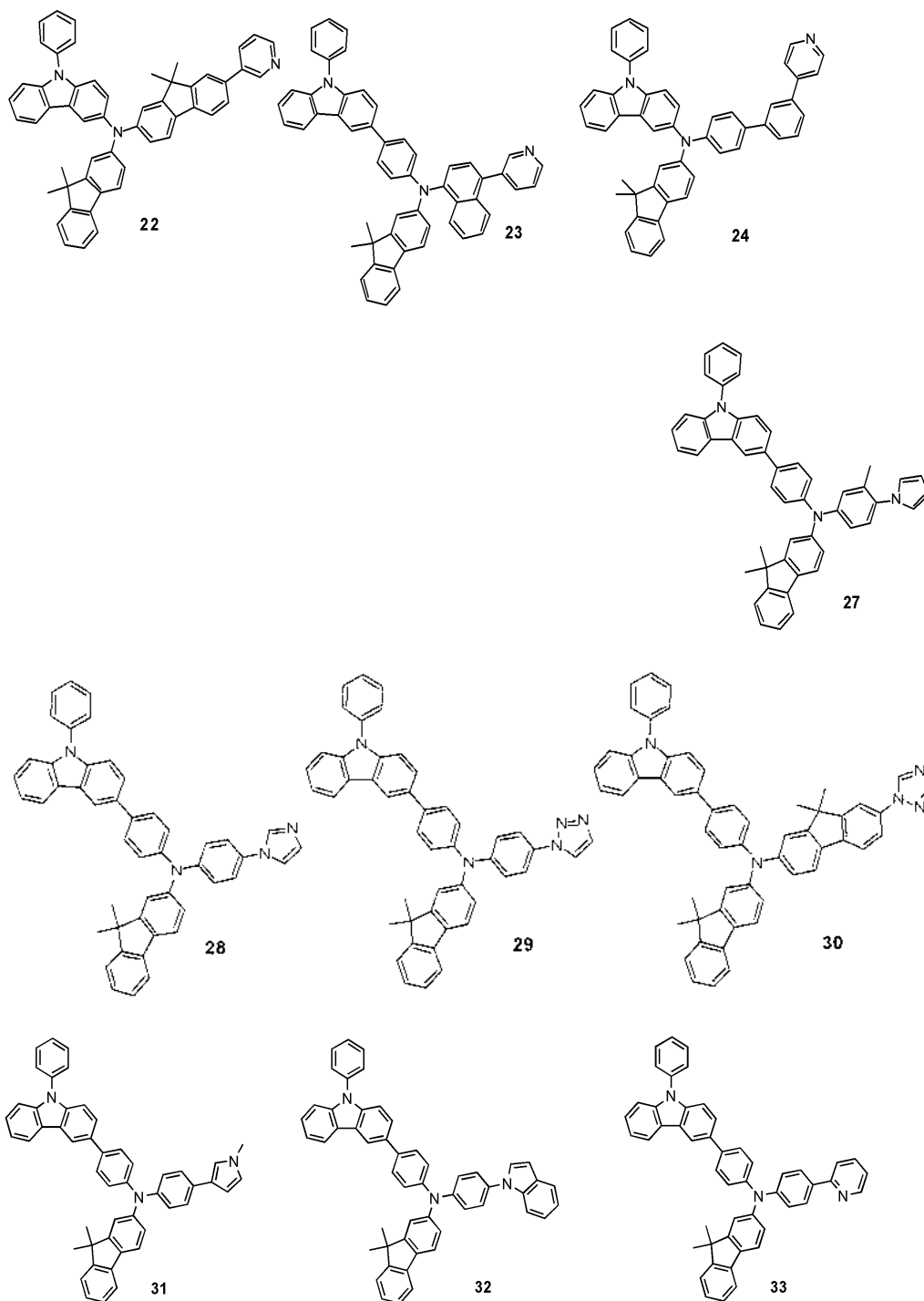
청구항 10

제1항에 있어서,

하기 화합물 1 내지 24 및 27 내지 33 중 하나인, 카바졸계 화합물:







청구항 11

제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 제1항 내지 제10항 중 어느 한 항의 카바졸계 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 12

제11항에 있어서,

상기 유기층이, 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 버퍼층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 주입 및 전자 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 13

제12항에 있어서,

상기 유기층이 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나 및 발광층을 포함하고, 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나에 상기 카바졸계 화합물이 포함되어 있는, 유기 발광 소자.

청구항 14

제13항에 있어서,

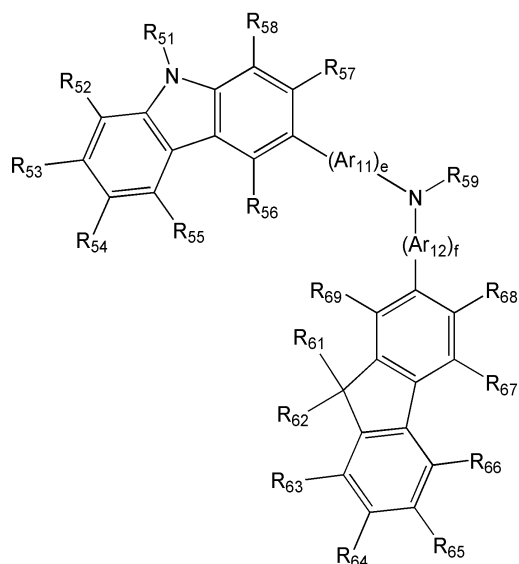
상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나가, 상기 카바졸계 화합물 외에, 상기 카바졸계 화합물의 정공 이동도 및 전도도보다 큰 정공 이동도 및 전도도를 갖는 양쪽성(bipolar) 화합물을 더 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 15

제14항에 있어서,

상기 양쪽성 화합물이 하기 화학식 300으로 표시되는, 유기 발광 소자:

<화학식 300>



상기 화학식 300 중,

Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기이고;

e 및 f 는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수이고;

R_{51} 내지 R_{58} 및 R_{61} 내지 R_{69} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 또는 치환 또는 비치환된 C_6-C_{60} 아릴싸이오기이고,

R_{59} 는,

페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 바이페닐기 및 피리딜기;

및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{20} 알킬기, 및 치환 또는 비치환된 C_1-C_{20} 알콕시기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 바이페닐기 및 피리딜기;

중 하나이고,

상기 치환된 C_6-C_{60} 아릴렌기, 치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환된 C_3-C_{60} 시클로알킬기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴기, 치환된 C_6-C_{60} 아릴옥시기, 및 치환된 C_6-C_{60} 아릴싸이오기의 치환기 중 적어도 하나는, 중수소, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_1-C_{60} 알콕시기, C_6-C_{60} 아릴기, C_2-C_{60} 헤테로아릴기, $-N(Q_{11})(Q_{12})$, 및 $-Si(Q_{13})(Q_{14})(Q_{15})$ (여기서, Q_{11} 내지 Q_{15} 는 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_6-C_{60} 아릴기, 및 C_2-C_{60} 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택됨)에서 선택된다.

청구항 16

제13항에 있어서,

상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나가, 상기 카바졸계 화합물 외에, 전하-생성 물질을 더 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 17

제13항에 있어서,

상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나와 상기 발광층 사이에 버퍼층이 개재된, 유기 발광 소자.

청구항 18

제13항에 있어서,

상기 발광층이 인광 도펀트를 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 19

제12항에 있어서,

상기 유기층이 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층에 상기 카바졸계 화합물이 포함되어 있는, 유기 발광 소자.

청구항 20

제12항에 있어서,

상기 유기층이 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층이 전자 수송성 유기 화합물 및 금속-함유 물질을 포함한, 유기 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 카바졸계 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.

배경 기술

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting diode)는 자발광형 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라, 응답시간이 빠르며, 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.

[0003] 일반적인 유기 발광 소자는 기판 상부에 애노드가 형성되어 있고, 이 애노드 상부에 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 여기에서 정공수송층, 발광층 및 전자수송층은 유기화합물로 이루어진 유기 박막들이다.

[0004] 상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기 발광 소자의 구동 원리는 다음과 같다.

[0005] 상기 애노드 및 캐소드간에 전압을 인가하면, 애노드로부터 주입된 정공은 정공수송층을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자수송층을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exiton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

발명의 내용

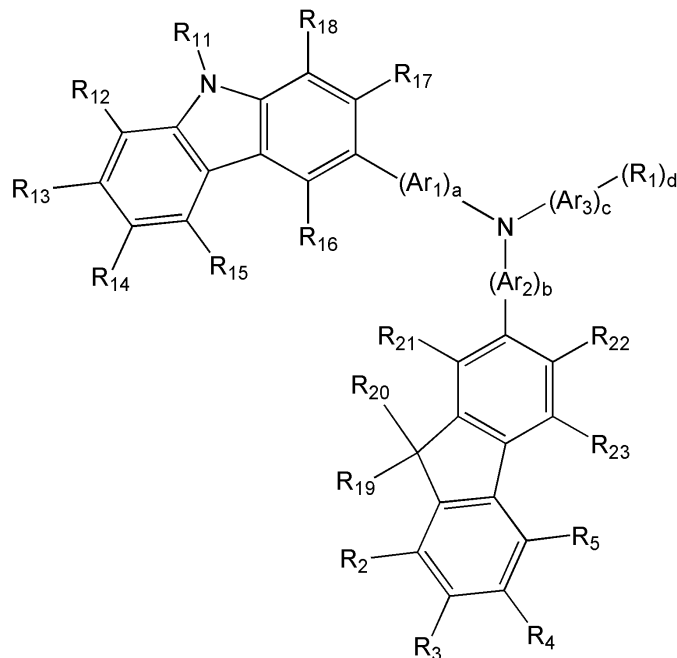
해결하려는 과제

[0006] 신규 구조를 갖는 카바졸계 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자를 제공한다.

과제의 해결 수단

[0007] 하기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물이 제공된다:

[0008] <화학식 1>



[0009]

[0010] 상기 화학식 1 중,

[0011] Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기이고;

[0012] a 및 b는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수이고;

[0013] c는 1 내지 5의 정수이고;

[0014] R₁ 내지 R₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴사이오기, -Si(R₃₁)(R₃₂)(R₃₃), -N(R₃₄)(R₃₅) 또는 질소-함유 그룹이 되, 상기 R₁ 내지 R₅ 중 적어도 하나는 질소-함유 그룹이고;

[0015] d는 0 내지 5의 정수이고;

[0016] R₁₁ 내지 R₂₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미

디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기, -Si(R₃₆)(R₃₇)(R₃₈) 또는 -N(R₃₉)(R₄₀)이고;

[0017] 상기 R₃₁ 내지 R₄₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기이고;

[0018] 상기 질소-함유 그룹은, 적어도 하나의 질소를 고리 원자(ring atom)로서 포함한 5원(5-membered) 방향족(aromatic) 고리 그룹, 6원(6-membered) 방향족 고리 그룹, 또는 5원 방향족 그룹과 6원 방향족 그룹이 융합된(fused) 9원(9-membered) 방향족 고리 그룹이다.

[0019] 또한, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상기 카바졸계 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

[0020] 상기 카바졸계 화합물을 포함한 유기 발광 소자는, 저구동 전압, 고휘도, 고효율 및 장수명을 가질 수 있다.

도면의 간단한 설명

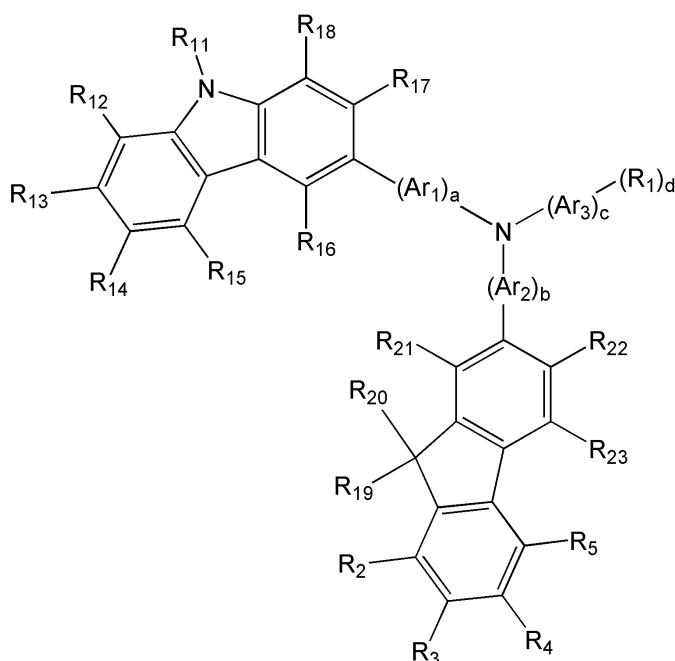
[0021] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

도 2는 실시예 11 내지 13 및 비교예 11의 유기 발광 소자의 시간-휘도 그래프를 도시한 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0022] 상기 카바졸계 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0023] <화학식 1>

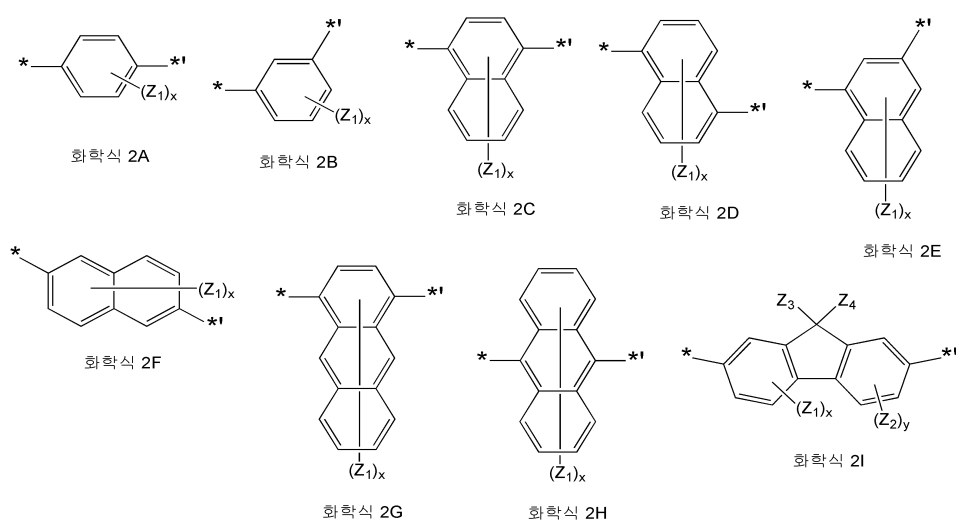


[0024]

[0025] 상기 화학식 1 중, Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기이다.

[0026] 예를 들어, 상기 Ar_1 내지 Ar_3 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기(pentalenylene), 치환 또는 비치환된 인데닐렌기(indenylene), 치환 또는 비치환된 나프틸렌기(naphthylene), 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기(azulenylene), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐렌기(heptalenylene), 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기(indacenylene), 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기(acenaphthylene), 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기(fluorenylene), 치환 또는 비치환된 페나레닐렌기(phenalenylene), 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기(phenanthrenylene), 치환 또는 비치환된 안트릴렌기(anthrylene), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기(fluoranthenylene), 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기(triphenylenylene), 치환 또는 비치환된 파이레닐렌기(pyrenylene), 치환 또는 비치환된 크라이세닐렌기(chrysenylene), 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기(naphthacenylene), 치환 또는 비치환된 피세닐렌기(picenylene), 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기(peryleneylene), 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기(pentaphenylene), 또는 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기(hexacenylene)일 수 있다.

[0027] 예를 들어, 상기 Ar_1 내지 Ar_3 가 서로 독립적으로, 하기 화학식 2A 내지 2I 중 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0028]

[0029] 상기 화학식 2A 내지 2I 중, Z_1 내지 Z_4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴싸이오기, $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 또는 $-N(Q_4)(Q_5)$ 일 수 있다. 여기서, Q_1 내지 Q_5 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴싸이오기, 또는 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 헤테로아릴기일 수 있다.

[0030] 예를 들어, 상기 화학식 2A 내지 2I 중, Z_1 내지 Z_4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알콕시기 또는 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{20} 아릴기일 수 있다.

[0031] 예를 들어, 상기 화학식 2A 내지 2I 중, Z_1 내지 Z_4 는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기

나 이의 염; 인산이나 이의 염; C_1 - C_{10} 알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등); C_1 - C_{10} 알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기 등); 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 하나 이상으로 치환된 C_1 - C_{10} 알킬기 및 C_1 - C_{10} 알콕시기; 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 플루오레닐기; 파이레닐기; 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1 - C_{10} 알킬기 및 C_1 - C_{10} 알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기 및 파이레닐기; 중 하나 일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0032] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2A 내지 2I 중, Z_1 내지 Z_4 는 서로 독립적으로, 수소, 메틸기 또는 페닐기일 수 있다.

[0033] 상기 화학식 2A 내지 2I 중, x 는 1 내지 8의 정수이고, y 는 1 내지 3의 정수일 수 있다. 상기 x 및 y 는 화학식 2A 내지 2I의 구조를 참조하여, 상기 범위에서 적절히 선택될 수 있다. x 가 2 이상일 경우, 2 이상의 Z_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. y 가 2 이상일 경우, 2 이상의 Z_2 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0034] 상기 화학식 2A 내지 2I 중 *는 화학식 1의 중앙에 위치한 질소와의 결합 사이트를 표시한 것이고, '*'는 화학식 1 중 R_1 , 카바졸 고리 또는 플루오렌 고리와 결합 사이트를 표시한 것이다.

[0035] 상기 화학식 1 중, a 및 b 는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수일 수 있다. a 및/또는 b 가 0일 경우, 화학식 1의 카바졸 고리 및/또는 플루오렌 고리는 화학식 1의 중앙에 위치한 질소에 직접(directly) 결합될 수 있다. 예를 들어, 상기 a 및 b 는 0, 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. a 가 2 이상일 경우, 2 이상의 Ar_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. b 가 2 이상일 경우, 2 이상의 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

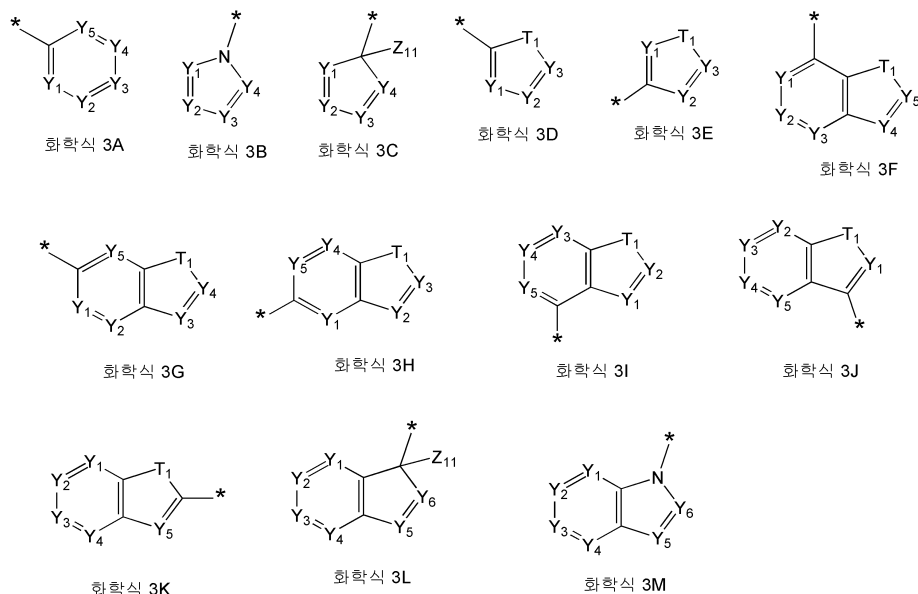
[0036] 상기 화학식 1 중, c 는 1 내지 5의 정수일 수 있다. 즉, 화학식 1 중, Ar_3 는 반드시 존재한다. 예를 들어, 상기 c 는 상기 c 는 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. c 가 2 이상일 경우, 2 이상의 Ar_3 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0037] 상기 화학식 1 중, R_1 내지 R_5 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴싸이오기, $-Si(R_{31})(R_{32})(R_{33})$, $-N(R_{34})(R_{35})$ 또는 질소-함유 그룹이되, 상기 R_1 내지 R_5 중 적어도 하나는 질소-함유 그룹이다.

[0038] 예를 들어, 상기 R_1 내지 R_5 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{20} 아릴기, 또는 질소-함유 그룹이되, 상기 R_1 내지 R_5 중 적어도 하나는 질소-함유 그룹이다.

[0039] 상기 질소-함유 그룹은, 적어도 하나의 질소를 고리 원자(ring atom)로서 포함한 5원(5-membered) 방향족(aromatic) 고리 그룹, 6원(6-membered) 방향족 고리 그룹, 또는 5원 방향족 그룹과 6원 방향족 그룹이 융합된(fused) 9원(9-membered) 고리 방향족 그룹이다. 본 명세서 중 "고리 원자"란 고리를 구성하고 있는 원자를 의미하는 것이다.

[0040] 예를 들어, 상기 질소-함유 그룹은, 하기 화학식 3A 내지 3M 중 어느 하나일 수 있다:



[0041]

[0042] 하기 화학식 3A 내지 3M 중, Y_1 내지 Y_6 은 서로 독립적으로, $=N-$ 또는 $=C(Z_{12})-$ 이고, T_1 은 $-N(Z_{13})-$ 또는 $-C(Z_{14})(Z_{15})-$ 일 수 있다. 즉, 상기 질소-함유 그룹의 고리 원자는 질소 또는 탄소일 수 있다.

[0043]

상기 화학식 3A 내지 3M 중, Z_{11} 내지 Z_{15} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴옥시기, 또는 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴싸이오기일 수 있다.

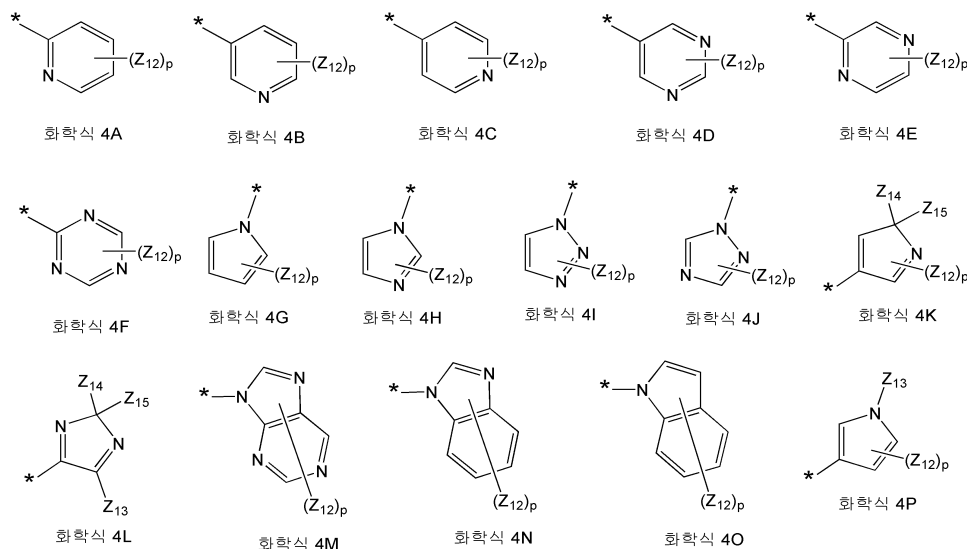
[0044]

예를 들어, 상기 Z_{11} 내지 Z_{15} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 알콕시기 또는 치환 또는 비치환된 C_5-C_{20} 아릴기일 수 있다.

[0045]

또한, 상기 Z_{11} 내지 Z_{15} 는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C_1-C_{10} 알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등); C_1-C_{10} 알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로톡시기, 부톡시기, 펜톡시기 등); 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 하나 이상으로 치환된 C_1-C_{10} 알킬기 및 C_1-C_{10} 알콕시기; 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 플루오레닐기; 파이레닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1-C_{10} 알킬기 및 C_1-C_{10} 알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기 및 파이레닐기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0046] 예를 들어, 상기 질소-함유 그룹은, 하기 화학식 4A 내지 4P 중 어느 하나일 수 있다:



[0047]

[0048] 상기 화학식 4A 내지 4P 중, Z_{12} , Z_{13} , Z_{14} 및 Z_{15} 에 대한 설명은 상술한 바와 같다.

[0049]

일 구현예에 따르면, 상기 Z_{12} , Z_{13} , Z_{14} 및 Z_{15} 는 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 또는 부틸기일 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 4A 내지 4P 중, Z_{12} , Z_{13} , Z_{14} 및 Z_{15} 는 수소일 수 있다.

[0050]

상기 화학식 4A 내지 4P 중, p 는 1 내지 6의 정수이다. 상기 p 는 화학식 4A 내지 4P의 구조에 따라 상기 범위 내에서 적절히 선택될 수 있다. 상기 p 가 2 이상일 경우, 2 이상의 Z_{12} 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0051]

상기 화학식 1 중, d 는 0 내지 5의 정수일 수 있다. 예를 들어, 상기 d 는 0, 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 d 는 Ar_3 의 구조에 따라 상기 범위 내에서 적절히 선택될 수 있다. 상기 d 가 2 이상일 경우, 2 이상의 R_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0052]

상기 화학식 1 중, R_{11} 내지 R_{23} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{60} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴싸이오기, $-Si(R_{36})(R_{37})(R_{38})$ 또는 $-N(R_{39})(R_{40})$ 일 수 있다.

[0053]

예를 들어, 상기 R_{11} 내지 R_{23} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알콕시기 또는 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{20} 아릴기일 수 있다.

[0054]

또한, 상기 R_{11} 내지 R_{23} 은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C_1 - C_{10} 알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등); C_1 - C_{10} 알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로톡시기, 부톡시기, 펜톡시기 등); 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 하나 이상으로 치환된 C_1 - C_{10} 알킬기 및 C_1 - C_{10} 알콕시기; 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 플루오레닐기; 파이레닐

기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기 및 파이레닐기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0055] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, R₁₂ 내지 R₁₈ 및 R₂₁ 내지 R₂₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 또는 인산이나 이의 염이고, R₁₁, R₁₉ 및 R₂₀은 서로 독립적으로, 수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기 또는 파이레닐기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0056] 상기 -Si(R₃₁)(R₃₂)(R₃₃), -N(R₃₄)(R₃₅), -Si(R₃₆)(R₃₇)(R₃₈) 및 -N(R₃₉)(R₄₀) 중, R₃₁ 내지 R₄₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기일 수 있다.

[0057] 예를 들어, 상기 R₃₁ 내지 R₄₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알콕시기 또는 치환 또는 비치환된 C₅-C₂₀아릴기일 수 있다.

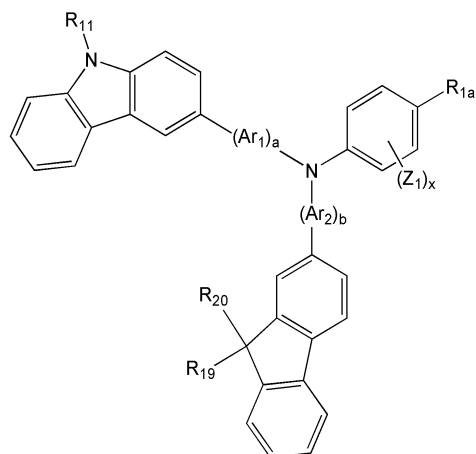
[0058] 또한, 상기 R₃₁ 내지 R₄₀은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C₁-C₁₀알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등); C₁-C₁₀알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기 등); 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 하나 이상으로 치환된 C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기; 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 플루오레닐기; 파이레닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기 및 파이레닐기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0059] 상기 Q₁ 내지 Q₅에 대한 설명은 상기 R₃₁에 대한 설명을 참조한다.

[0060] 상기 화학식 1 중, R₁이 질소-함유 그룹이고, c 및 d가 서로 독립적으로 1 또는 2일 수 있다. 또는, 상기 화학식 1 중, R₂ 내지 R₅ 중 적어도 하나가 질소-함유 그룹일 수 있다.

[0061] 상술한 바와 같은 카바졸계 화합물은 하기 화학식 1A 내지 1K 중 어느 하나로 표시될 수 있다:

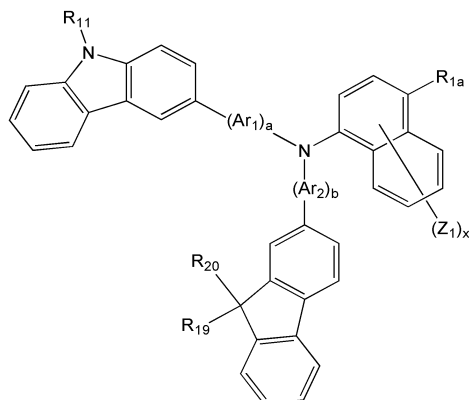
[0062] <화학식 1A> <화학식 1B>



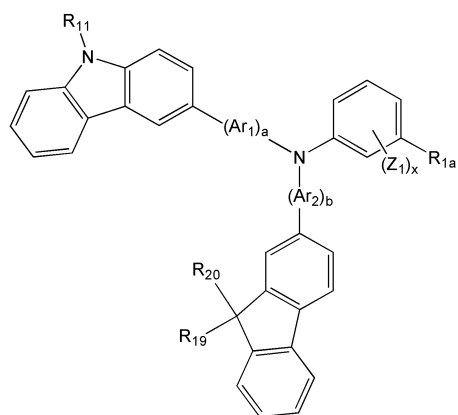
[0063]

[0064]

<화학식 1C>



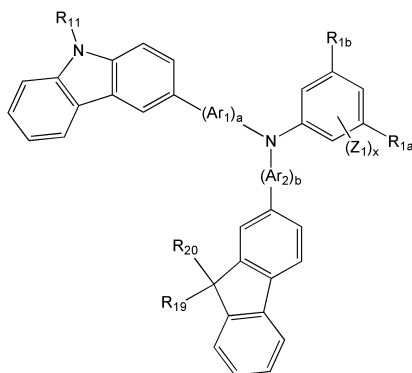
<화학식 1D>



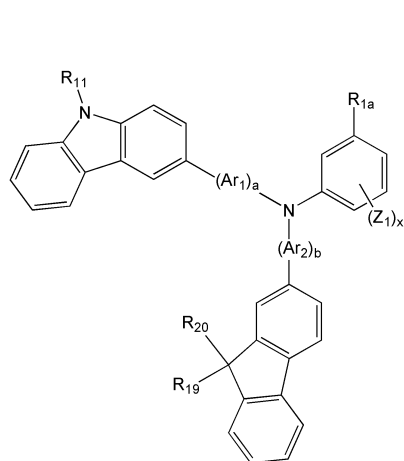
[0065]

[0066]

<화학식 1E>



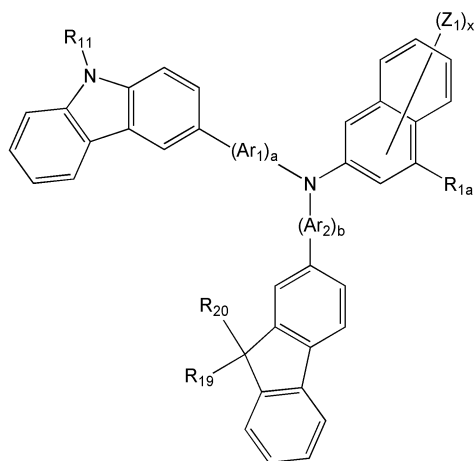
<화학식 1F>



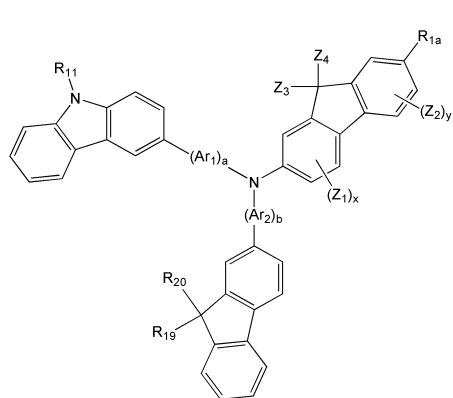
[0067]

[0068]

<화학식 1G>



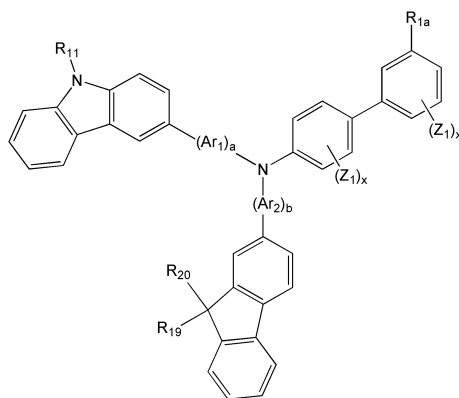
<화학식 1H>



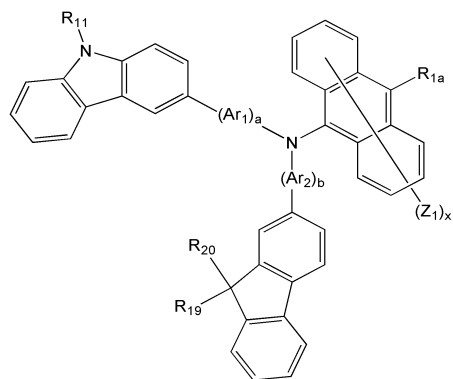
[0069]

[0070]

<화학식 1I>



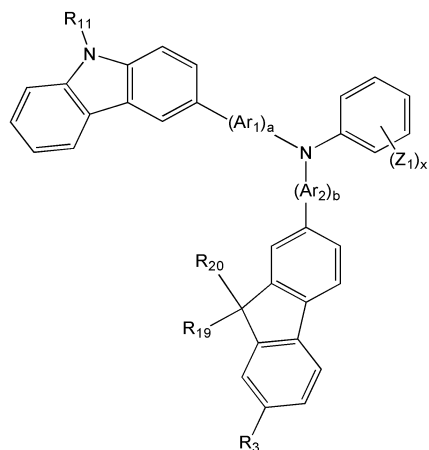
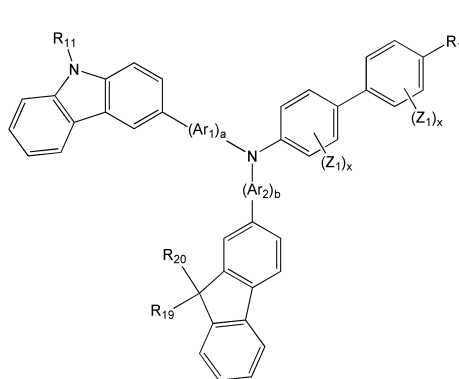
<화학식 1J>



[0071]

[0072]

<화학식 1K>



[0073]

[0074]

상기 화학식 1A 내지 1K 중, Ar_1 , Ar_2 , a , b , R_{11} , R_{19} , R_{20} , Z_1 내지 Z_4 , Q_1 내지 Q_5 및 x 에 대한 설명은 상술한 바를 참조한다.

[0075]

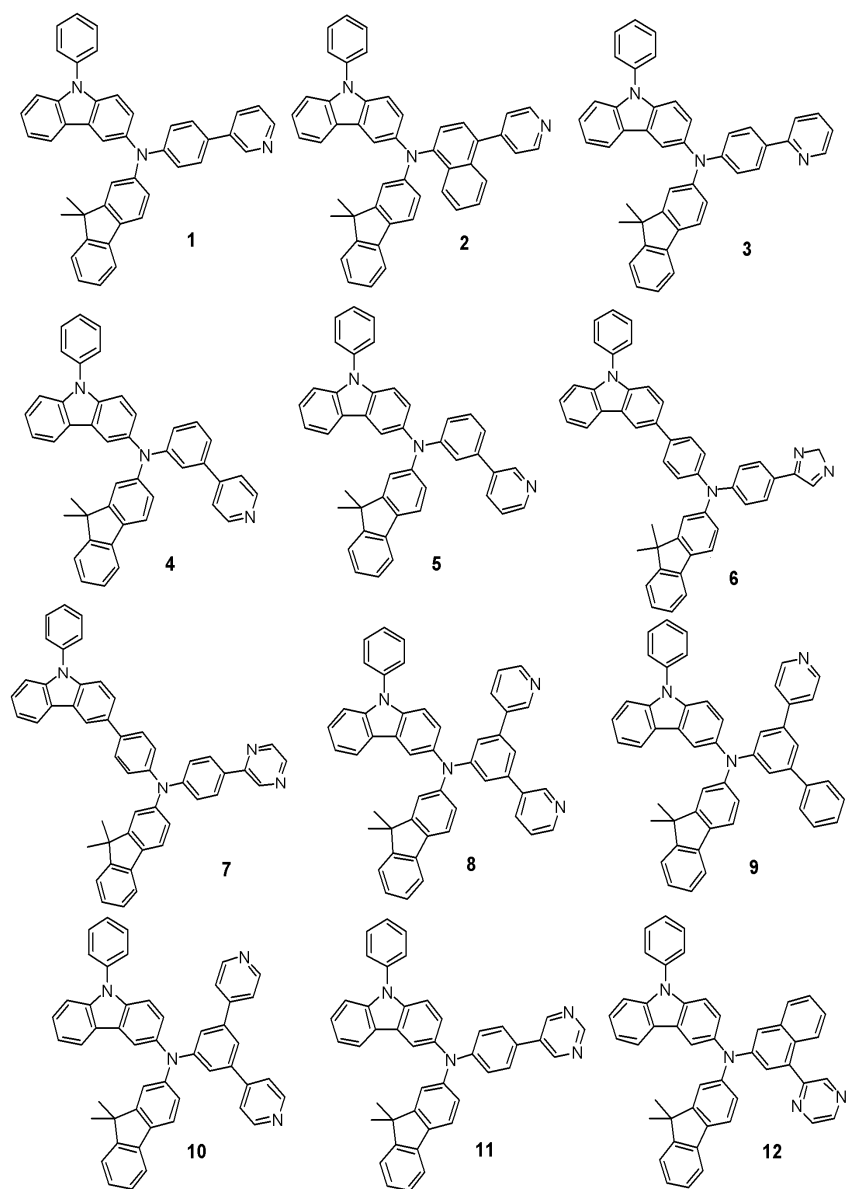
상기 화학식 1A 내지 1K 중 R_{1a} , R_{1b} 및 R_3 는 상술한 바와 같은 질소-함유 그룹이다. 상기 질소-함유 그룹에 대한 설명은 상술한 바를 참조한다.

[0076]

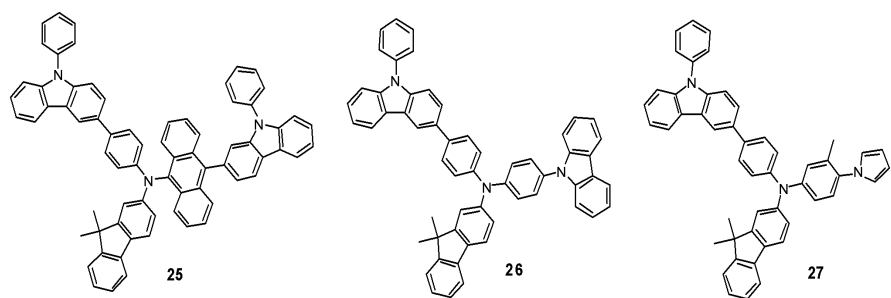
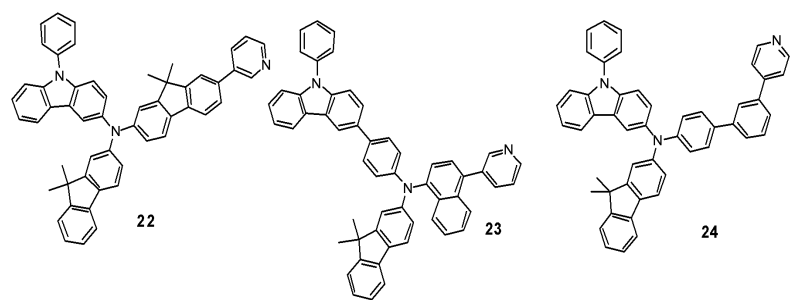
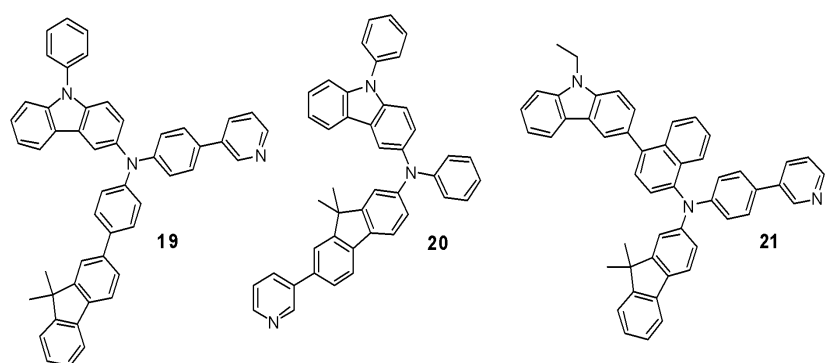
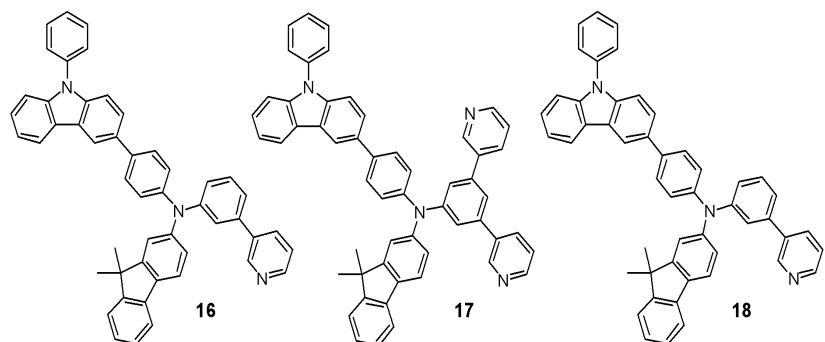
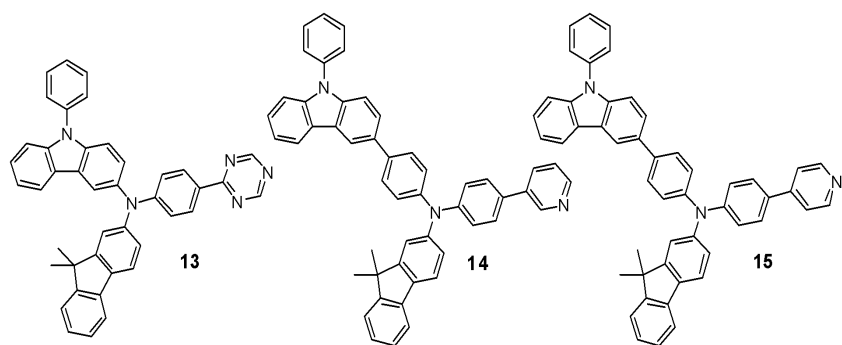
예를 들어, 상기 화학식 1A 내지 1K 중, Ar_1 및 Ar_2 는 상기 화학식 2A 내지 2I 중 하나이고; a 및 b 는 서로 독립적으로, 0 또는 1이고; R_{1a} , R_{1b} 및 R_3 는 서로 독립적으로, 상기 화학식 3A 내지 3M 중 어느 하나이고; Z_1 내지 Z_4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알콕시기 또는 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{20} 아릴기이고; x 는 1 내지 8의 정수일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

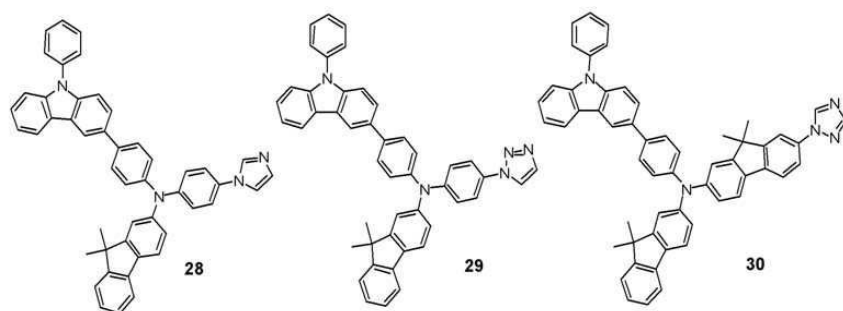
[0077]

상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물은, 예를 들어, 하기 화합물 1 내지 32 중 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

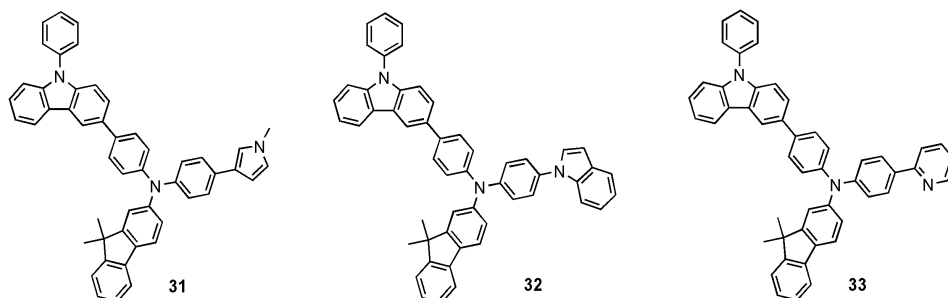


[0078]





[0081]



[0082]

[0083]

상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물은 트리아릴아민 구조를 가지면서, R_1 내지 R_5 중 적어도 하나가 본질적으로(essentially) 상술한 바와 같은 질소-함유 그룹이므로, 높은 유리 전이 온도 및/또는 용점을 가지면서, 전자 주입에 대하여 안정할 수 있다. 따라서, 상기 카바졸계 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극(애노드 및 캐소드) 사이에 개재될 경우, 유기 발광 소자의 구동시 한 쌍의 전극 사이의 유기층 중, 유기층들 사이 또는 유기층과 전극 사이에 발생하는 줄 열에 대하여 높은 내열성을 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 카바졸계 화합물은, 발광층과 애노드 사이에 개재될 경우 발광층을 통과하여 전달될 수 있는 전자에 의하여 실질적으로 열화되지 않을 수 있고, 발광층과 캐소드 사이에 개재될 경우 발광층을 통과하여 전달될 수 있는 정공에 의하여 실질적으로 열화되지 않을 수 있다.

[0084]

또한, 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물은 플루오렌 고리를 본질적으로 포함하므로, 상기 카바졸계 화합물을 포함하는 필름은 높은 평탄화도를 가질 수 있는 바, 상기 카바졸계 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 우수한 전기적 특성을 가질 수 있다.

[0085]

나아가, 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물 중 R_1 내지 R_5 중 적어도 하나가 상술한 바와 같은 질소-함유 그룹인데, 상기 질소-함유 그룹을 통하여 정공 이동도 조절이 용이해지므로 상기 카바졸계 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 전하(전자 및 정공) 균형(balance)이 극대화되어, 발광층에서의 발광 효율이 증가될 수 있다. 정공 이동 속도는 전자 이동 속도에 비하여 상대적으로 크므로, 애노드로부터 주입된 정공은 전자에 비하여 발광층에 과다 주입될 수 있다. 이로써, 발광층 중 엑시톤 형성 영역이 캐소드쪽으로 치우치거나, 과다 주입된 정공에 의하여 발광층 등의 유기층이 열화되어 유기 발광 소자의 수명이 감소될 수 있다. 그러나, 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물 중 R_1 내지 R_5 중 적어도 하나일 수 있는 질소-함유 그룹에 의하여, 정공 이동도가 제어(예를 들면, 정공 이동도가 상대적으로 감소될 수 있음)됨으로써, 발광층에 도달하는 정공 및 전자의 균형이 극대화될 수 있고, 이로써, 장수명 유기 발광 소자를 구현할 수 있다.

[0086]

뿐만 아니라, 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물 중 R_1 내지 R_5 중 적어도 하나일 수 있는 질소-함유 그룹에 의하여, 발광층으로부터 확산(diffusion)된 전자가 안정화될 수 있다는 점에서, 장수명 유기 발광 소자 구현에 기여할 수 있다.

[0087]

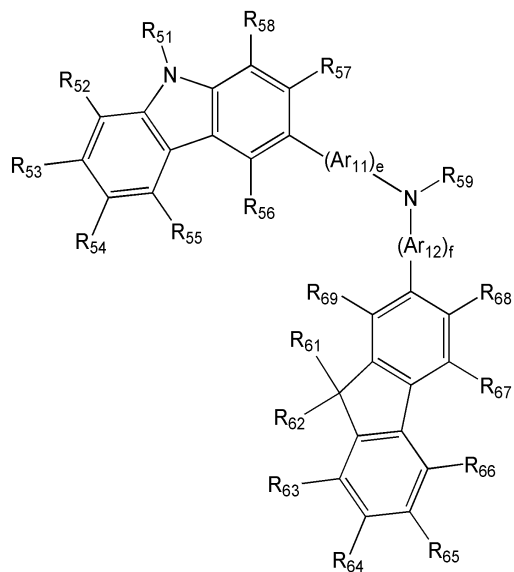
한편, 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물 중 R_1 내지 R_5 중 적어도 하나일 수 있는 질소-함유 그룹은, 상기 화학식 1의 중앙에 위치한 질소에 직접(directly) 결합되어 있는 것이 아니라, 플루오렌 고리 또는 Ar_3 를 사이에 두고 화학식 1의 중앙에 위치한 질소와 결합되어 있다. 이로써, R_1 내지 R_5 중 적어도 하나일 수 있는 질소-함유 그룹이 질소와 직접 결합되어 발생할 수 있는 정공 이동 특성 등과 같은 정공 관련 특성 변화를 방지할 수 있어, 유기 발광 소자의 효율이 향상될 수 있다.

- [0088] 본 명세서 중, 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기(또는 C_1-C_{60} 알킬기)의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등과 같은 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 알킬기를 들 수 있고, 치환된 C_1-C_{60} 알킬기는 상기 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자가 중수소, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염, 또는 C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_6-C_{60} 아릴기, C_2-C_{60} 헤테로아릴기, $-N(Q_{11})(Q_{12})$, 및 $-Si(Q_{13})(Q_{14})(Q_{15})$ (여기서, Q_{11} 내지 Q_{15} 는 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{60} 알킬기, C_2-C_{60} 알케닐기, C_2-C_{60} 알키닐기, C_5-C_{60} 아릴기, 및 C_2-C_{60} 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택됨)로 치환된 것이다.
- [0089] 본 명세서 중 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기(또는 C_1-C_{60} 알콕시기)는 $-OA$ (단, A는 상술한 바와 같은 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기임)의 화학식을 가지며, 이의 구체적인 예로서, 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시, 등이 있고, 이들 알콕시기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C_1-C_{60} 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.
- [0090] 본 명세서 중 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기(또는 C_2-C_{60} 알케닐기)는 상기 비치환된 C_2-C_{60} 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 에테닐, 프로페닐, 부테닐 등이 있다. 이들 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C_1-C_{60} 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.
- [0091] 본 명세서 중 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기(또는 C_2-C_{60} 알키닐기)는 상기 정의된 바와 같은 C_2-C_{60} 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 에티닐(ethynyl), 프로피닐(propynyl), 등이 있다. 이들 알키닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C_1-C_{60} 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.
- [0092] 본 명세서 중 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 5 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 비치환된 C_5-C_{60} 아릴렌기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 5 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 아릴기 및 아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 상기 아릴기 및 아릴렌기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 치환된 C_1-C_{60} 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.
- [0093] 상기 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기의 예로는 페닐기, C_1-C_{10} 알킬페닐기(예를 들면, 에틸페닐기), C_1-C_{10} 알킬비페닐기(예를 들면, 에틸비페닐기), 할로페닐기(예를 들면, o-, m- 및 p-플루오로페닐기, 디클로로페닐기), 디시아노페닐기, 트리플루오로메톡시페닐기, o-, m-, 및 p-토릴기, o-, m- 및 p-쿠메닐기, 메시틸기, 페녹시페닐기, (α , α -디메틸벤젠)페닐기, (N,N'-디메틸)아미노페닐기, (N,N'-디페닐)아미노페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 할로나프틸기(예를 들면, 플루오로나프틸기), C_1-C_{10} 알킬나프틸기(예를 들면, 메틸나프틸기), C_1-C_{10} 알콕시나프틸기(예를 들면, 메톡시나프틸기), 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 안트라퀴놀일기, 메틸안트릴기, 페난트릴기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리스레닐기, 에틸-크리스레닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 클로로페릴레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네틸기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기 등을 들 수 있으며, 치환된 C_5-C_{60} 아릴기의 예는 상술한 바와 같은 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기의 예와 상기 치환된 C_1-C_{60} 알킬기의 치환기를 참조하여 용이하게 인식할 수 있다. 상기 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기의 예를 참조하여 용이하게 인식될 수 있다.
- [0094] 본 명세서 중 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하고 나머지 고리원자가 C인 하나 이상의 방향족 고리로 이루어진 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴렌기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하고 나머지 고리원자가 C인 하나 이상의 방향족 고리로 이루어진 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 여기서, 상기 헤테로아릴기 및 헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리는 서로 융합될 수 있다. 상기 헤테로아릴기 및 헤테

테로아릴렌기 중 하나 이상의 수소원자는 상술한 C_1-C_{60} 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

- [0095] 상기 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴기의 예에는, 피라졸일기, 이미다졸일기, 옥사졸일기, 티아졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조이미다졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 등을 들 수 있다. 상기 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 아릴렌기의 예를 참조하여 용이하게 인식될 수 있다.
- [0096] 상기 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴옥시기는 $-OA_2$ (여기서, A_2 는 상기 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기임)를 가리키고, 상기 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴싸이오기는 $-OA_3$ (여기서, A_3 는 상기 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기임)를 가리킨다.
- [0097] 상기 화학식 1을 갖는 카바졸계 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 카바졸계 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자에게 용이하게 인식될 수 있다.
- [0098] 상기 화학식 1의 카바졸계 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 카바졸계 화합물은 발광층, 애노드와 발광층 사이 및/또는 발광층과 캐소드 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 카바졸계 화합물은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 및/또는 전자 수송층에 포함될 수 있다.
- [0099] 따라서, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층을 포함하고, 상기 유기층이 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시된 카바졸계 화합물을 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0100] 상기 유기층은 1종 이상의 상기 카바졸계 화합물을 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 유기 발광 소자는 상기 카바졸계 화합물로서 화합물 2만을 단일 물질 형태로 포함하거나, 화합물 2 및 8의 조합을 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 유기 발광 소자가 화합물 2 및 8을 모두 포함한다면, 상기 화합물 2 및 8은 동일한 층(예를 들면, 정공 수송층)에 혼합물의 형태로 존재하거나, 서로 다른 층에 각각(예를 들면, 화합물 2는 정공 수송층에 존재하고 화합물 8은 전자 수송층에 포함됨) 포함될 수 있는 등, 다양한 변형예가 가능하다. 본 명세서 중, "상기 유기층은 상기 카바졸계 화합물을 1종 이상 포함한다"란 표현은 상술한 바를 참조하여, 당업자에게 용이하게 이해될 수 있다.
- [0101] 상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층(이하, "H-기능층(H-functional layer)"이라 함), 버퍼층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송 기능 및 전자 주입 기능을 동시에 갖는 기능층(이하, "E-기능층(E-functional layer)"이라 함) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0102] 본 명세서 중 "유기층"은 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 층을 가리키는 용어이다.
- [0103] 상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층 중 적어도 하나 및 발광층을 포함하고, 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층 중 적어도 하나에 상기 카바졸계 화합물이 포함되어 있을 수 있다. 예를 들어, 상기 유기층은 상기 카바졸계 화합물을 포함한 정공 수송층 또는 H-기능층을 포함할 수 있다.
- [0104] 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층 중 적어도 하나는, 상기 카바졸계 화합물 외에, 상기 카바졸계 화합물의 정공 이동도 및 전도도보다 큰 정공 이동도 및 전도도를 갖는 양쪽성(bipolar) 화합물을 더 포함할 수 있다. 상기 양쪽성 화합물을 추가함으로써, 정공 주입 특성이 향상되어 유기 발광 소자의 구동 전압이 감소될 수 있다. 이 때, 상기 양쪽성 화합물과 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물을 함께 사용하므로, 양쪽성 화합물에 의하여 다량의 정공이 주입되더라도, 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물에 의하여 정공 이동도 조절, 전하 균형(charge balace) 및/또는 전자 안정화가 이루어져, 유기 발광 소자의 효율 및 수명 향상도 동시에 이루어질 수 있다. 따라서, 상기 양쪽성 화합물과 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물을 함께 사용(예를 들면, 애노드와 발광층 사이에 채용함)함으로써, 구동 전압 감소, 효율 증가 및 수명 증가를 동시에 달성할 수 있다.
- [0105] 상기 양쪽성 화합물은 하기 화학식 300으로 표시될 수 있다:

[0106] <화학식 300>



[0107]

[0108] 상기 화학식 300 중, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기이다. 상기 Ar₁₁ 및 Ar₁₂에 대한 설명은 상기 Ar₁에 대한 상세한 설명을 참조한다.

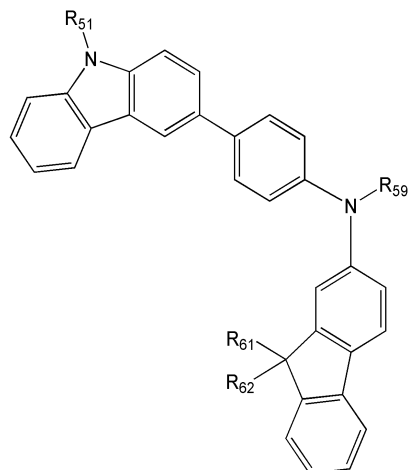
[0109] 상기 화학식 300 중, 상기 e 및 f는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수이다. 상기 e 및 f에 대한 설명은 상기 a에 대한 상세한 설명을 참조한다.

[0110] 상기 화학식 300 중, R₅₁ 내지 R₅₈ 및 R₆₁ 내지 R₆₉는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 또는 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기일 수 있다. 상기 R₅₁ 내지 R₅₈ 및 R₆₁ 내지 R₆₉에 대한 상세한 설명은 상기 R₁₁에 대한 상세한 설명을 참조한다.

[0111] 상기 화학식 300 중, R₅₉는, 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 바이페닐기; 피리딜기; 및 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬기, 및 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 바이페닐기 및 피리딜기; 중 하나일 수 있다.

[0112] 일 구현예에 따르면, 상기 양쪽성 화합물은 하기 화학식 300A로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0113] <화학식 300A>

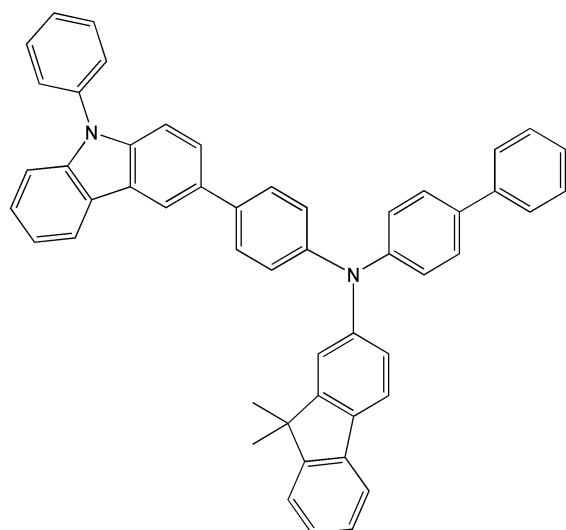


[0114]

[0115] 상기 화학식 300A 중, R₅₁, R₆₀, R₆₁ 및 R₅₉에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

[0116] 예를 들어, 상기 양쪽성 화합물은 하기 화합물 300일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0117] <화합물 300>



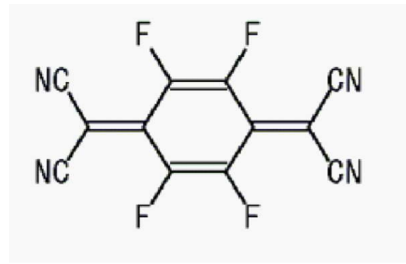
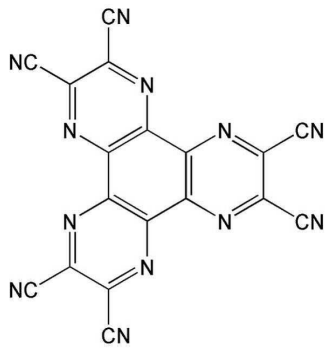
[0118]

[0119] 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 공지된 정공 주입 물질, 공지된 정공 수송 물질 및/또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 물질 외에, 막의 도전성 등을 향상시키기 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.

[0120] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라사이아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라사이아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4-CTNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 200 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0121] <화합물 200>

<F4-CTNQ>



[0122]

[0123]

상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 H-기능층이 상기 전하-생성 물질을 더 포함할 경우, 상기 전하-생성 물질은 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 H-기능층 중에 균일하게(homogeneous) 분산되거나, 또는 불균일하게 분포될 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0124]

상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층 중 적어도 하나와 상기 발광층 사이에는 버퍼층이 개재될 수 있다. 상기 버퍼층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 효율을 증가시키는 역할을 할 수 있다. 상기 버퍼층은 공지된 정공 주입 재료, 정공 수송 재료를 포함할 수 있다. 또는, 상기 버퍼층은 버퍼층 하부에 형성된 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층에 포함된 물질 중 하나와 동일한 물질을 포함할 수 있다.

[0125]

상기 버퍼층의 두께는 10Å 내지 700Å, 예를 들면, 20Å 내지 500Å의 범위일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 버퍼층의 두께가 상기 범위를 만족할 경우, 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 효과적으로 보상하여, 유기 발광 소자의 효율을 향상시킬 수 있다.

[0126]

상기 유기 발광 소자의 제1전극과 제2전극 사이에 정공 수송층이 포함될 경우, 상기 정공 수송층은 단일층 또는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0127]

예를 들어, 상기 정공 수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물을 포함한 단일층이거나, 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물과 상기 화학식 300으로 표시되는 양쪽성 화합물을 포함한 단일층일 수 있다. 예를 들어, 상기 유기 발광 소자의 제1전극과 발광층 사이의 구조는 하기 1) 내지 4)의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0128]

1) 제1전극/정공 주입층/정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층;

[0129]

2) 제1전극/정공 주입층/정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;

[0130]

3) 제1전극/정공 주입층/정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층; 및

[0131]

4) 제1전극/정공 주입층/정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 3의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;

[0132]

상기 1) 내지 4)의 구조 중 정공 수송층은 상술한 바와 같은 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.

[0133]

또한, 상기 정공 수송층이 다층 구조를 가질 경우, 상기 정공 수송층은 상기 제1정공 수송층으로부터 순차적으로 적층된 제1정공 수송층 및 제2정공 수송층을 포함할 수 있다. 상기 제1정공 수송층 및 제2정공 수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물과 상기 화학식 300으로 표시되는 양쪽성 화합물 중 하나 이상을 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 유기 발광 소자의 제1전극과 발광층 사이의 구조는 하기 5) 내지 16)의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0134]

5) 제1전극/정공 주입층/제1정공 수송층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층;

[0135]

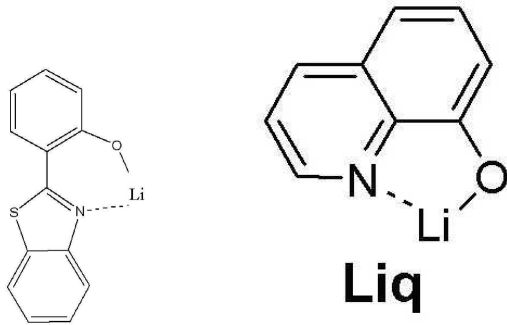
6) 제1전극/정공 주입층/제1정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/제2정공 수송층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;

[0136]

7) 제1전극/정공 주입층/제1정공 수송층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;

- [0137] 8) 제1전극/정공 주입층/제1정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/제2정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;
- [0138] 9) 제1전극/정공 주입층/제1정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층;
- [0139] 10) 제1전극/정공 주입층/제1정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2정공 수송층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;
- [0140] 11) 제1전극/정공 주입층/제1정공 수송층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/버퍼층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;
- [0141] 12) 제1전극/정공 주입층/제1정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/제2정공 수송층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층;
- [0142] 13) 제1전극/정공 주입층/제1정공 수송층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층;
- [0143] 14) 제1전극/정공 주입층/제1정공 수송층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;
- [0144] 15) 제1전극/정공 주입층/제1정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/제2정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층; 및
- [0145] 16) 제1전극/정공 주입층/제1정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/제2정공 수송층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층.
- [0146] 상기 5) 내지 16)의 구조 중 제1정공 수송층 및 제2정공 수송층 중 하나 이상은 상술한 바와 같은 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.
- [0147] 상기 제1정공 수송층과 제2정공 수송층의 두께비는 1:9 내지 9:1, 예를 들면, 3:7 내지 7:3일 수 있다. 예를 들어, 상기 제1정공 수송층과 제2정공 수송층의 두께비는 약 5:5일 수 있다.
- [0148] 상기 유기 발광 소자의 제1전극과 제2전극 사이에 H-기능층이 포함될 경우, 상기 H-기능층은 단일층 또는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0149] 예를 들어, 상기 H-기능층은 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물을 포함한 단일층이거나, 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물과 상기 화학식 300으로 표시되는 양쪽성 화합물을 포함한 단일층일 수 있다. 예를 들어, 상기 유기 발광 소자의 제1전극과 발광층 사이의 구조는 하기 17) 내지 20)의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:
- [0150] 17) 제1전극/H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층;
- [0151] 18) 제1전극/H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;
- [0152] 19) 제1전극/H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물+ 화학식 300의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층; 및
- [0153] 20) 제1전극/H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물+ 화학식 300의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층.
- [0154] 상기 17) 내지 20)의 구조 중 H-기능층은 상술한 바와 같은 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.
- [0155] 또한, 상기 H-기능층이 다층 구조를 가질 경우, 상기 H-기능층은 상기 제1전극으로부터 순차적으로 적층된 제1 H-기능층 및 제2 H-기능층을 포함할 수 있다. 상기 제1 H-기능층 및 제2 H-기능층은 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물과 상기 화학식 300으로 표시되는 양쪽성 화합물 중 하나 이상을 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 유기 발광 소자의 제1전극과 발광층 사이의 구조는 하기 21) 내지 32)의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:
- [0156] 21) 제1전극/제1 H-기능층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층;
- [0157] 22) 제1전극/제1 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/제2 H-기능층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;

- [0158] 23) 제1전극/제1 H-기능층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;
- [0159] 24) 제1전극/제1 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/제2 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;
- [0160] 25) 제1전극/제1 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층;
- [0161] 26) 제1전극/제1 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2 H-기능층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;
- [0162] 27) 제1전극/제1 H-기능층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/버퍼층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;
- [0163] 28) 제1전극/제1 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/제2 H-기능층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층;
- [0164] 29) 제1전극/제1 H-기능층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층;
- [0165] 30) 제1전극/제1 H-기능층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/제2 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층;
- [0166] 31) 제1전극/제1 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/제2 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/발광층; 및
- [0167] 32) 제1전극/제1 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물)/제2 H-기능층(화학식 1의 카바졸계 화합물+화학식 300의 양쪽성 화합물)/버퍼층(화학식 300의 양쪽성 화합물)/발광층.
- [0168] 상기 21) 내지 32)의 구조 중 제1 H-기능층 및 제2 H-기능층 중 하나 이상은 상술한 바와 같은 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.
- [0169] 상기 제1 H-기능층과 제2 H-기능층의 두께비는 1:9 내지 9:1, 예를 들면, 3:7 내지 7:3일 수 있다. 예를 들어, 상기 제1 H-기능층과 제2 H-기능층의 두께비는 약 5:5일 수 있다.
- [0170] 상기 발광층은 인광 도펀트를 더 포함하고, 상기 발광층에 포함된 카바졸계 화합물은 인광 호스트의 역할을 할 수 있다. 상기 인광 도펀트는, Ir, Pt, Os, Re, Ti, Zr, Hf 또는 이들 중 2 이상의 조합을 포함한 유기 금속 착체일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0171] 상기 발광층은 적색, 녹색 또는 청색 발광층일 수 있다. 예를 들어, 상기 발광층은 청색 발광층일 수 있다. 상기 카바졸계 화합물은 인광 도펀트를 포함한 청색 발광층과 함께 사용되어, 고효율, 고휘도, 고색순도, 및 장수명을 갖는 청색 발광 유기 발광 소자를 제공할 수 있다.
- [0172] 또한, 상기 유기층은 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층에 상기 카바졸계 화합물이 존재할 수 있다. 여기서, 상기 전자 수송층은 상기 카바졸계 화합물 외에, 금속-함유 화합물을 더 포함할 수 있다.
- [0173] 또는, 상기 유기층은 전자 수송층을 포함하되, 공지의 전자 수송성 유기 화합물 및 금속-함유 화합물을 포함할 수 있다.
- [0174] 상기 금속-함유 화합물은 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체의 비제한적인 예로는, 리튬 퀴놀레이트(LiQ) 또는 하기 화합물 203 등을 들 수 있다:
- [0175] <화합물 203>



[0176]

[0177]

도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.

[0178]

상기 기관(11)으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기관을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기관 또는 투명 플라스틱 기관을 사용할 수 있다.

[0179]

상기 제1전극(13)은 기관 상부에 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(13)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록 제1전극용 물질은 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(13)은 반사형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 이용하면, 상기 제1전극(13)을 반사형 전극으로 형성할 수도 있다.

[0180]

상기 제1전극(13)은 단일층 또는 2 이상의 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(13)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0181]

상기 제1전극(13) 상부로는 유기층(15)이 구비되어 있다.

[0182]

상기 유기층(15)은 정공 주입층, 정공 수송층, 버퍼층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층을 포함할 수 있다.

[0183]

정공 주입층(HIL)은 상기 제1전극(13) 상부에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

[0184]

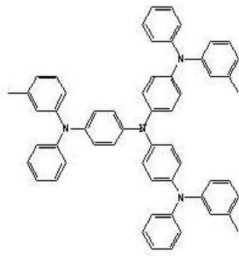
진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500 °C, 진공도 약 10⁻⁸ 내지 약 10⁻³ torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0185]

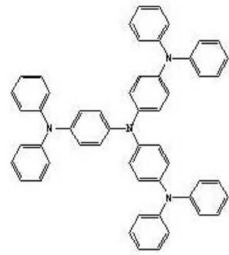
스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80°C 내지 200°C의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0186]

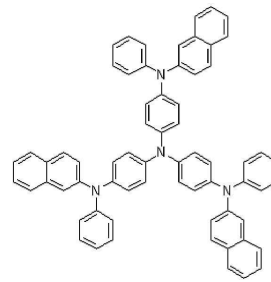
정공 주입 물질로는 공지된 정공 주입 물질을 사용할 수 있는데, 공지된 정공 주입 물질로는, 예를 들면, N,N'-디페닐-N,N'-비스-[4-(페닐-m-톨일-아미노)-페닐]-비페닐-4,4'-디아민(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine: DNTPD), 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA [4,4',4''-tris (3-methylphenylphenylamino) triphenylamine], NPB(N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)), TDATA, 2-TNATA, Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid: 폴리아닐린/캄페르술포산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리아닐린)/폴리(4-스티렌술포네이트))등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.



m-MTDATA



TDATA



2-TNATA

[0187]

[0188]

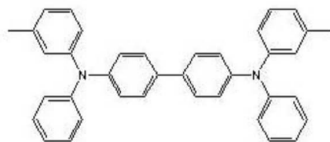
상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스러운 정도의 정공 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0189]

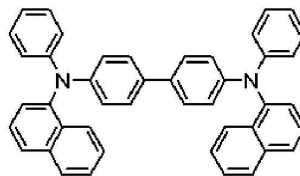
다음으로 상기 정공 주입층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공 수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의하여 정공 수송층을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건 범위 중에서 선택될 수 있다.

[0190]

정공 수송 물질로는 상기 화학식 1로 표시되는 카바졸계 화합물, 상기 양쪽성 화합물 및 공지된 정공 수송 물질 중 적어도 하나를 사용할 수 있다. 공지된 정공 수송 재료로는, 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), NPB(N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



TPD



NPB

[0191]

[0192]

상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 2000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1500Å일 수 있다. 상기 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0193]

상기 정공 수송층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 버퍼층을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의하여 버퍼층을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0194]

상기 버퍼층에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

[0195]

상기 버퍼층 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

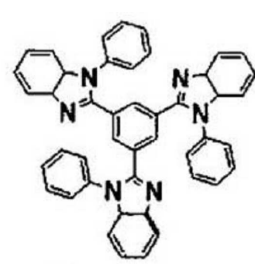
[0196]

상기 발광층 물질로는 공지의 발광 재료(호스트 및/또는 도펀트) 중 1종 이상의 물질을 사용할 수 있다.

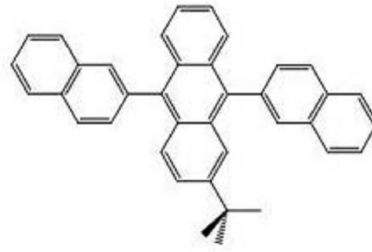
[0197]

공지의 호스트의 예로는 Alq₃, CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), PVK(폴리(n-비닐카바졸)), 9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센(ADN), TCTA, TPBI(1,3,5-트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠(1,3,5-tris(N-

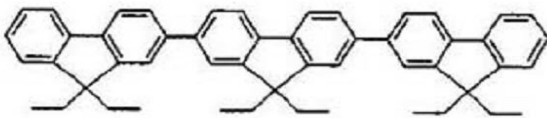
phenylbenzimidazole-2-yl)benzene)), TBADN(3-tert-부틸-9,10-디(나프트-2-일) 안트라센), E3, DSA(디스티릴 아릴렌) 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



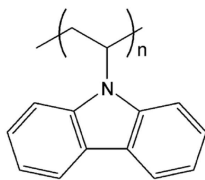
TPBI



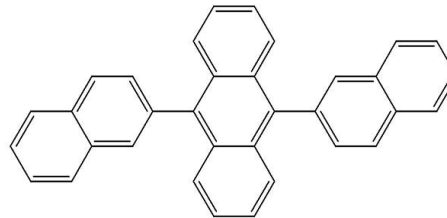
TBADN



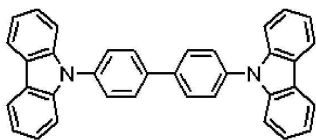
E3



PVK



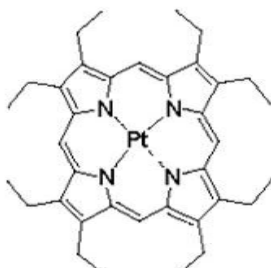
ADN



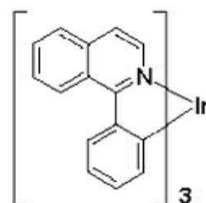
CBP

상기 도펀트는 형광 도펀트 및 인광 도펀트 중 적어도 하나일 수 있다.

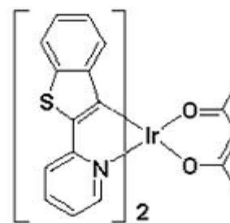
공지된 적색 도펀트로서 PtOEP, Ir(piq)₃, Btp₂Ir(acac) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



PtOEP

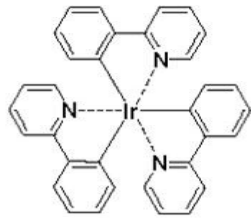


Ir(piq)₃

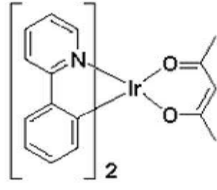


Btp₂Ir(acac)

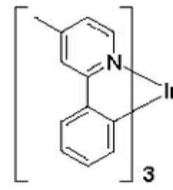
또한, 공지된 녹색 도펀트로서, Ir(ppy)₃ (ppy = 페닐피리딘), Ir(ppy)₂(acac), Ir(mppy)₃, C545T 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



Ir(ppy)₃

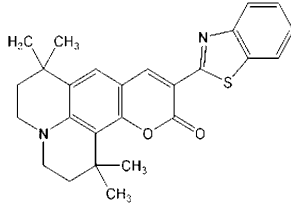


Ir(ppy)₂(acac)



Ir(mpyp)₃

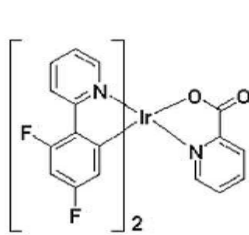
[0207]



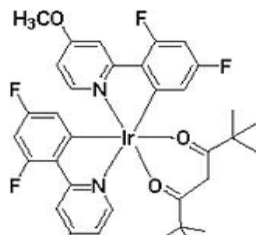
[0208]

[0209] C545T

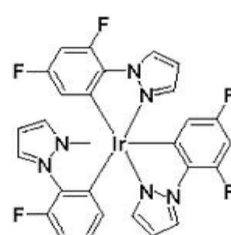
[0210] 한편, 공지된 청색 도펀트로서, F₂Irpic, (F₂ppy)₂Ir(tmd), Ir(dfppz)₃, ter-플루오렌(fluorene), 4,4'-비스(4-디페닐아미노스티릴) 비페닐 (DPAVBi), 2,5,8,11-테트라-*tert*-부틸 페릴렌 (TBPe), DPVBi 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



F₂Irpic

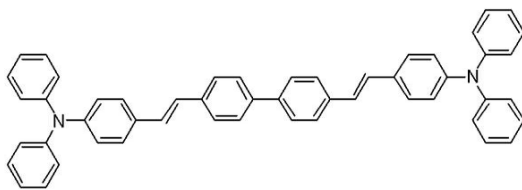


(F₂ppy)₂Ir(tmd)

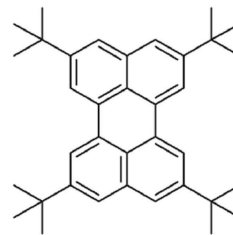


Ir(dfppz)₃

[0211]



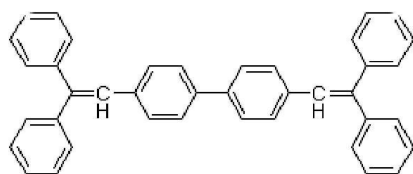
DPAVBi



TBPe

[0212]

[0213]



DPVBi

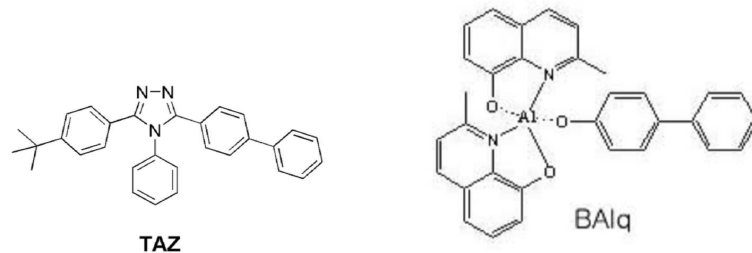
[0214]

[0215] 상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0216] 상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있

다.

[0217] 다음으로 발광층 상부에 전자 수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스핀코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 전자 수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 상기 전자 수송층 재료로는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 공지의 전자 수송 물질 또는 상기 화학식 1의 카바졸계 화합물을 이용할 수 있다. 공지의 전자 수송 물질의 예로는, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq_3), TAZ, Balq, 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: Bebq_2), ADN, 화합물 201, 화합물 202 등과 같은 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

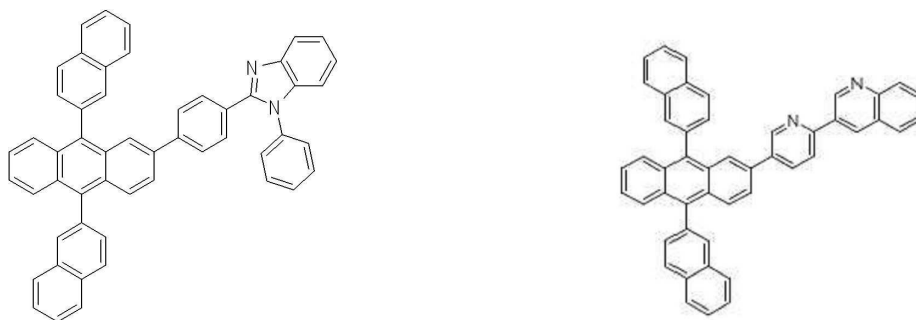


[0218]

[0219]

<화합물 201>

<화합물 202>



[0220]

[0221] 상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0222] 또는, 상기 전자 수송층은 공지의 전자 수송성 유기 화합물 또는 상기 화학식 1의 카바졸계 화합물 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0223] 또한 전자 수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

[0224] 상기 전자 주입층 형성 재료로는 LiF, NaCl, CsF, Li_2O , BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

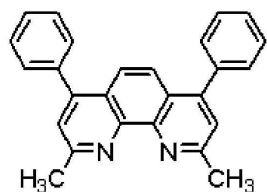
[0225] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0226] 이와 같은 유기층(15) 상부로는 제2전극(17)이 구비되어 있다. 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드(Cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극 형성용 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 박막으로 형성하여 투과형 전극을 얻을 수 있다. 한편, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용한 투과형 전극을 형성할 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0227] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0228] 예를 들어, 상기 유기 발광 소자의 제1전극(13)과 발광층 사이의 구조는 상술한 1) 내지 32)의 구조 중 하나로 변형될 수 있다. 이 때, H-기능층의 두께는 100Å 내지 10000Å, 예를 들면, 500Å 내지 5000Å일 수 있다. 상기 H-기능층의 두께가 상술한 범위를 만족할 경우, 구동 전압 상승없이 우수한 전기적 특성의 유기 발광 소자를 제작할 수 있다.

[0229] 또한, 발광층에 인광 도펀트와 함께 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 정공 수송층과 발광층 사이 또는 H-기능층과 발광층 사이에 진공증착법, 스퍼터링법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공 저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스퍼터링법에 의해 정공 저지층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 될 수 있다. 공지의 정공 저지 재료도 사용할 수 있는데, 이의 예로는, 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체 등을 들 수 있다. 예를 들면, 하기와 같은 BCP를 정공 저지층 재료로 사용할 수 있다.



BCP

[0230]

[0231] 상기 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

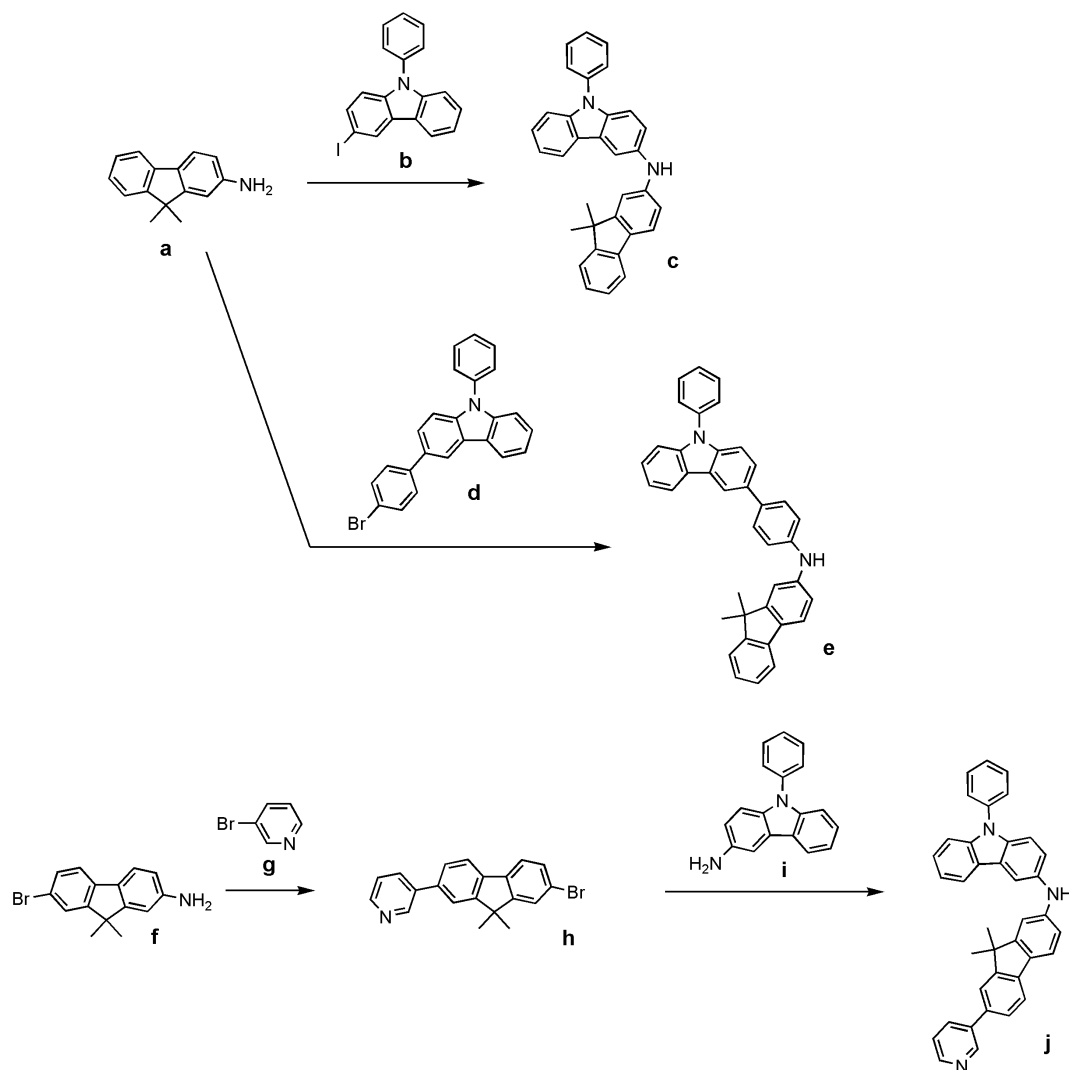
[0232] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0233] **[실시예]**

[0234] **중간체 a 내지 j의 합성**

[0235] 하기 반응식 1에 따라, 중간체 a 내지 j를 합성하였다:

[0236] <중간체 합성 반응식>



[0237] [0238] [0239] [0240] 중간체 c의 합성

중간체 a 10.5g(50mmol), 중간체 b 18.5 g (50mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)(Tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0): $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$) 1.35g(3.0mole %), 소듐 tert-부톡시드(sodium tert-butoxide) 7.2g(75mmol), 트리-tert-부틸포스핀(Tri-tert-butylphosphine: $\text{P}(\text{t-Bu})_3$) 300mg(3.0mole%)를 톨루엔(Toluene) 300mL에 넣고 100℃에서 5시간동안 환류교반하였다. 반응액을 상온까지 냉각시킨 후, 반응액에 메틸렌 클로라이드(methylene chloride)와 H_2O 를 넣고 추출한 후 마그네슘 설페이트(magnesium sulfate)를 넣어 건조시키고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 c(18.5g, 수율 82%)를 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS를 통해 확인하였다. $\text{C}_{33}\text{H}_{26}\text{N}_2$: M^+ 450.21

[0241] [0242] 중간체 e의 합성

중간체 a 10.5g(50mmol), 중간체 d 19.9 g (50mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 1.35g(3.0mole %), 소듐 tert-부톡시드 7.2g(75mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ 300mg(3.0mole%)를 톨루엔 300mL에 넣고 100℃에서 5시간동안 환류교반하였다. 반응액을 상온까지 냉각시킨 후, 반응액에 메틸렌 클로라이드와 H_2O 를 넣고 추출한 후 마그네슘 설페이트를 넣어 건조시키고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 e(22.5g, 수율 85%)를 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS를 통해 확인하였다. $\text{C}_{39}\text{H}_{30}\text{N}_2$: M^+ 526.24

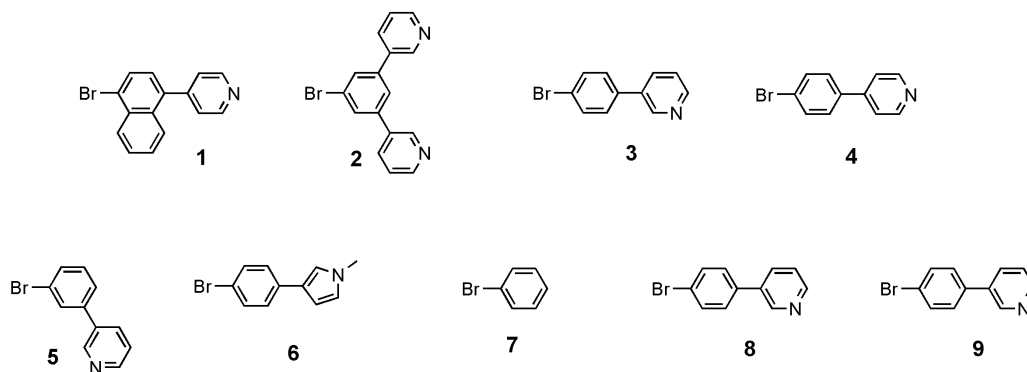
[0243] 중간체 h의 합성

[0244] 중간체 f 5.8g(20mmol), 중간체 g 9.5 g (60mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.5g(3.0mole %), 소듐 tert-부톡시드 2.9g(75mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ 120mg(3.0mole%)를 톨루엔 100mL에 넣고 100℃에서 5시간동안 환류교반하였다. 반응액을 상온까지 냉각시킨 후, 반응액에 메틸렌 클로라이드와 H_2O 를 넣고 추출한 후 마그네슘 설페이트를 넣어 건조시키고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 h (4.3g, 수율 74%)를 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS를 통해 확인하였다. $\text{C}_{20}\text{H}_{18}\text{N}_2$: M^+ 286.15

[0245] **중간체 j의 합성**

[0246] 중간체 h 4.0g(14mmol), 중간체 i 3.6 g (14mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 380mg(3.0mole %), 소듐 tert-부톡시드 2.0g(21mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ 84mg(3.0mole%)를 톨루엔 100mL에 넣고 100℃에서 5시간동안 환류교반하였다. 반응액을 상온까지 냉각시킨 후, 반응액에 메틸렌 클로라이드와 H_2O 를 넣고 추출한 후 마그네슘 설페이트를 넣어 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 j (6.1g, 수율 83%)를 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS를 통해 확인하였다. $\text{C}_{38}\text{H}_{29}\text{N}_3$: M^+ 527.24

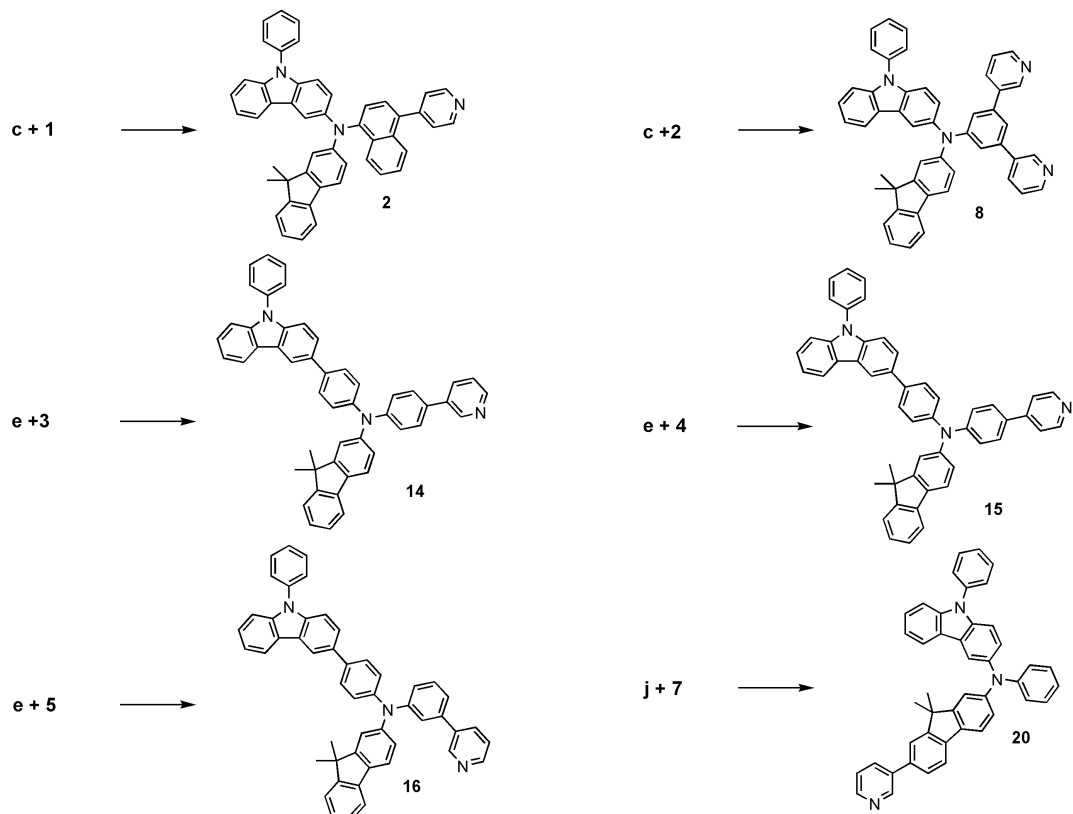
[0247] **중간체 1 내지 9의 화학식**



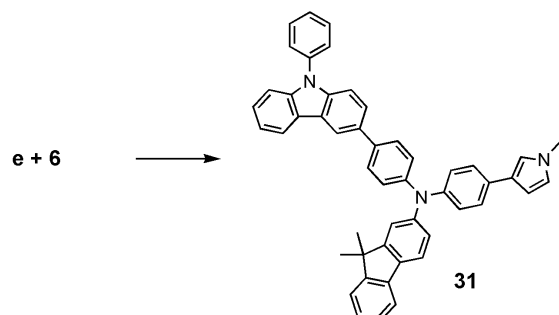
[0248]

[0249]

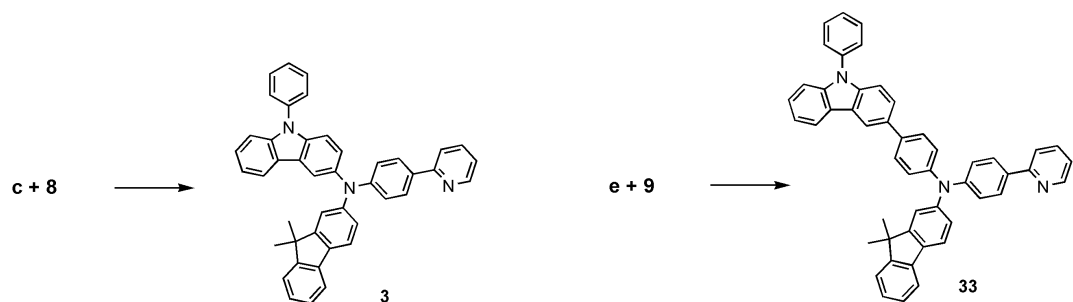
화합물 2, 3, 8, 14, 15, 16, 20, 31 및 33의 합성을 위한 반응식



[0250]



[0251]



[0252]

[0253]

화합물 2의 합성

[0254]

중간체 c 4.50g(10mmol), 중간체 1 2.84g(10mmol), $Pd_2(dba)_3$ 270mg(3.0mole %), 소듐 tert-부톡시드 1.4g(15mmol), $P(t-Bu)_3$ 60mg(3.0mole%)를 톨루엔 100mL에 넣고 100℃에서 5시간동안 환류교반하였다. 반응액을 상온으로 냉각시킨 후, 반응액에 메틸렌 클로라이드와 H_2O 를 넣고 추출한 후 마그네슘 설페이트를 넣어 건조시키고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 2(5.69 g, 수율 87%)을 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

- [0255] $C_{48}H_{35}N_3$: M+ 653.28
- [0256] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.70 (m, 2H), 8.22-8.20(d, 1H), 7.79(d, 1H), 7.78-7.74(m, 2H) 7.57-7.23(m, 16H), 7.14-7.08(m, 2H), 6.92-6.88(m, 1H), 6.81-6.79(m, 1H), 6.66-6.64(m, 1H), 6.47(m, 2H), 1.61(s, 6H)
- [0257] **화합물 8의 합성**
- [0258] 중간체 1 대신 중간체 2 3.1g(10mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 8(6.06g, 89%)을 수득하였다. 합성된 물질을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.
- [0259] $C_{49}H_{36}N_4$: M+ 680.29
- [0260] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.89 (m, 2H), 8.67-8.66(m, 2H), 8.22-8.20(d, 1H), 7.94-7.90(m, 3H), 7.78-7.76(m, 1H), 7.68(m, 1H), 7.63-7.61(m, 1H), 7.50-7.46(m, 6H), 7.40-7.22(m, 6H), 7.14-7.08(m, 2H), 7.00(m, 2H), 6.91-6.89(m, 1H), 6.74-6.72(m, 1H) 6.61(m, 1H), 1.61(s, 6H)
- [0261] **화합물 14의 합성**
- [0262] 중간체 c 및 1 대신, 중간체 e 5.27g(10mmol) 및 중간체 3 2.3g(10mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 14(5.30g, 78%)를 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.
- [0263] $C_{50}H_{37}N_3$: M+ 679.30
- [0264] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.90 (m, 1H), 8.60-8.58(m, 1H), 8.24-8.22(d, 1H), 8.15(s, 1H), 7.93-7.91(m, 1H), 7.78-7.84(m, 2H), 7.67-7.64(m, 1H), 7.58-7.54(m, 3H), 7.52-7.46(m, 5H), 7.38-7.24(m, 6H), 7.21-7.19(d, 1H), 7.13-7.10(m, 2H), 6.71-6.64(m, 3H), 6.58-6.54(m, 2H), 6.42(m, 1H), 1.61(s, 6H)
- [0265] **화합물 15의 합성**
- [0266] 중간체 c 및 1 대신 중간체 e 5.27g(10mmol) 및 중간체 4 2.3g(10mmol)를 사용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 15(5.57g, 82%)를 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.
- [0267] $C_{50}H_{37}N_3$: M+ 679.30
- [0268] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.72 (m, 2H), 8.24-8.22(d, 1H), 8.15(s, 1H), 7.78-7.73(m, 2H), 7.67-7.64(m, 1H), 7.58-7.55(m, 7H), 7.51-7.47(m, 4H), 7.39-7.27(m, 4H), 7.21-7.19(d, 1H), 7.13-7.10(m, 2H), 6.71-6.66(m, 3H), 6.58-6.54(m, 2H), 6.42(m, 1H), 1.61(s, 6H)
- [0269] **화합물 16의 합성**
- [0270] 중간체 c 및 1 대신, 중간체 e 5.27g(10mmol) 및 중간체 5 2.3g(10mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 16(5.85g, 86%)을 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.
- [0271] $C_{50}H_{37}N_3$: M+ 679.30
- [0272] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.86 (m, 1H), 8.65-8.64(m, 1H), 8.24-8.22(d, 1H), 8.15(s, 1H), 7.85-

7.74(m, 1H), 7.78-7.73(m, 2H), 7.67-7.64(m, 1H), 7.58-7.55(m, 3H), 7.51-7.47(m, 4H), 7.43-7.11(m, 8H), 7.07-7.04(m, 3H), 6.74-6.70(m, 1H), 6.58-6.54(m, 2H), 6.49(m, 1H), 6.23-6.21(m, 1H), 1.61(s, 6H)

[0273] **화합물 20의 합성**

[0274] 중간체 c 및 1 대신 중간체 j 5.27g(10mmol) 및 중간체 7 1.57g(10mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 20(4.95g, 82%)을 수득하였다. 생성된 화합물을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0275] $C_{44}H_{33}N_3$: M+ 03.27

[0276] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.94(s, 1H), 8.65-8.64(m, 1H), 8.22-.20(d, 1H), 8.06-8.04(m, 1H), 7.76-7.72(m, 3H), 7.57-7.55(m, 2H), 7.50-7.45(m, 4H), 7.43-7.23(m, 6H), 7.09-7.05(m, 2H), 6.87-6.85(m, 1H), 7.73-7.70(m, 1H), 6.67-6.63(m, 1H), 6.48-6.47(m, 1H), 6.30-6.27(m, 2H), 1.63(s, 6H)

[0277] **화합물 31의 합성**

[0278] 중간체 c 및 1 대신 중간체 e 5.27g(10mmol) 및 화합물 6 2.2g(10mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 31(5.04g, 74%)을 수득하였다. 생성된 화합물을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0279] $C_{50}H_{39}N_3$: M+ 681.31

[0280] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.24-8.22(m, 1H), 8.15(m, 1H), 7.78-7.73(m, 2H), 7.67-7.64(m, 1H), 7.58-7.55(m, 3H), 7.52-7.47(m, 4H), 7.39-7.27(m, 4H), 7.21-7.19(m, 1H), 7.14-7.09(m, 2H), 7.05-7.01(m, 2H), 6.90(m, 1H), 6.71-6.67(m, 3H), 6.58-6.51(m, 4H), 6.42-6.41(m, 1H), 3.47(s, 3H), 1.61(s, 6H)

[0281] **화합물 3의 합성**

[0282] 중간체 1 대신 중간체 8 2.34g(10mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 3 5.31g(88%)을 수득하였다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0283] $C_{44}H_{33}N_3$: M+ 603.27

[0284] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.56 (d, 1H), 7.84-6.98(m, 20H), 6.75(s, 2H), 6.58-6.55(m, 3H), 6.28(d, 1H), 1.67(s, 6H)

[0285] **화합물 33의 합성**

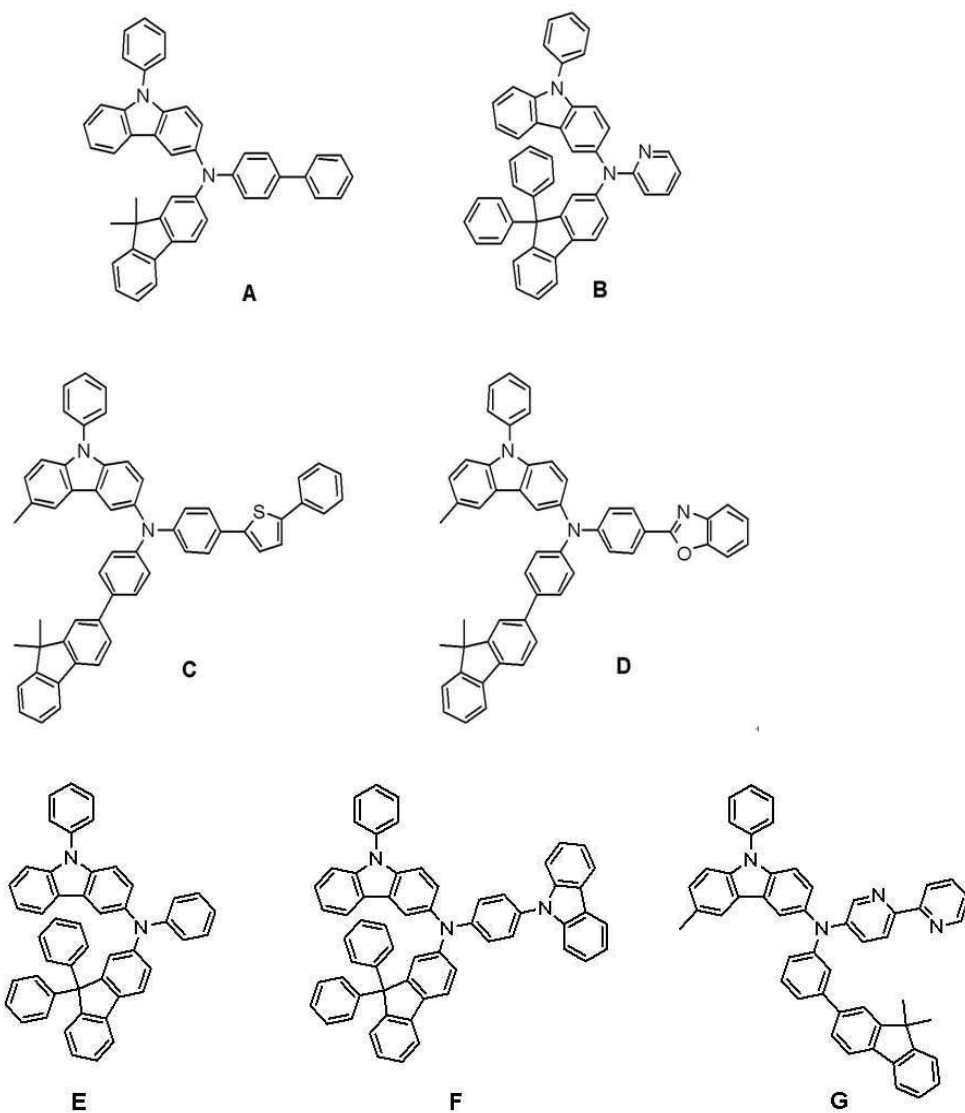
[0286] 중간체 c 및 중간체 1 대신, 중간체 e 5.27g(10mmol) 및 중간체 9 2.34g(10mmol)을 각각 사용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 33 6.05g(89%)을 수득하였다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0287] $C_{50}H_{37}N_3$: M+ 679.30

[0288] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.56(d, 1H), 7.84-6.98(m, 24H), 6.75(s, 1H), 6.58-6.52(m, 5H), 1.67(s, 6H)

[0289]

화합물 A 내지 G

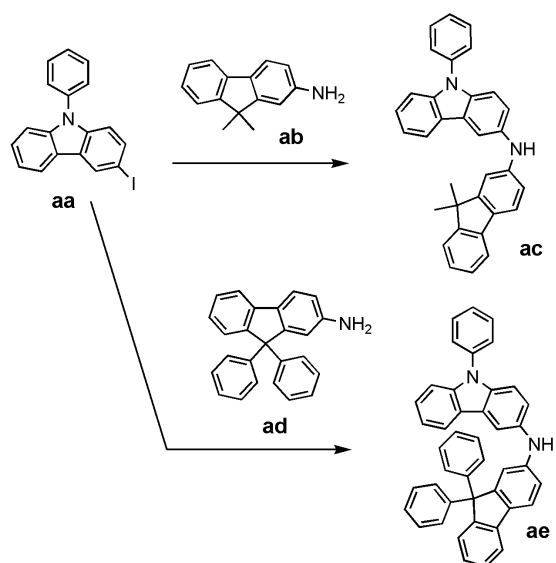


[0290]

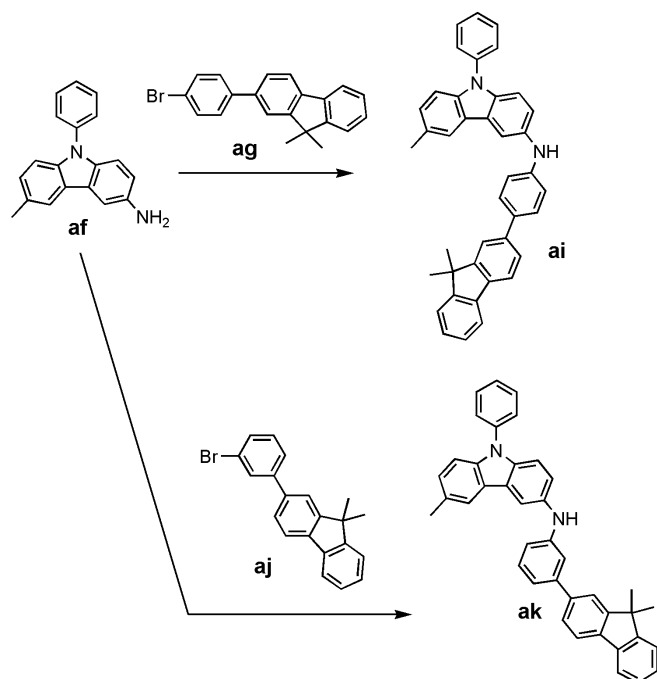
[0291]

[0292]

화합물 A 내지 G의 합성을 위한 반응식



[0293]



[0294]

[0295] **중간체 ac의 합성**

[0296] 중간체 ac의 합성 방법은 중간체 c의 합성 방법과 동일하다(중간체 aa=중간체 b, 중간체 ab=중간체 a).

[0297] **중간체 ae의 합성**

[0298] 중간체 a 및 d 대신 중간체 aa 18.5g(50mmol) 및 중간체 ad 16.7 g (50mmol)를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 중간체 e의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 ae(12.1g, 수율 65%)를 합성하고, LC-MS로 확인하였다. $C_{48}H_{30}N_2$: M+ 574.24

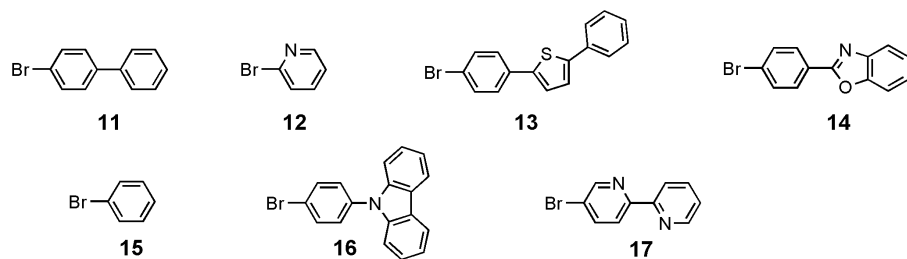
[0299] **중간체 ai의 합성**

[0300] 중간체 a 및 d 대신 중간체 af 13.6g(50mmol) 및 중간체 ag 17.5 g (50mmol)를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 중간체 e의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 ai(16.5g, 수율 61%)를 합성하고, LC-MS로 확인하였다. $C_{40}H_{32}N_2$: M+ 540.26

[0301] **중간체 ak의 합성**

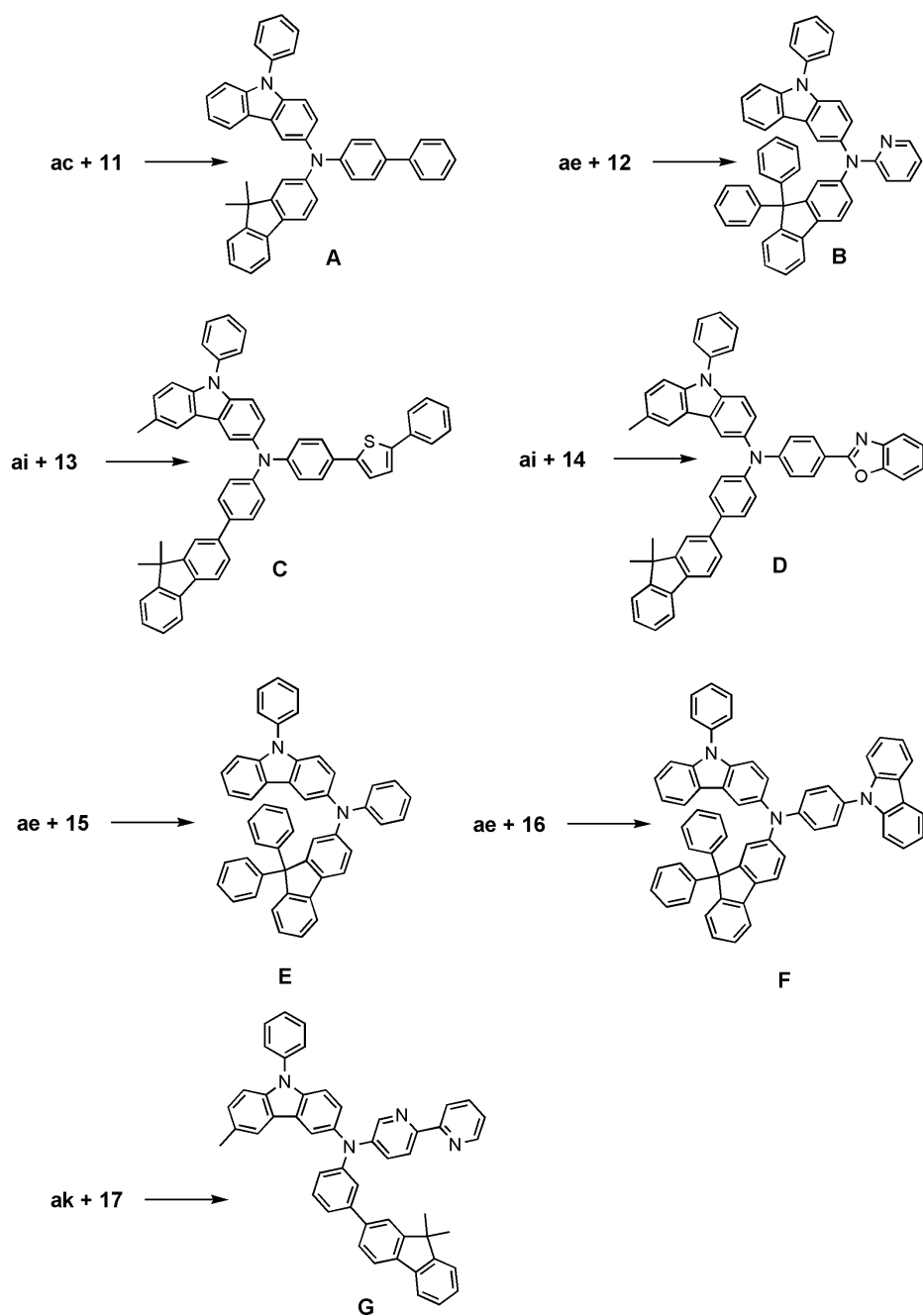
[0302] 중간체 a 및 d 대신 중간체 af 13.6g(50mmol) 및 중간체 aj 17.5 g (50mmol)를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 중간체 e의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 ak(17.8g, 수율 66%)를 합성하고, LC-MS로 확인하였다. $C_{40}H_{32}N_2$: M+ 540.26

[0303] 중간체 11 내지 17



[0304]

[0305] 화합물 A 내지 G 합성을 위한 반응식



[0306]

[0307] 화합물 A의 합성

[0308] 중간체 ac 4.51g(10mmol), 중간체 11 2.33g(10mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 270mg(3.0mole %), 소듐 tert-부톡시드 1.4g(15mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ 60mg(3.0mole%)를 톨루엔 100mL에 넣고 100℃에서 5시간동안 환류교반하였다. 반응액을 상온으로 냉각시킨 후, 반응액에 메틸렌 클로라이드와 H_2O 를 넣고 추출한 후 마그네슘 설페이트를 넣어 건조시키고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 A(수율 87%)를 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0309] $\text{C}_{45}\text{H}_{34}\text{N}_2$ M^+ 602.27

[0310] ^1H NMR (CDCl_3 , 400MHz) δ 8.23-8.20(m, 1H), 7.82(m, 1H), 7.78-7.76(m, 1H), 7.64-7.72(m, 2H), 7.58-7.56(m, 1H), 7.53-7.24(m, 13H), 7.14-7.08(m, 3H), 6.96-6.93(m, 2H), 6.76-6.73(m, 1H), 6.59-6.56(m, 2H), 6.52(m, 1H), 1.61(s, 6H)

[0311] 화합물 B의 합성

[0312] 중간체 11 대신 중간체 12 1.58g(10mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 화합물 A의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 B(수율 73%)를 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0313] $\text{C}_{48}\text{H}_{33}\text{N}_3$ M^+ 651.27

[0314] ^1H NMR (CDCl_3 , 400MHz) δ 8.23-8.19(m, 2H), 7.86-7.85(m, 1H), 7.54-7.42(m, 7H), 7.39-7.35(m, 1H), 7.31-7.06(m, 17H), 6.92-6.89(m, 1H), 6.81-6.76(m, 2H), 6.65-6.62(m, 1H), 6.57(m, 1H)

[0315] 화합물 C의 합성

[0316] 중간체 ac 및 중간체 11 대신 중간체 ai 5.41g(10mmol) 및 중간체 13 3.15g(10mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 화합물 A의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 C(수율 71%)를 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0317] $\text{C}_{56}\text{H}_{42}\text{N}_2\text{S}_1$ M^+ 774.31

[0318] ^1H NMR (CDCl_3 , 400MHz) δ 7.81-7.79(m, 1H), 7.77(s, 1H), 7.73-7.70(m, 1H), 7.65(m, 1H), 7.61-7.59(m, 2H), 7.52-7.09(m, 21H), 7.07-7.06(m, 1H), 6.69-6.65(m, 2H), 6.61-6.56(m, 2H), 2.56(s, 4H), 1.57(s, 6H)

[0319] 화합물 D의 합성

[0320] 중간체 ac 및 중간체 11 대신 중간체 ai 5.41g(10mmol) 및 중간체 14 2.74g(10mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 화합물 A의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 D(수율 77%)를 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0321] $\text{C}_{53}\text{H}_{39}\text{N}_3\text{O}_1$ M^+ 733.31

[0322] ^1H NMR (CDCl_3 , 400MHz) δ 8.12-8.08(m, 2H), 7.81-7.79(m, 1H), 7.77(s, 1H), 7.73-7.71(m, 2H), 7.65(m, 1H), 7.52-7.47(m, 5H), 7.43-7.09(m, 13H), 6.90-6.87(m, 2H), 6.61-6.50(m, 3H), 2.56(s, 3H), 1.57(s, 6H)

[0323] 화합물 E의 합성

[0324] 중간체 ac 및 중간체 11 대신 중간체 ae 5.75g(10mmol) 및 중간체 15 1.57g(10mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 화합물 A의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 E(수율 84%)를 수득하였다. 생성된 물질

을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0325] $C_{49}H_{34}N_2$ M^+ 650.27

[0326] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ 8.23-8.20(m, 1H), 7.86-7.85(m, 1H), 7.54-7.23(m, 12H), 7.18-7.05(m, 13H), 6.87-6.84(m, 1H), 6.81-6.79(m, 1H), 6.66-6.63(m, 2H), 6.54(m, 1H), 6.30-6.28(m, 2H)

[0327] **화합물 F의 합성**

[0328] 중간체 ac 및 중간체 11 대신 중간체 ae 5.75g(10mmol) 및 중간체 16 3.22g(10mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 화합물 A의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 F(수율 85%)를 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0329] $C_{61}H_{41}N_3$ M^+ 815.33

[0330] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ 8.23-8.20(m, 1H), 8.12-8.10(d, 2H), 7.86-7.85(m, 1H), 7.54-7.49(m, 4H), 7.48-7.06(m, 27H), 6.81-6.79(m, 1H), 6.76-6.68(m, 3H), 6.58(m, 1H), 6.53-6.51(m, 1H)

[0331] **화합물 G의 합성**

[0332] 중간체 ac 및 중간체 11 대신 중간체 ak 5.41g(10mmol) 및 중간체 17 2.35g(10mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 화합물 A의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 G(수율 72%)를 수득하였다. 생성된 물질을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0333] $C_{50}H_{38}N_4$ M^+ 694.31

[0334] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ 8.71-8.70(m, 1H), 8.38-8.36(m, 1H), 8.17(m, 1H), 8.12-8.10(m, 1H), 7.84-7.79(m, 3H), 7.77(s, 1H), 7.70-7.68(m, 1H), 7.64(m, 1H), 7.52-7.41(m, 6H), 7.35-7.09(m, 11H), 7.02(m, 1H), 6.65-6.63(m, 1H), 6.31-6.26(m, 1H), 2.56(s, 3H), 1.57(s, 6H)

[0335] **실시예 1**

[0336] 애노드로서 코닝 15 Ω/cm^2 (1200Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공 증착장치에 이 유리기판을 설치하였다.

[0337] 상기 ITO층 상부에 2-TNATA를 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성한 후, 상기 정공 주입층 상부에 화합물 2를 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0338] 이어서, 상기 정공 수송층 상부에 ADN 및 DPVBi를 중량비 98:2로 공증착하여 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0339] 이 후, 상기 발광층 상부에 Alq_3 를 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성하고, 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성하고, 상기 전자 주입층 상부에 Al을 증착하여 3000Å 두께의 제2전극(캐소드)을 형성함으로써 유기 발광 소자(청색 발광)를 제조하였다.

[0340] **실시예 2**

[0341] 정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 8을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0342]

실시예 3

[0343]

정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 14를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0344]

실시예 4

[0345]

정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 15를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0346]

실시예 5

[0347]

정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 16을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0348]

실시예 6

[0349]

정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 20을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0350]

실시예 7

[0351]

정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 31을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0352]

실시예 8

[0353]

정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 3을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0354]

실시예 9

[0355]

정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 33을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0356]

비교예 1

[0357]

정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 A를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0358]

비교예 2

[0359]

정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 B를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0360]

비교예 3

[0361] 정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 C를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0362] **비교예 4**

[0363] 정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 D를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0364] **비교예 5**

[0365] 정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 E를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0366] **비교예 6**

[0367] 정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 F를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0368] **비교예 7**

[0369] 정공 수송층 형성시 상기 화합물 2 대신 화합물 G를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0370] **평가예 1**

[0372] 실시예 1 내지 9와 비교예 1 내지 7의 유기 발광 소자의 구동 전압, 전류 밀도, 휘도, 발광색, 효율 및 반감 수명(@100mA/cm²)을 PR650 Spectroscan Source Measurement Unit.(PhotoResearch사 제품임)을 이용하여 평가하였다. 그 결과는 하기 표 1과 같다.

표 1

	정공 수송층	구동 전압 (V)	전류 밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	효율 (cd/A)	발광색	반감수명 (hr)
실시예 1	화합물 2	6.67	50	2,433	4.87	청색	293
실시예 2	화합물 8	6.53	50	2,547	5.09	청색	302
실시예 3	화합물 14	6.58	50	2,663	5.33	청색	285
실시예 4	화합물 15	6.68	50	2,770	5.54	청색	334
실시예 5	화합물 16	6.71	50	2,598	5.20	청색	317
실시예 6	화합물 20	6.76	50	2,238	4.90	청색	287
실시예 7	화합물 31	6.62	50	2,552	5.10	청색	304
실시예 8	화합물 3	6.50	50	2,835	5.67	청색	359
실시예 9	화합물 33	6.47	50	2,865	5.71	청색	342
비교예 1	화합물 A	7.85	50	1,561	3.12	청색	113
비교예 2	화합물 B	8.04	50	1,316	2.63	청색	104
비교예 3	화합물 C	7.49	50	1,472	2.94	청색	97
비교예 4	화합물 D	7.27	50	1,245	2.49	청색	107
비교예 5	화합물 E	7.95	50	1,183	2.37	청색	95
비교예 6	화합물 F	7.74	50	1,627	3.25	청색	120
비교예 7	화합물 G	7.89	50	1,255	2.51	청색	109

[0374] 표 1로부터, 실시예 1 내지 9의 유기 발광 소자는 비교예 1 내지 7의 유기 발광 소자에 비하여 우수한 구동 전

압, 휘도, 효율, 색순도 및 수명 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

[0375] 실시예 11

[0376] 애노드로서 코닝 15Ω/cm² (1200Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공 증착장치에 이 유리기판을 설치하였다.

[0377] 상기 ITO층 상부에 2-TNATA를 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성한 후, 상기 정공 주입층 상부에 화합물 300, 화합물 15 및 p-도펀트로서 F4-CTNQ를 공증착(화합물 300:화합물 15의 중량비는 70:30이고, p-도펀트의 함량은 1중량%(화합물 300와 화합물 15의 총중량이 100중량%임)임)하여 1140Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0378] 상기 정공 수송층 상부에 화합물 300을 증착하여 230Å 두께의 버퍼층을 형성한 후, 상기 버퍼층 상부에 ADN 및 DPVBi를 중량비 98:2로 공증착하여 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0379] 이 후, 상기 발광층 상부에 Alq₃를 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성하고, 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성하고, 상기 전자 주입층 상부에 Al을 증착하여 3000Å 두께의 제2전극(캐소드)을 형성함으로써 유기 발광 소자(청색 발광)를 제조하였다.

[0380] 실시예 12

[0381] 화합물 300 및 화합물 16을 공증착(화합물 300:화합물 16의 중량비는 70:30임)하여 1320Å 두께의 정공 수송층을 형성하고, 버퍼층의 두께를 50Å으로 변경하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 11과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0382] 실시예 13

[0383] 화합물 300 및 화합물 16을 공증착(화합물 300:화합물 16의 중량비는 70:30임)하여 1270Å 두께의 정공 수송층을 형성하고, 버퍼층의 두께를 100Å으로 변경하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 12와 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0384] 비교예 11

[0385] 화합물 300 및 화합물 15 대신 NPB를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 11과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0386] 평가예 2

[0387] 실시예 11 내지 13과 비교예 11의 유기 발광 소자의 구동 전압, 전류 밀도, 휘도, 발광색, 효율 및 반감 수명(@100mA/cm²)을 PR650 Spectroscan Source Measurement Unit.(PhotoResearch사 제품임)을 이용하여 평가하였다. 그 결과는 하기 표 2와 같으며, 실시예 11 내지 13 및 비교예 11의 시간-수명 그래프는 도 2에 나타내었다.

표 2

	실시예 11	실시예 12	실시예 13	비교예 11
정공 주입층	2-TNATA (600Å)	2-TNATA (600Å)	2-TNATA (600Å)	2-TNATA (600Å)
정공 수송층	화합물 300, 화합물 15 및 F4-CTNQ의 공증착 (1140Å)	화합물 300, 화합물 16 및 F4-CTNQ의 공증착 (1320Å)	화합물 300, 화합물 16 및 F4-CTNQ의 공증착 (1270Å)	NPB 및 F4-CTNQ의 공증착 (1140Å)

버퍼층	화합물 300 (230Å)	화합물 300 (50Å)	화합물 300 (100Å)	NPB (230Å)
구동 전압(V)	5.6	5.0	5.0	5.2
효율 (cd/A)	5.5	5.1	4.9	3.8
CIE_x	0.135	0.135	0.136	0.137
CIE_y	0.057	0.057	0.054	0.052
환산효율 (cd/A)/CIE_y	95.3	89.4	90.7	72.8
반감수명 (hr) (@400 nit)	68.0	263	225	26.0

[0389] 표 2 및 도 2로부터, 실시예 11 내지 13의 유기 발광 소자는 비교예 11의 유기 발광 소자에 비하여 우수한 구동 전압, 효율, 색순도 및 수명 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

부호의 설명

[0390] 10: 유기 발광 소자

11: 기판

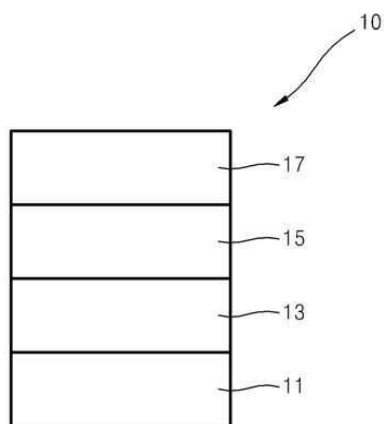
13: 제1전극

15: 유기층

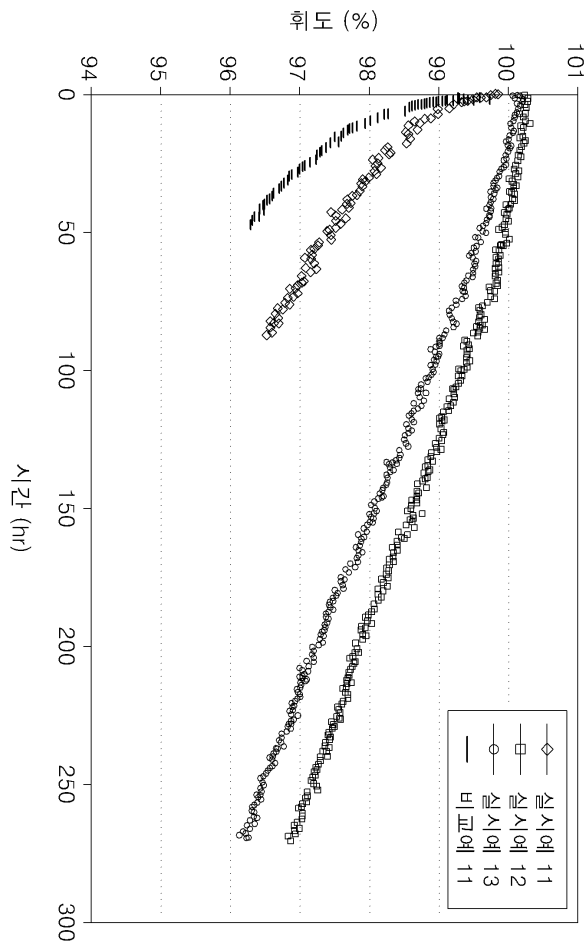
17: 제2전극

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	唑啉类化合物和含有它的有机发光器件		
公开(公告)号	KR101701246B1	公开(公告)日	2017-02-03
申请号	KR1020120002021	申请日	2012-01-06
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
[标]发明人	LEE SUN YOUNG 이선영 KWAK YOON HYUN 광윤현 PARK BUM WOO 박범우 SHIN DAE YUP 신대엽 LEE KWAN HEE 이관희 JEONG HYE IN 정혜인 KHO SAM IL 고삼일 PARK MIE HWA 박미화		
发明人	이선영 광윤현 박범우 신대엽 이관희 정혜인 고삼일 박미화		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0072 C07D209/82 H01L51/5072 H01L51/0061 H01L51/006 H01L51/0067		
优先权	1020110078200 2011-08-05 KR		
其他公开文献	KR1020130016032A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

公开了唑啉类化合物和包含其的有机发光装置。 专利号10-1701246

