



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2012-0139074
(43) 공개일자 2012년12월27일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2011-0058634
(22) 출원일자 2011년06월16일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
(72) 발명자
이선영
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
곽윤현
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
리앤목특허법인

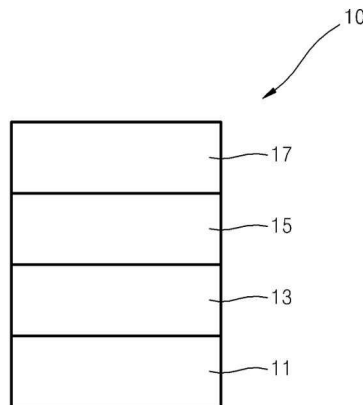
전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자

(57) 요약

축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 제시된다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

박범우

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

이중혁

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

이보라

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

한상현

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

정혜진

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

김영국

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

임진오

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

황석환

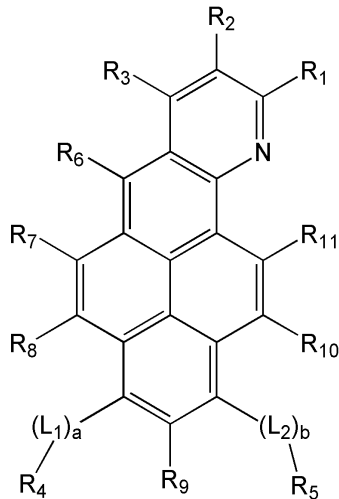
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

R_1 내지 R_{11} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, 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, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴기, $-N(R_{21})(R_{22})$, 또는 $-Si(R_{23})(R_{24})(R_{25})$ 이고;

L_1 및 L_2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴렌기이고;

a 및 b 는 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수이고;

R_{21} 내지 R_{25} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, 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} 헤테로아릴기이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

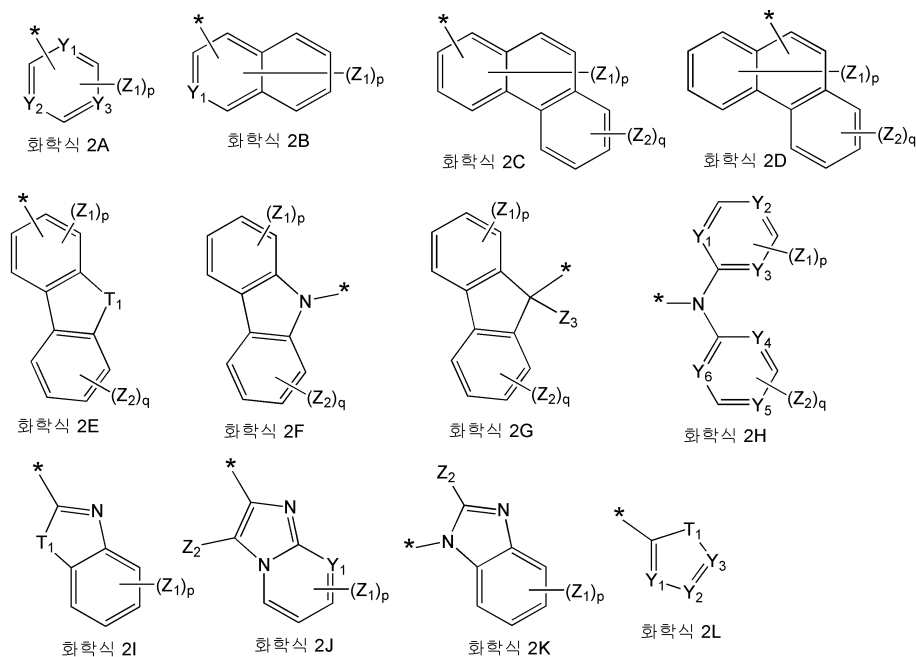
상기 R_1 내지 R_{11} 가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 펜테닐기, 아세틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인데닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphthyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphthyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 페나레닐(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기

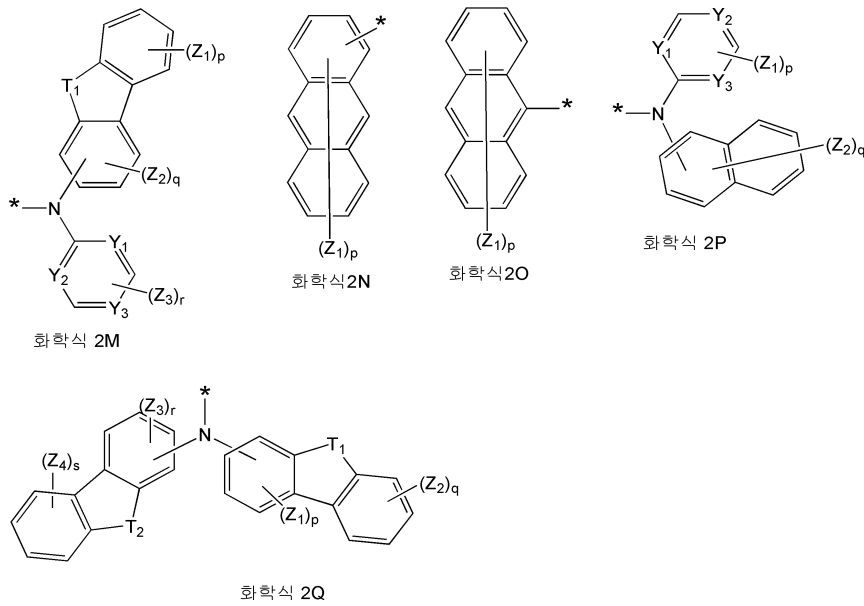
(anthryl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 파이레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크라이세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 나프타세닐기(naphthacenyl), 치환 또는 비치환된 피세닐기(picenyl), 치환 또는 비치환된 페릴레닐기(perylene), 치환 또는 비치환된 펜타세닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl), 치환 또는 비치환된 피롤일기(pyrrolyl), 치환 또는 비치환된 피라졸일기(pyrazolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸일기(imidazolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐기(imidazolynyl), 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기(imidazopyridinyl), 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기(imidazopyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 피리디닐기(pyridinyl), 치환 또는 비치환된 피라지닐기(pyrazinyl), 치환 또는 비치환된 피리미디닐기(pyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 인돌일기(indolyl), 치환 또는 비치환된 푸리닐기(purinyl), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기(quinolynyl), 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기(phthalazinyl), 치환 또는 비치환된 인돌리지닐기(indolizynyl), 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기(quinazolynyl), 치환 또는 비치환된 시놀리닐기(cinnolynyl), 치환 또는 비치환된 인다졸일기(indazolyl), 치환 또는 비치환된 카바졸일기(carbazolyl), 치환 또는 비치환된 페나지닐기(phenazinyl), 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 치환 또는 비치환된 파이라닐기(pyranyl), 치환 또는 비치환된 크로메닐기(chromenyl), 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기(benzofuranyl), 치환 또는 비치환된 티오펜일기(thiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기(benzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기(isothiazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기(benzoimidazolyl), 치환 또는 비치환된 이소사졸일기(isoxazolyl), 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기(dibenzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기(dibenzopuranyl), 치환 또는 비치환된 트리아지닐기(triazinyl), 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기(oxadiazolyl), 또는 $-N(R_{21})(R_{22})$ 인, 축합환 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 R_1 내지 R_{11} 이 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{10} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알콕시기, 및 하기 화학식 2A 내지 2Q 중 하나인, 축합환 화합물:





상기 화학식 2A 내지 2Q 중,

Y_1 내지 Y_6 은 서로 독립적으로, $=N-$ 또는 $=C(Z_{11})-$ 이고;

T_1 및 T_2 는 서로 독립적으로, $-S-$, $-O-$, $-N(Z_{12})-$ 또는 $-C(Z_{13})(Z_{14})-$ 이고;

Z_1 내지 Z_4 및 Z_{11} 내지 Z_{14} 는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 카르복시기; C_1-C_{60} 알킬기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C_1-C_{60} 알킬기; C_2-C_{60} 알케닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C_2-C_{60} 알케닐기; C_2-C_{60} 알키닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C_2-C_{60} 알키닐기; C_1-C_{60} 알콕시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C_1-C_{60} 알콕시기; C_3-C_{60} 시클로알킬기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C_3-C_{60} 시클로알킬기; C_5-C_{60} 아릴기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, C_1-C_{60} 알킬기 및 C_1-C_{60} 알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C_5-C_{60} 아릴기; C_5-C_{60} 아릴옥시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, C_1-C_{60} 알킬기 및 C_1-C_{60} 알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C_5-C_{60} 아릴옥시기; C_5-C_{60} 아릴싸이오기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, C_1-C_{60} 알킬기 및 C_1-C_{60} 알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C_5-C_{60} 아릴싸이오기; C_2-C_{60} 헤테로아릴기; 또는 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, C_1-C_{60} 알킬기 및 C_1-C_{60} 알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴기이고;

p 는 1 내지 9의 정수이고;

q 는 1 내지 7의 정수이고;

r 은 1 내지 3의 정수이고;

s 는 1 내지 4의 정수이다.

청구항 4

제3항에 있어서,

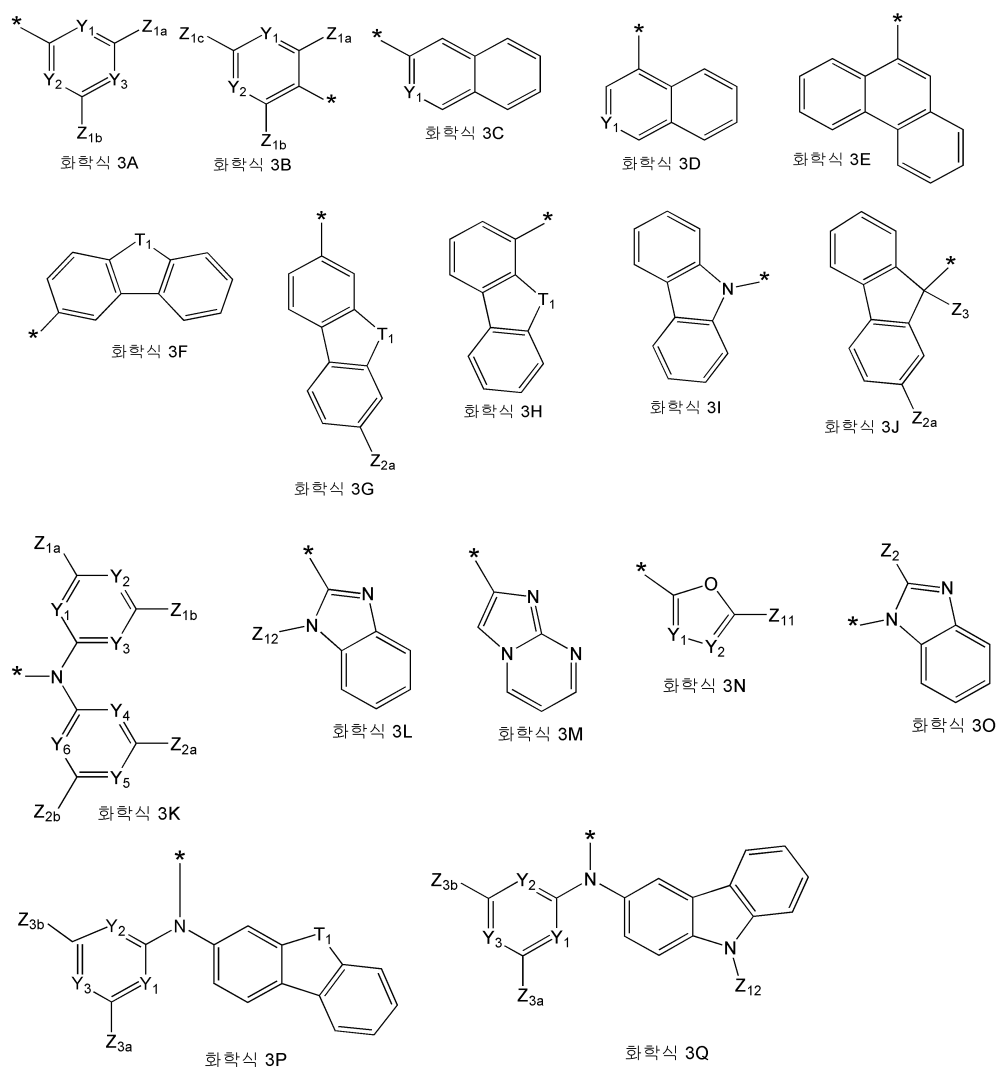
Z_1 내지 Z_4 및 Z_{11} 내지 Z_{14} 는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 메틸기; 에틸기; 프로필기; 부틸기; 펜틸기; 에테닐기; 프로페닐기; 부테닐기; 펜테닐기; 아세틸기; 메톡시기; 에톡시기;

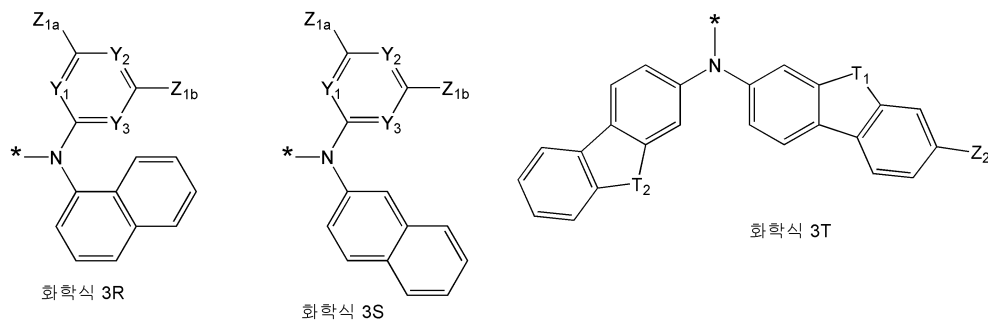
프로폭시기; 부톡시기; 펜톡시기; 페닐기; 나프틸기; 플루오레닐기; 페난트레닐기; 안트릴기; 파이레닐기; 크라이세닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 펜테닐기, 아세틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 및 펜톡시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 카바졸일기; 이미다졸일기; 이미다졸리닐기; 이미다조피리디닐기; 이미다조피리미디닐기; 피리디닐기; 피리미디닐기; 트리아지닐기; 퀴놀리닐기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 펜테닐기, 아세틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 및 펜톡시기 중 하나 이상으로 치환된 카바졸일기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기 및 퀴놀리닐기; 중 하나인, 축합환 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

R₁ 내지 R₁₁이 서로 독립적으로, 하기 화학식 3A 내지 3T 중 하나인, 축합환 화합물:





상기 화학식 3A 내지 3T 중,

Y_1 내지 Y_6 은 서로 독립적으로, $=N-$ 또는 $=C(Z_{11})-$ 이고;

T_1 및 T_2 는 서로 독립적으로, $-S-$, $-O-$, $-N(Z_{12})-$ 또는 $-C(Z_{13})(Z_{14})-$ 이고;

Z_{1a} , Z_{1b} , Z_{1c} , Z_{1d} , Z_2 , Z_{2a} , Z_{2b} , Z_{2c} , Z_3 , Z_{3a} , Z_{3b} , Z_{11} , Z_{12} , Z_{13} 및 Z_{14} 는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로겐 원자; 히드록실기; 시아노기; 메틸기; 에틸기; 프로필기; 부틸기; 펜틸기; 에테닐기; 프로페닐기; 부테닐기; 펜테닐기; 아세틸기; 메톡시기; 에톡시기; 프로폭시기; 부톡시기; 펜톡시기; 페닐기; 나프틸기; 플루오레닐기; 페난트레닐기; 안트릴기; 파이레닐기; 크라이세닐기; 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 펜테닐기, 아세틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 및 펜톡시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 카바졸일기; 이미다졸일기; 이미다졸리닐기; 이미다조피리디닐기; 이미다조피리미디닐기; 피리디닐기; 피리미디닐기; 트리아지닐기; 퀴놀리닐기; 및 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 펜테닐기, 아세틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 및 펜톡시기 중 하나 이상으로 치환된 카바졸일기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기 및 퀴놀리닐기; 중 하나이다.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 a 및 b가 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2인, 축합환 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서,

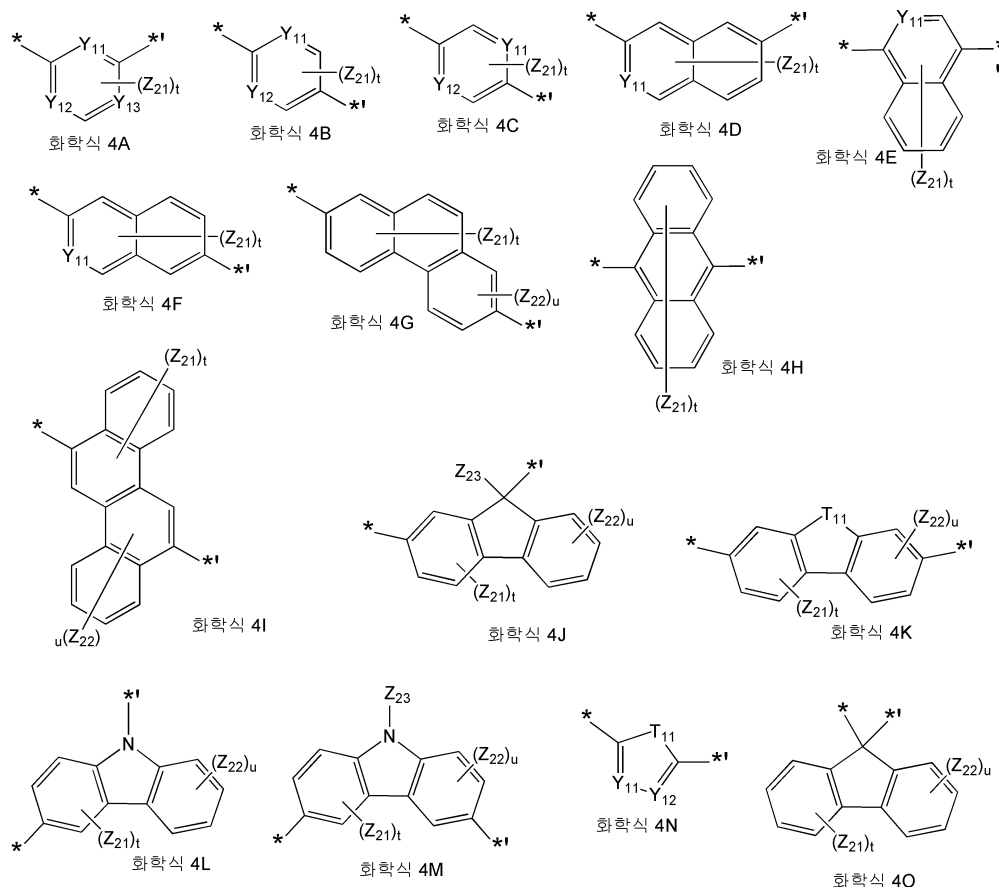
상기 L_1 및 L_2 가 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인데닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기, 치환 또는 비치환된 헵탈레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페나레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기, 치환 또는 비치환된 파이레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐레닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피롤일렌기, 치환 또는 비치환된 피라졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피라지닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기, 치환 또는 비치환된 인돌일렌기, 치환 또는 비치환된 푸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐렌기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐렌기, 치환 또는 비치환된 인돌리지닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기, 치환 또는 비치환된 페나지닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 파이라닐렌기, 치환 또는 비치환된 크로메닐렌기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜

닐렌기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일렌기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이속사졸일렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일렌기인, 축합환 화합물.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 L_1 및 L_2 가 하기 화학식 4A 내지 4O 중 어느 하나인, 축합환 화합물:



상기 화학식 4A 내지 4O 중,

Y_{11} 내지 Y_{16} 은 서로 독립적으로, $=N-$ 또는 $=C(Z_{31})-$ 이고;

T_{11} 은 $-S-$, $-O-$, $-N(Z_{32})-$ 또는 $-C(Z_{33})(Z_{34})-$ 이고;

Z_{21} 내지 Z_{23} 및 Z_{31} 내지 Z_{34} 는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 카르복시기; C_1-C_{60} 알킬기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C_1-C_{60} 알킬기; C_2-C_{60} 알케닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C_2-C_{60} 알케닐기; C_2-C_{60} 알키닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C_2-C_{60} 알키닐기; C_1-C_{60} 알콕시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C_1-C_{60} 알콕시기; C_3-C_{60} 시클로알킬기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C_3-C_{60} 시클로알킬기; C_5-C_{60} 아릴기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, C_1-C_{60} 알킬기 및 C_1-C_{60} 알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C_5-C_{60} 아릴기; C_5-C_{60} 아릴옥시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, C_1-C_{60} 알킬기 및 C_1-C_{60} 알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C_5-C_{60} 아릴옥시기; C_5-

C₆₀아릴싸이오기; 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기; C₂-C₆₀헤테로아릴기; 또는 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기이고;

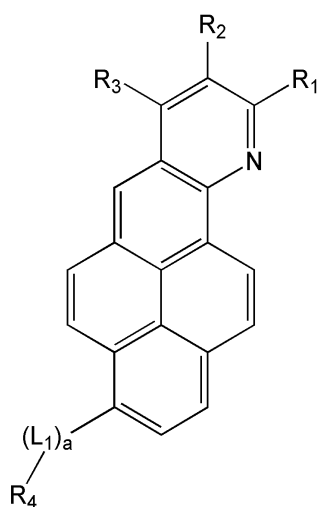
t는 1 내지 8의 정수이고;

u는 1 내지 5의 정수이다.

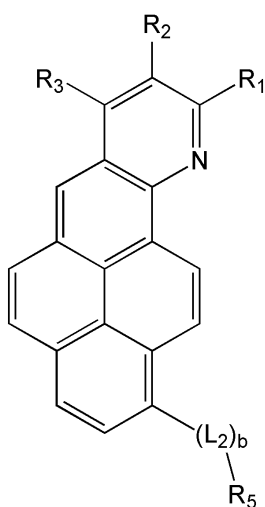
청구항 9

제1항에 있어서, 하기 화학식 1A 또는 1B로 표시되는, 축합환 화합물:

<화학식 1A>



<화학식 1B>

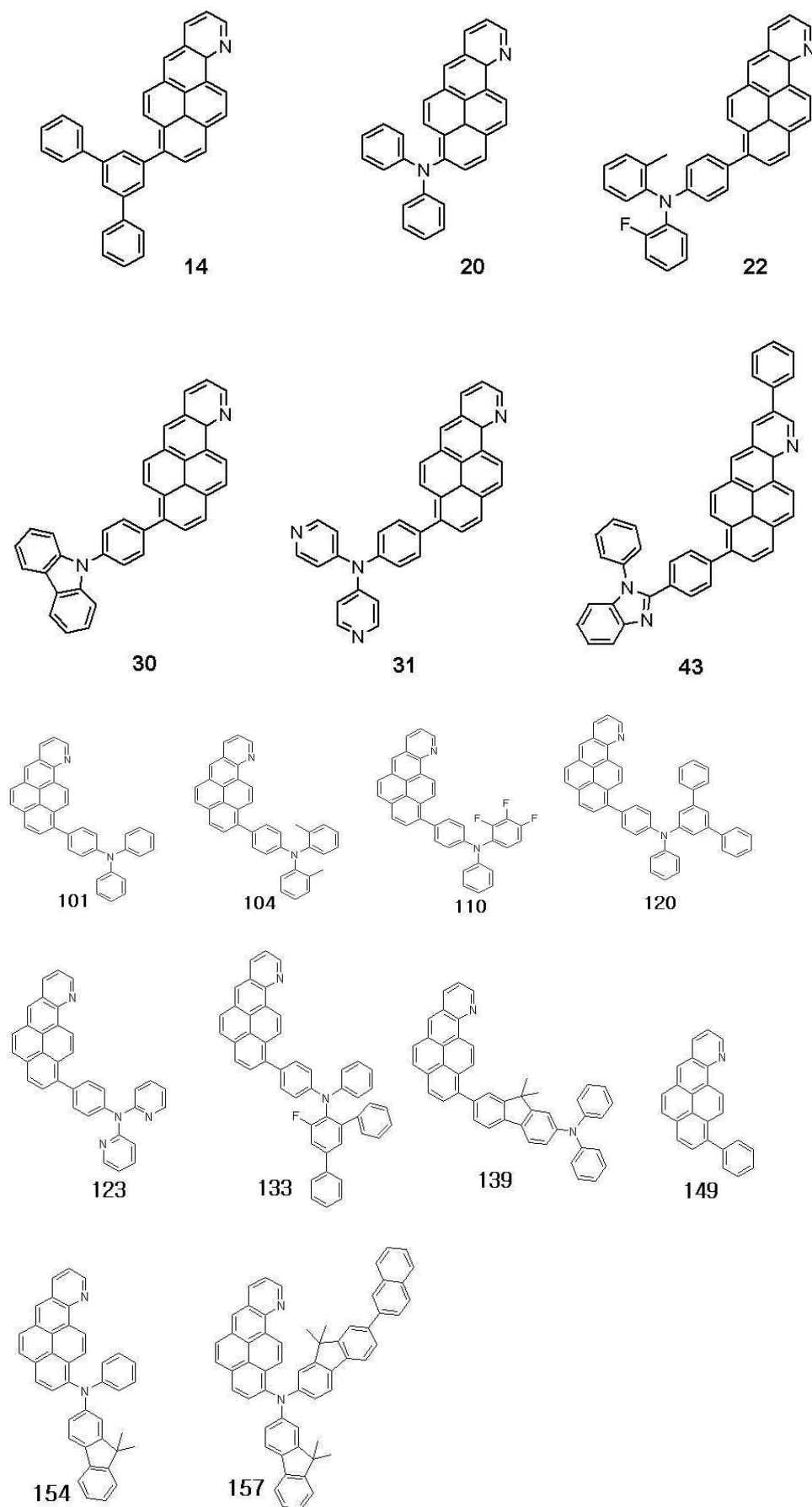


상기 화학식 1A 및 1B 중, R₁ 내지 R₅, L₁, L₂, a 및 b는 제1항에 기재된 바와 동일하다.

청구항 10

제1항에 있어서,

하기 화합물 14, 20, 22, 30, 31, 43, 101, 104, 110, 120, 123, 133, 139, 149, 154 또는 157인, 축합환 화합물:



청구항 11

제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 제1층을 포함하고, 상기 제1층이 제1항 내지 제10항 중 어느 한 항의 축합환 화합물을 단일 물질 또는 서로 다른 물질의 혼합물의 형태로 포함한다, 유기 발광 소자.

청구항 12

제11항에 있어서,

상기 제1층이 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송 기능 및 전자 주입 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함한다, 유기 발광 소자.

청구항 13

제12항에 있어서,

상기 제1층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 하나 이상을 포함한다, 유기 발광 소자.

청구항 14

제13항에 있어서,

상기 발광층에 상기 축합환 화합물이 포함되어 있고, i) 상기 형광 호스트가 상기 축합환 화합물이거나, ii) 상기 형광 도펀트가 상기 축합환 화합물이거나, iii) 상기 형광 호스트 및 형광 도펀트 각각이 상기 축합환 화합물인, 유기 발광 소자.

청구항 15

제12항에 있어서,

상기 제1층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 안트라센계 화합물, 스티릴계 화합물 및 아릴아미노계 화합물 중 하나 이상을 포함한다, 유기 발광 소자.

청구항 16

제15항에 있어서,

상기 발광층에 상기 축합환 화합물이 포함되어 있는, 유기 발광 소자.

청구항 17

제12항에 있어서,

상기 제1층이 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층에 상기 축합환 화합물이 포함되어 있는, 유기 발광 소자.

청구항 18

제12항에 있어서,

상기 제1층이 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층에 금속-함유 화합물이 포함되어 있는, 유기 발광 소자.

청구항 19

제12항에 있어서,

상기 제1층이 발광층 및 전자 수송층을 포함하고, 상기 발광층 및 전자 수송층 각각에 상기 축합환 화합물이 포함되어 있는, 유기 발광 소자.

청구항 20

제12항에 있어서,

상기 제1층이 상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 및 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 및 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나가 전하-생성 물질을 더 포함한 유기 발광 소자.

명세서

기술분야

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

배경기술

[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

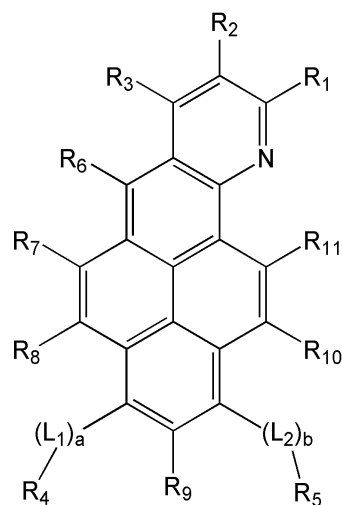
해결하려는 과제

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

과제의 해결 수단

[0007] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 제공된다:

[0008] <화학식 1>



[0009]

[0010] 상기 화학식 1 중,

[0011] R₁ 내지 R₁₁은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, 치

환 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, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴기, $-N(R_{21})(R_{22})$, 또는 $-Si(R_{23})(R_{24})(R_{25})$ 이고;

[0012] L_1 및 L_2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴렌기이고;

[0013] a 및 b는 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수이고;

[0014] R_{21} 내지 R_{25} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, 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} 헤테로아릴기이다.

[0015] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 제1층을 포함하고, 상기 제1층이 상기 축합환 화합물을 단일 물질 또는 서로 다른 물질의 혼합물의 형태로 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

[0016] 상기 축합환 화합물을 포함한 유기 발광 소자는, 저구동 전압, 고휘도, 구효율 및 장수명을 가질 수 있다.

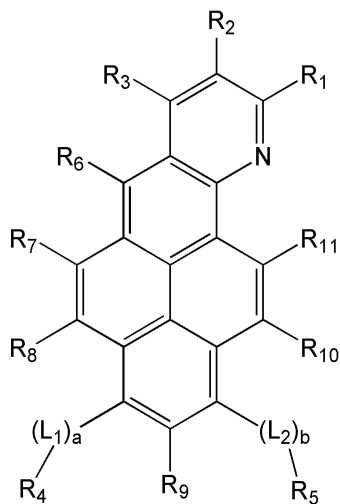
도면의 간단한 설명

[0017] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0018] 상기 축합환 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0019] <화학식 1>



[0020] 상기 화학식 1 중, R_1 내지 R_{11} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, 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, 치환 또는 비치환

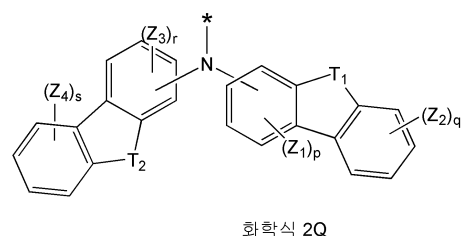
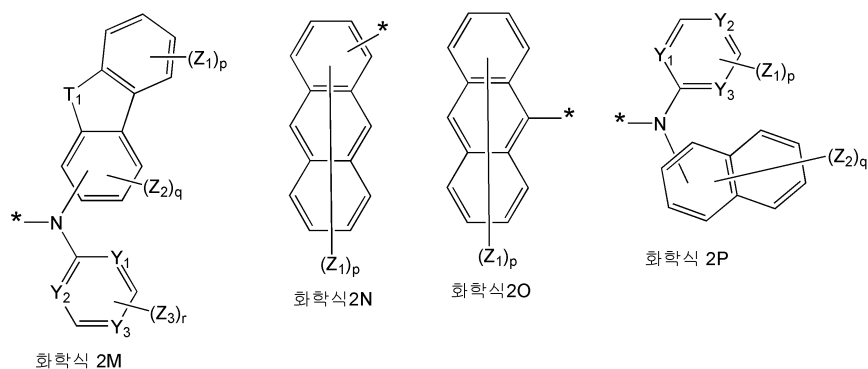
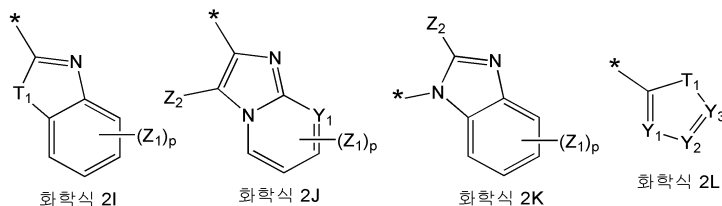
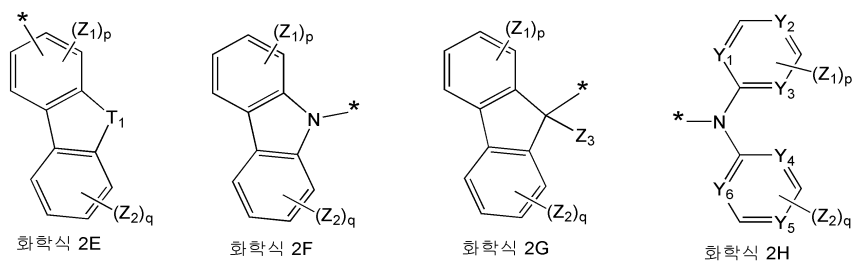
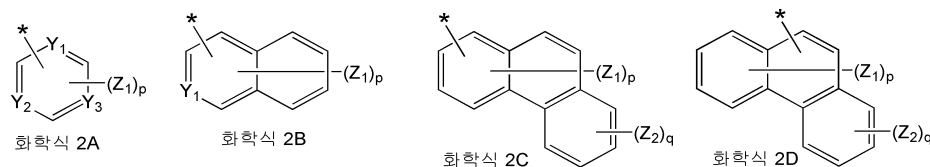
된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, -N(R₂₁)(R₂₂), 또는 -Si(R₂₃)(R₂₄)(R₂₅)일 수 있다.

[0022]

예를 들어, 화학식 1 중, 상기 R₁ 내지 R₁₁은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 펜테닐기, 아세틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인데닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphthyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphthyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 페나레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 파이레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크라이세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 나프타세닐기(naphthacenyl), 치환 또는 비치환된 피세닐기(picenyl), 치환 또는 비치환된 페릴레닐기(perylene), 치환 또는 비치환된 펜타세닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl), 치환 또는 비치환된 피롤일기(pyrrolyl), 치환 또는 비치환된 피라졸일기(pyrazolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸일기(imidazolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐기(imidazoliny), 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기(imidazopyridinyl), 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기(imidazopyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 피리디닐기(pyridinyl), 치환 또는 비치환된 피라지닐기(pyrazinyl), 치환 또는 비치환된 피리미디닐기(pyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 인돌일기(indolyl), 치환 또는 비치환된 푸리닐기(purinyl), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기(quinolinyl), 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기(phthalazinyl), 치환 또는 비치환된 인돌리지닐기(indolizinyl), 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기(quinazolinyl), 치환 또는 비치환된 시놀리닐기(cinnolinyl), 치환 또는 비치환된 인다졸일기(indazolyl), 치환 또는 비치환된 카바졸일기(carbazolyl), 치환 또는 비치환된 페나지닐기(phenazinyl), 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 치환 또는 비치환된 파이라닐기(pyranyl), 치환 또는 비치환된 크로메닐기(chromenyl), 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기(benzofuranyl), 치환 또는 비치환된 티오펜일기(thiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기(benzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기(isothiazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기(benzoimidazolyl), 치환 또는 비치환된 이소자졸일기(isoxazolyl), 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기(dibenzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기(dibenzopuranyl), 치환 또는 비치환된 트리아지닐기(triazinyl), 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기(oxadiazolyl), 또는 -N(R₂₁)(R₂₂)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0023]

예를 들어, 상기 화학식 1 중, 상기 R₁ 내지 R₁₁은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₁₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알콕시기, 및 하기 화학식 2A 내지 2Q 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



상기 화학식 2A 내지 2Q 중, Y₁ 내지 Y₆은 서로 독립적으로, =N- 또는 =C(Z₁₁)-일 수 있고, T₁ 및 T₂는 서로 독립적으로, -S-, -O-, -N(Z₁₂)- 또는 -C(Z₁₃)(Z₁₄)-일 수 있다.

한편, 상기 화학식 2A 내지 2Q 중, Z₁ 내지 Z₄ 및 Z₁₁ 내지 Z₁₄는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로겐 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 카르복시기; C₁-C₆₀알킬기; 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C₁-C₆₀알킬기; C₂-C₆₀알케닐기; 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C₂-C₆₀알케닐기; C₂-C₆₀알키닐기; 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C₂-C₆₀알키닐기; C₁-C₆₀알콕시기; 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C₁-C₆₀알콕시기; C₃-C₆₀시클로알킬기; 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기 및 카르복시기 중 하나 이상으로 치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기; C₅-C₆₀아릴기; 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C₅-C₆₀아릴기; C₅-C₆₀아릴옥시기; 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C₅-C₆₀아

릴옥시기; C₅-C₆₀아릴싸이오기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기; C₂-C₆₀헤테로아릴기; 또는 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복시기, C₁-C₆₀알킬기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기일 수 있다.

[0028]

예를 들어, 상기 Z₁ 내지 Z₄ 및 Z₁₁ 내지 Z₁₄는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 메틸기; 에틸기; 프로필기; 부틸기; 펜틸기; 에테닐기; 프로페닐기; 부테닐기; 펜테닐기; 아세틸기; 메톡시기; 에톡시기; 프로폭시기; 부톡시기; 펜톡시기; 페닐기; 나프틸기; 플루오레닐기; 페난트레닐기; 안트릴기; 파이레닐기; 크라이세닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 펜테닐기, 아세틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 및 펜톡시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 카바졸일기; 이미다졸일기; 이미다졸리닐기; 이미다조피리디닐기; 이미다조피리미디닐기; 피리디닐기; 피리미디닐기; 트리아지닐기; 퀴놀리닐기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 펜테닐기, 아세틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 및 펜톡시기 중 하나 이상으로 치환된 카바졸일기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기 및 퀴놀리닐기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0029]

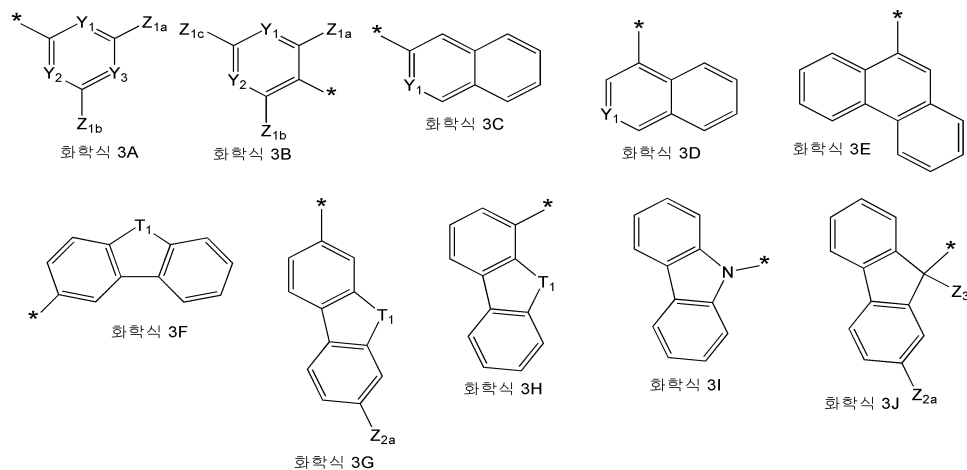
상기 화학식 2A 내지 2Q 중, p는 1 내지 9의 정수이고; q는 1 내지 7의 정수이고; r은 1 내지 3의 정수이고; s는 1 내지 4의 정수일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0030]

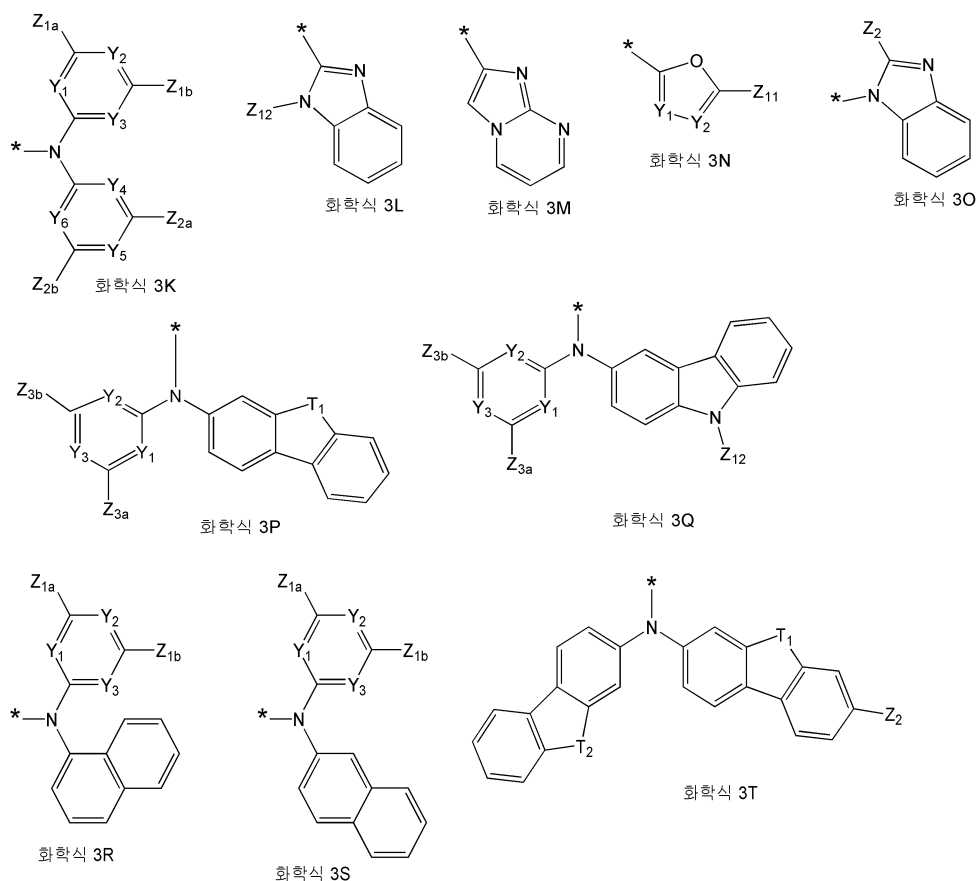
p가 2 이상일 경우, 2 이상의 Z₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, q가 2 이상일 경우, 2 이상의 Z₂는 서로 동일하거나 상이할 수 있고, r이 2 이상일 경우, 2 이상의 Z₃는 서로 동일하거나 상이할 수 있고, s가 2 이상일 경우, 2 이상의 Z₄는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0031]

예를 들어, 상기 R₁ 내지 R₁₁은 서로 독립적으로, 하기 화학식 3A 내지 3T 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0032]



[0033]

[0034]

[0035]

상기 화합식 3A 내지 3T 중, Y_1 내지 Y_6 , T_1 및 T_2 에 대한 상세한 설명은 상세한 바를 참조한다. 상기 화합식 3A 내지 3T 중 Z_{1a} , Z_{1b} , Z_{1c} , Z_{1d} , Z_2 , Z_{2a} , Z_{2b} , Z_{2c} , Z_3 , Z_{3a} , Z_{3b} , Z_{11} , Z_{12} , Z_{13} 및 Z_{14} 에 대한 상세한 설명은 상기 Z_1 에 대한 설명을 참조한다.

[0036]

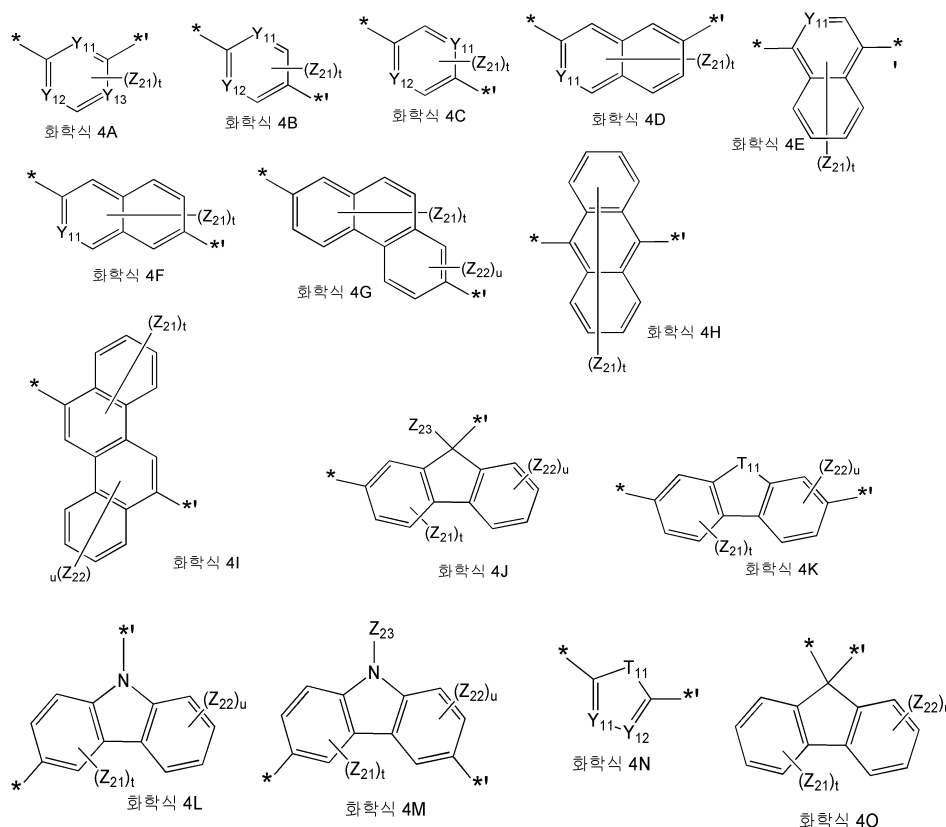
상기 화합식 1 중, L_1 및 L_2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 헤테로아릴렌기일 수 있다.

[0037]

예를 들어, 상기 L_1 및 L_2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인데닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기, 치환 또는 비치환된 헥탈레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페나레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페나트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기, 치환 또는 비치환된 피아레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐레닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피롤일렌기, 치환 또는 비치환된 피라졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피라지닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기, 치환 또는 비치환된 인돌일렌기, 치환 또는 비치환된 푸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐렌기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐렌기, 치환 또는 비치환된 인돌리지닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기, 치환 또는 비치환된 페나지닐렌기, 치환 또는 비치환된 페나트리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피라라닐렌기, 치환 또는 비치환된 크로메닐렌기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일렌기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이속사졸일렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일렌기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은

아니다.

[0038] 예를 들어, 상기 L_1 및 L_2 는 하기 화학식 4A 내지 4O 중 어느 하나일 수 있다:



[0039]

[0040]

[0041] 상기 화학식 4A 내지 4O 중, Y_{11} 내지 Y_{16} 은 서로 독립적으로, $=N-$ 또는 $=C(Z_{31})-$ 일 수 있고, T_{11} 은 $-S-$, $-O-$, $-N(Z_{32})-$ 또는 $-C(Z_{33})(Z_{34})-$ 일 수 있다.

[0042] Z_{21} 내지 Z_{23} 및 Z_{31} 내지 Z_{34} 에 대한 상세한 설명은 상기 Z_1 에 대한 설명을 참조한다.

[0043] 상기 t 는 1 내지 8의 정수이고; u 는 1 내지 5의 정수일 수 있다.

[0044] t 가 2 이상일 경우, 2 이상의 Z_{21} 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, u 가 2 이상일 경우, 2 이상의 Z_{22} 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

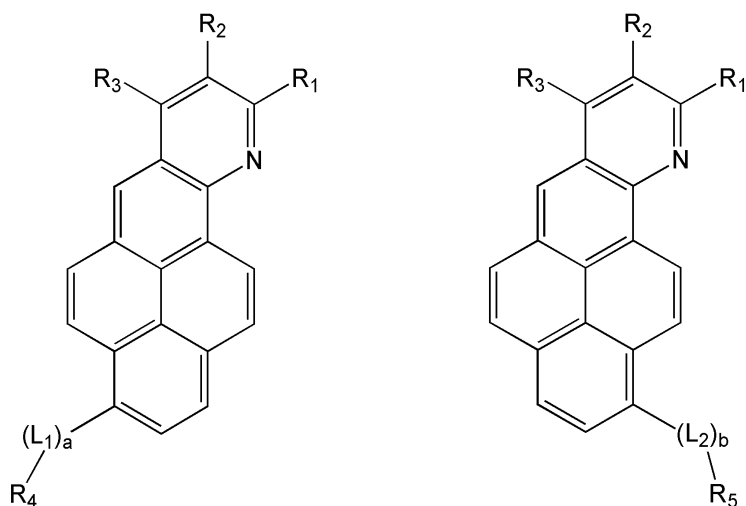
[0045] 상기 화학식 1 중, a 및 b 는 0 내지 5의 정수이다. 예를 들어, 상기 a 및 b 는 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0046] 상기 a 또는 b 가 0일 경우, R_4 또는 R_5 는 파이렌의 탄소와 직접 연결된다. a 가 2 이상일 경우, 2 이상의 L_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, b 가 2 이상일 경우, 2 이상의 L_2 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0047] 상기 화학식 1은 하기 화학식 1A 또는 1B로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0048] <화학식 1A>

<화학식 1B>



[0049]

[0050] 상기 화학식 1A 및 1B 중, R₁ 내지 R₅, L₁, L₂, a 및 b는 상술한 바를 참조한다.

[0051]

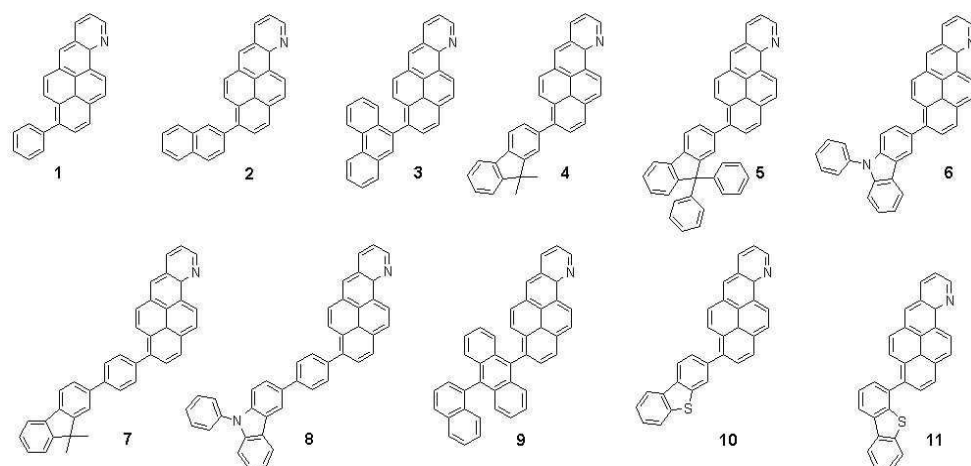
예를 들어, 상기 1A 및 1B 중 R₁ 내지 R₃는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 펜테닐기, 아세틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphthyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 파이레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크라이세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 피롤릴기(pyrrolyl), 치환 또는 비치환된 피라졸릴기(pyrazolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기(imidazolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐기(imidazolynyl), 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기(imidazopyridinyl), 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기(imidazopyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 피리디닐기(pyridinyl), 치환 또는 비치환된 피리미디닐기(pyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기(quinolinyl), 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기(benzofuranyl), 치환 또는 비치환된 티오펜기(thiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기(benzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기(dibenzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기(dibenzopuranyl), 치환 또는 비치환된 트리아지닐기(triazinyl), 또는 치환 또는 비치환된 옥사디아졸릴기(oxadiazolyl)이고; R₄ 및 R₅는 상기 화학식 2A 내지 2Q 중 어느 하나(예를 들면, 화학식 3A 내지 3T 중 어느 하나)이고; L₁ 및 L₂는 상기 화학식 4A 내지 4Q 중 어느 하나이고; a 및 b는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0052]

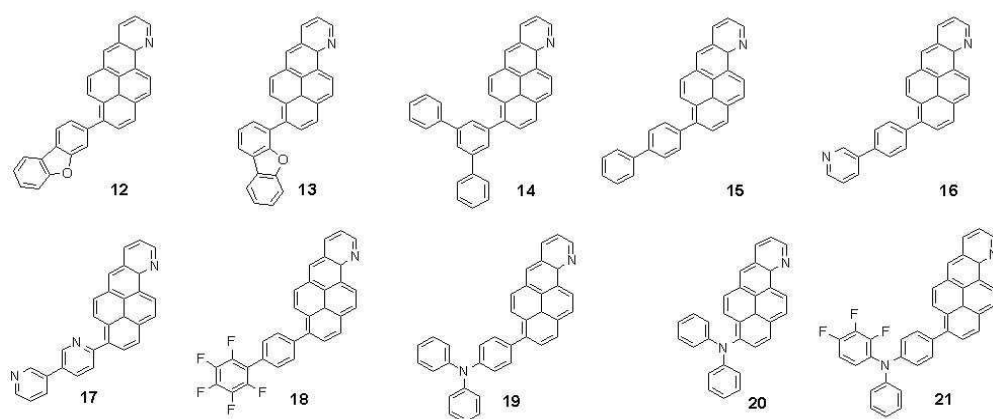
상기 화학식 1은 파이렌과 피리딘이 융합됨(fused)으로써, 파이-컨쥬게이션 시스템(π -conjugation system)을 갖게 되어 비-발광성 감쇠(non-radiative decay)를 감소시킬 수 있다. 이러한 화학식 1의 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 우수한 내부 발광 양자 수율을 가질 수 있는 바, 상기 유기 발광 소자의 발광 효율이 향상될 수 있다.

[0053]

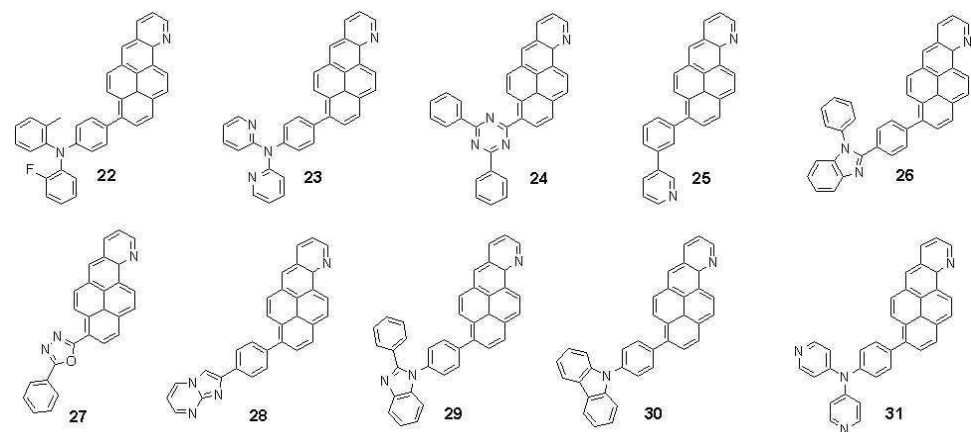
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은, 하기 화합물 1 내지 46 및 화합물 101 내지 157 중 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



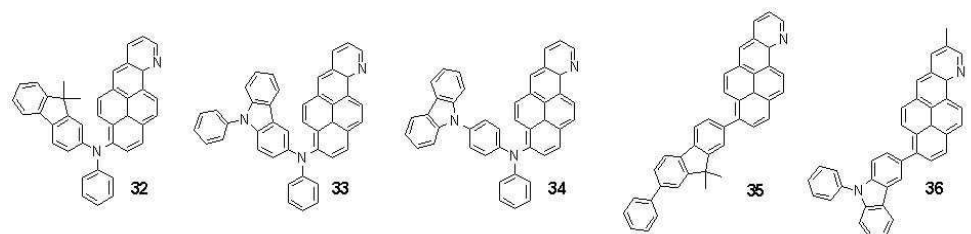
[0054]



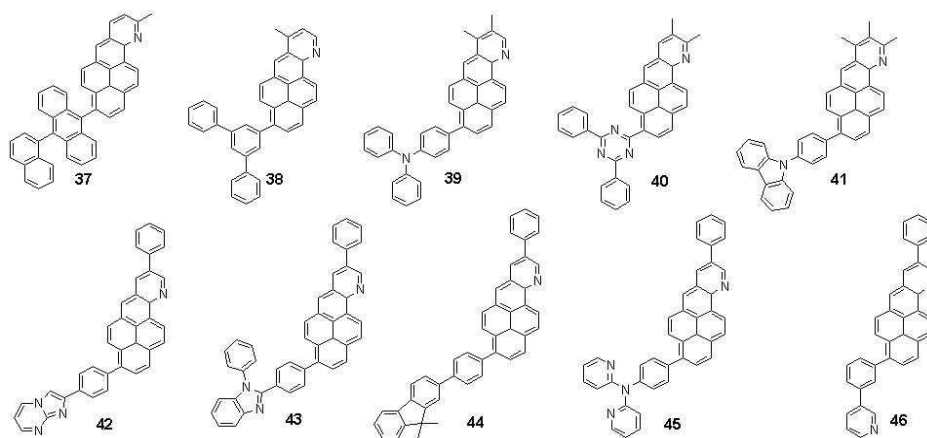
[0055]



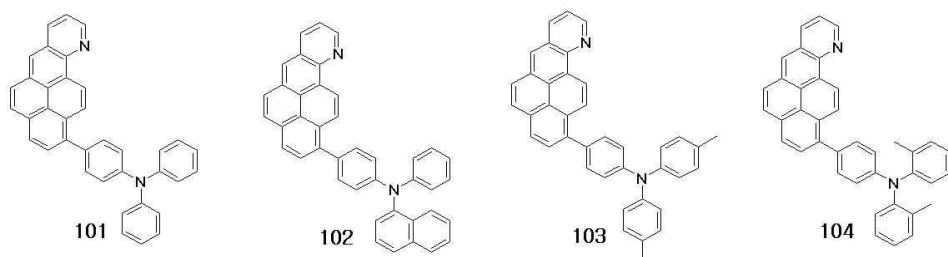
[0056]



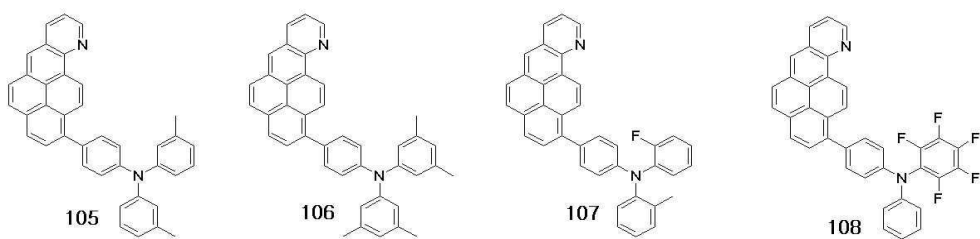
[0057]



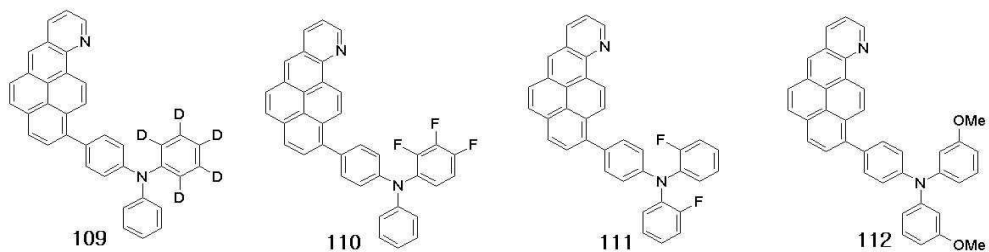
[0058]



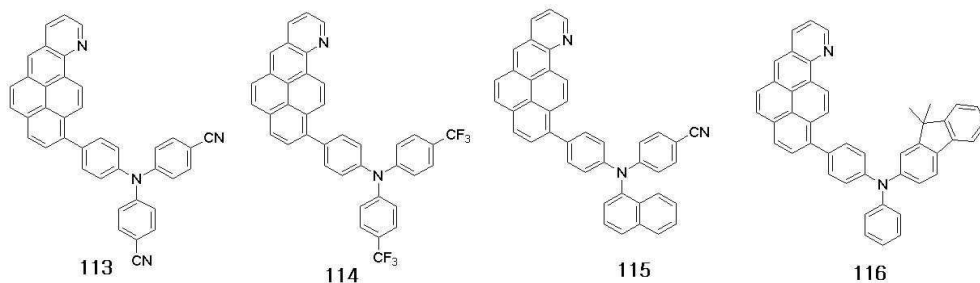
[0059]



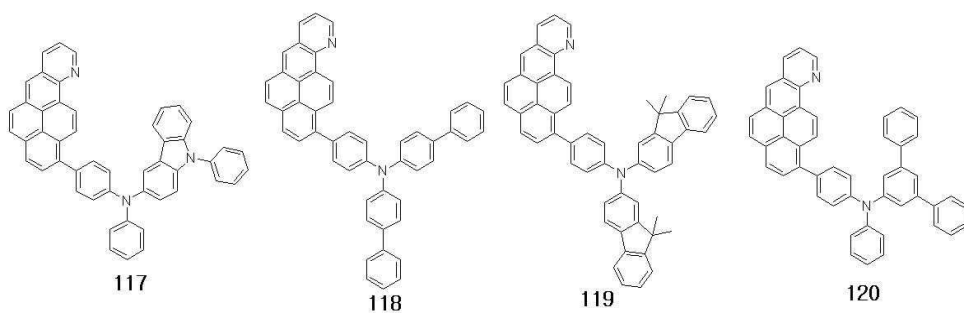
[0060]



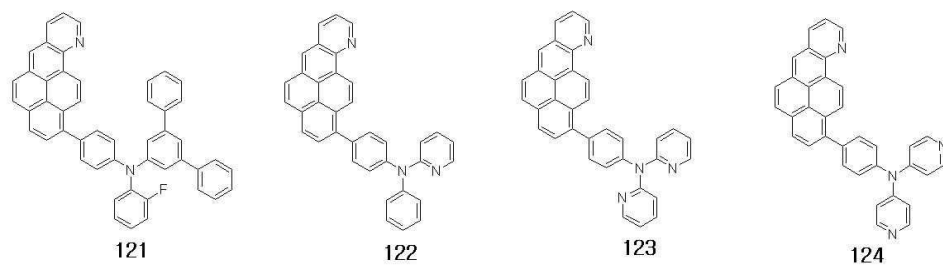
[0061]



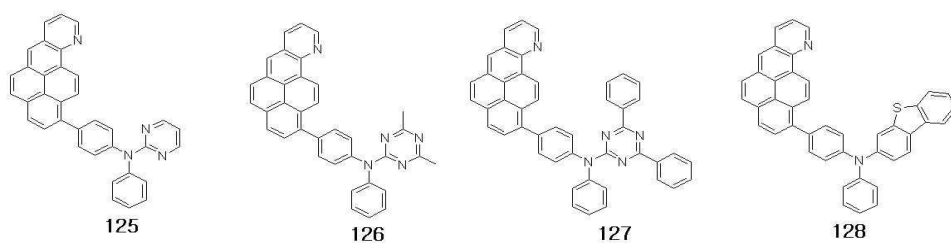
[0062]



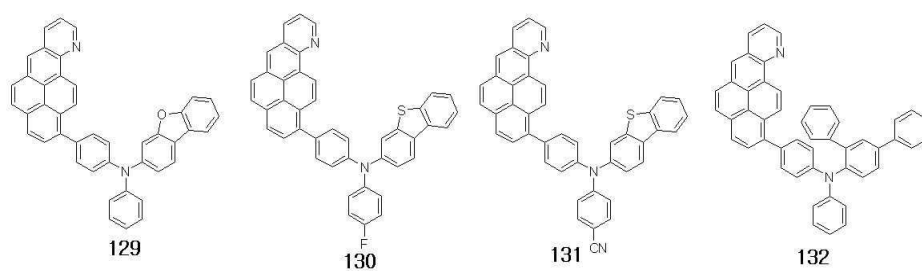
[0063]



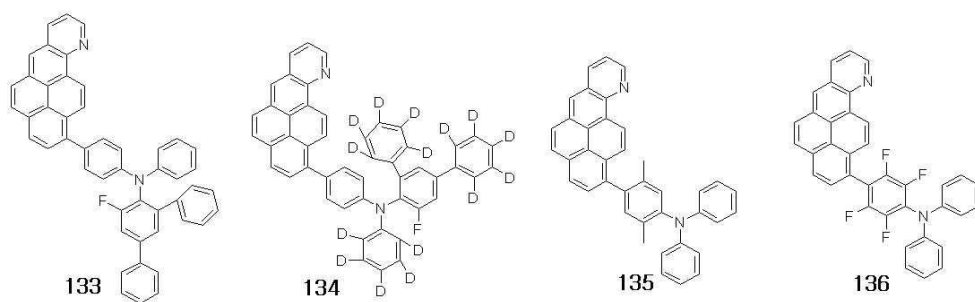
[0064]



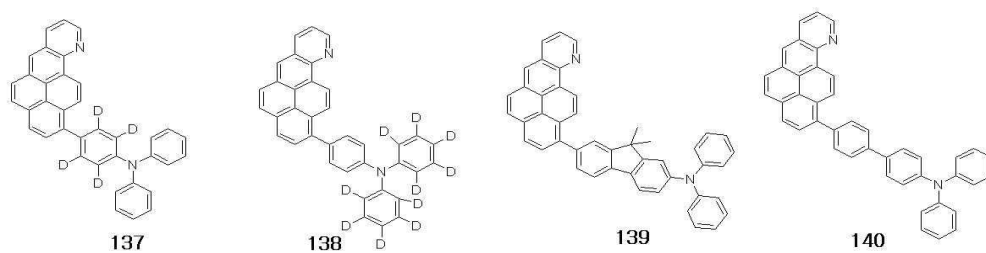
[0065]



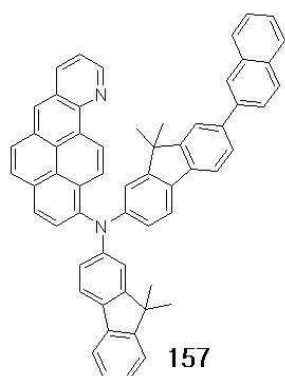
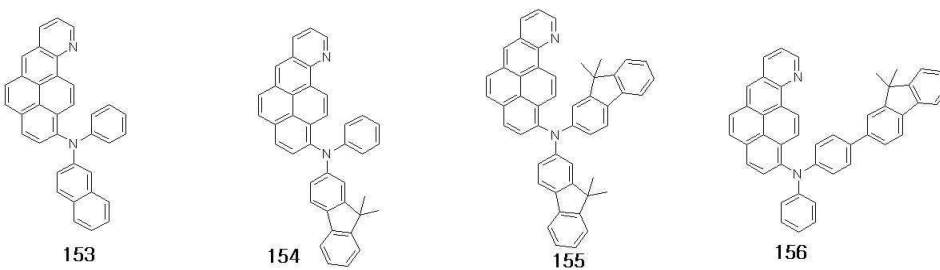
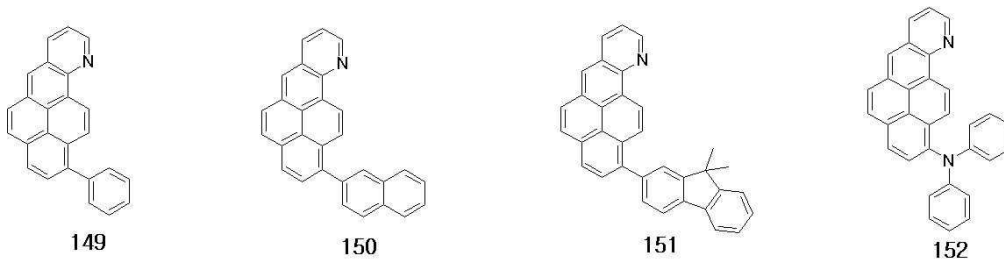
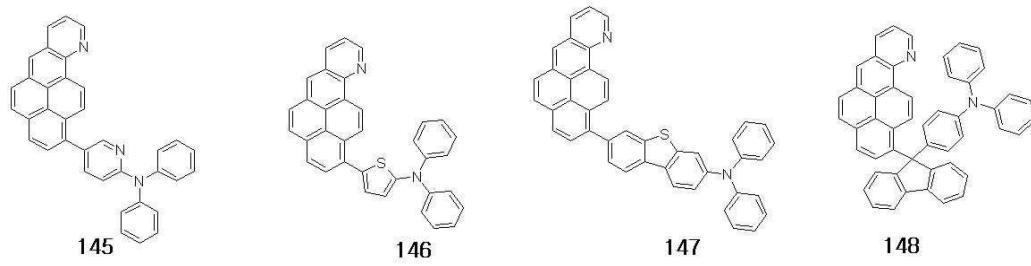
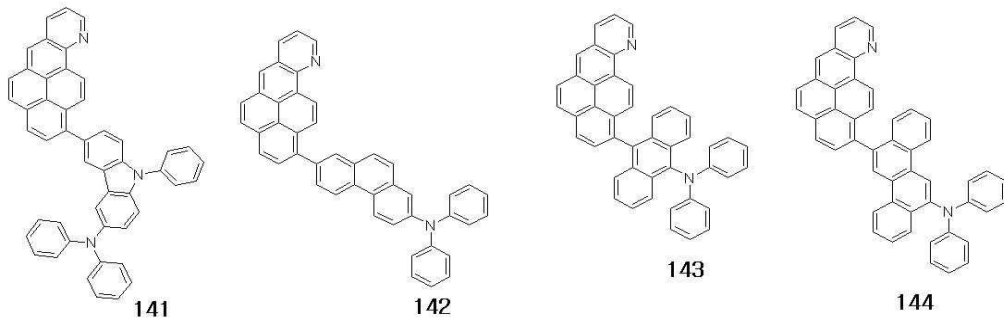
[0066]



[0067]



[0068]



본 명세서 중, 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기(또는 C_1 - C_{30} 알킬기)의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있고, 치환된 C_1 - C_{60} 알킬기는 상기 비치환된 C_1 - C_{60} 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자가 중수소, 할로겐 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, $-N(Q_1)(Q_2)$, 및 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ (여기서, Q_1 내지 Q_5 는 서로 독

립적으로 수소, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₅-C₆₀아릴기, 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택됨)로 치환된 것이다.

[0075] 본 명세서 중 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기(또는 C₁-C₆₀알콕시기)는 -OA(단, A는 상술한 바와 같은 비치환된 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 가지며, 이의 구체적인 예로서, 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시, 등이 있고, 이들 알콕시기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0076] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기(또는 C₂-C₆₀알케닐기)는 상기 비치환된 C₂-C₆₀알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 에테닐, 프로페닐, 부테닐 등이 있다. 이들 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0077] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기(또는 C₂-C₆₀알키닐기)는 상기 정의된 바와 같은 C₂-C₆₀알킬기의 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 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0078] 본 명세서 중 비치환된 C₅-C₆₀아릴기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 5 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기는 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 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0079] 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기의 예로는 페닐기, C₁-C₁₀알킬페닐기(예를 들면, 에틸페닐기), C₁-C₁₀알킬비페닐기(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), C₁-C₁₀알킬나프틸기(예를 들면, 메틸나프틸기), C₁-C₁₀알콕시나프틸기(예를 들면, 메톡시나프틸기), 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 안트라퀴놀일기, 메틸안트릴기, 페난트릴기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리세닐기, 에틸-크리세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 클로로페릴레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기 등을 들 수 있으며, 치환된 C₅-C₆₀아릴기의 예는 상술한 바와 같은 비치환된 C₅-C₆₀아릴기의 예와 상기 치환된 C₁-C₆₀알킬기의 치환기를 참조하여 용이하게 인식할 수 있다. 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기의 예를 참조하여 용이하게 인식될 수 있다.

[0080] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기는 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 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기는 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 헤테로아릴렌기 중 하나 이상의 수소원자는 상술한 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0081] 상기 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기의 예에는, 피라졸일기, 이미다졸일기, 옥사졸일기, 티아졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 피리다닐기, 피리다지닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조이미다졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 등을 들 수 있다. 상기 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀아릴렌기의 예를

참조하여 용이하게 인식될 수 있다.

- [0082] 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 비치호나도니 C_5-C_{60} 아릴싸이오기는 $-OA_3$ (여기서, A_3 는 상기 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기임)를 가리킨다.
- [0083] 상기 화학식 1을 갖는 축합환 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 축합환 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자에게 용이하게 인식될 수 있다.
- [0084] 상기 화학식 1을 갖는 축합환 화합물은 유기 발광 소자에 사용될 수 있다. 따라서, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 제1층을 포함하고, 상기 제1층이 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시된 축합환 화합물을 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0085] 상기 축합환 화합물은 단일 물질 또는 서로 다른 물질의 혼합물의 형태로 상기 제1층에 포함될 수 있다. 예를 들어, 후술할 실시예 1의 유기 발광 소자는 상기 축합환 화합물로서 화합물 14(발광층에 포함되어 형광 호스트로서의 역할을 함)만을 단일 물질 형태로 포함한다. 한편, 후술할 실시예 7의 유기 발광 소자는 상기 축합환 화합물로서 화합물 14(발광층에 포함되어 형광 호스트로서의 역할을 함) 및 화합물 20(발광층에 포함되어 형광 도펀트로서의 역할을 함)의 혼합물을 포함한다. 본 명세서 중, "상기 제1층은 상기 축합환 화합물은 단일 물질 또는 서로 다른 물질의 혼합물의 형태로 포함한다"란 표현은 상술한 바를 참조하여, 당업자에게 용이하게 이해될 수 있다.
- [0086] 상기 제1층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송 기능 및 전자 주입 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0087] 본 명세서 중 "제1층"은 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 모든 층을 가리키는 용어이다.
- [0088] 예를 들어, 상기 제1층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 하나 이상을 포함할 수 있다. 여기서, 상기 발광층에 상기 축합환 화합물이 포함되어 있고, i) 상기 형광 호스트가 상기 축합환 화합물(후술할 실시예 1 등 참조)이거나, ii) 상기 형광 도펀트가 상기 축합환 화합물(후술할 실시예 3 등 참조)이거나, iii) 상기 형광 호스트 및 형광 도펀트 각각이 상기 축합환 화합물(후술할 실시예 7 등 참조)일 수 있다.
- [0089] 한편, 상기 제1층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 안트라센계 화합물, 스티릴계 화합물 및 아릴아미노계 화합물 중 하나 이상을 포함할 수 있다. 여기서, 상기 발광층에 상기 축합환 화합물이 포함될 수 있다.
- [0090] 상기 발광층은 적색, 녹색 또는 청색 발광층일 수 있다. 예를 들어, 상기 발광층층은 청색 발광층일 수 있다. 이 때, 상기 축합환 화합물은 청색 호스트 및/또는 청색 도펀트로 사용되어, 고효율, 고휘도, 고색순도, 및 장수명을 갖는 유기 발광 소자를 제공할 수 있다.
- [0091] 또한, 상기 제1층은 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층에 상기 축합환 화합물이 포함될 수 있다(후술할 실시예 5 등 참조). 여기서, 상기 전자 수송층은 상기 축합환 화합물 외에, 금속-함유 화합물을 더 포함할 수 있다.
- [0092] 상기 제1층은 발광층 및 전자 수송층을 모두 포함하고, 상기 발광층 및 전자 수송층 각각에 상기 축합환 화합물(발광층 및 전자 수송층에 포함된 상기 축합환 화합물은 서로 동일하거나 상이할 수 있음)이 포함되어 있을 수 있다(후술할 실시예 8 등 참조).
- [0093] 또한, 상기 제1층은 상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 및 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 및 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나는, 통상의 정공 주입 물질, 정공 수송 물질 및 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 하는 물질 외에, 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.
- [0094] 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.
- [0095] 유기 발광 소자(10)는 기판(11), 제1전극(13) 제1층(15) 및 제2전극(17)을 차례로 구비한다.
- [0096] 상기 기판(11)으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열적 안

정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.

[0097] 상기 제1전극(13)은 기판 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.

[0098] 상기 제1전극(13) 상부로는 제1층(15)이 구비되어 있다.

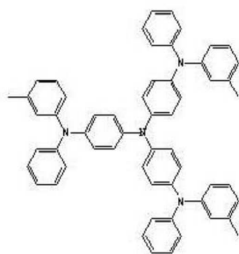
[0099] 상기 제1층(15)은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층을 포함할 수 있다.

[0100] 정공 주입층(HIL)은 상기 제1전극(13) 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

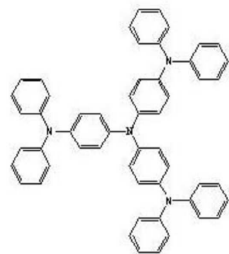
[0101] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500 °C, 진공도 약 10⁻⁸ 내지 약 10⁻³ torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0102] 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.

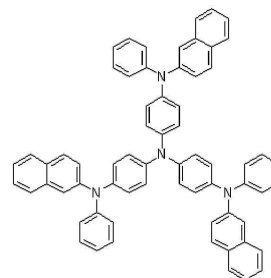
[0103] 정공 주입 물질로는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 및/또는 공지된 정공 주입 물질을 사용할 수 있는데, 공지된 정공 주입 물질로는, 예를 들면, N,N'-디페닐-N,N'-비스-[4-(페닐-m-톨일-아미노)-페닐]-비페닐-4,4'-디아민(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine: DNTPD), 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA [4,4',4''-tris (3-methylphenylphenylamino) 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 sulfonicacid:폴리아닐린/캄페술포산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린)/폴리(4-스티렌술포네이트))등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.



m-MTDATA



TDATA



2-TNATA

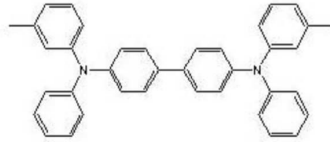
[0104]

[0105] 상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 주입층의 두께가 적절한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스러운 정도의 정공 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0106] 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 증

착 조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건 범위 중에서 선택될 수 있다.

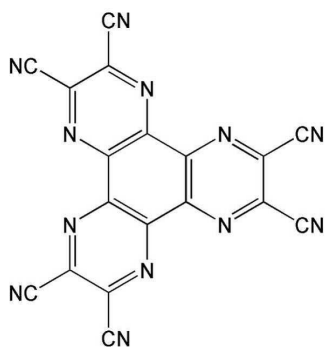
- [0107] 정공 수송 물질로는 상술한 바와 같은 화학식 1의 축합환 화합물 및/또는 공지된 정공 수송 물질을 사용할 수 있다. 공지된 정공 수송 재료로는, 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), NPB(N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



TPD

- [0108]
- [0109] 상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 800Å일 수 있다. 상기 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.
- [0110] 또는, 정공 주입층과 정공 수송층 대신, 정공 주입 기능과 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층을 형성할 수 있다. 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 물질은 공지된 재료 중에서 선택될 수 있다.
- [0111] 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 화학식 1의 축합환 화합물, 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.
- [0112] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라사이아노 퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라사이아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4TCNQ) 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.

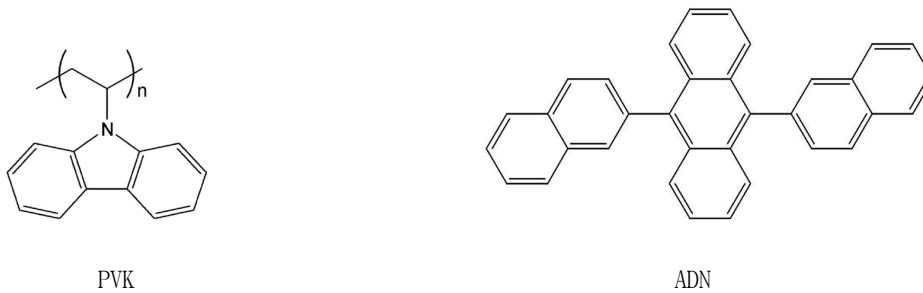
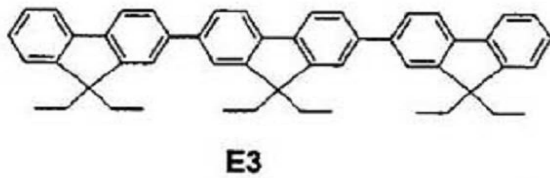
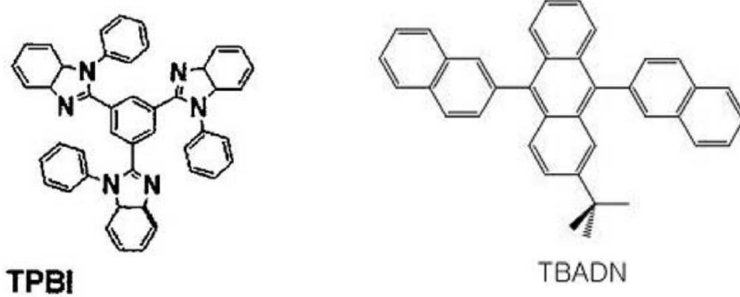
[0113] <화합물 200>



- [0114]
- [0115] 상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층이 상기 전하-생성 물질을 더 포함할 경우, 상기 전하-생성 물질은 상기 층들 중에 균일하게(homogeneous) 분산되거나, 또는 불균일하게 분포하여, 상기 층들 중 서브층(sub-layer)을 이룰 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.
- [0116] 상기 정공 수송층 또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 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.
- [0117] 상기 발광층 물질로는 상기 화학식 1의 축합환 화합물 및/또는 공지의 발광 재료(호스트 및 도펀트를 모두 포함

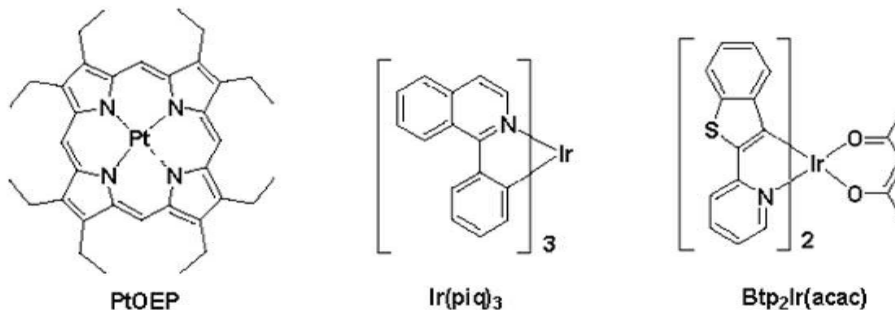
합) 중 1종 이상의 물질을 사용할 수 있다.

[0118] 공지의 호스트의 예로는 Alq_3 , 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.

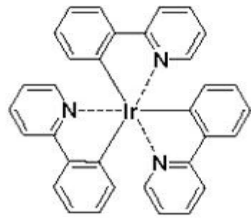


[0123] 상기 도펀트는 형광 도펀트 및 인광 도펀트 중 적어도 하나일 수 있다. 상기 인광 도펀트는, Ir, Pt, Os, Re, Ti, Zr, Hf 또는 이들 중 2 이상의 조합을 포함한 유기 금속 착체일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

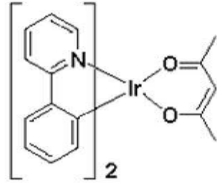
[0124] 한편, 공지된 적색 도펀트로서 PtOEP, Ir(piq)₃, Btp₂Ir(acac) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



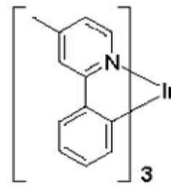
[0126] 또한, 공지된 녹색 도펀트로서, Ir(ppy)₃ (ppy = 페닐피리딘), Ir(ppy)₂(acac), Ir(mppy)₃, C545T 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



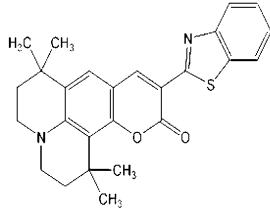
Ir(ppy)₃



Ir(ppy)₂(acac)

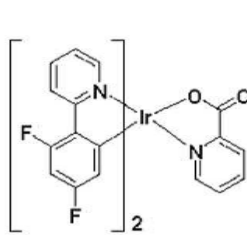


Ir(mpyp)₃

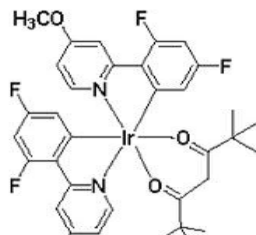


C545T

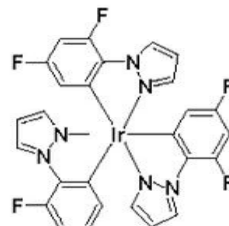
한편, 공지된 청색 도펀트로서, F₂Irpic, (F₂ppy)₂Ir(tmd), Ir(dfppz)₃, ter-플루오렌(fluorene), 4,4'-비스(4-디페닐아미노스티릴) 비페닐 (DPAVB_i), 2,5,8,11-테트라-*tert*-부틸 페틸렌 (TBPe), DPVB_i 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



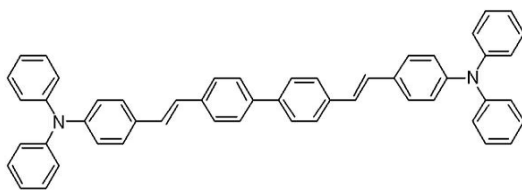
F₂Irpic



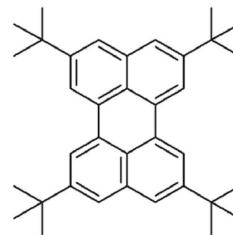
(F₂ppy)₂Ir(tmd)



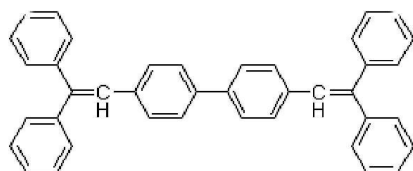
Ir(dfppz)₃



DPAVB_i



TBPe



DPVB_i

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.

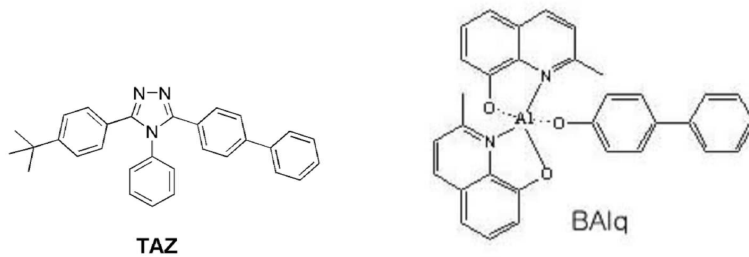
상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있

다.

[0137] 발광층에 인광 도펀트와 함께 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 정공 수송층과 발광층 사이에 진공증착법, 스퍼코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공 저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스퍼코팅법에 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.

[0138] 상기 정공 저지층의 두께는 약 50Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 100Å 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.

[0139] 다음으로 전자 수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스퍼코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공증착법 및 스퍼코팅법에 의해 전자수송층을 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 물질을 이용할 수 있다. 이의 예로는, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq₃), TAZ, Balq, 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: Bebq₂)등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0140]

[0141] 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.

[0142] 또는, 상기 전자 수송층은 전자 수송성 유기 화합물 및 금속-함유 물질을 포함할 수 있다. 상기 전자 수송성 유기 화합물의 비제한적인 예로는, AND(9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센); 및 하기 화합물 201 및 202와 같은 안트라센계 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

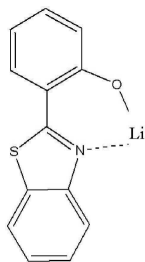
[0143] <화합물 201> <화합물 202>



[0144]

[0145] 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:

[0146] <화합물 203>



[0147]

[0148] 또한 전자 수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

[0149] 상기 전자 주입층 형성 재료로는 LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0150] 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.

[0151] 이와 같은 제1층(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.

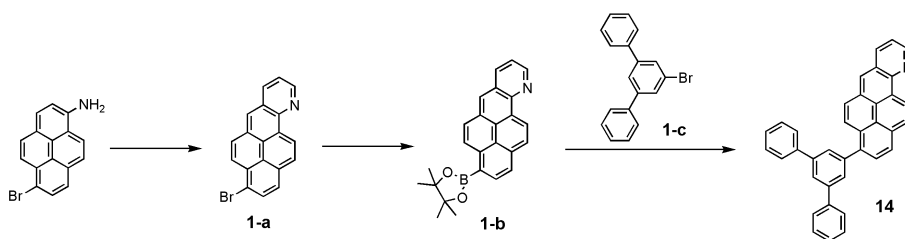
[0152] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0153] [실시예]

[0154] **합성예 1: 화합물 14의 합성**

[0155] 하기 반응식 1에 따라 화합물 14를 합성하였다:

[0156] <반응식 1>



[0157]

[0158] **중간체 1-a의 합성**

[0159] 1-아미노-6-브로모파이렌(1-amino-6-bromopyrene) 10g (33.8 mmol), 70% 황산 수용액 10g을 니트로벤젠 8g에 넣어 혼합하여 110℃로 높여준 후, 산화제인 글리세롤 10g을 적가한 다음, 110℃에서 10시간 동안 교반하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 상온으로 식힌 후, 물 50mL와 디에틸에테르 50mL로 3회 추출하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마스네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 1-a 7.1g(수율 71%)을 수득하였다. 생성된 화합물을 LC-MS를 통하여 확인하였다.

[0160] C₁₉H₁₀BrN₁ : M⁺ : 331.00

[0161] 중간체 1-b의 합성

[0162] 중간체 1-a 5g (15 mmol), 비스(피나콜레이트)디보론(bis(pinacolato)diboron) 4.6g (18mmol), KOAc(아세트산 칼륨) 4.42g (45mmol), Pd(dppf)Cl₂([1,1'-Bis(diphenylphosphino)ferrocene]dichloropalladium(II)), [1,1'-비스(디페닐포르피노)페로센]디클로로팔라듐(II)) 0.04g (0.06mmol)을 탈가스(degassed) DMF 100mL과 혼합하고, 10시간동안 교반하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 물 100mL와 다이클로로메탄 100mL로 3회 추출하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리정제하여 중간체 1-b 5.18g (수율 91%)을 수득하였다. 생성된 화합물을 LC-MS를 통해 확인하였다.

[0163] C₂₅H₂₂B₁N₁O₂ : M+ 379.17

[0164] 화합물 14의 합성

[0165] 중간체 1-b 2g (5.2 mmol), 중간체 1-c 1.9g (6.2mmol), Pd(PPh₃)₄ (테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)) 0.18g (0.16mmol)을 2M NaOH 수용액 20mL와 THF 20mL과 혼합하고 80℃로 10시간동안 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 상온으로 식힌 후, 물 50mL와 디에틸에테르 50mL로 3회 추출하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마스네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리정제하여 1.8g(수율 73 %)의 화합물 14를 수득하였다. 생성된 화합물을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

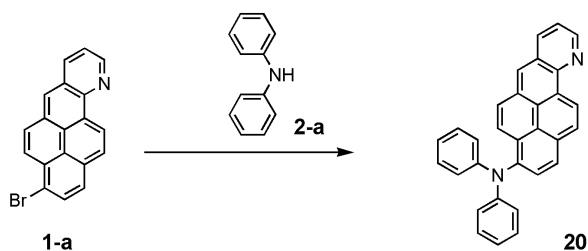
[0166] C₃₇H₂₃N₁ : M+ 482.19

[0167] ¹H NMR (CDCl₃, 400MHz) δ (ppm) 9.07 (d, 1H) 8.90 (m, 1H) 8.36 (d, 1H) 8.29(s, 1H) 8.26-8.23 (m, 1H) 8.20(d, 1H) 8.14(d, 1H) 8.01(d, 1H) 7.96(d, 1H) 7.85(m, 2H) 7.72-7.69(m, 5H) 7.49-7.39(m, 7H)

[0168] 합성예 2: 화합물 20의 합성

[0169] 하기 반응식 2에 따라, 화합물 20을 합성하였다:

[0170] <반응식 2>



[0171]

[0172] 실시예 1에 기재된 바에 따라 합성된 중간체 1-a 2g (6.0mmol), 중간체 2-a 10.15g (60.0mmol), Pd₂(dba)₃ (트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)) 0.16g (0.18mmol), (2,4,6-트리-tert-부틸페닐)포스핀 0.05g (0.18mmol), 소듐 t-부톡사이드 0.7g (7.2mmol)을 톨루엔 100mL에 넣고, 100℃로 10시간 동안 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3회 추출하여 수득한 유기층을 마스네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리정제하여 화합물 20 1.19g (수율 47 %)을 얻었다. 생성된 화합물을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

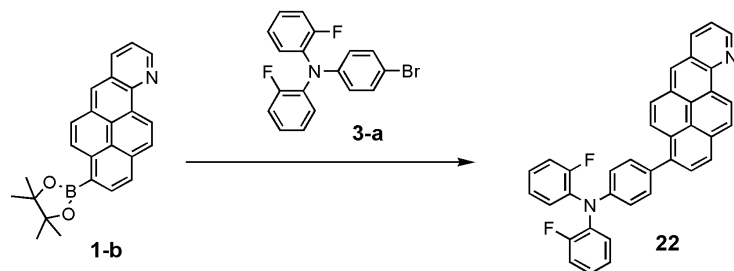
[0173] C₃₁H₂₀N₂ : M+ 420.16

[0174] ¹H NMR (CDCl₃, 400MHz) δ (ppm) 8.91 (m, 1H) 8.69(d, 1H) 8.27-8.24(m, 2H) 8.08(d, 1H) 8.03(d, 1H) 7.91-7.02 (m, 14H)

[0175] **합성예 3: 화합물 22의 합성**

[0176] 하기 반응식 3에 따라 화합물 22를 합성하였다:

[0177] <반응식 3>



[0178]

[0179] 중간체 1-b 2g (5.2 mmol), 중간체 3-a 2.23g (6.2mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.18g (0.16mmol)을 2M NaOH 수용액 20mL 와 THF 20mL 에 넣고 80℃로 10시간 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3회 추출하여 수득한 유기층을 마스네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리정제하여 화합물 22 1.7g (수율 62 %)을 얻었다. 생성된 화합물을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

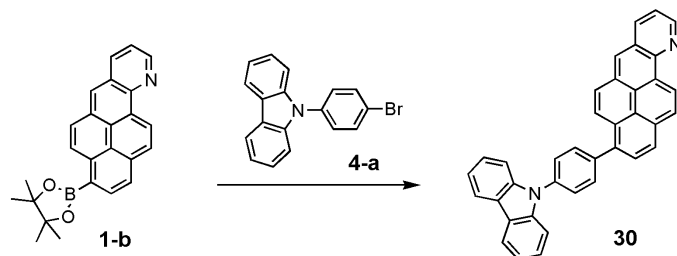
[0180] C₃₃H₂₃N₂ : M+ 532.18

[0181] ¹H NMR (CDCl₃, 400MHz) δ (ppm) 9.07(d, 1H) 8.91(m, 1H) 8.63(d, 1H) 8.49(s, 1H) 8.47-8.44(m, 1H) 8.36(d, 1H) 8.23(d, 2H) 8.19(d, 1H) 7.84-7.81(m, 2H) 7.75-7.71(m, 1H) 7.44-7.23(m, 8H) 6.99(m, 2H)

[0182] **합성예 4: 화합물 30의 합성**

[0183] 하기 반응식 4에 따라 화합물 30을 합성하였다:

[0184] <반응식 4>



[0185]

[0186] 중간체 1-b 2g (5.2 mmol), 중간체 4-a 2.0g (6.2mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.18g (0.16mmol)을 2M NaOH 수용액 20mL와 THF 20mL 에 넣고 80℃로 10시간 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3회 추출하여 수득한 유기층을 마스네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 수득한 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리정제하여 화합물 30 1.98g (수율 77 %)을 얻었다. 생성된 화합물을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

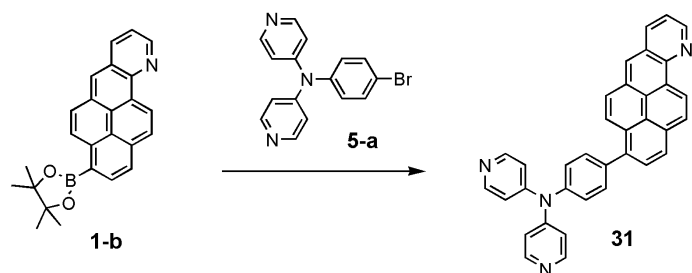
[0187] C₃₇H₂₂N₂ : M+ 494.18

[0188] ¹H NMR (CDCl₃, 400MHz) δ (ppm) 9.07(d, 1H) 8.91-8.90(m, 1H) 8.42(d, 1H) 8.29(s, 1H) 8.26-8.23(m, 1H) 8.17(d, 1H) 8.12-8.10(m, 2H) 8.04-8.00(m, 2H) 7.89(d, 1H) 7.61-7.57(m, 2H) 7.45-7.25(m, 9H)

[0189] **합성예 5: 화합물 31의 합성**

[0190] 하기 반응식 5에 따라 화합물 31을 합성하였다:

[0191] <반응식 5>



[0192]

[0193] 중간체 1-b 2g (5.2 mmol), 중간체 5-a 2.02g (6.2mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.18g (0.16mmol)을 2M NaOH 수용액 20mL 와 THF 20mL 에 넣고 80℃로 10시간 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3회 추출하여 수득한 유기층을 마스네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리정제하여 화합물 31 2.1g (수율 81 %)을 얻었다. 생성된 화합물을 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

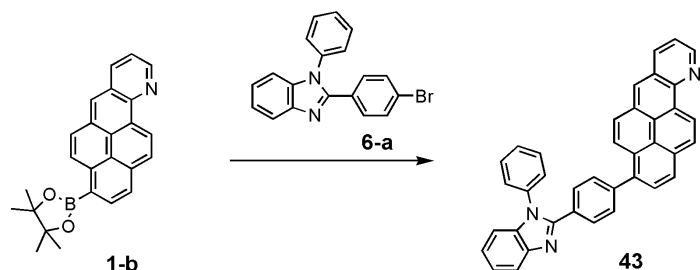
[0194] C₃₆H₂₃N₃ : M+ 498.19

[0195] ¹H NMR (CDCl₃, 400MHz) δ (ppm) 9.07(d, 1H) 8.91(m, 1H) 8.46(m, 4H) 8.42(d, 1H) 8.29(s, 1H) 8.25(m, 1H) 8.16(d, 1H) 8.04-8.00(m, 2H) 7.89(d, 1H) 7.52-7.49(m, 2H) 7.45-7.41(m, 1H) 7.25-7.21(m, 2H) 7.11(m, 4H)

[0196] **합성예 6: 화합물 43의 합성**

[0197] 하기 반응식 6에 따라 화합물 43을 합성하였다:

[0198] <반응식 6>



[0199]

[0200] 중간체 1-b 2g (5.2 mmol), 중간체 6-a 2.16g (6.2mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.18g (0.16mmol)을 2M NaOH 수용액 20mL 와 THF 20mL 에 넣고 80℃로 10시간 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3회 추출하여 수득한 유기층을 마스네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리정제하여 화합물 43 1.84 g (수율 68 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0201] C₃₈H₂₃N₃ : M+ 521.19

[0202] ¹H NMR (CDCl₃, 400MHz) δ (ppm) 9.07(d, 1H) 8.90(m, 1H) 8.42(d, 1H) 8.29(s, 1H) 8.26-8.22(m, 1H) 8.20-8.18(m, 2H) 8.11(d, 1H) 8.03(m, 2H) 7.89(d, 1H) 7.81-7.78(m, 3H) 7.66-7.64(m, 1H) 7.58-7.56(m, 2H) 7.45-7.20(m, 6H)

[0203] **실시예 1**

[0204] 코닝(corning) 15Ω/cm² (1200Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순

수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공증착장치에 이 유리기판을 설치하였다.

[0205] 상기 유리 기판의 ITO 전극(애노드) 상부에 2-TNATA를 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성한 후, 상기 정공 주입층 상부에 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(이하, NPB)을 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0206] 이어서, 상기 정공 수송층 상부에 화합물 14 및 1,4-bis-(2,2-diphenylvinyl)biphenyl (이하, DPVBi)를 중량비 98:2로 공증착하여 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0207] 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 Al를 증착하여 3000Å 두께의 제2전극(캐소드)를 형성함으로써 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0208] 실시예 2

[0209] 발광층 형성시 상기 화합물 14 대신 화합물 30을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0210] 실시예 3

[0211] 발광층 형성시 상기 화합물 14 대신 ADN을 사용하고, DPVBi 대신 화합물 20을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0212] 실시예 4

[0213] 발광층 형성시 상기 화합물 20 대신 화합물 22를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 3과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0214] 실시예 5

[0215] 발광층 형성시 상기 화합물 14 대신 ADN을 사용하고, 전자 수송층 형성시 Alq₃ 대신 화합물 31을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0216] 실시예 6

[0217] 전자 수송층 형성시 상기 화합물 31 대신 화합물 43을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 5와 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0218] 실시예 7

[0219] 발광층 형성시 DPVBi 대신 화합물 20을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0220] 실시예 8

[0221] 발광층 형성시 화합물 14 대신 화합물 30을 이용하고, DPVBi 대신 화합물 33를 이용하고, 전자 수송층 형성시 Alq₃ 대신 화합물 31을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

비교예 1

발광층 형성시 상기 화합물 14 대신 공지의 청색 형광 호스트인 9,10-di-naphthalene-2-yl-anthracene (이하, AND)을 이용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

평가예 1

실시예 1 내지 8과 비교예 1의 유기 발광 소자의 구동 전압, 전류 밀도, 휘도, 발광색, 효율 및 반감 수명(@100 mA/cm²)을 PR650 Spectroscan Source Measurement Unit.(PhotoResearch사 제품임)을 이용하여 평가하였다. 그 결과는 하기 표 1과 같다:

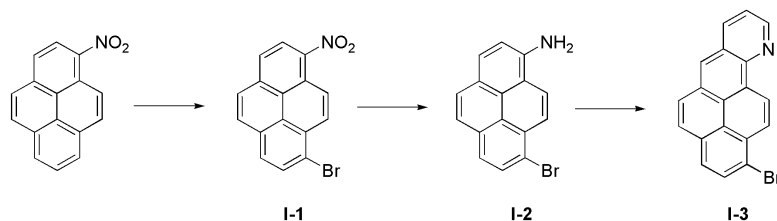
표 1

	EML		ETL	구동전압 (V)	전류 밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	효율 (cd/A)	발광색	반감수명 (hr)
	호스트	도펀트							
실시예 1	화합물 14	DPVBi	Alq ₃	6.27	50	2,155	4.31	청색	181
실시예 2	화합물 30	DPVBi	Alq ₃	6.34	50	2,059	4.12	청색	201
실시예 3	ADN	화합물 20	Alq ₃	6.07	50	2,225	4.45	청색	193
실시예 4	ADN	화합물 22	Alq ₃	6.11	50	2,311	4.62	청색	176
실시예 5	ADN	DPVBi	화합물 31	5.83	50	2,250	4.50	청색	172
실시예 6	ADN	DPVBi	화합물 43	6.18	50	2,380	4.76	청색	198
실시예 7	화합물 14	화합물 20	Alq ₃	5.65	50	2,145	4.29	청색	243
실시예 8	화합물 30	화합물 22	화합물 31	5.48	50	2,405	4.81	청색	227
비교예 1	ADN	DPVBi	Alq ₃	7.35	50	1,490	2.98	청색	120

상기 표 1에 따르면, 실시예 1 내지 8의 유기 발광 소자는 비교예 1의 유기 발광 소자에 비하여, 저구동 전압, 고휘도, 고효율 및 장수명을 가짐을 확인할 수 있다.

합성예 11: 화합물 101의 합성

<반응식 11-1>



중간체 I-1의 합성

1-니트로파이렌 4.94 g (20.0 mmol)을 디클로로메탄 100 ml에 녹인 후, 0 °C에서 브롬 (Br₂) 2.50 ml (20.0 mmol)을 천천히 적가하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 상온에서 12시간 동안 교반한 후, 물 60mL 와 티오황산 나트륨 20 % 수용액 30ml를 첨가하고 디클로로메탄 80 mL로 3회 추출하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하고 디클로로

메탄/헥산 용액으로 재결정하여 중간체 I-1 4.04 g (수율 62 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 HR-MS로 확인하였다.

[0233] $C_{16}H_8BrNO_2$ 계산치: 324.9738 실측치: 324.9740

[0234] 중간체 I-2의 합성

[0235] 중간체 I-1 4.04 g (12.4 mmol)을 에탄올 50ml 에 녹인 후, Fe 2.80 g (50 mmol), 0.1 M HCl 10mL를 첨가하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 95℃ 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 100mL 와 디에틸에테르 100mL로 3회 추출하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카젤관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-2 2.75g (수율 75 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다.

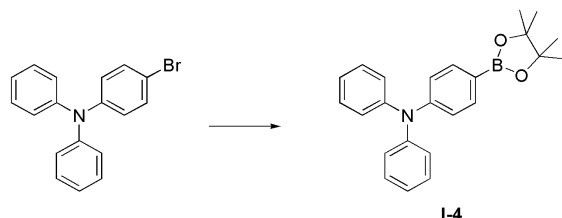
[0236] $C_{16}H_{10}BrN$ 계산치: 294.9997; 실측치 295.0012

[0237] 중간체 I-3의 합성

[0238] 중간체 I-2 2.75 g (9.30 mmol)와 1,3-프로판다이올 353 mg (4.65 mmol)을 메지틸렌(mesitylene) 10ml에 녹인 후, 공기 중에서 $IrCl_3 \cdot H_2O$ 70 mg (0.19 mmol), BINAP(2,2'-비스(디페닐포스포노)-1,1'-비나프틸) 186 mg (0.28 mmol) 및 Na_2CO_3 34 mg (0.30 mmol)의 혼합물을 추가하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 169℃에서 15시간 동안 교반한 다음, 상온으로 식힌 후, 용매를 진공하에서 제거하여 수득한 잔류물을 실리카젤관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-3 2.84 g (수율 92 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 HR-MS로 확인하였다.

[0239] $C_{19}H_{10}BrN$ 계산치: 330.9997 실측치: 331.0002

[0240] <반응식 11-2>



[0241]

[0242] 중간체 I-4의 합성

[0243] 4-브로모트리페닐아민 3.24 g (10.0 mmol), 비스(피나콜레이트)디보론(Bis(pinacolato)diborone) 2.54 g (10.0 mmol), [1,1 -Bis(diphenylphosphino)ferrocene]dichloro palladium (II) (이하, $PdCl_2(dppf)_2$) 0.36 g(0.5 mmol) 및 KOAc 2.94 g (30.0 mmol)을 DMSO(디메틸 술폭시드) 40 ml 에 녹인 후 80 ℃ 에서 6 시간 동안 교반하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3회 추출하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카젤관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-4 2.57 g (수율 89 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0244] $C_{24}H_{26}BNO_2$ 계산치: 371.2057; 실측치 371.2051

[0245] 화합물 101의 합성

[0246] 중간체 I-3 1.66 g (5.0 mmol), 중간체 I-4 1.86 g (5.0 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ 0.29 g(0.25 mmol), 및 K_2CO_3 2.07 g (15.0 mmol) 을 THF/ H_2O (2/1) 혼합용액 30 ml 에 녹인 후 70 ℃ 에서 5 시간 동안 교반하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3회 추출하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 수득한 잔류물을 실리카젤관 크로마토그래피로 분리 정제하여 화

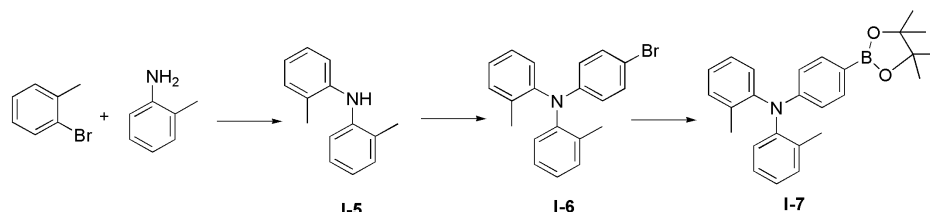
합물 101 1.86 g (수율 75 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 HR-MS 와 NMR을 통해 확인하였다.

[0247] $C_{37}H_{24}N_2$ 계산치: 496.1939; 실측치 $[M+1]$ 497.1922

[0248] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.92-8.90 (m, 1H), 8.70-8.67 (m, 1H), 8.29-8.22 (m, 3H), 8.17-8.14 (m, 2H), 8.03 (d, 1H), 7.68 (d, 1H), 7.53-7.48 (m, 2H), 7.45-7.42 (m, 1H), 7.08-7.04 (m, 4H), 6.98-6.93 (m, 2H), 6.67-6.63 (m, 2H), 6.17-6.13 (m, 4H)

[0249] **합성예 12: 화합물 104의 합성**

[0250] <반응식 12>



[0251]

[0252] 중간체 I-5의 합성

[0253] 1-브로모-2-메틸벤젠(1-Bromo-2-methylbenzene) 3.42 g (20.0 mmol), *o*-톨루이딘(*o*-toluidine) 2.79 g (30.0 mmol), $Pd_2(dba)_3$ 0.37 g(0.4 mmol), $PtBu_3$ 0.08 g (0.4 mmol) 및 $KOtBu$ 2.88 g (30.0 mmol)을 톨루엔 60 ml 에 녹인 후 85 °C 에서 4 시간 동안 교반하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3회 추출하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-5 3.47 g (수율 88 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 HR-MS 를 통해 확인하였다.

[0254] $C_{14}H_{15}N$ 계산치: 197.2204 ; 실측치 197.2253

[0255] 중간체 I-6의 합성

[0256] 중간체 I-5 1.97 g (10.0 mmol), 4-브로모요오도벤젠 2.83 g (10.0 mmol), $Pd_2(dba)_3$ 0.18 g(0.2 mmol), $PtBu_3$ 0.04 g (0.4 mmol) 및 $KOtBu$ 1.44 g (15.0 mmol) 톨루엔 40 ml 에 녹인 후 85 °C 에서 4 시간 동안 교반하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 상온으로 식힌 후, 물 30 mL 와 디에틸에테르 30 mL로 3회 추출하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-6 3.14 g (수율 89 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 HR-MS 를 통해 확인하였다.

[0257] $C_{20}H_{18}BrN$ 계산치: 351.0623; 실측치 351.0653

[0258] 중간체 I-7의 합성

[0259] 4-브로모트리페닐아민 대신 *N*-(4-브로모페닐)-2-메틸-*N*-*o*-톨일벤젠아민을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-4와 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-7을 합성하였다. 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0260] $C_{26}H_{30}BNO_2$ 계산치: 399.2370 ; 실측치 399.2381

[0261] 화합물 104의 합성

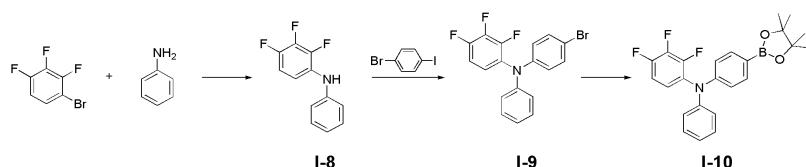
[0262] 중간체 I-4 대신 중간체 I-7을 사용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 101의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 104 2.15g (수율 75%)를 합성하였다. 생성된 화합물을 HR-MS 및 NMR을 통해 확인하였다.

[0263] $C_{39}H_{28}N_2$ 계산치: 524.2252; 실측치 [M+1] 525.2056

[0264] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.92-8.90 (dd, 1H), 8.69-8.67 (d, 1H), 8.29 (s, 1H), 8.27-8.23 (m, 2H), 8.17-8.14 (m, 2H), 8.04-8.02 (d, 1H), 7.69-7.67 (d, 1H), 7.49-7.41 (m, 3H), 7.06-7.03 (m, 2H), 6.98-6.89 (m, 4H), 6.83-6.78 (m, 2H), 6.63-6.60 (m, 2H), 1.82 (s, 6H)

[0265] **합성예 13: 화합물 110의 합성**

[0266] <반응식 13>



[0267]

[0268] 중간체 I-8의 합성

[0269] 1-브로모-2-메틸벤젠 대신 1-브로모-2,3,4-트리플루오로벤젠(1-Bromo-2,3,4-trifluorobenzene)을 사용하고, o-톨루이딘 대신 아닐린을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-5와 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-8 5.2g (65%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0270] $C_{12}H_8F_3N$ 계산치: 223.0609; 실측치 223.0901

[0271] 중간체 I-9의 합성

[0272] 중간체 I-5 대신 중간체 I-8을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-6의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-9 7.1g (81%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0273] $C_{18}H_{11}BrF_3N$ 계산치: 377.0027; 실측치 377.0023

[0274] 중간체 I-10의 합성

[0275] 4-브로모트리페닐아민 대신 중간체 I-9를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-4와 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-10 6.00g (75%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0276] $C_{24}H_{23}BF_3NO_2$ 계산치: 425.1774; 실측치 425.1769

[0277] 화합물 110의 합성

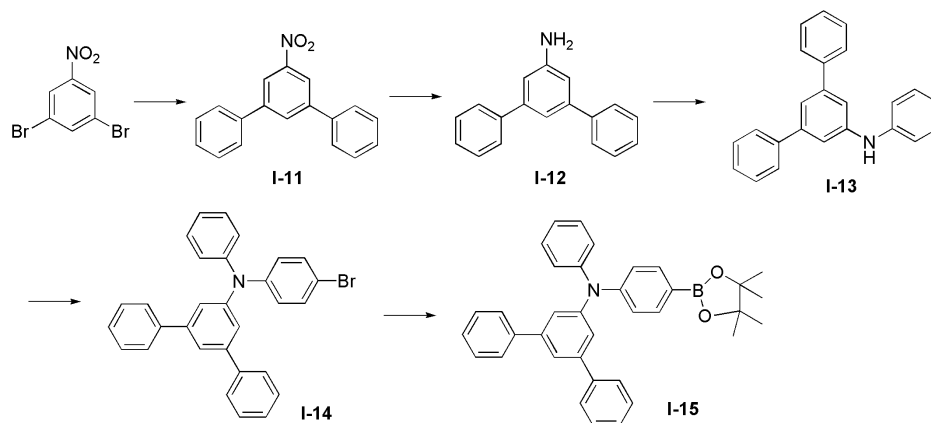
[0278] 중간체 I-4 대신 중간체 I-10을 사용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 101의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 110 1.23g (63%)을 합성하였다. 생성된 화합물을 HR-MS 및 NMR을 통해 확인하였다.

[0279] $C_{37}H_{21}F_3N_2$ 계산치: 550.1657; 실측치 [M+1] 551.5897

[0280] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.92-8.90 (m, 1H), 8.69-8.67 (d, 1H), 8.29 (s, 1H), 8.26-8.22 (m, 2H), 8.17-8.14 (m, 2H), 8.04-8.02 (d, 1H), 7.69-7.67 (d, 1H), 7.54-7.50 (m, 2H), 7.45-7.41 (m, 1H), 7.10-7.05 (m, 2H), 6.81-6.70 (m, 2H), 6.66-6.56 (m, 3H), 6.37-6.34 (m, 2H),

[0281] **합성예 14: 화합물 120의 합성**

[0282] <반응식 14>



[0283]

[0284] 중간체 I-11의 합성

[0285] 1,3-디브로모-5-니트로벤젠(1,3-Dibromo-5-nitrobenzene) 5.62g (20.0 mmol), 페닐보론산(phenylboronic acid) 1.22g (10.0 mmol), PdPPh₃ 0.58g (0.5 mmol) 및 K₂CO₃ 4.14g (30.0 mmol)을 THF/H₂O (2/1) 40 ml에 녹이고 80 °C에서 5시간 동안 교반한 후, 상온으로 식힌 다음, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3회 추출하였다. 이로부터 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발시켜 수득한 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-11 3.57 g (수율 65 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0286] C₁₈H₁₃NO₂ 계산치: 275.0948; 실측치 275.9732

[0287] 중간체 I-12의 합성

[0288] 중간체 I-1 대신 중간체 I-11을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-12 2.64g (83%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0289] C₁₈H₁₅N 계산치: 245.1204; 실측치: 245.5256

[0290] 중간체 I-13의 합성

[0291] 1-브로모-2-메틸벤젠 대신 4-브로모벤젠을 사용하고, *o*-톨루이딘 대신 중간체 I-12를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-5의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-13 2.38g (69%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0292] C₂₄H₁₉N 계산치: 321.1517; 실측치: 321.6245

[0293] 중간체 I-14의 합성

[0294] 중간체 I-5 대신 중간체 I-13을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-6의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-14 2.51g (71%)을 합성하였다. 생성된 화합물을 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0295] C₃₀H₂₂BrN 계산치: 476.0936; 실측치: 476.4158

[0296] 중간체 I-15의 합성

[0297] 4-브로모트리페닐아민 대신 중간체 I-14를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-15 2.29g (83%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0298] $C_{36}H_{34}BNO_2$ 계산치: 523.2683 ; 실측치 523.5641

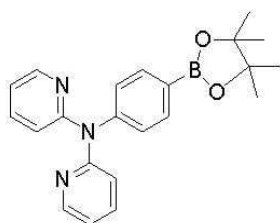
[0299] 화합물 120의 합성

[0300] 중간체 I-14 대신 중간체 I-15를 사용하였다는 점을 제외하고는 화합물 101의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 120 1.65g (69%)을 합성하였다. 생성된 화합물을 HR-MS 및 NMR을 통해 확인하였다.

[0301] $C_{49}H_{32}N_2$ 계산치: 648.2565; 실측치 [M+1] 649.3520

[0302] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.92-8.90 (m, 1H), 8.69-8.67 (d, 1H), 8.39 (s, 1H), 8.27-8.22 (d, 2H), 8.17-8.14 (m, 2H), 8.04-8.02 (d, 1H), 7.69-7.64 (m, 5H), 7.54-7.50 (m, 3H), 7.46-7.40 (m, 7H), 7.10-7.05 (m, 2H), 6.93-6.89 (m, 2H), 6.87-6.86 (d, 2H), 6.68-6.63 (m, 1H), 6.29-6.26 (m, 2H)

[0303] 합성예 15: 화합물 123의 합성



I-16

[0304]

[0305] 중간체 I-16의 합성

[0306] 1-브로모-2,3,4-트리플루오로벤젠 대신 2-프로모피리딘을 사용하고, 아닐린대신 2-아미노피리딘을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-8, I-9 및 I-10의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-16 2.3g (51%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다.

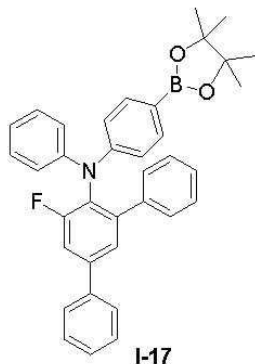
[0307] $C_{22}H_{24}BN_3O_2$ 계산치: 373.1962; 실측치 373.1956

[0308] 화합물 123의 합성

[0309] 중간체 I-4 대신 중간체 I-16을 이용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 101의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 123 1.34g (73%)을 합성하였다. 생성된 화합물을 HR-MS 및 NMR을 통해 확인하였다.

[0310] $C_{35}H_{22}N_4$ 계산치: 498.1844; 실측치 [M+1] 499.1925

[0311] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.92-8.90 (m, 1H), 8.69-8.67 (d, 1H), 8.29 (s, 1H), 8.27-8.21 (m, 4H), 8.17-8.13 (m, 2H), 8.04-8.02 (s, 1H), 7.73-7.67 (m, 3H), 7.55-7.51 (m, 2H), 7.45-7.42 (dd, 1H), 7.37-7.35 (m, 2H), 6.92-6.88 (m, 2H), 6.80-6.76 (m, 2H)

[0312] **합성예 16: 화합물 133의 합성**

[0313]

[0314] **중간체 I-17의 합성**

[0315] 1,3-디브로모-5-니트로벤젠 대신 1,3-디브로모-5-플루오로-6-니트로벤젠을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-11, I-12, I-13, I-14 및 I-15의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 중간체 I-17 2.61g (45%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0316] $C_{38}H_{33}BFNO_2$ 계산치: 541.2588; 실측치 541.3512

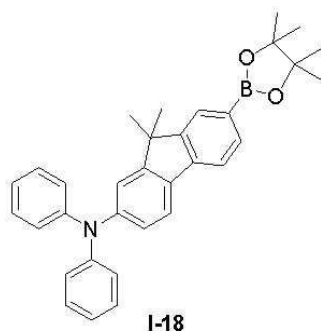
[0317]

[0318] **화합물 133의 합성**

[0319] 중간체 I-4 대신 중간체 I-17을 이용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 101의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 133 1.78g (66%)을 합성하였다. 생성된 화합물을 HR-MS 및 NMR를 통해 확인하였다.

[0320] $C_{49}H_{31}FN_2$ 계산치: 666.2471; 실측치 $[M+1]$ 667.3125

[0321] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.92-8.90 (m, 1H), 8.69-8.67 (d, 1H), 8.29 (s, 1H), 8.27-8.23 (m, 2H), 8.17-8.13 (m, 2H), 8.04-8.02 (d, 1H), 7.72-7.60 (m, 6H), 7.55-7.47 (m, 7H), 7.44-7.40 (m, 2H), 7.13-7.10 (d, 1H), 7.08-7.03 (m, 2H), 7.00-6.96 (m, 2H), 6.63-6.60 (m, 1H), 6.15-6.12 (m, 2H)

[0322] **합성예 17: 화합물 139의 합성**

[0323]

[0324] **중간체 I-18의 합성**

[0325] 1-브로모-2-메틸벤젠 대신 브로모벤젠을 사용하고 o-톨루이딘 대신 아닐린을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 중간체 I-5의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 디페닐아민을 합성하였다. 이어서, 중간체 I-5 대신 디페닐아민을 사용하고 4-브로모요오도벤젠 대신 2-브로모-7-아이오도-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2-bromo-7-iodo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 이용하였다는 점을 제외하고는 상기 중간체 I-6의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 7-브로모-9,9-디메틸-N,N-디페닐-9H-플루오렌-2-아민을 합성하였다. 이 후, 중간체 I-6 대신 7-브로모-9,9-디메틸-N,N-디페닐-9H-플루오렌-2-아민을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-7의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-18 2.59g (46%)을 합성하였다. 생성된 화합물은 HR-MS를 통해

확인하였다.

[0326] $C_{33}H_{34}BNO_2$ 계산치: 487.2683; 실측치: 487.3541

[0327] 화합물 139의 합성

[0328] 중간체 I-4 대신 중간체 I-18을 이용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 101의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 139 1.99g (82%)를 합성하였다. 생성된 화합물을 HR-MS 및 NMR을 통해 확인하였다.

[0329] $C_{46}H_{32}N_2$ 계산치: 612.2565; 실측치 [M+1] 613.3546

[0330] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.92-8.90 (m, 1H), 8.70-8.67 (m, 1H), 8.29 (s, 1H), 8.26-8.22 (m, 2H), 8.16-8.14 (m, 1H), 7.99-7.92 (dd, 2H), 7.80-7.76 (m, 2H), 7.68-7.66 (m, 2H), 7.54-7.52 (d, 2H), 7.50-7.48 (d, 1H), 7.45-7.41 (m, 1H), 7.08-7.04 (m, 4H), 6.67-6.63 (m, 3H), 6.40-6.38 (m, 1H), 6.16-6.13 (m, 3H), 1.82 (s, 6H)

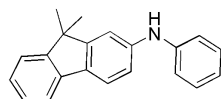
[0331] 합성예 18: 화합물 149의 합성

[0332] 중간체 I-4 대신 페닐보론산을 이용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 101의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 149 1.28g (74%)를 합성하였다. 생성된 화합물을 HR-MS 및 NMR을 통해 확인하였다.

[0333] $C_{25}H_{15}N$ 계산치: 329.1204; 실측치 [M+1] 330.2132

[0334] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.92-8.90(dd, 1H), 8.69-8.67 (d, 1H), 8.29 (s, 1H), 8.26-8.23 (m, 2H), 8.16-8.14 (d, 1H), 8.06-8.02 (m, 3H), 7.99-7.97 (d, 1H), 7.68-7.66 (d, 1H), 7.51-7.48 (m, 2H), 7.45-7.38 (m, 2H)

[0335] 합성예 19: 화합물 154의 합성



I-19

[0336]

[0337] 중간체 I-19의 합성

[0338] 1-브로모-2-메틸벤젠 대신 2-브로모플루오렌을 사용하고, o-톨루이딘 대신 아닐린을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-5의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-19 4.56g (72%)를 합성하였다. 생성된 화합물을 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0339] $C_{21}H_{18}N$ 계산치: 284.1439; 실측치: 284.1398

[0340] 화합물 154의 합성

[0341] 중간체 I-4 대신 중간체 I-19를 이용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 101의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 154 1.05g (53%)를 합성하였다. 생성된 화합물을 HR-MS 및 NMR을 통해 확인하였다.

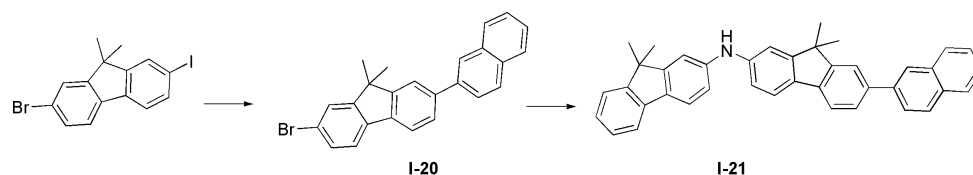
[0342] $C_{40}H_{28}N_2$ 계산치: 536.2252; 실측치 [M+1] 537.2412

[0343] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.92-8.90 (m, 1H), 8.61-8.59 (d, 1H), 8.27-8.23 (m, 2H), 8.17-8.08 (dd, 2H), 7.96-7.93 (d, 1H), 7.78-7.72 (m, 2H), 7.51-7.48 (d, 1H), 7.44-7.41 (m, 2H), 7.35-7.30 (m, 1H), 7.14-7.11 (m, 2H), 7.06-7.01 (m, 2H), 6.65-6.61 (m, 2H), 6.41-6.40 (d, 1H), 6.17-6.13 (m, 2H), 1.62

(s, 6H)

[0344] 합성예 20: 화합물 157의 합성

[0345] <반응식 20>



[0346]

[0347] 중간체 I-20의 합성

[0348] 1,3-디브로모-5-니트로벤젠 대신 2-브로모-7-아이오도-9,9-디메틸-9H-플루오렌을 사용하고, 페닐보론산 대신 2-나프틸보론산을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-11의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-20 3.56g (85%)을 합성하였다. 생성된 화합물을 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0349] $C_{25}H_{19}Br$ 계산치: 398.0670 ; 실측치: 398.0750

[0350] 중간체 I-21의 합성

[0351] 1-브로모-2-메틸벤젠 대신 중간체 I-20을 사용하고, o-톨루이딘 대신 2-아미노플루오렌을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 중간체 I-5의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-21 3.81g (81%)을 합성하였다. 생성된 화합물을 HR-MS를 통해 확인하였다.

[0352] $C_{40}H_{32}N$ 계산치: 527.2613; 실측치: 527.3145

[0353] 화합물 157의 합성

[0354] 중간체 I-4 대신 중간체 I-21을 이용하였다는 점을 제외하고는, 화합물 101의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 157 1.71g (72%)을 합성하였다. 생성된 화합물을 HR-MS 및 NMR을 통해 확인하였다.

[0355] $C_{59}H_{42}N_2$ 계산치: 778.3348; 실측치 $[M+1]$ 779.4982

[0356] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.92-8.90 (m, 1H), 8.61-8.59 (d, 1H), 8.27-8.23 (m, 2H), 8.18-8.08 (dd, 2H), 8.04 (s, 1H), 7.99-7.97 (d, 1H), 7.94-7.84 (m, 3H), 7.78-7.74 (m, 2H), 7.72-7.41 (m, 10H), 7.36-7.30 (m, 1H), 7.14-7.08 (m, 2H), 6.70-6.66 (m, 2H), 6.45-6.42 (m, 2H), 1.64-1.62 (d, 12H)

[0357] 실시예 11

[0358] 코닝(corning) $15\Omega/cm^2$ (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 진공증착장치에 이 유리기판을 설치하였다.

[0359] 상기 유리 기판의 ITO 전극(애노드) 상부에 2-TNATA를 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성한 후, 상기 정공 주입층 상부에 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(이하, NPB)을 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0360] 이어서, 상기 정공 수송층 상부에 ADN 및 화합물 101을 중량비 98:2로 공증착하여 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0361] 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 Al를 증착하여 3000Å 두께의 제2전극(캐소드)를 형성함으로써 유기 발광 소자를 제조하였다.

실시예 12

발광층 형성시 상기 화합물 101 대신 화합물 104을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

실시예 13

발광층 형성시 상기 화합물 101 대신 화합물 110을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

실시예 14

발광층 형성시 상기 화합물 101 대신 화합물 120을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

실시예 15

발광층 형성시 상기 화합물 101 대신 화합물 123을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

실시예 16

발광층 형성시 상기 화합물 101 대신 화합물 133을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

실시예 17

발광층 형성시 상기 화합물 101 대신 화합물 139를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

실시예 18

발광층 형성시 상기 화합물 101 대신 화합물 149를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

실시예 19

발광층 형성시 상기 화합물 101 대신 화합물 154를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

실시예 20

발광층 형성시 상기 화합물 101 대신 화합물 157을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

비교예 2

발광층 형성시 상기 화합물 101 대신 DPVBi를 이용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

평가예 2

평가예 1과 동일한 방법을 이용하여, 실시예 11 내지 20과 비교예 2의 유기 발광 소자의 구동 전압, 전류 밀도, 휘도, 발광색, 효율 및 반감 수명(@100mA/cm²)을 PR650 Spectroscan Source Measurement Unit.(PhotoResearch사 제품임)을 평가하여 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다:

표 2

	호스트	도펀트	구동전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	효율 (cd/A)	발광색	반감수명 (hr)
실시예 11	ADN	화합물 101	6.25	50	2,975	5.95	청색	255
실시예 12	ADN	화합물 104	6.49	50	2,920	5.84	청색	185
실시예 13	ADN	화합물 110	6.51	50	2,975	5.95	청색	189
실시예 14	ADN	화합물 120	6.53	50	2,875	5.75	청색	214
실시예 15	ADN	화합물 123	6.38	50	2,572	5.14	청색	193
실시예 16	ADN	화합물 133	6.31	50	2,991	5.98	청색	258
실시예 17	ADN	화합물 139	6.49	50	2,765	5.53	청색	227
실시예 18	ADN	화합물 149	6.47	50	2,847	5.69	청색	231
실시예 19	ADN	화합물 154	6.51	50	2,751	5.50	청색	231
실시예 20	ADN	화합물 157	6.58	50	2,762	5.52	청색	229
비교예 2	ADN	DPVBi	7.85	50	1,560	3.12	청색	113

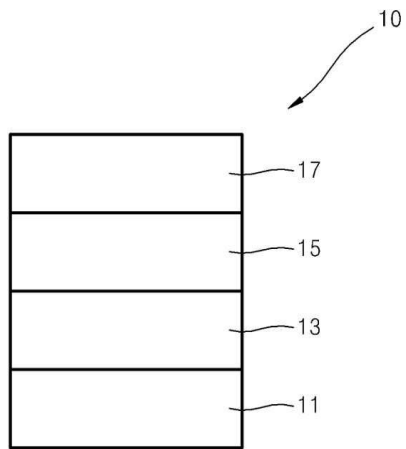
상기 표 2에 따르면, 실시예 11 내지 20의 유기 발광 소자는 비교예 2의 유기 발광 소자에 비하여, 저구동 전압, 고휘도, 고효율 및 장수명을 가짐을 확인할 수 있다.

부호의 설명

- 10: 유기 발광 소자
- 11: 기판
- 13: 제1전극
- 15: 제1층
- 17: 제2전극

도면

도면1



专利名称(译)	标题：缩合环化合物和含有它的有机发光器件		
公开(公告)号	KR1020120139074A	公开(公告)日	2012-12-27
申请号	KR1020110058634	申请日	2011-06-16
[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 LEE JONG HYUK 이종혁 LEE BO RA 이보라 HAN SANG HYUN 한상현 JUNG HYE JIN 정혜진 KIM YOUNG KOOK 김영국 LIM JIN O 임진오 HWANG SEOK HWAN 황석환		
发明人	이선영 광윤현 박범우 이종혁 이보라 한상현 정혜진 김영국 임진오 황석환		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	C07D401/14 C07D417/04 C07D403/04 C07D403/10 C07D401/10 C07D405/04 C07D487/04 C07D221/18 H01L51/0072 H01L51/0067		
其他公开文献	KR101511168B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

提供了熔融环化合物和包括其的有机发光器件。

