



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2010-0137188
(43) 공개일자 2010년12월30일

(51) Int. Cl.

C09K 11/06 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2009-0055483

(22) 출원일자 2009년06월22일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

다우어드밴스드디스플레이머티리얼 유한회사

충청남도 천안시 서북구 백석동 735-2

(72) 발명자

김치식

서울특별시 성동구 성수1가 14-60 3층

조영준

서울특별시 성북구 돈암동 15-1 삼성아파트
101-1111

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

박창희, 권오식

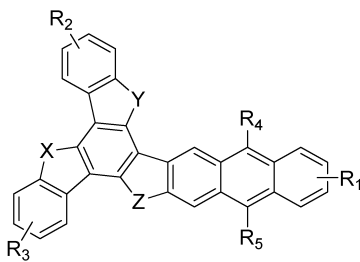
전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 채용하고 있는 유기 전계 발광 소자

(57) 요약

본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 포함하고 있는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 상세하게는 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 하기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서, X, Y, Z 및 R₁ 내지 R₅는 각각 발명의 상세한 설명에서 정의한 바와 같다.

본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 발광효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 구동수명이 매우 우수한 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

(72) 발명자

권혁주

서울특별시 동대문구 장안동 삼성래미안2차
224-2001

김봉욱

서울특별시 강남구 삼성동 4번지 한솔아파트
101-1108

김성민

서울특별시 양천구 목1동 917 목동파라곤 109동
902호

윤승수

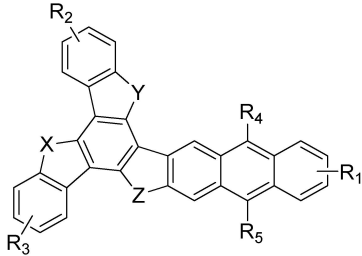
서울특별시 강남구 수서동 삼익아파트 405-1409

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 발광 화합물.

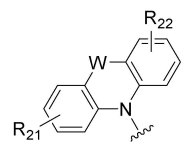
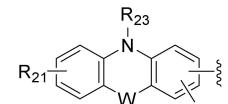
[화학식 1]



[상기 화학식 1에서,

R₁ 내지 R₅는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이 하나이상 융합된 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된(C3-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된(C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬, 시아노, NR₁₁R₁₂, BR₁₃R₁₄, PR₁₅R₁₆, P(=O)R₁₇R₁₈[R₁₁ 내지 R₁₈은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된(C3-C30)헤테로아릴이다.], R^aR^bR^cSi-[R^a, R^b 및 R^c는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬 또는 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴이다.], 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, R^dY-[Y는 S 또는 O이고, R^d는 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이다.] 치

환 또는 비치환된(C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된(C2-C30)알키닐,



이고, 단 R₄과 R₅는 동시에 수소 또는 중수소는 아니고;

W, X, Y 및 Z는 서로 독립적으로 -(CR₃₁R₃₂)_m-, -(R₃₁)C=C(R₃₂)-, -N(R₃₃)-, -S-, -O-, -Si(R₃₄)(R₃₅)-, -P(R₃₆)-, -P(=O)(R₃₇)-, -C(=O)- 또는 -B(R₃₈)-이고;

R₂₁ 내지 R₂₃ 및 R₃₁ 내지 R₃₈은 상기 R₁ 내지 R₃에서의 정의와 동일하며, 상기 R₃₁ 내지 R₃₈은 각각 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C30)알킬렌 또는 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며;

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

m은 0, 1 또는 2의 정수이다.]

청구항 2

제 1항에 있어서,

상기 R₁ 내지 R₃는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된(C3-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된(C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비

치환된 아다만틸, $NR_{11}R_{12}$ [R_{11} 및 R_{12} 은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된(C3-C30)헤테로아릴이다.] 또는 $R^aR^bR^cSi$ - [R^a , R^b 및 R^c 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이다.]이고; R_4 및 R_5 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이 하나이상 융합된 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된(C3-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된(C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬인 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물.

청구항 3

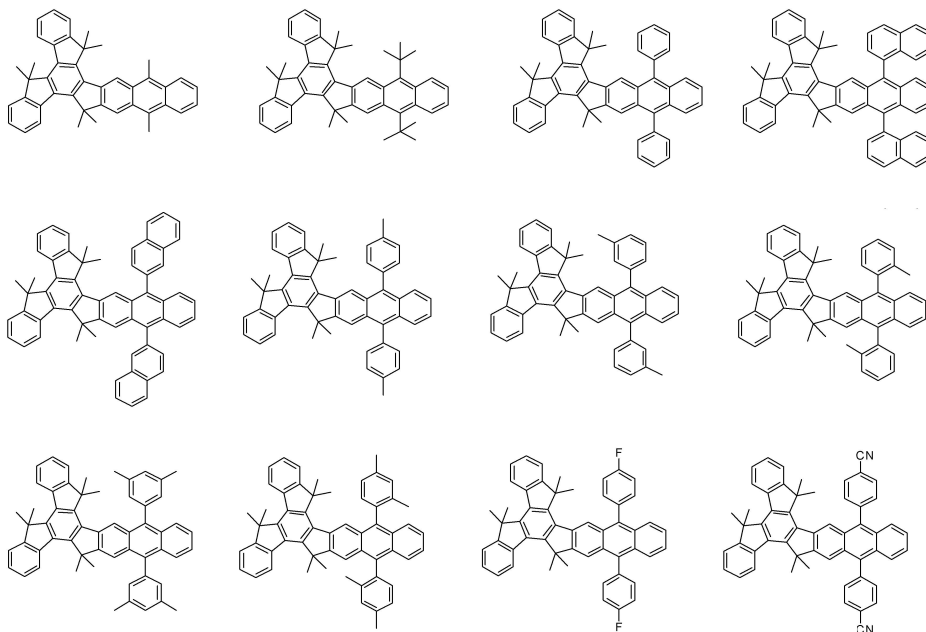
제 1항 또는 제 2항에 있어서,

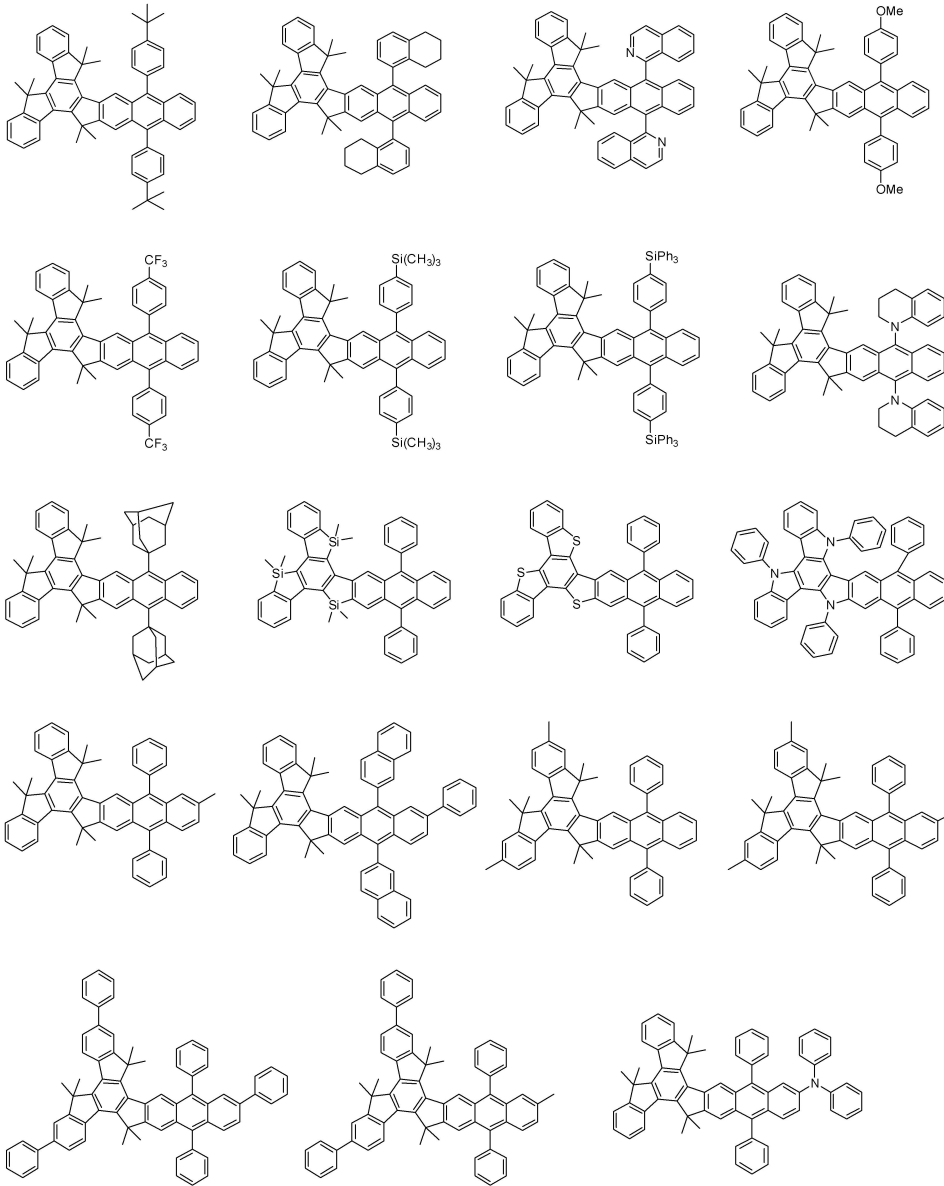
상기 R_1 내지 R_5 및 R_{11} 내지 R_{18} 의 치환기는 중수소, 할로젠, 할로젠이 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C6-C30)아릴이 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C3-C30)시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 (C6-C30)시클로알킬, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 아다만틸, (C7-C30)바이시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, 시아노, 카바졸릴, $NR_{41}R_{42}$, $BR_{43}R_{44}$, $PR_{45}R_{46}$, $P(=O)R_{47}R_{48}$ [R_{41} 내지 R_{48} 은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴이다.], (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴, (C1-C30)알킬옥시, (C1-C30)알킬티오, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C1-C30)알콕시카보닐, (C1-C30)알킬카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, (C6-C30)아릴옥시카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐옥시, (C1-C30)알킬카보닐옥시, (C6-C30)아릴카보닐옥시, (C6-C30)아릴옥시카보닐옥시, 카르복실, 나이트로 또는 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상으로 더 치환되거나, 서로 인접한 치환체가 연결되어 고리를 형성하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물.

청구항 4

제 3항에 있어서,

하기 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물.





청구항 5

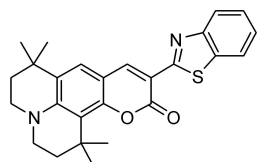
제 1항 내지 제 4항에서 선택되는 어느 한 항에 따른 유기 발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 6

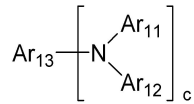
제 5항에 있어서,

상기 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 게재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어져 있으며, 상기 유기물층은 상기 유기 발광 화합물 하나 이상과 하기 화학식 2 또는 화학식 3의 화합물에서 선택되는 도판트 하나 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

[화학식 2]

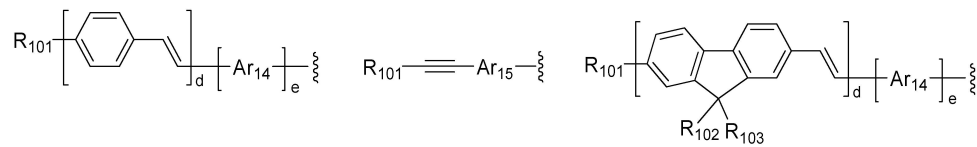


[화학식 3]

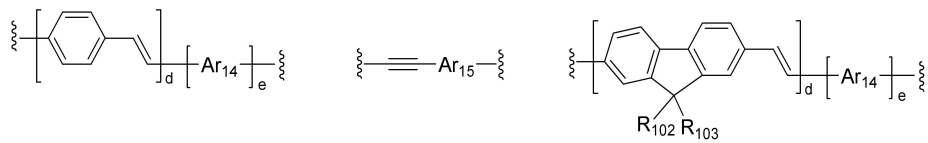


[상기 화학식 3에서, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된(C4-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된(C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬이고, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C30)알킬렌 또는 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하고;

c가 1인 경우 Ar₁₃은 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된(C4-C30)헤테로아릴 또는 하기 구조에서 선택되는 치환기이고;



c가 2인 경우 Ar₁₃는 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된(C4-C30)헤테로아릴렌 또는 하기 구조에서 선택되는 치환기이고;



Ar₁₄ 및 Ar₁₅은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴렌 또는 치환 또는 비치환된(C4-C30)헤테로아릴렌이고;

R₁₀₁ 내지 R₁₀₃는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬 또는 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴이고;

d는 1 내지 4의 정수이며, e는 0 또는 1의 정수이다.]

청구항 7

제 6항에 있어서,

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

청구항 8

제 6항에 있어서,

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

청구항 9

제 6항에 있어서,

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

청구항 10

제 6항에 있어서,

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

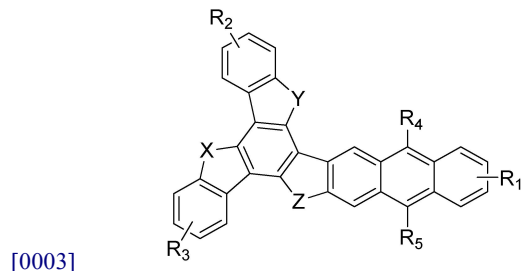
명세서

발명의 상세한 설명

기술분야

[0001] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 포함하고 있는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 상세하게는 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 하기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다.

[0002] [화학식 1]



배경기술

[0004] 표시 소자 중, 전기 발광 소자(electroluminescence device: EL device)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있으며, 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사에서는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 다이아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

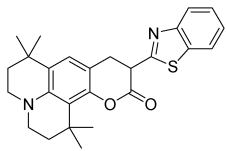
[0005] 유기 EL 소자는 전자 주입 전극(음극) 과 정공 주입 전극(양극) 사이에 형성된 유기막에 전하를 주입하면 전자와 정공이 쌍을 이룬 후 소멸하면서 빛을 내는 소자이다. 플라스틱 같은 휘 수 있는(flexible) 투명 기판 위에도 소자를 형성할 수 있을 뿐 아니라, 플라즈마 디스플레이 패널(Plasma Display Panel)이나 무기 EL 디스플레이에 비해 낮은 전압에서 (10V이하) 구동이 가능하고, 또한 전력 소모가 비교적 적으며, 색감이 뛰어나다는 장점이 있다. 또한 유기 EL 소자는 녹색, 청색, 적색의 3가지 색을 나타낼 수가 있어 차세대 풍부한 색 디스플레이 소자로 많은 사람들의 많은 관심의 대상이 되고 있다.

[0006] 유기 EL 소자에서 발광 효율, 수명 등의 성능을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료로서, 이러한 발광 재료에 요구되는 몇 가지 특성으로는 고체상태에서 발광 양자 수율이 커야하고, 전자와 정공의 이동도가 높아야 하며, 진공 증착시 쉽게 분해되지 않아야 하고, 균일한 박막을 형성, 안정해야한다.

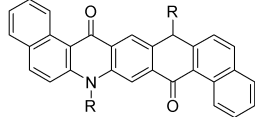
[0007] 유기EL소자는 보통 anode/HIL/HTL/EML/ETL/EIL/cathode로 구성되는데 발광층(EML)을 어떻게 형성하느냐에 따라 청색, 녹색, 적색의 유기 전기 발광 소자를 각각 구현할 수가 있다.

[0008] 발광재료는 기능적인 측면에서 호스트 재료와 도판트 재료로 구분될 수 있는데 일반적으로 EL 특성이 가장 우수한 소자 구조로는 호스트에 도판트를 도핑하여 발광층을 만드는 것으로 알려져 있다. 최근에 고효율, 장수명 유기 EL 소자의 개발이 시급한 과제로 대두되고 있으며, 특히 중대형 OLED 패널에서 요구하고 있는 EL 특성 수준을 고려해 볼 때 기존의 발광재료에 비해 매우 우수한 재료의 개발이 시급한 실정이다.

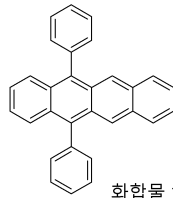
[0009] 한편, 녹색 형광 재료로는 Alq를 호스트로 하여, 도판트로는 쿠마린 유도체(화합물 d, C545T), 퀴나크리돈 유도체(화합물 e), DPT(화합물 f) 등을 수 내지 십수 % 정도로 도핑을 하는 시스템이 개발되어 널리 쓰이고 있다. 그러나, 이들 종래의 발광재료는 초기 발광효율의 경우, 상용화 가능한 수준의 성능을 보이나, 초기 효율 저하가 두드러지며 수명 측면에서 상당한 문제점을 보이고 있어, 대화면의 고성능 패널에서는 채택하기가 힘든 한계를 보이고 있다.



화합물 d



화합물 e



화합물 f

[0010]

[0011]

또한, OLED 소자에서의 수명 측면에서도 결코 만족할만한 수준이 되질 못하여 더욱 안정되고, 더욱 성능이 뛰어난 호스트 재료의 개발이 요구되고 있다.

발명의 내용

해결 하고자하는 과제

[0012]

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

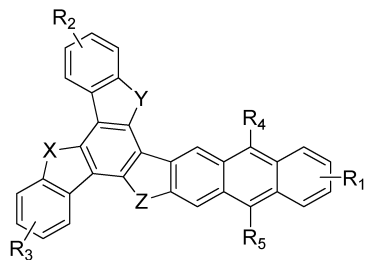
과제 해결수단

[0013]

본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 발광 효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 우수한 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

[0014]

[화학식 1]



[0015]

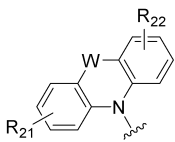
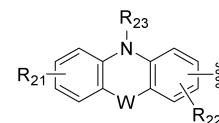
[0016]

[상기 화학식 1에서,

[0017]

R₁ 내지 R₅는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이 하나이상 융합된 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된(C3-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된(C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬, 시아노, NR₁₁R₁₂, BR₁₃R₁₄, PR₁₅R₁₆, P(=O)R₁₇R₁₈[R₁₁ 내지 R₁₈은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된(C3-C30)헤테로아릴이다.], R^aR^bcSi-[R^a, R^b 및 R^c는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬 또는 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴이다.], 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, R^dY-[Y는 S 또는 O이고, R^d는 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이다.] 치

환 또는 비치환된(C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된(C2-C30)알키닐,



이고, 단 R₄과 R₅는 동시에 수소 또는 중수소는 아니고;

- [0018] W, X, Y 및 Z는 서로 독립적으로 $-(CR_{31}R_{32})_m-$, $-(R_{31})C=C(R_{32})-$, $-N(R_{33})-$, $-S-$, $-O-$, $-Si(R_{34})(R_{35})-$, $-P(R_{36})-$, $-P(=O)(R_{37})-$, $-C(=O)-$ 또는 $-B(R_{38})-$ 이고;
- [0019] R_{21} 내지 R_{23} 및 R_{31} 내지 R_{38} 은 상기 R_1 내지 R_3 에서의 정의와 동일하며, 상기 R_{31} 내지 R_{38} 은 각각 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C30)알킬렌 또는 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며;
- [0020] 상기 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;
- [0021] m은 0, 1 또는 2의 정수이다.]
- [0022] 본 발명에 기재된 “알킬”, “알콕시” 및 그 외 “알킬” 부분을 포함하는 치환체는 직쇄 또는 분쇄 형태를 모두 포함한다. 본 발명에 기재된 “시클로알킬”은 단일 고리계 뿐만 아니라 아다만틸 또는 바이시클로알킬과 같은 여러 고리계 탄화수소도 포함한다.
- [0023] 본 발명에 기재된 「아릴」은 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로, 각 고리에 적절하게는 4 내지 7개, 바람직하게는 5 또는 6개의 고리원자를 포함하는 단일 또는 융합고리계를 포함하며, 다수개의 아릴이 단일결합으로 연결되어 있는 형태까지 포함한다. 구체적인 예로 페닐, 나프틸, 비페닐, 안트릴, 인데닐(indenyl), 플루오레닐, 페난트릴, 트리페닐레닐, 피렌일, 페릴렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다. 상기 나프틸은 1-나프틸 및 2-나프틸을 포함하며, 안트릴은 1-안트릴, 2-안트릴 및 9-안트릴을 포함하며, 플루오레닐은 1-플루오레닐, 2-플루오레닐, 3-플루오레닐, 4-플루오레닐 및 9-플루오레닐을 모두 포함한다. 본 발명에 기재된 「헤테로아릴」은 방향족 고리 골격 원자로서 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택되는 1 내지 4개의 헤테로원자를 포함하고, 나머지 방향족 고리 골격 원자가 탄소인 아릴 그룹을 의미하는 것으로, 5 내지 6원 단환 헤테로아릴, 및 하나 이상의 벤젠 환과 축합된 다환식 헤테로아릴이며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본 발명에서의 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴이 단일결합으로 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아릴기는 고리내 헤테로원자가 산화되거나 사원화되어, 예를 들어 N-옥사이드 또는 4차 염을 형성하는 2가 아릴 그룹을 포함한다. 구체적인 예로 퓨릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 퓨라진일, 피리딘일, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단환 헤테로아릴, 벤조퓨란일, 벤조티오펜일, 이소벤조퓨란일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴 등의 다환식 헤테로아릴 및 이들의 상응하는 N-옥사이드(예를 들어, 피리딘 N-옥사이드, 퀴놀릴 N-옥사이드), 이들의 4차 염 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다.
- [0024] 또한, 본 발명에 기재되어 있는 “(C1-C30)알킬, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬옥시, (C1-C30)알킬티오” 등의 알킬은 탄소수 1 내지 20개로 제한될 수 있고, 탄소수 1 내지 10개로 제한될 수 있다. “(C6-C30)아릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오” 등의 아릴은 탄소수 6 내지 20개로 제한될 수 있고, 탄소수 6 내지 12개로 제한될 수 있다. “(C3-C30)헤테로아릴”의 헤테로아릴은 탄소수 4 내지 20개로 제한될 수 있고, 탄소수 4 내지 12개로 제한될 수 있다. “(C3-C30)시클로알킬”의 시클로알킬은 탄소수 3 내지 20개로 제한될 수 있고, 탄소수 3 내지 7개로 제한될 수 있다. “(C2-C30)알케닐 또는 알키닐”의 알케닐 또는 알키닐은 탄소수 2 내지 20개로 제한될 수 있고, 탄소수 2 내지 10개로 제한될 수 있다.
- [0025] 또한 본 발명에 기재되어 있는 “치환 또는 비치환”이라는 기재는 상기 R_1 내지 R_5 및 R_{11} 내지 R_{18} 의 치환기가 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 할로젠이 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C6-C30)아릴이 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C3-C30)시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 (C6-C30)시클로알킬, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 아다만틸, (C7-C30)바이시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, 시아노, 카바졸릴, $NR_{41}R_{42}$, $BR_{43}R_{44}$, $PR_{45}R_{46}$, $P(=O)R_{47}R_{48}$ [R_{41} 내지 R_{48} 은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된

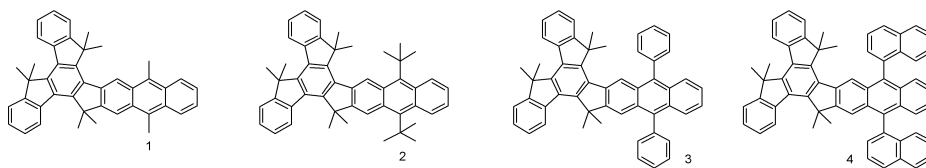
(C3-C30)헤테로아릴이다.], (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴, (C1-C30)알킬옥시, (C1-C30)알킬티오, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C1-C30)알콕시카보닐, (C1-C30)알킬카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, (C6-C30)아릴옥시카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐옥시, (C1-C30)알킬카보닐옥시, (C6-C30)아릴카보닐옥시, (C6-C30)아릴옥시카보닐옥시, 카르복실, 나이트로 또는 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상으로 더 치환되거나, 서로 인접한 치환체가 연결되어 고리를 형성하는 것을 의미한다.

[0026] 상기 R₁ 내지 R₃는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된(C3-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된(C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 아다만틸, NR₁₁R₁₂[R₁₁ 및 R₁₂은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된(C3-C30)헤테로아릴이다.] 또는 R^aR^bR^cSi-[R^a, R^b 및 R^c는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이다.]이고; R₄ 및 R₅는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이 하나이상 융합된 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된(C3-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된(C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬로부터 선택된다.

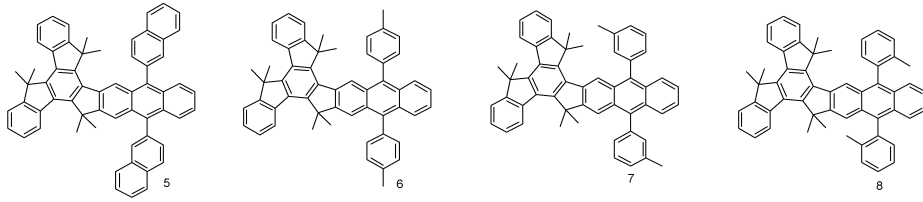
[0027] 상기 R₁ 내지 R₃는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 에틸헥실, 헵틸, 옥틸 등의 알킬, 페닐, 나프틸, 플루오레닐, 바이페닐, 페난트릴, 터페닐, 피레닐, 퍼틸레닐, 스피로바이플루오레닐, 플루오란테닐, 크리세닐, 트리페닐레닐 등의 아릴, 디벤조티오펜틸, 디벤조퓨릴, 카바졸릴, 피리딜, 퓨릴, 티에닐, 퀴놀릴, 트리아지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 퀴놀살리닐, 페난트롤리닐 등의 헤테로아릴, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등의 시클로알킬, 아다만틸, 모노 또는 디-페닐아미노, 모노 또는 디-메틸아미노, 모노 또는 디-피리딜아미노 등의 아미노, 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 디메틸에틸실릴, 트리부틸실릴 등의 트리아킬실릴, 디메틸페닐실릴 등의 디알킬아릴실릴 또는 트리페닐실릴, 트리나프틸실릴 등의 트리아릴실릴로부터 선택되어지나, 이에 한정되는 것은 아니며, 상기 화학식 1에서와 같이 치환되거나 비치환될 수 있다.

[0028] 상기 R₄ 및 R₅는 서로 독립적으로 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 에틸헥실, 헵틸, 옥틸 등의 알킬, 페닐, 나프틸, 플루오레닐, 바이페닐, 페난트릴, 터페닐, 피레닐, 퍼틸레닐, 스피로바이플루오레닐, 플루오란테닐, 크리세닐, 트리페닐레닐 등의 아릴, 1,2-디하이드로아세나프틸 등의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 아릴, 디벤조티오펜틸, 디벤조퓨릴, 카바졸릴, 피리딜, 퓨릴, 티에닐, 퀴놀릴, 트리아지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 퀴놀살리닐, 페난트롤리닐 등의 헤테로아릴, 모폴리닐, 티오모폴리닐, 모폴리노, 티오모폴리노, 피페리디닐, 피페리디노 등의 헤테로시클로알킬, 벤조피페리디노, 벤조피롤리디노 등의 방향족고리가 하나 이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸 등의 시클로알킬, 벤조시클로헥실 등의 방향족고리가 하나이상 융합된 시클로알킬, 아다만틸 또는 바이시클로[2.2.1]헵틸 등의 바이시클로알킬로부터 선택되어지나, 이에 한정되는 것은 아니며, 상기 화학식 1에서와 같이 치환되거나 비치환될 수 있다.

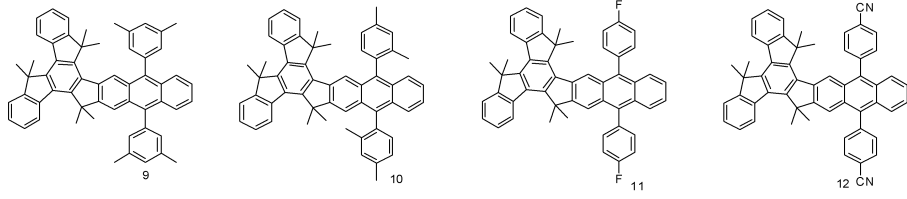
[0029] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 하기 화합물이 본 발명을 한정하는 것은 아니다.



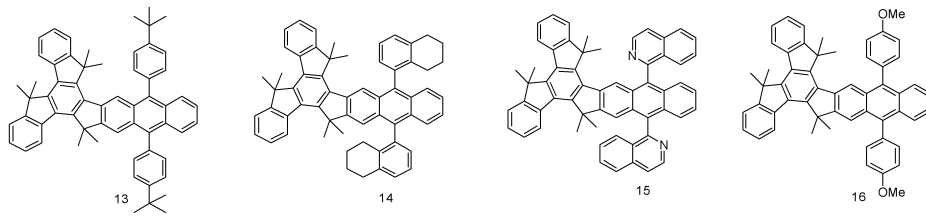
[0030]



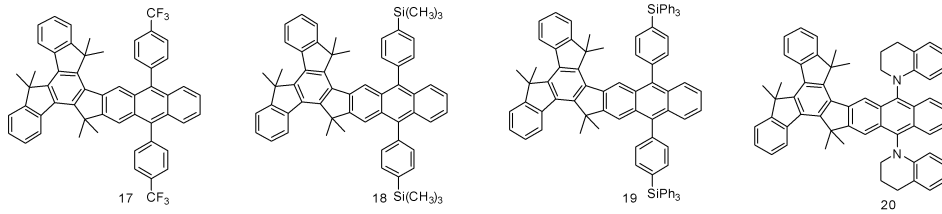
[0031]



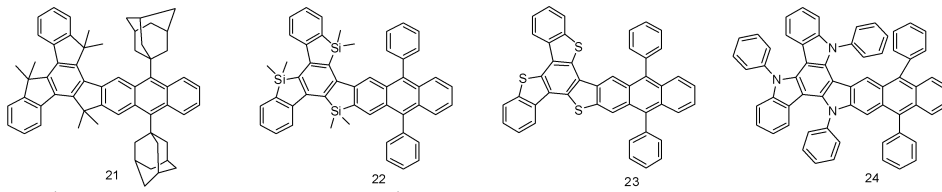
[0032]



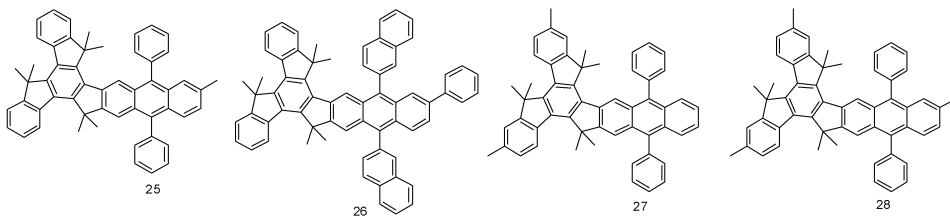
[0033]



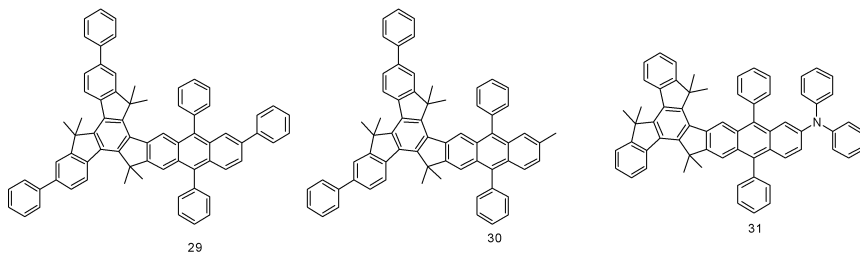
[0034]



[0035]



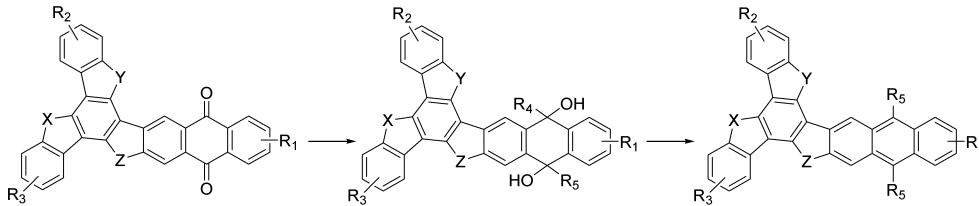
[0036]



[0037]

[0038] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 하기 반응식 1에 나타난 바와 같이, 제조될 수 있다.

[0039] [반응식 1]



[0040]

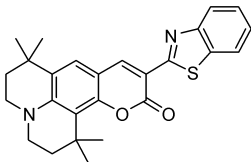
[0041] [상기 반응식 1에서 X, Y, Z 및 R₁ 내지 R₅는 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하다.]

[0042]

또한, 본 발명은 유기 전계 발광 소자를 제공하며, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어진 유기 전계 발광 소자에 있어서, 상기 유기물층은 상기 화학식 1 또는 2의 유기 발광 화합물을 하나 이상 포함하는 것을 특징으로 한다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1의 유기 발광 화합물 하나 이상을 호스트로 하여 하나 이상의 도판트를 포함하는 것을 특징으로 한다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 도판트는 특별히 제한되지는 않으나, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 도판트는 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 화합물로부터 선택되는 것이 바람직하다.

[0043]

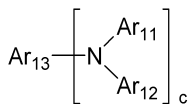
[화학식 2]



[0044]

[0045]

[화학식 3]



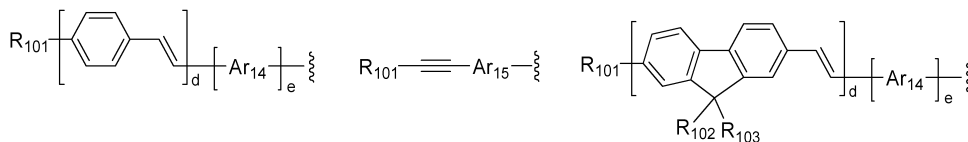
[0046]

[0047]

[상기 화학식 3에서, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된(C4-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된(C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬이고, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C30)알킬렌 또는 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하고;

[0048]

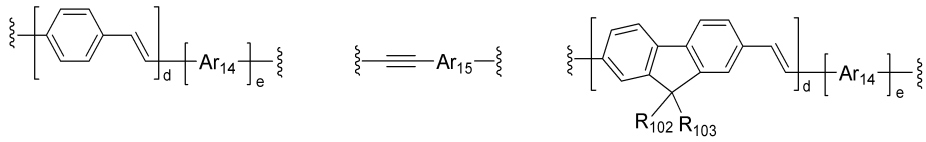
c가 1인 경우 Ar₁₃은 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된(C4-C30)헤테로아릴 또는 하기 구조에서 선택되는 치환기이고;



[0049]

[0050]

c가 2인 경우 Ar₁₃는 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된(C4-C30)헤테로아릴렌 또는 하기 구조에서 선택되는 치환기이고;



[0051]

[0052]

Ar₁₄ 및 Ar₁₅은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴렌 또는 치환 또는 비치환된(C4-C30)헤테로아릴렌이고;

[0053]

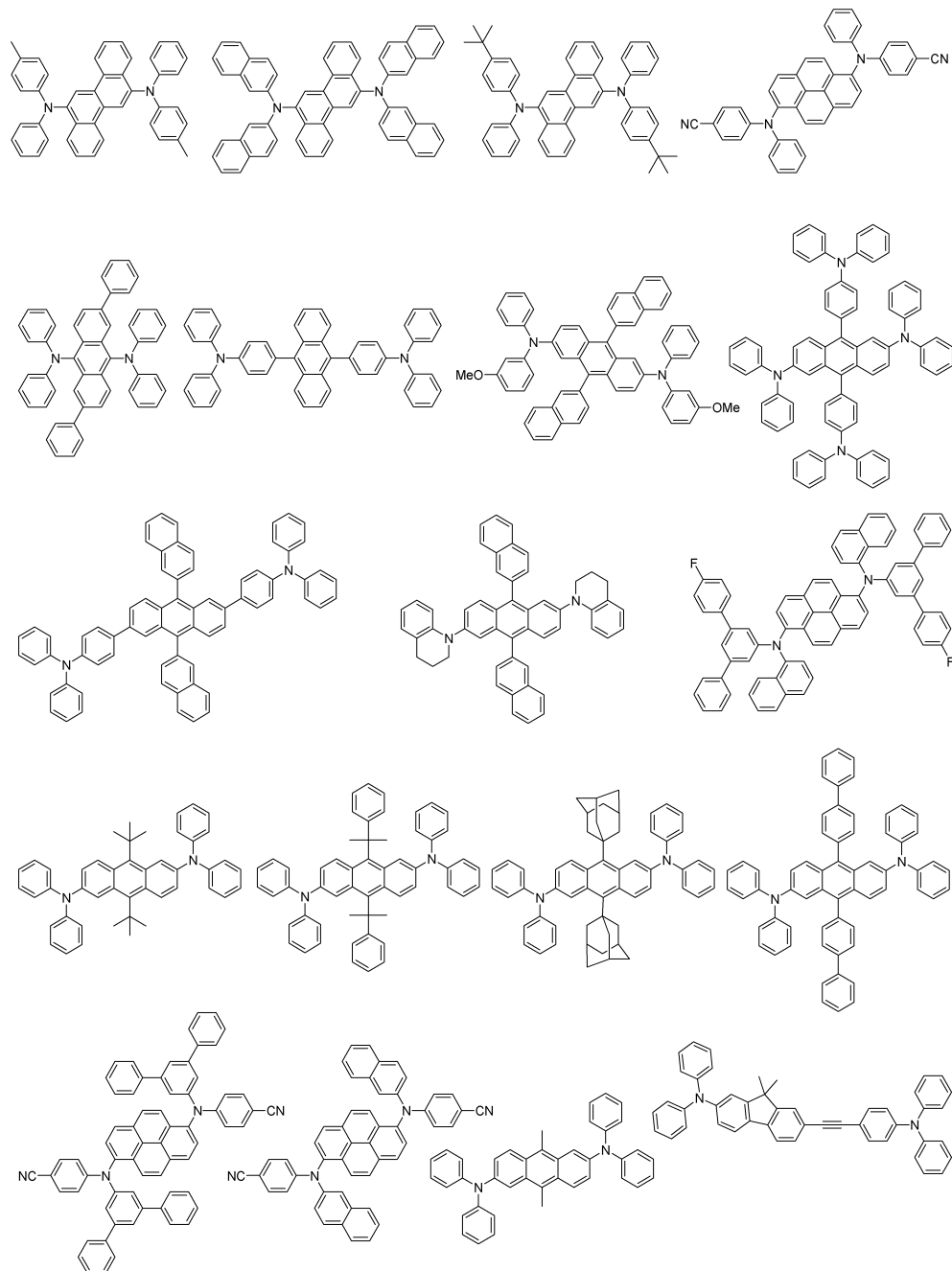
R₁₀₁ 내지 R₁₀₃는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬 또는 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴이고;

[0054]

d는 1 내지 4의 정수이며, e는 0 또는 1의 정수이다.]

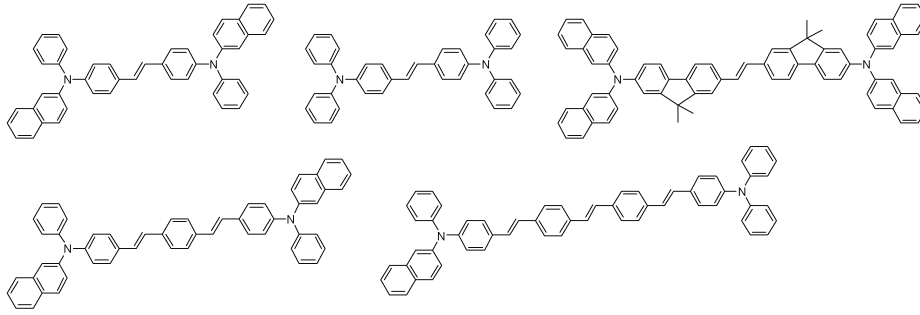
[0055]

상기 화학식 2 또는 3의 도판트 화합물은 하기 구조의 화합물로 예시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0056]

[0057]



[0058]

[0059]

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

[0060]

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

[0061]

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

[0062]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 일층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함) 이상을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 금속의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광매체층 측의 음극 표면에 할로젠화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 이것에 의해, 구동의 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드로서는 예컨대 $SiO_x (1 \leq x \leq 2)$, $AlO_x (1 \leq x \leq 1.5)$, $SiON$, $SiAlON$ 등을 바람직하게 들 수 있으며, 할로젠화 금속으로서는 예컨대 LiF , MgF_2 , CaF_2 , 불화 희토류 금속 등을 바람직하게 들 수 있으며, 금속 산화물로서는 예컨대 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등을 바람직하게 들 수 있다.

[0063]

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

효 과

[0064]

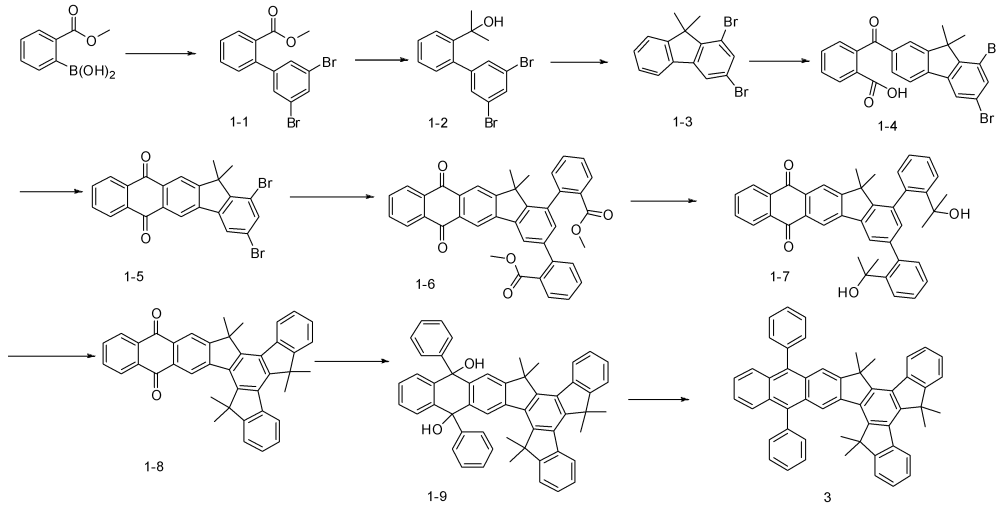
본 발명에 따른 유기 발광화합물은 발광효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 우수한 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

발명의 실시를 위한 구체적인 내용

[0065]

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

[0066] [제조예 1] 화합물 3의 제조



[0067]

[0068] 화합물 1-1의 제조

[0069] 2-(테르티카보닐)페닐보론산 10 g(55.55 mmol), 1,3,5-트리브로모벤젠 19.2 g(61.12 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.9 g(0.03 mmol), 2M K₂CO₃ 수용액 80 ml, 톨루엔 200 ml 및 에탄올 50 ml을 넣고 환류 교반시켰다. 5시간 후 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. EA로 추출하고 무수 MgSO₄로 건조하였다. 감압 증류하고 컬럼으로 분리하여 화합물 1-1 13.5 g(36.38 mmol, 65.73 %)을 얻었다.

[0070] 화합물 1-2의 제조

[0071] 화합물 1-1 13.5 g(36.38 mmol)을 THF 300 ml에 녹이고 메틸마그네슘 브로마이드 36.48 ml(109.44 mmol, 3.0M in diethyl ether)을 천천히 첨가하고, 60℃로 교반하였다. 10시간 후 상온으로 냉각하고 증류수를 천천히 가하고, EA로 추출하고 무수 MgSO₄로 건조하였다. 감압 증류하고 컬럼 분리하여 화합물 1-2 12 g(32.42 mmol, 90.07 %)을 얻었다.

[0072] 화합물 1-3의 제조

[0073] 화합물 1-2 12 g(32.42 mmol)을 아세트산 200 ml 및 H₃PO₄ 300 ml과 섞고 120℃로 교반시켰다. 12시간 후 상온으로 냉각하고 증류수를 가하고, EA로 추출하고 무수 MgSO₄로 건조하였다. 감압 증류후 컬럼으로 분리하여 화합물 1-3 9 g(25.56 mmol, 78.85 %)을 얻었다.

[0074] 화합물 1-4의 제조

[0075] 화합물 1-3 9 g(25.56 mmol)을 MC 100 ml에 녹이고 AlCl₃ 5.11 g(38.34 mmol) 및 무수프탈산 3.7 g(25.56 mmol)을 넣은 후 40℃로 12시간동안 교반시켰다. 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. MC로 추출하고 염산 수용액으로 씻어 주었다. 무수 MgSO₄로 건조하고 감압 증류하고 컬럼 분리하여 화합물 1-4 12 g(23.99 mmol, 93.86 %)을 얻었다.

[0076] 화합물 1-5의 제조

[0077] 화합물 1-4 12 g(23.99 mmol)을 아세트산 50 ml 및 황산 50 ml와 섞고 100℃로 교반하였다. 5시간 후 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. NaOH수용액으로 중성을 만들고 MC로 추출하였다. 무수 MgSO₄로 건조하고 감압 증류하였다. 컬럼 분리 하여 화합물 1-5 3.6 g(7.46 mmol, 31.12 %)을 얻었다.

[0078] 화합물 1-6의 제조

[0079] 2-(테르티카보닐)페닐보론산 3.35 g(18.66 mmol), 화합물 1-5 3.6 g(7.46 mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.43 g(0.37 mmol), 2M K₂CO₃ 수용액 11 ml, 톨루엔 50 ml 및 에탄올 25 ml을 넣고 환류 교반시켰다. 10시간 후 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. EA로 추출하고 무수 MgSO₄로 건조하였다. 감압 증류하고 컬럼으로 분리하여 화합물 1-

6 4 g(6.74 mmol, 90.4 %)을 얻었다.

[0080] 화합물 1-7의 제조

[0081] 화합물 1-6 4 g(6.74 mmol)을 THF 100 ml에 녹이고 메틸마그네슘 브로마이드 13.49 ml(40.49 mmol, 3.0M in diethyl ether)을 천천히 가하고, 60℃로 교반하였다. 10시간 후 상온으로 냉각하고 증류수를 천천히 가하고 EA로 추출하고 무수 MgSO₄로 건조하였다. 감압 증류하고 컬럼 분리하여 화합물 1-7 3.2 g(5.39 mmol, 80.11 %)을 얻었다.

[0082] 화합물 1-8의 제조

[0083] 화합물 1-7 3.2 g(5.39 mmol)을 아세트산 50 ml 및 H₃PO₄ 50ml와 섞고 120℃로 교반하였다. 12시간 후 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. EA로 추출하고 무수 MgSO₄로 건조하였다. 감압 증류후 컬럼으로 분리하여 화합물 1-8 2.3 g(4.13 mmol, 76.65 %)을 얻었다.

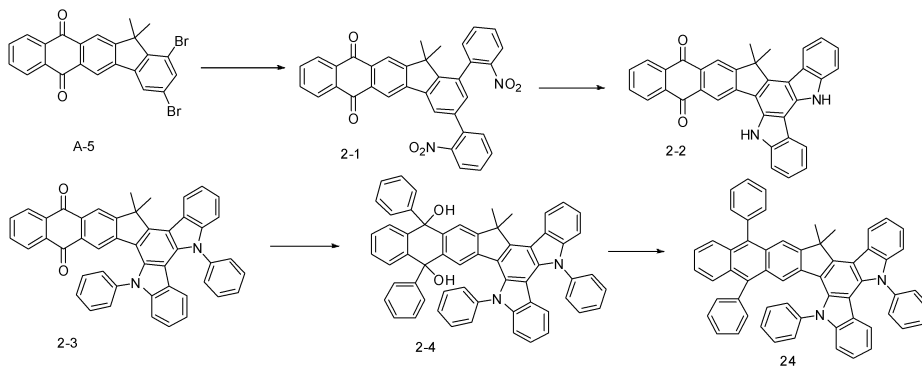
[0084] 화합물 1-9의 제조

[0085] 브로모벤젠 1.75 g(11.15 mmol)을 THF 40 ml에 넣고 -78℃에서 n-buLi 4.6 ml(11.56mmol, 2.5M in hexane)을 천천히 가하였다. 한시간 후 화합물 1-8 2.3 g(4.13 mmol)을 첨가하였다. 온도를 천천히 상온으로 올리고 10시간 후 증류수를 넣고 EA로 추출하였다. 무수 MgSO₄로 건조하고 감압 증류하였다. 정제하지 않고, 바로 다음 반응에 사용하였다.

[0086] 화합물 3의 제조

[0087] 조화합물 1-9 3.2 g을 KI 2.45 g(14.81 mmol), NaH₂PO₂H₂O 3.13 g(29.62 mmol) 및 아세트산 50 ml와 섞고 120℃로 가열하였다. 14시간 후 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. 생성된 고체를 감압 여과하고 NaOH수용액으로 씻어주었다. 컬럼 분리하여 화합물 3 1.6 g(2.35 mmol, 63.52 %)을 얻었다.

[0088] [제조예 2] 화합물 24의 제조



[0089]

[0090] 화합물 2-1의 제조

[0091] 화합물 1-5 5 g(10.37 mmol)과 2-니트로페닐보론산 4.32 g(25.92 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 제조예 1에서 화합물 1-6과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 2-1 4.7 g(8.29 mmol, 79.96 %)을 얻었다.

[0092] 화합물 2-2의 제조

[0093] 화합물 2-1 4.7 g(8.29 mmol)을 트리에틸포스파이트 50 ml와 섞고 환류 교반하였다. 20시간 후 상온으로 냉각하고 감압 증류하였다. 컬럼 분리하여 화합물 2-2 2.5 g(4.97 mmol, 60.00 %)을 얻었다.

[0094] 화합물 2-3의 제조

[0095] 화합물 2-2 2.5 g(4.97 mmol), 아이오도벤젠 2.21 ml(19.89 mmol), CuI 1.89 g(9.94 mmol), K₂CO₃ 2.75 g(19.89 mmol) 및 1,2-디클로로벤젠 50 ml을 섞고 190℃로 가열하였다. 24시간 후 상온으로 냉각하고 유기 용매를 감압 증류하였다. 증류수를 넣고 EA로 추출하였다. 감압 증류하고 컬럼 분리하여 화합물 2-3 2.7 g(4.12 mmol, 82.97 %)을 얻었다.

[0096] 화합물 2-4의 제조

[0097] 화합물 2-3 2.7 g(4.13 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 제조예 1에서 화합물 1-9과 동일한 방법으로 합성하였으며, 정제하지 않고, 바로 다음 반응에 사용하였다.

[0098] 화합물 24의 제조

[0099] 조화합물 2-4 3.2 g을 사용하는 것을 제외하고는 제조예 1에서 화합물 3과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 24 1.6 g(2.05 mmol, 49.98 %)을 얻었다.

[0100] 상기 제조예 1의 방법을 이용하여 유기 발광 화합물 1 내지 화합물 31을 제조하였으며, 표 1에 제조된 유기 발광 화합물들의 ¹H NMR 및 MS/FAB를 나타내었다.

[0101] [표 1]

화합물	¹ H NMR(CDCl ₃ , 200 MHz)	MS/FAB	
		found	calculated
1	δ = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 2.64(6H, s), 7.24~7.28(2H, m), 7.35~7.38(3H, m), 7.44(1H, m), 7.55(1H, m), 7.61(1H, m), 7.76(1H, s), 7.87(1H, m), 7.98(2H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)	554.76	554.30
2	δ = 1.48(18H, s), 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 7.24~7.28(2H, m), 7.35~7.38(3H, m), 7.44(1H, m), 7.55(1H, m), 7.61(1H, m), 7.76(1H, s), 7.87(1H, m), 7.98(2H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)	638.92	638.39
3	δ = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 7.24~7.28(2H, m), 7.38~7.44(6H, m), 7.51~7.55(9H, m), 7.61(1H, m), 7.76(1H, s), 7.87~7.91(3H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)	678.90	678.33
4	δ = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 7.24~7.28(2H, m), 7.38~7.44(4H, m), 7.55(5H, m), 7.61(3H, m), 7.76(1H, s), 7.87~7.91(3H, m), 8.04(2H, m), 8.07(1H, s), 8.08~8.09(3H, m), 8.42(2H, m), 8.55(2H, m)	779.02	779.36
5	δ = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 7.24~7.28(2H, m), 7.38~7.44(4H, m), 7.55~7.61(8H, m), 7.73(2H, m), 7.76(1H, s), 7.87~7.92(5H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)	779.02	779.36
6	δ = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 2.34(6H, s), 7.24~7.44(14H, m), 7.55(1H, m), 7.61(1H, m), 7.76(1H, s), 7.87~7.91(3H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)	706.95	706.36

[0102]

7	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 2.34(6H, s), 7.19\sim 7.44(12H, m), 7.55(1H, m), 7.61(1H, m), 7.76(1H, s), 7.79(2H, m), 7.87\sim 7.91(3H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	706.95	706.36
8	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 2.32(6H, s), 7.24\sim 7.44(12H, m), 7.55(1H, m), 7.61\sim 7.67(3H, m), 7.76(1H, s), 7.87\sim 7.91(3H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	706.95	706.36
9	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 2.34(12H, s), 7.24\sim 7.31(4H, m), 7.38\sim 7.44(4H, m), 7.55\sim 7.61(6H, m), 7.76(1H, s), 7.87\sim 7.91(3H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	735.01	734.39
10	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 2.34(6H, s), 2.59(6H, s), 7.1(2H, m), 7.16(2H, m), 7.24\sim 7.28(2H, m), 7.38\sim 7.44(4H, m), 7.55(3H, m), 7.61(1H, m), 7.76(1H, s), 7.87\sim 7.91(3H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	735.01	734.39
11	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 7.24\sim 7.3(6H, m), 7.38\sim 7.44(8H, m), 7.55(1H, m), 7.61(1H, m), 7.76(1H, s), 7.87\sim 7.91(3H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	714.88	714.31
12	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 7.24\sim 7.28(2H, m), 7.38\sim 7.44(4H, m), 7.55(1H, m), 7.61(1H, m), 7.76(1H, s), 7.82\sim 7.91(11H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	728.92	728.32
13	$\delta = 1.35(18H, s), 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 7.24\sim 7.28(2H, m), 7.37\sim 7.44(12H, m), 7.55(1H, m), 7.61(1H, m), 7.76(1H, s), 7.87\sim 7.91(3H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	791.11	791.45
14	$\delta = 1.72(20H, m), 1.72(0H, s), 1.78(6H, s), 2.74(8H, m), 6.88(2H, m), 6.98(2H, m), 7.15(2H, m), 7.24\sim 7.28(2H, m), 7.38\sim 7.44(4H, m), 7.55(1H, m), 7.61(1H, m), 7.76(1H, s), 7.87\sim 7.91(3H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	787.08	786.42
15	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 7.1(2H, m), 7.24\sim 7.28(2H, m), 7.38\sim 7.55(9H, m), 7.61\sim 7.63(3H, m), 7.76(1H, s), 7.87\sim 7.92(5H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m), 8.42(2H, m)$	780.99	780.35
16	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 3.83(6H, s), 7.05(4H, m), 7.24\sim 7.28(2H, m), 7.38\sim 7.44(4H, m), 7.55(1H, m), 7.61(1H, m), 7.68(4H, m), 7.76(1H, s), 7.87\sim 7.91(3H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	738.95	738.35
17	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 7.24\sim 7.28(2H, m), 7.38\sim 7.44(8H, m), 7.55(1H, m), 7.61(1H, m), 7.68(4H, m), 7.76(1H, s), 7.87\sim 7.91(3H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	814.90	814.30
18	$\delta = 0.25(18H, s), 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 7.24\sim 7.28(2H, m), 7.38\sim 7.46(8H, m), 7.55(1H, m), 7.61(1H, m), 7.76(1H, s), 7.77(4H, m), 7.87\sim 7.91(3H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	823.26	822.41
19	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 7.24\sim 7.28(2H, m), 7.37\sim 7.55(39H, m), 7.61(1H, m), 7.76(1H, s), 7.87\sim 7.91(7H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	1195.68	1194.50
20	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 1.96(4H, m), 2.76(4H, m), 3.06(4H, m), 6.55(2H, m), 6.72(2H, m), 7.05\sim 7.07(4H, m), 7.24\sim 7.28(2H, m), 7.38\sim 7.44(4H, m), 7.55(1H, m), 7.61(1H, m), 7.69(1H, s), 7.87\sim 7.91(3H, m), 8(1H, s), 8.09(1H, m)$	789.06	788.41
21	$\delta = 1.71(12H, m), 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 2.01\sim 2.02(18H, m), 7.24\sim 7.28(2H, m), 7.35\sim 7.38(3H, m), 7.44(1H, m), 7.55(1H, m), 7.61(1H, m), 7.76(1H, s), 7.87(1H, m), 7.98(2H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	795.14	794.49
22	$\delta = 0.66(18H, s), 7.33\sim 7.41(6H, m), 7.51\sim 7.52(10H, m), 7.61(2H, m), 7.89\sim 7.91(4H, m), 8.23(1H, s), 8.25(1H, s)$	727.12	726.26
23	$\delta = 7.39\sim 7.41(4H, m), 7.5\sim 7.52(12H, m), 7.91(4H, s), 7.91(0H, m), 7.98(2H, m), 8.45(2H, m)$	648.86	648.10
24	$\delta = 7.25(2H, m), 7.33\sim 7.52(23H, m), 7.58(6H, m), 7.91(4H, s), 7.91\sim 7.94(2H, m), 8.55(2H, m)$	825.99	825.31
25	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 2.45(3H, s), 7.24\sim 7.28(3H, m), 7.38\sim 7.44(4H, m), 7.51\sim 7.55(9H, m), 7.61(1H, m), 7.7(1H, m), 7.76(1H, s), 7.85\sim 7.87(2H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	692.93	692.34

26	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 7.24\sim 7.28(2H, m), 7.38\sim 7.44(3H, m), 7.51\sim 7.61(13H, m), 7.73(2H, m), 7.76(1H, s), 7.87\sim 8(8H, m), 8.07(1H, s), 8.09\sim 8.13(2H, m)$	855.00	854.39
27	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 2.34(6H, s), 7.18(1H, m), 7.24(1H, m), 7.35\sim 7.41(6H, m), 7.51\sim 7.52(8H, m), 7.75(1H, m), 7.76(1H, s), 7.91\sim 7.97(3H, m), 8.07(1H, s)$	706.95	706.36
28	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 2.34(6H, s), 2.45(3H, s), 7.18(1H, m), 7.24\sim 7.25(2H, m), 7.35(1H, m), 7.41(3H, m), 7.51\sim 7.52(8H, m), 7.7\sim 7.75(2H, m), 7.76(1H, s), 7.85(1H, m), 7.97(1H, m), 8.07(1H, s)$	720.98	720.38
29	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 7.41(5H, m), 7.51\sim 7.52(20H, m), 7.61\sim 7.63(2H, m), 7.69(1H, m), 7.76(1H, s), 7.77(1H, m), 7.83(1H, m), 7.93\sim 7.97(2H, m), 8.07(1H, s), 8.13\sim 8.15(2H, m)$	907.19	906.42
30	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 2.45(3H, s), 7.25(1H, m), 7.41(4H, m), 7.51\sim 7.52(16H, m), 7.63(1H, m), 7.69\sim 7.7(2H, m), 7.76(1H, s), 7.77(1H, m), 7.83\sim 7.85(2H, m), 7.93(1H, m), 8.07(1H, s), 8.15(1H, m)$	845.12	844.41
31	$\delta = 1.72(12H, s), 1.78(6H, s), 6.63(4H, m), 6.81\sim 6.83(3H, m), 7.03(1H, m), 7.2\sim 7.28(6H, m), 7.38\sim 7.44(4H, m), 7.51\sim 7.55(9H, m), 7.61(1H, m), 7.75(1H, m), 7.76(1H, s), 7.87(1H, m), 8.07(1H, s), 8.09(1H, m)$	846.11	845.30

[0103]

[0104]

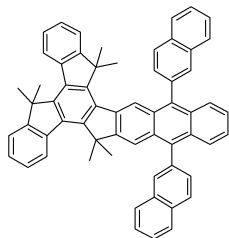
[0105] [실시에 1] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0106] 본 발명의 발광 재료를 이용한 구조의 OLED 소자를 제작하였다.

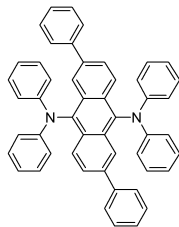
[0107] 우선, OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막(15 Ω/□)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다.

[0108] 다음으로, 진공 증착 장비의 기판 폴더에 ITO 기판을 설치하고, 진공 증착 장비 내의 셀에 4,4',4"-트리스(N,N-(2-나프틸)-페닐아미노)트리페닐아민(2-TNATA)을 넣고, 챔버 내의 진공도가 10⁻⁶ torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 2-TNATA를 증발시켜 ITO 기판 상에 60 nm 두께의 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 N,N'-bis(α-나프틸)-N,N'-디페닐-4,4'-디아민(NPB)을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 NPB를 증발시켜 정공주입층 위에 20 nm 두께의 정공전달층을 증착하였다.

[0109] 정공주입층, 정공전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 본 발명에 따른 화합물 **5**를 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 **E**를 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트를 기준으로 2 내지 5 중량%로 증착함으로써 상기 정공 전달층 위에 30 nm 두께의 발광층을 증착하였다.



화합물 5



화합물 E

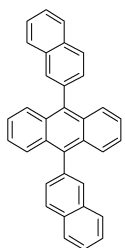
[0110]

[0111] 이어서 전자전달층으로써 트리스(8-히드록시퀴놀린)알루미늄(III) (Alq)를 20 nm 두께로 증착한 다음, 전자주입층으로 리튬퀴놀레이트(Liq)를 1 내지 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 150 nm의 두께로 증착하여 OLED를 제작하였다.

[0112] 재료 별로 각 화합물은 10⁻⁶ torr 하에서 진공 승화 정제하여 OLED 발광재료로 사용하였다.

[0113] [비교예 1] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제작

[0114] 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트 재료로서 본 발명의 화합물 대신 DNA를 사용한 것 외에는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.



DNA

[0115]

[0116] 상기 실시예 1 및 비교예 1에서 제조된 본 발명에 따른 유기 발광 화합물과 종래의 발광 화합물을 각각 함유하는 OLED 소자의 전력 효율을 각각 1,000 cd/m²에서 측정하여 하기 표 2에 나타내었다.

[0117] [표 2]

No.	호스트	도판트	도핑농도 (중량%)	전력효율(lm/W)	색
				@1000cd/m ²	
1	화합물 5	화합물E	3	8.2	녹색
2	화합물 15	화합물E	3	8.1	녹색
3	화합물 23	화합물E	3	8.1	녹색
4	화합물 26	화합물E	3	8.0	녹색
비교예1	DNA	화합물E	3	7.1	녹색

[0118]

[0119] 상기 표 2에 나타난 바와 같이, 본 발명의 재료를 녹색 발광 소자에 적용한 결과, 비교예 1 대비 동등이상의 색 순도를 유지하면서 전력효율이 개선되었음을 확인할 수 있었다.

专利名称(译)	新型有机发光化合物和使用其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020100137188A	公开(公告)日	2010-12-30
申请号	KR1020090055483	申请日	2009-06-22
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
当前申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	KIM CHI SIK 김치식 CHO YOUNG JUN 조영준 KWON HYUCK JOO 권혁주 KIM BONG OK 김봉옥 KIM SUNG MIN 김성민 YOON SEUNG SOO 윤승수		
发明人	김치식 조영준 권혁주 김봉옥 김성민 윤승수		
IPC分类号	C09K11/06		
CPC分类号	C09K11/06 C07F13/00 H05B33/14 H01L51/50 C07D307/78 C07D471/04 C07D487/22 C07C13/62 C07C22/08 C07C25/22 C07C43/21 C07C211/61 C07C255/52 C07C2602/10 C07C2603/54 C07C2603 /74 C07D215/04 C07D217/04 C07D493/12 C07D495/14 C07F7/0805 C07F7/0807 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C09K2211/1029 H01L51/0056 H01L51/006 H01L51/0094 H01L51 /5012		
代理人(译)	张本勋		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

目的：提供一种新型有机电致发光化合物和采用该化合物的有机电致发光器件，以确保优异的发光效率和器件寿命以及适当的色坐标。组成：一种新型有机电致发光化合物，用化学式1表示。化学式1 R1-R5为氢，氘，卤素，取代或未取代的（C1-C30）烷基，取代或未取代的（C6-C30）芳基，取代或未取代的（C6-C30）芳基与取代或未取代的（C3-C30）键合环烷基，取代或未取代的（C3-C30）杂芳基，取代或未取代的5-7元杂环烷基的杂环烷基，5-7元杂环烷基与一个或多个取代或未取代的芳环键合，取代或未取代的（C3-C30）环烷基，NR11R12，BR13R14，PR15R16，P（=O）R17R18和RaRbRcSi。COPYRIGHT KIPO 2011

