



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

(11) 공개번호 10-2012-0032054  
 (43) 공개일자 2012년04월05일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C09K 11/06* (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)  
*C07F 15/00* (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2010-0072906  
 (22) 출원일자 2010년07월28일  
 심사청구일자 없음

(71) 출원인  
**룸엔드하스전자재료코리아유한회사**  
 충남 천안시 백석동 736  
 (72) 발명자  
**김현**  
 경기도 안양시 동안구 호계동 1052-5 목련아파트  
 501-1001  
**신효남**  
 서울특별시 성북구 동소문로34길 24, 삼성아파트  
 101-1111 (돈암동)  
 (뒷면에 계속)  
 (74) 대리인  
**김종관, 권오식, 박창희**

전체 청구항 수 : 총 11 항

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

**(57) 요약**

본 발명은 하기 화학식을 갖는 유기 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 구체적으로는 발광 재료로서 사용되는 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 도판트로서 사용하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 특히 발광층의 도판트 재료로서 이용한 유기 발광 소자는 발광 효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 우수한 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

(72) 발명자

**나홍엽**

서울특별시 영등포구 당산동4가 금호어울림아파트  
103-401

**권혁주**

서울특별시 광진구 광나루로56길 32, 현대2차 아파  
트 206동 701호 (구의동)

**이경주**

대전광역시 유성구 엑스포로 448, 506동 202호 (전  
민동, 엑스포아파트)

**김봉옥**

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

**김성민**

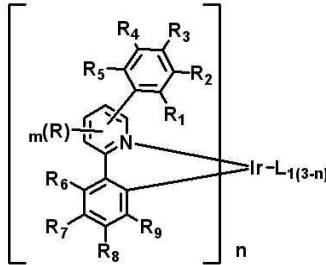
서울특별시 양천구 목1동 목동트라펠리스 EB-1003

**특허청구의 범위**

**청구항 1**

하기 화학식 I로 표시되는 유기 발광 화합물:

[화학식 I]



상기 화학식 I에서,

L<sub>1</sub>은 유기리간드이며;

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>은 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 시아노, 나이트로, BR<sub>21</sub>R<sub>22</sub>, PR<sub>23</sub>R<sub>24</sub>, P(=O)R<sub>25</sub>R<sub>26</sub>[R<sub>21</sub> 내지 R<sub>26</sub>은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴이다.], R<sub>27</sub>R<sub>28</sub>R<sub>29</sub>Si-[R<sub>27</sub> 내지 R<sub>29</sub>은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴이다.], 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아르(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬이고;

R은 수소, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴이며;

R<sub>6</sub> 내지 R<sub>9</sub>은 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 치환 또는 비치환된 (C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 시아노, 나이트로, BR<sub>21</sub>R<sub>22</sub>, PR<sub>23</sub>R<sub>24</sub>, P(=O)R<sub>25</sub>R<sub>26</sub>, NR<sub>30</sub>R<sub>31</sub>[R<sub>21</sub> 내지 R<sub>26</sub>, R<sub>30</sub> 내지 R<sub>31</sub>은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴이다.], R<sub>27</sub>R<sub>28</sub>R<sub>29</sub>Si-[R<sub>27</sub> 내지 R<sub>29</sub>은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴이다.], R<sub>32</sub>Y-[Y는 S 또는 O이고, R<sub>32</sub>는 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴이다.], 치환 또는 비치환된 (C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아르(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬이거나 인접한 치환기들끼리 결합하여 융합 고리를 형성할 수 있으며;

n 및 m은 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고;

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

**청구항 2**

제 1항에 있어서,

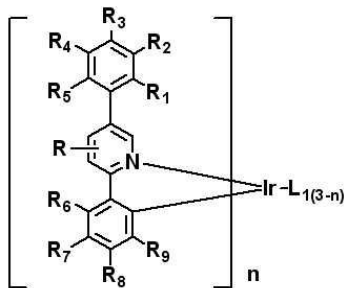
상기 치환기에 더 치환되는 치환기는 서로 독립적으로 중수소, 할로젠, 할로젠이 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴이 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 방

방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬, R<sub>91</sub>R<sub>92</sub>R<sub>93</sub>Si-, (C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>)알케닐, (C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>)알키닐, 시아노, 카바졸릴, NR<sub>94</sub>R<sub>95</sub>, BR<sub>96</sub>R<sub>97</sub>, PR<sub>98</sub>R<sub>99</sub>, P(=O)R<sub>100</sub>R<sub>101</sub>, (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아르(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬(C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, R<sub>102</sub>S-, R<sub>103</sub>O-, R<sub>104</sub>C(=O)-, R<sub>105</sub>C(=O)O-, 카르복실, 나이트로 또는 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이고, R<sub>91</sub> 내지 R<sub>103</sub>은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬이거나 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)알킬렌 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자로 치환될 수 있으며; R<sub>104</sub> 및 R<sub>105</sub>는 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알콕시, (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴옥시인 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물.

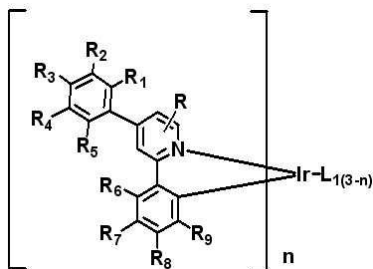
**청구항 3**

제 1항에 있어서, 상기 화학식 I의 화합물이 하기 화학식 II 또는 III의 화합물인 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물:

[화학식 II]



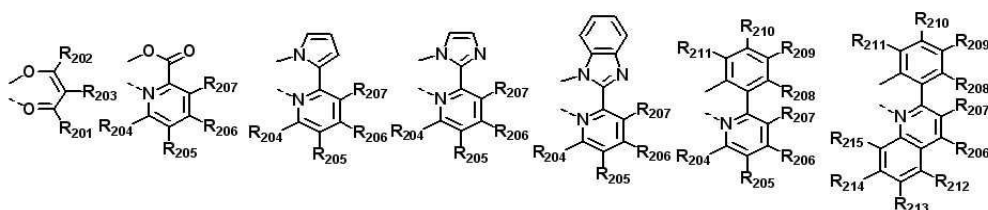
[화학식 III]

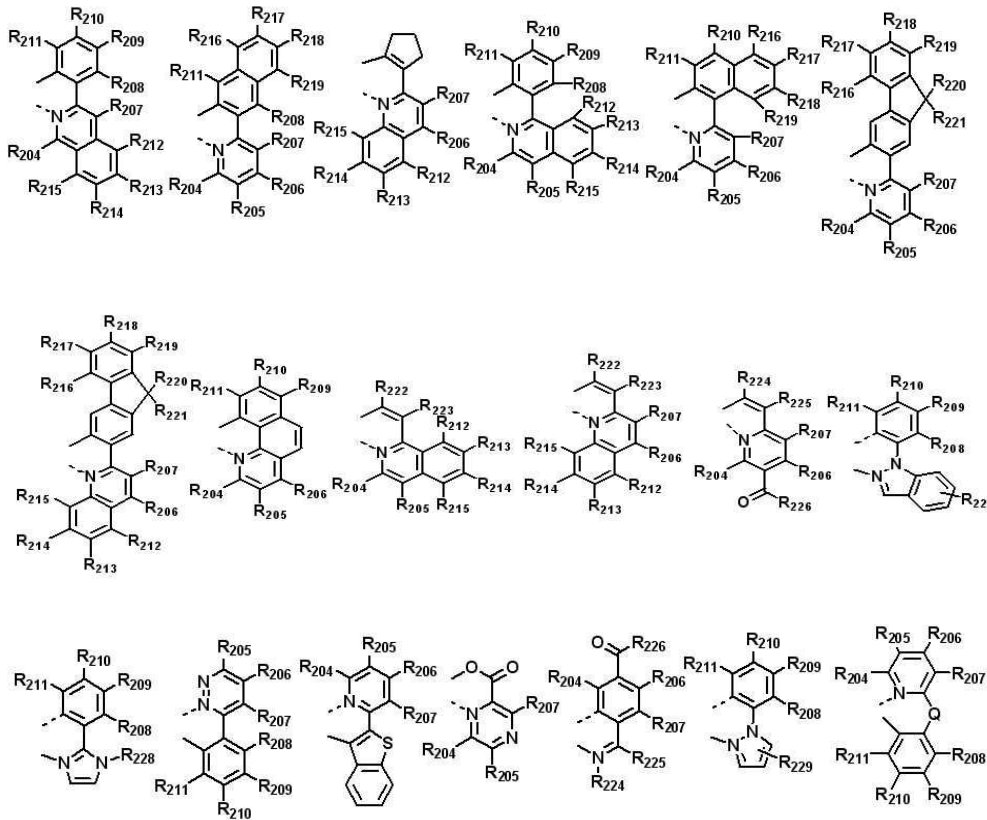


상기 화학식 II 또는 화학식 III에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>, R, R<sub>6</sub> 내지 R<sub>9</sub>, L<sub>1</sub>, n은 상기 화학식 I에서의 정의와 동일하다.

**청구항 4**

제 1항에 있어서, 상기 L<sub>1</sub>은 하기의 구조를 갖는 화합물들로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물:





상기 화학식에서,

R<sub>201</sub> 내지 R<sub>203</sub>은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 할로젠이고;




R<sub>204</sub> 내지 R<sub>219</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 치환 또는 비치환된 모노 또는 치환 또는 비치환된 디(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노 또는 디(C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴아미노, SF<sub>5</sub>, 치환 또는 비치환된 트리(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬(C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴실릴, 시아노 또는 할로젠이고;

R<sub>220</sub> 내지 R<sub>223</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬 또는 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴이고;

R<sub>224</sub> 및 R<sub>225</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 할로젠이거나, R<sub>224</sub>와 R<sub>225</sub>는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)알킬렌 또는 (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하며;

R<sub>226</sub>은 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 치환 또는 비치환된 (C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴 또는 할로젠이고;

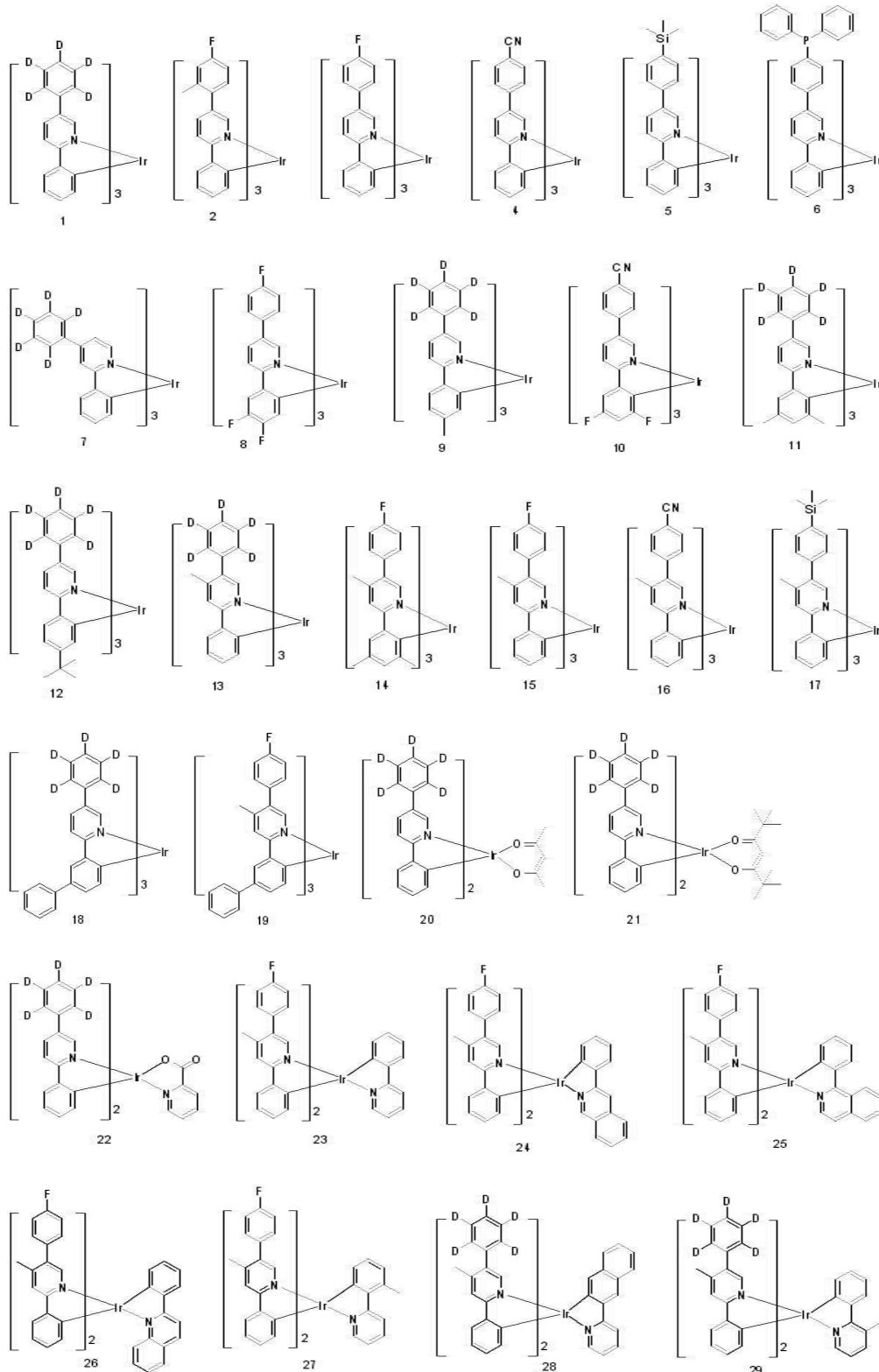
R<sub>227</sub> 내지 R<sub>229</sub>은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 할로젠이고;

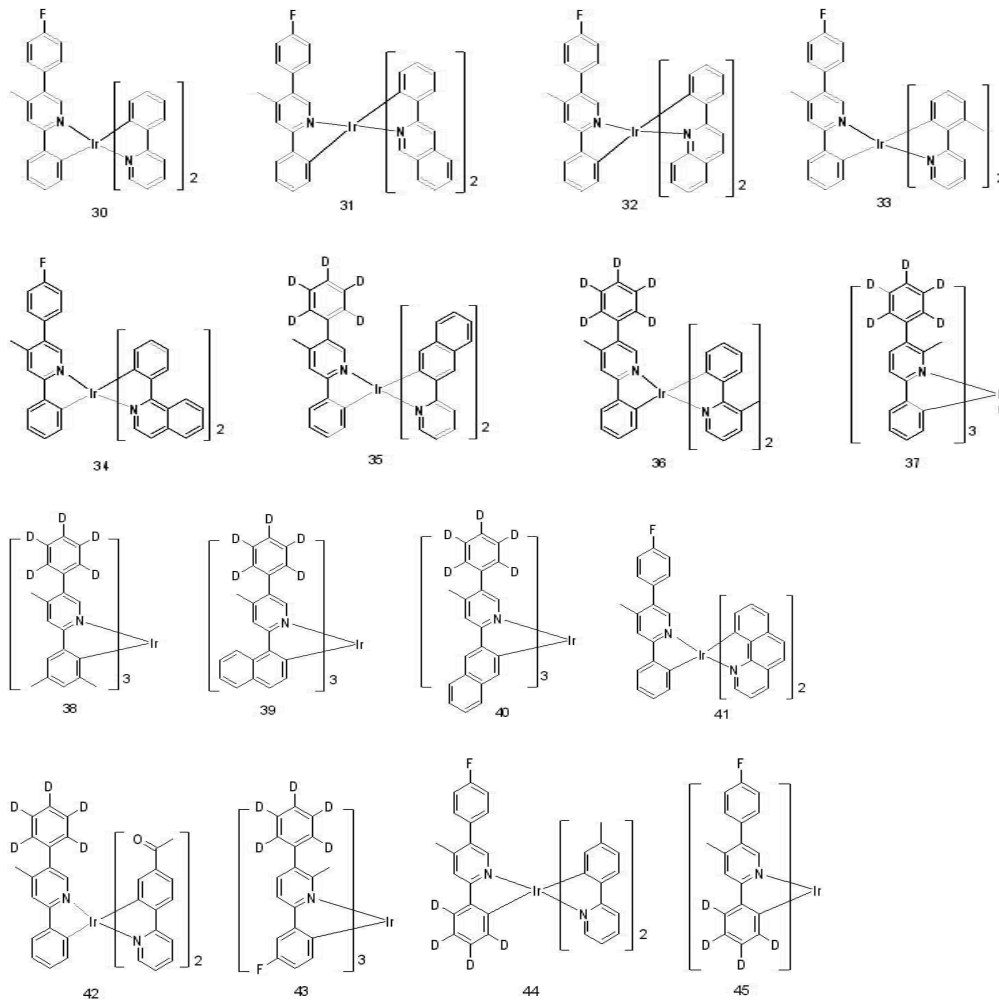
Q는 ,  또는  이며, 여기에서 R<sub>231</sub> 내지 R<sub>242</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알콕시, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 시아노, 치

환 또는 비치환된 (C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬이거나, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로 고리 또는 융합고리를 형성할 수 있거나, R<sub>207</sub> 또는 R<sub>208</sub>과 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 포화 또는 불포화의 융합 고리를 형성할 수 있다.

**청구항 5**

제 1항에 있어서, 상기 화학식 I의 화합물이 하기 구조를 갖는 화합물들로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물:





**청구항 6**

제 1항 내지 제 5항 중의 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 7**

제 6항에 있어서, 상기 화합물이 발광층의 도판트 재료로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 8**

제 6항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 소자는,

제1전극;

제2전극; 및

상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어져 있으며, 상기 유기물층은 적어도 상기 화학식 I의 유기 발광 화합물이 포함된 층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 9**

제 8항에 있어서, 상기 유기물층에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타넘계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 착체 화합물이 더 포함되어 있는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 10**

제 8항에 있어서, 상기 유기물층은 발광층 및 전하 생성층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 11**

제 8항에 있어서, 상기 유기물층에 적색, 녹색 또는 청색 발광을 하는 유기발광층을 하나 이상 포함하여 백색 발광을 하는 유기 전계 발광 소자.

**명세서**

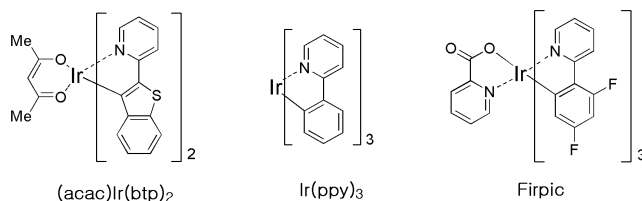
**기술분야**

[0001] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 구체적으로는 발광 재료로서 사용되는 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 도판트로서 사용하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

**배경기술**

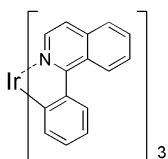
[0002] OLED에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재까지 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 전기 발광의 메커니즘 상 인광 재료의 개발은 이론적으로 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있는 가장 좋은 방법 중 하나이다.

[0003] 현재까지 이리듐(III)착물 계열이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 각 RGB 별로 (acac)Ir(btp)<sub>2</sub>, Ir(ppy)<sub>3</sub> 및 Firpic 등의 재료가 알려져 있다. 특히, 최근 일본, 구미에서 많은 인광 재료들이 연구되어지고 있다.



[0004]

[0005] 종래의 적색 인광 재료 중, 좋은 EL 특성을 보이는 재료로 보고된 재료는 몇 가지 보고가 되고 있으나, 아직까지 상용화 수준에 도달한 재료는 아주 미미한 것으로 알려져 있다. 가장 좋은 재료로는 1-phenyl isoquinoline의 이리듐 착물이 있는데, EL 특성이 매우 우수 하여 진적색의 색순도 및 고 발광효율을 보이는 것으로 알려져 있다. (참고문헌 : A. Tsuboyama, et. al. , J. Am. Chem. Soc. 2003, 125(42), 12971-12979)



[0006] 1-phenyl isoquinoline

[0007] 더구나, 적색 재료의 경우, 수명 상의 큰 문제가 없어 색순도 나 발광 효율이 우수하면 상용화가 용이한 경향을 가지고 있다. 따라서 상기의 이리듐 착물은 뛰어난 색순도 및 발광효율로 인해 상용화 가능성이 매우 높은 재료라고 할 수 있다.

[0008] 그러나, 이리듐 착물은 아직 소형 디스플레이 정도에서나 적용이 가능한 재료로 판단되어지며, 실상 중대형 OLED 패널에서 요구되는 EL 특성 수준은 공지된 재료들 보다 더욱 우수해야 하는 문제점이 있다.

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

[0009] 따라서, 본 발명자들은 상기한 종래의 문제점을 해결하기 위하여 노력한 결과, 발광 효율이 뛰어나고 수명이 획기적으로 개선된 유기 전계 발광 소자를 실현하기 위한 새로운 발광 화합물을 발명하게 되었다.

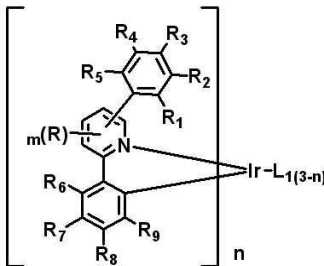
[0010] 따라서, 본 발명의 목적은 상기한 문제점들을 해결하기 위하여 기존의 도판트 재료보다 발광 효율 및 소자 수명이 좋으며, 적절한 색좌표를 갖는 우수한 골격의 유기 발광 화합물을 제공하는 데에 있다.

[0011] 또한, 본 발명의 다른 목적은 상기 유기 발광 화합물을 발광 재료로서 채용하는 고효율 및 장수명의 유기 전계 발광 소자를 제공하는 데에 있다.

**과제의 해결 수단**

[0012] 본 발명은 하기 화학식 I로 표시되는 유기 발광 화합물에 관한 것이다:

[0013] [화학식 I]



[0014] 상기 화학식 I에서,  
[0015] L<sub>1</sub>은 유기리간드이며;

[0017] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>은 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 시아노, 나이트로, BR<sub>21</sub>R<sub>22</sub>, PR<sub>23</sub>R<sub>24</sub>, P(=O)R<sub>25</sub>R<sub>26</sub>[R<sub>21</sub> 내지 R<sub>26</sub>은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴이다.], R<sub>27</sub>R<sub>28</sub>R<sub>29</sub>Si-[R<sub>27</sub> 내지 R<sub>29</sub>은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴이다.], 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아르(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬이고;

[0018] R은 수소, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴이며;

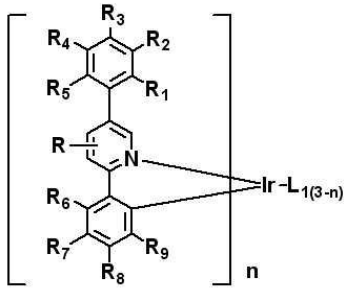
[0019] R<sub>6</sub> 내지 R<sub>9</sub>은 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 치환 또는 비치환된 (C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 시아노, 나이트로, BR<sub>21</sub>R<sub>22</sub>, PR<sub>23</sub>R<sub>24</sub>, P(=O)R<sub>25</sub>R<sub>26</sub>, NR<sub>30</sub>R<sub>31</sub>[R<sub>21</sub> 내지 R<sub>26</sub>, R<sub>30</sub> 내지 R<sub>31</sub>은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴이다.], R<sub>27</sub>R<sub>28</sub>R<sub>29</sub>Si-[R<sub>27</sub> 내지 R<sub>29</sub>은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴이다.], R<sub>32</sub>Y-[Y는 S 또는 O이고, R<sub>32</sub>는 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴이다.], 치환 또는 비치환된 (C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아르(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬이거나 인접한 치환기들끼리 결합하여 융합 고리를 형성할 수 있으며;

[0020] n 및 m은 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고;

[0021] 상기 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

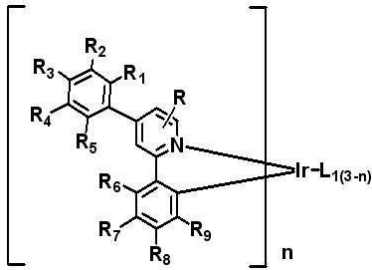
[0022] 상기 화학식 I의 화합물은 또한 하기 화학식 II 또는 III의 구조를 갖는 화합물을 포함한다:

[0023] [화학식 II]



[0024]

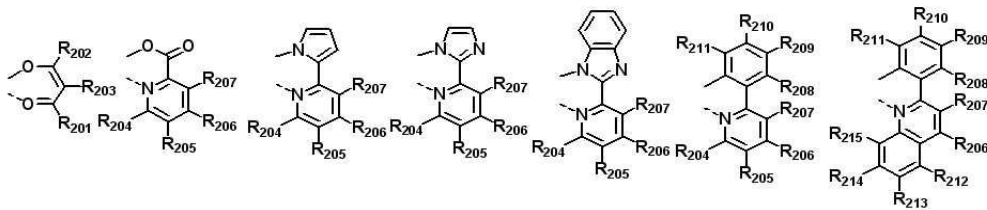
[0025] [화학식 III]



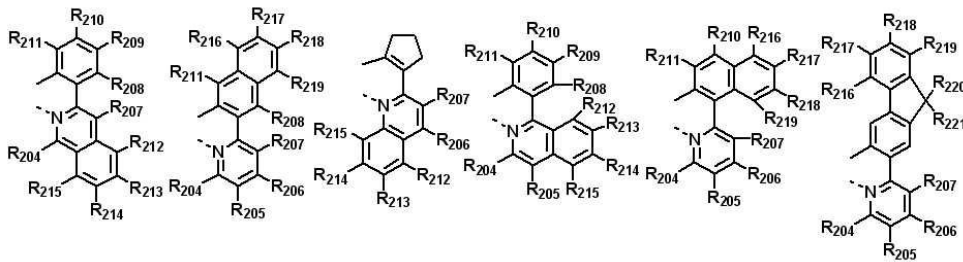
[0026]

[0027] 상기 화학식 II 또는 화학식 III에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>, R, R<sub>6</sub> 내지 R<sub>9</sub>, L<sub>1</sub>, n은 상기 화학식 I에서의 정의와 동일하다.

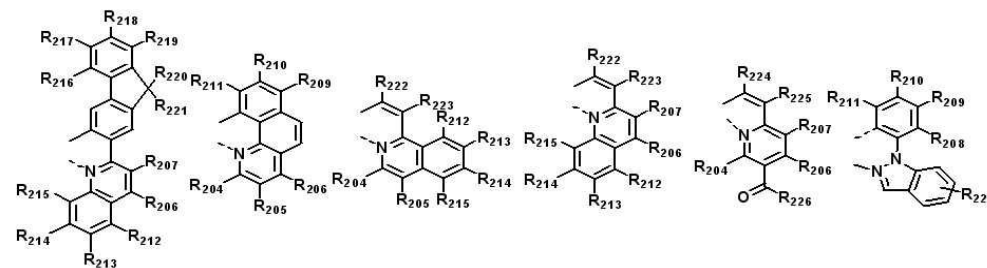
[0028] 상기한 L<sub>1</sub>은 하기의 구조를 갖는 화합물들로부터 선택되며, 이들로 한정되는 것은 아니다:



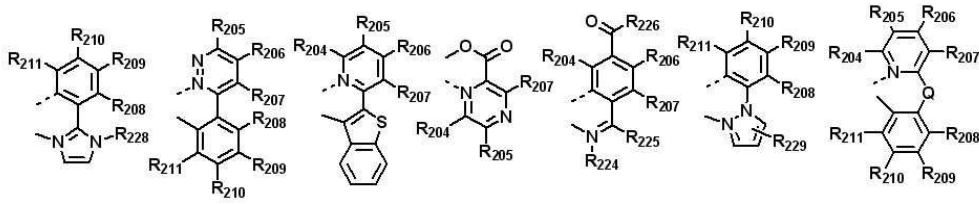
[0029]



[0030]



[0031]



[0032]

[0033]

[0034]

[0035]

[0036]

[0037]

[0038]

[0039]

[0040]

[0041]

상기 화학식에서,

R<sub>201</sub> 내지 R<sub>203</sub>은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 할로젠이고;

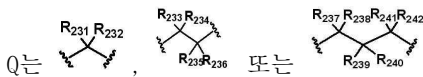
R<sub>204</sub> 내지 R<sub>219</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 치환 또는 비치환된 모노 또는 치환 또는 비치환된 디(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노 또는 디(C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴아미노, SF<sub>5</sub>, 치환 또는 비치환된 트리(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬(C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴실릴, 시아노 또는 할로젠이고;

R<sub>220</sub> 내지 R<sub>223</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬 또는 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴이고;

R<sub>224</sub> 및 R<sub>225</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 할로젠이거나, R<sub>224</sub>와 R<sub>225</sub>는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)알킬렌 또는 (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하며;

R<sub>226</sub>은 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 치환 또는 비치환된 (C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴 또는 할로젠이고;

R<sub>227</sub> 내지 R<sub>229</sub>은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 할로젠이고;



Q는 이며, 여기에서 R<sub>231</sub> 내지 R<sub>242</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알콕시, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬이거나, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로 고리 또는 융합고리를 형성할 수 있거나, R<sub>207</sub> 또는 R<sub>208</sub>과 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 포화 또는 불포화의 융합 고리를 형성할 수 있다.

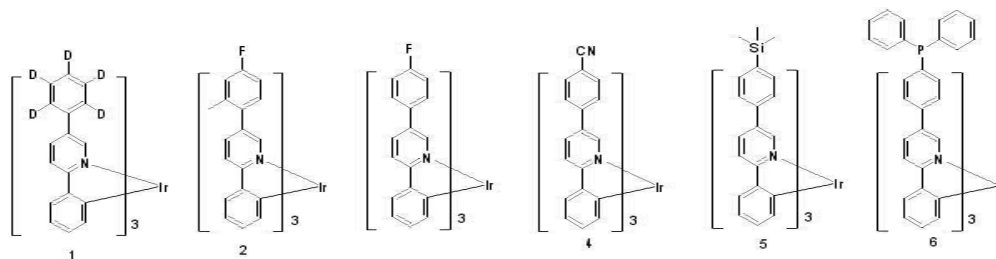
본 발명에 기재된 「알킬」, 「알콕시」 및 그 외 「알킬」부분을 포함하는 치환체는 직쇄 또는 분쇄 형태를 모두 포함하고, 「시클로알킬」은 단일 고리계 뿐만 아니라 치환 또는 비치환된 아다만틸 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>7</sub>-C<sub>30</sub>)바이시클로알킬과 같은 여러 고리계 탄화수소도 포함한다. 본 발명에 기재된 「아릴」은 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로, 각 고리에 적절하게는 4 내지 7개, 바람직하게는 5 또는 6개의 고리원자를 포함하는 단일 또는 융합고리계를 포함하며, 다수개의 아릴이 단일결합으로 연결되어 있는 형태까지 포함한다. 구체적인 예로 페닐, 나프틸, 비페닐, 안트릴, 인데닐(indenyl), 플루오레닐, 페난트릴, 트리페닐레닐, 피렌일, 페릴렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란텐일 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, 퓨라잔일, 피리딜, 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, 피리딜 N-옥사이드, 퀴놀릴 N-옥사이드), 이들의 4차 염 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다.

[0042] 또한, 본 발명에 기재되어 있는 "(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬기"는 (C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>)알킬 또는 (C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>)알킬을 포함하고, "(C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴기"는 (C<sub>6</sub>-C<sub>20</sub>)아릴 또는 (C<sub>6</sub>-C<sub>12</sub>)아릴을 포함한다. "(C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴기"는 (C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub>)헤테로아릴 또는 (C<sub>3</sub>-C<sub>12</sub>)헤테로아릴을 포함하고, "(C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬기"는 (C<sub>3</sub>-C<sub>20</sub>)시클로알킬 또는 (C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>)시클로알킬을 포함한다. "(C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>)알케닐 또는 알키닐"기는 (C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>)알케닐 또는 알키닐, (C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>)알케닐 또는 알키닐을 포함한다.

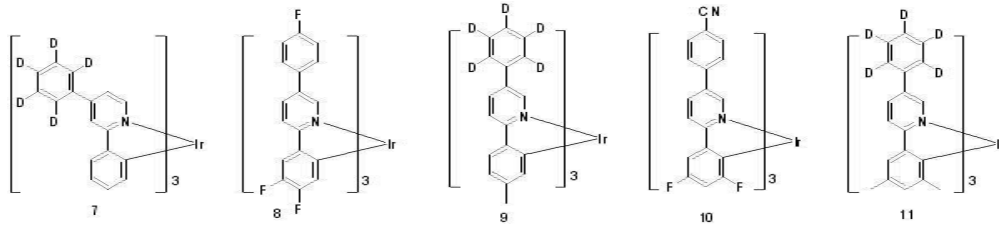
[0043] 또한 본 발명에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 '치환'은 비치환된 치환기에 더 치환되는 경우를 뜻하며, 더 치환되는 치환기는 서로 독립적으로 중수소, 할로젠, 할로젠이 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴이 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬, R<sub>91</sub>R<sub>92</sub>R<sub>93</sub>Si-, (C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>)알케닐, (C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>)알키닐, 시아노, 카바졸릴, NR<sub>94</sub>R<sub>95</sub>, BR<sub>96</sub>R<sub>97</sub>, PR<sub>98</sub>R<sub>99</sub>, P(=O)R<sub>100</sub>R<sub>101</sub>, (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아르(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬(C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, R<sub>102</sub>S-, R<sub>103</sub>O-, R<sub>104</sub>C(=O)-, R<sub>105</sub>C(=O)O-, 카르복실, 나이트로 또는 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이고, R<sub>91</sub> 내지 R<sub>103</sub>은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬이거나 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)알킬렌 또는 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자로 치환될 수 있으며; R<sub>104</sub> 및 R<sub>105</sub>는 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알콕시, (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴 또는 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴옥시인 것을 의미한다.

[0044] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 하기의 구조를 갖는 화합물로 예시되며, 그렇다고 해서 이들 화합물로 한정되는 것은 아니다:

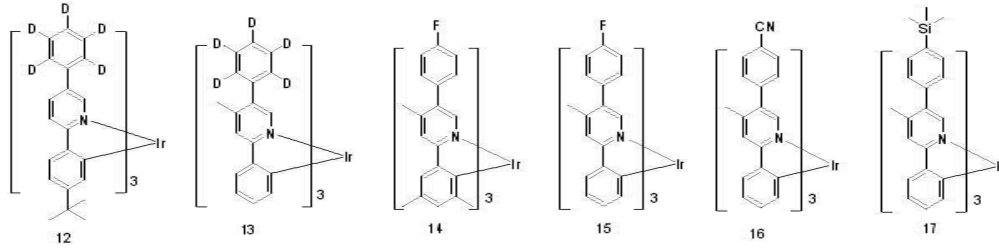


[0045]

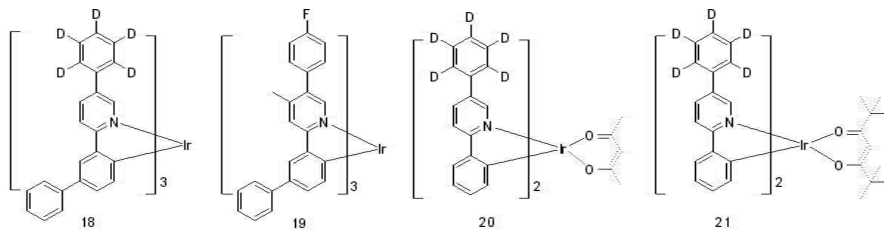
[0046]



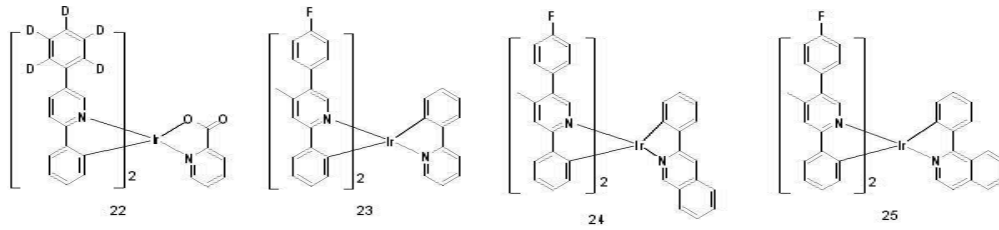
[0047]



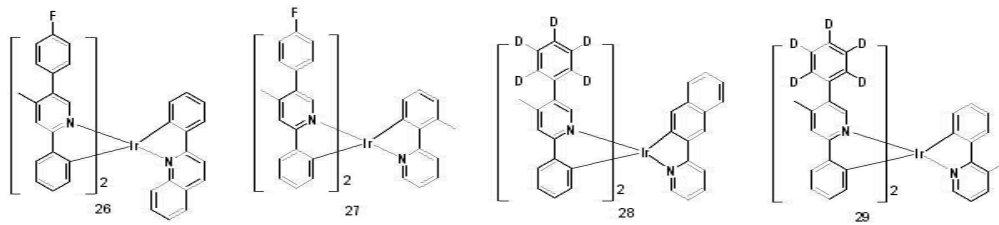
[0048]



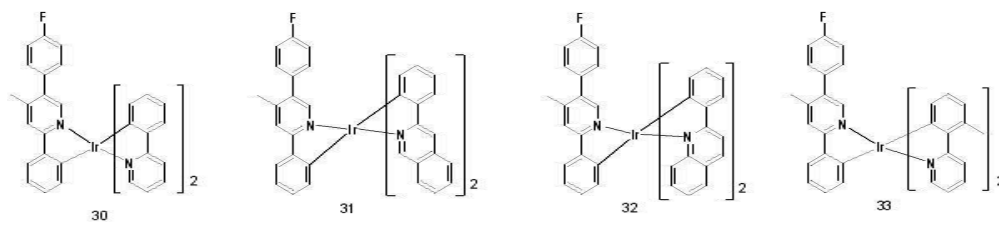
[0049]



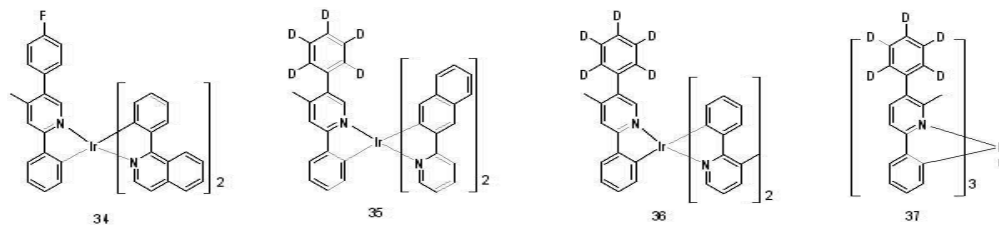
[0050]

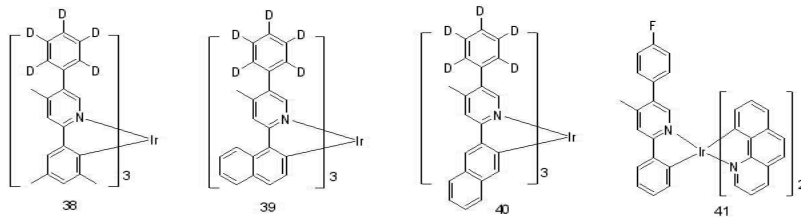


[0051]

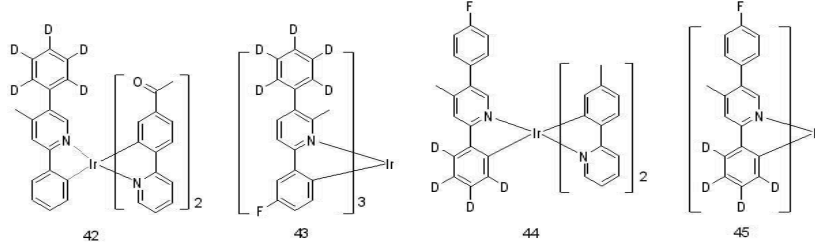


[0052]





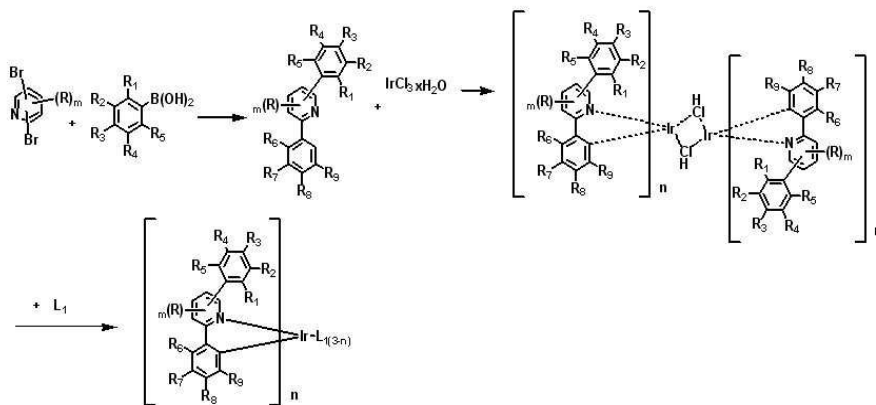
[0053]



[0054]

[0055] 상기 화학식 I의 화합물은 하기 반응식 1에 나타난 바와 같이, 제조될 수 있으며, 하기의 제조방법이 화학식 I의 유기 발광 화합물을 제조하는 방법을 한정하는 것은 아니며, 하기의 제조방법의 변형은 당업자에게 자명할 것이다.

[0056] [반응식 1]



[0057]

[0058] 상기 반응식 1에서

[0059]  $L_1$ , R, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub> 내지 R<sub>9</sub>, n 및 m은 상기 화학식 I에서의 정의와 동일하다.

[0060] 또한, 본 발명은 상기한 화학식 I의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

[0061] 이러한 유기 전계 발광 소자는, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어져 있으며, 상기 유기물층은 적어도 상기 화학식 I의 유기 발광 화합물이 포함된 층을 포함한다.

[0062] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 화학식 I의 유기 발광 화합물을 포함하고, 동시에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있으며, 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물의 구체적인 예는 특허출원 제10-2008-0060393호의 식별번호<212> 내지 <224>에 예시되어 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0063] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 I의 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.

- [0064] 본 발명의 화학식 I의 유기 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 서브픽셀로 하고, Ir, Pt, Pd, Rh, Re, Os, Tl, Pb, Bi, In, Sn, Sb, Te, Au 및 Ag로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 금속화합물을 포함하는 서브픽셀 하나 이상을 동시에 병렬로 패터닝한 독립발광방식의 픽셀구조를 가진 유기 전계 발광 소자를 구현할 수도 있다.
- [0065] 또한, 상기 유기물층에 상기 유기 전계 발광 화합물 이외에 적색, 녹색 또는 청색 발광 화합물을 포함하는 유기 발광층 하나 이상을 동시에 포함하여 백색 발광을 하는 유기 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.
- [0066] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 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 할로겐화 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, 할로겐화 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.
- [0067] 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 발광 소자를 제작할 수 있다.

**발명의 효과**

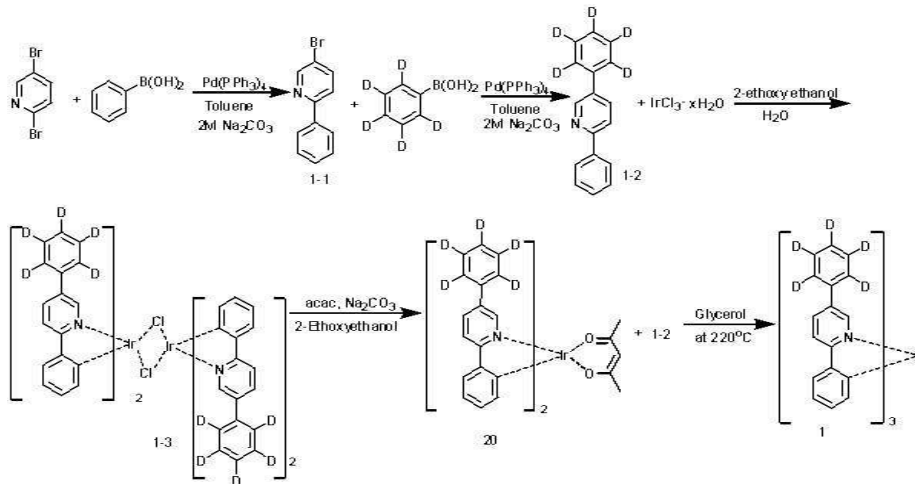
- [0068] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 특히 발광층의 도판트 재료로서 이용한 유기 발광 소자는 발광 효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 우수한 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

- [0069] 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.

- [0070] [제조예 1]

[0071] 화합물 1의 제조



[0072]

[0073] 화합물 1-1의 제조

[0074] 2,5-디브로모피리딘 5 g(21 mmol), 페닐보로닉엑시드(phenyl boronic acid) 2.6 g(21 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1.3 g(1.1 mmol)을 질소 존재하에서, 톨루엔 50 mL, 에탄올 25 mL, 2 M 탄산나트륨 25 mL에 녹인 다음 120°C로 환류 교반하였다. 2시간 후 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물 1-1 2.6 g(11 mmol)을 얻었다.

[0075] 화합물 1-2의 제조

[0076] 화합물 1-1 2.6 g(11 mmol), d<sup>5</sup>-페닐보로닉엑시드 1.8 g(13 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.7 g(0.6 mmol)을 질소 존재하에서, 톨루엔 40 mL, 에탄올 20 mL, 2 M 탄산나트륨 20 mL에 녹인 다음 120°C로 환류 교반하였다. 2시간 후 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물 1-2 2.2 g(9.3 mmol)을 얻었다.

[0077] 화합물 1-3의 제조

[0078] 화합물 1-2 2.2 g(9.3 mmol)과 이리듐클로라이드(IrCl<sub>3</sub>) 1.1 g(4.2 mmol), 2-에톡시에탄올 45 mL, 증류수 15 mL을 넣고 24시간 동안 환류교반하였다. 반응이 완결되면 실온으로 냉각하고 침전물을 여과하였다. 얻어진 고체를 물과 메탄올로 씻어주고, 헥산으로 재결정하여 표제 화합물 1-3 1.9 g(1.4 mmol)를 얻었다.

[0079] 화합물 20의 제조

[0080] 화합물 1-3 1.9 g(1.4 mmol), 탄산나트륨 0.82 g(8.4 mmol), 2,4-펜탄디온 2.3 ml(4.2 mmol)을 2-에톡시에탄올 30 mL에 녹인 후 5시간 동안 환류교반하였다. 반응이 종결되면 실온으로 냉각하고 이때 생성된 고체침전물을 여과한 다음 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 분리, 재결정하여 노란색 결정의 표제 화합물 20 0.67 g (0.9 mmol)을 얻었다.

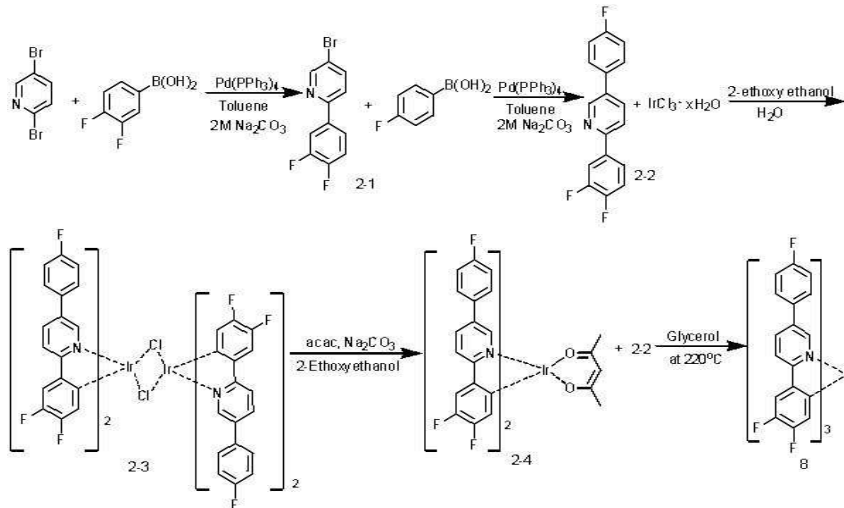
[0081] 화합물 1의 제조

[0082] 화합물 20 1.4 g(1.8 mmol), 화합물 1-2 0.85 g(3.6 mmol), 글리세롤 20 mL를 220°C에서 12시간 환류교반하여 실온으로 냉각한다. 그 혼합물을 물과 메탄올로 씻고 메틸렌클로라이드로 녹여 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 노란색 결정의 화학식으로 표시되는 이리듐 착화합물의 결정 화합물 1 0.8 g(0.9 mmol)을 얻었다.

[0083] <sup>1</sup>H NMR(CDCl<sub>3</sub>, 200 MHz) δ = 7.47(3H, m), 7.53~7.54(6H, m), 7.69(3H, m), 8.03(3H, m), 8.3(3H, m), 8.78(3H, m); MS/FAB 실측치 899, 계산치 898.16

[0084] [제조예 2]

[0085] 화합물 8의 제조



[0086]

[0087] 화합물 2-1의 제조

[0088] 2,5-디브로모피리딘 5 g(21 mmol), 3,4-디플루오로페닐보로닉엑시드 (3,4-디플루오로페닐보로닉엑시드) 3.3 g(21 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1.3 g(1.1 mmol)을 질소 존재 하에서, 톨루엔 50 mL, 에탄올 25 mL, 2 M 탄산나트륨 25 mL에 녹인 다음 120℃로 환류 교반하였다. 2시간 후 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물 2-1 2.6 g(9.6 mmol)을 얻었다.

[0089] 화합물 2-2의 제조

[0090] 상기 제조한 화합물 2-1 2.6 g(11 mmol), 4-플루오로페닐보로닉엑시드 1.6 g(11.3 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.7 g(0.52 mmol)을 질소 존재하에서, 톨루엔 40 mL, 에탄올 20 mL, 2 M 탄산나트륨 20 mL에 녹인 다음 120℃로 환류 교반하였다. 2시간 후 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물 2-2 2.3 g(8.6 mmol)을 얻었다.

[0091] 화합물 2-3의 제조

[0092] 화합물 2-2 2.3 g(8.6 mmol)과 이리듐클로라이드(IrCl<sub>3</sub>) 1.1 g(3.9 mmol), 2-에톡시에탄올 45 mL, 증류수 15 mL을 넣고 24시간 동안 환류교반하였다. 반응이 완결되면 실온으로 냉각하고 침전물을 여과하였다. 얻어진 고체를 물과 메탄올로 씻어주고, 핵산으로 재결정하여 표제 화합물 2-3 2.7 g(1.7 mmol)를 얻었다.

[0093] 화합물 2-4의 제조

[0094] 화합물 2-3 1.9 g(1.7 mmol), 탄산나트륨 0.82 g(8.5 mmol), 2,4-펜탄디온 2.3 ml(4.3 mmol)을 2-에톡시에탄올 30 mL에 녹인 후 5시간 동안 환류교반하였다. 반응이 종결되면 실온으로 냉각하고 이때 생성된 고체침전물을 여과한 다음 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 분리, 재결정하여 노란색 결정의 표제 화합물 2-4 0.8 g (0.93 mmol)을 얻었다.

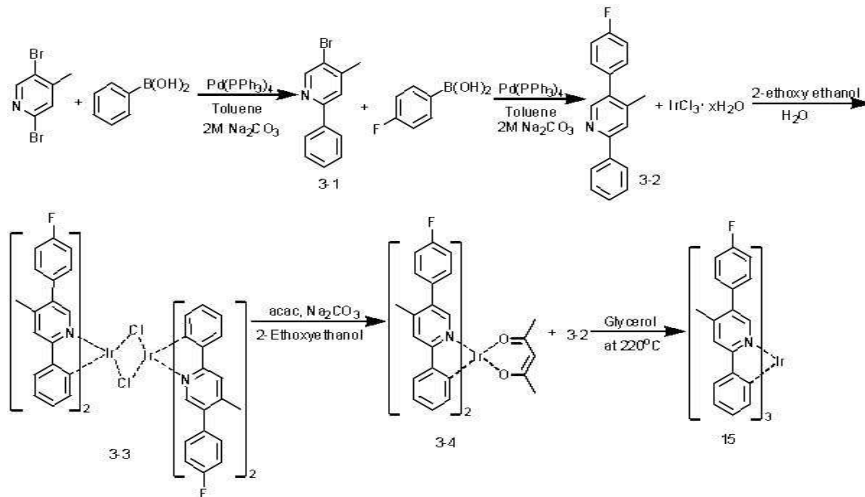
[0095] 화합물 8의 제조

[0096] 화합물 2-4 1.4 g(1.8 mmol), 화합물 2-2 0.85 g(3.6 mmol), 글리세롤 20 mL를 220℃에서 12시간 환류교반하여 실온으로 냉각한다. 그 혼합물을 물과 메탄올로 씻고 메틸렌클로라이드로 녹여 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 노란색 결정의 표제 화합물 8 0.8 g(0.9 mmol)을 얻었다.

[0097] <sup>1</sup>H NMR(CDCl<sub>3</sub>, 200 MHz) δ = 7.22(3H, m), 7.3(6H, m), 7.39(6H, m), 7.69(3H, m), 8.01~8.03(6H, m), 8.78(3H, m); MS/FAB 실측치 1045, 계산치 1044.98

[0098] [제조예 3]

[0099] 화합물 15의 제조



[0100]

[0101] 화합물 3-1의 제조

[0102] 2,5-디브로모-4-메틸피리딘 5 g(21 mmol), 페닐보로닉엑시드 2.6 g(21 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1.3 g(1.1 mmol)을 질소 존재하에서, 톨루엔 50 mL, 에탄올 25 mL, 2 M 탄산나트륨 25 mL에 녹인 다음 120°C로 환류 교반하였다. 2시간 후 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물 3-1 4 g(17 mmol)을 얻었다.

[0103] 화합물 3-2의 제조

[0104] 화합물 3-1 4 g(17 mmol), 4-플루오로페닐보로닉엑시드 2.8 g(20 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1 g(0.9 mmol)을 질소 존재하에서, 톨루엔 80 mL, 에탄올 40 mL, 2 M 탄산나트륨 40 mL에 녹인 다음 120°C로 환류 교반하였다. 2시간 후 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물 3-2 4 g(15 mmol)을 얻었다.

[0105] 화합물 3-3의 제조

[0106] 화합물 3-2 4 g(15 mmol)과 이리듐클로라이드(IrCl<sub>3</sub>) 2 g(6.8 mmol), 2-에톡시에탄올 90 mL, 증류수 30 mL을 넣고 24시간 동안 환류교반하였다. 반응이 완결되면 실온으로 냉각하고 침전물을 여과하였다. 얻어진 고체를 물과 메탄올로 씻어주고, 핵산으로 재결정하여 표제 화합물 3-3 3 g(2 mmol)를 얻었다.

[0107] 화합물 3-4의 제조

[0108] 화합물 3-3 3 g(2 mmol), 탄산나트륨 1.3 g(12 mmol), 2,4-펜탄디온 3.7 ml(6 mmol)을 2-에톡시에탄올 30 mL에 녹인 후 5시간 동안 환류교반하였다. 반응이 종결되면 실온으로 냉각하고 이때 생성된 고체침전물을 여과한 다음 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 분리, 재결정하여 노란색 결정의 표제 화합물 3-4 1.5 g (1.8 mmol)을 얻었다.

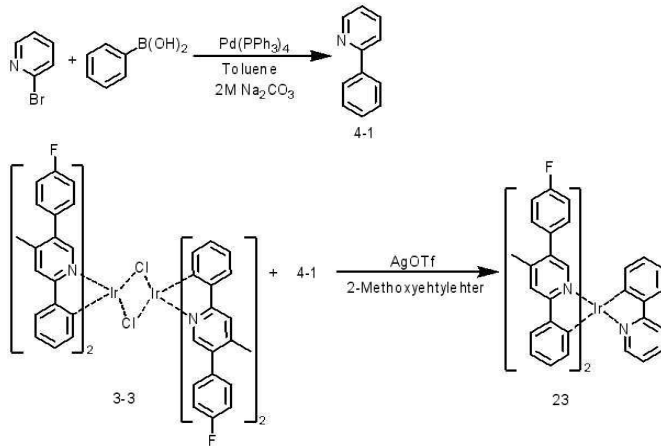
[0109] 화합물 15의 제조

[0110] 화합물 3-4 1.5 g(1.8 mmol), 화합물 3-2 1 g(3.6 mmol), 글리세롤 20 mL를 220°C에서 12시간 환류교반하여 실온으로 냉각한다. 그 혼합물을 물과 메탄올로 씻고 메틸렌클로라이드로 녹여 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 노란색 결정의 화학식으로 표시되는 이리듐 착화합물의 결정 화합물 15 1 g(1 mmol)을 얻었다.

[0111] <sup>1</sup>H NMR(CDCl<sub>3</sub>, 200 MHz) δ = 2.61 (9H, s), 7.3 (6H, m), 7.39 (6H, m), 7.47 (3H, m), 7.53~7.54 (6H, m), 8.02 (3H, s), 8.3 (3H, m), 8.79 (3H, s); MS/FAB 실측치 980, 계산치 979.12

[0112] [제조예 4]

[0113] 화합물 23의 제조



[0114]

[0115] 화합물 4-1의 제조

[0116] 2-브로모피리딘 5 g(21 mmol), 페닐보로닉엑시드 2.6 g(21 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1.3 g(1.1 mmol)을 질소 존재하에서, 톨루엔 50 mL, 에탄올 25 mL, 2 M 탄산나트륨 25 mL에 녹인 다음 120°C로 환류 교반하였다. 2시간 후 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물 4-1 4 g(17 mmol)을 얻었다.

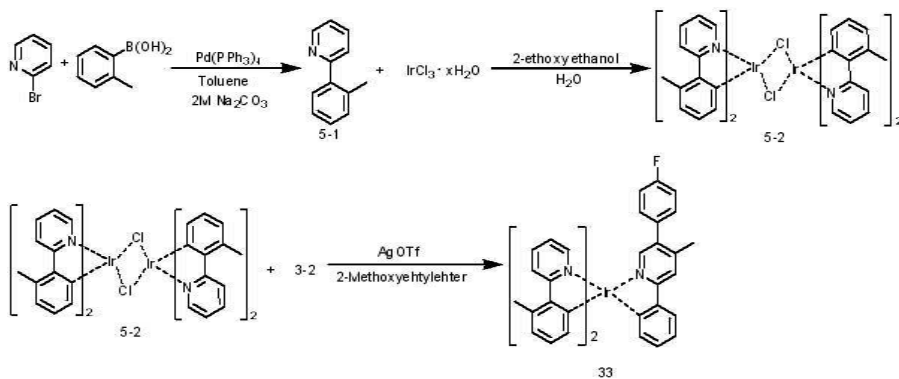
[0117] 화합물 23의 제조

[0118] 화합물 3-3 14 g(13 mmol)와 화합물 4-1 9.8 g(39 mmol), AgCF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub> 10 g(39 mmol), 2-메톡시-에틸에테르 50 mL을 12시간 동안 환류교반하고 실온으로 냉각한다. 그 혼합물을 물과 메탄올로 씻고 메탄올로 녹여 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 붉은색 결정의 화학식으로 표시되는 이리듐 착화합물의 결정 화합물 23 3.5 g(4.5 mmol)을 얻었다.

[0119] <sup>1</sup>H NMR(CDC<sub>3</sub>, 200 MHz) δ = 2.61(6H, s), 7.1(1H, m), 7.3(4H, m), 7.39(4H, m), 7.47~7.54(10H, m), 7.97(1H, m), 8.02(2H, s), 8.3(3H, m), 8.56(1H, m), 8.79(2H, s); MS/FAB 실측치 872, 계산치 871.01

[0120] [제조예 5]

[0121] 화합물 33의 제조



[0122]

[0123] 화합물 5-1의 제조

[0124] 2-브로모피리딘 5 g(21 mmol), o-톨일보로닉엑시드(o-tolylboronic acid) 2.6 g(21 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1.3 g(1.1 mmol)을 질소 존재하에서, 톨루엔 50 mL, 에탄올 25 mL, 2 M 탄산나트륨 25 mL에 녹인 다음 120°C로 환류 교반하였다. 2시간 후 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물 5-1 4 g(17 mmol)을 얻었다.

[0125] 화합물 5-2의 제조

[0126] 화합물 5-1 4 g(15 mmol)과 이리듐클로라이드(IrCl<sub>3</sub>) 2 g(6.8 mmol), 2-에톡시에탄올 90 mL, 증류수 30 mL을 넣고 24시간 동안 환류교반하였다. 반응이 완결되면 실온으로 냉각하고 침전물을 여과하였다. 얻어진 고체를 물과 메탄올로 씻어주고, 헥산으로 재결정하여 표제 화합물 5-2 3 g(2 mmol)을 얻었다.

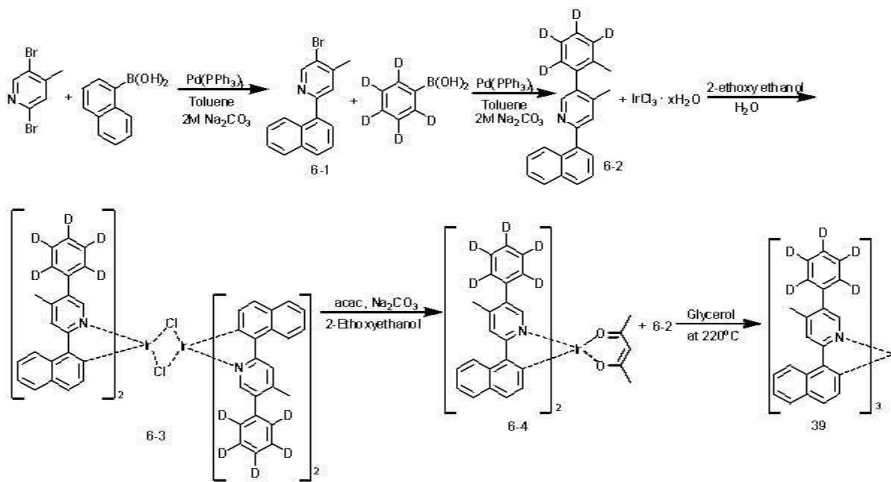
[0127] 화합물 33의 제조

[0128] 화합물 5-2 14 g(13 mmol)와 화합물 3-2 9.8 g(39 mmol), AgCF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub> 10 g(39 mmol), 2-메톡시-에틸에테르 50 mL을 12시간 동안 환류교반하고 실온으로 냉각한다. 그 혼합물을 물과 메탄올로 씻고 메탄올로 녹여 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 붉은색 결정의 화학식으로 표시되는 이리듐 착화합물의 결정 화합물 33 3.5 g(4.5 mmol)을 얻었다.

[0129] <sup>1</sup>H NMR(CDC<sub>13</sub>, 200 MHz) δ = 2.59(6H, s), 2.61(3H, s), 7(2H, m), 7.3~7.39(10H, m), 7.47~7.54(5H, m), 7.97(2H, m), 8.02(1H, s), 8.3(1H, m), 8.56(2H, m), 8.79(1H, s); MS/FAB 실측치 791, 계산치 790.95

[0130] [제조예 6]

[0131] 화합물 39의 제조



[0132]

[0133] 화합물 6-1의 제조

[0134] 2,5-디브로모-4-메틸피리딘 5 g(21 mmol), 나프탈렌-1-일보로닉엑시드 2.6 g(21 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1.3 g(1.1 mmol)을 질소 존재하에서, 톨루엔 50 mL, 에탄올 25 mL, 2 M 탄산나트륨 25 mL에 녹인 다음 120°C로 환류 교반하였다. 2시간 후 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물 6-1 2.6 g(11 mmol)을 얻었다.

[0135] 화합물 6-2의 제조

[0136] 화합물 6-1 2.6 g(11 mmol), d<sup>5</sup>-페닐보로닉엑시드 1.8 g(13 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.7 g(0.6 mmol)을 질소 존재하에서, 톨루엔 40 mL, 에탄올 20 mL, 2 M 탄산나트륨 20 mL에 녹인 다음 120°C로 환류 교반하였다. 2시간 후 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물 6-2 2.2 g(9.3 mmol)을 얻었다.

[0137] 화합물 6-3의 제조

[0138] 화합물 6-2 2.2 g(9.3 mmol)과 이리듐클로라이드(IrCl<sub>3</sub>) 1.1 g(4.2 mmol), 2-에톡시에탄올 45 mL, 증류수 15 mL을 넣고 24시간 동안 환류교반하였다. 반응이 완결되면 실온으로 냉각하고 침전물을 여과하였다. 얻어진 고체를 물과 메탄올로 씻어주고, 헥산으로 재결정하여 표제 화합물 6-3 1.9 g(1.4 mmol)을 얻었다.

[0139] 화합물 6-4의 제조

[0140] 화합물 6-3 1.9 g(1.4 mmol), 탄산나트륨 0.82 g(8.4 mmol), 2,4-펜탄디온 2.3 ml(4.2 mmol)을 2-에톡시에탄올 30 mL에 녹인 후 5시간 동안 환류교반하였다. 반응이 종결되면 실온으로 냉각하고 이때 생성된 고체 침전물을

여과한 다음 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 분리, 재결정하여 노란색 결정의 표제 화합물 **6-4** 0.67 g (0.9 mmol)을 얻었다.

[0141] **화합물 39의 제조**

[0142] 화합물 **6-4** 1.4 g(1.8 mmol), 화합물 **6-2** 0.85 g(3.6 mmol), 글리세롤 20 mL를 220℃에서 12시간 환류교반하여 실온으로 냉각한다. 그 혼합물을 물과 메탄올로 씻고 메틸렌클로라이드로 녹여 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 노란색 결정의 이리듐 착화합물의 결정 화합물 **1** 0.8 g(0.9 mmol)을 얻었다.

[0143]  $^1\text{H}$  NMR( $\text{CDCl}_3$ , 200 MHz)  $\delta$  = 2.61(9H, s), 7.55(6H, m), 7.69(3H, m), 8.02(3H, s), 8.08~8.1(6H, m), 8.55(3H, m), 8.79(3H, s); MS/FAB 실측치 1091, 계산치 1090.42

[0144] **[실시예 1] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작**

[0145] 본 발명의 발광 재료를 이용한 구조의 OLED 소자를 제작하였다. 우선, OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막(15  $\Omega/\square$ )을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로, 진공 증착 장비의 기관 폴더에 ITO 기관을 설치하고, 진공 증착 장비 내의 셀에 2-TNATA[4,4',4"-tris(N,N-(2-나프틸)-페닐아미노)트리페닐아민]을 넣고, 챔버 내의 진공도가  $10^{-6}$  torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 2-TNATA를 증발시켜 ITO 기관 상에 60 nm 두께의 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 NPB[N,N'-bis( $\alpha$ -나프틸)-N,N'-디페닐-4,4'-디아민]을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 NBP을 증발시켜 정공주입층 위에 20 nm 두께의 정공전달층을 증착하였다. 정공주입층, 정공전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 CBP[4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐]을 넣고, 또 다른 셀에는 본 발명의 화합물 **11**을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 4 내지 20%중량으로 도핑함으로써 상기 정공 전달층 위에 30 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 상기 발광층 위에 정공차단층으로 비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)(*p*-페닐페놀레이트)알루미늄(III) (BAIq)을 10nm의 두께로 증착시키고, 이어서 전자전달층으로써 Alq[tris(8-hydroxyquinoline)-aluminum(III)]를 20 nm 두께로 증착하였다. 다음으로 전자 전달층으로써 Alq[tris(8-히드록시퀴나졸린)-알루미늄(III)] 를 20 nm 두께로 증착한 다음, 전자주입층으로 Liq[리튬 퀴놀레이트, lithium quinolate]를 1 내지 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 150 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제작하였다.

[0146] 재료 별로 각 화합물은  $10^{-6}$  torr 하에서 진공 승화 정제하여 OLED 발광재료로 사용하였다.

[0147] 그 결과, 6.8 V의 전압에서 3.6 mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 1080 cd/m<sup>2</sup>의 녹색발광이 확인되었다.

[0148] **[실시예 2]본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작**

[0149] 도판트 재료로서 본 발명의 화합물 **13**을 이용한 것 외에는, 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0150] 그 결과, 6.7 V의 전압에서 3.5 mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 1075 cd/m<sup>2</sup>의 녹색발광이 확인되었다.

[0151] **[실시예 3]본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작**

[0152] 도판트 재료로서 본 발명의 화합물 **20**을 이용한 것 외에는, 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0153] 그 결과, 6.8 V의 전압에서 3.3 mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 1085 cd/m<sup>2</sup>의 녹색발광이 확인되었다.

[0154] **[실시예 4]본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작**

[0155] 도판트 재료로서 본 발명의 화합물 **36**를 이용한 것 외에는, 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0156] 그 결과, 6.7 V의 전압에서 3.5 mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 1070 cd/m<sup>2</sup>의 녹색발광이 확인되었다.

- [0157] **[비교예 1]종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자의 발광 특성**
- [0158] 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 도판트 재료로서 본 발명의 화합물 대신 Ir(ppy)<sub>3</sub>[tris(2-페닐피리딘)이리듐]을 이용한 것 외에는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0159] 그 결과, 7.5 V의 전압에서 3.8 mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 1000 cd/m<sup>2</sup>의 녹색발광이 확인되었다.
- [0160] 본 발명에서 개발한 유기 발광 화합물들의 발광 특성이 종래의 재료 대비 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다. 또한 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 발광용 도판트 재료로 사용한 소자는 LUMO값이 낮아져 이로 인해 호스트와 매칭이 잘 되어 효율, 수명 등의 특성이 뛰어날 뿐만 아니라 구동전압을 강하시켜줌으로써 전력 효율의 상승을 유도하여 소비전력을 개선시킬 수 있었다.

专利名称(译)	标题：有机电致发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020120032054A</a>	公开(公告)日	2012-04-05
申请号	KR1020100072906	申请日	2010-07-28
[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 HYUN 김현 SHIN HYO NIM 신호님 NA HONG YOEP 나홍엽 KWON HYUCK JOO 권혁주 LEE KYUNG JOO 이경주 KIM BONG OK 김봉옥 KIM SUNG MIN 김성민		
发明人	김현 신호님 나홍엽 권혁주 이경주 김봉옥 김성민		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 C07F15/00		
CPC分类号	H01L51/0085 C07F15/0033 C09K2211/1025 C09K2211/185 H01L2251/30 Y10S428/917		
代理人(译)	李昌勋		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

#### 摘要(译)

用途：提供一种有机电致发光化合物，具有优异的发光效率与现有掺杂剂材料的寿命比较，并具有适度的色彩配位。组成：有机电致发光化合物在化学式1中。在化学式1中，L1是有机配体，R1-R5分别是氬，卤素，取代或未取代的C3-30环烷基，取代或未取代的5-7元杂环烷基，氰基，硝基，BR21R22，PR23R24，P(=O)R25R26，R27R28R29Si-，取代或未取代的C6-30和C1-30烷基。R21-R26分别是取代或未取代的C1-30烷基，取代或未取代的C6-30芳基，或取代或未取代的C3-30杂芳基。R27-R29分别是取代或未取代的C1-30烷基，取代或未取代的C6-30芳基，或取代或未取代的C3-30杂芳基。

