



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2012년09월18일
 (11) 등록번호 10-1184159
 (24) 등록일자 2012년09월12일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/54* (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2009-0134495
 (22) 출원일자 2009년12월30일
 심사청구일자 2009년12월30일
 (65) 공개번호 10-2011-0077831
 (43) 공개일자 2011년07월07일
 (56) 선행기술조사문헌
 KR1020080047209 A*
 *는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
주식회사 두산
 서울특별시 중구 장충단로 275 (을지로6가)
 (72) 발명자
신창주
 경기도 용인시 수지구 포은대로362번길 5-14, 30
 3호 (풍덕천동)
홍진석
 경기도 수원시 장안구 창훈로40번길 27-9, 302호
 (연무동)
 (뒷면에 계속)
 (74) 대리인
조우제, 김기효

전체 청구항 수 : 총 7 항

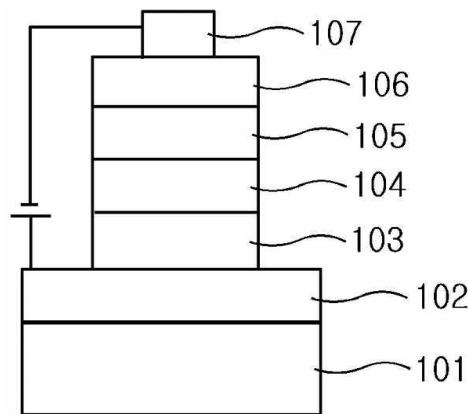
심사관 : 오세주

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

(57) 요약

본 발명은 신규한 유기 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 구체적으로는 하나 이상의 플루오란텐 유도체 모이어티(moiety)를 가지면서, 대칭 혹은 비대칭 분자 구조를 가지는 화합물, 및 상기 화합물을 유기 전계 발광 소자에 적용, 바람직하게는 정공 주입층 재료, 정공 수송층 재료, 형광층 혹은 인광층의 호스트 재료, 전자 수송 및 주입 재료로 적용하여 발광효율, 휘도, 열적 안정성, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

김태형

경기도 용인시 수지구 만현로 79, 만현마을 현대아
이파크 501동 703호 (상현동)

김경수

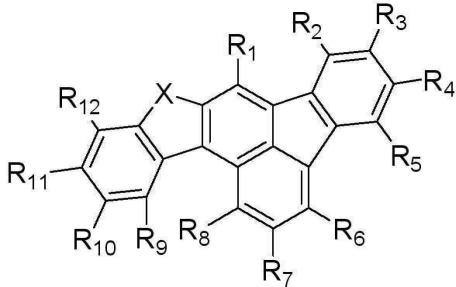
대전광역시 유성구 노은로 353, 송림마을 305동
1905호 (하기동)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

<화학식 1>



상기 식에서,

X는 CR₁₃R₁₄, O, S, S(=O), S(=O)₂ 및 SiR₁₆R₁₇로 이루어진 군에서 선택되고,

R₁ 내지 R₁₄, R₁₆ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 $\left[\text{L} \right]_n \left[\text{Q}_1 \right]_{m_1} \left[\text{Q}_2 \right]_{m_2}$ 이되, n은 0 내지 10의 정수이고, m₁은 0 내지 9의 정수이며, m₂는 1이며;

하나 이상의 L은 각각 독립적으로 CA¹A², NA³, O, S 및 SiA⁴A⁵로 이루어진 군에서 선택되며, A¹ 내지 A⁵는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1-C40 알킬, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알케닐, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알키닐, 치환 또는 비치환된 C3-C40 사이클로알킬, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로사이클로알킬, (치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴)C1-C40 알킬, 치환 또는 비치환된 C1-C40 알콕시, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C60 디아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴옥시, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 탄화수소, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 헤테로환이고, A¹과 A², A⁴와 A⁵는 서로 결합하여 환상 고리를 형성할 수 있으며;

하나 이상의 Q₁은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1-C40 알킬렌, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알케닐렌, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알키닐렌, 치환 또는 비치환된 C3-C40 사이클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로사이클로알킬렌, (치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴) C1-C40 알킬렌, 치환 또는 비치환된 C6-C60의 -N(아릴)-, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴렌, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌, 치환 또는 비치환된 C1-C30 알킬실릴렌, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴실릴렌, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 탄화수소, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 헤테로환이고;

Q₂는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1-C40 알킬, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알케닐, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알키닐, 치환 또는 비치환된 C3-C40 사이클로알킬, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로사이클로알킬, (치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴) C1-C40 알킬, 치환 또는 비치환된 C1-C40 알콕시, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C60 디아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴옥시, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 C1-C30 알킬실릴, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴실릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 탄화수소, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 헤테로환이며;

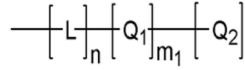
R₁ 내지 R₁₂는 인접하는 기와 서로 결합하여 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고

리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있으며;

R₁₃과 R₁₄, R₁₆과 R₁₇은 서로 결합하여 환상 고리를 형성할 수 있다.

청구항 2

제 1 항에 있어서,



R₁ 내지 R₁₄, R₁₆ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 n이 0이고 m₁이 0 내지 9의 정수이며, m₂가 1인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 R₁ 내지 R₁₄ 및 R₁₆ 내지 R₁₇의 알킬, 알케닐, 알키닐, 사이클로알킬, 헤테로사이클로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴아민, 디아릴아민, 아릴옥시, 아릴, 헤테로아릴, 알킬실릴, 아릴실릴, 축합 폴리사이클릭 방향족 탄화수소, 및 축합 폴리사이클릭 방향족 헤테로환의 치환기는 각각 독립적으로 중수소, C1-C20 알킬, C6-C20 아릴, C6-C20 아릴아민, C6-C20 디아릴아민, 핵원자수 5 내지 30의 헤테로아릴, 핵원자수 5 내지 30의 축합 폴리사이클릭 방향족 탄화수소, 및 핵원자수 5 내지 30의 축합 폴리사이클릭 방향족 헤테로환으로 구성된 군으로부터 선택된 1 이상인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 4

양극; 음극; 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서,

상기 유기층 중 적어도 하나는 제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 5

제 4 항에 있어서,

상기 유기층은 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층, 정공 주입층 및 정공 수송층으로 구성된 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 6

제 4 항에 있어서,

상기 화합물은 인광 호스트 물질 또는 형광 호스트 물질인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 7

제 4 항에 있어서,

상기 화합물은 형광 게스트 물질인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

명세서

발명의 상세한 설명

기술분야

본 발명은 신규한 유기 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 구체적으로는 하나 이상의 플루오란텐 유도체 모이어티(moiety)를 가지면서, 대칭 혹은 비대칭 분자 구조를 가지는 화합물, 및 상기

[0001]

화합물을 유기 전계 발광 소자에 적용, 바람직하게는 정공 주입층 재료, 정공 수송층 재료, 형광 혹은 인광층의 호스트 재료, 전자 주입층 재료 및/또는 전자 수송층 재료로 적용하여 발광효율, 휘도, 열적 안정성, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

- [0002] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질에 전기에너지를 가했을 때 빛이 나타나는 현상을 말한다. 즉, 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 유기층을 위치시키고 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기층에 주입되게 된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되고, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.
- [0003] 유기 전계 발광(electroluminescent, EL) 소자(이하, 간단히 '유기 EL 소자'로 칭함)는 자발광 표시 소자이므로 명암비가 우수하고 시야각이 넓으며 응답시간이 빨라 고성능 디스플레이에 적합하다.
- [0004] 1950년대 Bernanose의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 EL 소자에 대한 연구는 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 EL 소자가 제시되었고, 고효율, 고수명의 유기 EL 소자를 만들기 위하여 소자 내 각각의 특징적인 유기물 층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.
- [0005] 유기 EL 소자를 효율적으로 만들기 위한 일 방법으로서 소자내의 유기층을 단층 대신 다층 구조로 제조하는 연구가 진행되어 왔다.
- [0006] 일반적으로 유기 EL 소자는 기판 상부에 양극(anode)이 형성되어 있고 양극 상부에 순차적으로 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 음극(cathode)이 형성되어 있는 박막 다층 구조로 되어 있다.
- [0007] 이렇게 유기 EL 소자를 다층으로 제작하는 이유는 정공과 전자의 이동속도가 상이하므로, 따라서 적절한 정공 주입층 및 수송층, 전자 수송층 및 주입층을 만들어 주면 정공과 전자가 효과적으로 전달될 수 있으며, 소자 내 정공과 전자의 균형이 이루어져 발광 효율을 높일 수 있기 때문이다.
- [0008] 전자 주입층에서 주입된 전자와 정공 주입층에서 전달된 정공은 발광층에서 재결합하여 엑시톤을 형성하게 되며 일중항 여기상태에서 기저 상태로 떨어지며 발광하는 것을 형광이라고 하고, 삼중항 여기상태에서 기저 상태로 떨어지는 발광을 인광이라고 한다. 이론적으로 캐리어가 발광층에서 재결합하여 엑시톤이 발생될 때 일중항과 삼중항 여기자의 비율이 1:3의 비율로 발생되게 되며, 인광을 이용할 경우 내부 양자 효율이 100%에 이를 수 있다.
- [0009] 전자 수송 재료에 관한 최초의 보고는 옥사디아졸 유도체(PBD)를 들 수 있다. 이후 트리아졸 유도체(TAZ) 및 페난트롤린 유도체(BCP)가 전자 수송성을 나타낸다고 보고되었다. 전자 수송층은 유기 단분자 물질로는 전자에 대한 안정도와 전자 이동 속도가 상대적으로 우수한 유기 금속 착체들이 좋은 후보들이며, 안정성이 우수하고 전자 친화도가 큰 Alq3가 가장 우수한 것으로 보고 되었으며 지금까지도 가장 기본적으로 사용되고 있다. 또한, 종래에 공지된 전자 수송용 물질로는 산요(Sanyo)사에서 발표한 플라본(flavon)유도체 또는 치소(Chisso)사의 게르마늄 및 실리콘 사이클로펜타디엔 유도체 등이 알려져 있다. (일본공개특허공보 제1998-017860호, 일본공개특허공보 제1999-087067호).
- [0010] 종래의 전자 주입 및 수송 물질로는 이미다졸기, 옥사졸기, 티아졸기를 가진 유기 단분자 물질들이 많이 보고되었다. 그러나 이러한 물질들이 전자수송 물질로 보고되기 이전에 모토롤라(Motorola)사의 EU 0700917 A2에 이러한 물질들의 금속착체 화합물들이 유기 EL 소자의 청색 발광층 또는 청록색 발광층으로의 적용이 이미 보고되었다.
- [0011] 1996년도에 코닥사에서 발표하고 미국 특허 제5,645,948호에 기재된 TPBI는 이미다졸기를 가진 대표적인 전자 수송 물질로 알려져 있으며, 그 구조는 벤젠의 1,3,5 위치에 세 개의 N-페닐 벤즈이미다졸기를 함유하고 기능적으로는 전자를 전달하는 능력뿐 아니라 발광층에서 넘어오는 정공을 차단하는 기능도 있는 것으로 보고되고 있으나, 실제 소자에 적용하기에는 열적 안정성이 낮은 문제점을 가지고 있다.
- [0012] 인광 호스트 재료로는 CBP(4,4-dicarbazolybiphenyl)등의 카바졸 고리 화합물 등이 사용되며, 인광 게스트 재료로는 Ir, Pt 등의 중원자가 포함된 금속 착체 화합물이 널리 사용되고 있다.
- [0013] 그러나 현재 사용되는 인광 호스트 재료인 CBP 의 경우 유리전이온도(Tg)가 110℃ 정도로 낮으며, 소자 내의 결정화가 쉽게 일어나 유기 EL 소자의 수명이 150시간 정도로 매우 짧은 단점이 있다.

발명의 내용

해결 하고자하는 과제

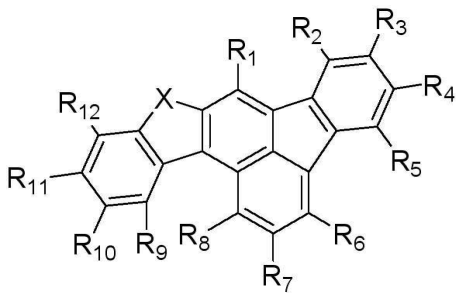
[0014] 따라서, 본 발명의 목적은 인광 호스트 물질, 형광 호스트 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 주입 물질 및/또는 전자 수송 물질로서 유기 EL 소자에 적용하여 구동전압을 낮추고, 발광효율, 휘도, 열적 안정성 및 소자 수명을 향상시킬 수 있는 플루오란텐 유도체 구조를 포함하는 신규 화합물을 제공하는 것이다.

[0015] 본 발명의 다른 목적은 상기 화합물을 이용한 유기 EL 소자를 제공하는 것이다.

과제 해결수단

[0016] 상기 목적을 달성하기 위하여 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

화학식 1

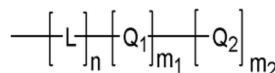


[0017]

[0018]

상기 식에서,

X는 CR₁₃R₁₄, O, S, S(=O), S(=O)₂ 및 SiR₁₆R₁₇로 이루어진 군에서 선택되고,



R₁ 내지 R₁₄, R₁₆ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 $\left[L \right]_n \left[Q_1 \right]_{m_1} \left[Q_2 \right]_{m_2}$ 이되, n은 0 내지 10의 정수이고, m₁은 0 내지 9의 정수이며, m₂는 1이며;

하나 이상의 L은 각각 독립적으로 CA¹A², NA³, O, S 및 SiA⁴A⁵로 이루어진 군에서 선택되며, A¹ 내지 A⁵는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1-C40 알킬, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알케닐, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알키닐, 치환 또는 비치환된 C3-C40 사이클로알킬, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로사이클로알킬, (치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴)C1-C40 알킬, 치환 또는 비치환된 C1-C40 알콕시, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C60 디아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴옥시, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 탄화수소, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 헤테로환이고, A¹과 A², A⁴와 A⁵는 서로 결합하여 환상 고리를 형성할 수 있으며;

하나 이상의 Q₁은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1-C40 알킬렌, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알케닐렌, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알키닐렌, 치환 또는 비치환된 C3-C40 사이클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로사이클로알킬렌, (치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴) C1-C40 알킬렌, 치환 또는 비치환된 C6-C60의 -N(아릴)-, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴렌, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌, 치환 또는 비치환된 C1-C30 알킬실릴렌, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴실릴렌, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 탄화수소, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 헤테로환이고;

Q₂는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1-C40 알킬, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알케닐, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알키닐, 치환 또는 비치환된 C3-C40 사이클로알킬, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로사

이클로알킬, (치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴) C1-C40 알킬, 치환 또는 비치환된 C1-C40 알콕시, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C60 디아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴옥시, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 C1-C30 알킬실릴, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴실릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 탄화수소, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 헤테로환이며;

R₁ 내지 R₁₂는 인접하는 기와 서로 결합하여 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있으며;

R₁₃과 R₁₄, R₁₆과 R₁₇은 서로 결합하여 환상 고리를 형성할 수 있다.

[0019] 삭제

[0020] 삭제

[0021] 삭제

[0022] 삭제

[0023] 삭제

[0024] 삭제

[0025] 삭제

[0026] 또한, 본 발명은, 양극; 음극; 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 하나 이상의 유기층을 포함하는 유기 EL 소자로서, 상기 유기층 중 적어도 하나는 상술된 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 EL 소자를 제공한다.

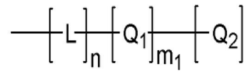
효 과

본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은 형광 특성 및 인광 특성을 모두 가질 수 있으며 열적 안정성이 우수하여 청색, 녹색, 적색의 형광 또는 인광 호스트 재료로 채택될 경우 저 전력, 고 효율, 고 휘도 및 향상된 내구성과 수명을 확보할 수 있다. 또한, 분자 내의 전자 특성 치환기와 정공 특성 치환기를 모두 포함함으로써, 양극과 음극 사이에 1층 이상의 유기층을 포함하는 유기 EL 소자의 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및/또는 전자 수송층 재료로도 응용될 수 있다. 따라서 본 발명의 화합물을 포함하는 유기 EL 소자는 발광성능 및 수명 면에서 크게 향상될 수 있어 풀 칼라 디스플레이 패널 등에 효과적으로 적용될 수 있다.

발명의 실시를 위한 구체적인 내용

[0028] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 하나 이상의 플루오란텐 유도체 모이어티(moiety)를 가지면서, 대칭 혹은 비대칭 분자 구조를 가지는 화합물로서, 인광 호스트 물질, 형광 호스트 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 주입 물질 및/또는 전자 수송 물질로서 유기 EL 소자에 사용될 수 있다.

[0029] 본 발명의 화학식 1의 화합물에서, X는 CR₁₃R₁₄, O, S, S(=O), S(=O)₂ 및 SiR₁₆R₁₇로 이루어진 군에서 선택된다.



R₁ 내지 R₁₄, R₁₆ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 내지 9의 정수이며, m₂는 1이며;

하나 이상의 L은 각각 독립적으로 CA¹A², NA³, O, S 및 SiA⁴A⁵로 이루어진 군에서 선택되며, A¹ 내지 A⁵는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1-C40 알킬, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알케닐, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알키닐, 치환 또는 비치환된 C3-C40 사이클로알킬, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로사이클로알킬, (치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴)C1-C40 알킬, 치환 또는 비치환된 C1-C40 알콕시, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C60 디아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴옥시, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 탄화수소, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 헤테로환이고, A¹과 A², A⁴와 A⁵는 서로 결합하여 환상 고리를 형성할 수 있으며;

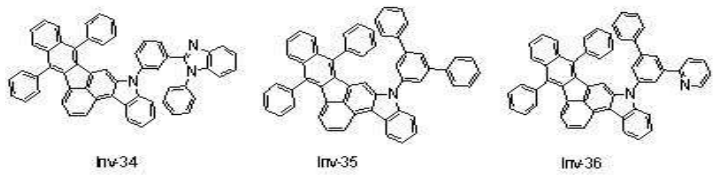
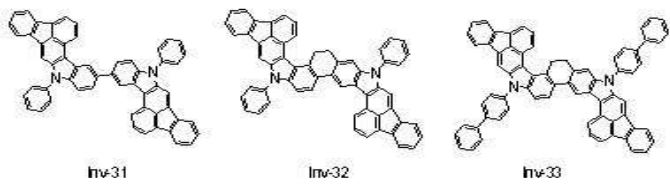
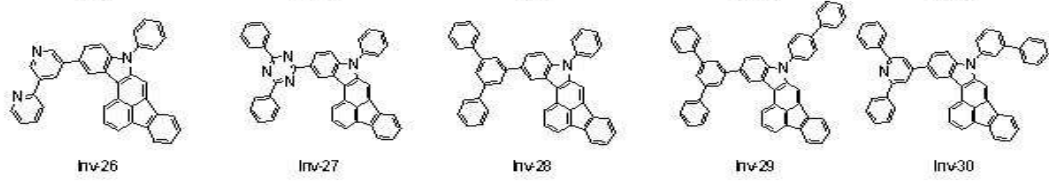
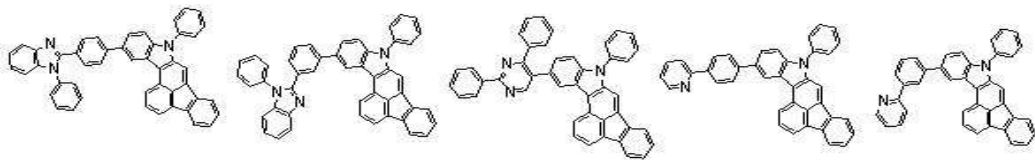
하나 이상의 Q₁은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1-C40 알킬렌, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알케닐렌, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알키닐렌, 치환 또는 비치환된 C3-C40 사이클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로사이클로알킬렌, (치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴) C1-C40 알킬렌, 치환 또는 비치환된 C6-C60의 -N(아릴)-, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴렌, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌, 치환 또는 비치환된 C1-C30 알킬실릴렌, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴실릴렌, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 탄화수소, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 헤테로환이고;

Q₂는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1-C40 알킬, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알케닐, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알키닐, 치환 또는 비치환된 C3-C40 사이클로알킬, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로사이클로알킬, (치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴) C1-C40 알킬, 치환 또는 비치환된 C1-C40 알콕시, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C60 디아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴옥시, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 C1-C30 알킬실릴, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴실릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 탄화수소, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 헤테로환이다.

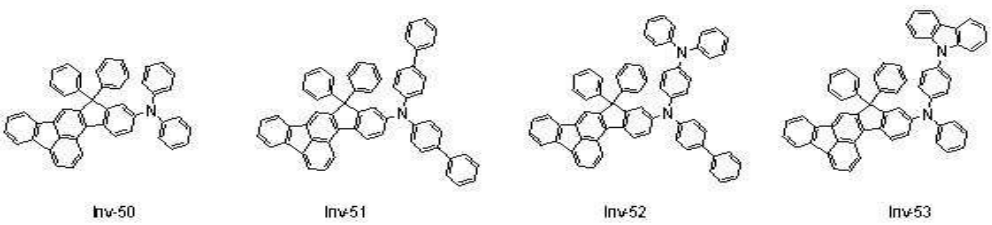
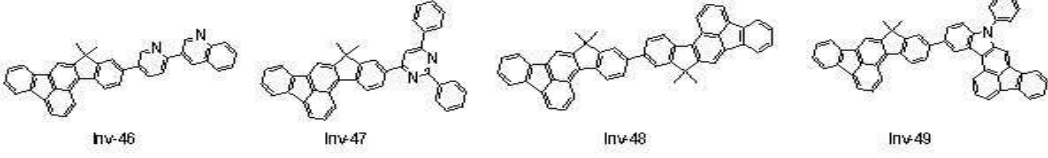
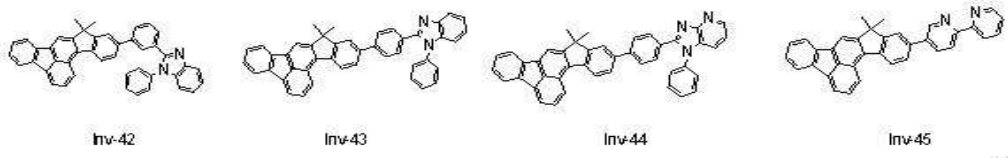
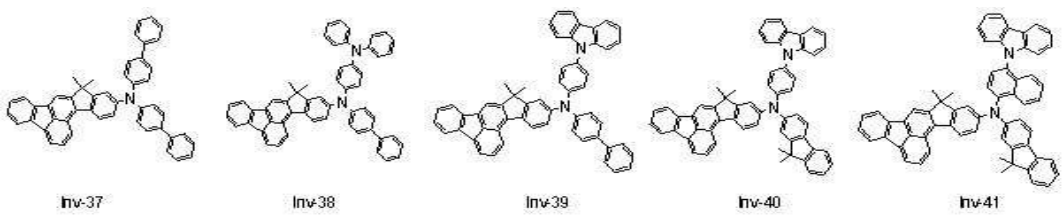
[0030] 삭제

[0031] 바람직하게는, A¹ 내지 A⁵는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1-C20 알킬, 치환 또는 비치환된 C2-C20 알케닐, 치환 또는 비치환된 C2-C20 알키닐, 치환 또는 비치환된 C3-C20 사이클로알킬, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 20의 헤테로사이클로알킬, (치환 또는 비치환된 C6-C20 아릴) C1-C20 알킬, 치환 또는 비치환된 C1-C20 알콕시, 치환 또는 비치환된 C6-C20 아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C20 디아릴아민, 치환 또는 비치환된 C6-C30 아릴옥시, 치환 또는 비치환된 C6-C30 아릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 30의 헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 20의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 탄화수소, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 20의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 헤테로환이고, A¹과 A², A⁴와 A⁵는 서로 결합하여 핵원자수 5 내지 8의 환상 고리를 형성할 수 있으며;

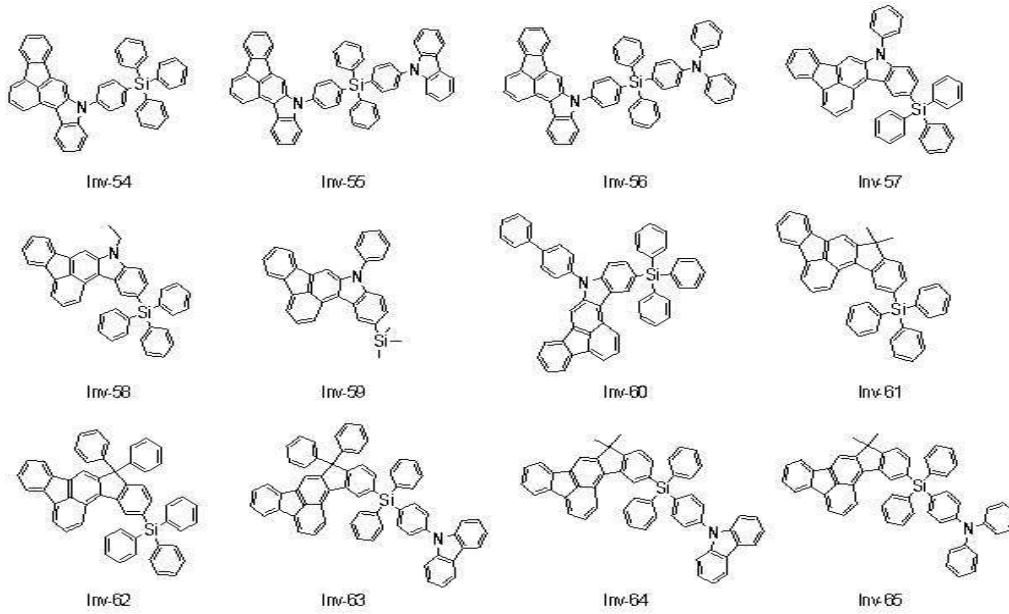
하나 이상의 Q₁은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1-C40 알킬렌, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알케닐렌, 치환 또는 비치환된 C2-C40 알키닐렌, 치환 또는 비치환된 C3-C40 사이클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로사이클로알킬렌, (치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴) C1-C40 알킬렌, 치환 또는 비치환된 C6-C60의 -N(아릴)-, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴렌, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌, 치환 또는 비치환된 C1-C30 알킬실릴렌, 치환 또는 비치환된 C6-C60 아릴실릴렌, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 탄화수소, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 50의 축합(fused) 폴리사이클릭 방향족 헤테로환이고;



[0037]



[0038]



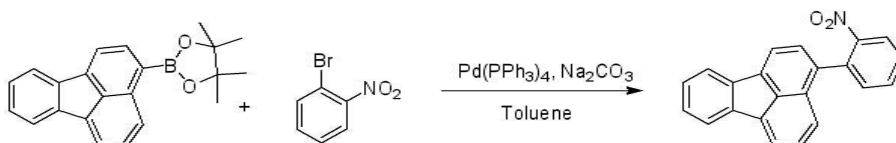
- [0039]
- [0040] 본 발명에서 사용된 "비치환된 축합 폴리사이클릭 방향족 탄화수소"는 5-내지 8-원(membered)의 방향족 고리들이 서로 축합되어 형성된, 핵원자수 5 내지 50, 바람직하게는 5 내지 20의 방향족 부위를 의미하며, 이의 비-제한적인 예로는 인덴, 플루오렌, 페난트렌 등이 있다.
- [0041] "비치환된 축합 폴리사이클릭 방향족 헤테로환(heterocycle)"은 5- 내지 6-원(membered)의 방향족 고리들이 서로 축합되어 핵원자수 5 내지 50, 바람직하게는 5 내지 20의 방향족 부위를 형성하되, 축합에 의해 형성된 고리들 중 적어도 하나에서 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O 또는 S와 같은 헤테로원자로 치환된 방향족 부위를 의미한다. 이의 비-제한적인 예로는 카바졸 등이 있다.
- [0042] "비치환된 헤테로사이클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40, 바람직하게는 3 내지 20의 비-방향족 부위를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O 또는 S와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이의 비-제한적인 예로는 모르폴린, 피페라진 등이 있다.
- [0043] "비치환된 헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 60, 바람직하게는 5 내지 30의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 부위를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O 또는 S와 같은 헤테로원자로 치환된다. 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된(fused) 형태로 부착될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함하는 것으로 해석한다. 본 발명에서 헤테로아릴과 방향족 헤테로환은 중첩적인 의미로 사용될 수도 있다.
- [0044] 본 발명의 화학식 1의 화합물은 일반적인 합성방법에 따라 합성될 수 있다 (*J. Org. Chem.* 70(13): 5014-5019 (2005); *J. Org. Chem.* 73: 7369 (2008) 등 참조). 본 발명의 화합물에 대한 상세한 합성 과정은 후술하는 합성예에서 구체적으로 기술하도록 한다.
- [0045] 본 발명에 따른 유기 EL 소자는, 양극(anode); 음극(cathode); 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [0046] 상기 화학식 1의 화합물은 단독 또는 복수로 포함될 수 있다.
- [0047] 본 발명의 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층, 전자 수송층 및 발광층 중 어느 하나 이상일 수 있다. 본 발명에서 발광층은 인광 도판트 재료 또는 형광 도판트 재료를 포함할 수 있다. 바람직하게는, 본 발명의 화학식 1의 화합물은 청색, 녹색, 및/또는 적색의 인광 호스트, 형광 호스트, 정공 수송 물질, 정공 주입 물질, 전자 주입 물질 및/또는 전자수송 물질로서 유기 EL 소자에 포함될 수 있다. 또한, 본 발명의 화학식 1의 화합물은 형광 게스트 물질일 수도 있다. 보다 바람직하게는 본 발명의 화학식 1의 화합물은 인광 호스트 또는 형광 호스트, 특히 바람직하게는 인광 호스트로서 유기 EL 소자에 포함될 수 있다.
- [0048] 본 발명의 화합물은 150℃ 이상의 높은 유리 전이 온도를 가지고 있어, 이러한 화합물을 유기 EL 소자의 유기층

으로 사용할 경우 유기 EL 소자 내에서 결정화가 최소화되기 때문에 소자의 구동전압을 낮출 수 있고, 발광효율, 휘도, 열적 안정성, 및 수명 특성을 개선할 수 있다.

- [0049] 본 발명에 따른 유기 EL 소자 구조의 비제한적인 예를 들면, 기판, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 것일 수 있으며, 이때 상기 발광층, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층 중 하나 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0050] 또한, 본 발명에 따른 유기 EL 소자는 전술한 바와 같이 양극, 1층 이상의 유기층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조뿐만 아니라, 전극과 유기층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입될 수도 있다.
- [0051] 본 발명의 유기 EL 소자에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 상기 유기층은 진공 증착이나 용액 도포에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이들에만 한정되지 않는다.
- [0052] 본 발명의 유기 EL 소자는, 유기층 중 1층 이상을 본 발명의 화학식 1로 표현된 화합물을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법을 이용하여 유기층 및 전극을 형성할 수 있다.
- [0053] 예컨대, 기판으로는 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름이나 시트 등이 사용될 수 있다.
- [0054] 양극 물질로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합물; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 또는 카본블랙 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0055] 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0056] 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 수송층 및 전자 주입층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질이 사용될 수 있다.
- [0057] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 EL 소자의 개략적인 구조가 도 1에 나타나있다. 도 1을 참조하면, 기판(101), 양극(102), 정공 주입층(103), 정공 수송층(104), 발광층(105), 전자 수송층(106) 및 음극(107)이 순차적으로 적층되어 있다.
- [0058] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.

[0059] <합성예 1> 화합물 Inv-3 의 합성

[0060] <단계 1> 3-(2-nitrophenyl)fluoranthene의 합성



- [0061]
- [0062] 2-(fluoranthen-3-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane (8.4 g, 25.5934 mmol), 2-bromonitrobenzene(5.69 g, 28.1527 mmol) 및 Pd(PPh₃)₄ (0.9 g, 0.7678 mmol)을 플라스크에 넣은 후 Toluene 200 ml에 용해시켰다. Na₂CO₃ (8.13 g)을 증류수 70 ml에 용해시킨 용액을 상기 플라스크에 첨가한 후 12시간 동안 환류 교반하였다.
- [0063] 반응이 종결된 후, 반응 용액을 methylene chloride를 이용하여 추출 및 농축하여 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(Hexane : MC = 4 : 1(v/v))로 정제하여 표제 화합물 (6.22 g, 75%)을 수득하였다.

[0064] GC-Mass (이론치: 323.24 g/mol, 측정치: 323 g/mol)

[0065] <단계 2> 8H-fluoreno[9,1-bc]carbazole의 합성



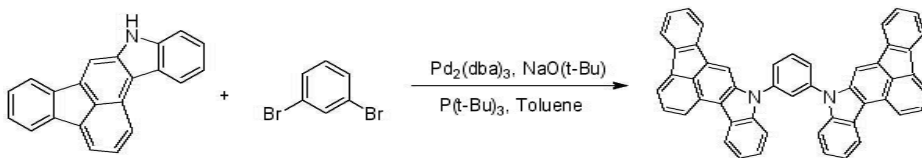
[0066]

[0067] 상기 <단계 1>에서 합성한 화합물(6.22 g, 19.2367 mmol)을 Triethylphosphite (20 ml, 115.4202 mmol)에 용해시킨 후 4시간 동안 환류 교반하였다.

[0068] 반응이 종결된 후, 생성된 고체를 필터 및 Hexane/Methylene Chloride 에서 재결정하여 표제 화합물(3.24 g, 58%)을 수득하였다.

[0069] GC-Mass (이론치: 291.35 g/mol, 측정치: 291 g/mol)

[0070] <단계 3> 화합물 Inv-3의 합성



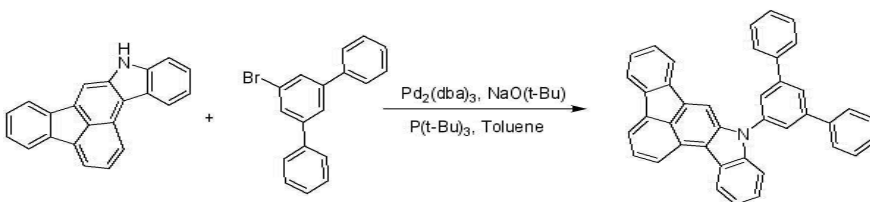
[0071]

[0072] 상기 <단계 2>에서 합성한 화합물(13.6 g, 46.6299 mmol), 1,3-dibromobenzene (5 g, 21.1954 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.6 g, 0.6358 mmol), NaO(t-Bu) (6.1 g, 63.5862 mmol), 및 P(t-Bu)₃ (0.43 g, 2.1195 mmol)을 Toluene 100 ml에 용해시킨 후 12시간 동안 환류 교반하였다.

[0073] 반응이 종결된 후, 반응 용액을 methylene chloride를 이용하여 추출하고, 여액을 실리카겔 필터를 이용하여 농축한 다음, 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(Hexane : MC = 2 : 1(v/v))로 정제하여 원하는 표제 화합물 Inv-3(10 g, 77%)을 수득하였다.

[0074] GC-Mass (이론치: 656.77 g/mol, 측정치: 656 g/mol)

[0075] <합성예 2> 화합물 Inv-6의 합성

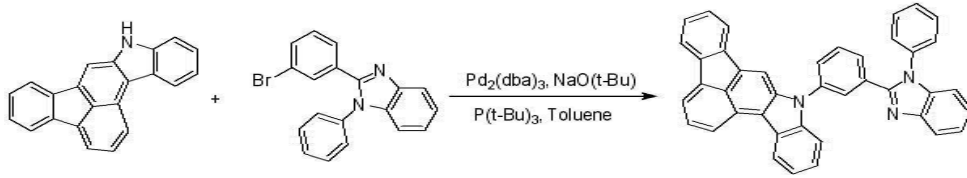


[0076]

[0077] 합성예 1의 <단계 2>에서 합성한 화합물 8H-fluoreno[9,1-bc]carbazole (10 g, 34.33 mmol) 및 5-bromo-1-phenyl-3-phenylbenzene (12.74 g, 41.196 mmol)을 Toluene 150 ml에 용해시키는 것을 제외하고는 합성예 1의 <단계 3>과 동일한 방법을 수행하여 원하는 표제 화합물 Inv-6(12 g, 67%)을 수득하였다.

[0078] GC-Mass (이론치: 519.63 g/mol, 측정치: 519 g/mol)

[0079] <합성예 3> 화합물 Inv-9 의 합성



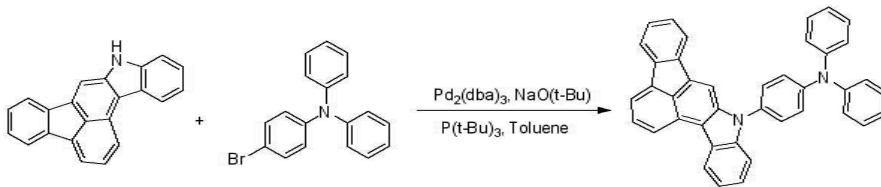
[0080]

[0081] 합성예 1의 <단계 2>에서 합성한 화합물 8H-fluoreno[9,1-bc]carbazole (10 g, 34.33 mmol) 및 2-(3-bromophenyl)-1-phenyl-1H-benzo[d]imidazole (14.4 g, 41.2 mmol)을 toluene 150 ml에 용해시키는 것을 제외하고는 합성예 1의 <단계 3>과 동일한 방법을 수행하여 원하는 표제 화합물 Inv-9 (11 g, 58%)을 수득하였다.

[0082] GC-Mass (이론치: 559.66 g/mol, 측정치: 559 g/mol)

<합성예 4> 화합물 Inv-10 의 합성

[0083] 삭제



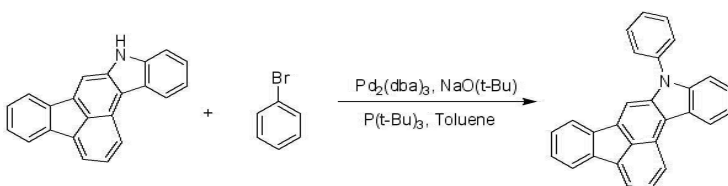
[0084]

[0085] 합성예 1의 <단계 2>에서 합성한 화합물 8H-fluoreno[9,1-bc]carbazole (10 g, 34.33 mmol) 및 4-bromo-N,N-diphenylaniline (13.36 g, 41.2 mmol)을 Toluene 150 ml에 용해시키는 것을 제외하고는 합성예 1의 <단계 3>과 동일한 방법을 수행하여 원하는 표제 화합물 Inv-10 (14 g, 76%)을 수득하였다.

[0086] GC-Mass (이론치: 534.65 g/mol, 측정치: 534 g/mol)

[0087] <합성예 5> 화합물 Inv-22 의 합성

[0088] <단계 1> 8-phenyl-8H-fluoreno[9,1-bc]carbazole의 합성

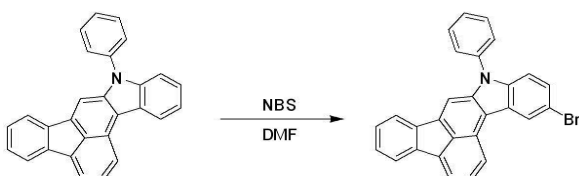


[0089]

[0090] 합성예 1의 <단계 2>에서 합성한 화합물 8H-fluoreno[9,1-bc]carbazole (10 g, 34.33 mmol) 및 Bromobenzene (6.47 g, 41.2 mmol)을 Toluene 150 ml에 용해시키는 것을 제외하고는 합성예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물(10.5 g, 83%)을 수득하였다.

[0091] GC-Mass (이론치: 367.44 g/mol, 측정치: 367 g/mol)

[0092] <단계 2> 5-bromo-8-phenyl-8H-fluoreno[9,1-bc]carbazole의 합성



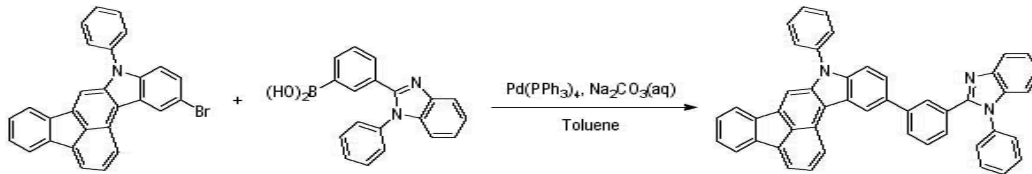
[0093]

[0094] 상기 <단계 1>에서 합성한 화합물 8-phenyl-8H-fluoreno[9,1-bc]carbazole (5 g, 13.61 mmol)을 N,N-dimethylformamide 80 ml에 용해시킨 다음 N-bromosuccinimide (2.42 g, 13.61 mmol)을 첨가하였다. 혼합 용액을 80℃에서 12시간 동안 교반한 다음 증류수 200 ml를 첨가하였다.

[0095] 생성된 고체를 여과한 후 methylene chloride에 용해시켜 실리카겔 필터로 여과하였다. 여액을 농축시킨 후 Hexane/Methylene Chloride 로 재결정하여 표제 화합물(5 g, 82%)을 수득하였다.

[0096] GC-Mass (이론치: 446.34 g/mol, 측정치: 446 g/mol)

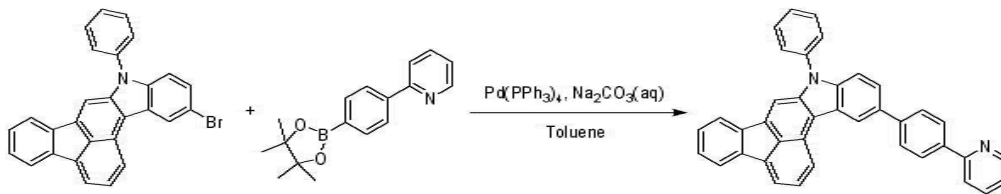
[0097] <단계 3> 화합물 Inv-22의 합성



[0098] 상기 <단계 2>에서 합성한 화합물 5-bromo-8-phenyl-8H-fluoreno[9,1-bc]carbazole (5 g, 11.2 mmol) 및 3-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenylboronic acid (4.22 g, 13.44 mmol)을 Toluene 70 ml에 용해시킨 후 합성에 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 원하는 표제 화합물 Inv-22 (5.2 g, 73%)을 수득하였다.

[0100] GC-Mass (이론치: 635.75 g/mol, 측정치: 635 g/mol)

[0101] <합성에 6> 화합물 Inv-24의 합성

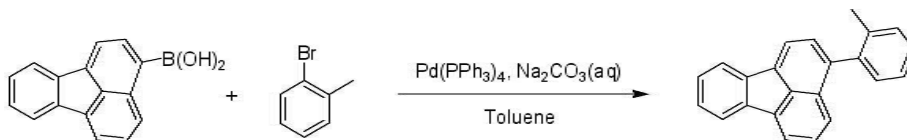


[0102] 합성에 5의 <단계 2>에서 합성한 화합물 5-bromo-8-phenyl-8H-fluoreno[9,1-bc]carbazole (5 g, 11.2 mmol) 및 2-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)pyridine (3.78 g, 13.44 mmol)을 Toluene 70 ml에 용해시키는 것을 제외하고는 합성에 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 원하는 표제 화합물 Inv-24 (4.5 g, 77%)을 수득하였다.

[0104] GC-Mass (이론치: 520.62 g/mol, 측정치: 520 g/mol)

[0105] <합성에 7> 화합물 Inv-38의 합성

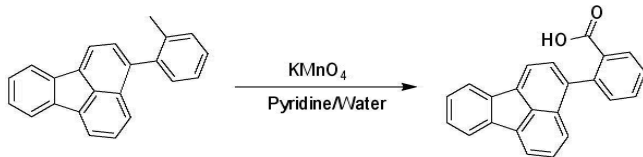
[0106] <단계 1> 3-o-tolylfluoranthene의 합성



[0107] Fluoranthren-3-ylboronic acid (5 g, 20.32 mmol) 및 2-bromotoluene (4.17 g, 24.38 mmol)을 Toluene 70 ml에 용해시키는 것을 제외하고는 합성에 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물 (4.8 g, 81%)을 수득하였다.

[0109] GC-Mass (이론치: 292.37 g/mol, 측정치: 292 g/mol)

[0110] <단계 2> 2-(Fluoranthren-3-yl)benzoic acid의 합성



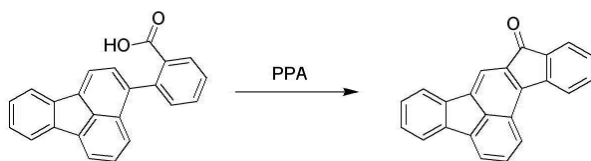
[0111]

[0112] 상기 <단계 1>에서 합성한 화합물 3-o-tolylfluoranthene (5 g, 17.1 mmol) 을 pyridine 90 ml에 용해시킨 다음 potassium permanganate (13.5 g)을 증류수 15 ml에 녹인 용액을 첨가하여 10 시간 동안 환류 교반하였다.

[0113] 반응이 종결된 후, 침전물을 거르고 끓는 증류수 500 ml로 침전물에 남아있는 생성물을 세척하였다. 여액을 모아 산성이 될 때까지 염산을 조금씩 첨가해 주었다. 형성된 침전물을 여과하여 걸러진 물질을 오븐에서 건조하여 표제 화합물(3.1 g, 56%)을 수득하였다.

[0114] GC-Mass (이론치: 322.36 g/mol, 측정치: 322 g/mol)

[0115] <단계 3> 8H-indeno[2,1-b]fluoranthene-8-one 의 합성



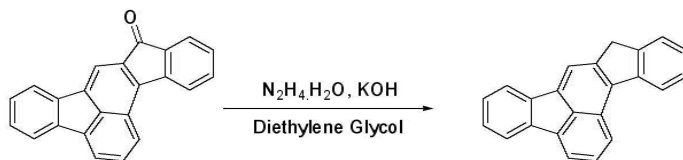
[0116]

[0117] 상기 <단계 2>에서 합성한 화합물 2-(fluoranthene-3-yl)benzoic acid (5 g, 15.51 mmol)을 PPA (10 g)에 넣은 후 130℃에서 3시간 동안 교반하였다.

[0118] 반응이 종결된 후, 얻어진 용액을 증류수 500 ml에 넣고, 생성된 고체를 증류수로 수회 세척한 다음 Methanol 200 ml로 세척하여 표제 화합물(3 g, 64%)을 수득하였다.

[0119] GC-Mass (이론치: 304.34 g/mol, 측정치: 304 g/mol)

[0120] <단계 4> 8H-indeno[2,1-b]fluoranthene 의 합성



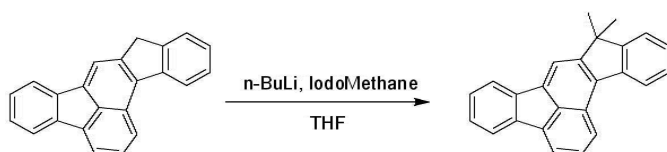
[0121]

[0122] 1L 둥근바닥 플라스크에 Potassium hydroxide (69.4 g, 1.24 mol) 및 Diethylene glycol (600 ml)를 넣고 교반한 다음, 상기 <단계 3>에서 합성한 화합물 8H-indeno[2,1-b]fluoranthene-8-one (5 g, 16.44 mmol)과 Hydrazine monohydrate (50.8 g, 1.02 mol)을 첨가하여 185℃로 가열하면서 24시간 동안 교반하였다.

[0123] 반응이 종결된 후, 얼음이 담긴 2L 비이커에 반응 용액을 붓고 교반하면서 염산을 서서히 첨가하였다. 형성된 침전물을 여과하고 증류수로 수회 세척한 다음 건조하여 표제 화합물(3.5 g, 73%)을 수득하였다.

[0124] GC-Mass (이론치: 290.36 g/mol, 측정치: 290 g/mol)

[0125] <단계 5> 8,8-dimethyl-8H-indeno[2,1-b]fluoranthene 의 합성



[0126]

[0127] 250 ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 <단계 4>에서 합성한 화합물 8H-indeno[2,1-b]fluoranthene (3 g, 10.32

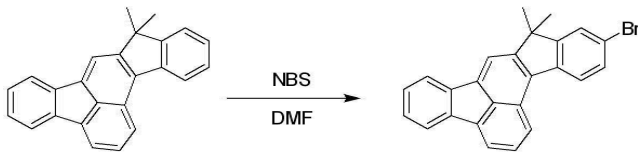
mmol)을 넣고 진공 건조시킨 뒤 질소 가스를 충전하였다. THF 100 ml를 상기 플라스크에 넣고 -78℃로 냉각시켰다. n-Butyllithium(1.6M in Hex.) (1.65 g, 25.8 mmol)을 천천히 첨가하면서 동일 온도에서 1시간 동안 교반하였다. Iodomethane (4.74 g, 25.8 mmol)을 첨가한 후 3시간 동안 교반하였다.

[0128] 반응이 종결된 후, 증류수 100 ml로 세척하고 methylene chloride로 추출한 다음 magnesium sulfate로 수분을 제거하고 여액을 농축하였다.

[0129] 상기 반응액을 컬럼 크로마토그래피(Hexane : MC = 9 : 1(v/v))로 정제하여 표제 화합물(2.8 g, 85%)을 수득하였다.

[0130] GC-Mass (이론치: 318.41 g/mol, 측정치: 318 g/mol)

[0131] <단계 6> 6-bromo-8,8-dimethyl-8H-indeno[2,1-b]fluoranthene의 합성

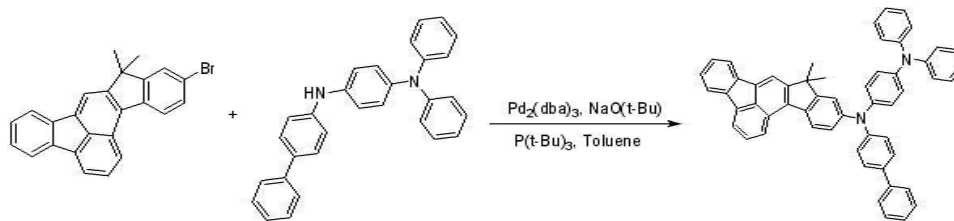


[0132] 상기 <단계 5>에서 합성한 화합물 8,8-dimethyl-8H-indeno[2,1-b]fluoranthene (5 g, 15.7 mmol)을 N,N-dimethylformamide 120 ml에 용해시킨 다음 N-bromosuccinimide (2.79 g, 15.7 mmol)을 첨가하였다.

[0134] 혼합 용액을 80℃에서 12시간 동안 교반한 다음 증류수 200 ml를 첨가하고 생성된 고체를 여과한 후 MC 100 ml에 용해시켜 Silicagel Filter 하였다. 여액을 농축시킨 다음 Methanol/Methylene Chloride로 재결정하여 표제 화합물(5.3 g, 85%)을 수득하였다.

[0135] GC-Mass (이론치: 397.31 g/mol, 측정치: 397 g/mol)

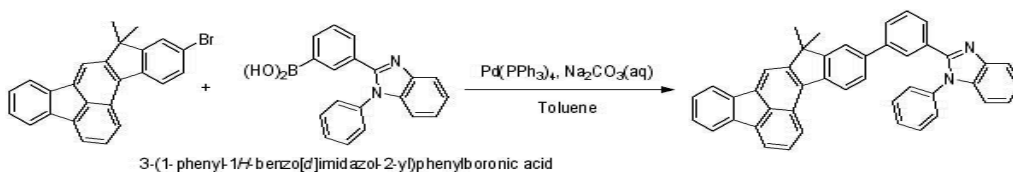
[0136] <단계 7> 화합물 Inv-38의 합성



[0137] 상기 <단계 6>에서 합성한 화합물 6-bromo-8,8-dimethyl-8H-indeno[2,1-b]fluoranthene (5 g, 12.58 mmol) 및 N1-(biphenyl-4-yl)-N4,N4-diphenylbenzene-1,4-diamine (5.71 g, 13.84 mmol)을 Toluene 100 ml에 용해시키는 것을 제외하고는 합성에 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 원하는 표제 화합물 Inv-38 (7.4 g, 81%)을 수득하였다.

[0139] GC-Mass (이론치: 728.92 g/mol, 측정치: 728 g/mol)

[0140] <합성에 8> 화합물 Inv-42의 합성



[0141] 상기 합성에 7의 <단계 6>에서 합성한 화합물 6-bromo-8,8-dimethyl-8H-indeno[2,1-b]fluoranthene (5 g, 12.58 mmol) 및 3-(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenylboronic acid (4.35 g, 13.84 mmol)을 Toluene

100 ml에 용해시키는 것을 제외하고는 합성예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 원하는 표제 화합물 Inv-42 (5.2 g, 70%)을 수득하였다.

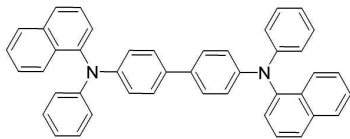
[0143] GC-Mass (이론치: 586.72 g/mol, 측정치: 586 g/mol)

[0144] <실시예 1 내지 6> 유기 EL 소자의 제조 (발광층으로의 적용)

[0145] ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

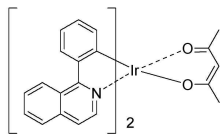
[0146] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 NPB(40nm)/합성예 1-6에서 합성한 각각의 화합물 + 10%Ir(piq)2(acac)(20nm)/BCP(10nm)/Alq3(40 nm)/LiF(1nm)/Al(200 nm) 순으로 유기 EL 소자를 제조하였다.

[0147] NPB



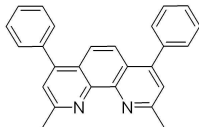
[0148]

[0149] Ir(piq)2(acac)



[0150]

[0151] BCP

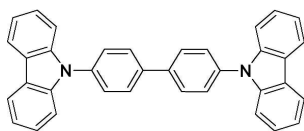


[0152]

[0153] <비교예 1> 유기 EL 소자의 제조

[0154] 발광층 형성시 합성예에서 제조된 화합물 대신 CBP를 발광호스트 물질로 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 EL 소자를 제조하였다.

[0155] CBP



[0156]

[0157] <평가예 1>

[0158] 실시예 1-6 및 비교예 1에서 제조된 각각의 유기 EL 소자에 대하여 구동전압, 전류효율 및 휘도를 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0159]

소자	화합물	전압(V)	휘도(cd/m2)	효율(cd/A)	컬러
실시예 1	Inv-3 (합성예 1)	3.4	72	7.2	적색
실시예 2	Inv-6 (합성예 2)	3.0	65	6.5	적색
실시예 3	Inv-9 (합성예 3)	2.8	78	7.8	적색
실시예 4	Inv-10 (합성예 4)	3.0	67	6.7	적색
실시예 5	Inv-22 (합성예 5)	2.8	74	7.4	적색
실시예 6	Inv-24 (합성예 6)	2.7	74	7.4	적색
비교예 1	CBP	5.4	64	6.4	적색

[0160]

상기 표 1에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 사용한 유기 EL 소자(실시예 1-6)는 종래 CBP를 사용한 유기 EL 소자(비교예 1)보다 전압 및 효율 면에서 월등한 성능을 나타내는 것을 알 수 있다.

[0161]

<실시예 7 내지 9, 비교예 2> 유기 EL 소자의 제조 (전자 주입 및 수송층으로의 적용)

[0162]

상기 실시예 1에서 준비된 ITO 투명 전극 위에 DS-HIL(두산社, 이하 DS-HIL로 표기)를 60 nm의 두께로 열 진공 증착하여 정공 주입층을 형성하였다. 그 위에 정공을 이송하는 물질인 N,N-di(naphthalene-1-yl)-N,N-diphenylbenzidine (NPB)를 15 nm의 두께로 증착한 후, 발광 호스트 역할을 하는 ADN(9,10-di(naphthalen-2-yl)anthracene, 이하 ADN으로 표기)와 도판트 역할을 하는 DS-405(두산社)를 사용하여 발광층을 30 nm 두께로 증착하였다. 발광층 위에 전자의 주입 및 수송 역할을 하는 물질로서 합성예 3, 5 및 8에서 각각 합성한 화합물 Inv-9(실시예 7), Inv-22(실시예 8), 및 Inv-42(실시예 9)와 비교물질인 aluminum tris(8-hydroxyquinoline)(Alq3) (비교예 2)을 각각 25 nm의 두께로 증착하였다. 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 1 nm의 두께로 LiF와 200 nm의 두께의 Al을 증착하여 음극을 형성하여 유기 EL 소자를 제조하였다.

[0163]

<평가예 2>

[0164]

실시예 7-9 및 비교예 2에서 제조된 각각의 유기 EL 소자에 대하여 구동전압, 전류효율 및 휘도를 측정하고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

표 2

[0165]

소자	화합물	전압(V)	휘도(cd/m2)	효율(cd/A)	컬러
실시예 7	Inv-9 (합성예 3)	4.7	681	6.8	청색
실시예 8	Inv-22 (합성예 5)	4.9	652	6.5	청색
실시예 9	Inv-42 (합성예 8)	4.8	650	6.5	청색
비교예 2	Alq3	5.7	600	6.0	청색

[0166]

상기 표 2에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 사용한 유기 EL 소자(실시예 7-9)는 종래 Alq3을 사용한 유기 EL 소자(비교예 2) 보다 전압 및 효율 면에서 월등한 성능을 나타내는 것을 알 수 있다.

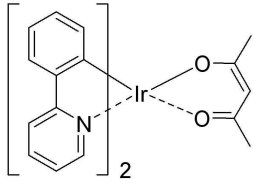
[0167]

<실시예 10> 유기 EL 소자의 제조 (정공 주입 및 수송층으로의 적용)

[0168]

상기 실시예 1에서 준비된 ITO 투명 전극 위에, 합성예 7에서 합성한 화합물 Inv-38(40nm)/CBP + 10%Ir(ppy)2(acac) (20nm)/BCP(10nm)/Alq3(40 nm)/LiF(1nm)/Al(200 nm) 순으로 유기 EL 소자를 제작하였다.

[0169] Ir(ppy)₂(acac)



[0170]

[0171] <비교예 3> 유기 EL 소자의 제조

[0172] 정공 주입 및 수송층 형성시 합성예에서 제조된 화합물 대신 NPB를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 10과 동일한 방법으로 유기 EL 소자를 제조하였다.

[0173] <평가예 3>

[0174] 실시예 10 및 비교예 3에서 제조된 각각의 유기 EL 소자에 대하여 구동전압, 전류효율 및 휘도를 측정하고, 그 결과를 하기 표 3에 나타내었다.

표 3

소자	화합물	전압(V)	휘도(cd/m ²)	효율(cd/A)	컬러
실시예 10	Inv-38 (합성예 7)	5.7	224	22.4	녹색
비교예 3	NPB	7.94	174	17.4	녹색

[0175] 삭제

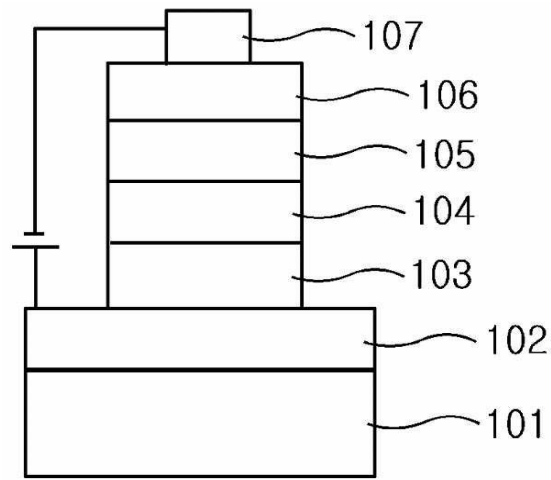
[0176] 상기 표 3에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 사용한 유기 EL 소자(실시예 10)는 NPB(비교예 3)와 비교하여 전압 및 효율 면에서 월등한 성능을 나타내는 것을 알 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0177] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 EL 소자의 개략적인 단면도이다.

도면

도면1



专利名称(译)	有机化合物和使用其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR101184159B1	公开(公告)日	2012-09-18
申请号	KR1020090134495	申请日	2009-12-30
[标]申请(专利权)人(译)	株式会社斗山		
申请(专利权)人(译)	斗山公司		
当前申请(专利权)人(译)	斗山公司		
[标]发明人	SHIN CHANG JU 신창주 HONG JIN SEOK 홍진석 KIM TAE HYUNG 김태형 KIM KYOUNG SOO 김경수		
发明人	신창주 홍진석 김태형 김경수		
IPC分类号	H01L51/54 C09K11/06		
CPC分类号	H05B33/20 H01L51/0055 H01L51/0094 H01L51/0072 H01L51/5012 H01L51/5048 H01L51/5088		
代理人(译)	Gimgihyo Jowooje		
其他公开文献	KR1020110077831A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

用途：提供有机化合物，以确保荧光和磷光特性和出色的热稳定性，并确保低功率，高效率，高亮度，耐用性和使用寿命。组成：有机化合物由化学式1表示。在化学式1中，X选自CR13R14，NR15，O，S，S(=O)，S(=O)₂和SiR16R17；R1-R17独立地为-Ln-Qm。有机电致发光器件包括正电极，负电极和插入在正电极和负电极之间的有机层。至少一个有机层包含有机化合物。

