



(19)대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(51) 。 Int. Cl. C09K 11/06 (2006.01)	(45) 공고일자 (11) 등록번호 (24) 등록일자	2007년06월19일 10-0730140 2007년06월13일
---	-------------------------------------	--

(21) 출원번호 (22) 출원일자 심사청구일자	10-2005-0064059 2005년07월15일 2005년07월15일	(65) 공개번호 (43) 공개일자	10-2007-0009074 2007년01월18일
----------------------------------	---	------------------------	--------------------------------

(73) 특허권자            삼성에스디아이 주식회사  
                              경기 수원시 영통구 신동 575

(72) 발명자                신정한  
                              경기 용인시 기흥읍 공세리 428-5

                              이석중  
                              경기 용인시 기흥읍 공세리 428-5

                              이창호  
                              경기 용인시 기흥읍 공세리 428-5

                              황석환  
                              경기 용인시 기흥읍 공세리 428-5

                              양승각  
                              경기 용인시 기흥읍 공세리 428-5

                              김영국  
                              경기 용인시 기흥읍 공세리 428-5

                              김희연  
                              경기 용인시 기흥읍 공세리 428-5

(74) 대리인                리엔목특허법인

(56) 선행기술조사문헌 EP1202608 A2 WO1994018278 A	KR1020000064244 A
---	-------------------

심사관 : 손창호

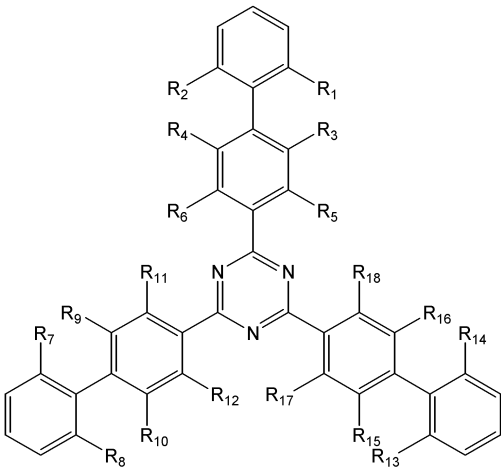
전체 청구항 수 : 총 18 항

(54) 트리아진계 화합물 및 이를 이용한 유기 발광 소자

(57) 요약

본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물 및 이를 구비한 유기 발광 소자에 관한 것이다:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>18</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 미치환 또는 치환 C<sub>1-30</sub>알킬기, 미치환 또는 치환 C<sub>6-50</sub>아릴기 또는 미치환 또는 치환 C<sub>4-50</sub>헤테로아릴기이고;

상기 R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>8</sub>, R<sub>13</sub> 및 R<sub>14</sub>가 모두 수소이고, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>9</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>11</sub>, R<sub>12</sub>, R<sub>15</sub>, R<sub>16</sub>, R<sub>17</sub> 및 R<sub>18</sub>이 서로 독립적으로, 수소, 미치환 또는 치환 C<sub>1-30</sub>알킬기, 미치환 또는 치환 C<sub>6-50</sub>아릴기 또는 미치환 또는 치환 C<sub>4-50</sub>헤테로아릴기인 경우는 제외한다.

대표도

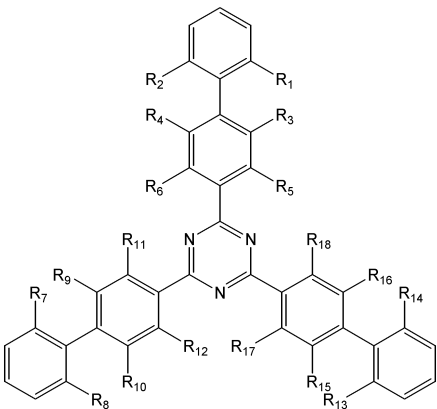
도 1c

### 특허청구의 범위

#### 청구항 1.

하기 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

$R_1$  내지  $R_{18}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 미치환 또는 치환  $C_{1-30}$ 알킬기, 미치환 또는 치환  $C_{6-50}$ 아릴기 또는 미치환 또는 치환  $C_{4-50}$ 헤테로아릴기이되,

단,  $R_1$ 과  $R_2$  중 하나 이상,  $R_7$ 과  $R_8$  중 하나 이상, 및  $R_{13}$ 과  $R_{14}$  중 하나 이상은 미치환 또는 치환  $C_{1-30}$ 알킬기, 미치환 또는 치환  $C_{6-50}$ 아릴기 또는 미치환 또는 치환  $C_{4-50}$ 헤테로아릴기이다.

## 청구항 2.

제1항에 있어서, 상기 알킬기, 아릴기 및 헤테로아릴기의 치환기가, -F, -Cl, -Br, -CN, -NO<sub>2</sub>, -OH; 미치환 또는 -F, -Cl, -Br, -CN, -NO<sub>2</sub> 또는 -OH로 치환된  $C_{1-10}$ 알킬기, 미치환 또는 -F, -Cl, -Br, -CN, -NO<sub>2</sub> 또는 -OH로 치환된  $C_{1-10}$ 알콕시기, 미치환 또는 -F, -Cl, -Br, -CN, -NO<sub>2</sub> 또는 -OH로 치환된  $C_{6-10}$ 아릴기, 미치환 또는 -F, -Cl, -Br, -CN, -NO<sub>2</sub> 또는 -OH로 치환된  $C_{4-10}$ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상인 것을 특징으로 하는 트리아진계 화합물.

## 청구항 3.

제1항에 있어서,  $R_1$  내지  $R_{18}$ 이 서로 독립적으로, 수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기, 플루오로메틸기, 디플루오로메틸기, 트리플루오로메틸기, 페닐기,  $C_{1-10}$ 알킬페닐기,  $C_{1-10}$ 알콕시페닐기, 할로페닐기, 시아노페닐기, 디시아노페닐기, 트리플루오로메톡시페닐기, o-, m-, 또는 p-톨일기, o-, m- 또는 p-쿠메닐기, 메시틸기, 페녹시페닐기, (α,α-디메틸벤젠)페닐기, (N,N'-디메틸)아미노페닐기, (N,N'-디페닐)아미노페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기,  $C_{1-10}$ 알킬나프틸기,  $C_{1-10}$ 알콕시나프틸기, 할로나프틸기, 시아노나프틸기, 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 안트라퀴놀일기, 메틸안트릴기, 페난트릴기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 크리세닐기, 에틸-크리세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 클로로페릴레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네틸기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기, 카르바졸릴기,  $C_{1-10}$ 알킬 카르바졸릴기, 비페닐기,  $C_{1-10}$ 알킬 비페닐기,  $C_{1-10}$ 알콕시 비페닐기, 티오페닐기, 인돌일기, 피리딜기, 피라졸릴기, 이미다졸릴기, 옥사졸릴기, 티아졸릴기, 트리아졸릴기, 테트라졸일기, 옥사디아졸릴기, 피리디닐기, 피리다지닐기 또는 피리미디닐기이되,

단,  $R_1$ 과  $R_2$  중 하나 이상,  $R_7$ 과  $R_8$  중 하나 이상, 및  $R_{13}$ 과  $R_{14}$  중 하나 이상은 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기, 플루오로메틸기, 디플루오로메틸기, 트리플루오로메틸기, 페닐기,  $C_{1-10}$ 알킬페닐기,  $C_{1-10}$ 알콕시페닐기, 할로페닐기, 시아노페닐기, 디시아노페닐기, 트리플루오로메톡시페닐기, o-, m-, 또는 p-톨일기, o-, m- 또는 p-쿠메닐기, 메시틸기, 페녹시페닐기, (α,α-디메틸벤젠)페닐기, (N,N'-디메틸)아미노페닐기, (N,N'-디페닐)아미노페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기,  $C_{1-10}$ 알킬나프틸기,  $C_{1-10}$ 알콕시나프틸기, 할로나프틸기, 시아노나프틸기, 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 안트라퀴놀일기, 메틸안트릴기, 페난트릴기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 크리세닐기, 에틸-크리세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 클로로페릴레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네틸기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기, 카르바졸릴기,  $C_{1-10}$ 알킬 카르바졸릴기, 비페닐기,  $C_{1-10}$ 알킬 비페닐기,  $C_{1-10}$ 알콕시 비페닐기, 티오페닐기, 인돌일기, 피리딜기, 피라졸릴기, 이미다졸릴기, 옥사졸릴기, 티아졸릴기, 트리아졸릴기, 테트라졸일기, 옥사디아졸릴기, 피리디닐기, 피리다지닐기 또는 피리미디닐기인 것을 특징으로 하는 트리아진계 화합물.

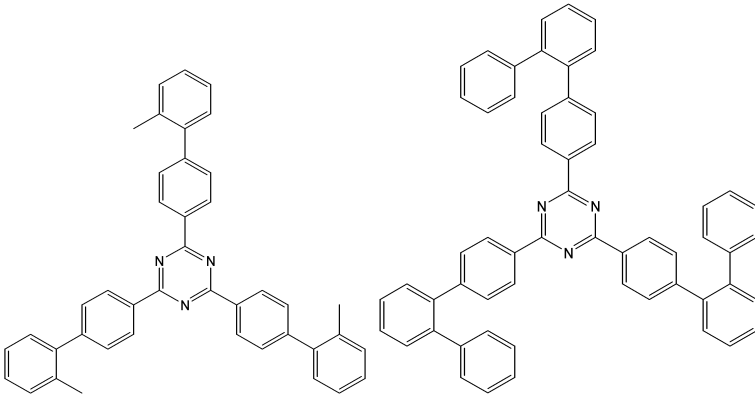
## 청구항 4.

제1항에 있어서, R<sub>1</sub>, R<sub>7</sub> 및 R<sub>13</sub>이 서로 동일하고, R<sub>2</sub>, R<sub>8</sub> 및 R<sub>14</sub>이 서로 동일하고, R<sub>3</sub>, R<sub>9</sub> 및 R<sub>15</sub>이 서로 동일하고, R<sub>4</sub>, R<sub>10</sub> 및 R<sub>16</sub>이 서로 동일하고, R<sub>5</sub>, R<sub>11</sub> 및 R<sub>17</sub>이 서로 동일하고, R<sub>6</sub>, R<sub>12</sub> 및 R<sub>18</sub>이 서로 동일한 것을 특징으로 하는 트리아진계 화합물.

**청구항 5.**

제1항에 있어서, 상기 트리아진계 화합물이 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 것을 특징으로 하는 트리아진계 화합물:

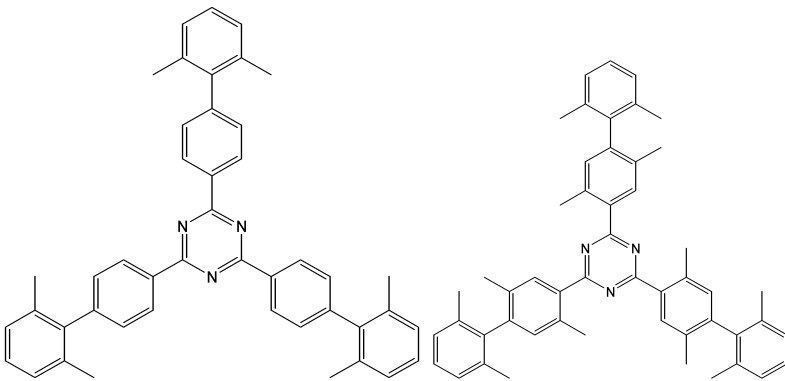
<화학식 2> <화학식 3>



**청구항 6.**

제1항에 있어서, 상기 트리아진계 화합물이 하기 화학식 4 또는 5로 표시되는 것을 특징으로 하는 트리아진계 화합물:

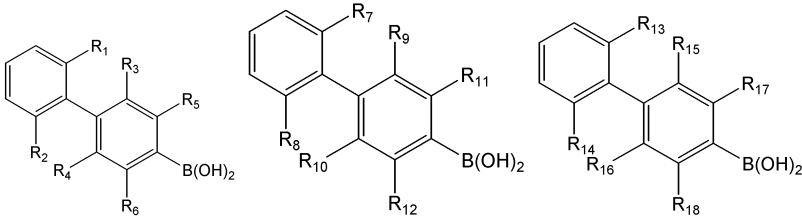
<화학식 4> <화학식 5>



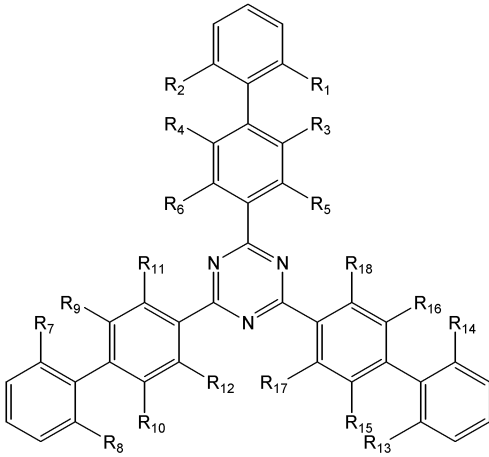
**청구항 7.**

하기 화학식 1A로 표시되는 화합물, 하기 화학식 1B로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 1C로 표시되는 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상을 트리아진 고리-함유 화합물과 반응시키는 단계를 포함하는, 하기 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물의 제조 방법:

<화학식 1A> <화학식 1B> <화학식 1C>



<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>18</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 미치환 또는 치환 C<sub>1-30</sub>알킬기, 미치환 또는 치환 C<sub>6-50</sub>아릴기 또는 미치환 또는 치환 C<sub>4-50</sub>헤테로아릴기이되,

단, R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub> 중 하나 이상, R<sub>7</sub>과 R<sub>8</sub> 중 하나 이상, 및 R<sub>13</sub>과 R<sub>14</sub> 중 하나 이상은 미치환 또는 치환 C<sub>1-30</sub>알킬기, 미치환 또는 치환 C<sub>6-50</sub>아릴기 또는 미치환 또는 치환 C<sub>4-50</sub>헤테로아릴기이다.

**청구항 8.**

제7항에 있어서, R<sub>1</sub>, R<sub>7</sub> 및 R<sub>13</sub>이 서로 동일하고, R<sub>2</sub>, R<sub>8</sub> 및 R<sub>14</sub>이 서로 동일하고, R<sub>3</sub>, R<sub>9</sub> 및 R<sub>15</sub>이 서로 동일하고, R<sub>4</sub>, R<sub>10</sub> 및 R<sub>16</sub>이 서로 동일하고, R<sub>5</sub>, R<sub>11</sub> 및 R<sub>17</sub>이 서로 동일하고, R<sub>6</sub>, R<sub>12</sub> 및 R<sub>18</sub>이 서로 동일한 것을 특징으로 하는 트리아진계 화합물의 제조 방법.

**청구항 9.**

제7항에 있어서, 상기 트리아진 고리-함유 화합물이 트리할로트리아진인 것을 특징으로 하는 트리아진계 화합물의 제조 방법.

**청구항 10.**

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 유기막을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기막이 제1항 내지 제5항 중 어느 한 항의 트리아진계 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**청구항 11.**

제10항에 있어서, 상기 유기막이 발광층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**청구항 12.**

제11항에 있어서, 상기 유기막이 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**청구항 13.**

제10항에 있어서, 상기 유기막이 상기 트리아진계 화합물을 포함하는 발광층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**청구항 14.**

제10항에 있어서, 상기 유기막이 상기 트리아진계 화합물을 포함하는 전자수송층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**청구항 15.**

제10항에 있어서, 상기 유기막이 상기 트리아진계 화합물을 포함하는 정공저지층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**청구항 16.**

제12항에 있어서, 상기 소자가 제1전극/정공수송층/발광층/전자수송층/제2전극, 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극 또는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/전자주입층/제2전극의 구조를 갖는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**청구항 17.**

제11항에 있어서, 상기 발광층이 적색, 녹색, 청색 또는 백색을 포함하는 인광 또는 형광 도펀트를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**청구항 18.**

제1항에 있어서, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>8</sub>, R<sub>13</sub>, 및 R<sub>14</sub>이 미치환 또는 치환 C<sub>1-30</sub>알킬기, 미치환 또는 치환 C<sub>6-50</sub>아릴기 또는 미치환 또는 치환 C<sub>4-50</sub>헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

명세서

**발명의 상세한 설명**

**발명의 목적**

**발명이 속하는 기술 및 그 분야의 종래기술**

본 발명은 트리아진계 화합물 및 이를 이용한 유기 발광 소자에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 전기적인 안정성과 높은 전자 수송 능력 및 정공 저지 능력을 갖고 있고 유리전이온도가 높고 결정화를 방지할 수 있는 재료인 트리아진계 화합물과 이를 포함한 유기막을 채용한 유기 발광 소자에 관한 것이다.

전계 발광 소자 (electroluminescent emitting device)는 자발광형 소자로 시야각이 넓으며 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답시간이 빠르다는 장점을 가지고 있기 때문에 커다란 주목을 받고 있다. 상기 전계 발광 소자에는 발광층 (emitting layer)에 무기 화합물을 사용하는 무기 발광 소자와 유기 화합물을 사용하는 유기 발광 소자(organic light emitting device : OLED)가 있는데, 유기 발광 소자는 무기 발광 소자에 비하여 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 점에서 많은 연구가 이루어지고 있다.

유기 발광 소자는 일반적으로 애노드/유기 발광층/캐소드의 적층구조를 갖고, 발광층과 캐소드 사이에 정공저지층 또는 전자주입층을 추가로 더 적층하여 애노드/유기 발광층/정공저지층/캐소드, 애노드/유기 발광층/전자수송층/캐소드 또는 애노드/유기 발광층/정공저지층/전자주입층/캐소드 등의 구조를 가질 수 있다.

상기 전자수송층 형성 재료로서 옥사디아졸류, 티아디아졸류 또는 피리미딘류 등과 같은 헤테로방향족계 화합물 등이 알려져 있다(미국 특허 제6,559,256 참조).

그러나, 지금까지 알려진 전자수송층 형성 재료 또는 정공저지층 형성 재료를 구비한 유기 발광 소자는 수명, 효율 및 소비 전력 특성이 만족할 만한 수준에 이르지 못하여 개선의 여지가 많다.

**발명이 이루고자 하는 기술적 과제**

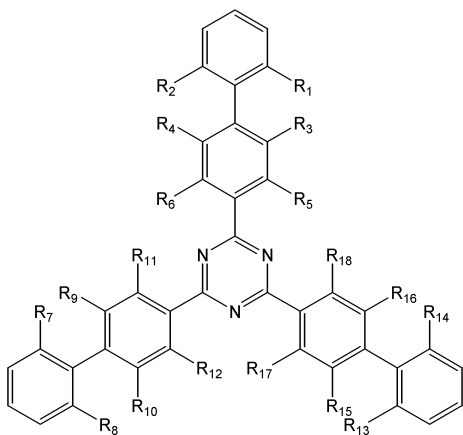
상기 종래 기술의 문제점을 해결하기 위하여, 본 발명은 유기 발광 소자의 수명, 효율 및 소비전력 특성을 향상시킬 수 있는 트리아진계 화합물 및 이를 구비한 유기 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

**발명의 구성**

상기 본 발명의 과제를 이루기 위하여, 본 발명의 제1태양은,

하기 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물을 제공한다:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

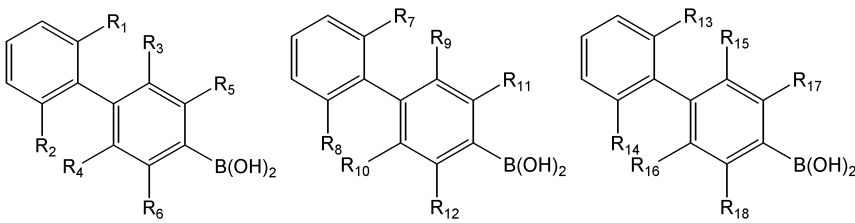
R<sub>1</sub> 내지 R<sub>18</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 미치환 또는 치환 C<sub>1-30</sub>알킬기, 미치환 또는 치환 C<sub>6-50</sub>아릴기 또는 미치환 또는 치환 C<sub>4-50</sub>헤테로아릴기이고;

상기 R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>8</sub>, R<sub>13</sub> 및 R<sub>14</sub>가 모두 수소이고, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>9</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>11</sub>, R<sub>12</sub>, R<sub>15</sub>, R<sub>16</sub>, R<sub>17</sub> 및 R<sub>18</sub>이 서로 독립적으로, 수소, 미치환 또는 치환 C<sub>1-30</sub>알킬기, 미치환 또는 치환 C<sub>6-50</sub>아릴기 또는 미치환 또는 치환 C<sub>4-50</sub>헤테로아릴기인 경우는 제외한다.

상기 본 발명의 다른 과제를 이루기 위하여, 본 발명의 제2태양은,

하기 화학식 1A로 표시되는 화합물, 하기 화학식 1B로 표시되는 화합물 및 기 화학식 1C로 표시되는 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상을 트리아진 고리-함유 화합물과 반응시키는 단계를 포함하는, 상기 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물을 제조하는 방법을 제공한다:

<화학식 1A> <화학식 1B> <화학식 1C>



상기 본 발명의 다른 과제를 이루기 위하여, 본 발명의 제3태양은,

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 유기막을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기막이 상기 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

상기 트리아진계 화합물을 구비한 유기 발광 소자는 수명, 효율 및 소비전력이 향상될 수 있다.

이하, 본 발명을 보다 상세히 설명하기로 한다.

본 발명을 따르는 트리아진계 화합물은, 상기 화학식 1로 표시되며, 상기 화학식 1 중, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>8</sub>, R<sub>13</sub> 및 R<sub>14</sub>가 모두 수소이고 R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>9</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>11</sub>, R<sub>12</sub>, R<sub>15</sub>, R<sub>16</sub>, R<sub>17</sub> 및 R<sub>18</sub>이 서로 독립적으로, 수소, 미치환 또는 치환 C<sub>1-30</sub>알킬기, 미치환 또는 치환 C<sub>6-50</sub>아릴기 또는 미치환 또는 치환 C<sub>4-50</sub>헤테로아릴기인 경우는 제외한 화합물이다.

즉, 트리아진 고리에 치환된 3개의 비페닐기에 있어서, 트리아진 고리와 직접 연결되어 있지 않은 제2아릴기(물론, 3개임)의 6개의 ortho-위치 중 하나 이상이 치환(물론, 치환기에서 수소 원자는 제외됨)되어야 한다. 이 중, 상기 6개의 ortho-위치 중 3개 이상이 치환되는 것이 바람직하며, 보다 바람직하게는 상기 6개의 ortho-위치 중 6개 모두가 치환되는 것이 바람직하다. 이로써, 상기 트리아진계 화합물의 3개의 비페닐기에 있어서, 각 비페닐기 당 2개의 아릴기 간의 입체장애효과(steric hindrance)로 인하여, 각 비페닐기 당 2개의 아릴기 간의 평면성이 제거(즉, 상기 2개의 아릴기들은 동일한 평면 상에 위치하지 않고 서로 뒤틀어짐)될 수 있다. 따라서, 상기 2개의 아릴기 간의 컨쥬게이션이 제거될 수 있는 바, 화합물의 에너지 갭이 높아질 수 있다. 따라서, 유기 발광 소자의 애노드 및 캐소드 사이의 유기막을 이루는 물질로 이용될 수 있다. 특히 유기 발광 소자 중 애노드 및 캐소드 사이에 개재될 수 있는 발광층, 전자수송층 및 정공저지층에 사용될 수 있다.

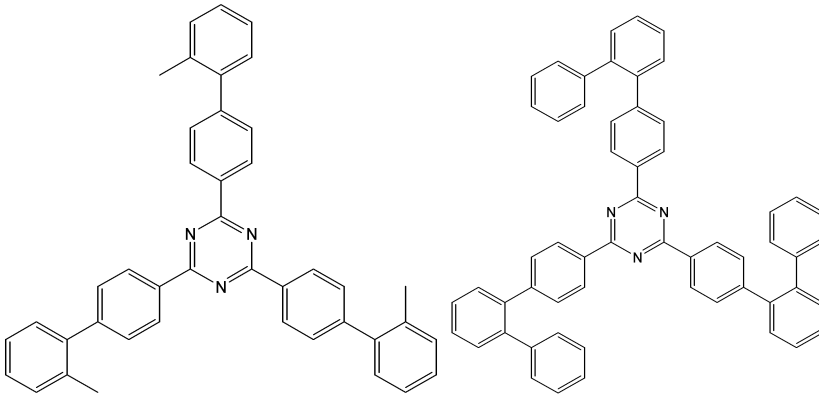
상기 알킬기, 아릴기 및 헤테로아릴기의 치환기가, -F, -Cl, -Br, -CN, -NO<sub>2</sub>, -OH; 미치환 또는 -F, -Cl, -Br, -CN, -NO<sub>2</sub> 또는 -OH로 치환된 C<sub>1-10</sub>알킬기, 미치환 또는 -F, -Cl, -Br, -CN, -NO<sub>2</sub> 또는 -OH로 치환된 C<sub>1-10</sub>알콕시기, 미치환 또는 -F, -Cl, -Br, -CN, -NO<sub>2</sub> 또는 -OH로 치환된 C<sub>6-10</sub>아릴기, 미치환 또는 -F, -Cl, -Br, -CN, -NO<sub>2</sub> 또는 -OH로 치환된 C<sub>4-10</sub>헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상일 수 있다.

보다 구체적으로, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>18</sub>이 서로 독립적으로, 수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기, 플루오로메틸기, 디플루오로메틸기, 트리플루오로메틸기, 페닐기, C<sub>1-10</sub>알킬페닐기, C<sub>1-10</sub>알콕시페닐기, 할로페닐기, 시아노페닐기, 디시아노페닐기, 트리플루오로메톡시페닐기, o-, m-, 또는 p-톨일기, o-, m- 또는 p-쿠메닐기, 메시틸기, 페녹시페닐기, (α,α-디메틸벤젠)페닐기, (N,N'-디메틸)아미노페닐기, (N,N'-디페닐)아미노페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, C<sub>1-10</sub>알킬나프틸기, C<sub>1-10</sub>알콕시나프틸기, 할로나프틸기, 시아노나프틸기, 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 안트라퀴놀일기, 메틸안트릴기, 페난트릴기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 크리세닐기, 에틸-크리세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 클로로페틸레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네틸기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기, 카르바졸릴기, C<sub>1-10</sub>알킬 카르바졸릴기, 비페닐기, C<sub>1-10</sub>알킬 비페닐기, C<sub>1-10</sub>알콕시 비페닐기, 티오페닐기, 인돌일기, 피리딜기, 피라졸릴기, 이미다졸릴기, 옥사졸릴기, 티아졸릴기, 트리아졸릴기, 테트라졸일기, 옥사디아졸릴기, 피리디닐기, 피리다지닐기 또는 피리미디닐기일 수 있고, 상기 R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>8</sub>, R<sub>13</sub> 및 R<sub>14</sub>가 모두 수소이고, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>9</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>11</sub>, R<sub>12</sub>, R<sub>15</sub>, R<sub>16</sub>, R<sub>17</sub> 및 R<sub>18</sub>이 서로 독립적으로, 수소 또는 상기 나열된 치환기들인 경우는 제외된다.

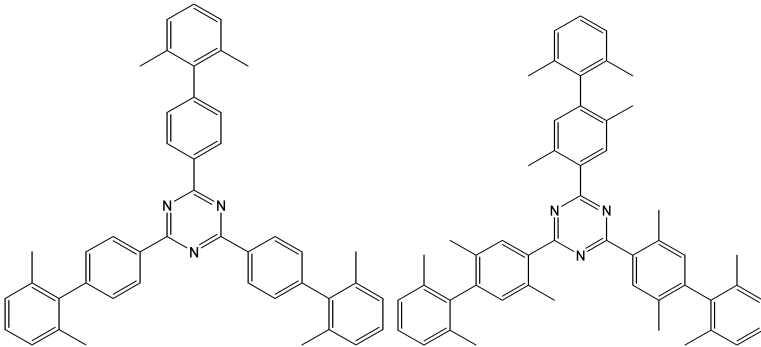
상기 화학식 1에 있어서, 예를 들어, R<sub>1</sub>, R<sub>7</sub> 및 R<sub>13</sub>이 서로 동일하고, R<sub>2</sub>, R<sub>8</sub> 및 R<sub>14</sub>이 서로 동일하고, R<sub>3</sub>, R<sub>9</sub> 및 R<sub>15</sub>이 서로 동일하고, R<sub>4</sub>, R<sub>10</sub> 및 R<sub>16</sub>이 서로 동일하고, R<sub>5</sub>, R<sub>11</sub> 및 R<sub>17</sub>이 서로 동일하고, R<sub>6</sub>, R<sub>12</sub> 및 R<sub>18</sub>이 서로 동일할 수 있다.

바람직하게, 본 발명을 따르는 트리아진계 화합물은 하기 화학식 2, 3, 4 또는 5로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

<화학식 2> <화학식 3>

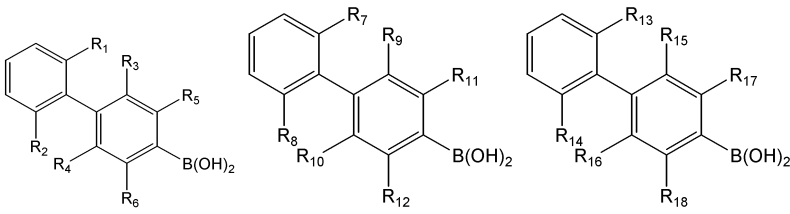


<화학식 4> <화학식 5>

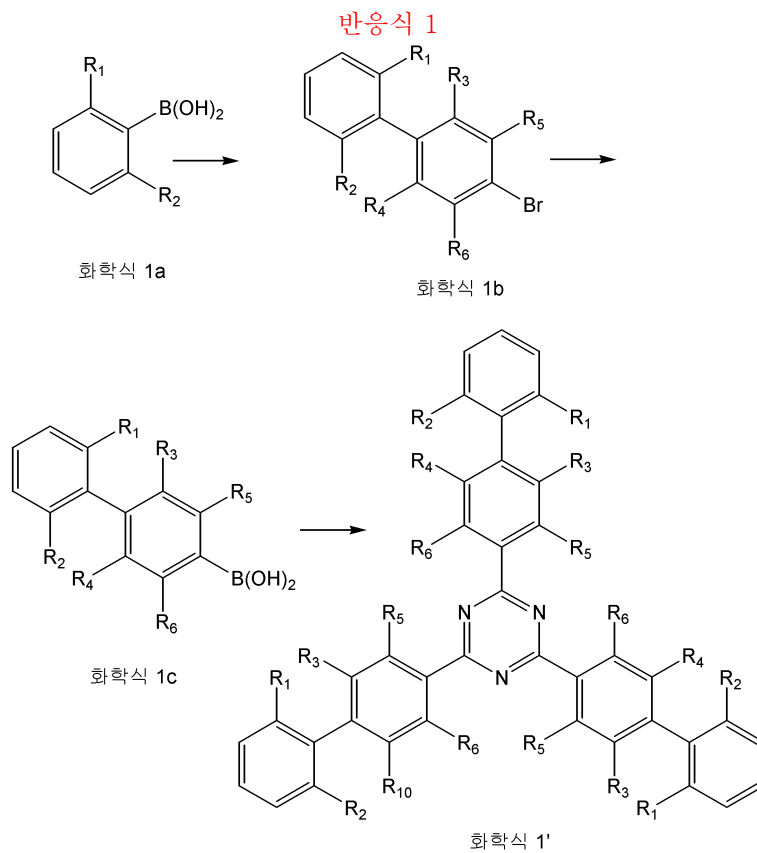


상기 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물의 합성 방법은 통상적인 유기 합성 방법을 이용한 것으로서, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물 합성 방법은 하기 화학식 1A로 표시되는 화합물 1A, 하기 화학식 1B로 표시되는 화합물 1B 및 하기 화학식 1C로 표시되는 화합물 1C로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상을 트리아진 고리-함유 화합물과 반응시키는 단계를 포함한다.

<화학식 1A> <화학식 1B> <화학식 1C>



이하, 본 발명을 따르는 트리아진계 화합물의 제조 방법을 상기 화학식 1 중, R<sub>1</sub>, R<sub>7</sub> 및 R<sub>13</sub>이 서로 동일하고, R<sub>2</sub>, R<sub>8</sub> 및 R<sub>14</sub>이 서로 동일하고, R<sub>3</sub>, R<sub>9</sub> 및 R<sub>15</sub>이 서로 동일하고, R<sub>4</sub>, R<sub>10</sub> 및 R<sub>16</sub>이 서로 동일하고, R<sub>5</sub>, R<sub>11</sub> 및 R<sub>17</sub>이 서로 동일하고, R<sub>6</sub>, R<sub>12</sub> 및 R<sub>18</sub>이 서로 동일할 수 있다. 이하, 하기 화학식 1'의 합성 경로를 나타낸 하기 반응식 1을 이용하여, 보다 상세히 살펴보기로 한다:



먼저, 상기 화학식 1a로 표시되는 화합물을 브로모페닐계 화합물과 반응시켜, 상기 화학식 1b로 표시되는 브로모비페닐계 화합물을 얻는다. 이 때, 상기 화학식 1a로 표시되는 화합물의 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>의 정의는 전술한 바를 따르나, 이들 모두가 수소인 경우가 제외됨은 물론이다. 상기 화학식 1b로 표시된 브로모비페닐계 화합물 중 R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub> 및 R<sub>6</sub>의 정의도 전술한 바를 참조한다. 이 후, 상기 화합물 1b로 표시되는 화합물을 부틸리튬 및 트리메톡시 보레이트와 반응시켜, 상기 화학식 1c로 표시되는 화합물을 얻는다. 이 때, 반응 온도는 -78℃ 내지 0℃, 바람직하게는 -78℃일 수 있다. 그리고 나서, 상기 화학식 1c로 표시되는 화합물을 트리아진 고리-함유 화합물과 반응시켜, 상기 화학식 1'으로 표시되는 트리아진계 화합물을 얻을 수 있다. 상기 트리아진-고리 함유 화합물은 트리할로트리아진일 수 있다. 예를 들면, 트리클로로-트리아진을 사용할 수 있다.

본 발명을 따르는 유기 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 유기막을 포함하되, 상기 유기막이 전술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물을 포함할 수 있다.

본 발명을 따르는 유기 발광 소자의 구조는 매우 다양하다. 상기 제1전극과 제2전극 사이에 유기막으로서 발광층을 포함하며, 상기 발광층 외에도, 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상의 층을 유기막으로서 더 포함할 수 있다. 이와 같은 유기막은 전술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물을 포함할 수 있다. 예를 들면, 본 발명을 따르는 유기 발광 소자 중, 상기 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물을 포함하는 유기막은 발광층, 전자수송층 또는 정공저지층일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

보다 구체적으로, 본 발명을 따르는 유기 발광 소자의 다양한 구현에는 도 1a, 1b 및 1c를 참조한다. 도 1a의 유기 발광 소자는 제1전극/정공수송층/발광층/전하수송층/제2전극으로 이루어진 구조를 갖고, 도 1b의 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극으로 이루어진 구조를 갖는다. 또한, 도 1c의 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/전자주입층/제2전극의 구조를 갖는다. 이 때, 상기 발광층, 전자수송층 또는 정공저지층이 상기 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물을 포함할 수 있음은 물론이다.

본 발명을 따르는 유기 발광 소자의 발광층은 적색, 녹색, 청색 또는 백색을 포함하는 인광 또는 형광 도펀트를 포함할 수 있다. 이 중, 상기 인광 도펀트는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb 및 Tm으로 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상의 원소를 포함하는 유기금속화합물일 수 있다.

이하, 본 발명을 따르는 유기 발광 소자의 제조 방법을 도 1c에 도시된 유기 발광 소자를 참조하여, 살펴보기로 한다.

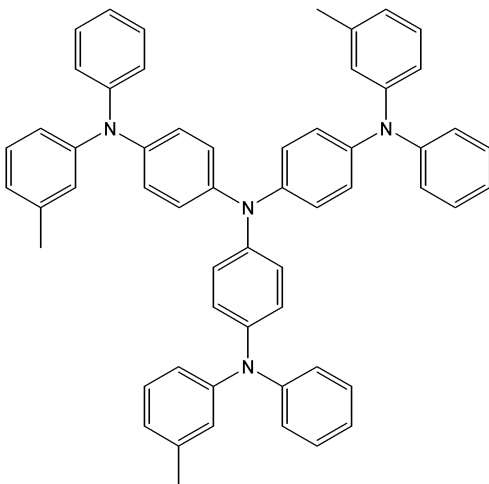
먼저 기판 상부에 높은 일함수를 갖는 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법에 의해 형성하여 제1전극을 형성한다. 상기 제1전극은 애노드(Anode)일 수 있다. 여기에서 기판으로는 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용하는 데 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유기기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 그리고, 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO<sub>2</sub>), 산화아연(ZnO) 등을 사용한다.

다음으로, 상기 제1전극 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공주입층(HIL)을 형성할 수 있다.

진공증착법에 의해 정공주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 일반적으로 증착온도 50 내지 500°C, 진공도 10<sup>-8</sup> 내지 10<sup>-3</sup> torr, 증착속도 0.01 내지 100Å/sec, 막 두께는 통상 10Å 내지 5μm 범위에서 적절히 선택하는 것이 바람직하다.

상기 정공주입층 물질로는 특별히 제한되지 않으며, 예를 들면, 미국특허 제4,356,429호에 개시된 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물 또는 Advanced Material, 6, p.677(1994)에 기재되어 있는 스타버스트형 아민 유도체류인 TCTA, m-MTDATA, m-MTDAPB 등을 정공주입층으로 사용할 수 있다. 상기 m-MTDATA의 화학식은 하기 화학식 6을 참조한다.

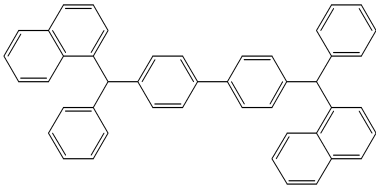
<화학식 6>



다음으로 상기 정공주입층 상부에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공증착법에 의해 정공수송층을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

상기 정공수송층 물질은 특별히 제한되지는 않으며, 정공수송층에 사용되고 있는 공지의 것에서 임의의 것을 선택하여 사용할 수 있다. 예를 들면, N-페닐카르바졸, 폴리비닐카르바졸 등의 카르바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐 벤지딘( $\alpha$ -NPD) 등의 방향족 축합환을 가지는 통상적인 아민 유도체 등이 사용된다.  $\alpha$ -NPD의 화학식은 하기 화학식 7을 참조한다:

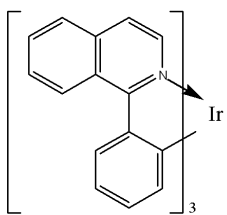
<화학식 7>



다음으로 상기 정공수송층 상부에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공증착법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

발광층 재료로는 전술한 바와 같은 본 발명을 따르는 화학식 1로 표시된 트리아진계 화합물이 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1로 표시된 트리아진계 화합물은 인광 호스트로서 사용될 수 있다. 이 밖에, 공지의 재료, 공지의 호스트 재료 및 도펀트 재료 중에서 임의로 선택된 물질을 발광층 재료로 사용할 수 있다. 호스트 재료의 경우, 예를 들면, Alq<sub>3</sub> 또는 CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐) 등을 사용할 수 있다. 한편, 도펀트의 경우, 예를 들면, 형광 도펀트로서는 이데미츠사(Idemitsu사)에서 구입 가능한 IDE102, IDE105 및 하야시바라사에서 구입 가능한 C545T 등을 사용할 수 있으며, 인광 도펀트로서는 적색 인광 도펀트 PtOEP, UDC사의 RD 61, 녹색 인광 도펀트 Ir(PPy)<sub>3</sub>(PPy=2-phenylpyridine), 청색 인광 도펀트인 F2Irpc, UDC사의 적색 인광 도펀트 RD 61 등을 사용할 수 있다. 또한, 하기 화학식 8로 표시되는 도펀트를 사용할 수 있다:

<화학식 8>



도핑 농도는 특별히 제한 되지 않으나 통상적으로 호스트와 도펀트 100 중량부를 기준으로 하여 상기 도펀트의 함량은 0.01 ~ 15 중량부이다.

발광층에 인광 도펀트와 함께 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여 정공저지재료(HBL)를 추가로 진공증착법 또는 스펀코팅법에 의해 적층시킬 수 있다. 이 때 사용할 수 있는 정공저지 물질로는 상기 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물을 사용할 수 있으며, 공지의 재료를 사용할 수도 있다. 공지의 정공저지재료는, 예를 들면 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, 또는 JP 11-329734(A1)에 기재되어 있는 정공저지재료, BCP 등을 들 수 있다.

다음으로 전자수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스핀코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 상기 전자수송층 재료는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 상기 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물을 사용할 수 있으며, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq<sub>3</sub>) 등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있다.

또한 전자수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

전자 주입층으로서는 LiF, NaCl, CsF, Li<sub>2</sub>O, BaO 등의 물질을 이용할 수 있다. 상기 정공저지층(HBL), 전자수송층(ETL), 전자주입층(EIL)의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

마지막으로 전자주입층 상부에 제2전극 형성용 금속을 진공증착법이나 스퍼터링법 등의 방법을 이용하여 제2전극을 형성할 수 있다. 상기 제2전극은 캐소드(Cathode)로 사용될 수 있다. 상기 제2전극 형성용 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 들 수 있다. 또한 전면 발광소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 사용한 투과형 캐소드를 사용할 수도 있다.

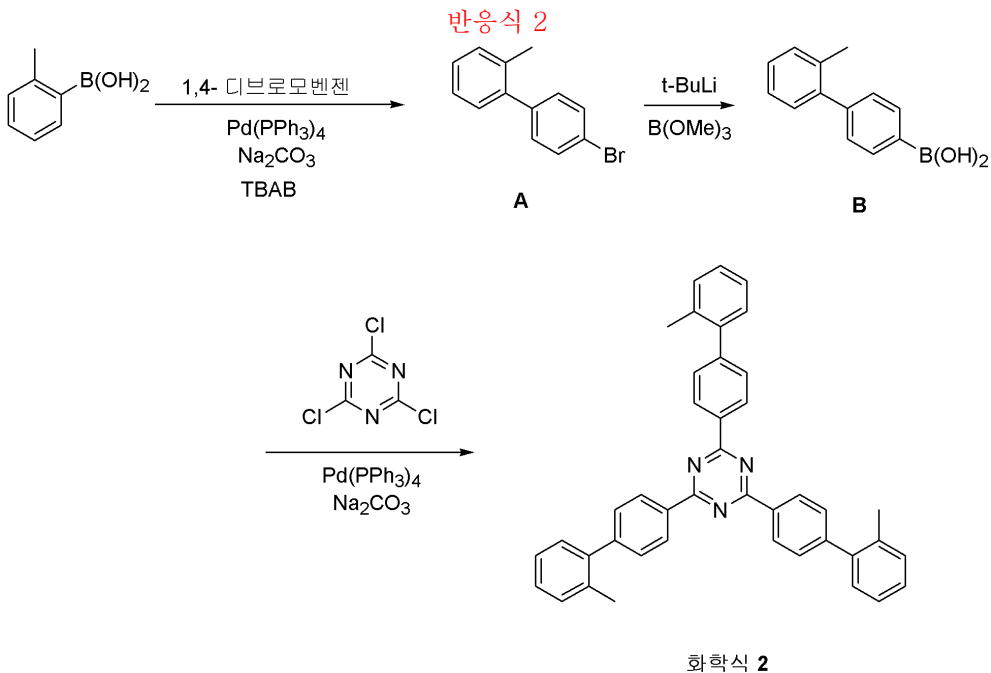
본 발명의 유기 발광 소자는 도 1c에 도시된 제1전극, 정공주입층(HIL), 정공수송층(HTL), 발광층(EML), 정공저지층(HBL), 전자수송층(ETL), 전자주입층(EIL), 제2전극 구조의 유기 발광 소자 뿐만 아니라, 다양한 구조의 유기 발광 소자의 구조가 가능하며, 필요에 따라 한층 또는 2층의 중간층을 더 형성하는 것도 가능하다.

이하에서, 본 발명을 따르는 화학식 2로 표시되는 화합물 2(이하, "화합물 2"라고 함), 화학식 3으로 표시되는 화합물 3(이하, "화합물 3"이라고 함), 화학식 4로 표시되는 화합물 4(이하, "화합물 4"라고 함) 및 화학식 5로 표시되는 화합물 5(이하, "화합물 5"라고 함)의 합성에 및 실시예를 구체적으로 예시하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다.

실시예

합성예 1

하기 반응식 2의 반응 경로에 따라 화합물 2를 합성하였다:



중간체 A의 합성

o-톨릴보로닉 산(5.7 g, 41.9 mmol), 1,4-디브로모벤젠(10 g, 41.9 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.315 g, 0.273 mmol), 테트라부틸암모늄 브로마이드(0.68 g, 2.1 mmol), 2M Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(42 mL)을 톨루엔(500 mL)에 녹인 후, 환류온도에서 5시간 동안 교반하였다. 상온까지 냉각시킨 후 물(200mL)을 첨가하고 디클로로메탄 200mL씩 3회 추출하였다. 수거한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고, 용매를 증발시켜, 조(crude)생성물을 얻은 다음, 실리카젤관 크로마토그래피로 분리 정제하여, 8.3g(수율 88%)의 중간체 A를 얻었다.

#### 중간체 B의 합성

상기 중간체 A(7 g, 28.3 mmol)를 THF에 용해시킨 후, -78℃에서 노르말헥산에 용해된 1.7몰 터서리부틸리튬(67mL)을 한 방울씩 적가한 다음, 20분간 교반하였다. 트리메톡시 보레이트(12.9 mL, 113.3 mmol)를 상기 반응액에 첨가한 다음 동일한 온도에서 2시간 동안 교반한 후, 상온에서 1시간 동안 교반하였다. 상기 반응액을 0℃로 냉각한 후, 6노르말 염산(200mL)을 첨가하고, 디에틸에테르 150mL씩 3회 추출하였다. 수거한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고, 용매를 증발시켜, 조생성물을 얻은 다음, 실리카젤관 크로마토그래피로 분리 정제하여, 4.04g(수율 67%)의 중간체 B를 얻었다.

#### 화합물 2의 합성

상기 중간체 B(4 g, 18.9 mmol), 시아누릭 클로라이드(0.87 g, 4.72 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.03 g, 0.024 mmol), 2M Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (19 mL)을 톨루엔(100mL)에 용해시킨 후, 환류온도에서 48시간 동안 교반하였다. 상온까지 냉각시킨 후 물(200mL)을 첨가하고, 디에틸에테르 150mL씩 3회 추출하였다. 수거한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고, 용매를 증발시켜, 조생성물을 얻은 다음, 디클로로메탄과 메틸알콜을 이용하여 재결정함으로써, 1.33g(수율 48%)의 화합물 2를 얻었다.

<sup>1</sup>H NMR(CDCl<sub>3</sub>, 400MHz) δ (ppm) 8.86(dd, 6H), 7.56(dd, 6H), 7.35~7.29(m, 12H), 2.35(s, 9H).

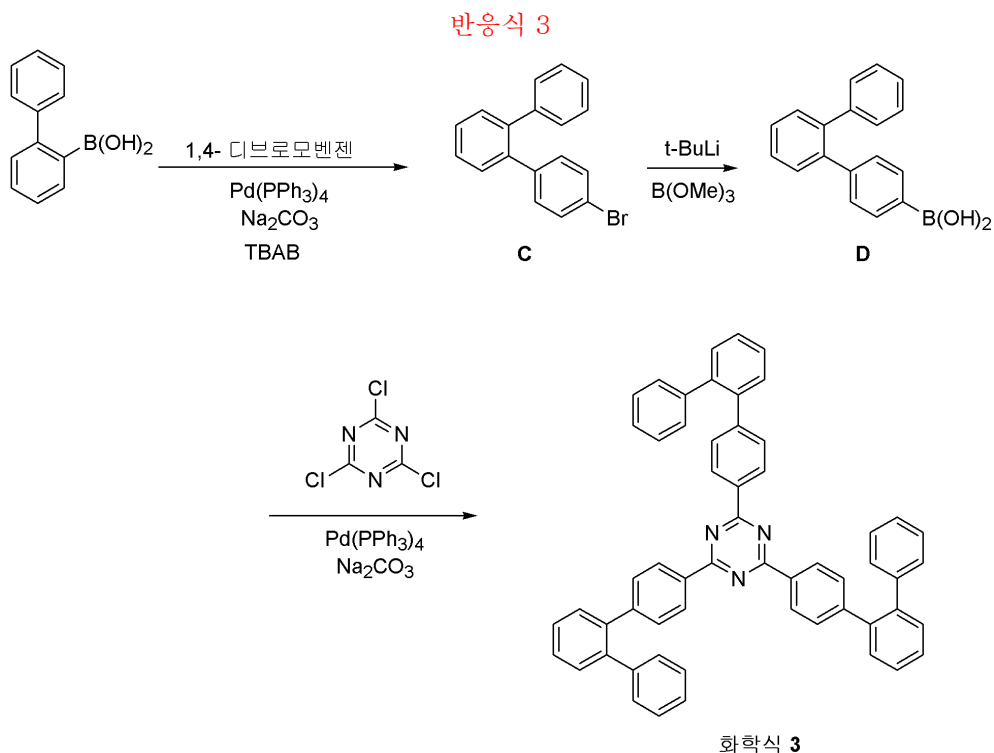
상기 화합물 2를 CHCl<sub>3</sub>에 0.2mM의 농도로 희석시켜, UV 스펙트럼(Spectrum)을 측정된 결과, 최대흡수파장 300.5nm를 관찰하였다.

이어서, 상기 화합물 2를 CHCl<sub>3</sub>에 10mM 농도로 희석시켜, 350nm에서의 PL(Photoluminescence)을 측정된 결과, 420nm에서의 최대 발광을 관찰하였다(도 2 참조).

또한, 상기 화합물 2에 대하여, TGA(Thermo Gravimetric Analysis) 및 DSC(Differential Scanning Calorimetry)를 이용한 열분석(N<sub>2</sub> 분위기, 온도구간 : 상온~ 600℃(10℃/min)-TGA, 상온에서 400℃까지-DSC, Pan Type : Pt Pan in 일회용 Al Pan(TGA), 일회용 Al pan(DSC))을 수행한 결과, Td 359℃, Tm 305℃를 각각 얻었다(도 3 및 도 4 참조).

#### 합성예 3

하기 반응식 3의 반응 경로에 따라 화합물 3를 합성하였다:



중간체 C의 합성

o-톨릴보로닉 산 대신, 2-비페닐보로닉 산(10g, 50.50mmol)을 이용하였다는 점을 제외하고, 상기 합성에 1의 중간체 A의 제조 방법과 동일한 방법을 수행하여, 10.93g(수율 77%)의 중간체 C를 얻었다.

중간체 D의 합성

중간체 B 대신 상기 중간체 C(11g, 35.58mmol)를 이용하였다는 점을 제외하고, 상기 합성에 1의 중간체 B의 제조 방법과 동일한 방법을 수행하여, 6.92g(수율 71%)의 중간체 D를 얻었다.

화합물 3의 합성

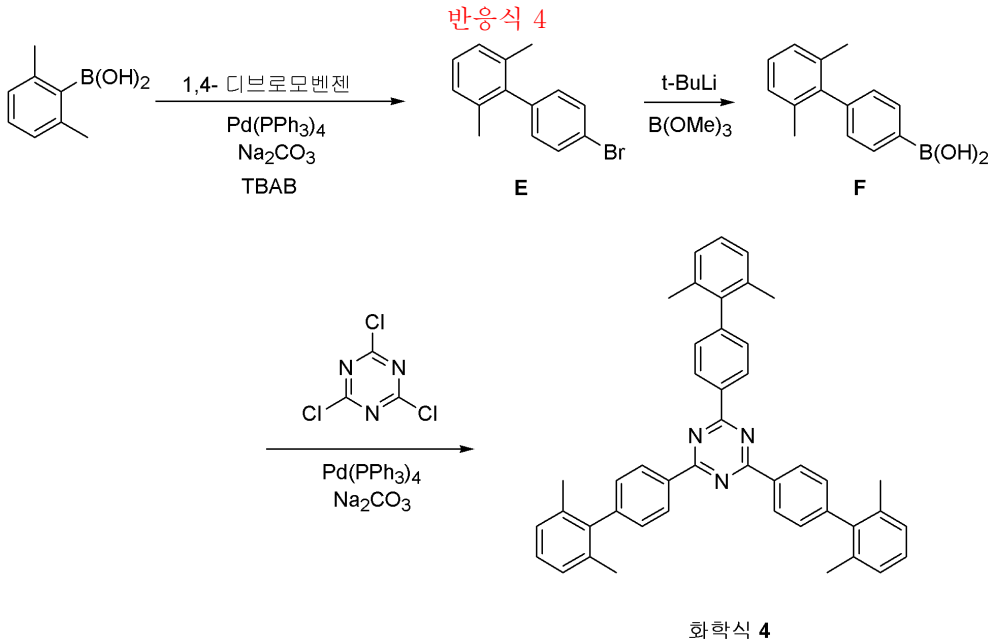
중간체 B 대신 상기 중간체 C(6.5g, 23.71mmol)를 이용하였다는 점을 제외하고, 상기 합성에 1의 화합물 2의 제조 방법과 동일한 방법을 수행하여, 2.54g(수율 56%)의 화합물 3을 얻었다.

<sup>1</sup>H NMR(CDCl<sub>3</sub>, 400MHz) δ (ppm) 8.58(d, 6H), 7.51~7.46(m, 12H), 7.33(d, 6H), 7.26~7.18(m, 15H)

상기 화합물 3을 CHCl<sub>3</sub>에 10mM의 농도로 희석시켜 360nm에서의 PL을 측정할 결과, 410nm에서 최대 발광을 관찰하였다(도 5 참조).

합성예 3

하기 반응식 4의 반응 경로에 따라 화합물 4를 합성하였다:



중간체 E의 합성

o-톨릴보로닉 산 대신, 2,6-디메틸페닐보로닉 산(7g,46.64mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고, 상기 합성에 1 중 중간체 A의 제조 방법과 동일한 제조 방법을 수행하여, 7.61g(수율 83%)의 중간체 E를 얻었다.

중간체 F의 합성

중간체 A 대신 상기 중간체 E(8g,37.01mmol)를 사용하였다는 점을 제외하고, 상기 합성에 1 중 중간체 B의 제조 방법과 동일한 제조 방법을 수행하여, 5.85g(수율 70%)의 중간체 F를 얻었다.

화합물 4의 합성

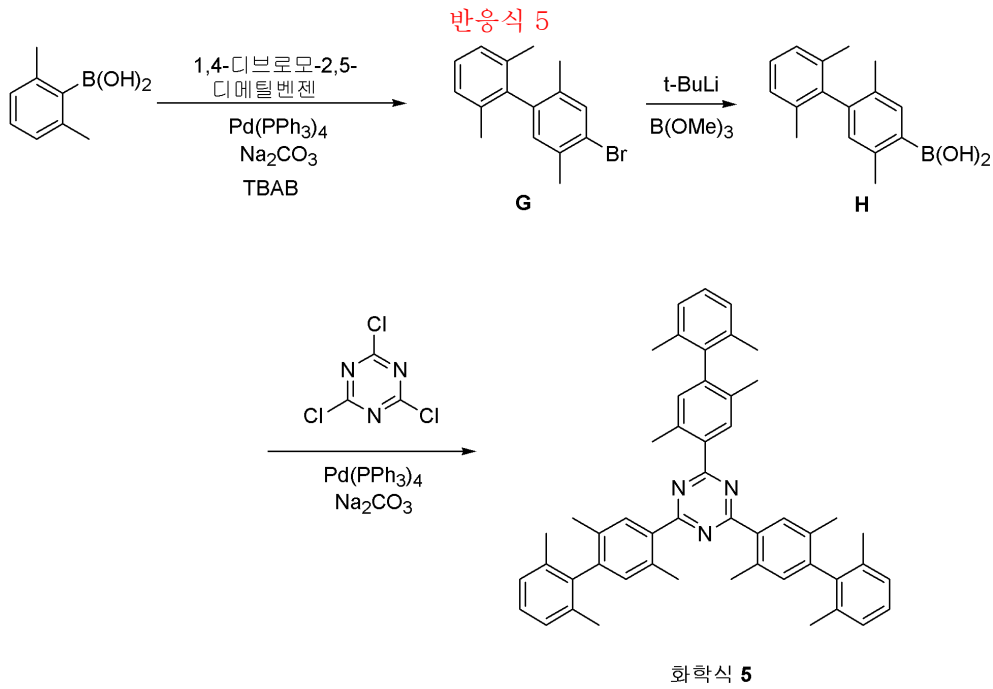
중간체 B 대신 상기 중간체 F(5.5g,24.33mmol)를 사용하였다는 점을 제외하고, 상기 합성에 1 중 화합물 2의 제조 방법과 동일한 제조 방법을 수행하여, 1.97g(수율 52%)이 화합물 4를 얻었다.

<sup>1</sup>H NMR(CDCl<sub>3</sub>, 400MHz) δ (ppm) 8.91(d, 6H), 7.40(d, 6H), 7.21~7.14(m, 9H), 2.10(s, 18H).

상기 화합물 4를 CHCl<sub>3</sub>에 10mM 농도로 묽혀서 360nm에서의 PL을 측정된 결과, 400nm에서의 최대 발광을 관찰하였다 (도 6 참조).

합성예 4

하기 반응식 5의 반응 경로에 따라 화합물 5를 합성하였다:



중간체 G의 합성

o-톨릴보로닉 산 대신 2,6-디메틸페닐보로닉 산(10.3g, 68.40mmol)을 이용하고, 1,4-디브로모벤젠 대신 1,4-디브로모-2,5-디메틸벤젠(16.4g, 62.18mmol)을 이용하였다는 점을 제외하고, 상기 합성에 1의 중간체 A의 제조 방법과 동일한 방법을 수행하여, 9.81g(수율 55%)의 중간체 G를 얻었다.

<sup>1</sup>H NMR(CDCl<sub>3</sub>, 400MHz) δ (ppm) 7.42(s, 1H), 7.09~7.03(m, 3H), 6.86(s, 1H), 2.35(s, 3H), 1.91(s, 3H), 1.88(s, 6H); <sup>13</sup>C NMR(CDCl<sub>3</sub>, 400MHz) δ (ppm) 140.57, 136.28, 135.94, 135.89, 134.19, 131.85, 127.98, 127.85, 123.76, 22.97, 20.93, 19.25.

중간체 H의 합성

중간체 A 대신, 상기 중간체 G(9.5g, 32.85mmol)를 이용하였다는 점을 제외하고, 상기 합성에 1의 중간체 B의 제조 방법과 동일한 방법을 수행하여, 5.68g(수율 68%)의 중간체 H를 얻었다.

<sup>1</sup>H NMR(CDCl<sub>3</sub>, 400MHz) δ (ppm) 8.18(s, 1H), 7.18~7.12(m, 3H), 6.98(s, 1H), 2.85(s, 3H), 2.03(s, 3H), 2.00(s, 6H); <sup>13</sup>C NMR(CDCl<sub>3</sub>, 400MHz) δ (ppm) 144.79, 143.84, 140.84, 139.14, 135.59, 135.50, 132.23, 131.14, 127.24, 127.00, 22.64, 20.35, 19.01.

화합물 5의 합성

중간체 B 대신 상기 중간체 H(5.5g, 21.64mmol)를 이용하였다는 점을 제외하고는 상기 합성에 1의 화합물 2의 제조 방법과 동일한 방법을 수행하여, 2.33g(수율 61%)의 화합물 5를 얻었다.

<sup>1</sup>H NMR(CDCl<sub>3</sub>, 400MHz) δ (ppm) 8.14(s, 3H), 7.21~7.12(m, 9H), 7.05(s, 3H), 2.81(s, 9H), 2.06(s, 9H), 2.01(s, 18H); <sup>13</sup>C NMR(CDCl<sub>3</sub>, 400MHz) δ (ppm) 143.56, 140.44, 136.29, 135.66, 135.02, 133.54, 132.83, 132.31, 127.26, 127.11, 29.70, 21.69, 20.41, 19.05.

상기 화합물 5를 CHCl<sub>3</sub>에 0.2mM의 농도로 희석시켜, UV 스펙트럼을 얻은 결과, 최대흡수파장 282.5nm를 관찰하였다.

또한, 상기 화합물 5를  $\text{CHCl}_3$  에 10mM의 농도로 희석시켜, 356nm에서 PL 을 측정된 결과, 397nm에서 최대 발광을 관찰하였다(도 7 참조).

이어서, 상기 화합물 5에 대하여 TGA(Thermo Gravimetric Analysis) 및 DSC(Differential Scanning Calorimetry)를 이용한 열분석( $\text{N}_2$  분위기, 온도구간 : 상온~ 600°C (10°C/min)-TGA , 상온에서 400°C까지-DSC, Pan Type : Pt Pan in 일회용 Al Pan(TGA) , 일회용 Al pan(DSC))을 수행한 결과, Tg 120°C, Tc 191°C, Tm 283°C를 얻었다(도 8 및 9 참조).

### 실시예 1

상기 합성에 1에서 합성한 화합물 2를 전자수송층으로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기 발광 소자를 제작하였다: m-MTDATA(750Å)/α-NPD(150Å)/CBP(300Å):화합식 8로 표시되는 화합물 8(10%)/Balq(50Å)/화합물 2(200Å)/LiF(80Å)/Al(3000Å).

애노드는 코닝(corning) 15Ω/cm<sup>2</sup> (1200Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수물속에서 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 m-MTDATA를 진공증착하여 정공주입층을 750Å 두께로 형성하였다. 이어서 상기 정공주입층 상부에 α-NPD를 150Å의 두께로 진공 증착하여 정공수송층을 형성하였다. 정공수송층을 형성한 후, 상기 정공수송층 상부에 인광 호스트로서 CBP를 사용하고 인광 도판트로써 화합식 8로 표시되는 화합물 8(이하, "화합물 8"이라고 함)(USP2003/0068526 참조)을 10% 사용하여 진공증착함으로써, 300Å의 두께의 발광층을 형성하였다. 그 후, 상기 발광층 상부에 Balq를 진공증착하여 50Å 두께의 정공저지층을 형성하였다. 상기 정공저지층 상부에 화합물 2를 진공증착하여 200Å 두께의 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 80Å(전자주입층)과 Al 3000Å (캐소드)을 순차적으로 진공증착하여, 도 1c에 도시된 바와 같은 유기 발광 소자를 제조하였다. 이를 샘플 1이라고 한다.

### 실시예 2

상기 합성에 1에서 합성한 화합물 2를 정공저지층으로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기 발광 소자를 제작하였다: m-MTDATA(750Å)/α-NPD(150Å)/CBP(300Å):화합물 8(10%)/화합물 2(50Å)/Alq3(200Å)/LiF(80Å)/Al(3000Å)

애노드는 코닝(corning) 15Ω/cm<sup>2</sup> (1200Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수물속에서 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 m-MTDATA를 진공증착하여 정공주입층을 750Å 두께로 형성하였다. 이어서 상기 정공주입층 상부에 α-NPD를 150Å의 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 정공수송층을 형성한 후, 상기 정공수송층 상부에 인광 호스트로서 CBP를 이용하고, 인광 도판트로써 화합물 8(USP2003/0068526 참조)를 10% 사용하여, 진공증착함으로써 300Å 두께의 발광층을 형성하였다. 상기 발광층 상부에 화합물 2를 진공증착하여 50Å 두께의 정공저지층을 형성하였다. 상기 정공저지층 상부에 Alq3를 진공증착하여 200Å 두께의 전자수송층을 형성한 다음, 상기 전자수송층 상부에 LiF 80Å(전자 주입층)과 Al 3000Å(캐소드)를 순차적으로 진공 증착하여 도 1c에 도시된 바와 같은 유기 발광 소자를 제작하였다. 이를 샘플 2라고 한다.

### 실시예 3

상기 합성에 1에서 합성한 화합물 2를 발광층의 호스트로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기 발광 소자를 제작하였다: m-MTDATA(750Å)/α-NPD(150Å)/화합물 2 : Irppy(6%) (300Å)/Balq(50Å)/Alq3(200Å)/LiF(80Å)/Al(3000Å).

애노드는 코닝(corning) 15Ω/cm<sup>2</sup> (1200Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수물속에서 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 m-MTDATA를 진공증착하여 정공주입층을 750Å 두께로 형성하였다. 이어서 상기 정공주입층 상부에 α-NPD를 150Å의 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 정공수송층을 형성한 후, 상기 정공수송층 상부에 인광 호스트로서 화합물 2를 이용하고, 인광 도판트로써 Irppy를 6% 사용하여, 진공증착함으로써 300Å 두께의 발광층을 형성하였다. 상기 발

광층 상부에 Balq 를 진공증착하여 50Å 두께의 정공저지층을 형성하였다. 상기 정공저지층 상부에 Alq3를 진공증착하여 200Å 두께의 전자수송층을 형성한 다음, 상기 전자수송층 상부에 LiF 80Å(전자 주입층)과 Al 3000Å(캐소드)를 순차적으로 진공 증착하여 도 1c에 도시된 바와 같은 유기 발광 소자를 제작하였다. 이를 샘플 3이라고 한다.

### 비교예

다음과 같은 구조의 유기 발광 소자를 제작하였다: m-MTDATA(750Å)/α-NPD(150Å)/CBP(300Å):화합물 8(10%)/Balq(50Å)/Alq(200Å)/LiF(80Å)/Al(3000Å)

에노드는 코닝(corning) 15Ω/cm<sup>2</sup> (1200Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수물속에서 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 m-MTDATA를 진공 증착하여 정공주입층을 750Å 두께로 형성하였다. 이어서 상기 정공주입층 상부에 α-NPD를 150Å의 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 정공수송층을 형성한 후, 상기 정공수송층 상부에 인광 호스트로서 CBP를 이용하고, 인광 도판트로써 화합물 8(USP2003/0068526참조)를 10% 이용하여, 이를 진공증착함으로써, 300Å 두께의 발광층을 형성하였다. 상기 발광층 상부에 Balq를 진공증착하여 50Å 두께의 정공저지층을 형성한 다음, 상기 정공저지층 상부에 Alq3를 진공 증착하여 200Å 두께의 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 80Å(전자주입층)과 Al 3000Å(캐소드)를 순차적으로 진공 증착하여, 도 1c에 도시된 바와 같은 유기 발광 소자를 제조하였다. 이를 샘플 A라고 한다.

### 평가예 1

상기 샘플 1, 2 및 A에 대하여, 전류-전압 특성, 휘도 특성, 효율 특성 및 소비 전력 특성을 평가하여, 각각 도 10, 11, 12 및 13에 나타내었다. 상기 전류-전압 특성 평가에는 Keithley를 사용하였고, 휘도 특성 평가, 효율 특성 평가 및 소비 전력 특성 평가에는 IVL 측정장치(PhotoResearch PR650 Keithley 238)를 사용하였다.

도 10에 따르면, 동일 전압 인가시, 샘플 1 및 2의 전류 밀도가 샘플 A에 비하여 높은 것을 알 수 있는 바, 본 발명을 따르는 유기 발광 소자는 우수한 전류 밀도 특성을 가짐을 알 수 있다.

도 11에 따르면, 동일 전압 인가시, 샘플 1 및 2가 샘플 A에 비하여 최고 약 2.6배에 이르는 휘도를 갖는 것을 알 수 있는 바, 본 발명을 따르는 유기 발광 소자는 우수한 휘도 특성을 가짐을 알 수 있다.

도 12에 따르면, 샘플 1 및 2는 동일한 휘도 구현을 위하여 샘플 A에 비하여 적은 전류를 요구하는 바, 본 발명을 따르는 유기 발광 소자는 우수한 효율 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

도 13에 따르면, 샘플 1 및 2는 샘플 A에 비하여 적은 전력을 요구하는 바, 본 발명을 따르는 우수한 전력 효율을 가짐을 확인할 수 있다.

따라서, 상기 도 10 내지 13으로부터, 본 발명을 따르는 유기 발광 소자는 우수한 전자수송 특성 및 정공저지 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

### 평가예 2

상기 샘플 3의 휘도, 전류 효율, 전력효율 및 수명을 상기 평가예 1과 동일한 방법으로 평가하였다. 그 결과, 상기 샘플 3은 5.5V에서 870 cd/m<sup>2</sup>의 휘도, 55.22 cd/A의 전류 효율, 31.54 lm/W의 전력 효율, 5000 cd에서 33시간의 수명을 나타내었다. 이로써, 본 발명을 따르는 화합물은 유기 발광 소자의 발광층을 형성하는 재료로서 매우 적합함을 알 수 있다.

### **발명의 효과**

본 발명에 따라 화학식 1로 표시되는 트리아진계 화합물은 트리아진 고리에 치환된 비페닐기의 2 개의 아릴기 간의 권주게이션이 일어나지 않아, 높은 에너지 갭을 가질 수 있다. 따라서, 본 발명을 따르는 트리아진계 화합물은 우수한 전자수송 능력과 정공저지능력을 바탕으로 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 모든 컬러의 형광과 인광 소자에 적합한 유기막 형성 재료로 유효하게 사용되어, 고효율, 저전압, 고휘도, 장수명의 유기 발광 소자를 얻을 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

- 도 1a 내지 1c는 본 발명을 따르는 유기 발광 소자의 구조를 간략하게 나타낸 단면도이고,  
 도 2는 화학식 2로 표시되는 화합물 2의 PL(Photoluminescence) 스펙트럼을 나타낸 도면이고,  
 도 3은 화학식 2로 표시되는 화합물 2에 대한 TGA(Thermo Gravimetric Analysis) 분석 결과를 나타낸 도면이고,  
 도 4는 화학식 2로 표시되는 화합물 2에 대한 DSC(Differential Scanning Calorimetry) 분석 결과를 나타낸 도면이고,  
 도 5는 화학식 3으로 표시되는 화합물 3의 PL 스펙트럼을 나타낸 도면이고,  
 도 6은 화학식 4로 표시되는 화합물 4의 PL 스펙트럼을 나타낸 도면이고,  
 도 7은 화학식 5로 표시되는 화합물 5의 PL 스펙트럼을 나타낸 도면이고,  
 도 8은 화학식 5로 표시되는 5에 대한 TGA 분석 결과를 나타낸 도면이고,  
 도 9는 화학식 5로 표시되는 화합물 5에 대한 DSC 분석 결과를 나타낸 도면이고,  
 도 10은 본 발명의 실시예 1 및 2 및 비교예에 따른 유기 발광 소자에 있어서, 인가 전압에 따른 전류 밀도 변화를 나타낸 도면이고,  
 도 11은 본 발명의 실시예 1 및 2 및 비교예에 따른 유기 발광 소자에 있어서, 인가 전압에 따른 휘도 변화를 나타낸 도면이고,  
 도 12는 본 발명의 실시예 1 및 2 및 비교예에 따른 유기 발광 소자에 있어서, 휘도에 따른 효율 변화를 나타낸 도면이고,  
 도 13은 본 발명의 실시예 1 및 2 및 비교예에 따른 유기 발광 소자에 있어서, 휘도에 따른 전력 효율 변화를 나타낸 도면이다.

### 도면

도면1a

제2전극
전자수송층
발광층
정공수송층
제1전극
기판

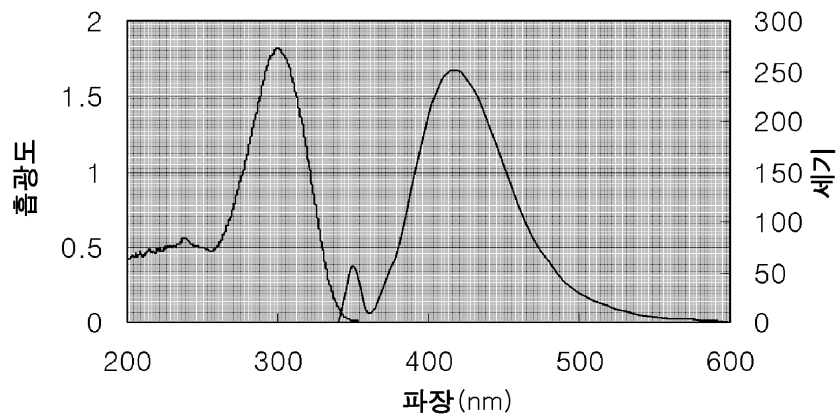
도면1b

제2전극
전자주입층
전자수송층
발광층
정공수송층
정공주입층
제1전극
기판

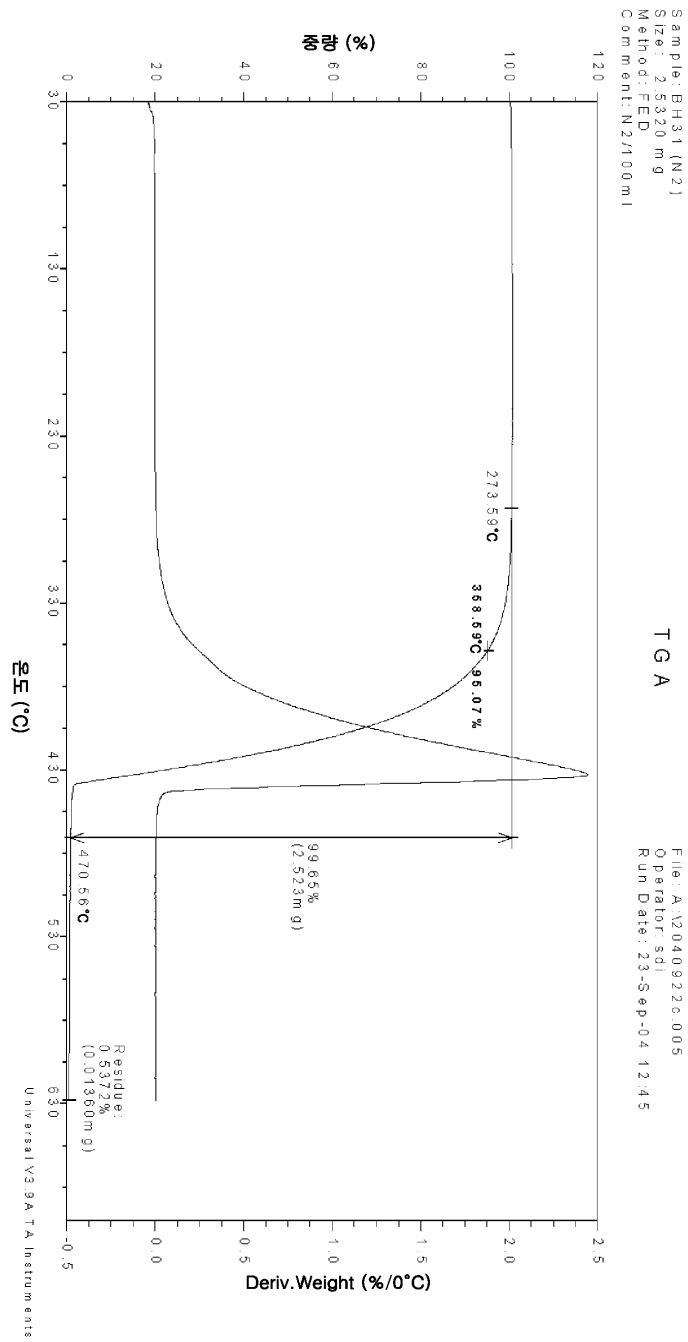
도면1c

제2전극
전자주입층
전자수송층
정공저지층
발광층
정공수송층
정공주입층
제1전극
기판

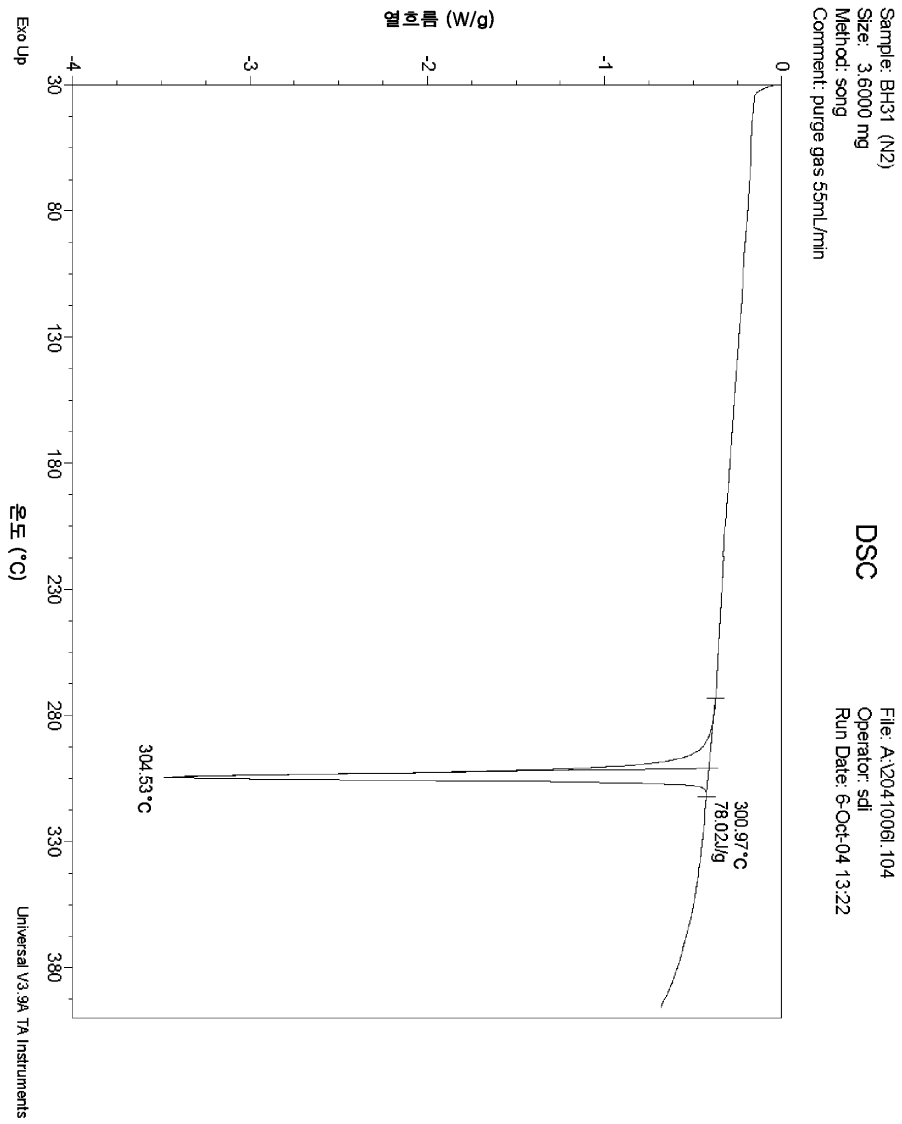
도면2



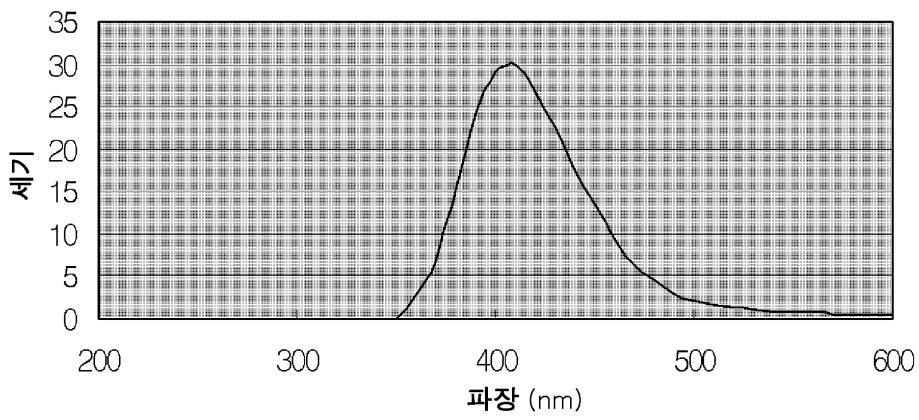
도면3



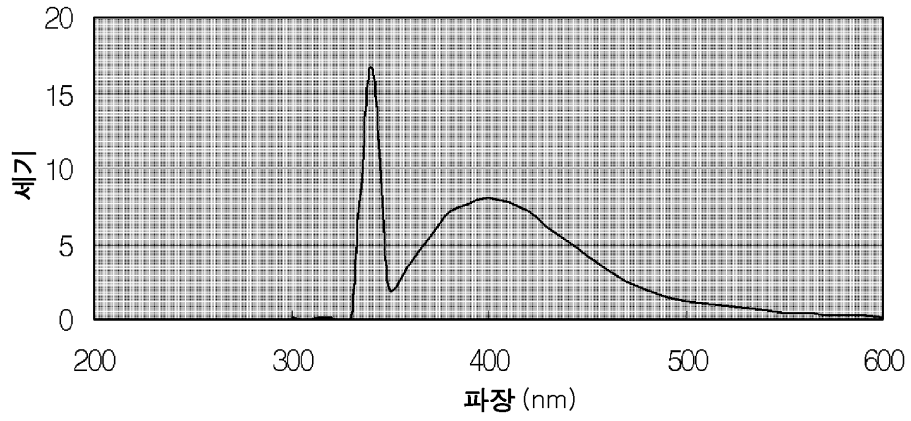
도면4



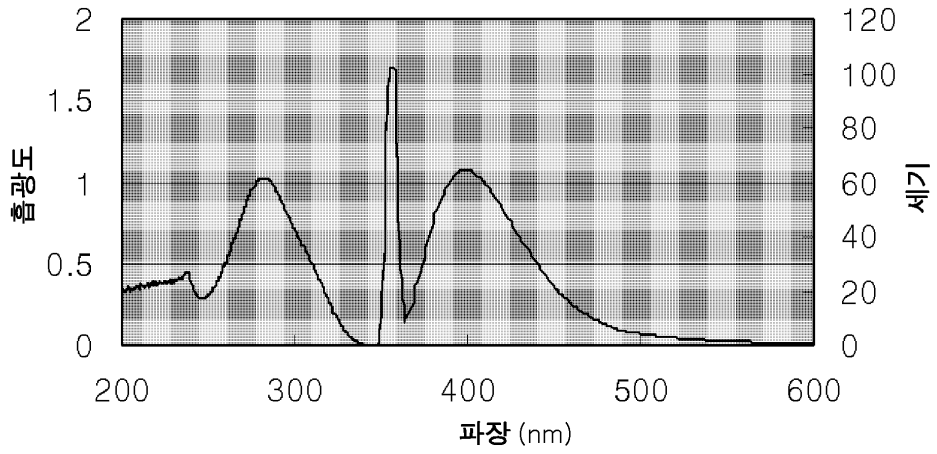
도면5



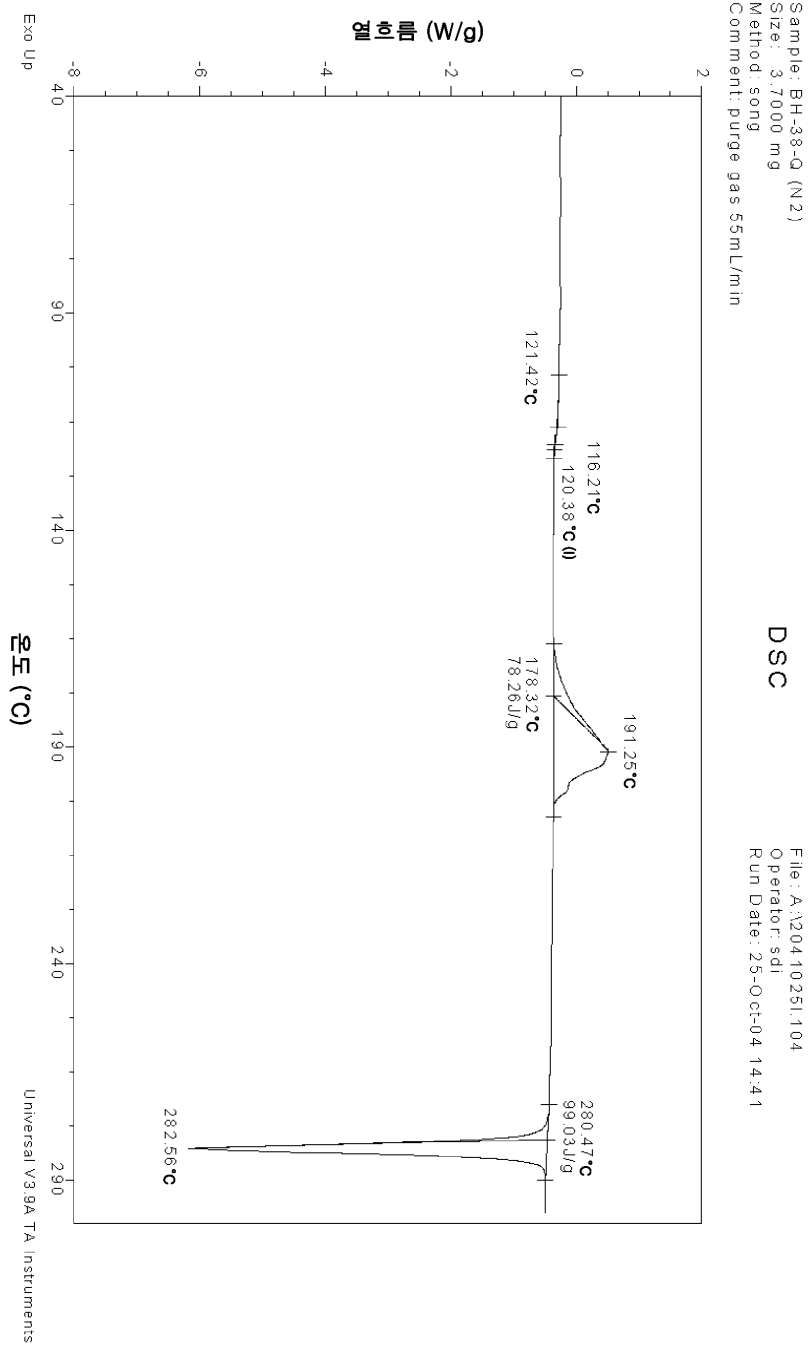
도면6



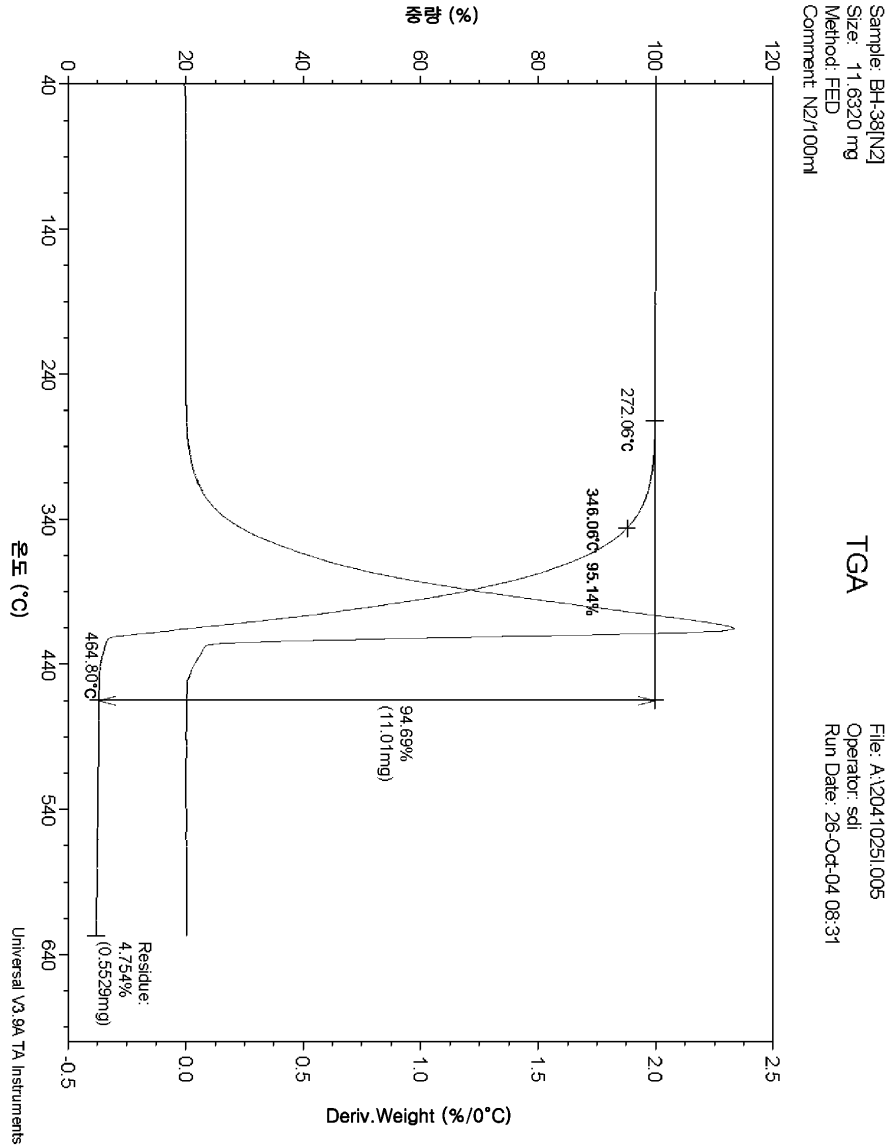
도면7



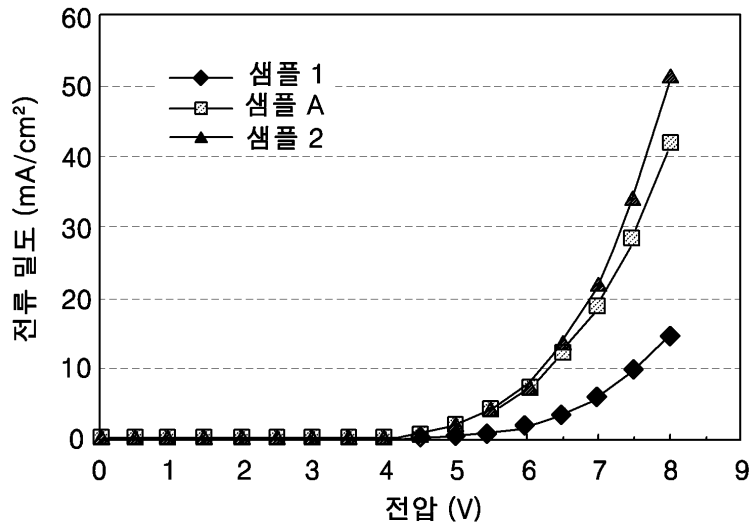
도면8



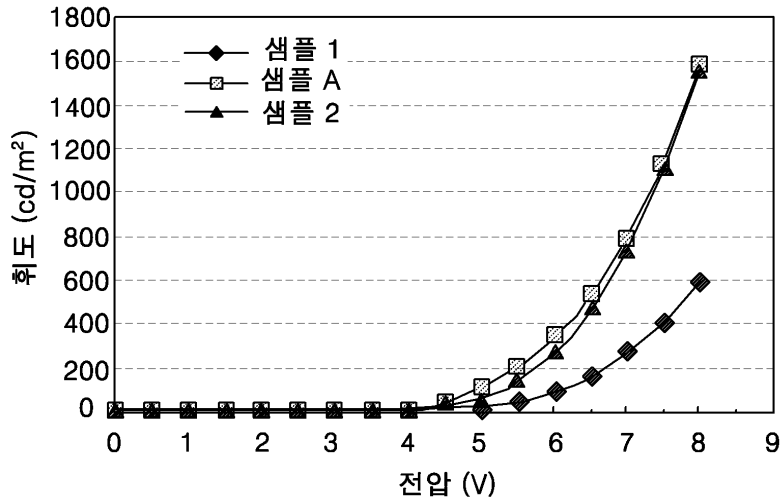
도면9



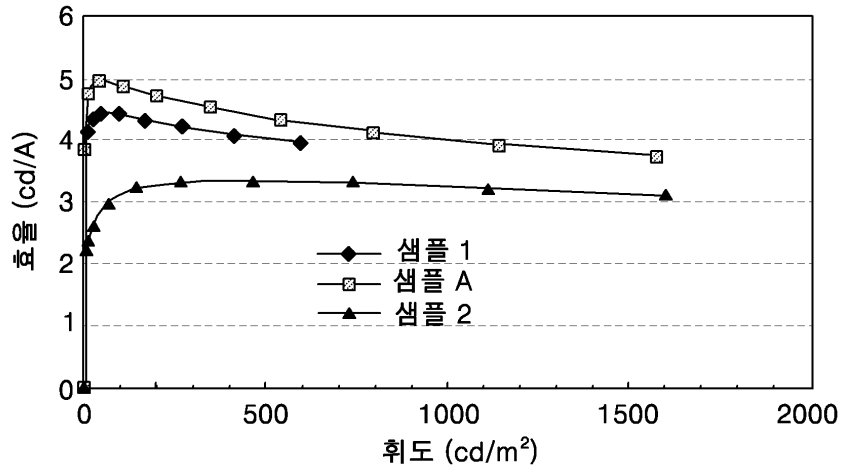
도면10



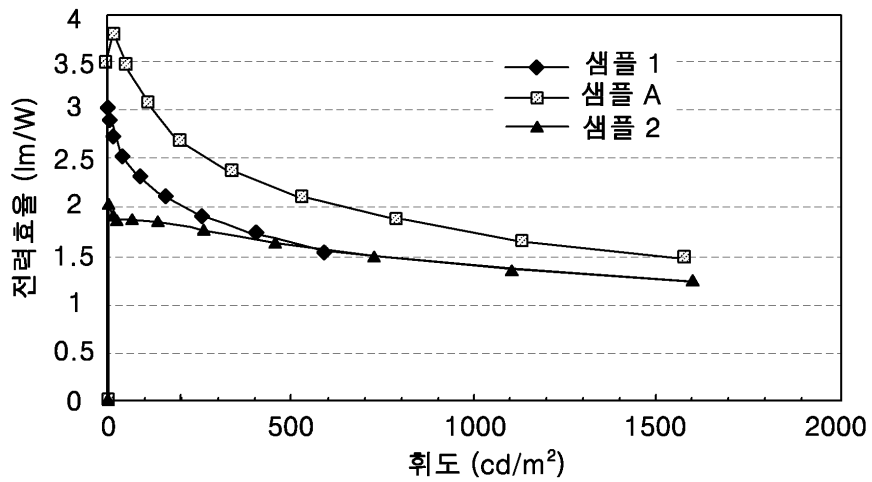
도면11



도면12



도면13



专利名称(译)	三嗪化合物和使用其的有机发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR100730140B1</a>	公开(公告)日	2007-06-19
申请号	KR1020050064059	申请日	2005-07-15
申请(专利权)人(译)	三星SD眼有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	三星SD眼有限公司		
[标]发明人	SHIN JUNG HAN 신정환 LEE SEOK JONG 이석종 LEE CHANG HO 이창호 HWANG SEOK HWAN 황석환 YANG SEUNG GAK 양승각 KIM YOUNG KOOK 김영국 KIM HEE YEON 김희연		
发明人	신정환 이석종 이창호 황석환 양승각 김영국 김희연		
IPC分类号	C09K11/06		
CPC分类号	H01L51/5012 H01L51/0067 H01L51/0059 C09K2211/1029 C07D251/24 H01L51/0085 H01L51/5048 C09K11/06 C09K2211/185 C09K2211/1007 H05B33/14 C09K2211/1059 C09K2211/1014 H01L51/0081		
其他公开文献	KR1020070009074A		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

用途：提供三嗪基化合物以具有良好的电子传输和空穴阻挡性能，并制备具有高效率，低电压，高亮度和长寿命的有机发光器件。

제2전극
전자주입층
전자수송층
정공저지층
발광층
정공수송층
정공주입층
제1전극
기판