



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2012-0052936  
(43) 공개일자 2012년05월24일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
**C09K 11/06** (2006.01) **H05B 33/22** (2006.01)  
**C07D 235/02** (2006.01) **C07D 403/14** (2006.01)
- (21) 출원번호 10-2012-7001305
- (22) 출원일자(국제) 2010년06월11일  
 심사청구일자 **없음**
- (85) 번역문제출일자 2012년01월17일
- (86) 국제출원번호 PCT/EP2010/058194
- (87) 국제공개번호 WO 2010/145991  
 국제공개일자 2010년12월23일
- (30) 우선권주장  
 09163085.5 2009년06월18일  
 유럽특허청(EPO)(EP)
- (71) 출원인  
**바스프 에스이**  
 독일 데-67056 루드비히afen
- (72) 발명자  
**슈일트크네흐트, 크리스티안**  
 독일 68307 만하임 산트호페르 스트라쎄 283아  
**렌나르츠, 크리스티안**  
 독일 67105 슈이페르스타트 한즈-푸르만-스트라  
 쪄 24  
 (뒷면에 계속)
- (74) 대리인  
**위혜숙, 양영준**

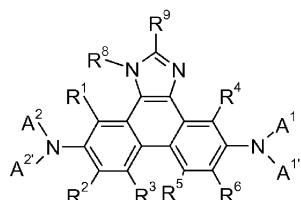
전체 청구항 수 : 총 12 항

(54) 발명의 명칭 전계 발광 소자를 위한 정공 수송 물질로서의 폐난트로아졸 화합물

### (57) 요약

본 발명은 정공 수송/주입 및/또는 전자 차단 층의 성분으로서 하기 화학식 I의 화합물을 포함하는 전계발광 소자에 관한 것이다. 화학식 I의 화합물은 단독으로 또는 도면트와 조합하여, 전계발광 소자의 개선된 효율, 구동 전압 및/또는 수명을 제공할 수 있다.

<화학식 I>



(72) 발명자

와타나베, 소이치

독일 68161 만하임 34 에스6

바겐블라스트, 게르하르트

독일 67157 바헨하임 암 유데나케 8

무레, 폐테

스위스 체하-4104 오베르빌 호헤스트라쎄 166

슈애페, 토마스

스위스 체하-4410 리에스탈 바이트베크 15 데

체보타레바, 나탈리아

프랑스 에프-68220 하겐탈 르 바 뤼 뒤 게랭 33

리치, 안드레아

스위스 체하-4052 바젤 크리스토프 메리안-플라츠

2

바르돈, 크리스티나

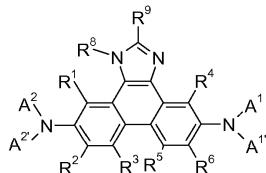
독일 79761 발트슈트 칼바리엔베르크스트라쎄 5

## 특허청구의 범위

### 청구항 1

애노드, 정공 수송/주입 층, 임의로 전자 차단 층, 발광 층, 임의로 정공- 또는 여기자-차단 층, 전자-수송 층 및 캐소드를 포함하며, 정공 수송/주입 층 및/또는 전자 차단 층이 하기 화학식 I의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 전계발광 (EL) 소자.

<화학식 I>



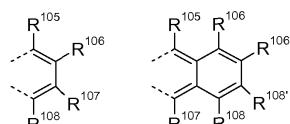
상기 식에서,  $R^1$  및  $R^4$ 는 서로 독립적으로 수소,  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_2-C_{18}$ 알케닐,  $C_2-C_{18}$ 알카닐,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시, CN, 또는  $-CO-R^{28}$ 이고,

$R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^5$  및  $R^6$ 은 서로 독립적으로 H,  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_6-C_{24}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴, G에 의해 치환된  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴,  $C_2-C_{18}$ 알케닐,  $C_2-C_{18}$ 알카닐,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시,  $C_7-C_{25}$ 아르알킬, CN, 또는  $-CO-R^{28}$ 이고,

$R^8$ 은  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_6-C_{24}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴, 또는 G에 의해 치환된  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴이고,

$R^9$ 는 H,  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_6-C_{24}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴, 또는 G에 의해 치환된  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴이거나, 또는

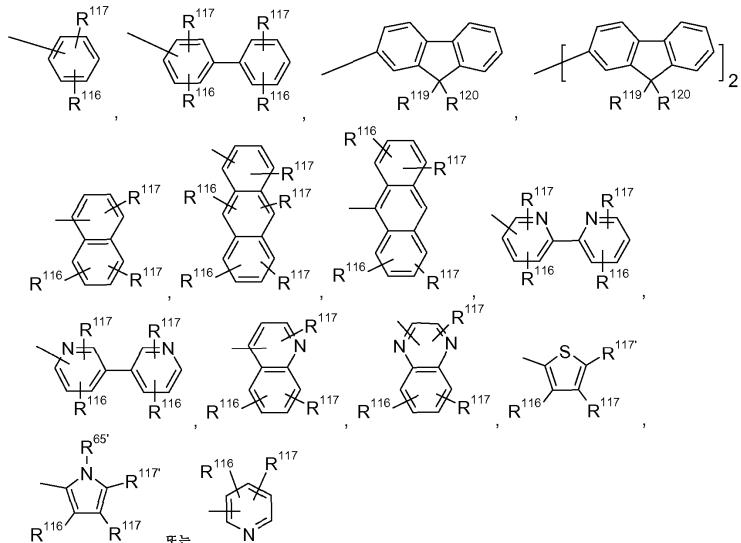
서로 인접한 2개의 치환기  $R^2$  및  $R^3$  및/또는  $R^5$  및  $R^6$ 은 함께 기



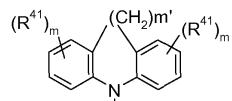
를 형성하고,

$R^{105}$ ,  $R^{106}$ ,  $R^{107}$ ,  $R^{108}$ ,  $R^{106'}$  및  $R^{108'}$ 는 서로 독립적으로 H,  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/되거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, 또는 E에 의해 치환되고/되거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시이고,

$A^1$ ,  $A^2$ ,  $A^{1'}$  및  $A^{2'}$ 는 서로 독립적으로 화학식



의 기이거나, 또는 A<sup>1</sup> 및 A<sup>1'</sup> 및/또는 A<sup>2</sup> 및 A<sup>2'</sup>는 이들이 결합되어 있는 질소 원자와 함께 헤테로방향족 고리, 또는 고리계, 예컨대



를 형성하고; m'은 0, 1 또는 2이고;

m은 각 경우에 동일하거나 상이할 수 있고, 0, 1, 2 또는 3, 특히 0, 1 또는 2, 매우 특히 0 또는 1이고;

R<sup>41</sup>은 각 경우에 동일하거나 상이할 수 있고, Cl, F, CN, N(R<sup>45</sup>)<sub>2</sub>, C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 기, C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub>시클로알킬 기, C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알콕시 기 (여기서, 서로에 대해 이웃하지 않는 1개 이상의 탄소 원자는 -NR<sup>45</sup>- , -O- , -S- , 또는 -C(=O)-O-에 의해 대체될 수 있고/거나, 여기서 1개 이상의 수소 원자는 F에 의해 대체될 수 있음), C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴 기 또는 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴옥시 기 (여기서, 1개 이상의 탄소 원자는 O, S 또는 N에 의해 대체될 수 있고/거나 1개 이상의 비-방향족 기 R<sup>41</sup>에 의해 치환될 수 있음)이거나, 또는

2개 이상의 기 R<sup>41</sup>은 고리계를 형성하고;

R<sup>45</sup>은 H, C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 기, C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub>시클로알킬 기 (여기서, 서로에 이웃하지 않는 1개 이상의 탄소 원자는 -NR<sup>45</sup>- , -O- , -S- , -C(=O)-O- 또는 -O-C(=O)-O-에 의해 대체될 수 있고/거나 여기서 1개 이상의 수소 원자는 F에 의해 대체될 수 있음), C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴 기 또는 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴옥시 기 (여기서, 1개 이상의 탄소 원자는 O, S 또는 N에 의해 대체될 수 있고/거나 1개 이상의 비-방향족 기 R<sup>41</sup>에 의해 치환될 수 있음)이고,

R<sup>45</sup>은 H, C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 기 또는 C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub>시클로알킬 기이고,

R<sup>65</sup>은 H, C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 기, C<sub>4</sub>-C<sub>18</sub>시클로알킬 기 (여기서, 서로 이웃하지 않는 1개 이상의 탄소 원자는 -O- 또는 -S-에 의해 대체될 수 있고/거나 여기서 1개 이상의 수소 원자는 F에 의해 대체될 수 있음), C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴 기 또는 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴옥시 기 (여기서, 1개 이상의 탄소 원자는 O, S 또는 N에 의해 대체될 수 있고/거나 G에 의해 치환될 수 있음)이고,

R<sup>116</sup>, R<sup>117</sup> 및 R<sup>117'</sup>는 서로 독립적으로 H, 할로겐, -CN, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, G에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헤테로아릴, G에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헤테로아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알카닐, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>아르알킬, -C(=O)-R<sup>127</sup>, -C(=O)OR<sup>127</sup> 또는 -C(=O)NR<sup>127</sup>R<sup>126</sup>이거나, 또는

서로에 인접한 치환기  $R^{116}$ ,  $R^{117}$  및  $R^{117'}$ 는 고리를 형성할 수 있고,

$R^{119}$  및  $R^{120}$ 은 서로 독립적으로  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{24}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴, G에 의해 치환된  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴,  $C_2-C_{18}$ 알케닐,  $C_2-C_{18}$ 알키닐,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시 또는  $C_7-C_{25}$ 아르알킬이거나, 또는

$R^{119}$  및  $R^{120}$ 은 함께 화학식  $=CR^{121}R^{122}$ 의 기를 형성하고, 여기서

$R^{121}$  및  $R^{122}$ 는 서로 독립적으로 H,  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/되거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{24}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴, 또는 G에 의해 치환된  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴이거나, 또는

$R^{119}$  및  $R^{120}$ 은 함께 5원 또는 6원 고리를 형성하고, 이는  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/되거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{24}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴, G에 의해 치환된  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴,  $C_2-C_{18}$ 알케닐,  $C_2-C_{18}$ 알키닐,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, E에 의해 치환되고/되거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시,  $C_7-C_{25}$ 아르알킬 또는  $-C(=O)-R^{127'}$ 에 의해 임의로 치환될 수 있고,

$R^{126}$ ,  $R^{127}$  및  $R^{127'}$ 는 서로 독립적으로  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬; 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,

D는  $-CO-$ ;  $-COO-$ ;  $-S-$ ;  $-SO-$ ;  $-SO_2-$ ;  $-O-$ ;  $-NR^{25}-$ ;  $-SiR^{30}R^{31}-$ ;  $-POR^{32}-$ ;  $-CR^{23}=CR^{24}-$ ; 또는  $-C\equiv C-O-$ 고;

E는  $-OR^{29}$ ;  $-SR^{29}$ ;  $-NR^{25}R^{26}$ ;  $-COR^{28}$ ;  $-COOR^{27}$ ;  $-CONR^{25}R^{26}$ ;  $-CN$ ; 또는 할로겐이고; G는 E,  $C_1-C_{18}$ 알킬, D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 퍼플루오로알킬,  $C_1-C_{18}$ 알콕시 또는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시이고, 여기서

$R^{23}$  및  $R^{24}$ 는 서로 독립적으로  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬; 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이고;

$R^{25}$  및  $R^{26}$ 은 서로 독립적으로  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬; 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이거나; 또는

$R^{25}$  및  $R^{26}$ 은 함께 5 또는 6원 고리를 형성하고,  $R^{27}$  및  $R^{28}$ 은 서로 독립적으로  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬; 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,

$R^{29}$ 는  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬; 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,

$R^{30}$  및  $R^{31}$ 은 서로 독립적으로  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{18}$ 아릴, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴이고,

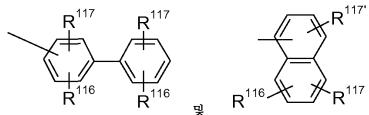
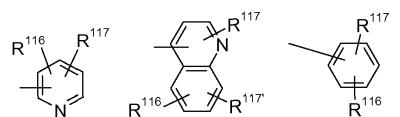
$R^{32}$ 는  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{18}$ 아릴, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴이다.

## 청구항 2

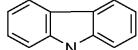
제1항에 있어서,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$  및  $R^6$ 이 수소인 EL 소자.

## 청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서,  $A^1$ ,  $A^{1'}$ ,  $A^2$  및  $A^{2'}$ 가 서로 독립적으로 화학식



의 기이거나, 또는  $A^1$  및  $A^{1'}$ 가 이들이 결합되어 있는 질소 원자와 함께 화



학식 의 기를 형성하고; 여기서  $R^{116}$ ,  $R^{117}$  및  $R^{117'}$ 는 서로 독립적으로 H 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬인 EL 소자.

#### 청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서,  $R^8$ 이  $C_1-C_{18}$ 알킬, D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬, 임의로  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_1-C_{18}$ 알콕시 또는 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환될 수 있는  $C_6-C_{18}$ 아릴이고;

$R^9$ 가 H,  $C_1-C_{18}$ 알킬, D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬, 임의로  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_1-C_{18}$ 알콕시 또는 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환될 수 있는  $C_6-C_{18}$ 아릴이고;

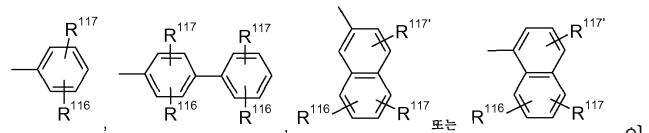
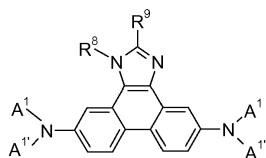
D가  $-O-$ ,  $-S-$ , 또는  $-NR^{25}-$ 이고,

$R^{25}$ 가  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬; 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬인 EL 소자.

#### 청구항 5

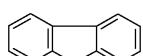
제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 I의 화합물이 하기 화학식 Ia의 화합물인 EL 소자.

<화학식 Ia>



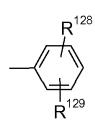
상기 식에서,  $A^1$  및  $A^{1'}$ 는 서로 독립적으로 화학식

기이거나, 여기서  $R^{116}$ ,  $R^{117}$  및  $R^{117'}$ 는 서로 독립적으로 H 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬이거나; 또는  $A^1$  및  $A^{1'}$ 는 이들이 결합되



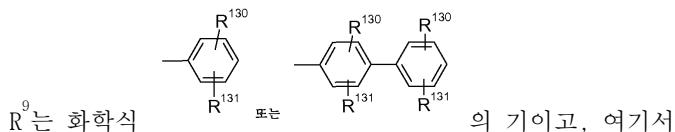
어 있는 질소 원자와 함께 화학식

의 기를 형성하고;



$R^8$ 은 화학식

의 기이고,

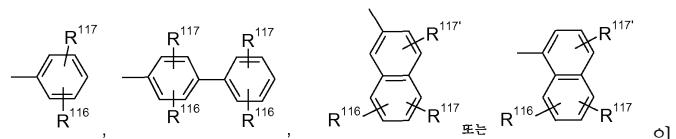
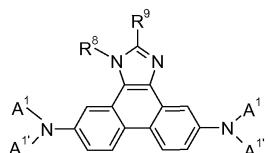


$R^{128}$ ,  $R^{129}$ ,  $R^{130}$  및  $R^{131}$ 은 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬이다.

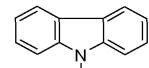
## 청구항 6

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 I의 화합물이 하기 화학식 Ia의 화합물인 EL 소자.

<화학식 Ia>



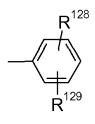
상기 식에서,  $A^1$  및  $A^{1'}$ 는 서로 독립적으로 화학식

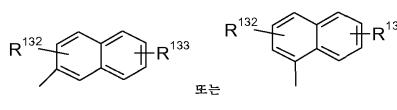
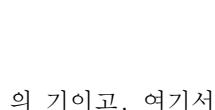


의 기를 형성하고;

기이거나, 또는  $A^1$  및  $A^{1'}$ 는 이들이 결합되어 있는 질소 원자와 함께 화학식

여기서  $R^{116}$ ,  $R^{117}$  및  $R^{117'}$ 는 서로 독립적으로 H 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고;

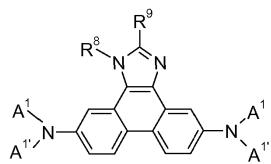
$R^8$ 은 화학식 의 기이고,

$R^9$ 는 화학식  또는 의 기이고, 여기서

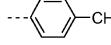
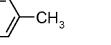
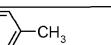
$R^{128}$ ,  $R^{129}$ ,  $R^{132}$  및  $R^{133}$ 은 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬이다.

## 청구항 7

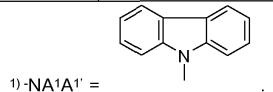
제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 에 있어서, 화학식 I의 화합물이 하기 화학식의 화합물인 EL 소자.



화합물	A <sup>1</sup>	A <sup>1'</sup>	R <sup>8</sup>	R <sup>9</sup>
A-1	···	···	···	···
A-2	···	···	···	···
A-3	···	···	···	···
A-4	···	···	···	···
A-5	···	···	···	···
A-6	···	···	···	···
A-7	···	···	···	···
A-8	···	···	···	···
A-9	···	···	···	···
A-10	···	···	···	···
A-11	···	···	···	···
A-12	···	···	···	···

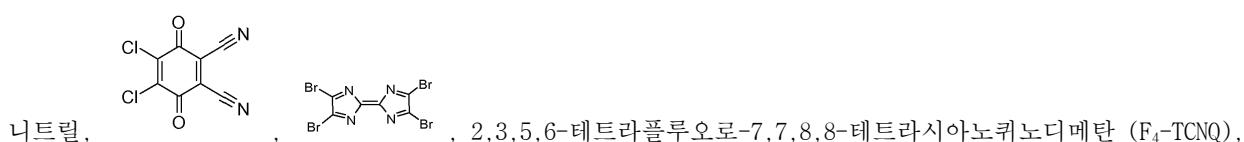
A-13				
A-14				
A-15				
A-16				
A-17				
A-18				
A-19				
A-20				
A-21				
A-22				
A-23				
A-24				
A-25				
A-26				
A-27				
A-28				
A-29				

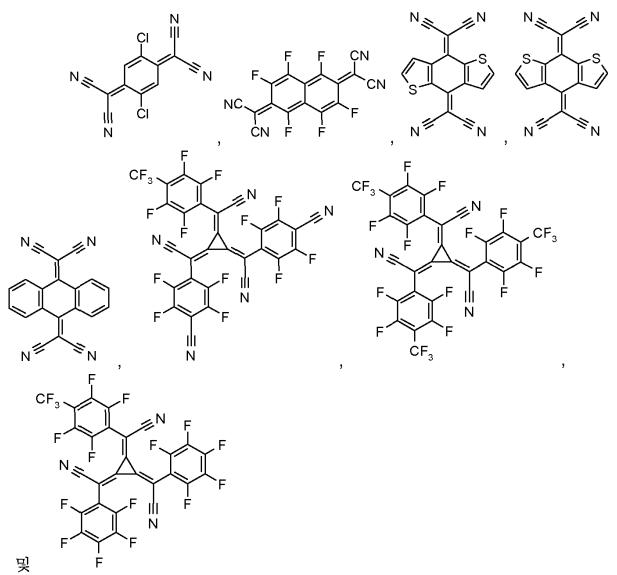
A-30				
A-31				
A-32				
A-33				
A-34				
A-35				
A-36				
A-37				
A-38				
A-39				
A-40				
A-41				
A-42				
A-43				
A-44				
A-45	1)	1)		



### 청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서, 정공 수송/주입 층이 화학식 I의 화합물 및 도편트를 포함하고, 여기서 도편트는 산화티타늄 ( $TiO_x$ ), 산화바나듐 ( $VO_x$ ), 산화몰리브데넘 ( $MoO_3$ ), 특히  $Mo_3$ , 산화텅스텐 ( $WO_x$ ), 산화루테늄 ( $RuO_x$ ), 산화크로뮴 ( $CrO_x$ ), 산화지르코늄 ( $ZrO_x$ ), 산화하프늄 ( $HfO_x$ ) 산화탄탈럼 ( $TaO_x$ ), 산화은 ( $AgO_x$ ), 산화망가니즈 ( $MnO_x$ ), 삼염화철 ( $FeCl_3$ ), 오염화안티모니 ( $SbCl_5$ ), 금속 프탈로시아닌 화합물, 디시아노(프탈로시아네이토(-1)코발트(III), 옥소카본-, 슈도옥소카본- 및 라디알렌 화합물, 디시아노(프탈로시아네이토(-1)루테늄(III) 화합물, 2-(6-디시아노메틸렌-1,3,4,5,7,8-헥사플루오로-6H-나프탈렌-2-일리덴)-말로노





로부터 선택되는 것인 EL 소자.

### 청구항 9

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 있어서, 전자 차단 층이 화학식 I의 화합물을 포함하는 것인 EL 소자.

### 청구항 10

전계발광 소자의 정공 수송/주입 및/또는 전자 차단 층을 위한 물질로서의, 제1항에 따른 화학식 I의 화합물의 용도.

### 청구항 11

제1항에 따른 화학식 I의 화합물 및 임의로 도편트를 포함하는 정공 수송/주입 층.

### 청구항 12

제1항에 따른 화학식 I의 화합물을 포함하는 전자 차단 층.

## 명세서

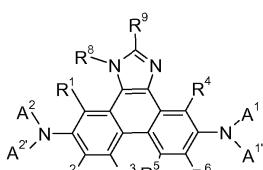
### 기술 분야

[0001]

본 발명은 정공 수송/주입 및/또는 전자 차단 층의 성분으로서 하기 화학식 I의 화합물을 포함하는 전계발광 소자에 관한 것이다. 화학식 I의 화합물은 단독으로 또는 도편트와의 조합으로 전계발광 소자의 개선된 효율, 구동 전압 및/또는 수명을 제공할 수 있다.

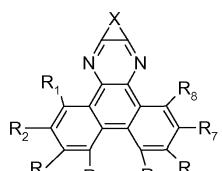
[0002]

<화학식 I>



[0003]

### 배경 기술

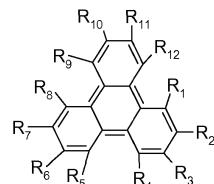


[0004]

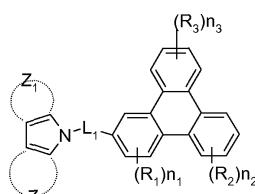
JP9013025는 화학식

(여기서, X는 C<sub>2</sub>-C<sub>5</sub>알킬 등이고; R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub>은 서로 독립적으로 각

각 H, 할로겐, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>알킬 등)에 의해 나타내어지는 퀴녹살린 유도체인 전계발광 소자에 관한 것이다.

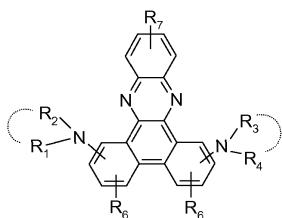


[0005] JP11251063은 유기 EL 소자의 성분 물질로서 사용되는 화학식에 의해 나타내어지는 트리페닐렌 화합물을 개시한다. 상기 식에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 치환 또는 비치환된 아미노 기, 니트로 기, 시아노 기, 치환 또는 비치환된 알킬 기, 치환 또는 비치환된 알케닐 기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬 기, 치환 또는 비치환된 알콕시 기, 치환 또는 비치환된 방향족 탄화수소 기, 치환 또는 비치환된 방향족 헤테로사이클 기, 치환 또는 비치환된 아르알킬 기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시 기, 치환 또는 비치환된 알콕시카르보닐 기 또는 카르복실 기를 나타낸다. R<sub>1</sub> 내지 R<sub>12</sub>는 이들로부터 2개의 고리를 형성할 수 있다.

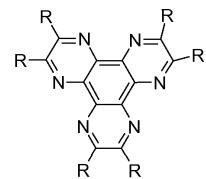


[0006] JP2006143845는 화학식의 화합물에 관한 것이며, 여기서 Z<sub>1</sub>, Z<sub>2</sub>는 방향족 탄화수소 고리, 방향족 헤테로시클릭 고리이고; R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 H, 치환기이고; n<sub>1</sub> = 0 내지 30이고; n<sub>2</sub>, n<sub>3</sub> = 0 내지 40이고; L<sub>1</sub> = 연결 기, 단일 결합이다.

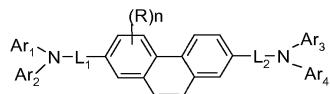
[0007] JP2134644는 감광층 중에 폐나진 화합물을 갖는 전자사진 감광체에 관한 것이다. 폐나진 화합물은 화학식



에 의해 나타내어지고, 여기서 각각의 R<sub>1</sub>-R<sub>4</sub>는 H 원자, (치환된)알킬 기, 아르알킬 기, 아릴 기 또는 헤테로시클릭 기이며, 여기서 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub> 및 R<sub>3</sub> 및 R<sub>4</sub>는 각각 N 원자와 함께 5-7원 고리를 형성할 수 있고; 각각의 R<sub>5</sub>-R<sub>7</sub>은 H 원자, (치환된)알킬 기, 알콕시 기, 할로겐 원자 또는 니트로 기이다.

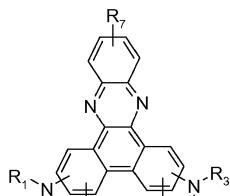


[0008] US20060289882는 유기 전계발광 소자에 관한 것이며, 여기서 전자 추출 층은 화학식에 의해 나타내어진 헥사아자트리페닐렌 유도체로 형성될 수 있고, 여기서 R은 수소, 1 내지 10의 탄소수를 갖는 알킬 기, 1 내지 10의 탄소수를 갖는 알킬옥시 기, 1 내지 10의 탄소수를 갖는 디알킬아민 기, F, Cl, Br, I 또는 CN을 나타낸다.

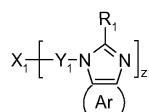


[0009] US20070029927은 화학식 (1):  $\text{Ar}_1\text{Ar}_2\text{N-L}_1\text{-C}_6\text{H}_3\text{-L}_2\text{-Ar}_3\text{Ar}_4$ 에 의해 나타내어진 방향족 아민 유도체, 및 유기 전계발광 소자에서의 그의 용도를 개시하며, 여기서 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 6 내지 30개의 고리 탄소 원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴 기 또는 5 내지 30개의 고리 탄소 원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴 기를 나타내고; L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 단일 결합, 6 내지 30개의 고리 탄소 원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴렌 기 또는 5 내지 30개의 고리 탄소 원자를 갖는 치환 또는 비치환된 헤�테로아릴렌 기를

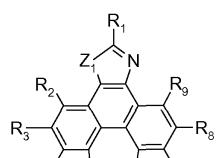
나타내지만;  $L_1$  및  $L_2$  둘 다가 단일 결합인 경우에는,  $Ar_1$  및  $Ar_3$  둘 다가 각각 치환 또는 비치환된 페닐 기를 나타내는 경우, 또한  $Ar_2$  및  $Ar_4$  둘 다가 각각 치환 또는 비치환된 비페닐릴 기 또는 치환 또는 비치환된 페닐 기를 나타내는 경우는 제외되고;  $R$ 은 치환기를 나타내고  $R$ 이 2개 이상 존재하는 경우에, 이들은 서로 결합하여 고리를 형성하고;  $n$ 은 0 내지 8의 정수를 나타낸다.



[0010] JP2134644는 화학식  $\text{R}_1\text{R}_2\text{N}(\text{Ar})\text{R}_3\text{R}_4\text{N}(\text{Ar})\text{R}_5\text{R}_6\text{N}(\text{Ar})\text{R}_7$ 의 폐나진 화합물에 관한 것이며, 여기서 각각의  $\text{R}_1\text{R}_4$ 는 H 원자, (치환된)알킬 기, 아르알킬 기, 아릴 기 또는 헤테로시클릭 기이며, 여기서  $\text{R}_1$  및  $\text{R}_2$  및  $\text{R}_3$  및  $\text{R}_4$ 는 각각 N 원자와 함께 5-7원 고리를 형성할 수 있고; 각각의  $\text{R}_5\text{R}_7$ 은 H 원자, (치환된)알킬 기, 알콕시 기, 할로겐 원자 또는 니트로 기이다. 폐나진 화합물은 전자사진 감광체의 감광층에 혼입된다.

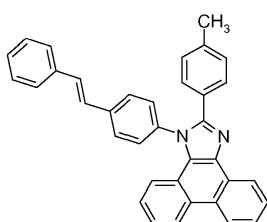


[0011] JP2000323278은 화학식  $\text{X}_1\left[\text{Y}_1\text{N}(\text{Ar})\text{C}(=\text{O})\text{N}_1\right]_z$ 의 이미다졸 구조를 갖는 유기 인을 포함하는 방출체에 관한 것이며, 여기서  $\text{R}_1$ 은 각각 동일하거나 상이할 수 있고, 수소, 알킬 기, 시클로알킬 기, 아르알킬 기, 알케닐 기, 시클로알케닐 기 등으로부터 선택될 수 있고,  $\text{X}_1$ 은 결합 유닛이고, 치환 또는 비치환된 방향족 고리, 헤테로사이클, 포화 지방 쇄 등으로부터 선택되고,  $\text{Y}_1$ 은 단일 결합, 또는 단일 결합, 알킬 쇄, 알킬렌 쇄, 에테르 쇄 등의 조합으로부터 선택되고,  $\text{Ar}$ 은 치환 또는 비치환된 방향족 고리, 헤테로사이클 등으로부터 선택되고,  $z$ 는 자연 수를 나타낸다. 유기 인은 바람직하게는 호스트 물질에 도핑된 게스트 물질을 갖는 발광 물질이다.



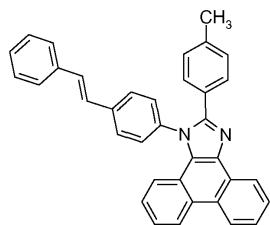
[0012] JP 2001023777은 화학식  $\text{R}_1\text{R}_2\text{N}(\text{Ar})\text{R}_3\text{R}_4\text{N}(\text{Ar})\text{R}_5\text{R}_6\text{N}(\text{Ar})\text{R}_7\text{R}_8\text{N}(\text{Ar})\text{R}_9$ 의 화합물을 기재하며, 여기서  $\text{R}_1$  내지  $\text{R}_9$ 는 결합, 수소, 알킬 기, 시클로알킬 기, 아르알킬 기, 알케닐 기, 시클로알케닐 기, 알콕시 기, 알킬티오 기, 아릴에테르 기, 아릴 티오에테르 기, 아릴 기, 헤테로시클릭 기, 할로겐, 시아노 기, 알데하이드 기, 카르보닐 기, 에스테르 기, 카르바모일 기, 아미노 기, 니트로 기, 실릴 기, 실록시아닐 기 및 인접한 치환기 사이에 형성된 고리 구조를 나타내고,  $\text{Z}_1$ 은 산소, 황, 질소 또는 포화 탄화수소를 나타낸다. 폐난트로아졸 골격을 갖는 화합물은 정공 수송 층, 전자 수송 층 및 발광 층의 물질에서 호스트 물질 또는 도펀트 물질로서 적합하다. 임의의  $\text{R}_1$  내지  $\text{R}_9$ 가 아릴 치환된 아미노 기인 화합물은 개시되지 않는다.

[0013] JP2001118683은 발광 요소에 관한 것이며, 여기서 발광 물질은 적어도 게스트 물질 및 호스트 물질로 이루어지고 호스트 물질의 방출 스펙트럼의 피크는 300 nm 초과 460 nm 미만이다. 하기 폐난트로아졸 화합물이 명백하게 개시된다:



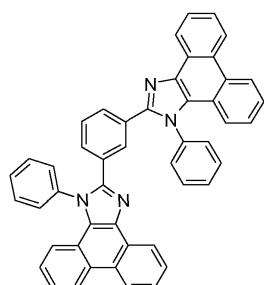
[0014] JP2002050473은 발광 물질이 양극 및 음극 사이에 존재하고 전기 에너지에 의해 발광하는 요소를 기재하고,

요소는 광반응에 의해 형성된 1종 이상의 생성물을 함유한다. 하기 폐난트로아졸 화합물이 명백하게 개시된다:



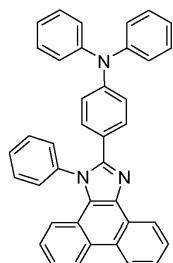
[0016]

JP2003059670은 적어도 양극, 발광 층, 전자 캐리어 층 및 음극이 순서대로 적층된 구조를 갖는 발광 요소를 기재하고, 전자 캐리어 층은 발광 층의 이온화 전위보다 0.1 eV 이상 큰 이온화 전위를 갖고, 주로 발광 층 및 전자 캐리어 층을 구성하는 물질은 승화 특성을 갖는 유기 화합물로 이루어지고, 또한 주로 전자 캐리어 층을 구성하는 유기 화합물은 400 이상의 분자량 및 90°C 이상의 유리 전이 온도를 갖는다. 하기 폐난트로아졸 화합물이 명백하게 개시된다:

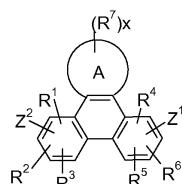


[0018]

JP2002367786은 적어도 양극, 발광 층, 정공 수송 층, 전자 수송 층 및 음극의 연속적으로 적층된 구조를 갖는 발광 요소를 기재하고, 발광 층 및 전자 수송 사이의 관계는  $(I_p(ETL)-I_p(EML)) > (E_a(ETL)-E_a(EML))$ 이다. 발광 층 및 전자 수송 층을 구성하는 주요 물질은 승화 특성을 갖는 유기 화합물로 이루어지고, 전자 수송 층을 구성하는 주요 물질은 400 이상의 분자 질량을 갖는 유기 화합물이다. [Ea: 전자 친화도 (eV), Ip: 이온화 전위 (eV), EML: 발광 층 및 ETL: 전자 수송 층]. 하기 폐난트로아졸 화합물이 명백하게 개시된다:



[0020]



(I)의 화합물을 포함하는 전계

발광 소자를 기재한다. 호스트는 인광 물질과 함께 전계발광 소자의 개선된 효율성, 안정성, 제조성 또는 스펙트럼 특성을 제공할 수 있다.

[0022]

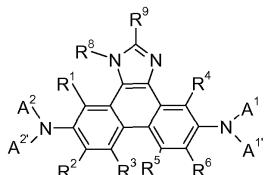
이러한 개발에도 불구하고, 전계발광 소자의 개선된 효율, 안정성, 제조성 또는 스펙트럼 특성을 제공할 수 있는 정공 수송 물질을 위한, 특히 개선된 효율, 구동 전압 및/또는 수명을 제공하는 전자 차단 층 및/또는 임의로 도핑된 전공 수송/주입 층을 위한 물질로서의 물질을 포함하는 EL 소자에 대한 필요성이 있다.

### 발명의 내용

## 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0023] 따라서, 본 발명은 정공 수송/주입 층 및/또는 전자 차단 층이 하기 화학식 I의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는, 애노드, 정공 수송/주입 층, 임의로 전자 차단 층, 발광 층, 임의로 정공- 또는 여기자-차단 층, 전자-수송 층 및 캐소드를 포함하는 전계발광 (EL) 소자를 제공한다.

[0024] <화학식 I>



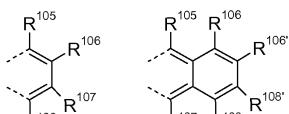
[0025]

[0026] 상기 식에서,  $R^1$  및  $R^4$ 는 서로 독립적으로 수소,  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_2-C_{18}$ 알케닐,  $C_2-C_{18}$ 알키닐,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시, CN, 또는  $-CO-R^{28}$ 이고,

[0027]  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^5$  및  $R^6$ 은 서로 독립적으로 H,  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_6-C_{24}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴, G에 의해 치환된  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴,  $C_2-C_{18}$ 알케닐,  $C_2-C_{18}$ 알키닐,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시,  $C_7-C_{25}$ 아르알킬, CN, 또는  $-CO-R^{28}$ 이고,

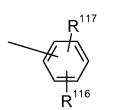
[0028]  $R^8$ 은  $C_{1-C_{18}}$ 알킬, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_{1-C_{18}}$ 알킬,  $C_{1-C_{18}}$ 페플루오로알킬,  $C_{6-C_{24}}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_{6-C_{24}}$ 아릴,  $C_{2-C_{20}}$ 헵테로아릴, 또는 G에 의해 치환된  $C_{2-C_{20}}$ 헵테로아릴이고,

[0029] R는 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, G에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, 또는 G에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴이고,

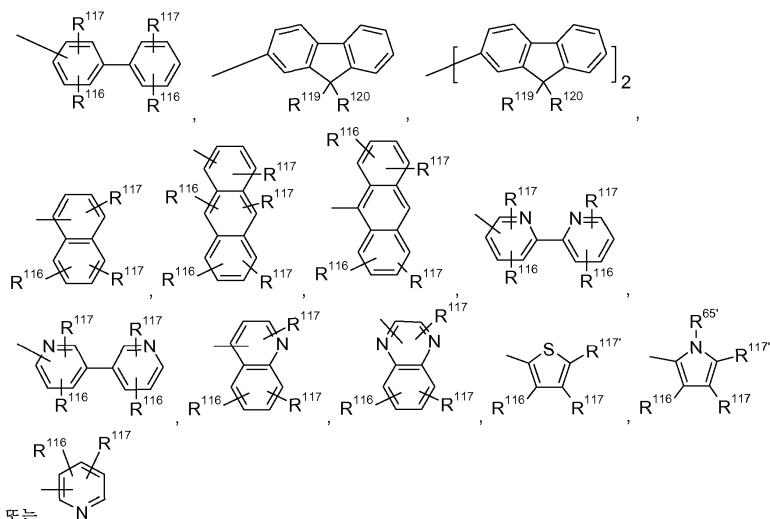


[0030] 서로 연결한 2개의 치환기  $R^2$  및  $R^3$  및 / 또는  $R^5$  및  $R^6$ 을 하계기  $R^{108}$  또는  $R^{107}$   $R^{108}$  를 혼성하고

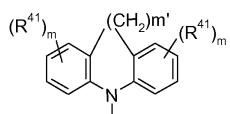
[0031]  $R^{105}$ ,  $R^{106}$ ,  $R^{107}$ ,  $R^{108}$ ,  $R^{106'}$  및  $R^{108'}$ 는 서로 독립적으로 H,  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/되거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알코시 또는 E에 의해 치환되고/되거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알코시이고



[0032]  $A^1$   $A^2$   $A^{1'}$  및  $A^{2'}$ 은 서로 동일적으로 화학식



의 기이거나, 또는  $A^1$  및  $A^{1'}$  및/또는  $A^2$  및  $A^{2'}$ 는 이들이 결합되어 있는 질소 원자와 함께 헤테로방향족 고리, 또는 고리계, 예컨대



를 형성하고;  $m'$ 는 0, 1 또는 2이고;

[0033]

$m$ 은 각 경우에 동일하거나 상이할 수 있고, 0, 1, 2 또는 3, 특히 0, 1 또는 2, 매우 특히 0 또는 1이고;

[0034]

$R^{41}$ 은 각 경우에 동일하거나 상이할 수 있고, Cl, F, CN,  $N(R^{45})_2$ ,  $C_1-C_{25}$ 알킬 기,  $C_4-C_{18}$ 시클로알킬 기,  $C_1-C_{25}$ 알콕시 기 (여기서, 서로에 대해 이웃하지 않는 1개 이상의 탄소 원자는  $-NR^{45}-$ ,  $-O-$ ,  $-S-$ , 또는  $-C(=O)-O-$ 에 의해 대체될 수 있고/거나, 여기서 1개 이상의 수소 원자는 F에 의해 대체될 수 있음),  $C_6-C_{24}$ 아릴 그룹 또는  $C_6-C_{24}$ 아릴옥시 기 (여기서, 1개 이상의 탄소 원자는 O, S 또는 N에 의해 대체될 수 있고/거나 1개 이상의 비-방향족 그룹  $R^{41}$ 에 의해 치환될 수 있음)이거나, 또는

[0035]

2개 이상의 기  $R^{41}$ 은 고리계를 형성하고;

[0036]

$R^{45}$ 는 H,  $C_1-C_{25}$ 알킬 기,  $C_4-C_{18}$ 시클로알킬 기 (여기서, 서로에 대해 이웃하지 않는 1개 이상의 탄소 원자는  $-NR^{45}-$ ,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-C(=O)-O-$  또는  $-O-C(=O)-O-$ 에 의해 대체될 수 있고/거나, 여기서 1개 이상의 수소 원자는 F에 의해 대체될 수 있음),  $C_6-C_{24}$ 아릴기, 또는  $C_6-C_{24}$ 아릴옥시 기, 여기서 1개 이상의 탄소 원자는 O, S 또는 N에 의해 대체될 수 있고/거나 1개 이상의 비-방향족  $R^{41}$  기에 의해 치환될 수 있음)이고,

[0037]

$R^{45'}$ 는 H,  $C_1-C_{25}$ 알킬 기 또는  $C_4-C_{18}$ 시클로알킬 기이고,

[0038]

$R^{65'}$ 는 H,  $C_1-C_{25}$ 알킬 기,  $C_4-C_{18}$ 시클로알킬 기 (여기서, 서로에 대해 이웃하지 않는 1개 이상의 탄소 원자는  $-O-$  또는  $-S-$ 에 의해 대체될 수 있고/거나, 여기서 1개 이상의 수소 원자는 F에 의해 대체될 수 있음),  $C_6-C_{24}$ 아릴 기, 또는  $C_6-C_{24}$ 아릴옥시 기 (여기서, 1개 이상의 탄소 원자는 O, S 또는 N에 의해 대체될 수 있고/거나 G에 의해 치환될 수 있음)이고,

[0039]

$R^{116}$ ,  $R^{117}$  및  $R^{117'}$ 는 서로 독립적으로 H, 할로겐, -CN,  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{24}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_2-C_{20}$ 헤테로아릴, G에 의해 치환된  $C_2-C_{20}$ 헤테로아릴,  $C_2-C_{18}$ 알케닐,  $C_2-C_{18}$ 알카닐,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시,  $C_7-C_{25}$ 아르알킬,  $-C(=O)-R^{127'}$ ,  $-C(=O)OR^{127'}$  또는  $-C(=O)NR^{127'}R^{126'}$ 이거나, 또는

- [0040] 서로에 대해 인접한 치환기  $R^{116}$ ,  $R^{117}$  및  $R^{117'}$ 는 고리를 형성할 수 있고,
- [0041]  $R^{119}$  및  $R^{120}$ 은 서로 독립적으로  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/되거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{24}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴, G에 의해 치환된  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴,  $C_2-C_{18}$ 알케닐,  $C_2-C_{18}$ 알카닐,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, E에 의해 치환되고/되거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시 또는  $C_7-C_{25}$ 아르알킬이거나, 또는
- [0042]  $R^{119}$  및  $R^{120}$ 은 함께 화학식  $=CR^{121}R^{122}$ 의 기를 형성하고, 여기서
- [0043]  $R^{121}$  및  $R^{122}$ 는 서로 독립적으로 H,  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/되거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{24}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴, 또는 G에 의해 치환된  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴이거나, 또는
- [0044]  $R^{119}$  및  $R^{120}$ 은 함께 5원 또는 6원 고리를 형성하고, 이는  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되고/되거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{24}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴, G에 의해 치환된  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴,  $C_2-C_{18}$ 알케닐,  $C_2-C_{18}$ 알카닐,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, E에 의해 치환되고/되거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시,  $C_7-C_{25}$ 아르알킬, 또는  $-C(=O)-R^{127'}$ 에 의해 임의로 치환될 수 있고,
- [0045]  $R^{126}$ ,  $R^{127}$  및  $R^{127'}$ 는 서로 독립적으로  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬; 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,
- [0046] D는  $-CO-$ ;  $-COO-$ ;  $-S-$ ;  $-SO-$ ;  $-SO_2-$ ;  $-O-$ ;  $-NR^{25}-$ ;  $-SiR^{30}R^{31}-$ ;  $-POR^{32}-$ ;  $-CR^{23}=CR^{24}-$ ; 또는  $-C\equiv C-O$ 고;
- [0047] E는  $-OR^{29}$ ;  $-SR^{29}$ ;  $-NR^{25}R^{26}$ ;  $-COR^{28}$ ;  $-COOR^{27}$ ;  $-CONR^{25}R^{26}$ ;  $-CN$ ; 또는 할로겐이고; G는 E,  $C_1-C_{18}$ 알킬, D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 퍼플루오로알킬,  $C_1-C_{18}$ 알콕시 또는 E에 의해 치환되고/되거나 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시이고, 여기서
- [0048]  $R^{23}$  및  $R^{24}$ 는 서로 독립적으로  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬; 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이고;
- [0049]  $R^{25}$  및  $R^{26}$ 은 서로 독립적으로  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬; 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이거나; 또는
- [0050]  $R^{25}$  및  $R^{26}$ 은 함께 5 또는 6원 고리를 형성하고,  $R^{27}$  및  $R^{28}$ 은 서로 독립적으로  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬; 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,
- [0051]  $R^{29}$ 는  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬; 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,
- [0052]  $R^{30}$  및  $R^{31}$ 은 서로 독립적으로  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{18}$ 아릴, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴이고,
- [0053]  $R^{32}$ 는  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{18}$ 아릴, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴이다.
- [0054] 화학식 I의 화합물은 유기 발광 다이오드 (OLED)의 전계발광 소자의 정공 수송 층을 위한 물질 (성분)으로서, 단독으로 또는 다른 물질과의 조합으로 사용된다. 화학식 I의 화합물은 단독으로 또는 도편트와의 조합으로 전계발광 소자의 개선된 효율, 구동 전압 및/또는 수명을 제공할 수 있다.
- [0055] 대안적으로, 화학식 I의 화합물은 전자 차단 층을 위한 물질로서 사용될 수 있다. 화학식 I의 화합물은 단독으로 전계발광 소자의 개선된 효율, 구동 전압 및/또는 수명을 제공할 수 있다.
- [0056] 본원에 사용된 바와 같은 용어 "정공 수송/주입 층"은 발광 층 및 애노드 사이에, 바람직하게는 애노드에 인

접하게 배치되어, 주로 정공을 주입/운반하는 층을 지칭한다.

[0057] 바람직하게는,  $R^{116}$  및  $R^{117}$ 은 서로 독립적으로 H,  $C_1$ - $C_{12}$ 알킬, 예컨대 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, t-부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, 이소펜틸, n-헥실, 2-에틸헥실 또는 n-헵틸, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1$ - $C_{12}$ 알킬, 예컨대  $-CH_2OCH_3$ ,  $-CH_2OCH_2CH_3$ ,  $-CH_2OCH_2CH_2OCH_3$  또는  $-CH_2OCH_2CH_2OCH_2CH_3$ ,  $C_6$ - $C_{14}$ 아릴, 예컨대 폐닐, 나프틸 또는 비페닐릴,  $C_5$ - $C_{12}$ 시클로알킬, 예컨대 시클로헥실, G에 의해 치환된  $C_6$ - $C_{14}$ 아릴, 예컨대  $-C_6H_4OCH_3$ ,  $-C_6H_4OCH_2CH_3$ ,  $-C_6H_3(OCH_3)_2$  또는  $-C_6H_3(OCH_2CH_3)_2$ ,  $-C_6H_4CH_3$ ,  $-C_6H_3(CH_3)_2$ ,  $-C_6H_2(CH_3)_3$  또는  $-C_6H_4tBu$ 이다.

[0058] 바람직하게는,  $R^{119}$  및  $R^{120}$ 은 서로 독립적으로  $C_1$ - $C_{12}$ 알킬, 예컨대 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, sec-부틸, 헥실, 옥틸 또는 2-에틸-헥실, E에 의해 치환되고/거나 D가 개재된  $C_1$ - $C_{12}$ 알킬, 예컨대  $-CH_2(OCH_2CH_2)_wOCH_3$  ( $w = 1, 2, 3$  또는 4),  $C_6$ - $C_{14}$ 아릴, 예컨대 폐닐, 나프틸 또는 비페닐릴, G에 의해 치환된  $C_6$ - $C_{14}$ 아릴, 예컨대  $-C_6H_4OCH_3$ ,  $-C_6H_4OCH_2CH_3$ ,  $-C_6H_3(OCH_3)_2$ ,  $-C_6H_3(OCH_2CH_3)_2$ ,  $-C_6H_4CH_3$ ,  $-C_6H_3(CH_3)_2$ ,  $-C_6H_2(CH_3)_3$  또는  $-C_6H_4tBu$ 거나, 또는  $R^{119}$  및  $R^{120}$ 은 함께 4 내지 8원 고리, 특히 5 또는 6원 고리, 예컨대 시클로헥실 또는 시클로펜틸을 형성하며, 이는  $C_1$ - $C_8$ 알킬에 의해 임의로 치환될 수 있다.

[0059] D는 바람직하게는  $-CO-$ ,  $-COO-$ ,  $-S-$ ,  $-SO-$ ,  $-SO_2-$ ,  $-O-$ ,  $-NR^{25}-$ 이고, 여기서  $R^{25}$ 는  $C_1$ - $C_{12}$ 알킬, 예컨대 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소부틸, 또는 sec-부틸, 또는  $C_6$ - $C_{14}$ 아릴, 예컨대 폐닐, 톨릴, 나프틸 또는 비페닐릴이다.

[0060] E는 바람직하게는  $-OR^{29}$ ;  $-SR^{29}$ ;  $-NR^{25}R^{25}$ ;  $-COR^{28}$ ;  $-COOR^{27}$ ;  $-CONR^{25}R^{25}$ ; 또는  $-CN$ 이고, 여기서  $R^{25}$ ,  $R^{27}$ ,  $R^{28}$  및  $R^{29}$ 는 서로 독립적으로  $C_1$ - $C_{12}$ 알킬, 예컨대 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, 헥실, 옥틸 또는 2-에틸-헥실, 또는  $C_6$ - $C_{14}$ 아릴, 예컨대 폐닐, 톨릴, 나프틸 또는 비페닐릴이고, 이는 임의로 치환될 수 있다.

[0061] G는 바람직하게는 E와 동일하거나, 또는  $C_1$ - $C_{18}$ 알킬, 특히  $C_1$ - $C_{12}$ 알킬, 예컨대 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, 헥실, 옥틸 또는 2-에틸-헥실이거나, 또는  $C_1$ - $C_{18}$ 페플루오로알킬, 예컨대, 예를 들어  $-CF_3$ 이다.

[0062]  $R^1$  및  $R^4$ 가 수소이고,

[0063]  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^5$  및  $R^6$ 이 서로 독립적으로 H,  $C_1$ - $C_{18}$ 알킬, D가 개재된  $C_1$ - $C_{18}$ 알킬,  $C_1$ - $C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_1$ - $C_{18}$ 알콕시, D가 개재된  $C_1$ - $C_{18}$ 알콕시 또는  $C_7$ - $C_{25}$ 아르알킬이고;

[0064]  $R^8$ 이  $C_1$ - $C_{18}$ 알킬, D가 개재된  $C_1$ - $C_{18}$ 알킬;  $C_1$ - $C_{18}$ 페플루오로알킬, 임의로  $C_1$ - $C_{18}$ 알킬,  $C_1$ - $C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_1$ - $C_{18}$ 알콕시 또는 D가 개재된  $C_1$ - $C_{18}$ 알콕시에 의해 치환될 수 있는  $C_6$ - $C_{18}$ 아릴이고;

[0065]  $R^9$ 가 H,  $C_1$ - $C_{18}$ 알킬, D가 개재된  $C_1$ - $C_{18}$ 알킬,  $C_1$ - $C_{18}$ 페플루오로알킬, 임의로  $C_1$ - $C_{18}$ 알킬,  $C_1$ - $C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_1$ - $C_{18}$ 알콕시 또는 D가 개재된  $C_1$ - $C_{18}$ 알콕시에 의해 치환될 수 있는  $C_6$ - $C_{18}$ 아릴이고, 여기서

[0066] D가  $-CO-$ ;  $-COO-$ ;  $-S-$ ;  $-SO-$ ;  $-SO_2-$ ;  $-O-$ ;  $-NR^{25}-$ ;  $-CR^{23}=CR^{24}-$ ; 또는  $-C\equiv C-$ 이고; 여기서

[0067]  $R^{23}$  및  $R^{24}$ 가 서로 독립적으로 H이고;

[0068]  $R^{25}$ 가  $C_6$ - $C_{18}$ 아릴;  $C_1$ - $C_8$ 알킬 또는  $C_1$ - $C_8$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6$ - $C_{18}$ 아릴;  $C_1$ - $C_8$ 알킬; 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1$ - $C_8$ 알킬인 화학식 I의 화합물이 훨씬 더 바람직하다.

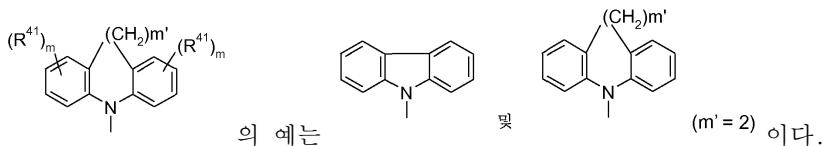
[0069]  $R^8$ 은 보다 바람직하게는  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 임의로 치환될 수 있는  $C_6-C_{18}$ 아릴이고;

[0070]  $R^9$ 는 보다 바람직하게는  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬에 의해 임의로 치환될 수 있는  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, 또는 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시이다.

[0071] D는  $-S-$ ,  $-O-$ , 또는  $-NR^2-$   $\circ$  고,

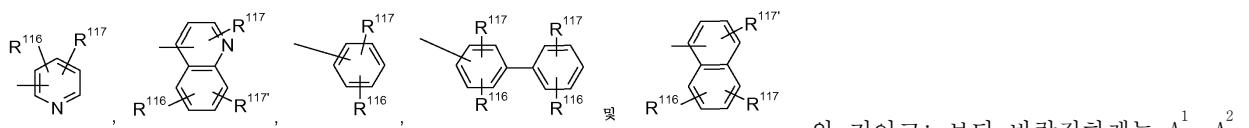
[0072]  $R^{25}$ 는  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴;  $C_1-C_{18}$ 알킬; 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이다.

[0073] 본 발명의 바람직한 실시양태에서,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$  및  $R^6$ 은 수소이다.

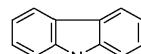


[0074] | 의 예는 및  $(m' = 2)$  이다.

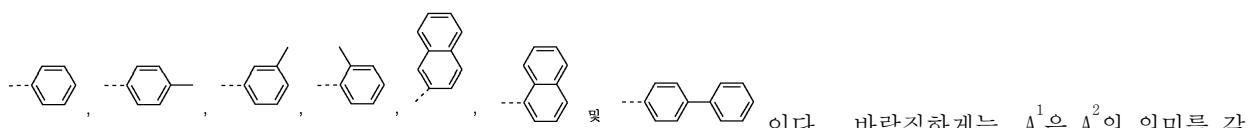
[0075] 바람직하게는,  $A^1$ ,  $A^2$ ,  $A^{1'}$  및  $A^{2'}$ 는 서로 독립적으로 화학식



$A^1$  및  $A^2$ 는 서로 독립적으로 화학식  $R^{116}$ ,  $R^{116}R^{116}$  및  $R^{116}R^{117}$ 의 기이고.  $A^1$  및  $A^1$  및/또는



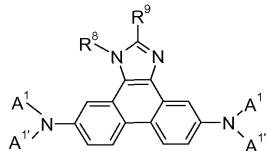
$A^2$  및  $A^2'$ 는 이들이 결합되어 있는 질소 원자와 함께 화학식의 기를 형성하고; 여기서  $R^{116}$ ,  $R^{117}$  및  $R^{117}'$ 는 서로 독립적으로  $H$  또는  $C_{1-18}$ 일 것이다.  $A^1$ ,  $A^2$ ,  $A^1'$  및  $A^2'$ 의 구체적인 예는



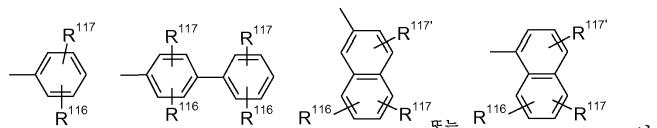
고  $A^{1'}$  는  $A^{2'}$  의 의미를 갖는다.

[0076] 바람직한 실시양태에서, 본 발명은 하기 화학식 Ia의 화합물에 관한 것이다.

[0077] <화학식 Ia>

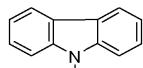


[0078]  $\text{A}^- \text{---} \text{C}=\text{C} \text{---} \text{C}=\text{C} \text{---} \text{A}^+$



[0079] 삼기 식에서,  $A^1$  및  $A^{1'}$ 은 서로 독립적으로 화학식  $R^{116}$ ,  $R^{116}$ ,  $R^{116}$ ,  $R^{116}$  또는  $R^{116}$   $\text{--} R^{117}$ 의

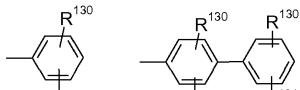
기이고, 여기서  $R^{116}$ ,  $R^{117}$  및  $R^{117'}$ 는 서로 독립적으로 H 또는  $C_{1-C_{18}}$ 일킬이거나; 또는  $A^1$  및  $A^{1'}$ 는 이들이 결합되



어 있는 질소 원자와 함께 화학식 의 기를 형성하고;

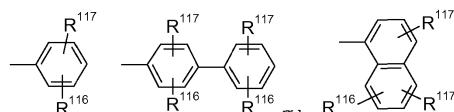


$R^8$ 은 화학식  $R^{129}$ 의 기이고

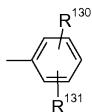


$R^9$  는 화학식       $R^{131}$  또는  $R^{131}$        $R^{131}$  의 기이고 여기서

$R^{128}$ ,  $R^{129}$ ,  $R^{130}$  및  $R^{131}$ 은 서로 돌립적으로  $H$ ,  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 알코시 또는  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬이다. 상기 실



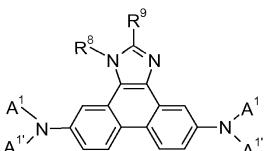
시양태에서  $A^1$  및  $A^{1'}$ 는 바람직하게는 서로 독립적으로 화학식



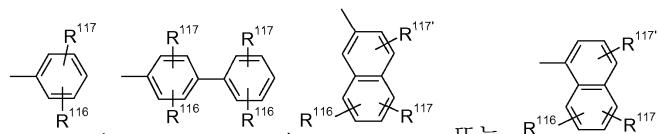
이고,  $R^9$ 는 바람직하게는 화학식  $R^{131}$ 의 기이다.

또 다른 바람직한 실시양태에서, 본 발명은 하기 화학식 Ia의 화합물에 관한 것이다.

### <화학식 Ia>



상기 식에서  $A^1$  및  $A^{1'}$ 는 서로 독립적으로 학습

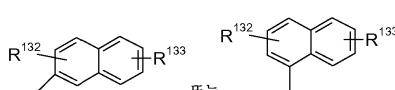


의 기이거나, 또는  $A^1$  및  $A^{1'}$ 을 이들이 결합되어 있는 절소 원자와 함께 화학식

고: 여기서  $R^{116}$ ,  $R^{117}$  및  $R^{117'}$ 는 서로 돌립적으로 H 또는  $C_4-C_{18}$  알킬이고:



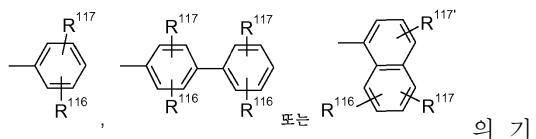
$R^8$  은 핵핵식  $R^{129}$  의 기이고



$P^9$  는 화학식  또는 의 기호로 표기된다.

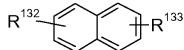
$R^{128}$   $R^{129}$   $R^{132}$  및  $R^{133}$ 은 서로 돋립적으로 H-C-C-아키, C-C-아코시 또는 C-C-페플론으로 아키이다. 사기 시

시양태에서  $A^1$  및  $A^{1'}$ 는 바람직하게는 서로 독립적으로 화학식



의 기

이고,  $R^9$ 는 바람직하게는 화학식



의 기이다.

[0090]

특히 바람직한 화합물의 예는 특허청구범위 제10항에 나타낸 화합물 A-1 내지 A-45이다. 본 발명에서, 화학

식 의 화합물, 예컨대, 예를 들어 화합물 A-1, A-5, A-7, A-11, A-31 및 A-35가 가장

바람직하며, 여기서  $A^1$  및  $A^{1'}$ 는 서로 독립적으로 또는 이고,  $R^9$ 는 또는 또는 이다.

[0091]

화학식 I의 화합물은 예를 들어 화학식 (II)의 화합물 (여기서,  $X^{10}$ 은 할로겐, 예컨대 브로모 또는 요오도, 바람직하게는 요오도를 의미함)을, 염기, 예컨대 수소화나트륨, 탄산칼륨 또는 탄산나트륨, 및 촉매, 예컨대 구리 (0) 또는 구리 (I) (예컨대 구리, 구리-브론즈, 구리 브로마이드 요오다이드 또는 구리 브로마이드)의 존재 하에, 용매, 예컨대 톨루엔, 디메틸 포름아미드 또는 디메틸 솔록시드 중에서 화학

식  $HNA^1A^{1'}$  또는

의 화합물과 반응시키는 것을 포함하는 방법에 따라 제조될 수 있으며, 여기서  $m'$ ,  $A^1$ ,  $A^{1'}$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{41}$  및  $m$ 은 상기 정의된 바와 같다 (WO08/031743). 구리를 촉매로 사용하는 이 반응은 울만(Ullmann) 촉합으로서 지칭되며, 문헌 [Yamamoto & Kurata, Chem. and Industry, 737-738 (1981), J. Mater. Chem. 14 (2004) 2516, H. B. Goodbrand et al., J. Org. Chem. 64 (1999) 670 and k. D. Belfield et al., J. Org. Chem. 65 (2000) 4475]에 기재되어 있다. 추가로 팔라듐 촉매는 할로겐 화합물과 아민의 아릴 커플링에 사용될 수 있으며, 문헌 [M. D. Charles et al., Organic Lett. 7 (2005) 3965, A. F. Littke et al., Angew. Chem. Int. Ed. 41 (2002) 4176] 및 그에 인용된 문헌에 기재된 바와 같다.

[0092]

화학식 II의 화합물은 WO06/097419 또는 WO08/031743으로부터 공지되어 있거나, 그에 기재된 방법과 유사한 방법에 따라 제조될 수 있다.

[0093]

할로겐은 불소, 염소, 브롬 및 요오드이다.

[0094]

$C_1-C_{18}$ 알킬은 전형적으로 가능한 경우 선형 또는 분지형이다. 예는 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, sec.-부틸, 이소부틸, tert.-부틸, n-펜틸, 2-펜틸, 3-펜틸, 2,2-디메틸프로필, 1,1,3,3-테트라메틸펜틸, n-헥실, 1-메틸헥실, 1,1,3,3,5,5-헥사메틸헥실, n-헵틸, 이소헵틸, 1,1,3,3-테트라메틸부틸, 1-메틸헵틸, 3-메틸헵틸, n-옥틸, 1,1,3,3-테트라메틸부틸 및 2-에틸헥실, n-노닐, 테실, 운데실, 도데실, 트리데실, 테트라데실, 펜타데실, 헥사데실, 헤파데실 또는 옥타데실이다.  $C_1-C_8$ 알킬은 전형적으로 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, sec.-부틸, 이소부틸, tert.-부틸, n-펜틸, 2-펜틸, 3-펜틸, 2,2-디메틸-프로필, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 1,1,3,3-테트라메틸부틸 및 2-에틸헥실이다.  $C_1-C_4$ 알킬은 전형적으로 메틸, 에틸, n-프로필,

이소프로필, n-부틸, sec.-부틸, 이소부틸, tert.-부틸이다.

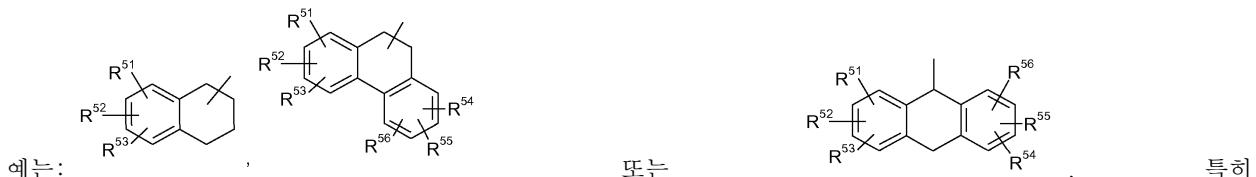
$C_1-C_{18}$  알콕시 기는 직쇄 또는 분지형 알콕시 기, 예를 들어 메톡시, 에톡시,  $n$ -프로포록시, 이소프로포록시,  $n$ -부톡시,  $sec$ -부톡시,  $tert$ -부톡시, 아밀옥시, 이소아밀옥시 또는  $tert$ -아밀옥시, 헵틸옥시, 옥틸옥시, 이소옥틸옥시, 노닐옥시, 테실옥시, 운데실옥시, 도데실옥시, 테트라데실옥시, 펜타데실옥시, 헥사데실옥시, 헬타데실옥시 및 옥타데실옥시이다.  $C_1-C_8$  알콕시의 예는 메톡시, 에톡시,  $n$ -프로포록시, 이소프로포록시,  $n$ -부톡시,  $sec$ -부톡시,  $tert$ -부톡시,  $n$ -펜틸옥시, 2-펜틸옥시, 3-펜틸옥시, 2,2-디메틸프로포록시,  $n$ -헥실옥시,  $n$ -헵틸옥시,  $n$ -옥틸옥시, 1,1,3,3-테트라메틸부톡시 및 2-에틸헥실옥시, 바람직하게는  $C_1-C_4$  알콕시, 예컨대 전형적으로 메톡시, 에톡시,  $n$ -프로포록시, 이소프로포록시,  $n$ -부톡시,  $sec$ -부톡시, 이소부톡시,  $tert$ -부톡시이다. 용어 "알킬티오 기"는 에테르 연결의 산소 원자가 황 원자에 의해 대체된 것을 제외하고는 알콕시 기와 동일한 기를 의미한다.

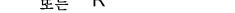
$C_2-C_{18}$  알케닐 기는 직쇄 또는 분지형 알케닐 기, 예컨대, 예를 들어 비닐, 알릴, 메트알릴, 이소프로페닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 이소부테닐, n-펜타-2,4-디에닐, 3-메틸-부트-2-에닐, n-옥트-2-에닐, n-도데스-2-에닐, 이소도데세닐, n-도데스-2-에닐 또는 n-옥타데스-4-에닐이다.

$C_{2-18}$ 알키닐은 직쇄 또는 분지형이고, 바람직하게는 비치환 또는 치환된  $C_{2-8}$ 알키닐, 예컨대, 예를 들어 에티닐, 1-프로핀-3-일, 1-부틴-4-일, 1-펜틴-5-일, 2-메틸-3-부틴-2-일, 1,4-펜타디인-3-일, 1,3-펜타디인-5-일, 1-헥신-6-일, 시스-3-메틸-2-펜텐-4-인-1-일, 트랜스-3-메틸-2-펜텐-4-인-1-일, 1,3-헥사디인-5-일, 1-옥탄-8-일, 1-노닌-9-일, 1-데신-10-일, 또는 1-테트라코신-24-일이다.

$C_1-C_8$ 퍼플루오로알킬, 특히  $C_1-C_4$ 퍼플루오로알킬은 분지형 또는 비분지형 라디칼, 예컨대, 예를 들어  $-CF_3$ ,  $-CF_2CF_3$ ,  $-CF_2CF_2CF_3$ ,  $-CF(CF_3)_2$ ,  $-(CF_2)_3CF_3$  및  $-C(CF_3)_3$ 이다.

용어 "시클로알킬 기"는 전형적으로  $C_4$ - $C_{18}$  시클로알킬, 예컨대 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 시클로노닐, 시클로데실, 시클로운데실, 시클로도데실, 바람직하게는 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸 또는 시클로옥틸이며, 이는 비치환되거나 치환될 수 있다. 용어 "시클로알케닐 기"는 1개 이상의 이중 결합을 함유하는 불포화 지환족 탄화수소 기, 예컨대 시클로펜테닐, 시클로펜타디에닐, 시클로헥세닐 등을 의미하며, 이는 비치환되거나 치환될 수 있다. 시클로알킬 기, 특히 시클로헥실 기는  $C_1$ - $C_4$ -알킬, 할로겐 및 시아노로 1 내지 3회 치환될 수 있는 폐닐에 의해 1 또는 2회 축합될 수 있다. 이러한 축합된 시클로헥실 기의



또는 이며, 여기서,  $R^{51}$ ,  $R^{52}$ ,  $R^{53}$ ,  $R^{54}$ ,  $R^{55}$  및  $R^{56}$ 은 서로 독립적으로  $C_1$ - $C_8$ -알킬,  $C_1$ - $C_8$ -알콕시, 할로겐 및 시아노, 특히 수소이다.

아릴은 보통 임의로 치환될 수 있는  $C_6$ - $C_{24}$ 아릴 ( $C_6$ - $C_{18}$ 아릴), 예컨대, 예를 들어 폐닐, 4-메틸페닐, 4-메톡시페닐, 나프틸, 특히 1-나프틸 또는 2-나프틸, 비페닐릴, 터페닐릴, 피레닐, 2- 또는 9-플루오로레닐, 폐난트릴, 악트릴, 테트라실, 펜타실, 헥사실 또는 쿼더페닐릴이며, 이는 비치환되거나 치환될 수 있다.

용어 "아르알킬 기"는, 전형적으로  $C_7-C_{25}$ 아르알킬, 예컨대 벤질, 2-벤질-2-프로필,  $\beta$ -페닐-에틸,  $\alpha$ ,  $\alpha$ -디메틸벤질,  $\omega$ -페닐-부틸,  $\omega$ ,  $\omega$ -디메틸- $\omega$ -페닐-부틸,  $\omega$ -페닐-도데실,  $\omega$ -페닐-옥타데실,  $\omega$ -페닐-에이코실 또는  $\omega$ -페닐-도코실, 바람직하게는  $C_7-C_{18}$ 아르알킬, 예컨대 벤질, 2-벤질-2-프로필,  $\beta$ -페닐-에틸,  $\alpha$ ,  $\alpha$ -디메틸벤질,  $\omega$ -페닐-부틸,  $\omega$ ,  $\omega$ -디메틸- $\omega$ -페닐-부틸,  $\omega$ -페닐-도데실 또는  $\omega$ -페닐-옥타데실이고, 특히 바람직하게는  $C_7-C_{12}$ 아르알킬, 예컨대 벤질, 2-벤질-2-프로필,  $\beta$ -페닐-에틸,  $\alpha$ ,  $\alpha$ -디메틸벤질,  $\omega$ -페닐-부틸, 또는  $\omega$ ,  $\omega$ -디메틸- $\omega$ -페닐-부틸이고, 여기서 지방족 탄화수소 기 및 방향족 탄화수소 기 둘 다는 비치화되거나 치

환될 수 있다.

[0102] 헤테로아릴은 전형적으로  $C_2$ - $C_{20}$  헤테로아릴, 즉 5개 내지 7개의 고리 원자를 갖는 고리 또는 축합 고리계이고, 여기서 질소, 산소 또는 황이 가능한 헤테로 원자이고, 전형적으로 6개 이상의 공액  $\pi$ -전자를 갖는 5개 내지 30개의 원자를 갖는 불포화 헤테로시클릭 기, 예컨대 티에닐, 벤조[b]티에닐, 디벤조[b,d]티에닐, 티안트레닐, 푸릴, 푸르푸릴, 2H-피라닐, 벤조피라닐, 이소벤조피라닐, 디벤조피라닐, 페녹시티에닐, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 피리딜, 비피리딜, 트리아지닐, 피리미디닐, 피라지닐, 피리다지닐, 인돌리지닐, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 퓨리닐, 퀴놀리지닐, 키놀릴, 이소키놀릴, 프탈라지닐, 나프티리디닐, 키녹살리닐, 키나졸리닐, 신놀리닐, 프테리디닐, 카르바졸릴, 카르볼리닐, 벤조트리아졸릴, 벤족사졸릴, 페난트리디닐, 아크리디닐, 피리미디닐, 페난트롤리닐, 페나지닐, 이소티아졸릴, 페노티아지닐, 이속사졸릴, 푸라자닐 또는 페녹사지닐이며, 이는 비치환되거나 치환될 수 있다.

[0103] 상기 언급된 기의 가능한 치환기는  $C_1$ - $C_8$ 알킬, 히드록실 기, 메르캅토 기,  $C_1$ - $C_8$ 알콕시,  $C_1$ - $C_8$ 알킬티오, 할로겐, 할로- $C_1$ - $C_8$ 알킬, 시아노 기, 알데히드 기, 케톤 기, 카르복실 기, 에스테르 기, 카르바모일 기, 아미노 기, 니트로 기 또는 질릴 기이다. 상기 언급된 기의 바람직한 치환기는  $C_1$ - $C_8$ 알킬,  $C_1$ - $C_8$ 알콕시,  $C_1$ - $C_8$ 알킬티오 및 시아노 기이다.

[0104] 치환기, 예를 들어  $R^{41}$ 이 하나의 기에서 1회 초과로 나타나는 경우에, 이는 각 경우에 상이할 수 있다.

[0105] 용어 "G에 의해 치환된"은 1개 이상, 특히 1 내지 3개의 치환기 G가 존재할 수 있음을 의미한다.

[0106] 상기된 바와 같이, 상기 언급된 기는 E에 의해 치환되고/거나, 원하는 경우에, D가 개재될 수 있다. 개재는 물론, 기가 단일 결합에 의해 서로에게 연결된 2개 이상의 탄소 원자를 함유하는 경우에만 가능하며;  $C_6$ - $C_{24}$ 아릴은 개재되지 않고; 개재된 아릴알킬 또는 알킬아릴은 알킬 잔기 내에 단위 D를 함유한다. 1개 이상의 E에 의해 치환되고/거나 1개 이상의 단위 D가 개재된  $C_1$ - $C_{18}$ 알킬은 예를 들어  $(CH_2CH_2O)_{1-9}R^x$  (여기서,  $R^x$ 는 H 또는  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬 또는  $C_2$ - $C_{10}$ 알카노일 (예를 들어,  $CO-CH(C_2H_5)C_4H_9$ 임),  $CH_2-CH(OR^{y'})-CH_2-O-R^y$  (여기서,  $R^y$ 는  $C_1$ - $C_{18}$ 알킬,  $C_5$ - $C_{12}$ 시클로알킬, 페닐,  $C_7$ - $C_{15}$ 페닐알킬이고,  $R^{y'}$ 는  $R^y$ 와 동일한 정의를 포함하거나 H임);

[0107]  $C_1$ - $C_8$ 알킬렌-COO-R<sup>z</sup>, 예를 들어  $CH_2COOR^z$ ,  $CH(CH_3)COOR^z$ ,  $C(CH_3)_2COOR^z$  (여기서,  $R^z$ 는 H,  $C_1$ - $C_{18}$ 알킬,  $(CH_2CH_2O)_{1-9}R^x$  (여기서,  $R^x$ 는 상기 지시된 정의를 포함함));

[0108]  $CH_2CH_2-O-CO-CH=CH_2$ ;  $CH_2CH(OH)CH_2-O-CO-C(CH_3)=CH_2$ 이다.

[0109] 일반적 소자 구조

[0110] 화학식 I의 화합물은 소분자 물질, 올리고머 물질, 중합체 물질 또는 그의 조합을 사용하는 많은 OLED 소자 형태에서 활용될 수 있다. 이들은 단일 애노드 및 캐소드를 포함하는 매우 단순한 구조에서부터 보다 복잡한 소자, 예컨대 애노드 및 캐소드가 직교 배치되어 화소를 형성하는 수동 매트릭스 디스플레이, 및 각각의 화소가 독립적으로, 예를 들어 박막 트랜지스터 (TFT)로 제어되는 활성-매트릭스 디스플레이를 포함한다.

[0111] 본 발명의 유기 발광 소자는 애노드 및 캐소드로 이루어진 한 쌍의 전극, 및 전극의 쌍 사이에 배치되는 하나 이상의 발광 층 및 정공 수송/주입 층을 비롯한 유기 화합물을 각각 함유하는 층들을 갖는다.

[0112] 제1 구성은 기판 상에, 애노드, 정공 수송/주입 층, 발광 층, 전자-수송 층 및 캐소드를 연속적으로 포함한다. 이 구성에서, 캐리어-수송 기능 및 발광 기능은 서로 별개이고, 정공 및 전자가 재결합하는 영역은 발광 층에 존재한다.

[0113] 제2 구성은, 정공 수송/주입 층이 하나의 정공 주입 층 및 하나의 정공-수송 층을 포함한다는 점에서 제1 구성과 상이하다. 층은 정공 주입 특성에 대해 개선된 효과를 가지고 있고, 구동 전압을 감소시키는데 효과적이다.

[0114] 제3 구성은, 정공이 캐소드 층으로 침투하는 것을 억제하기 위한 층 (정공-차단 층)이 발광 층 및 전자-수송 층 사이에 추가로 제공된다는 점에서 상기 제1 구성과 상이하다. 구성은 큰 이온화 전위 (즉, 깊은 HOMO)를

갖는 화합물이 정공-차단 층에 사용되는 경우 방출 효율의 향상에 효과적이다.

[0115] 화학식 I의 화합물은 정공 수송/주입 층의 성분으로 사용될 수 있다. 정공-수송 층의 주요 성분으로서 화학식 I의 화합물이 애노드로부터 정공의 주입을 용이하게 하고, 주입된 정공을 발광 층으로 수송하기 위한 우수한 이동성을 갖는 것이 바람직하다.

[0116] 대안적으로, 화학식 I의 화합물은 전자 차단 층의 성분으로 사용될 수 있다.

[0117] 소분자 소자에 특히 유용한 전형적 구조는 기판, 애노드, 정공 수송/주입 층, 임의로 전자 차단 층, 발광 층, 임의로 정공- 또는 여기자-차단 층, 전자-수송 층 및 캐소드로 이루어진다. 소분자 소자에 특히 유용한 바람직한 구조는 기판, 애노드, 정공 수송/주입 층, 전자 차단 층, 발광 층, 정공-차단 층, 전자-수송 층 및 캐소드로 이루어진다.

[0118] 이들 층은 하기에 상세히 기재된다. 대안적으로, 기판이 캐소드에 인접하여 위치할 수 있거나, 또는 기판이 사실상 애노드 또는 캐소드를 구성할 수 있음을 유념하기 바란다. 애노드와 캐소드 사이의 유기 층은 편의상 유기 EL 소자라고 지칭된다. 또한, 유기 층의 조합된 층 두께는 바람직하게는 500 nm 미만이다.

[0119] 인광 물질을 위한 호스트 물질

[0120] 화학식 I의 화합물은 또한 인광 화합물에 대한 호스트로서 유기 발광 다이오드 (OLED)에 사용될 수 있다. W008/031743을 참조한다.

[0121] 적합하게는, OLED 소자의 발광 층은 발광을 위한 호스트 물질 및 하나 이상의 게스트 물질을 포함한다. 발광 게스트 물질(들)은 보통 호스트 물질의 양 미만의 양으로 존재하고, 전형적으로 호스트의 15 wt% 이하, 보다 전형적으로 호스트의 0.1 wt% 내지 10 wt%, 일반적으로 호스트의 5% 내지 10%의 양으로 존재한다. 편의상, 본원에서는 인광 착체 게스트 물질을 인광 물질로 지칭할 수 있다. 방출 층은 수송 및 방출 특성을 겸비한 단일 물질을 포함할 수 있다. 방출 물질이 도편트든지 또는 주요 구성성분이든지에 관계없이, 방출 층은 기타 물질, 예컨대 방출 층의 방출을 조정하는 도편트를 포함할 수 있다. 방출 층은 조합하여 목적하는 광스펙트럼을 방출할 수 있는 복수개의 방출 물질을 포함할 수 있다.

[0122] 본 발명에 유용한 호스트 물질은 단독으로, 또는 다른 호스트 물질과 조합하여 사용할 수 있다. 호스트 물질은 삼중선 엑시톤이 호스트 물질로부터 인광 물질로 효율적으로 이동될 수 있도록 선택되어야 한다. 적합한 호스트 물질은 W000/70655; W001/39234; W001/93642; W002/074015; W002/15645, US20020117662 및 W008/031743에 기재되어 있다. 적합한 호스트는 특정 아릴 아민, 트리아졸, 인돌 및 카르바졸 화합물을 포함한다. 호스트의 예는 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 ( $\alpha$ -NPD), 4,4'-N,N'-디카르바졸-비페닐 (CBP), 2,2'-디메틸-4,4'-N,N'-디카르바졸-비페닐,  $m$ -(N,N'-디카르바졸)벤젠 및 폴리(N-비닐카르바졸), 및 그의 유도체이다.

[0123] 바람직한 호스트 물질은 연속 막을 형성할 수 있다. 발광 층은 소자의 막 형태성, 전기적 특성, 발광 효율성 및 수명을 개선시키기 위해 1종 초파의 호스트 물질을 함유할 수 있다. 발광 층은 우수한 정공-수송 특성을 갖는 제1 호스트 물질, 및 우수한 전자 수송 특성을 갖는 제2 호스트 물질을 함유할 수 있다.

[0124] 인광 물질

[0125] 인광 물질은 동일하거나 상이한 층에서 단독으로, 또는 특정 경우, 서로 조합하여 사용할 수 있다. 인광 물질 및 관련 물질의 예는 W000/57676, W000/70655, W001/41512, W002/15645, US2003/0017361, W001/93642, W001/39234, US6,458,475, W002/071813, US6,573,651, US2002/0197511, W002/074015, US6,451,455, US2003/0072964, US2003/0068528, US6,413,656, 6,515,298, 6,451,415, 6,097,147, US2003/0124381, US2003/0059646, US2003/0054198, EP1239526, EP1238981, EP1244155, US2002/0100906, US2003/0068526, US2003/0068535, JP2003073387, JP2003073388, US2003/0141809, US2003/0040627, JP2003059667, JP2003073665 및 US2002/0121638에 기재되어 있다.

[0126]  $\text{IrL}_3$  및  $\text{IrL}_2\text{L}'$  유형의 시클로금속화 Ir(III) 착체, 예컨대 녹색-방출 fac-트리스(2-페닐페리디네이토- $\text{N},\text{C}^{2'}$ )이리듐(III) 및 비스(2-페닐페리디네이토- $\text{N},\text{C}^{2'}$ )이리듐(III) (아세틸아세토네이트)의 방출 광장은 시클로금속화성 리간드 L 상의 적절한 위치에 전자 공여 또는 인출 기를 치환시킴으로써, 또는 시클로금속화성 리간드 L에 대하여 상이한 헤테로사이클을 선택함으로써 이동시킬 수 있다. 방출 광장은 또한 보조 리간드 L'의 선택에 의해 이동될 수 있다. 적색 방출체의 예는 비스 (2-(2'-벤조티에닐)페리디네이토- $\text{N},\text{C}^{3'}$ )이리듐

(E1)(아세틸아세토네이트), 이리듐(III)비스(2-메틸디벤조[f,h]퀴녹살린) (아세틸아세토네이트) 및 트리스(1-페닐이소퀴놀리네이토-N,C)이리듐(III)이다. 청색-방출체의 예는 비스(2-(4,6-디플루오로페닐)-페리디네이토-N,C<sup>2'</sup>)이리듐(III)(페롤리네이트)이다.

[0127] 인광 물질로서 비스(2-(2'-벤조[4,5-a]티에닐)페리디네이토-N,C<sup>3</sup>)이리듐(아세틸아세토네이트)[Btp<sub>2</sub>Ir(acac)]를 사용하는 적색 전기 인광이 보고되어 있다 (문헌 [Adachi, C., Lamansky, S., Baldo, M. A., Kwong, R. C., Thompson, M. E., and Forrest, S. R., App. Phys. Lett., 78, 1622 1624 (2001)]).

[0128] 다른 중요한 인광 물질에는 시클로금속화된 Pt(II) 착체, 예컨대 시스-비스(2-페닐페리디네이토-N,C<sup>2'</sup>)백금(II), 시스-비스(2-(2'-티에닐)페리디네이토-N,C<sup>3'</sup>) 백금(II), 시스-비스(2-(2'-티에닐)퀴놀리네이토-N,C<sup>5'</sup>) 백금(II) 또는 (2-(4,6-디플루오로페닐)페리디네이토-N,C<sup>2'</sup>) 백금(II) 아세틸아세토네이트가 포함된다. Pt(II)포르페린 착체, 예컨대 2,3,7,8,12,13,17,18-옥타에틸-21H, 23H-포르핀 백금(H)가 또한 유용한 인광 물질이다.

[0129] 유용한 인광 물질의 또 다른 예로는 3가 란타나이드, 예컨대 Th<sup>3+</sup> 및 Eu<sup>3+</sup>의 배위 착물이 포함된다 (문헌 [J. Kido et al., Appl. Phys. Lett., 65, 2124 (1994)]).

[0130] 다른 중요한 인광 물질은 W006/000544 및 W008/101842에 기재되어 있다.

#### [0131] 차단 층

[0132] 적합한 호스트 뿐만 아니라, 인광 물질을 사용하는 OLED 소자는 종종 엑시톤 또는 전자-정공 재조합 중심을 호스트 및 인광 물질을 포함하는 발광 층에 국한시키는 것을 돋거나 또는 전하 캐리어 (전자 또는 정공)의 수를 감소시키기 위해 하나 이상의 엑시톤 또는 정공 차단 층을 필요로 한다. 한 실시양태에서, 이러한 차단 층은 전자-수송 층과 발광 층 사이에 위치될 것이다. 이 경우에, 차단 층의 이온화 전위는 호스트로부터 전자-수송 층으로의 정공 이동에 대한 에너지 장벽이 존재하도록 해야 하며, 반면에 전자 친화도는 전자가 전자-수송 층으로부터 호스트 및 인광 물질을 포함하는 발광 층으로 보다 쉽게 통과되도록 해야 한다. 추가로, 차단 물질의 삼중선 에너지는 인광 물질의 것보다 큰 것이 바람직하나, 이는 반드시 요구되는 것은 아니다. 적합한 정공 차단 물질은 W000/70655 및 W001/93642에 기재되어 있다. 유용한 물질의 2가지 예는 배토쿠프로인 (BCP) 및 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)(4-페닐페놀레이토)알루미늄(III) (BA1q)이며, 이는 예를 들어 세슘에 의해 도핑될 수 있다. US20030068528에 기재된 바와 같이, BA1q 이외의 다른 금속 착체가 또한 정공 및 엑시톤을 차단하는 것으로 공지되어 있다. US20030175553에는 전자/엑시톤 차단 층에서의 fac-트리스(1-페닐피라졸레이토-N,C<sub>2</sub>)이리듐(III) (Irppz)의 용도가 기재되어 있다. 대안적으로, 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 (a-NPD)이 전자/엑시톤 차단 층에 사용될 수 있다.

[0133] 대안적으로, 화학식 I의 화합물은 전자 차단 층을 위한 물질로서 사용될 수 있다. 화학식 I의 화합물은 단독으로 기능하여 전계발광 소자의 개선된 효율, 구동 전압 및/또는 수명을 제공할 수 있다.

#### [0134] 기판

[0135] 기판은 의도하는 발광 방향에 따라 광 투과성이거나 또는 불투명할 수 있다. 광 투과 특성은 기판을 통한 EL 방출의 가시화를 위해 바람직하다. 투명한 유리 또는 플라스틱이 상기 경우에 통상적으로 사용된다. 기판은 다중층의 물질을 포함하는 복합 구조일 수 있다. 이는 통상적으로, TFT가 OLED 층 아래에 제공되는 능동 매트릭스 기판에 대한 경우이다. 기판은, 적어도 방출형 화소화 영역에서, 유리 또는 중합체와 같은 거의 투명한 물질로 구성될 필요가 여전히 있다. EL 방출이 상부 전극을 통해 가시화되는 적용분야의 경우, 하부 지지체의 투과 특성은 중요치 않으며, 따라서 광투과성, 광흡수성 또는 광반사성일 수 있다. 이러한 경우에 사용하기 위한 기판으로는 유리, 플라스틱, 반도체 물질, 규소, 세라믹 및 회로 기판 재료가 포함되나 이에 제한되지 않는다. 또한, 기판은 능동 매트릭스 TFT 디자인에서 발견되는 바와 같이, 다중층의 물질을 포함하는 복합 구조일 수 있다. 이러한 소자 형태에는 광투명성 상부 전극을 제공할 필요가 있다.

#### [0136] 애노드

[0137] 목적하는 전계발광성 발광 (EL)이 애노드를 통해 가시화되는 경우, 애노드는 해당 방출에 대해 투명하거나 또는 실질적으로 투명해야 한다. 본 발명에서 사용되는 통상적인 투명한 애노드 물질은 산화인듐주석 (ITO), 산화인듐아연 (IZO) 및 산화주석이나, 비제한적으로 알루미늄-도핑된 산화아연, 산화마그네슘인듐 및 산화니

켈팅스텐을 포함하는 다른 금속 산화물도 작용할 수 있다. 이들 산화물 이외에, 금속 질화물, 예컨대 질화갈륨, 금속 셀렌화물, 예컨대 셀렌화아연 및 금속 황화물, 예컨대 황화아연을 애노드로서 사용할 수 있다. EL 방출이 캐소드를 통해서만 가시화되는 적용분야의 경우, 애노드의 투과 특성은 중요치 않으며, 투명하거나 불투명하거나 반사성인 임의의 전도성 물질을 사용할 수 있다. 이러한 적용분야를 위한 전도체의 예에는 금, 이리듐, 몰리브데넘, 팔라듐 및 백금이 포함되나 이에 제한되지 않는다. 바람직한 애노드 물질은 임의의 적합한 방식, 예컨대 증발, 스퍼터링, 화학적 침착 또는 전기화학적 방식으로 통상적으로 침착된다. 애노드는 잘 알려진 포토리소그래피 공정을 사용하여 패턴화될 수 있다. 임의로, 다른 층의 적용 전에 애노드를 연마하여 표면 조도를 감소시켜 단락(short)을 최소화시키거나 반사성을 증진시킬 수 있다.

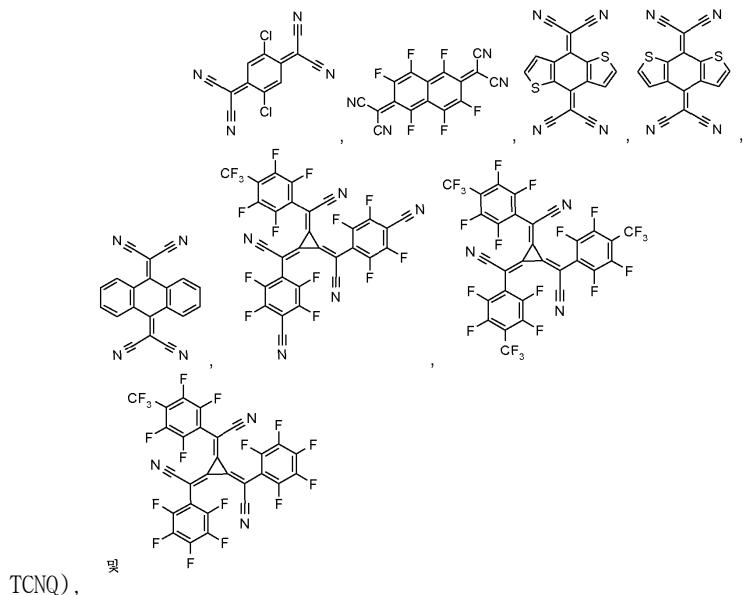
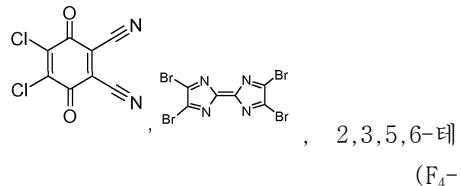
#### [0138] 캐소드

발광이 오로지 애노드를 통해서만 가시화되는 경우, 본 발명에 사용되는 캐소드는 거의 모든 전도성 물질로 구성될 수 있다. 바람직한 물질은 우수한 막-형성 특성을 가져 하부 유기 층과의 우수한 접촉을 보장하고, 낮은 전압에서 전자 주입을 촉진하고, 우수한 안정성을 갖는다. 유용한 캐소드 물질은 종종 낮은 일 함수의 금속 (<4.0 eV) 또는 금속 합금을 함유한다. 한 유용한 캐소드 물질은 US-A-4,885,221에 기재된 바와 같이, 은의 백분율이 1 내지 20% 범위인 Mg:Ag 합금으로 구성된다. 캐소드 물질의 또 다른 적합한 부류에는 캐소드, 및 보다 두꺼운 층의 전도성 금속으로 캡핑된 유기 층 (예를 들어, 전자 수송 층 (ETL))과 접촉해 있는 얇은 전자 주입층 (EIL)을 포함하는 이중층을 포함된다. 여기서, EIL은 바람직하게는 낮은 일 함수의 금속 또는 금속 염을 포함하며, 이 경우, 보다 두꺼운 캡핑층은 낮은 일 함수를 가질 필요가 없다. 이러한 한 캐소드는 US-A-5,677,572에 기재된 바와 같이, LiF의 얇은 층 다음에 Al의 보다 두꺼운 층으로 구성된다. 알칼리 금속으로 도핑된 ETL 물질, 예를 들어 Li-도핑된 Alq는 유용한 EIL의 또 다른 예이다. 다른 유용한 캐소드 물질 군으로는 US-A-5,059,861, 5,059,862 및 6,140,763에 개시된 것이 포함되나 이에 제한되지 않는다.

발광이 캐소드를 통해 가시화되는 경우, 캐소드는 투명하거나 거의 투명해야 한다. 이러한 적용분야의 경우, 금속은 얇아야 하거나 또는 투명한 전도성 산화물 또는 이들 물질의 조합을 사용해야 한다. 광학적으로 투명한 캐소드는 US-A-4,885,211, 5,247,190, JP 3,234,963, 미국 특허 번호 5,703,436, 5,608,287, 5,837,391, 5,677,572, 5,776,622, 5,776,623, 5,714,838, 5,969,474, 5,739,545, 5,981,306, 6,137,223, 6,140,763, 6,172,459, EP1076368, US-A-6,278,236 및 6,284,3936에 보다 상세히 기재되어 있다. 캐소드 물질은 임의의 적합한 방법, 예컨대 증발, 스퍼터링 또는 화학적 침착에 의해 통상적으로 침착된다. 필요에 따라, US-A-5,276,380 및 EP0732868에 기재된 바와 같은 관통-마스크 (through-mask) 침착, 집적 색도우 마스킹 (integral shadow masking), 레이저 융삭 및 선택적 화학적 증착을 포함하나 이에 제한되지 않는 다수의 익히 공지된 방법을 통해 패턴화를 달성할 수 있다.

#### [0141] 정공 수송/주입 층 (HTL)

정공 수송/주입 층은 단일 층으로 제한되지 않으며, 하나 이상의 층이 화학식 I의 화합물로 이루어진 둘 이상의 층이 쌓일 수 있다. 정공 수송/주입 층이 둘 이상의 층 (정공 주입 층/정공 수송 층)으로 이루어지는 경우에, 화학식 I의 화합물은 애노드의 옆의 층 (정공 주입 층)에 함유된다. 유기 EL 소자의 정공 수송/주입 층은 하나 이상의 화학식 I의 화합물을 함유한다. 정공 수송/주입 층은 화학식 I의 단일 화합물, 또는 화학식 I의 화합물의 혼합물, 또는 화학식 I의 화합물과 다른 화합물 (소위 "도편트")의 혼합물로 형성될 수 있다. 정공 수송/주입 층은 바람직하게는 화학식 I의 화합물 및 도편트를 포함하는 단일 층이다. 도편트(들)는 화학식 I의 화합물 및 도편트의 중량을 기준으로 하여 0.001 중량% 내지 20 중량%, 특히 1 중량% 내지 20 중량%의 양으로 사용된다. 도편트의 예는 예를 들어, 문헌 [K. Walzer, B. Maennig, M. Pfeiffer, and K. Leo, Chem. Rev. 107 (2007) 1233-1271], EP1596445A1, WO2009/003455A1, DE100357044, WO2008/058525, WO2008/138580, US20080171228 및 US2008/0265216에 언급되어 있다. 화학식 I의 화합물과의 조합에 사용될 수 있는 도편트의 구체적인 예는 다음과 같다: 산화티타늄 ( $TiO_x$ ), 산화바나듐 ( $VO_x$ ), 특히  $V_2O_5$ , 산화몰리브데넘 ( $MoO_x$ ), 특히  $MoO_3$ , 산화텅스텐 ( $WO_x$ ), 특히  $W_3$ , 산화루테튬 ( $RuO_x$ ), 산화크로뮴 ( $CrO_x$ ), 산화지르코늄 ( $ZrO_x$ ), 산화하프늄 ( $HfO_x$ ) 산화탄탈럼 ( $TaO_x$ ) 산화은 ( $AgO_x$ ), 산화망가니즈 ( $MnO_x$ ), 삼염화철 ( $FeCl_3$ ), 오염화안티모니 ( $SbCl_5$ ), WO2008/058525에 기재된 바와 같은 금속 프탈로시아닌 화합물, 디시아노(프탈로시아네이토(-1)코발트(III), US2008/0265216에 기재된 옥소카본-, 슈도옥소카본- 및 라디알렌 화합물, WO2008/138580에 기재된 바와 같은 디시아노(프탈로시아네이토(-1)루테튬(III), 특히  $Mo_3$ , 2-(6-디시아노메틸



[0143] 구체적으로, 특히, 화학식 I의 화합물 및 도편트의 중량을 기준으로 하여 1 내지 20 중량%의 양으로 MoO<sub>3</sub>을 정공 수송/주입 층의 도편트로 사용할 수 있다. 대안적으로, 화학식 I의 화합물 및 도편트의 중량을 기준으로 하여 1 내지 20 중량%의 양의 도편트로서의 2,3,5,6-테트라플루오로-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄 (F<sub>4</sub>-TCNQ)과 화학식 I의 화합물의 혼합물을 사용할 수 있다.

[0144] 본 발명에 따라 사용되는 도편트로 각각의 화학식 I의 화합물 (매트릭스 물질)을 도핑하는 것은 하기 방법 중 하나 또는 그의 조합에 의해 수행될 수 있다: a) 진공 하에 매트릭스 물질을 위한 하나의 공급원 및 도편트를 위한 하나의 공급원과의 혼합된 증발; b) 열처리에 의해 도편트를 후속적으로 내부-화산시키는, 매트릭스 물질 및 도편트의 순차적 침착; c) 열처리에 의해 용매를 후속적으로 증발시키는, 도편트의 용액에 의한 매트릭스 물질 층의 도핑; 및 d) 표면에 적용되는 도편트의 층에 의한 매트릭스 물질 층의 표면상 도핑.

[0145] 정공-주입 층에 사용하기 위한 대안적 물질은 US-A-4,720,432에 기재된 바와 같은 포파린 화합물, US-A-6,208,075에 기재된 바와 같은 플라즈마-침착 플루오로카본 중합체, 및 몇몇 방향족 아민, 예를 들어 m-MTADATA (4,4',4"-트리스[(3-메틸페닐)페닐아미노]트리페닐아민)을 포함한다. 유기 EL 소자에 유용한 것으로 보고된 대안적 정공-주입 물질은 EP0891121 및 EP1029909에 기재되어 있다.

[0146] 정공 수송 층을 위한 대안적 물질로서 예를 들어 하기 방향족 아민 화합물을 사용할 수 있다: 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 (약어: NPB); N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민 (약어 TPD); 4,4',4"-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민 (약어 TDATA); 4,4',4"-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트리페닐아민 (약어 MTADATA); 및 4,4'-비스[N-(스페로-9,9'-비플루오렌-2-일)-N-페닐아미노]비페닐 (약어 : BSPB).

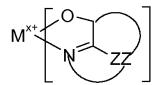
[0147] 형광 발광 물질 및 층 (LEL)

[0148] 인광 물질 이외에, 형광 물질을 비롯한 기타 발광 물질을 OLED 소자에서 사용할 수 있다. 용어 "형광"은 통상적으로 임의의 발광 물질을 설명하는데 사용되지만, 이 경우에는 단일항 여기 상태로부터 발광되는 물질을 지칭한다. 형광 물질은 인광 물질과 동일한 층, 인접한 층, 인접한 화소에서, 또는 임의의 조합에서 사용할 수 있다. 인광 물질의 성능에 부정적인 영향을 미칠 물질을 선택하지 않도록 주의해야 한다. 당업자는 인광 물질과 동일한 층 또는 인접한 층에서의 물질의 삼중선 여기 상태 에너지가 원치않는 켄칭을 막을 수 있도록 적절하게 설정되어야 함을 이해할 것이다. US-A-4,769,292 및 5,935,721에 보다 자세히 기재된 바와 같이, 유기 EL 소자의 발광 층 (LEL)은 전계 발광이 상기 영역에서 전자-정공 쌍 재조합의 결과로서 생성되는 발광

성 형광 또는 인광 물질을 포함한다. 발광 층은 단일 물질로 구성될 수 있으나, 보다 일반적으로는 게스트 방출 물질 또는 물질들로 도핑된 호스트 물질로 이루어지며, 여기서 발광은 주로 방출 물질로부터 야기되며 임의의 색상일 수 있다. 발광 층의 호스트 물질은 하기 정의되는 바와 같은 전자 수송 물질, 상기 정의된 바와 같은 정공 수송 물질, 또는 정공-전자 재조합을 지지하는 또 다른 물질 또는 물질들의 조합일 수 있다. 형광 방출 물질은 통상적으로, 호스트 물질의 0.01 내지 10 중량%로 도입된다. 호스트 및 방출 물질은 비-중합체 소분자 또는 중합체 물질, 예컨대 폴리플루오렌 및 폴리비닐아릴렌 (예를 들어, 폴리(p-페닐렌비닐렌), PPV)일 수 있다. 중합체의 경우, 소분자 방출 물질이 중합체 호스트로 분자적으로 분산될 수 있거나 또는 소수 성분을 호스트 중합체로 공중합시킴으로써 방출 물질이 첨가될 수 있다. 막 형성성, 전기적 특성, 발광 효율성, 수명 또는 제조성을 개선시키기 위해, 호스트 물질을 함께 혼합할 수 있다. 호스트는 우수한 정공 수송 특성을 갖는 물질 및 우수한 전자 수송 특성을 갖는 물질을 포함할 수 있다.

[0149] 유용한 것으로 공지된 호스트 및 방출 물질에는 US-A-4,768,292, 5,141,671, 5,150,006, 5,151,629, 5,405,709, 5,484,922, 5,593,788, 5,645,948, 5,683,823, 5,755,999, 5,928,802, 5,935,720, 5,935,721 및 6,020,078에 개시된 물질이 포함되나, 이에 제한되지 않는다.

[0150] 8-히드록시퀴놀린 및 유사한 유도체의 금속 치체 (화학식 E)는 전계발광을 지지할 수 있는 유용한 호스트 화합물의 한 부류를 구성하고, 이는 500 nm 초과 파장, 예를 들어 녹색, 황색, 오렌지색 및 적색 광 방출에 대해 특히 적합하다.



[0151] 여기서 M은 금속을 나타내고, v는 1 내지 4의 정수이고, ZZ는 독립적으로 각 경우에 둘 이상의 융합된 방향족 고리를 갖는 핵을 완성하는 원자를 나타낸다. 상기로부터, 금속은 1가, 2가, 3가 또는 4가 금속일 수 있음이 명백하다. 금속은 예를 들어, 알칼리 금속, 예컨대 리튬, 나트륨 또는 칼륨; 알칼리 토금속, 예컨대 마그네슘 또는 칼슘; 토금속, 예컨대 알루미늄 또는 갈륨, 또는 전이 금속, 예컨대 아연 또는 지르코늄일 수 있다. 일반적으로, 유용한 키헤이트화 금속인 것으로 공지된 임의의 1가, 2가, 3가 또는 4가 금속을 사용할 수 있다. ZZ는 둘 이상의 융합된 방향족 고리를 함유하고, 그 중 하나 이상이 아졸 또는 아진 고리인 헤테로시클릭 핵을 완성한다. 필요한 경우, 지방족 및 방향족 고리를 비롯한 추가의 고리를 2개의 요망되는 고리와 융합시킬 수 있다. 기능상의 개선 없이 분자 벌크를 증가시키는 것을 피하기 위해, 고리 원자의 수는 일반적으로 18 이하로 유지시킨다.

[0152] 유용한 키헤이트된 옥시노이드 화합물의 예시는 다음과 같다:

CO-1: 알루미늄 트리스옥신 [일명, 트리스(8-퀴놀리놀레이토)알루미늄(III)]

CO-2: 마그네슘 비스옥신 [일명, 비스(8-퀴놀리놀레이토)마그네슘(II)]

CO-3: 비스[벤조{f}-8-퀴놀리놀레이토]아연(II)

CO-4: 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)알루미늄(III)-μ-옥소-비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)알루미늄(III)

CO-5: 인듐 트리스옥신 [일명, 트리스(8-퀴놀리놀레이토)인듐]

CO-6: 알루미늄 트리스(5-메틸옥신) [일명, 트리스(5-메틸-8-퀴놀리놀레이토)알루미늄(III)]

CO-7: 리튬 옥신 [일명, (8-퀴놀리놀레이토)리튬(I)]

CO-8: 갈륨 옥신 [일명, 트리스(8-퀴놀리놀레이토)갈륨(III)]

CO-9: 지르코늄 옥신 [일명, 테트라(8-퀴놀리놀레이토)지르코늄(IV)]

[0162] 유용한 형광 방출 물질은 안트라센, 테트라센, 크산텐, 페릴렌, 루브렌, 쿠마린, 로다민 및 퀴나크리돈의 유도체, 디시아노메틸렌페란 화합물, 티오피란 화합물, 폴리메탄 화합물, 피릴륨과 티아피릴륨 화합물, 플루오렌 유도체, 폐리플란텐 유도체, 인데노페릴렌 유도체, 비스(아지닐)아민 봉소 화합물, 비스(아지닐)메탄 화합물 및 카르보스티릴 화합물을 포함하지만 이에 제한되지는 않는다. 유용한 재료의 예시적 예는 US7,090,930B2에서 기재된 화합물 L1 내지 L52를 포함하지만 이에 제한되지는 않는다.

전자-수송 층 (ETL)

본 발명의 유기 EL 소자의 전자 수송 층의 형성에 사용하기 위한 바람직한 막-형성 물질은 금속 키헤이트된

옥시노이드 화합물, 예컨대 옥신 그 자체의 킬레이트 (또한 8-퀴놀리놀 또는 8-히드록시퀴놀린으로 지칭됨)이다. 이러한 화합물은 전자의 주입 및 수송을 돋고, 두 경우에서 높은 성능 수준을 나타내며, 막의 형성에서 용이하게 제작된다. 고려되는 옥시노이드 화합물의 예는 상기 기재된 화학식 E를 충족시키는 화합물이다.

[0165] 다른 전자 수송 물질에는 US4,356,429에 개시된 바와 같은 다양한 부타디엔 유도체, 및 US4,539,507에 기재된 바와 같은 다양한 헤테로시클릭 광학 중백제가 포함된다. 화학식 G를 충족시키는 벤즈아졸 또한 유용한 전자 수송 물질이다. 트리아진이 또한 전자 수송 물질로서 유용한 것으로 공지되어 있다. 도핑을 사용하여 전도성을 증진시킬 수 있다.  $\text{Alq}_3$ 은 고유 전자 수송 층의 예이다. n-도핑된 전자 수송 층의 예는 US 6,337,102에 개시된 바와 같이 1:1의 몰비로 Li로 도핑된 BPhen이다.

[0166] 유기 층의 침착

[0167] 상기 언급된 유기 물질은 유기 물질의 형태에 적합한 임의의 방식으로 적합하게 침착된다. 소분자의 경우, 열 증발을 통해 편리하게 침착되나, 다른 방식으로, 예컨대 임의적 결합제와 함께 용매로부터 침착시켜 막형 성성을 개선시킬 수 있다. 물질이 가용성이거나 올리고머/중합체 형태인 경우, 스판-코팅, 잉크젯 프린팅과 같은 용액 공정이 일반적으로 바람직하다. 텐드리머 치환기를 사용함으로써 소분자가 용액 공정을 견디는 능력을 증진시킬 수 있다. 패턴화된 침착은 샐도우 마스크, 집적 샐도우 마스크 (US5,294,870), 공여자 시트로 부터의 공간적으로 한정된 열 염료 이동 (US5,688,551, 5,851,709 및 6,066,357) 및 잉크젯 방법 (US6,066,357)을 이용하여 달성할 수 있다.

[0168] 캡슐화

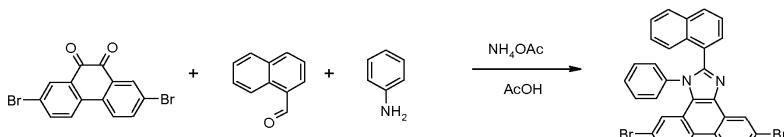
[0169] 대부분의 OLED 소자는 수분 또는 산소 또는 둘 다에 민감하므로, 이들은 통상적으로 질소 또는 아르곤과 같은 불활성 분위기 하에, 알루미나, 보크사이트, 황산칼슘, 점토, 실리카 젤, 제올라이트, 알칼리 금속 산화물, 알칼리 토금속 산화물, 슬레이트 또는 금속 할라이드 및 퍼클로레이트와 같은 건조제와 함께 밀봉한다. 캡슐화 및 건조화 방법에는 US6,226,890에 기재된 방법이 포함되나 이에 제한되지 않는다. 또한,  $\text{SiO}_x$ , 텅플론 및 교대배열된 무기/중합체 층과 같은 장벽 층이 캡슐화용으로 당업계에 공지되어 있다.

[0170] 본 발명의 실시양태에 따라 제작된 소자는 평판 디스플레이, 컴퓨터 모니터, 텔레비전, 게시판, 내부 또는 외부조명 및/또는 신호용 라이트, 완전히 투명한 디스플레이, 플렉서블 디스플레이, 레이저 프린터, 휴대전화, 개인용 휴대정보 단말기 (PDA), 랩탑 컴퓨터, 디지털 카메라, 캠코더, 뷰파인더, 마이크로-디스플레이, 차량, 극장 또는 스타디움 스크린 또는 간판을 비롯한 광범위한 소비 제품에 도입될 수 있다. 다양한 제어 메카니즘을 사용하여 수동 매트릭스 및 능동 매트릭스를 비롯한 본 발명에 따라 제작된 소자를 제어할 수 있다.

[0171] 본 발명의 각종 특성 및 측면을 하기 실시예에서 추가로 설명한다. 이들 실시예는 본 발명의 범주 내에서 어떻게 작업되는지를 당업자에게 보여주기 위해 제시된 것으로서, 본 발명의 범주를 제한하도록 제공된 것은 아니며, 본 발명의 범주는 단지 특허청구범위에서 한정된다. 하기 실시예, 및 다른 부분의 명세서 및 특허청구 범위에서 달리 나타내지 않는 한, 모든 부 및 백분율은 중량 기준이며, 온도는 섭씨 온도이고, 압력은 대기압 또는 대기압 근처이다.

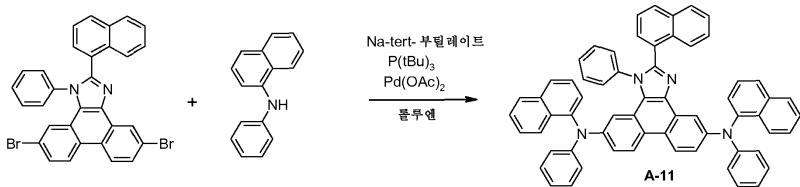
[0172] <실시예>

[0173] 실시예 1



[0174]

[0175] a) 500 ml의 빙초산 중 30.0 g (82.0 mmol)의 2,7-디브로모-페난트렌-9,10-디온, 14.1 g (90.2 mmol)의 1-나프탈렌 카르복스알데히드, 15.3 g (164 mmol)의 아닐린 및 19.0 g (246 mmol)의 아세트산암모늄을 질소 하에 4시간 동안 환류시켰다. 생성물을 여과하고, 빙초산, 물, 탄산수소나트륨 용액 및 물로 세척하고, 이어서 톨루엔 및 메틸 에틸 케톤 중에서 데콕팅시켰다.



[0176]

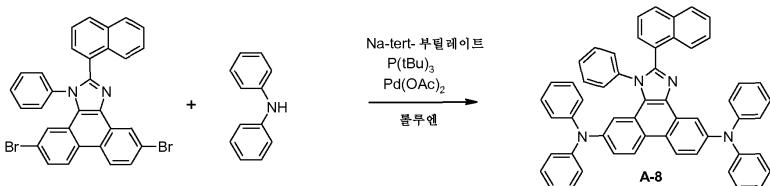
[0177] b) 3.66 g (38.0 mmol)의 나트륨 tert-부틸레이트를 200 ml의 툴루엔 중 10.00 g (17.3 mmol)의 실시예 1a의 생성물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시켰다. 190 mg (0.86 mmol)의 팔라듐(II) 아세테이트를 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시켰다. 350 mg (1.73 mmol)의 트리-tert-부틸포스핀을 첨가하였다. 40 ml의 툴루엔 중 7.96 g (36.3 mmol)의 N-페닐-1-나프탈아민의 탈기된 용액을 첨가하였다. 반응 혼합물을 90°C에서 아르곤 하에 15시간 동안 교반하고, 툴루엔으로 실리카 젤 상에서 여과하였다. 용매를 전공 하에 제거하고 생성물을 디에틸 에테르로부터 결정화시켰다. 생성물은 158°C의 유리 전이 온도를 가졌다.

<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, THF-d<sub>8</sub>, ppm): δ = 8.57 (d, J = 9.2 Hz, 1H), 8.50 (d, J = 9.1 Hz, 1H),

8.41 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 8.08 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.73-7.94 (m, 8H), 6.65-7.53 (m, 30H).

[0178]

실시예 2



[0180]

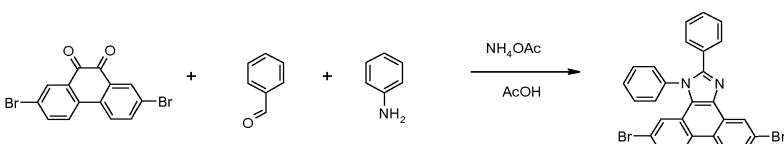
[0181] 실시예 1b와 유사한 방법으로 합성을 수행하였다. 생성물은 334°C의 용점을 가졌다.

<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, THF-d<sub>8</sub>, ppm): δ = 8.48 (d, J = 9.2 Hz, 1H), 8.44 (d, J = 9.1 Hz, 1H),

8.29 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 7.82-7.85 (m, 1H), 7.63-7.68 (m, 2H), 6.77-7.31 (m, 32H).

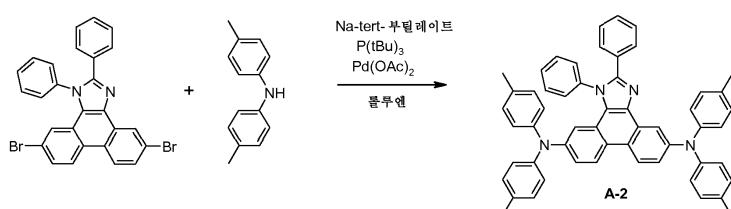
[0182]

실시예 3



[0184]

[0185] 3a) 150 ml의 빙초산 중 10.0 g (82.0 mmol)의 2,7-디브로모-페난트렌-9,10-디온, 3.19 g (30.1 mmol)의 벤즈 알데히드, 5.09 g (54.6 mmol)의 아닐린 및 6.32 g (82.0 mmol)의 아세트산암모늄을 질소 하에 23시간 동안 환류시켰다. 생성물을 여과하고, 빙초산, 물, 탄산수소나트륨 용액 및 물로 세척하고, 이어서 이소프로판올에서 데콕팅시키고 툴루엔으로 실리카 젤 상에서 여과하였다.



[0186]

[0187] 3b) 2.73 g (28.4 mmol)의 나트륨 tert-부틸레이트를 50 ml의 툴루엔 중 5.00 g (9.46 mmol)의 실시예 3a의 생성물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시켰다. 106 mg (0.47 mmol)의 팔라듐(II) 아세테이트를 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시켰다. 툴루엔 중 트리-tert-부틸포스핀의 1M 용액 0.95 ml (0.95 mmol)을 첨가하였다. 5.60 g (28.4 mmol)의 디-p-톨릴-아민의 탈기된 용액을 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤 하에 100°C에서 20시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 60 ml의 1% 시안화나트륨 용액으로 세척하였다. 유기 용매를 전공 하에 제거하였다. 생성물을 에탄올로 데콕팅시키고, 디클로로메탄 중에 용해시키고 에탄올을 첨가하였다. 디클로로메탄을 증류하여 제거하였다. 생성물을 여과하였다 (용점: 239°C).

[0188]  $^1\text{H}$  NMR (300 MHz, THF- $d_8$ , ppm):  $\delta$  = 8.48 (t,  $J$  = 9.6 Hz, 2H), 8.42 (d,  $J$  = 2.4 Hz, 2H), 6.46-7.49 (m, 2H), 7.02-7.33 (m, 22H), 6.81-6.87 (m, 5H), 3.36 (s, 6H), 3.33 (s, 6H).

[0189] 소자 제작 및 적용 실시예

[0190] 소자를 고진공 ( $<10^{-6}$  mbar)에서 열 증발에 의해 제작하였다. 애노드는 이전에 유리 기판 상에 침착된 대략 1200 Å의 산화인듐주석 (ITO)으로 이루어졌다. 캐소드는 1000 Å의 Al로 이루어졌다. 모든 소자는 글로브 박스의 질소 분위기 (<1 ppm의  $\text{H}_2\text{O}$  및  $\text{O}_2$ )에서, 캡슐화 없이, 제조 직후 시험하였다. 사용된 모든 물질은 승화 특성을 가졌다.

[0191] 적용 실시예 1

[0192] 유기 스택은, ITO 표면으로부터, 정공 수송 층으로서 4F-TCNQ와 10:1의 증발률로 함께 증발시킨 화합물 A-11 600 Å, 이어서 전자 차단 층으로서 화합물 A-11 10 Å으로 순차적으로 이루어졌다. 방출 층은 적색 방출체 이리듐(III)비스(2-메틸디벤조[f,h]퀴녹살린) (아세틸아세토네이트) 10%로 도핑된 호스트로서의 화합물 A-11 200 Å, 이어서 정공 차단 층으로서 BA1q (비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)-4-(페닐-페놀레이토)알루미늄-(III) 100 Å, 및 6% Cs로 도핑된 BPhen (4,7 디페닐-1,10-페난트롤린)으로 이루어진 전자 수송 물질 600 Å으로 이루어졌다.

[0193] 적용 실시예 2

[0194] 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 ( $\alpha$ -NPD)를 화합물 A-11 대신에 호스트로서 사용하는 것을 제외하고, 적용 실시예 1과 동일.

[0195] 적용 실시예 3

[0196] 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 ( $\alpha$ -NPD)를 화합물 A-11 대신에 전자 차단 층으로서 사용하는 것을 제외하고, 적용 실시예 2와 동일.

[0197] 적용 실시예 4

[0198] 4F-TCNQ로 도핑된 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 ( $\alpha$ -NPD) (10:1)를 화합물 A-11 대신에 정공 수송 층으로서 사용하는 것을 제외하고, 적용 실시예 1과 동일.

[0199] 적용 실시예 5

[0200] 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 ( $\alpha$ -NPD)을 화합물 A-11 대신에 호스트로서 사용하는 것을 제외하고, 적용 실시예 4와 동일.

[0201] 적용 실시예 6

[0202] 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 ( $\alpha$ -NPD)를 화합물 A-11 대신에 전자 차단 층으로서 사용하는 것을 제외하고, 적용 실시예 4와 동일.

[0203] 비교 적용 실시예 1

[0204] 유기 스택은, ITO 표면으로부터, 정공 수송 층으로서 4F-TCNQ와 10:1 증발률로 함께 증발시킨 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 ( $\alpha$ -NPD) 600 Å, 이어서 전자 차단 층으로서  $\alpha$ -NPD 100 Å으로 순차적으로 이루어졌다. 방출 층은 호스트로서 10%의 적색 방출체 이리듐(III)비스(2-메틸디벤조[f,h]퀴녹살린) (아세틸아세토네이트)로 도핑된  $\alpha$ -NPD 200 Å, 정공 차단 층으로서 BA1q (비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)-4-(페닐-페놀레이토)알루미늄-(III) 100 Å, 및 6% Cs로 도핑된 BPhen (4,7 디페닐-1,10-페난트롤린)으로 이루어진 전자 수송 물질 600 Å으로 이루어졌다.

[0205] 상기와 같이 제조된 소자에 대해 측정된 발광 효율, 개시 전압 ( $@1000 \text{ cd/m}^2$ ) 및 최대 휘도를 하기 표에 보고하였다:

	C.Eff@1000 [cd/m <sup>2</sup> ]	V@1000 [cd/m <sup>2</sup> ]	최대 휘도 [cd/m <sup>2</sup> ]	T <sub>50</sub> (4500 cd/m <sup>2</sup> ) <sup>1)</sup>
적용 실시 예 1	13	2.5	18700	1000
적용 실시 예 2	16	2.8	23300	3300
적용 실시 예 3	16	2.7	21700	2100
적용 실시 예 4	12	2.5	19000	3300
적용 실시 예 5	14	2.8	21000	5000
적용 실시 예 6	16	2.5	20000	1100
비교 적용 실시 예 1	16	3	24500	3000

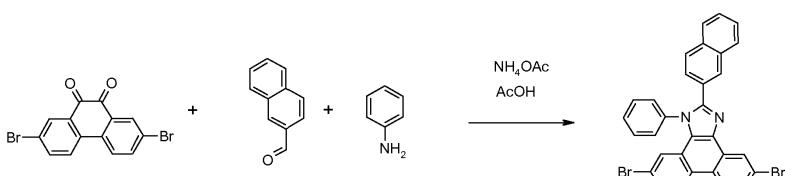
1) 4500 cd/m<sup>2</sup> 의 휘도를 갖는 OLED 소자가 초기 휘도의 50%를 달성하는 시간.

[0206]

소자 구성에 따라, 본 발명의 소자는 보다 낮은 개시 전압을 가졌고, 비교 적용 실시 예 1의 소자와 비교하여 비슷한 발광 효율 및 최대 휘도에서 월등한 수명을 나타낼 수 있었다.

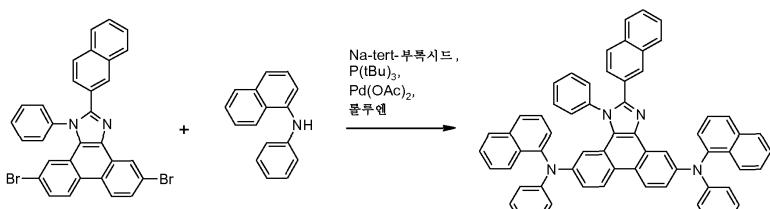
[0208]

실시 예 4



[0209]

a) 80 ml의 빙초산 중 5.0 g (13.6 mmol)의 2,7-디브로모-페난트レン-9,10-디온, 2.35 g (15.0 mmol)의 2-나프탈렌 카르복스알데히드, 2.54 g (27.3 mmol)의 아닐린 및 3.16 g (41.0 mmol)의 아세트산암모늄을 질소 하에 18시간 동안 환류시켰다. 생성물을 여과하고, 빙초산, 물, 탄산수소나트륨 용액 및 물로 세척하고, 이어서 디에틸-에테르 중에서 데콕팅하였다.



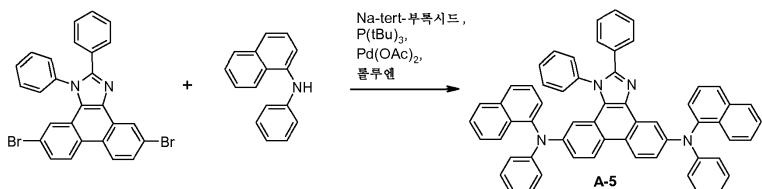
[0211]

b) 1.75 g (18.3 mmol)의 나트륨 tert-부틸레이트를 100 ml의 톨루엔 중 4.80 g (17.3 mmol)의 실시 예 4a의 생성물에 첨가하였다. 3.82 g (17.4 mmol)의 N-페닐-1-나프틸아민을 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시켰다. 93 mg (0.42 mmol)의 팔라듐(II) 아세테이트를 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시켰다. 170 mg (83 mmol)의 트리-tert-부틸포스핀을 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시켰다. 반응 혼합물을 90°C에서 아르곤 하에 21시간 동안 교반하고, 톨루엔으로 실리카 겔 상에서 여과하였다. 용매를 진공 하에 제거하고, 생성물을 디에틸-에테르 중에서 데콕팅하였다. 톨루엔/시클로헥산 1/1로, 이어서 톨루엔/시클로헥산 7/3으로 실리카 겔 상에서 칼럼 크로마토그래피하여 화합물 A-43을 수득하였다 (수율 : 51 %).

<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, THF-d<sub>8</sub>, ppm): δ = 8.52 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 8.49 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 8.42 (d, J = 9.1 Hz, 1H), 8.42 (d, J = 9.1 Hz, 1H), 8.06 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 6.87-7.95 (m, 36H), 6.74 (d, J = 2.3 Hz, 1H).

[0213]

실시 예 5



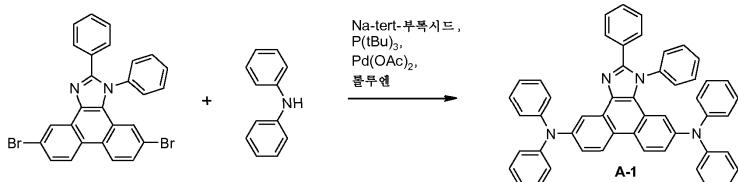
[0215]

화합물 A-5를 실시 예 3a의 생성물 및 N-페닐-1-나프틸아민으로부터 출발하여 출발하여 실시 예 1b와 유사하게

제조하였다. 용점: 290°C.

[0217]  $^1\text{H}$  NMR (300 MHz, THF-d<sub>8</sub>, ppm):  $\delta$  = 8.45-8.48 (m, 2H), 8.41 (d,  $J$  = 9.1 Hz, 1H), 8.05 (d,  $J$  = 8.5 Hz, 1H), 7.91 (t,  $J$  = 8.8 Hz, 2H), 7.76-7.81 (m, 2H), 7.70 (d,  $J$  = 8.5 Hz, 1H), 7.05-7.53 (m, 23H), 6.85-6.94 (m, 7H), 6.68 (d,  $J$  = 2.4 Hz, 1H).

[0218] 실시예 6

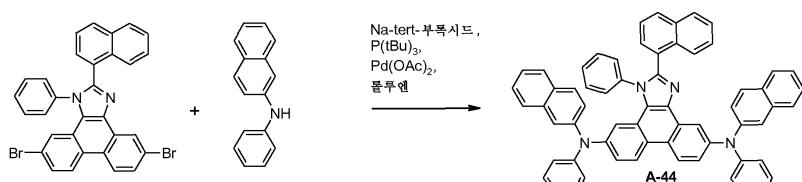


[0219]

[0220] 화합물 A-1을 실시예 3a의 생성물 및 N,N-디페닐아민으로부터 출발하여 실시예 1b와 유사하게 제조하였다. 용점: 277°C.

[0221]  $^1\text{H}$  NMR (300 MHz, THF-d<sub>8</sub>, ppm):  $\delta$  = 8.57 (t,  $J$  = 9.7 Hz, 2H), 8.49 (d,  $J$  = 2.5 Hz, 1H), 7.48-7.52 (m, 2H), 7.15-7.35 (m, 22H), 7.89-7.06 (m, 9H).

[0222] 실시예 6

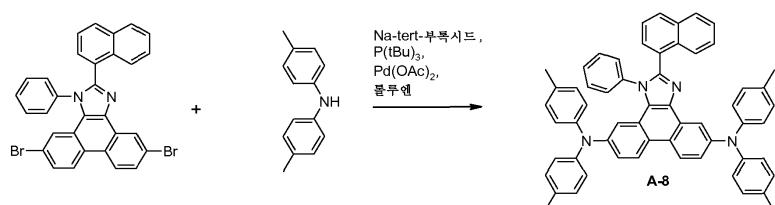


[0223]

[0224] 화합물 A-44를 실시예 1a의 생성물 및 N-페닐-2-나프틸아민으로부터 출발하여 실시예 1b와 유사하게 제조하였다. 용점: 268°C.

[0225]  $^1\text{H}$  NMR (300 MHz, THF-d<sub>8</sub>, ppm):  $\delta$  = 8.63 (d,  $J$  = 9.2 Hz, 1H), 8.59 (d,  $J$  = 9.1 Hz, 1H), 8.45 (d,  $J$  = 2.5 Hz, 1H), 6.88-7.96 (m, 35H), 6.47-6.56 (m, 4H), 7.77-7.82 (m, 2H), 6.80-7.45 (m, 40H).

[0226] 실시예 7



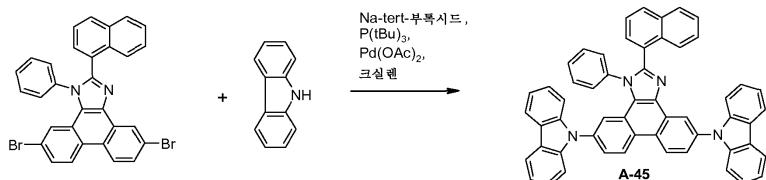
[0227]

[0228] 화합물 A-8을 실시예 1a의 생성물 및 N,N-비스(4-메틸페닐)아민으로부터 출발하여 실시예 1b와 유사하게 제조하였다. 용점: 286°C.

[0229]  $^1\text{H}$  NMR (300 MHz, THF-d<sub>8</sub>, ppm):  $\delta$  = 8.54 (d,  $J$  = 9.2 Hz, 1H), 8.50 (d,  $J$  = 9.2 Hz, 1H), 8.36 (d,  $J$  = 2.5 Hz, 1H), 7.94-7.97 (m, 1H), 7.94-7.97 (m, 2H), 7.77-7.82 (m, 2H), 6.80-7.45 (m, 40H).

[0230]

실시예 8



[0231]

[0232]

화합물 A-45를 실시예 1a의 생성물 및 카르바졸으로부터 출발하여 실시예 1b와 유사하게 제조하였다. 크실렌을 이 반응을 위한 용매로서 사용하였다. 용점: 286°C.

<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, THF-d<sub>6</sub>, ppm): δ = 9.18 (d, J = 2.2 Hz, 1H), 9.09 (d, J= 9.1 Hz, 1H), 9.04 (d, J= 9.0 Hz, 1H), 8.20 (d, J= 7.7 Hz, 2H), 8.14 (d, J= 7.07 Hz, 2H), 7.05-8.06 (m, 27H).

[0233]

[0234]

적용 실시예 7

[0235]

유기 스택은, ITO 표면으로부터, 정공 수송 층으로서 4F-TCNQ와 10:1 증발률로 함께 증발시킨 화합물 NPD 600 Å, 이어서 전자 차단 층으로서 화합물 A-44 100 Å으로 순차적으로 이루어졌다. 방출 층은 호스트로서 10%의 적색 방출체 이리듐(III)비스(2-메틸디벤조[f,h]퀴녹살린) (아세틸아세토네이트)로 도핑된 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 ( $\alpha$ -NPD) 200 Å, 이어서 정공 차단 층으로서 BA1q (비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)-4-(페닐-페놀레이토)알루미늄-(III) 100 Å, 및 6% Cs로 도핑된 BPhen (4,7 디페닐-1,10-페난트롤린)으로 이루어진 전자 수송 물질 600 Å으로 이루어졌다.

[0236]

비교 적용 실시예 2

[0237]

유기 스택은, ITO 표면으로부터, 정공 수송 층으로서 4F-TCNQ와 10:1 증발률로 함께 증발시킨 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 ( $\alpha$ -NPD) 600 Å, 이어서 전자 차단 층으로서  $\alpha$ -NPD 100 Å으로 순차적으로 이루어졌다. 방출 층은 호스트로서 10%의 적색 방출체 이리듐(III)비스(2-메틸디벤조[f,h]퀴녹살린) (아세틸아세토네이트)로 도핑된  $\alpha$ -NPD 200 Å, 이어서 정공 차단 층으로서 BA1q (비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)-4-(페닐-페놀레이토)알루미늄-(III) 100 Å, 및 6% Cs로 도핑된 BPhen (4,7 디페닐-1,10-페난트롤린)으로 이루어진 전자 수송 물질 600 Å으로 이루어졌다.

[0238]

적용 실시예 8

[0239]

4F-TCNQ와 10:1 증발률로 함께 증발시킨 화합물 A-44를 4F-TCNQ와 10:1 증발률로 함께 증발시킨 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 ( $\alpha$ -NPD) 대신에 정공 수송 층으로서 사용하는 것을 제외하고, 비교 실시예 1과 동일.

[0240]

적용 실시예 9

[0241]

유기 스택은, ITO 표면으로부터, 정공 수송 층으로서 4F-TCNQ와 10:1 증발률로 함께 증발시킨 화합물 NPD 600 Å, 이어서 전자 차단 층으로서 화합물 A-2 100 Å으로 순차적으로 이루어졌다. 방출 층은 호스트로서 10%의 적색 방출체 이리듐(III)비스(2-메틸디벤조[f,h]퀴녹살린) (아세틸아세토네이트)로 도핑된 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 ( $\alpha$ -NPD) 200 Å, 이어서 정공 차단 층으로서 BA1q (비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)-4-(페닐-페놀레이토)알루미늄-(III) 100 Å, 및 6% Cs로 도핑된 BPhen (4,7 디페닐-1,10-페난트롤린)으로 이루어진 전자 수송 물질 600 Å으로 이루어졌다.

[0242]

상기와 같이 제조된 소자에 대해 측정된 발광 효율, 개시 전압 (@1000 cd/m<sup>2</sup>) 및 최대 휘도를 하기 표에 보고하였다:

	C.Eff@1000 [cd/m <sup>2</sup> ]	V@1000 [cd/m <sup>2</sup> ]	최대 휘도 /[cd/m <sup>2</sup> ]	T <sub>50</sub> (4500 cd/m <sup>2</sup> ) <sup>1)</sup>
적용 실시예 7	15.1	3.3	20200	1800
적용 실시예 8	15.1	2.6	21000	780
적용 실시예 9	15.2	3.1	23600	2100
비교 적용 실시예 2	15.6	2.7	21900	840

<sup>1)</sup> 4500 cd/m<sup>2</sup> 의 휘도를 갖는 OLED 소자가 초기 휘도의 50%를 달성하는 시간.

[0243]

소자 구성에 따라, 본 발명의 소자는 보다 낮은 전압을 가졌고, 비교 적용 실시예 2의 소자와 비교하여 비슷한 발광 효율 및 최대 휘도에서 월등한 수명을 나타낼 수 있었다.

专利名称(译)	标题 : 菲蒽化合物作为电致发光器件的空穴传输材料		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020120052936A</a>	公开(公告)日	2012-05-24
申请号	KR1020127001305	申请日	2010-06-11
[标]申请(专利权)人(译)	UDC爱尔兰有限公司		
申请(专利权)人(译)	玉 , DC爱尔兰有限公司		
[标]发明人	SCHILDKNECHT CHRISTIAN 슈일트크네흐트크리스티안 LENNARTZ CHRISTIAN 렌나르츠크리스티안 WATANABE SOICHI 와타나베소이치 WAGENBLAST GERHARD 바겐블라스트게르하르트 MURER PETER 무레페터 SCHAEFER THOMAS 슈아페토마스 CHEBOTAREVA NATALIA 체보타레바나탈리아 RICCI ANDREA 리치안드레아 BARDON KRISTINA 바르돈크리스티나		
发明人	슈일트크네흐트,크리스티안 렌나르츠,크리스티안 와타나베,소이치 바겐블라스트,게르하르트 무레,페터 슈아페,토마스 체보타레바,나탈리아 리치,안드레아 바르돈,크리스티나		
IPC分类号	C09K11/06 H05B33/22 C07D235/02 C07D403/14 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 H05B33/22 C07D235/02 C07D403/14 H01L51/0061 H01L51/0072 H01L51/0081 H01L51/5052 H01L51/5096 Y10S428/917 H01L51/5056 H01L51/5048		
优先权	2009163085 2009-06-18 EP		
其他公开文献	KR101761223B1		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

**摘要(译)**

本发明涉及包含下列化学式I的化合物作为空穴传输/注入和/或电子阻挡层的组分的电致发光器件。或者化学式I的化合物与掺杂剂独立地组装;并且可以提供电致发光器件的改进效率 , 以及驱动电压和/或寿命。 003c # 化学式I003e # imntagRe @

