

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2017-0076436 (43) 공개일자 2017년07월04일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) <i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>C07D 209/82</i> (2006.01) <i>C07D 403/10</i> (2006.01) <i>C07D 403/14</i> (2006.01) <i>H01L 51/00</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01) (52) CPC특허분류 <i>C09K 11/06</i> (2013.01) <i>C07D 209/82</i> (2013.01) (21) 출원번호 10-2015-0186698 (22) 출원일자 2015년12월24일 심사청구일자 없음		(71) 출원인 에스케이케미칼주식회사 경기도 성남시 분당구 판교로 310 (삼평동) (72) 발명자 이송 서울특별시 강남구 광평로47길 17 신동아아파트 708동 1202호 박정호 경기도 성남시 분당구 동판교로 275 풍성신미주 아파트 121동 504호 (뒷면에 계속) (74) 대리인 이수열

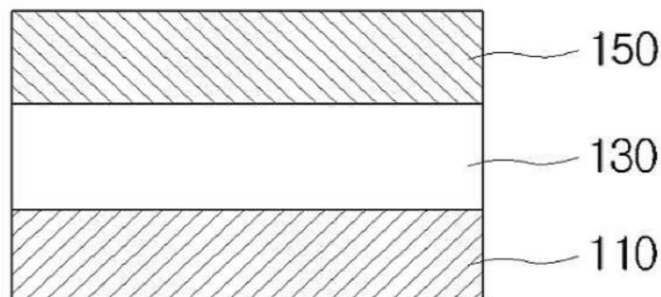
전체 청구항 수 : 총 9 항

(54) 발명의 명칭 **유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자**

(57) 요약

본 발명은 유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다. 이에 의하여 인광발광재료의 색순도 및 발광효율을 향상 시킬 수 있는 발광층의 호스트로서 사용할 수 있는 유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자를 제공할 수 있다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 403/10 (2013.01)

C07D 403/14 (2013.01)

H01L 51/0067 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

C09K 2211/1059 (2013.01)

(72) 발명자

전석운

경기도 수원시 팔달구 정자천로32번길 27 꽃피버들
마을금강아파트 151-2305

강주식

경기도 화성시 동탄반석로 232 신일유토빌아파트
131-2403

신용준

서울특별시 서대문구 수색로 100 DMC 레미안 이편
한세상 114동 2503호

장유미

경기도 광주시 송정로 69 나산아파트 102동 1504호

양남철

서울특별시 서초구 바우피로 91 우성아파트
110-507

박재균

서울특별시 관악구 인현12길 46-1 은천아파트 202
동 306호

채희일

경기도 수원시 팔달구 권광로348번길 17-6 하이빌
109동 201호

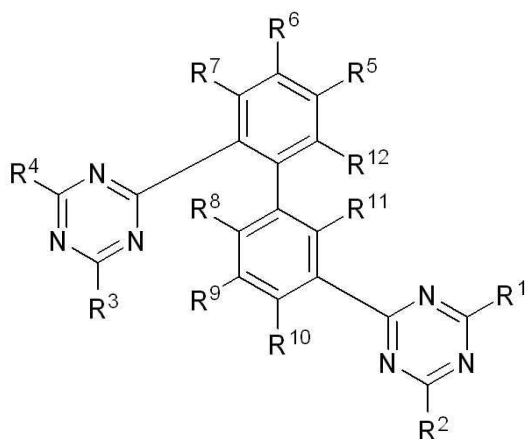
명세서

청구범위

청구항 1

하기 구조식 1로 표시되는 유기전계발광소자용 화합물.

[구조식 1]



구조식 1에서,

R¹ 내지 R⁴는 서로 같거나 다르고, R¹ 내지 R⁴는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

R⁵ 내지 R¹⁰은 서로 같거나 다르고, R⁵ 내지 R¹⁰은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

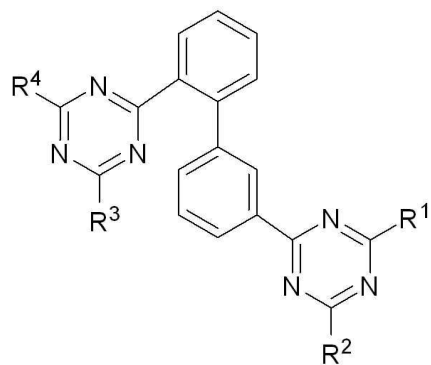
R¹¹ 및 R¹²는 서로 같거나 다르고, R¹¹ 및 R¹²는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 R¹¹ 및 R¹²는 서로 화학 결합되고 그들 사이의 네 개의 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C5 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C4 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C5 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C4 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 2로 표시되고,

[구조식 2]



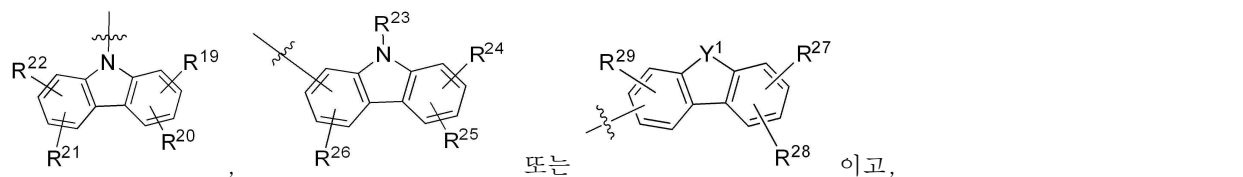
구조식 2에서,

R^1 내지 R^4 는 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

청구항 3

제2항에 있어서,

R^1 내지 R^4 는 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로



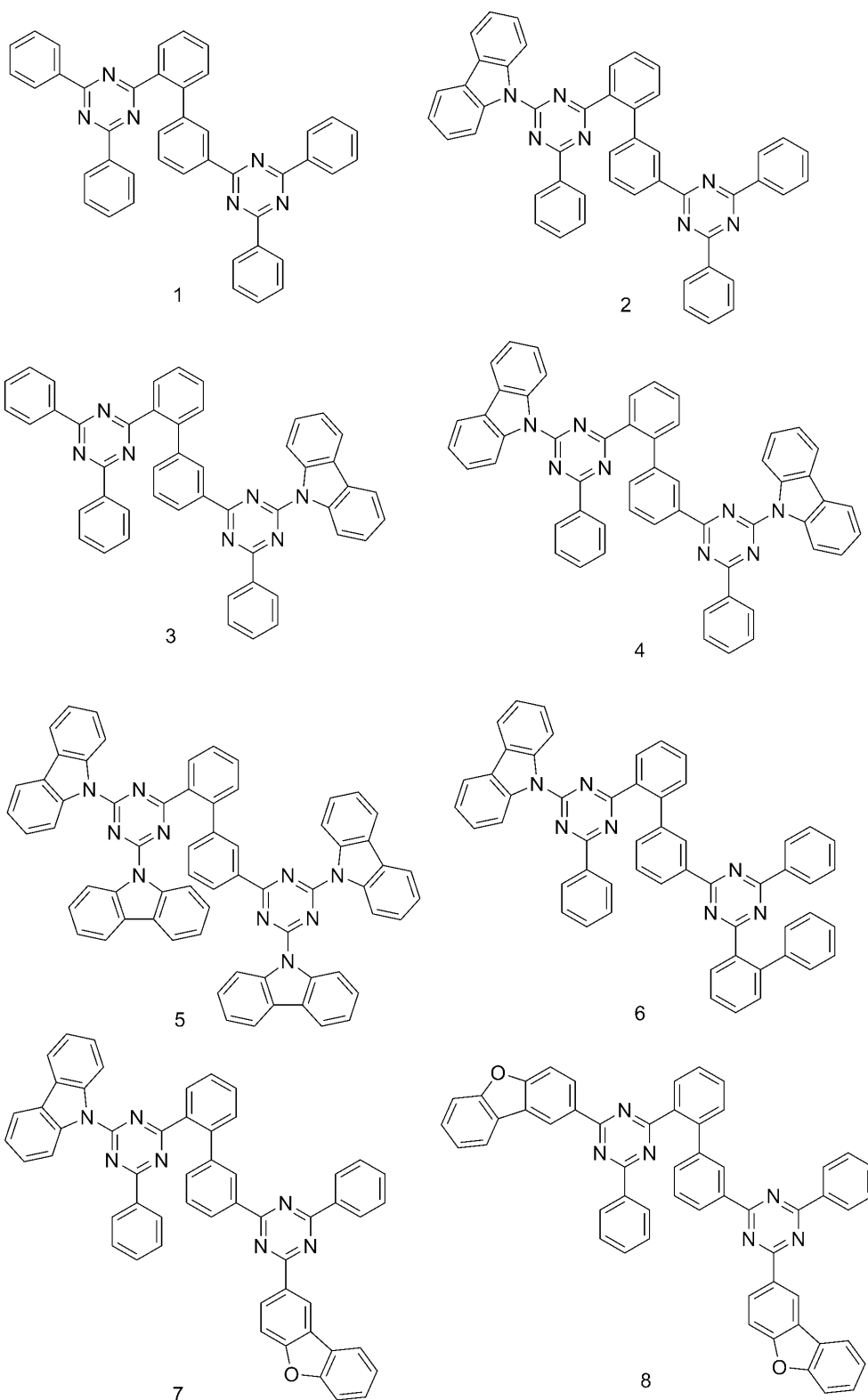
Y^1 은 황원자 또는 산소원자이고,

R^{13} 내지 R^{29} 는 서로 같거나 다르고, R^{13} 내지 R^{29} 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 화학식으로 표시되는 화합물 1 내지 8 중에서 선택된 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.



청구항 5

제1항에 따른 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계발광소자.

청구항 6

제1전극, 제2전극 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 단수 또는 복수의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자에 있어서,

상기 단수 또는 복수의 유기물층 중에서 선택된 1종 이상의 유기물층은 제1항에 따른 유기전계발광소자용 화합

물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 7

제6항에 있어서,

상기 단수 또는 복수의 유기물층은 발광층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 8

제6항에 있어서,

상기 복수의 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 복수의 유기물층은 전자주입층, 전자수송층, 정공차단층, 전자차단층, 정공수송층 및 정공주입층 중에서 선택된 1종 이상을 추가로 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 9

제7항에 있어서,

상기 발광층은 호스트와 도펀트를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 유기전계발광소자의 발광효율을 향상시킬 수 있는 유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기전계발광소자는 기존 액정 표시 장치(LCD), 플라즈마 디스플레이 패널(PDP) 그리고 전계 방출 디스플레이(FED)등의 타 평판 표시 소자에 비해 구조가 간단하고, 제조 공정상 다양한 장점이 있으며 높은 휘도 및 시야각 특성이 우수하며, 응답속도가 빠르고 구동전압이 낮아 벽걸이 TV등의 평판 디스플레이 또는 디스플레이의 배면광, 조명, 광고판 등의 광원으로 사용되도록 활발하게 개발이 진행되고 있다.

[0003] 유기전계발광소자는 일반적으로 직류 전압을 인가하였을 때 양극으로부터 주입된 정공과 음극으로부터 주입된 전자가 재결합하여 전자-정공 쌍인 엑시톤을 형성하며 이 엑시톤이 안정한 바닥 상태로 돌아오면서 그에 해당하는 에너지를 발광 재료에 전달함에 의해 빛으로 변환된다.

[0004] 유기전계발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위해 이스트만 코닥사의 탕(C. W. Tang) 등에 의해 두 개의 반대 전극 사이에 적층형 유기물 박막을 구성하여 저전압 구동 유기전계발광소자가 보고(C. W. Tang, S. A. Vanslyke, Applied Physics Letters, 51권 913페이지, 1987년)된 이래, 다층 박막 구조형 유기전계발광소자용 유기 재료에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. 이러한 적층형 유기전계발광소자의 효율과 수명은 박막을 구성하는 재료의 분자구조와 관련이 깊다. 예컨대, 박막을 구성하는 재료 중 발광재료, 정공수송층 물질, 또는 전자수송층 물질 등의 구조에 따라 양자효율이 크게 영향을 받으며, 열안정성이 떨어질 경우 고온 또는 구동온도에서 재료의 결정화가 이루어져 소자의 수명을 단축시키는 원인이 되고 있다.

[0005] 특히 상기 유기전계발광소자의 박막 구성 재료 중 크게 호스트물질과 발광물질(도펀트)로 나눌 수 있는 발광재료의 경우, 발광 기작에 따라 형광과 인광으로 구별되는데, 인광 발광재료를 사용하는 경우 기존의 물질보다 높은 효율과 색순도, 그리고 장수명을 만족시킬 수 있는 인광 호스트 물질이 필요한 실정이다.

발명의 내용

해결하려는 과제

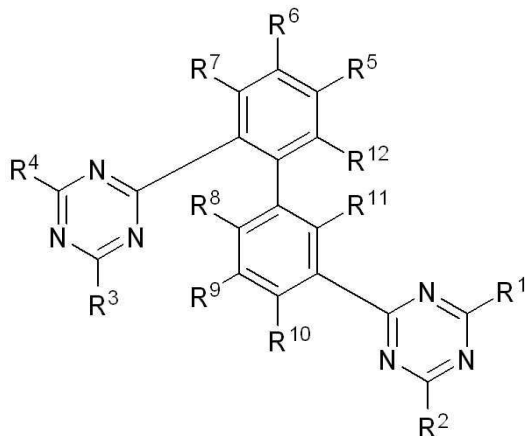
[0006] 본 발명은 전기적 안정성이 우수하며, 고효율과 높은 색순도 및 장수명을 구현할 수 있고, 순청 발광을 보이며, 호스트로서 인광 발광층에 사용될 수 있는 유기발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공할

수 있다.

과제의 해결 수단

본 발명의 하나의 측면에 따르면, 하기 구조식 1로 표시되는 유기전계발광소자용 화합물이 제공될 수 있다.

[구조식 1]



구조식 1에서,

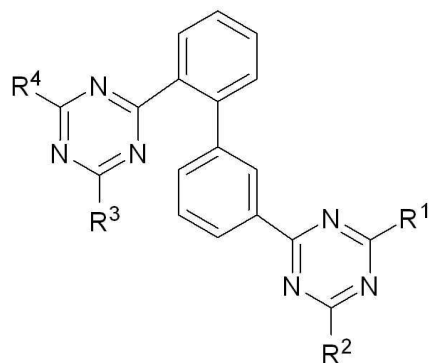
R^1 내지 R^4 는 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

R^5 내지 R^{10} 은 서로 같거나 다르고, R^5 내지 R^{10} 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

R^{11} 및 R^{12} 는 서로 같거나 다르고, R^{11} 및 R^{12} 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 R^{11} 및 R^{12} 는 서로 화학 결합되고 그들 사이의 네 개의 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C5 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C4 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C5 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C4 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있다.

바람직하게는, 상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 2로 표시되고,

[구조식 2]



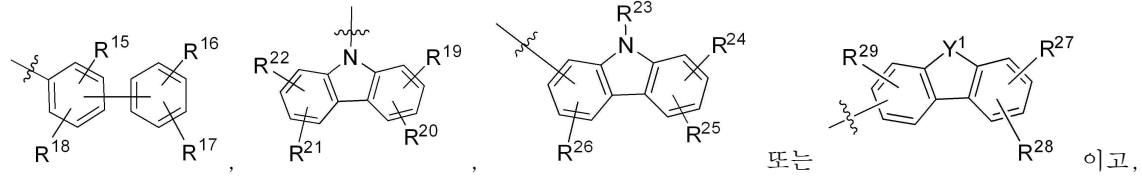
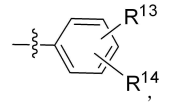
구조식 2에서,

R^1 내지 R^4 는 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는

치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0019]

더욱 바람직하게는, R^1 내지 R^4 는 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로



[0020]

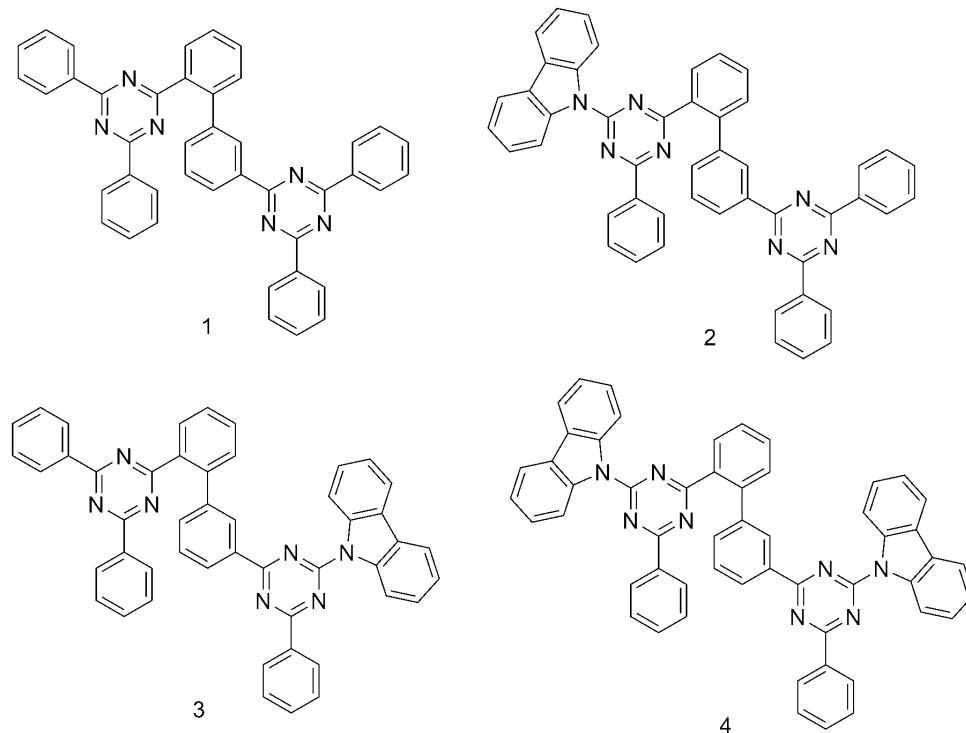
Y^1 은 황원자 또는 산소원자이고,

[0021]

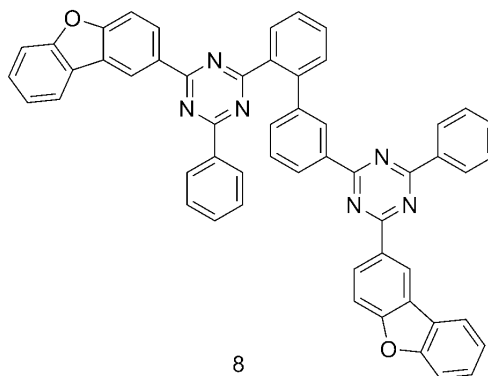
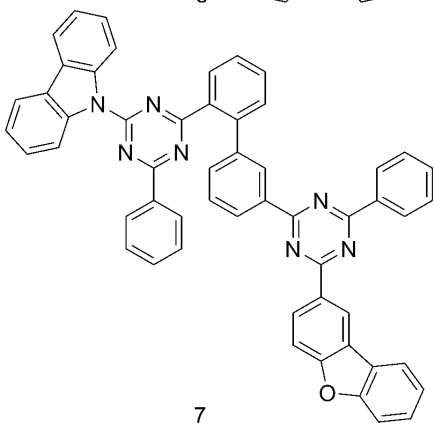
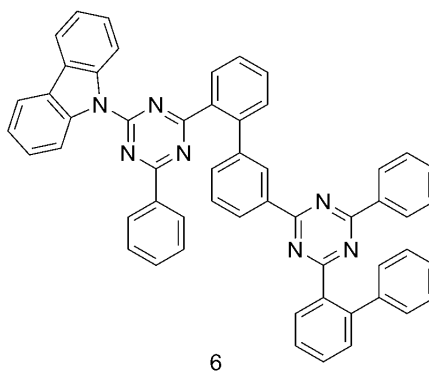
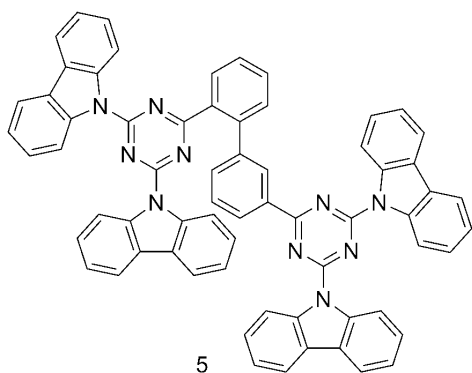
R^{13} 내지 R^{29} 는 서로 같거나 다르고, R^{13} 내지 R^{29} 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0022]

상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 화학식으로 표시되는 화합물 1 내지 8 중에서 선택된 어느 하나일 수 있으나, 여기에 한정되지 않는다.



[0023]



[0024]

[0025]

본 발명의 다른 측면에 따르면, 상기 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계발광소자가 제공될 수 있다.

[0026]

본 발명의 또 다른 측면에 따르면, 제1전극, 제2전극 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 단수 또는 복수의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자에 있어서, 상기 단수 또는 복수의 유기물층 중에서 선택된 1종 이상의 유기물층은 상기 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자가 제공될 수 있다.

[0027]

상기 단수 또는 복수의 유기물층은 발광층을 포함할 수 있다.

[0028]

상기 복수의 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 복수의 유기물층은 전자주입층, 전자수송층, 정공차단층, 전자차단층, 정공수송층 및 정공주입층 중에서 선택된 1종 이상을 추가로 포함할 수 있다.

[0029]

상기 발광층은 호스트와 도펀트를 포함할 수 있다.

발명의 효과

[0030]

본 발명은 안정성이 우수하며, 인광발광재료의 색순도 및 발광효율, 수명을 크게 향상시킬 수 있고, 호스트로서 순청 발광을 보이는 발광층에 사용될 수 있는 유기전계발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0031]

도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 단면을 나타낸 단면도이다.

도 2는 본 발명의 다른 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 단면을 나타낸 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

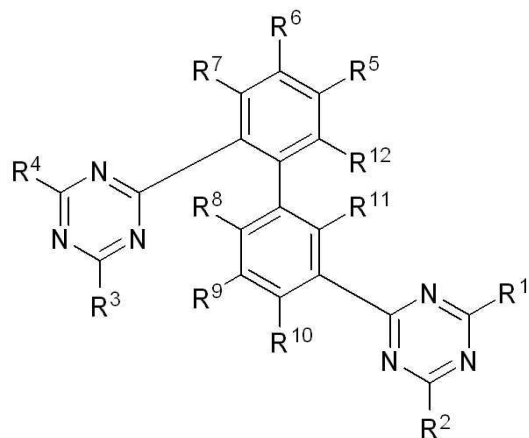
[0032]

본 발명은 다양한 변환을 가할 수 있고 여러 가지 실시예를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 예시하고 상세한 설명에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 실시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변환, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 본 발명을 설명함에 있어서 관련된 공지 기술에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우 그 상세한 설명을 생략한다.

- [0033] 또한, 이하에서 사용될 제1, 제2 등과 같이 서수를 포함하는 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되지는 않는다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다.
- [0034] 또한, 어떤 구성요소가 다른 구성요소 상에 "형성되어" 있다거나 "적층되어" 있다고 언급된 때에는, 그 다른 구성요소의 표면 상의 전면 또는 일면에 직접 부착되어 형성되어 있거나 적층되어 있을 수도 있지만, 중간에 다른 구성요소가 더 존재할 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.
- [0035] 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 출원에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.
- [0037] 본 명세서에서 "원자가결합"이란 별도의 정의가 없는 한, 단일결합, 이중결합 또는 삼중결합을 의미한다.
- [0038] 상기 "치환된"이란 적어도 하나의 수소원자가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C1 내지 C30 할로겐화알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C30 알콕시기, C2 내지 C30 알케닐기, C2 내지 C30 알키닐기, C6 내지 C30 아릴옥시기, 실릴옥시기($\text{OSiR}^1\text{R}^2\text{R}^3$: R^1 , R^2 , 및 R^3 는 각각 독립적으로 수소원자, C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), C1 내지 C30 아실기, C2 내지 C30 아실옥시기, C2 내지 C30 헤테로아릴옥시기, C1 내지 C30 술폰닐기, C1 내지 C30 알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, C1 내지 C30 헤테로시클로티올기, C1 내지 C30 인산아마이드기, 실릴기($\text{SiR}^1\text{R}^2\text{R}^3$: R^1 , R^2 , 및 R^3 는 각각 독립적으로 수소원자, C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), 아민기- NRR' (여기에서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소 원자, C1 내지 C30 알킬기, 및 C6 내지 C30 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기임), 카르복실기, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아조기, 및 하이드록시기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환된 것을 의미한다.
- [0039] 또한 상기 치환기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수도 있다.
- [0040] 또한, 상기 "치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기" 또는 "치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기" 등에서의 상기 알킬기 또는 아릴기의 탄소수 범위는 상기 치환기가 치환된 부분을 고려하지 않고 비치환된 것으로 보았을 때의 알킬 부분 또는 아릴 부분을 구성하는 전체 탄소수를 의미하는 것이다. 예컨대, 파라 위치에 부틸기가 치환된 페닐기는 탄소수 4의 부틸기로 치환된 탄소수 6의 아릴기에 해당하는 것을 의미한다.
- [0041] 또한, 상기 "치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 융합된 아릴기" 등에서 상기 융합된 아릴기의 탄소수 범위는 상기 치환기가 치환된 부분을 고려하지 않고 비치환된 것으로 보았을 때 융합되어 부가적으로 새롭게 형성된 아릴 부분을 구성하는 전체 탄소수를 의미하는 것이다.
- [0042] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.
- [0043] 본 명세서에서 "이들의 조합"이란 별도의 정의가 없는 한, 둘 이상의 치환기가 연결기로 결합되어 있거나, 둘 이상의 치환기가 축합하여 결합되어 있는 것을 의미한다.
- [0044] 본 명세서에서 "수소"란 별도의 정의가 없는 한, 일중수소, 이중수소, 또는 삼중수소를 의미한다.
- [0045] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기", "알케닐(alkenyl)기" 또는 "알키닐(alkynyl)기"란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다.
- [0046] 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.
- [0047] "알케닐(alkenyl)기"는 적어도 두 개의 탄소원자가 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합으로 이루어진 작용기를 의미하며, "알키닐(alkynyl)기"는 적어도 두 개의 탄소원자가 적어도 하나의 탄소-탄소 삼중 결합으로 이루어진 작용기를 의미한다.
- [0048] "알케닐렌(alkenylene)기"는 상기 알케닐기의 말단 탄소에 결합된 수소 중 어느 하나가 원자가 결합으로 치환된 작용기를 의미하고, "알키닐렌(alkynylene)기"는 상기 알키닐기의 말단 탄소에 결합된 수소 중 어느 하나가 원

자가 결합으로 치환된 작용기를 의미한다.

- [0049] 포화이든 불포화이든 간에 알킬기, 알케닐기, 또는 알키닐기는 분지형, 직쇄형 또는 환형일 수 있다.
- [0050] 알킬기는 C1 내지 C30 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 C1 내지 C20 알킬기, C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다.
- [0051] 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자, 즉, 알킬쇄는 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.
- [0052] 구체적인 예를 들어 상기 알킬기는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.
- [0053] "아민기"는 아미노기, 아릴아민기, 알킬아민기, 아릴알킬아민기, 또는 알킬아릴아민기를 포함하고, -NRR'로 표현될 수 있고, 여기에서 R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소 원자, C1 내지 C30 알킬기, 및 C6 내지 C30 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기이다.
- [0054] "시클로알킬(cycloalkyl)기"는 모노시클릭 또는 융합고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나뉘 가지는 고리) 작용기를 포함한다.
- [0055] "헤테로시클로알킬(heterocycloalkyl)기"는 시클로알킬기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로시클로알킬기가 융합된 고리(fused ring)인 경우, 융합된 고리 중 적어도 하나의 고리가 상기 헤테로 원자를 1 내지 4개 포함할 수 있다.
- [0056] "방향족(aromatic)기"는 고리 형태인 작용기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 작용기를 의미한다. 구체적인 예로 아릴기와 헤테로아릴기가 있다.
- [0057] "아릴(aryl)기"는 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나뉘 가지는 고리) 작용기를 포함한다.
- [0058] "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로아릴기가 융합된 고리(fused ring)인 경우, 융합된 고리 중 적어도 하나의 고리가 상기 헤테로 원자를 1 내지 4개 포함할 수 있다.
- [0059] 아릴기 및 헤테로아릴기에서 고리의 원자수는 탄소수 및 비탄소원자수의 합이다.
- [0060] "알킬아릴기" 또는 "아릴알킬기"와 같이 조합하여 사용할 때, 상기에 든 각각의 알킬 및 아릴의 용어는 상기 나타낸 의미와 내용을 가진다.
- [0061] "아릴알킬기"이란 용어는 벤질과 같은 아릴 치환된 알킬 라디칼을 의미하며 알킬기에 포함된다.
- [0062] "알킬아릴기"이란 용어는 알킬 치환된 아릴 라디칼을 의미하며 아릴기에 포함된다.
- [0064] 이하, 본 발명의 실시예를 첨부도면을 참조하여 설명하기로 하며, 첨부 도면을 참조하여 설명함에 있어, 동일하거나 대응하는 구성 요소는 동일한 도면번호를 부여하고 이에 대한 중복되는 설명은 생략하기로 한다.
- [0065] 본 발명의 하나의 측면에 따르면, 하기 구조식 1로 표시되는 유기전계발광소자용 화합물이 제공될 수 있다.
- [0066] [구조식 1]



[0067]

[0068]

구조식 1에서,

[0069]

R^1 내지 R^4 는 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0070]

R^5 내지 R^{10} 은 서로 같거나 다르고, R^5 내지 R^{10} 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0071]

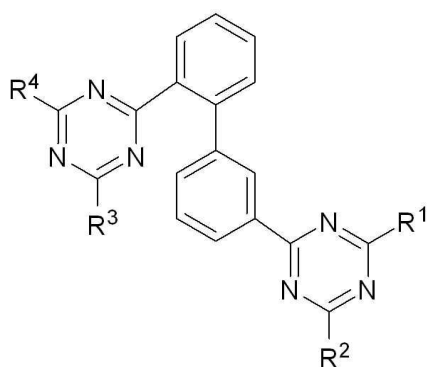
R^{11} 및 R^{12} 는 서로 같거나 다르고, R^{11} 및 R^{12} 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 R^{11} 및 R^{12} 는 서로 화학 결합되고 그들 사이의 네 개의 탄소원자와 함께 치환 또는 비치환된 융합된 C5 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C4 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C5 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C4 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있다.

[0072]

바람직하게는, 상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 2로 표시되고,

[0073]

[구조식 2]



[0074]

[0075]

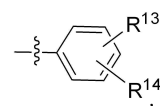
구조식 2에서,

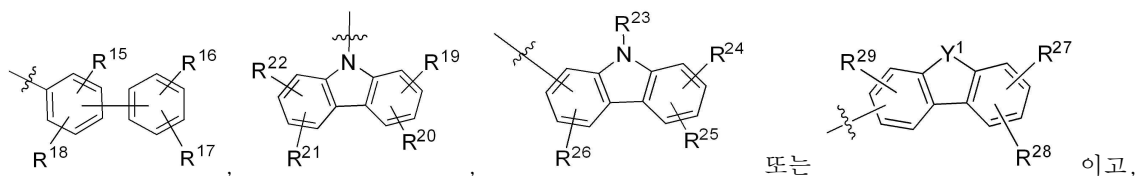
[0076]

R^1 내지 R^4 는 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0077]

더욱 바람직하게는, R^1 내지 R^4 는 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로



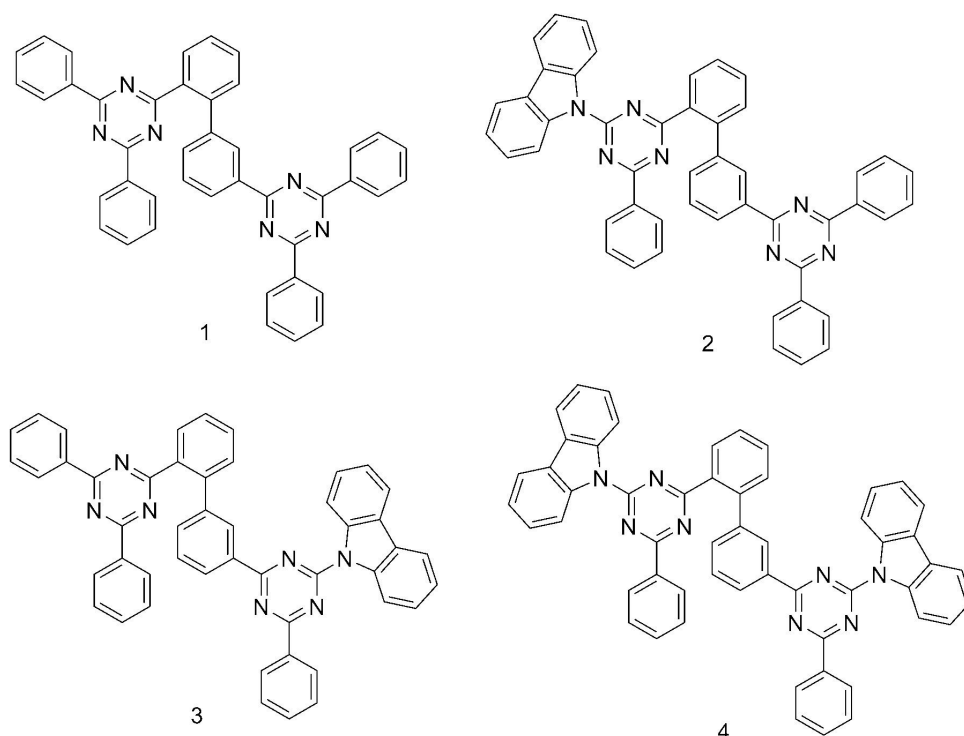


[0078] Y^1 은 황원자 또는 산소원자이고,

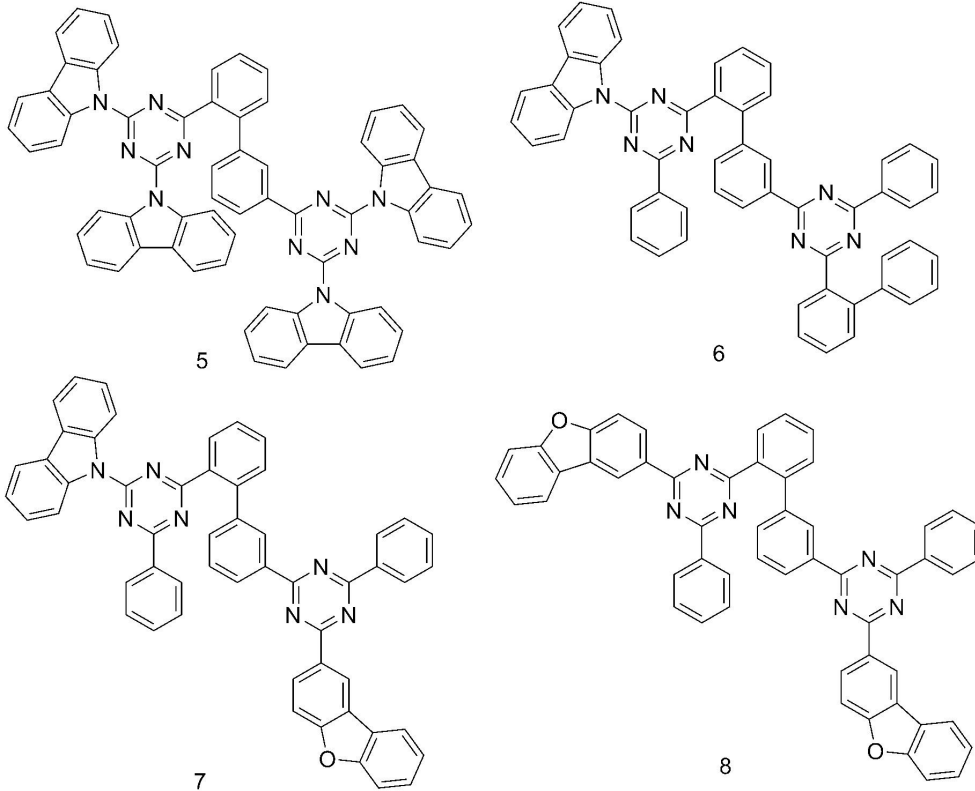
[0079] R^{13} 내지 R^{29} 는 서로 같거나 다르고, R^{13} 내지 R^{29} 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0080] 상기 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기의 예는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 이미다조[1,2-a]피리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤지이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인다졸릴기, 치환 또는 비치환된 페노티아지닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 테트라졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사다리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 싸이아트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 퓨리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프피리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 이미다조[1,2-a]피리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤지이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인다졸릴기, 치환 또는 비치환된 페노티아지닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조싸이오페닐기일 수 있다.

[0081] 상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 화학식으로 표시되는 화합물 1 내지 8 중에서 선택된 어느 하나일 수 있으나, 여기에 한정되지 않는다.



[0082]



[0083]

[0084]

도 1 및 2를 참고하면, 본 발명의 실시예에 따른 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계발광소자(1)가 제공될 수 있다.

[0085]

본 발명의 다른 실시예에 따르면, 상기 유기전계발광소자는 제1전극(110); 제2전극(150); 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 단수 또는 복수의 유기물층(130)을 포함하며, 상기 단수 또는 복수의 유기물층(130) 중에서 선택된 1종 이상의 유기물층은 본 발명에 따른 유기발광소자용 화합물을 포함할 수 있다.

[0086]

여기서, 상기 단수 또는 복수의 유기물층(130)은 발광층(134)을 포함할 수 있다.

[0087]

또한 상기 복수의 유기물층(130)은 발광층(134)을 포함하고, 상기 복수의 유기물층은 전자주입층(131), 전자수송층(132), 정공차단층(133), 전자차단층(135), 정공수송층(136) 및 정공주입층(137) 중에서 선택된 1종 이상을 추가로 포함할 수 있다.

[0088]

상기 발광층(134)은 호스트와 도펀트를 포함할 수 있다.

[0089]

상기 유기전계발광소자는 바람직하게는 투명기관에 의하여 지지된다. 투명기관의 재료로는 양호한 기계적 강도, 열안정성 및 투명성을 갖는 한 특별한 제한은 없다. 구체적인 예를 들면, 유리, 투명 플라스틱 필름 등을 사용할 수 있다.

[0090]

본 발명의 유기전계발광소자의 양극재료로서는 4eV 이상의 일함수를 갖는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 또는 이의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적으로는 금속인 Au 또는 CuI, ITO(인듐 주석 산화물), SnO₂ 및 ZnO와 같은 투명 전도성 재료를 들 수 있다. 양극 필름의 두께는 10 내지 200nm 가 바람직하다.

[0091]

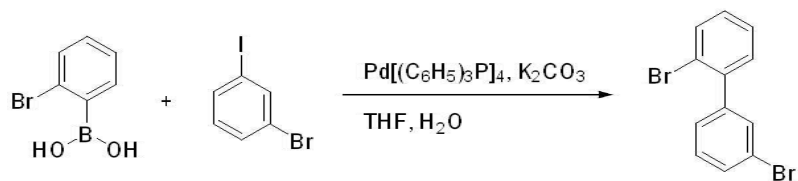
본 발명의 유기전계발광소자의 음극 재료로서는 4eV 미만의 일함수를 갖는 금속, 합금, 전기 전도성 화합물 또는 이의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적으로는, Na, Na-K 합금, 칼슘, 마그네슘, 리튬, 리튬 합금, 인듐, 알루미늄, 마그네슘 합금, 알루미늄 합금을 들 수 있다. 이외에, 알루미늄/AlO₂, 알루미늄/리튬, 마그네슘/은 또는 마그네슘/인듐 등도 사용될 수 있다. 음극필름의 두께는 10 내지 200nm 가 바람직하다.

[0092]

유기 EL 소자의 발광효율을 높이기 위해서는 하나 이상의 전극은 바람직하게는 10% 이상의 광투과율을 가지는 것이 바람직하다. 전극의 쉬트저항은 바람직하게는 수백 Ω/mm 이하이다. 전극의 두께는 10nm 내지 1 μm , 보다 바람직하게는 10 내지 400nm 이다. 이러한 전극은 화학적 기상증착(CVD), 물리적 기상증착(PVD) 등의 기상증착법 또는 스퍼터링법을 통하여 상기한 전극 재료를 박막으로 형성하여 제조할 수 있다.

- [0093] 또한 본 발명의 목적에 적합하게 본 발명의 유기전계발광소자용 화합물이 사용될 때, 공지된 정공수송 물질, 정공주입 물질, 발광층 물질, 발광층의 호스트 물질, 전자수송 물질, 및 전자주입 물질이 상기 각각의 유기물층에서 단독으로 사용되거나 또는 본 발명의 유기전계발광소자용 화합물과 선택적으로 병행하여 사용될 수 있다.
- [0094] 정공 수송 물질로서 N,N-dicarbazolyl-3,5-benzene(mCP), poly(3,4-ethylenedioxythiophene):polystyrenesulfonate (PEDOT:PSS), N, N' -di(1-naphthyl)-N,N' -diphenylbenzidine(NPD), N,N'-디페닐-N,N'-디(3-메틸페닐)-4,4'-디아미노비페닐(TPD), N,N'-디페닐-N,N'-디나프틸-4,4'-디아미노비페닐, N,N,N',N'-테트라-p-톨릴-4,4'-디아미노비페닐, N,N,N',N'-테트라페닐-4,4'-디아미노비페닐, 코퍼(II)1,10,15,20-테트라페닐-21H,23H-포피린 등과 같은 포피린(porphyrin)화합물 유도체, 주쇄 또는 측쇄내에 방향족 3차아민을 갖는 중합체, 1,1-비스(4-디-p-톨릴아미노페닐)시클로헥산, N,N,N-트리(p-톨릴)아민, 4, 4', 4'-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트리페닐아민과 같은 트리아릴아민 유도체, N-페닐카르바졸 및 폴리비닐카르바졸과 같은 카르바졸 유도체, 무금속 프탈로시아닌, 구리프탈로시아닌과 같은 프탈로시아닌 유도체, 스타버스트 아민 유도체, 엔아민스티벤계 유도체, 방향족 삼급아민과 스티릴 아민 화합물의 유도체, 및 폴리실란 등을 들 수 있다.
- [0095] 전자 수송 물질로서 diphenylphosphine oxide-4-(triphenylsilyl)phenyl (TSP01), Alq₃, 2,5-디아릴 실롤 유도체(PyPySPyPy), 퍼플루오리네이티드 화합물(PF-6P), Octasubstituted cyclooctatetraene 화합물(COTs)을 들 수 있다.
- [0096] 본 발명의 유기전계발광소자에 있어서, 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 수송층 및 정공 주입층은 상기한 화합물의 하나 이상의 종류를 함유하는 단일 층으로 형성되거나, 또는 상호 적층된, 상이한 종류의 화합물을 함유하는 복수의 층으로 구성될 수 있다.
- [0097] 발광재료로서 예를 들면 촉광 형광재료, 형광증백제, 레이저 색소, 유기 신틸레이터 및 형광 분석용 시약을 들 수 있다. 구체적으로는, 카바졸계 화합물, 포스핀옥사이드계 화합물, 카바졸계 포스핀옥사이드 화합물, bis((3,5-difluoro-4-cyanophenyl)pyridine) iridium picolinate(FCNIrpic), tris(8-hydroxyquinoline) aluminum(Alq₃), 안트라센, 페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 코로넨, 루브렌 및 퀴나크리돈과 같은 폴리아로마틱 화합물, 쿼터페닐과 같은 올리고페닐렌 화합물, 1,4-비스(2-메틸스티릴)벤젠, 1,4-비스(4-메틸스티릴)벤젠, 1,4-비스(4-메틸-5-페닐-2-옥사졸릴)벤젠, 1,4-비스(5-페닐-2-옥사졸릴)벤젠, 2,5-비스(5-t-부틸-2-벤즈옥사졸릴)사이오펜, 1,4-디페닐-1,3-부타디엔, 1,6-디페닐-1,3,5-헥사트리엔, 1,1,4,4-테트라페닐-1,3-부타디엔과 같은 액체신틸레이션용 신틸레이터, 옥신 유도체의 금속착체, 쿠마린 색소, 디시아노메틸렌피란 색소, 디시아노메틸렌사이오피란 색소, 폴리메틴 색소, 옥소벤즈안트라센 색소, 크산텐 색소, 카르보스티릴 색소, 페릴렌 색소, 옥사진 화합물, 스티벤 유도체, 스피로 화합물, 옥사디아졸 화합물 등을 들 수 있다.
- [0098] 본 발명의 유기 EL 소자를 구성하는 각 층은 진공 증착, 스핀 코팅 또는 캐스팅과 같은 공지된 방법을 통하여 박막으로 형성시키거나, 각 층에서 사용되는 재료를 이용하여 제조할 수 있다. 이들 각층의 막두께에 대해서는 특별한 제한은 없으며, 재료의 특성에 따라 알맞게 선택할 수 있으나, 보통 2nm 내지 5,000nm의 범위에서 결정될 수 있다.
- [0099] 본 발명의 따른 유기전계발광소자용 화합물은 진공 증착법에 의하여 형성될 수 있으므로, 박막 형성 공정이 간편하고, 핀홀(pin hole)이 거의 없는 균질한 박막으로 용이하게 얻을 수 있는 장점이 있다.
- [0100]
- [0101] [실시예]
- [0102] 이하, 실시예를 통하여 본 발명에 따른 유기전계발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자의 제조 방법을 더욱 구체적으로 설명한다. 그러나 이는 예시를 위한 것으로서 이에 의하여 본 발명의 범위가 한정되는 것이 아니다.
- [0103]

[0104] 제조예 1: 중간체(1) 2,3'-디브로모-1,1'-비페닐의 합성

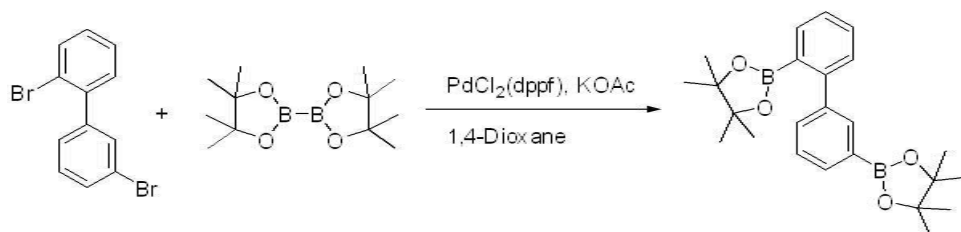


[0105]

[0106] 질소 분위기 하의 1000ml 둥근바닥 3구 플라스크에 3-브로모아이오도벤젠 20.0g, 2-브로모페닐보로닉산 14.2g, 탄산칼륨 29.3g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 4.1g 및 테트라하이드로퓨란 540ml, 물 135ml를 넣고 60℃로 4시간 교반 및 환류시켜주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. n-헥산 용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(1)을 16.8g 얻었다. (수율 76%)

[0107] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 312

[0109] 제조예 2: 중간체(2) 2,2'-([1,1'-비페닐]-2,3'-디일)비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보레인)의 합성

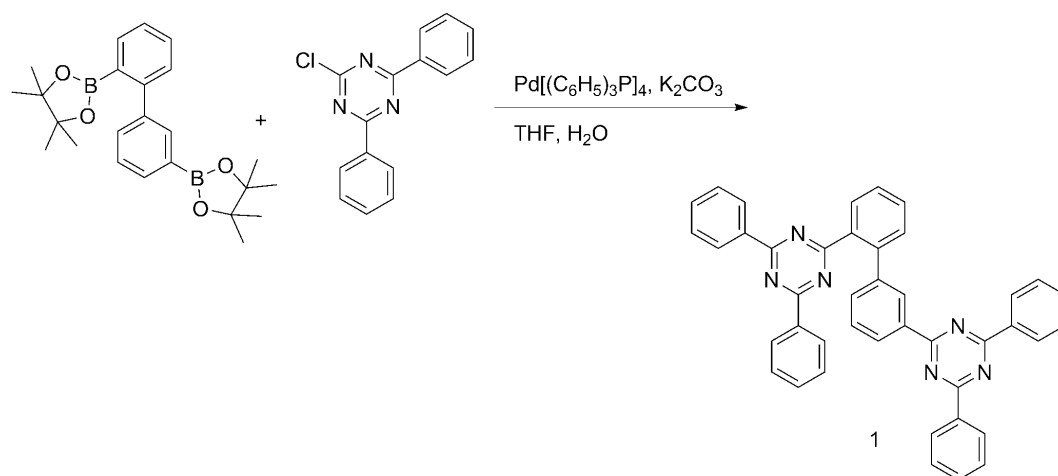


[0110]

[0111] 질소 분위기 하의 500ml 둥근바닥 3구 플라스크에 제조예 1에서 합성한 중간체(1) 16.8g, 비스(피나콜라토)디보론 30.1g, 아세트산칼륨 26.4g, [1,1'-비스(디페닐포스포노)페로센]디클로로팔라듐(II) 2.0g, 및 1,4-디옥산 250ml를 넣고 온도를 95로 유지시켜주며 20시간 동안 교반시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 에틸아세테이트와 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(2)를 11.3g 얻었다. (수율 52%)

[0112] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 406

[0114] 실시예 1: 화합물(1)의 합성



[0115]

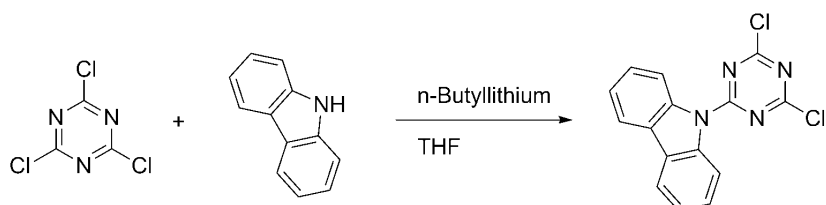
[0116] 질소 분위기 하의 500ml 둥근바닥 3구 플라스크에 제조예 2에서 제조한 중간체(2) 5.0g, 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 7.3g, 탄산칼륨 5.1g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.7g 및 테트라하이드로퓨란 140ml, 물 35ml를 넣고 60℃로 4시간 교반 및 환류시켜주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하고, 농

축된 용액을 디클로로메탄과 시클로헥산으로 재결정하여 화합물(1)을 5.1g 얻었다. (수율 67%)

[0117] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 616

[0118] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 9.32 (d, 2H), 9.17 (s, 1H), 9.03 (d, 1H), 8.86 (d, 1H), 8.69 (d, 1H), 8.44 (d, 1H), 8.25 (d, 2H), 8.11-7.98 (m, 4H), 7.81 (d, 1H), 7.69-7.50 (m, 4H), 7.46-7.30 (m, 6H), 7.27 (t, 4H)

[0120] 제조예 3: 중간체(3) 9-(4,6-디클로로-1,3,5-트리아지닐)-9H-카바졸의 합성

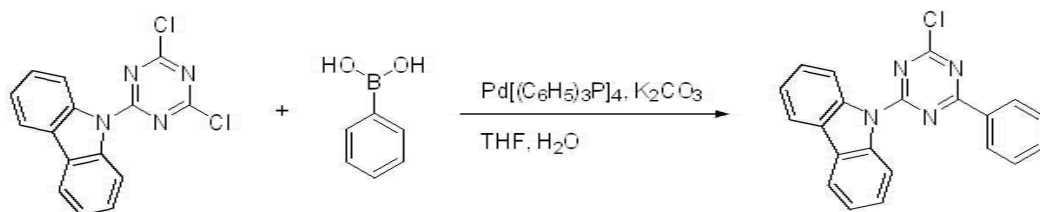


[0121]

[0122] 질소 분위기 하의 500ml 둥근바닥 3구 플라스크에 카바졸 20.0g, 무수테트라히드로푸란 130ml를 넣고 교반하여 녹였다. 반응액의 온도를 0℃로 떨어뜨린 후, n-butyllithium(2.5M) 47.8ml를 천천히 적가하였다. 적가 후 반응액을 실온으로 승온시키고 30분간 교반했다. 질소 분위기 하의 500ml 둥근바닥 3구 플라스크에 염화시아누르 21.0g, 무수테트라히드로푸란 130ml를 넣고 교반하여 녹였다. 카바졸 반응액을 염화시아누르 반응액에 천천히 적가한 후 실온에서 1시간 이상 교반하였다. 반응액에 증류수를 부어 30분 이상 교반한 후, 반응액을 여과하였다. 걸러진 고체를 아세톤으로 세척하여 중간체(3)을 24.3g 얻었다. (수율 68%)

[0123] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 315

[0125] 제조예 4: 중간체(4) 9-(4-클로로-6-페닐-1,3,5-트리아지닐)-9H-카바졸의 합성

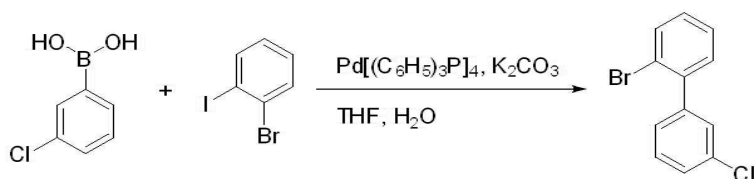


[0126]

[0127] 질소 분위기 하의 1000ml 둥근바닥 3구 플라스크에 제조예 3에서 제조한 중간체(3) 20.0g, 탄산칼륨 26.3g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 3.7 g 및 테트라하이드로푸란 300ml, 물 115ml를 넣고 교반하며 60℃로 승온시켰다. 페닐보로닉산 7.7g을 테트라하이드로푸란 160ml에 녹여 적가한 후 4시간 교반 및 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하고, 농축된 용액을 톨루엔과 메탄올로 재결정하여 중간체(4)를 7.8g 얻었다. (수율 34%)

[0128] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 356

[0130] 제조예 5: 중간체(5) 2-브로모-3'-클로로-1,1'-비페닐의 합성

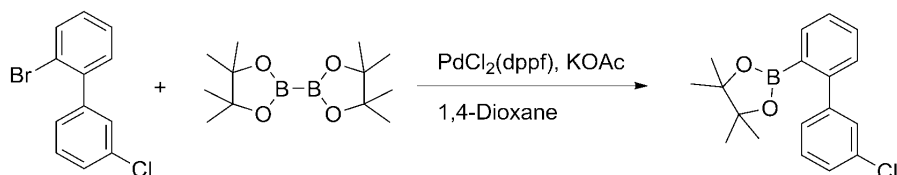


[0131]

[0132] 질소 분위기 하의 2000ml 둥근바닥 3구 플라스크에 3-클로로페닐보로닉산 20.0g, 1-브로모-2-아이오도벤젠 36.2g, 탄산칼륨 53.0g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 7.4g 및 테트라하이드로퓨란 900ml, 물 200ml를 넣고 60℃로 4시간 교반 및 환류시켜주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. n-헥산 용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(5)를 26.3g 얻었다. (수율 77%)

[0133] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 267

[0135] 제조예 6: 중간체(6) 2-(3'-클로로-[1,1'-비페닐])-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로레인의 합성

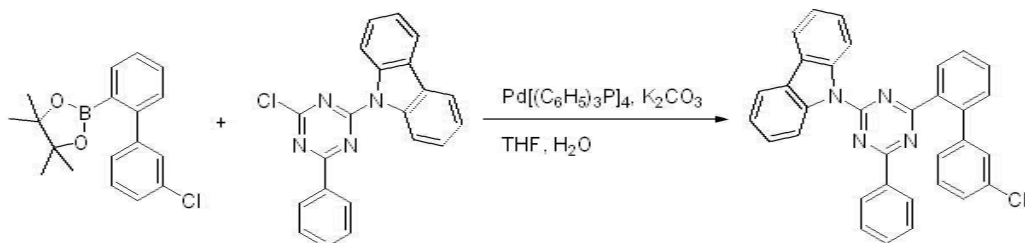


[0136]

[0137] 질소 분위기 하의 500ml 둥근바닥 3구 플라스크에 제조예 5에서 합성한 중간체(5) 26.3g, 비스(피나콜라토)디보론 25.0g, 아세트산칼륨 48.2g, [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐(II) 3.6g, 및 1,4-디옥산 340ml를 넣고 온도를 95로 유지시켜주며 20시간 동안 교반시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 에틸아세테이트와 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(6)을 17.8g 얻었다. (수율 58%)

[0138] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 314

[0140] 제조예 7: 중간체(7) 9-(4-(3'-클로로-[1,1'-비페닐])-6-페닐-1,3,5-트리아지닐)-9H-카바졸의 합성

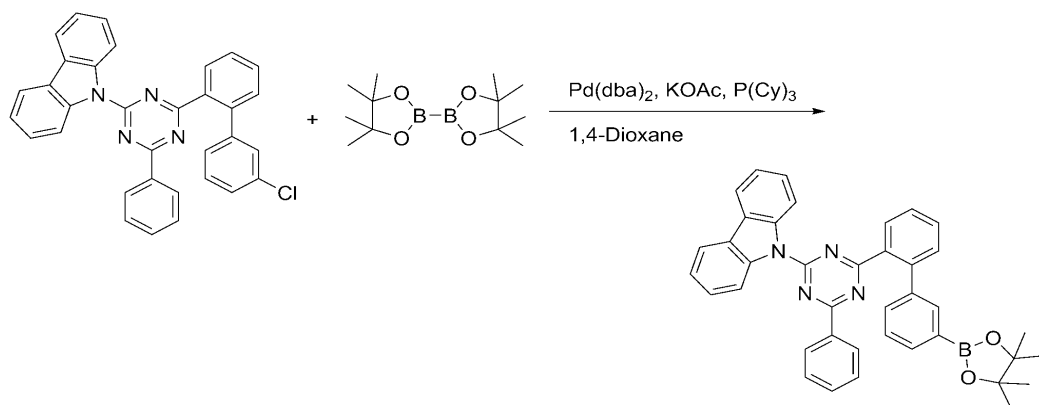


[0141]

[0142] 질소 분위기 하의 500ml 둥근바닥 3구 플라스크에 제조예 6에서 합성한 중간체(6) 10.0g, 제조예 4에서 합성한 중간체(4) 11.3g, 탄산칼륨 13.2g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 1.8g 및 테트라하이드로퓨란 290ml, 물 70ml를 넣고 60℃로 4시간 교반 및 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(7)을 8.5g 얻었다. (수율 53%)

[0143] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 509

[0145] 제조예 8: 중간체(8) 9-(4-페닐-6-(3'-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로라닐)-[1,1'-비페닐])-1,3,5-트리아지닐)-9H-카바졸의 합성



[0146]

[0147]

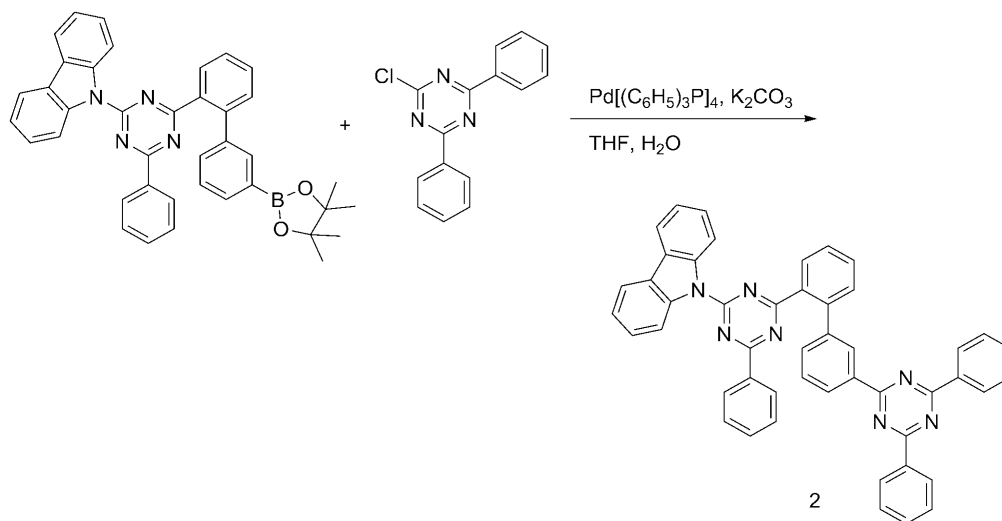
질소 분위기 하의 1000ml 둥근바닥 3구 플라스크에 제조예 7에서 합성한 중간체(7) 8.5g, 비스(피나콜라토)디보론 5.1g, 아세트산칼륨 3.3g, 비스(디벤질리덴아세톤)팔라듐(0) 0.5g, 트리시클로헥실포스핀 0.7g 및 1,4-디옥산 200ml를 넣고 온도를 95로 유지시켜주며 20시간 동안 교반시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(8)을 5.9g 얻었다. (수율 59%)

[0148]

MS (ESI) : $[M+H]^+$ 600

[0150]

실시예 2: 화합물(2)의 합성



[0151]

[0152]

질소 분위기 하의 250ml 둥근바닥 3구 플라스크에 제조예 8에서 제조한 중간체(8) 5.0g, 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 2.2g, 탄산칼륨 3.5g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.5g 및 테트라하이드로퓨란 90ml, 물 25ml를 넣고 60℃로 4시간 교반 및 환류시켜주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하고, 농축된 용액을 디클로로메탄과 시클로헥산으로 재결정하여 화합물(2)를 3.7g 얻었다. (수율 63%)

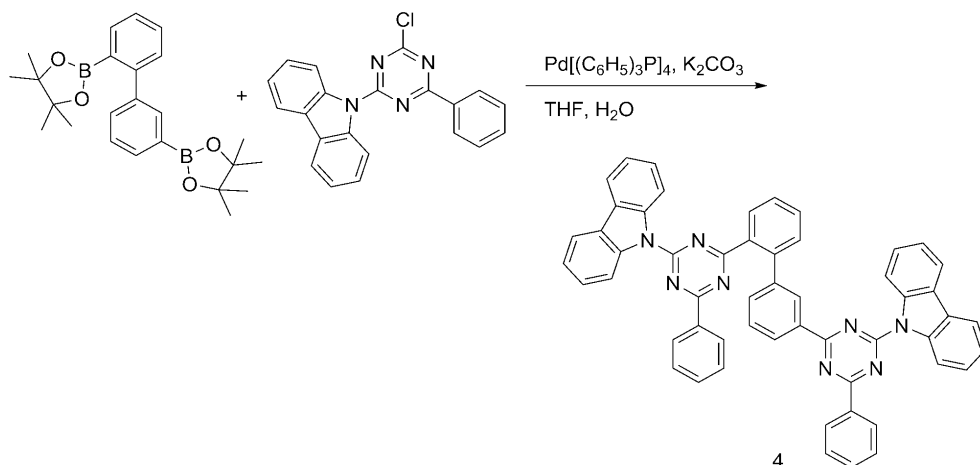
[0153]

MS (ESI) : $[M+H]^+$ 705

[0154]

^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 9.10 (d, 2H), 9.04 (s, 1H), 8.93 (d, 1H), 8.81 (d, 1H), 8.72 (d, 1H), 8.59 (d, 2H), 8.44 (d, 1H), 8.28 (d, 2H), 8.17-7.98 (m, 2H), 7.86 (t, 1H), 7.75 (d, 1H), 7.67-7.59 (m, 6H), 7.50-7.38 (m, 8H), 7.32 (t, 2H)

[0156] 실시예 3: 화합물(4)의 합성



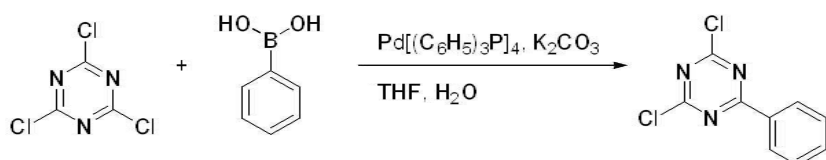
[0157]

[0158] 질소 분위기 하의 250ml 둥근바닥 3구 플라스크에 제조예 2에서 제조한 중간체(2) 3.5g, 제조예 4에서 제조한 중간체(4) 7.1g, 탄산칼륨 3.6g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.5g 및 테트라하이드로퓨란 145ml, 물 35ml를 넣고 60℃로 4시간 교반 및 환류시켜주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하고, 농축된 용액을 디클로로메탄과 시클로헥산으로 재결정하여 화합물(4)를 3.4g 얻었다. (수율 50%)

[0159] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 794

[0160] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 9.06 (d, 2H), 8.90 (s, 1H), 8.76 (d, 2H), 8.63 (d, 2H), 8.54 (d, 1H), 8.37 (d, 1H), 8.31 (d, 2H), 8.03 (d, 2H), 7.93 (d, 2H), 7.78-7.75 (m, 2H), 7.69 (t, 1H), 7.66 (d, 1H), 7.55-7.51 (m, 5H), 7.43-7.35 (m, 8H), 7.29 (t, 2H)

[0162] 제조예 9: 중간체(9) 2,4-디클로로-6-페닐-1,3,5-트리아진의 합성

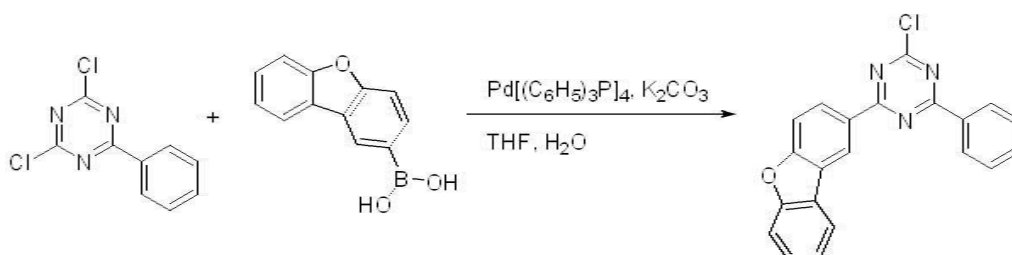


[0163]

[0164] 질소 분위기 하의 2000ml 둥근바닥 3구 플라스크에 염화시아누르 20.0g, 페닐보로닉산 13.2g, 탄산칼륨 45.0g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 6.3g 및 테트라하이드로퓨란 680ml, 물 170ml를 넣고 60℃로 4시간 교반 및 환류시켜주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(9)를 19.0g 얻었다. (수율 77%)

[0165] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 226

[0167] 제조예 10: 중간체(10) 2-클로로-4-(2-디벤조퓨라닐)-6-페닐-1,3,5-트리아진의 합성

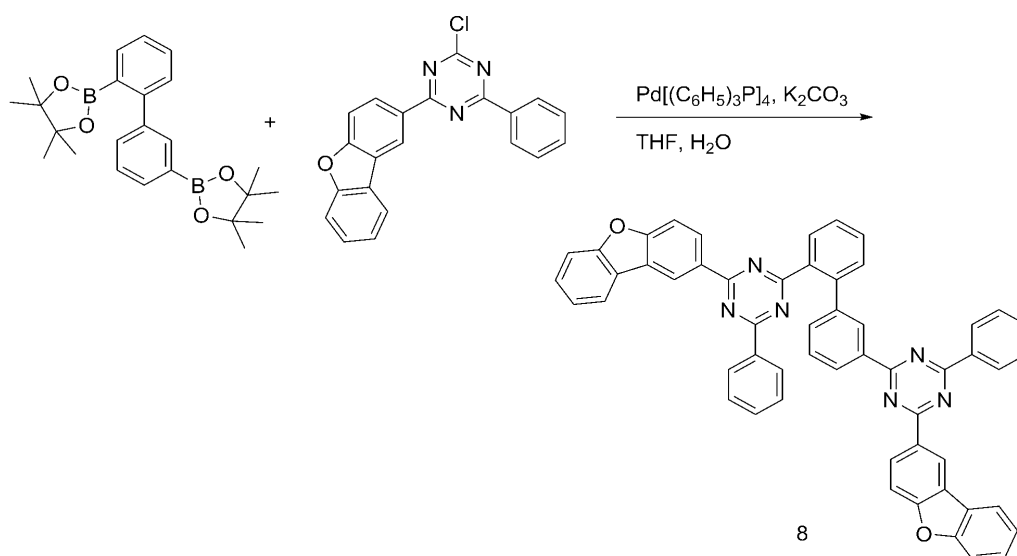


[0168]

[0169] 질소 분위기 하의 1000ml 둥근바닥 3구 플라스크에 제조예 9에서 합성한 중간체(9) 19.0g, 탄산칼륨 34.8g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 4.9g 및 테트라하이드로퓨란 450ml, 물 150ml를 넣고 교반하며 60℃로 승온시켰다. 2-디벤조플라닐보로닉산 17.8g을 테트라하이드로퓨란 150ml에 녹여 적가한 후 4시간 교반 및 환류시켜주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(10)을 15.8g 얻었다. (수율 53%)

[0170] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 357

[0172] 실시예 4: 화합물(8)의 합성



[0173]

[0174] 질소 분위기 하의 250ml 둥근바닥 3구 플라스크에 제조예 2에서 제조한 중간체(2) 3.0g, 제조예 10에서 제조한 중간체(10) 6.1g, 탄산칼륨 6.1g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.4g 및 테트라하이드로퓨란 120ml, 물 30ml를 넣고 60℃로 4시간 교반 및 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하고, 농축된 용액을 디클로로메탄과 시클로헥산으로 재결정하여 화합물(8)을 2.8g 얻었다. (수율 48%)

[0175] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 796

[0176] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 8.98 (d, 2H), 8.73 (d, 2H), 8.51 (d, 2H), 8.36 (d, 1H), 8.25 (d, 1H), 8.17 (d, 2H), 8.11 (d, 2H), 8.04 (d, 2H), 7.93-7.87 (m, 2H), 7.76 (t, 1H), 7.70-7.58 (m, 5H), 7.49-7.34 (m, 8H), 7.30 (t, 2H)

[0178] 소자실시예 1: 화합물 (1)을 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조

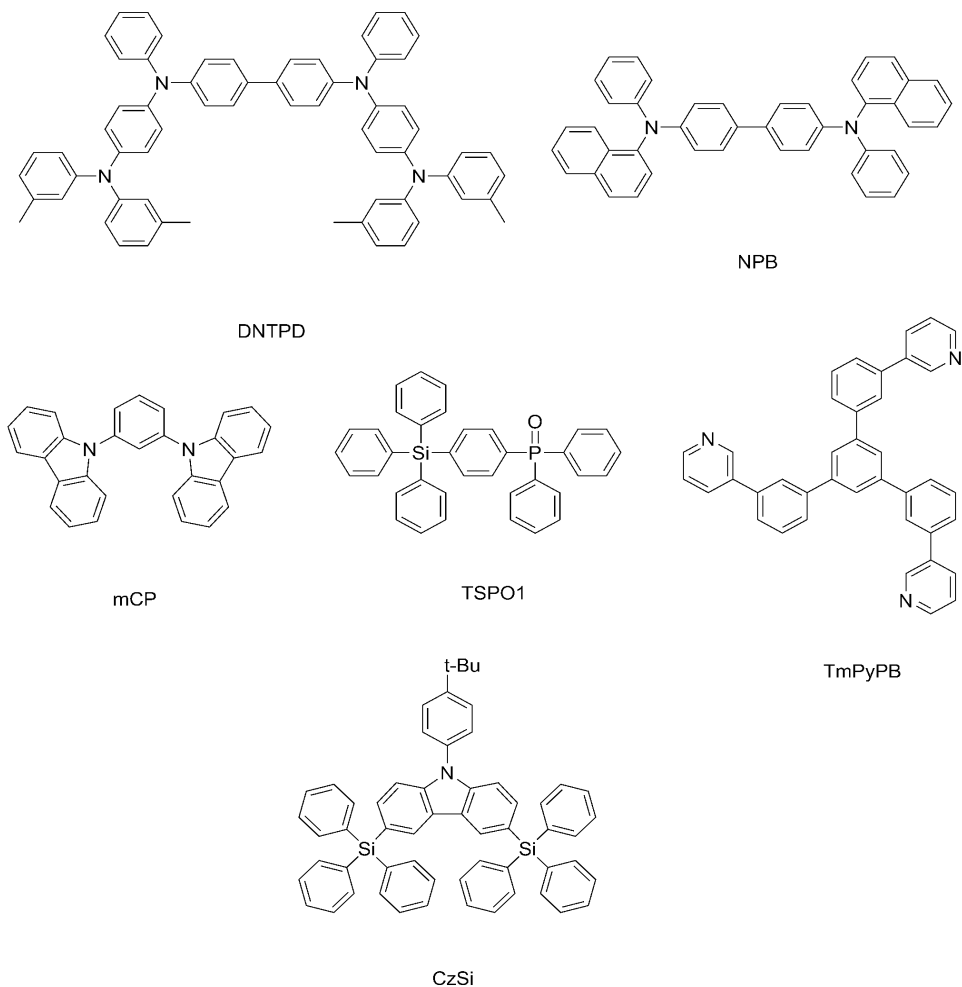
[0179] ITO (Indium tin oxide)가 150nm 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 이소프로필 알코올 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송시켜 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[0180] 이와 같이 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상에 DNTPD를 진공 증착하여 60nm 두께의 정공 주입층을 형성하였다. 이어서 제 1정공 수송층으로서 NPB를 증착하여 10nm 두께의 제1 정공수송층을 형성하였으며, 이어서 제 2정공 수송층으로서 mCP를 증착하여 20nm 두께의 제2 정공수송층을 형성하였다. 이어서 화합물 (1)을 호스트로 하여 증착속도를 0.1nm/sec, FIr6의 증착속도를 0.01nm/sec로 증착하고, 증착속도 비율이 10%가 되도록 FIr6를 도핑하여 정공수송층 위에 발광층을 40nm 두께로 형성하였다. 그 위에 엑시톤 차단층으로서 TSP01을 증착하여 15nm 두께의 엑시톤 차단층을 형성하였으며, 그 위에 TmPyPB를 증착하여 15nm 두께의 전자수송층을 형성하였으며, 상기 전자수송층 상부에 LiQ 2nm와 알루미늄(Al)을 50nm 두께로 순차적으로 진공 증착하

여 음극을 형성함으로써 유기전계발광소자를 제조하였다.

- [0181] 이때, 각 물질의 증착속도는 유기물질인 DNTPD, NPB, mCP, TSP01, TmPyPB는 0.1 nm/sec, LiQ는 0.02 nm/sec, 알루미늄은 0.2 nm/sec로 하였다.
- [0183] 소자실시예 2: 화합물 (2)를 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0184] 발광층의 호스트로 화합물(1) 대신에 화합물(2)를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0186] 소자실시예 3: 화합물 (4)를 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0187] 발광층의 호스트로 화합물(1) 대신에 화합물(4)를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0189] 소자실시예 4: 화합물 (8)을 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0190] 발광층의 호스트로 화합물(1) 대신에 화합물(8)을 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0192] 소자비교예 1: CzSi를 호스트로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0193] 소자실시예 1에서 발광층의 호스트로 화합물(1) 대신에 CzSi를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.

[0195] 상기 소자실시에 및 소자비교예에서 사용한 DNTPD, NPB, mCP, TSP01, TmPyPB 및 CzSi의 구조식은 아래와 같다.



[0196]

[0198] 유기전계발광소자의 특성 분석

[0199] 이하, 소자실시에 1 내지 4, 및 소자비교예 1에 따라 제조된 유기전계발광소자를 1000 cd/m² 휘도에서 특성을 비교하여 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0200]

구분	호스트 재료	1000 cd/m ² 에서 구동전압 (V)	1000 cd/m ² 에서 휘 도효율 (cd/A)
소자실시예 1	화합물(1)	8.0	6.6
소자실시예 2	화합물(2)	6.7	9.8
소자실시예 3	화합물(4)	6.3	14.1
소자실시예 4	화합물(8)	6.9	14.4
소자비교예 1	CzSi	8.5	7.5

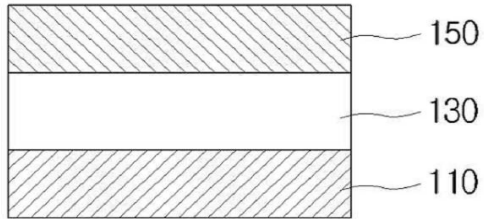
[0202] 외부양자효율은 전압을 0 V 부터 15 V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta CS-2000)를 이용하여 그 때의 휘도를 측정하고, 측정된 휘도값을 전류 밀도값으로 나누어 결과를 얻었다.

[0203] 상기 표 1에 따르면, 본 발명에 의한 화합물 (2), (4), (8)을 발광층의 호스트로 포함하는 유기전계발광소자에 사용한 결과, 종래 CzSi를 사용한 것과 비교하여 휘도효율이 향상되고, 구동전압이 감소되어 우수한 성능을 보

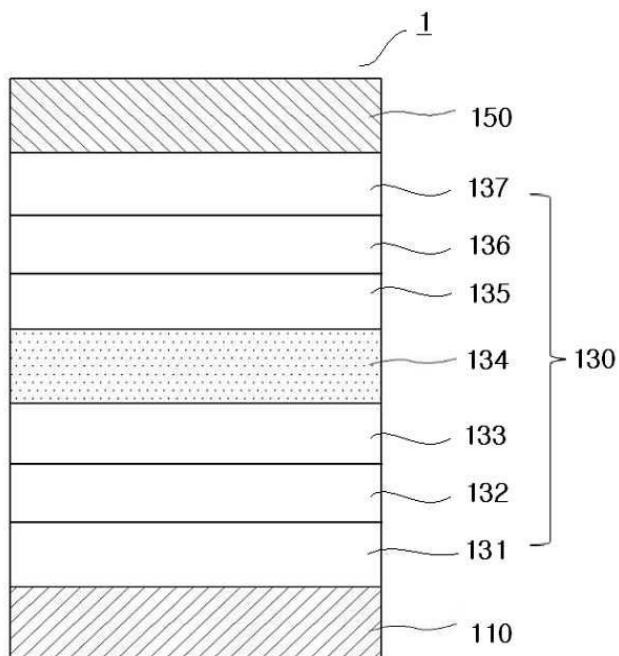
이는 것을 확인할 수 있었다.

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	标题：用于有机电致发光器件的化合物和含有该化合物的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020170076436A	公开(公告)日	2017-07-04
申请号	KR1020150186698	申请日	2015-12-24
[标]申请(专利权)人(译)	SK化学株式会社		
申请(专利权)人(译)	SK化工有限公司		
[标]发明人	LEE SONG 이송 PARK JEONG HO 박정호 JUN SUK WOON 전석운 KANG JU SIK 강주식 SHIN YONG JUN 신용준 CHANG YU MI 장유미 YANG NAM CHOUL 양남철 PARK JAE KYUN 박재균 CHAE HEE IL 채희일		
发明人	이송 박정호 전석운 강주식 신용준 장유미 양남철 박재균 채희일		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 C07D403/10 C07D403/14 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D403/10 C07D403/14 C07D209/82 H01L51/5012 H01L51/0067 C09K2211/1059 C09K2211/1029		
代理人(译)	Yisuyeol		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明提供用于有机电致发光器件的化合物和包含其的有机电致发光器件。因此，用于有机电致发光器件的化合物可以用作发光层的主体，从而提高磷光发光材料的色纯度和发光效率，并且可以提供包括该化合物的有机电致发光器件。

