



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2018-0063709
(43) 공개일자 2018년06월12일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) C07D 251/24 (2006.01)
C07D 405/04 (2006.01) C07D 409/04 (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C09K 11/06 (2013.01)
C07D 251/24 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2016-0163811

(22) 출원일자 2016년12월02일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

(주)피엔에이치테크

경기도 용인시 기흥구 동백중앙로16번길 16-25,
706호(중동, 대우프론티어밸리1단지)

(72) 발명자

현서용

경기도 용인시 수지구 손곡로 54, 201동 503호

정성욱

충청북도 청주시 서원구 산남로 23, 101동 701호

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

정은열

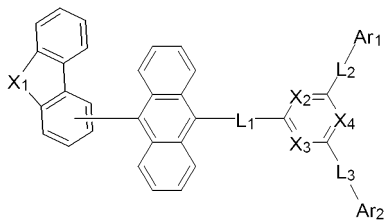
전체 청구항 수 : 총 6 항

(54) 발명의 명칭 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

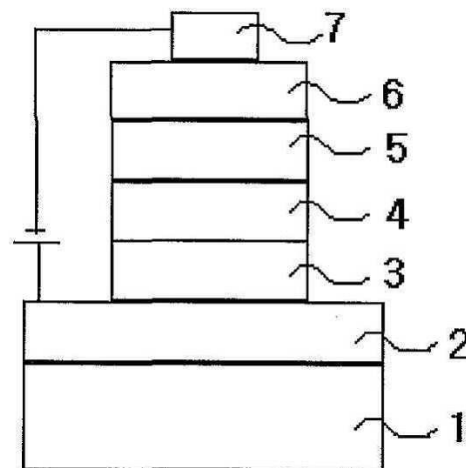
(57) 요약

본 발명은 하기 [화학식 I]로 표시되는 유기발광 화합물로서, 이를 전자수송층의 전자수송 재료로 채용하는 경우, 양자효율 및 발광효율 특성이 우수한 유기전계발광소자의 구현이 가능하다.

[화학식 I]



대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 405/04 (2013.01)

C07D 409/04 (2013.01)

H01L 51/0067 (2013.01)

H01L 51/0073 (2013.01)

H01L 51/0074 (2013.01)

C09K 2211/1044 (2013.01)

C09K 2211/1059 (2013.01)

C09K 2211/1088 (2013.01)

C09K 2211/1096 (2013.01)

(72) 발명자

김동원

충청북도 청주시 흥덕구 월명로23번길 10-7

김익환

부산광역시 사상구 주감로 10

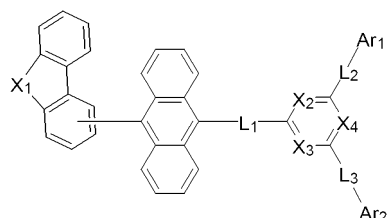
명세서

청구범위

청구항 1

하기 [화학식 I]로 표시되는 유기발광 화합물:

[화학식 I]



상기 [화학식 I]에서,

X_1 은 CR_1R_2 이고, X_2 내지 X_4 는 서로 동일 하거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR_3 또는 N이고,

상기 R_1 내지 R_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 7의 알킬기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기 중에서 선택되며, 상기 R_1 내지 R_2 는 서로 또는 인접한 치환기와 연결되어 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리를 형성할 수 있고,

상기 R_3 는 수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택되며,

L_1 내지 L_3 은 각각 독립적으로 직접결합이거나, 치환 또는 비치환된 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기 중에서 선택되며,

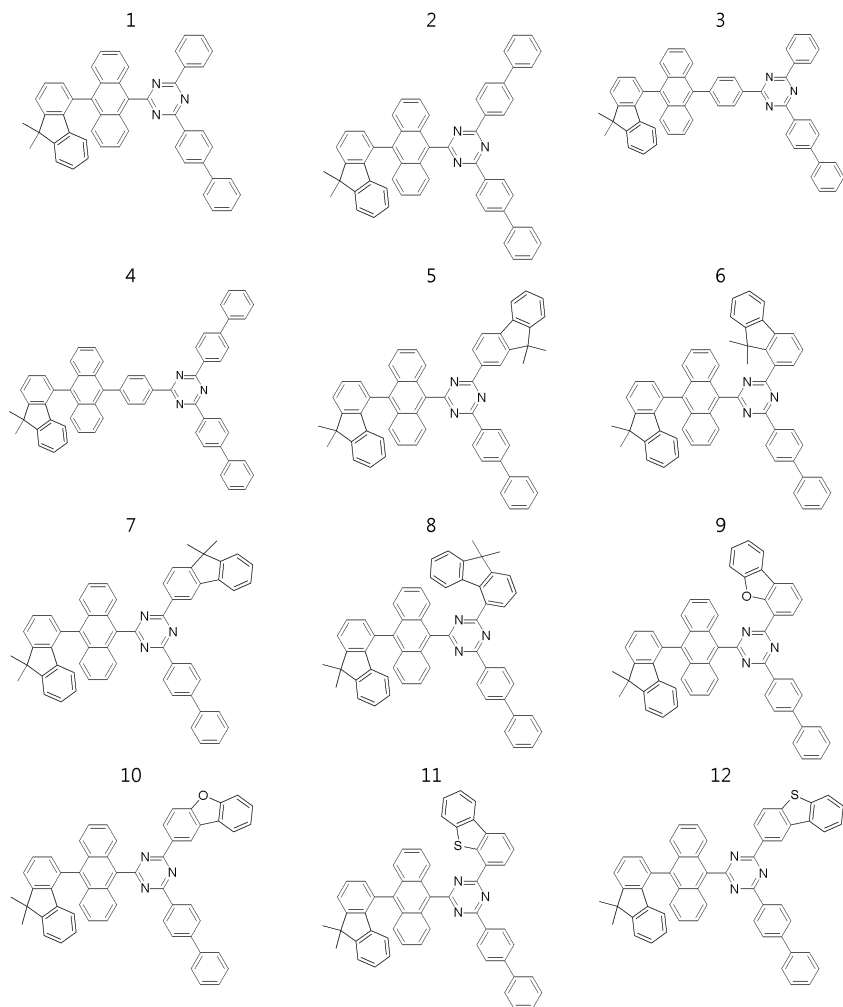
Ar_1 내지 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택되며,

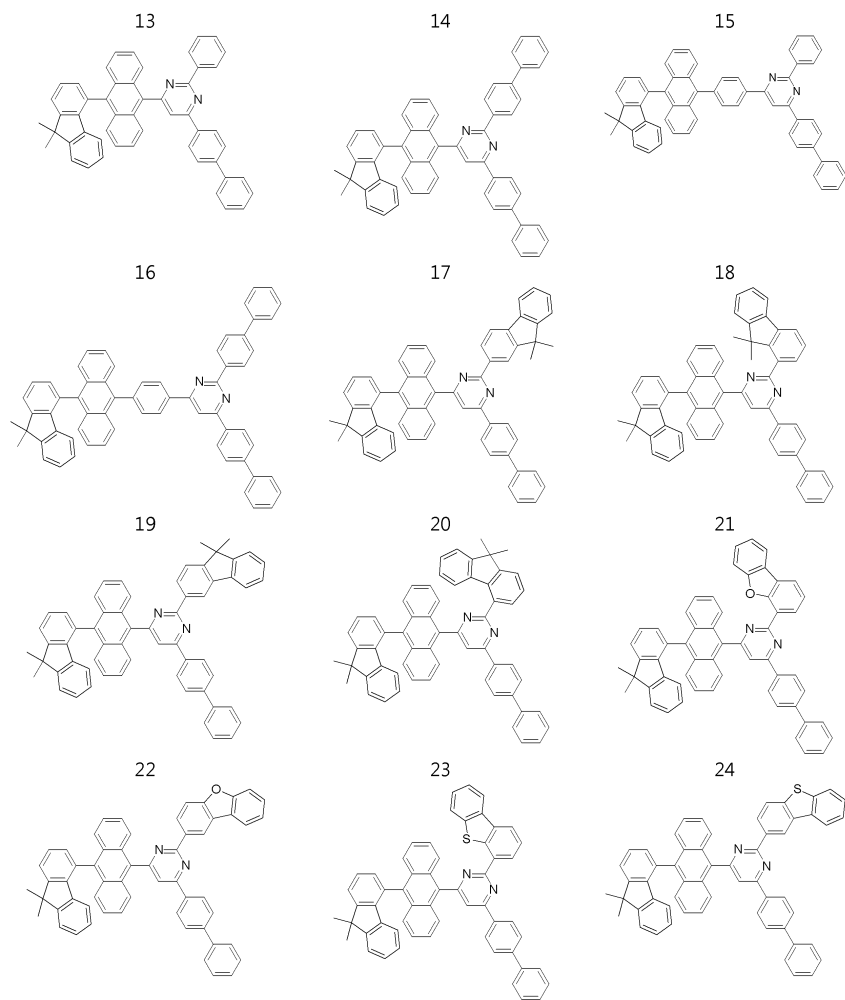
상기 치환 또는 비치환이란 수소, 할로젠기, 니트로기, 히드록시기, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 알케닐기, 아릴기 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1 또는 2 이상의 치환기로 치환되거나, 상기 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환되거나, 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다.

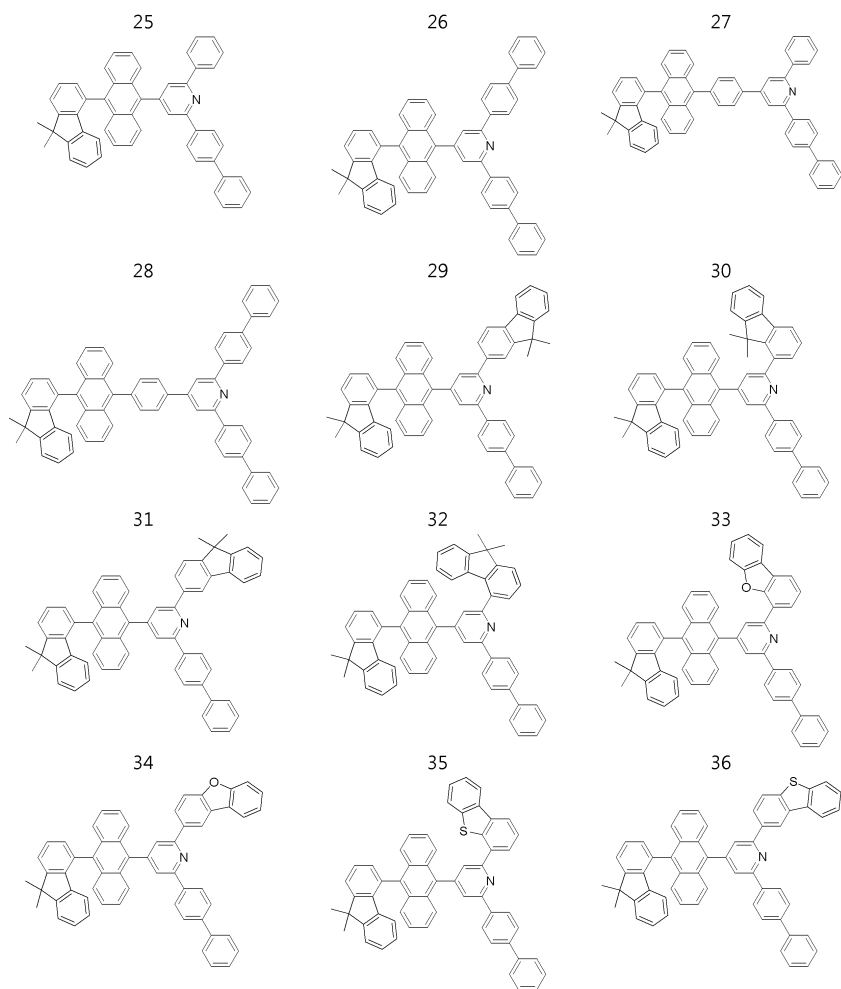
청구항 2

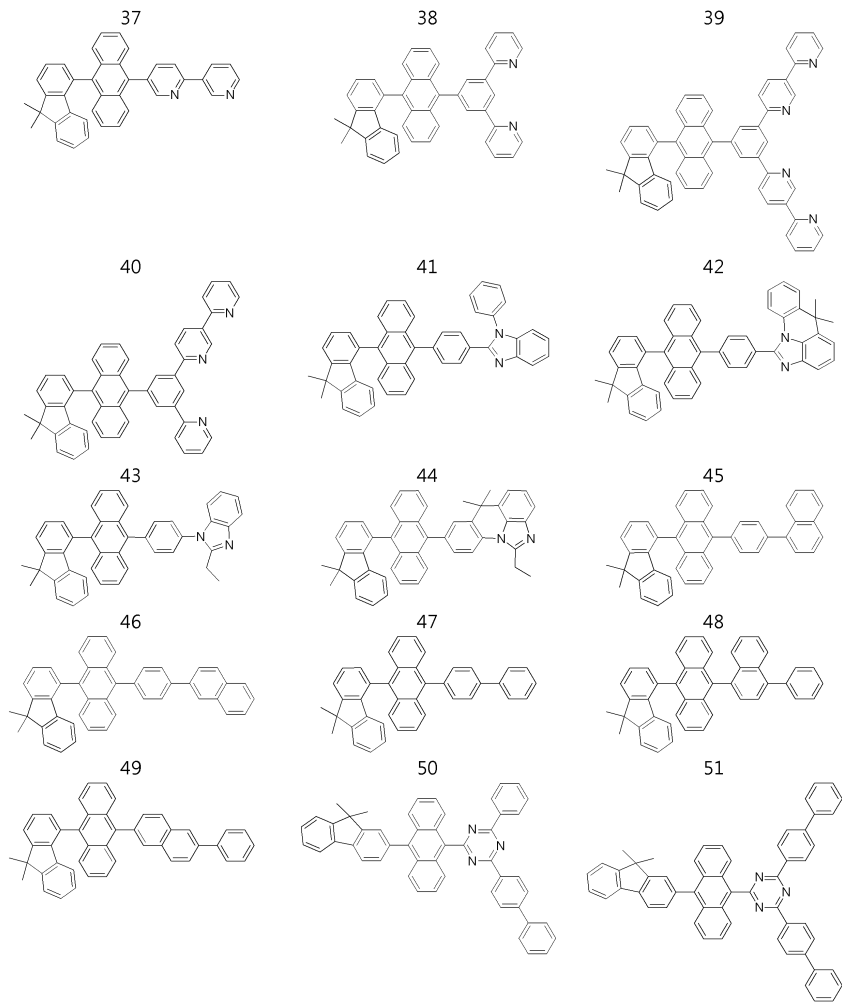
제1항에 있어서,

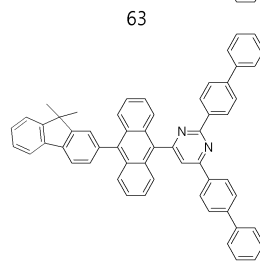
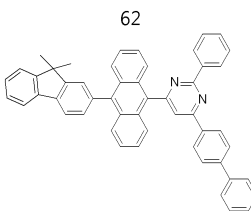
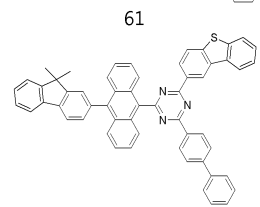
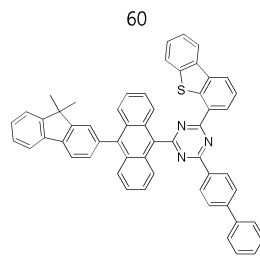
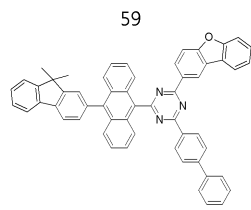
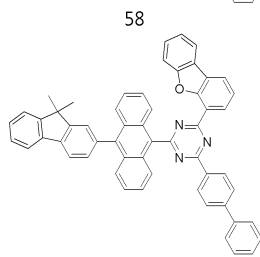
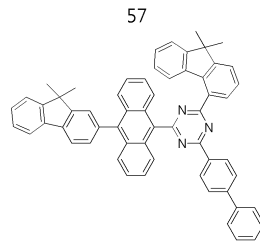
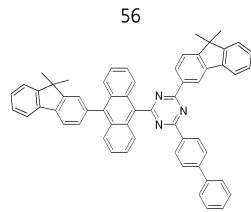
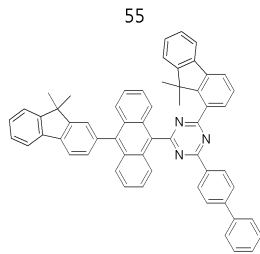
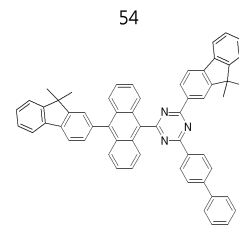
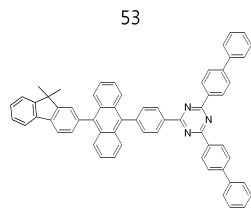
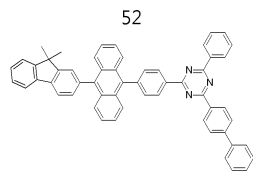
상기 [화학식 I]은 하기 [화합물 1] 내지 [화합물 194] 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

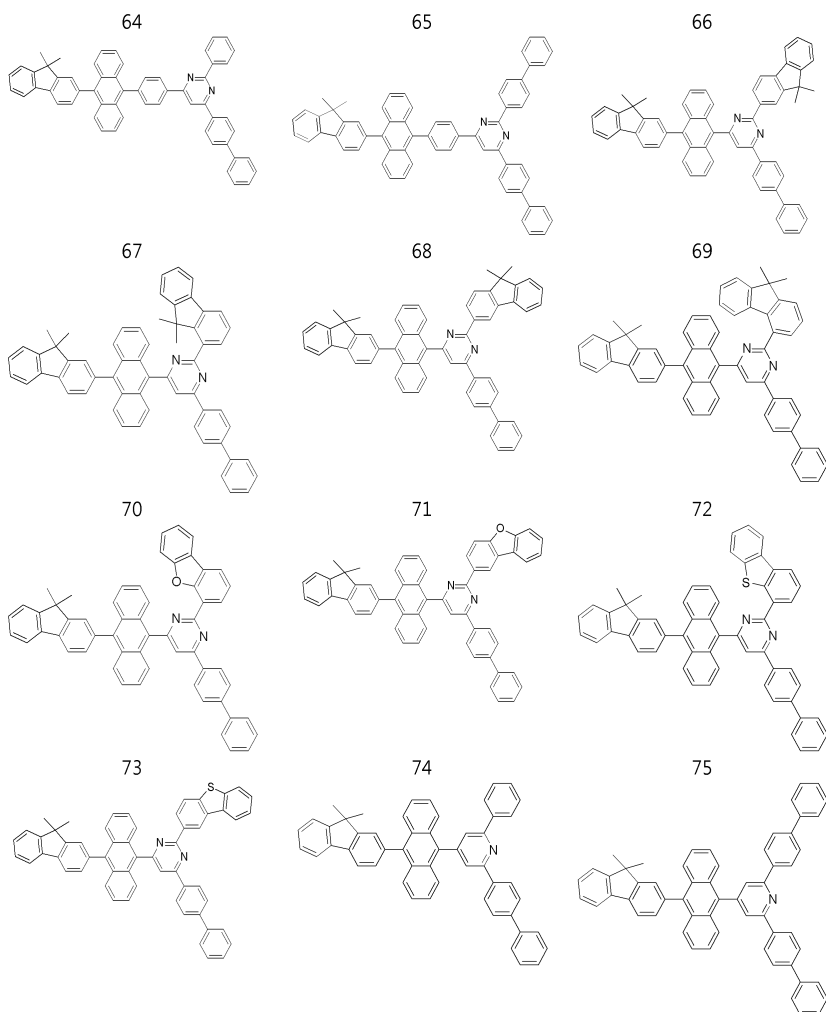


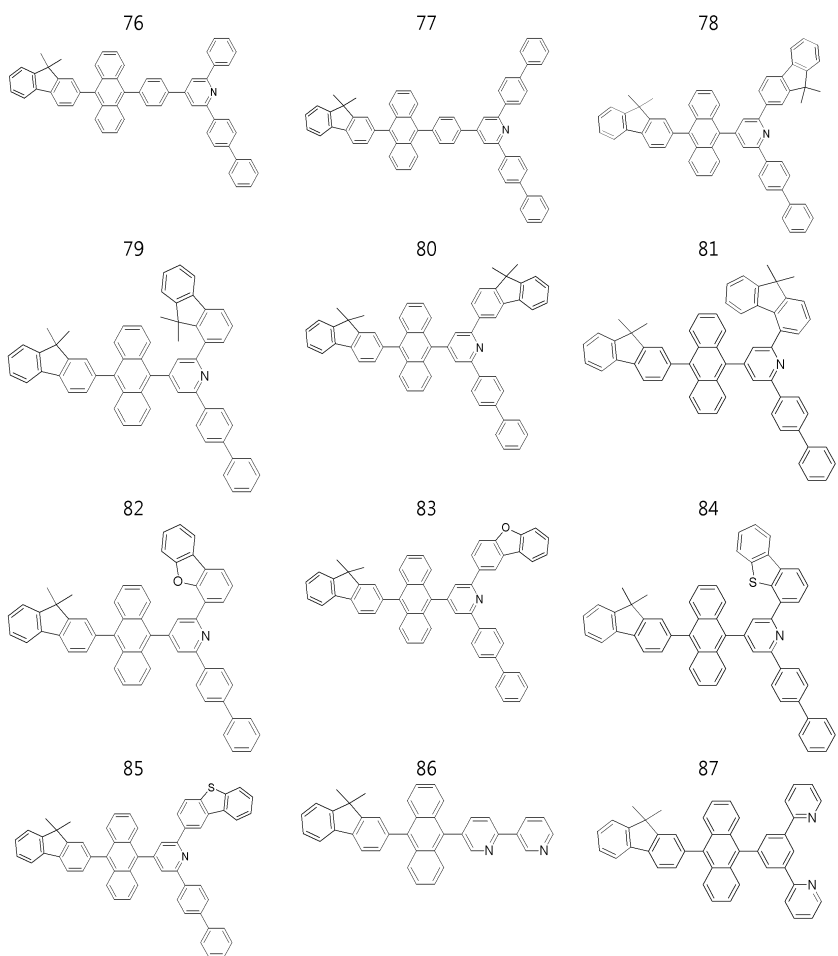


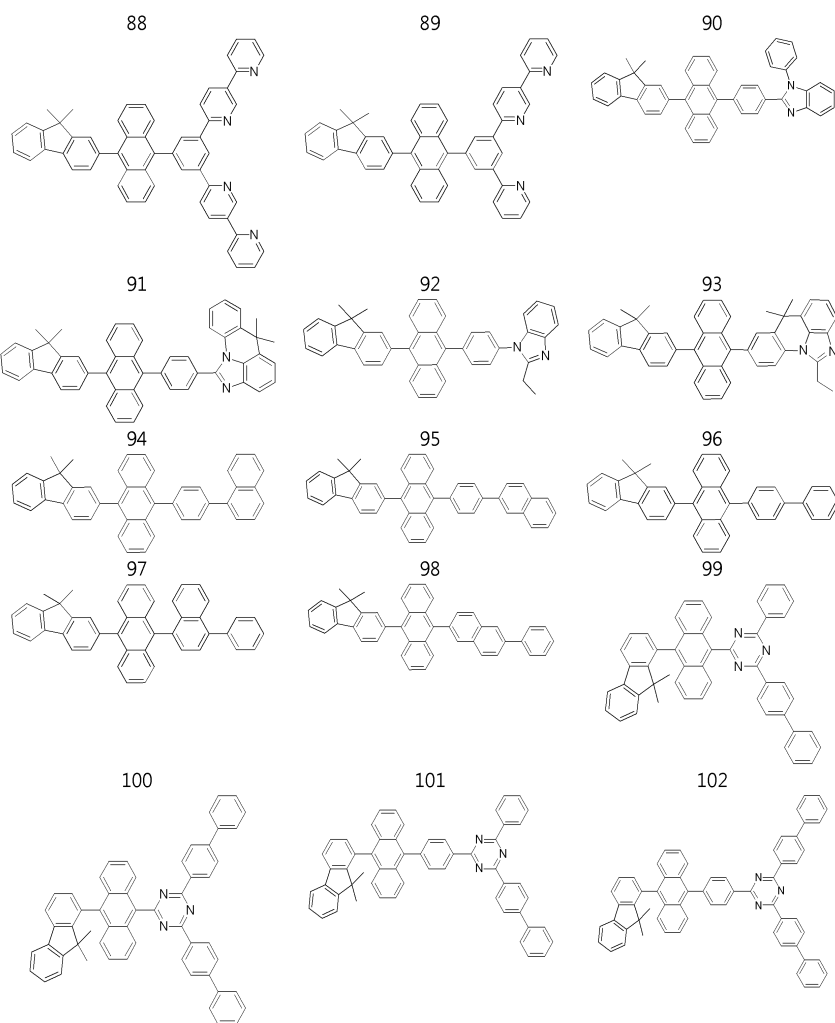


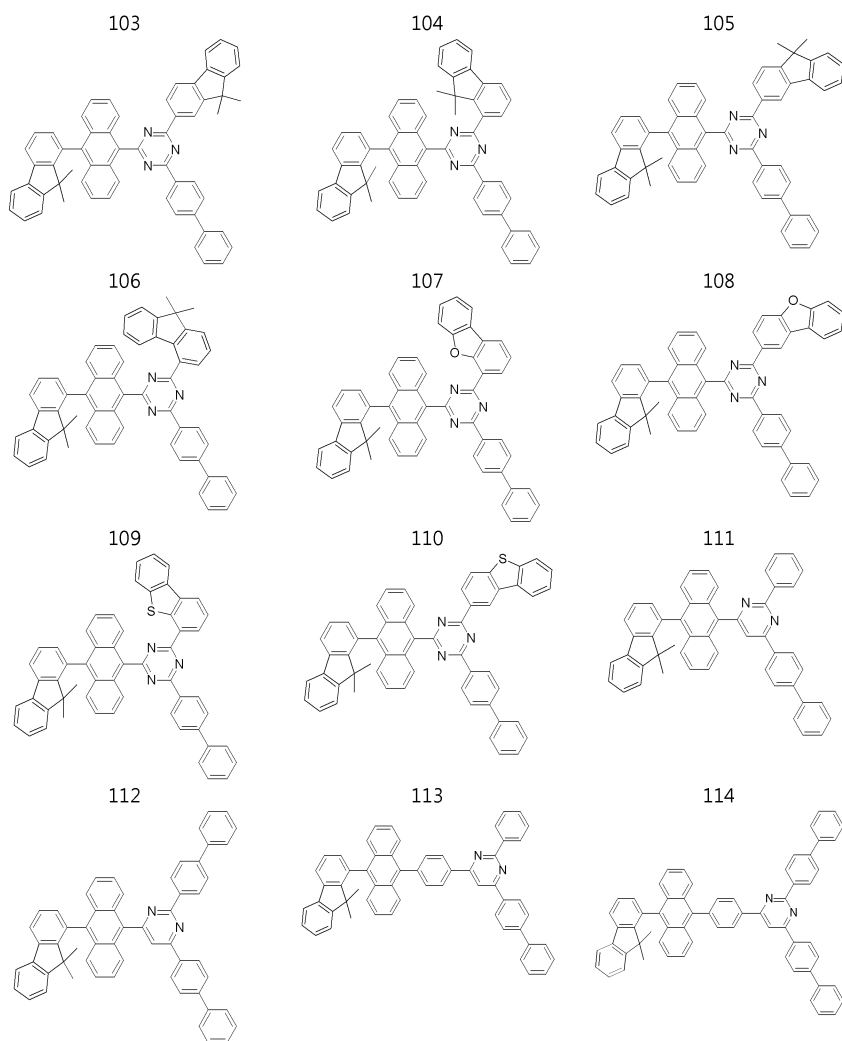


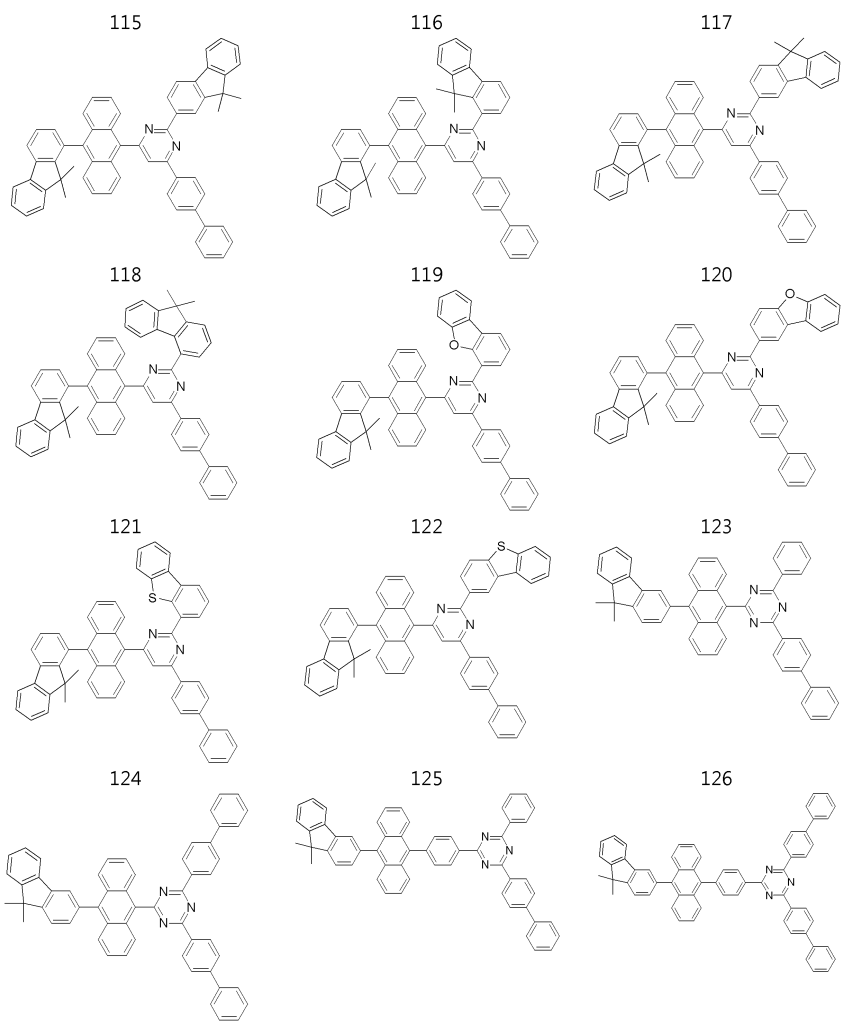


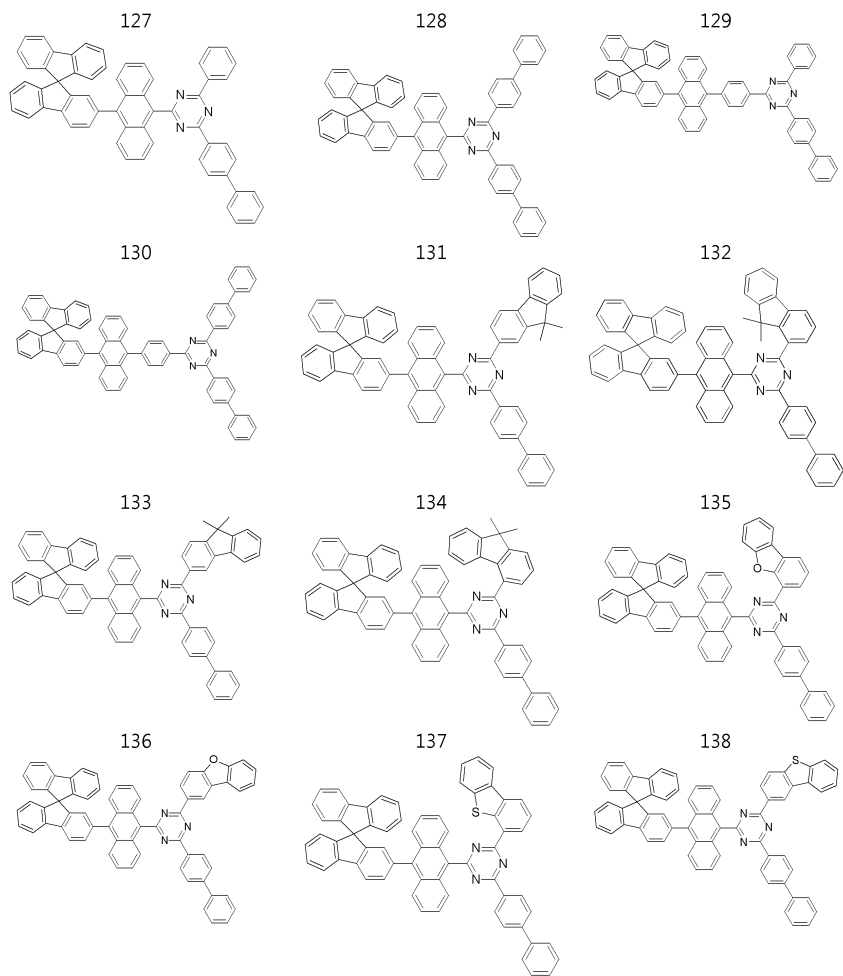


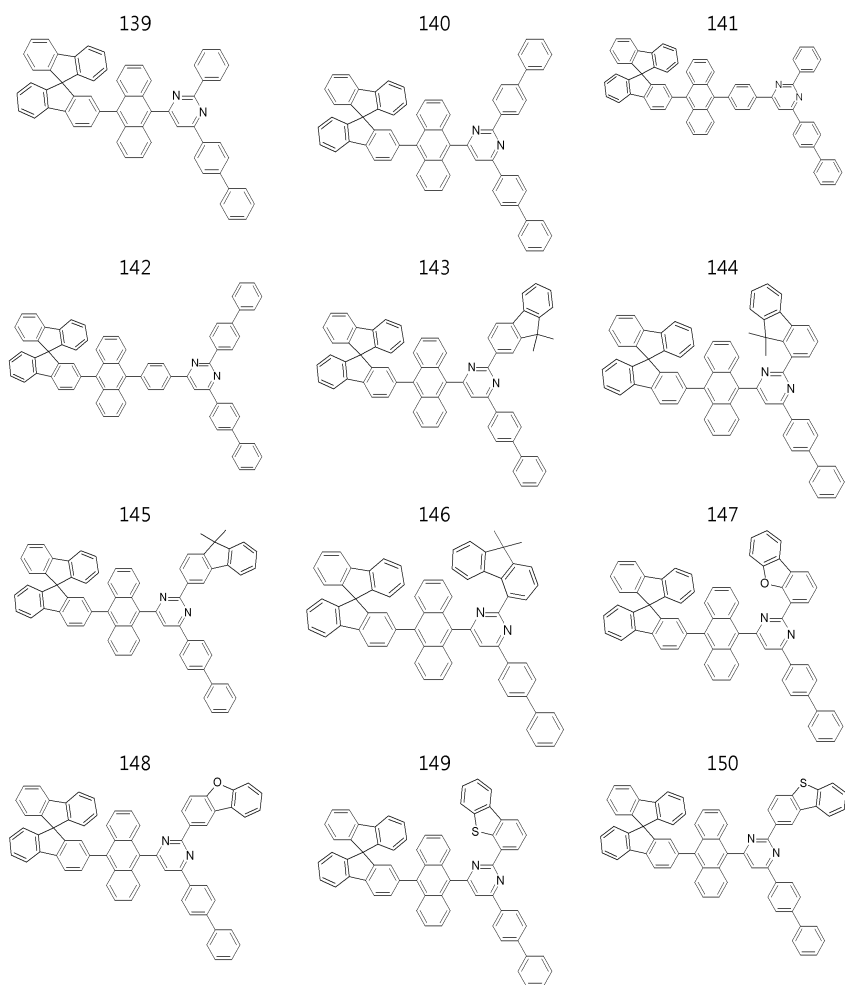


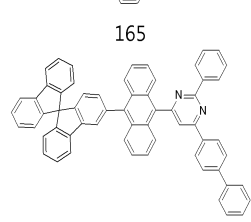
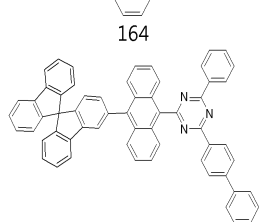
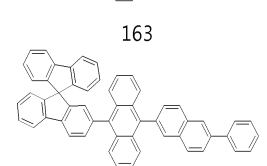
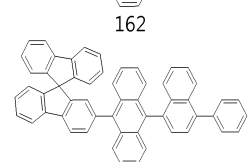
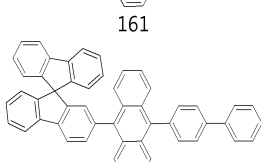
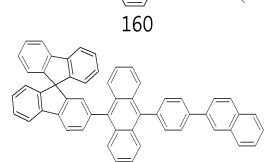
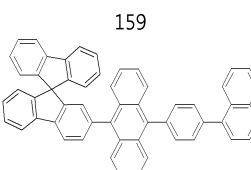
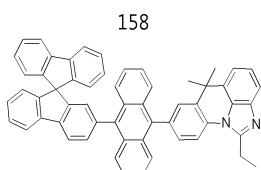
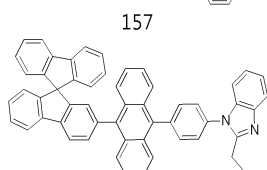
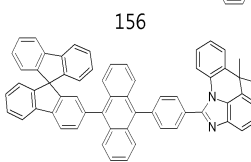
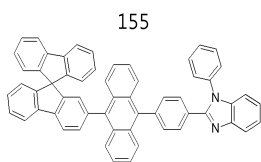
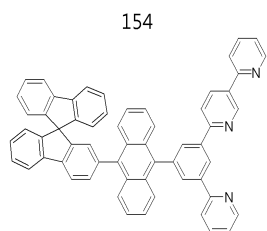
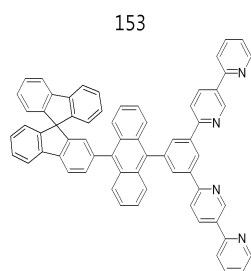
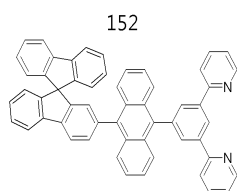
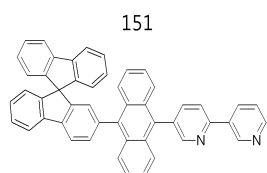


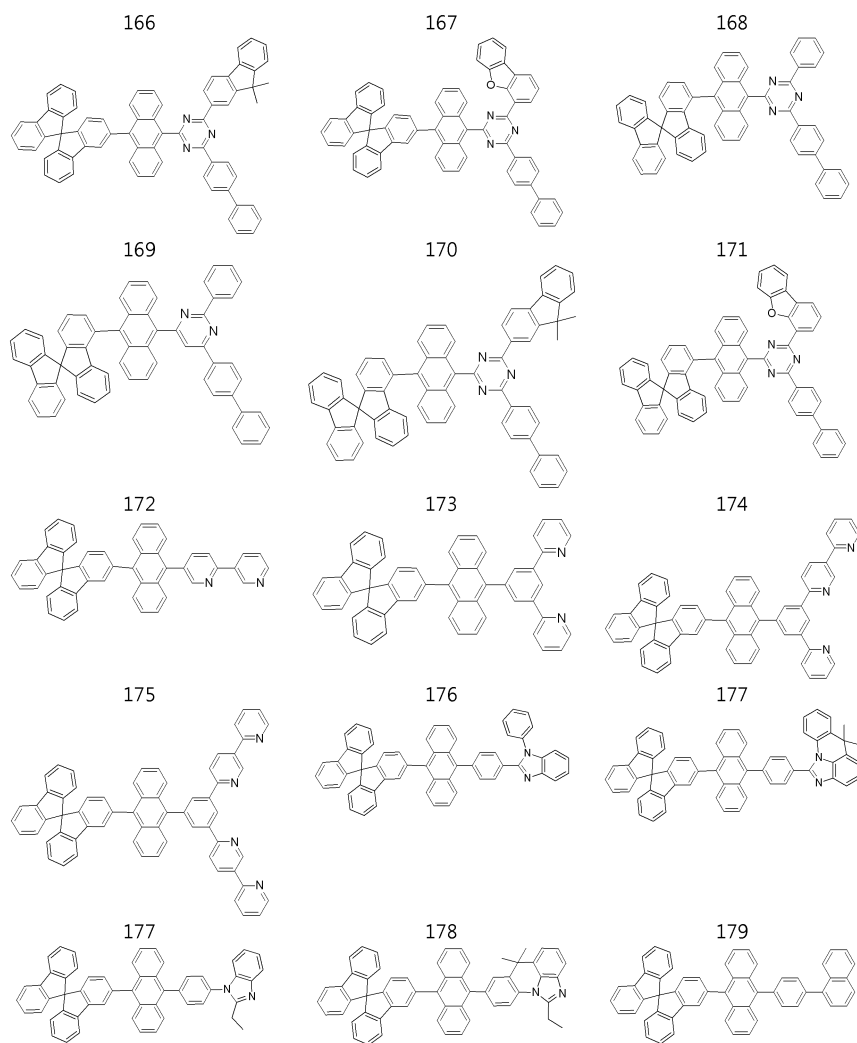


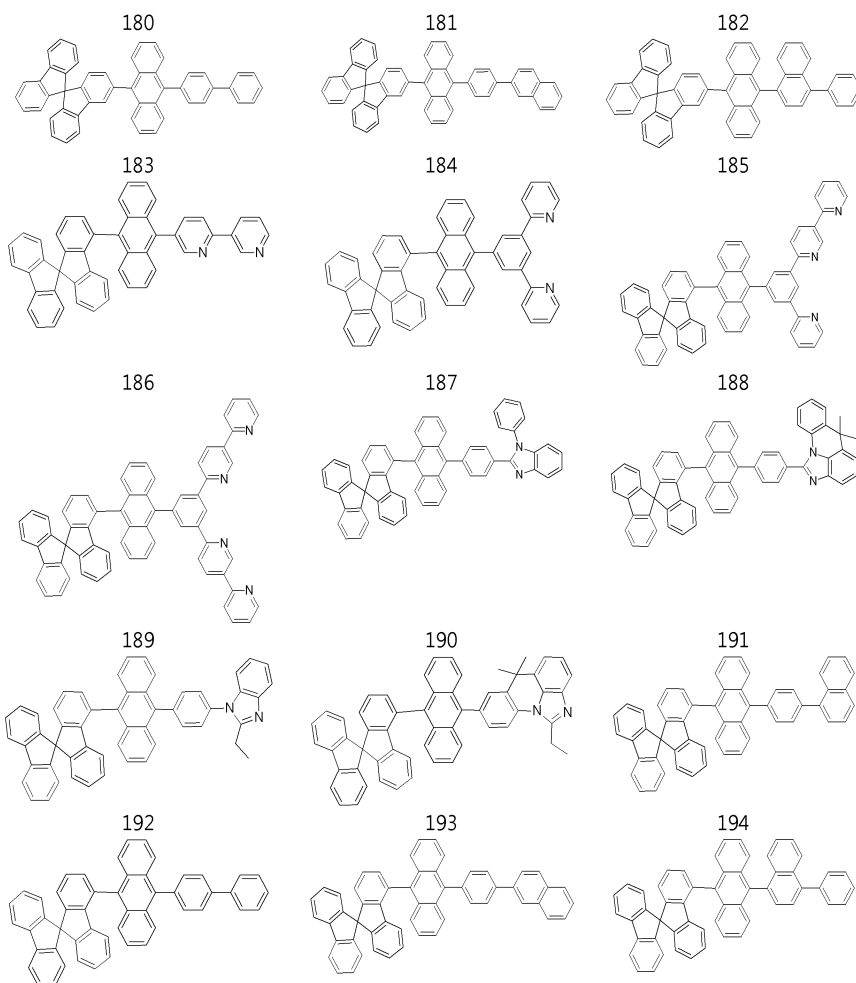












청구항 3

제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자로서,

상기 유기물층 중 1 층 이상은 제1항에 따른 [화학식 I]로 구현되는 유기발광 화합물을 하나 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 4

제3항에 있어서,

상기 유기물층은 전자주입층, 전자수송층, 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 정공저지층 및 발광층 중 1층 이상을 포함하고,

상기 층들 중 1층 이상이 상기 [화학식 I]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 5

제4항에 있어서,

상기 전자수송층이 상기 [화학식 I]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 6

제4항에 있어서,

상기 전자 수송층은 제1 전자수송층 및 제2 전자수송층으로 이루어지고, 상기 제1 전자수송층이 상기 [화학식 I]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기발광 화합물에 관한 것으로서, 보다 구체적으로 유기전계발광소자의 전자수송층에 채용되는 유기발광 화합물 및 이를 채용하여 발광효율, 양자효율 등의 발광특성이 현저히 향상된 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기전계발광소자는 투명 기판 위에도 소자를 형성할 수 있을 뿐 아니라, 플라즈마 디스플레이 패널(Plasma Display Panel)이나 무기전계발광(EL) 디스플레이에 비해 10 V 이하의 저전압 구동이 가능하고, 전력 소모가 비교적 적으며, 색감이 뛰어나다는 장점이 있고, 녹색, 청색, 적색의 3가지 색을 나타낼 수가 있어 최근에 차세대 디스플레이 소자로 많은 관심의 대상이 되고 있다.

[0003] 다만, 이러한 유기전계발광소자가 상기와 같은 특징으로 발휘하기 위해서는 소자 내 유기층을 이루는 물질인 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지는 안정하고 효율적인 유기전계발광소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서, 발광 특성을 개선할 수 있는 새로운 재료의 개발과 소자 내 유기물층 구조에 대한 개발이 계속 요구되고 있는 실정이다.

발명의 내용

해결하려는 과제

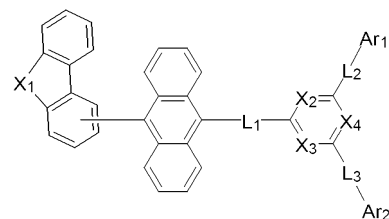
[0004] 따라서, 본 발명은 유기전계발광소자 내의 전자수송층에 채용되어 발광효율을 현저히 향상시킬 수 있는 신규한 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공하고자 한다.

[0005] 또한, 전자수송층을 복수의 층으로 하여 종래 전자수송 재료와 함께 신규한 유기발광 화합물을 채용하여 양자효율, 발광효율을 현저히 향상시킬 수 있는 유기전계발광소자를 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0006] 본 발명은 상기 과제를 해결하기 위하여, 하기 [화학식 I]로 표시되는 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.

[0007] [화학식 I]



[0008]

[0010] 상기 [화학식 I]의 구체적인 구조 및 치환기에 대해서는 후술한다.

발명의 효과

[0012] 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 전자수송층에 채용한 유기전계발광소자는 종래의 전자수송 재료를 채용한 소자에 비하여 현저히 향상된 발광 효율을 구현할 수 있어 다양한 디스플레이 소자에 유용하게 사용될 수 있다.

도면의 간단한 설명

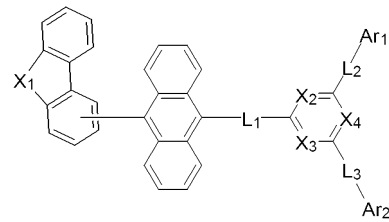
[0013] 도 1 내지 5는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 구조를 예시한 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0014] 이하, 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다.

[0015] 본 발명은 하기 [화학식 I]로 표시되는 유기발광 화합물로서, 유기전계발광소자 내의 유기층에 전자수송 재료로 채용하는 경우에 양자효율 및 발광효율이 우수한 유기전계발광소자의 구현이 가능하다.

[0016] [화학식 I]



[0017]

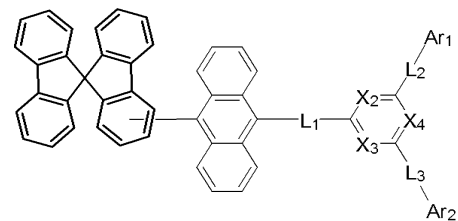
[0018] 상기 [화학식 I]에서,

[0019] X_1 은 CR_1R_2 이고, X_2 내지 X_4 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR_3 또는 N이다.

[0020] 상기 R_1 내지 R_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 7의 알킬기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기 중에서 선택되며, 상기 R_1 내지 R_2 는 서로 또는 인접한 치환기와 연결되어 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리를 형성할 수 있다.

[0021] 이에 따라 구체적으로 상기 [화학식 I]은 하기와 같은 구조일 수 있다.

[0022] [화학식 I-1]



[0023]

[0024] 또한, 상기 R_3 는 수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택된다.

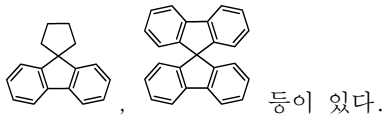
[0025] L_1 내지 L_3 은 각각 독립적으로 직접결합이거나, 치환 또는 비치환된 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기 중에서 선택된다.

[0026] Ar_1 내지 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택되며,

[0028] 한편, 본 발명에 있어서, 상기 치환 또는 비치환이란 수소, 할로젠기, 니트로기, 히드록시기, 알킬기, 시클로알킬기, 알콕시기, 알케닐기, 아릴기 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1 또는 2 이상의 치환기로 치환되거나, 상기 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환되거나, 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을

의미한다.

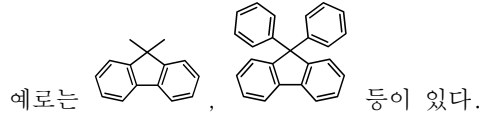
- [0029] 구체적 예들 들면, 치환된 아릴렌기라 함은, 페닐기, 비페닐기, 나프탈렌기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 페난트레닐기, 페틸렌기, 테트라세닐기, 안트라센닐기 등이 다른 치환기로 치환된 것을 의미한다.
- [0030] 치환된 헤테로아릴렌기라 함은, 피리딜기, 티오펜기, 트리아진기, 퀴놀린기, 페난트롤린기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 카바졸기 및 이들의 축합헤테로고리, 예컨대 벤즈퀴놀린기, 벤즈이미다졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈티아졸기, 벤즈카바졸기, 디벤조티오펜기, 디벤조퓨란기 등이 다른 치환기로 치환된 것을 의미한다.
- [0032] 본 발명에 있어서, 상기 치환기들의 예시들에 대해서 아래에서 구체적으로 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0033] 본 발명에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 20인 것이 바람직하다. 구체적 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-프로필기, 이소프로필기, 부틸기, n-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, sec-부틸기, 1-메틸-부틸기, 1-에틸-부틸기, 펜틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, 네오펜틸기, tert-펜틸기, 헥실기, n-헥실기, 1-메틸헥실기, 2-메틸헥실기, 4-메틸-2-헥실기, 3,3-디메틸부틸기, 2-에틸부틸기, 헵틸기, n-헵틸기, 1-메틸헵틸기, 시클로헵틸메틸기, 시클로헵틸메틸기, 옥틸기, n-옥틸기, tert-옥틸기, 1-메틸헵틸기, 2-에틸헵틸기, 2-프로필헵틸기, n-노닐기, 2,2-디메틸헵틸기, 1-에틸-프로필기, 1,1-디메틸-프로필기, 이소헵틸기, 2-메틸헵틸기, 4-메틸헵틸기, 5-메틸헵틸기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0034] 본 발명에 있어서, 알콕시기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 입체적 방해를 주지 않는 범위인 1 내지 20개인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, 이소프로폭시기, i-프로필옥시기, n-부톡시기, 이소부톡시기, tert-부톡시기, sec-부톡시기, n-펜틸옥시기, 네오펜틸옥시기, 이소펜틸옥시기, n-헥실옥시기, 3,3-디메틸부틸옥시기, 2-에틸부틸옥시기, n-옥틸옥시기, n-노닐옥시기, n-데실옥시기, 벤질옥시기, p-메틸벤질옥시기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0035] 본 발명에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 20인 것이 바람직하다. 구체적 예로는 비닐기, 1-프로페닐기, 이소프로페닐기, 1-부테닐기, 2-부테닐기, 3-부테닐기, 1-펜테닐기, 2-펜테닐기, 3-펜테닐기, 3-메틸-1-부테닐기, 1,3-부타디에닐기, 알릴기, 1-페닐비닐-1-일기, 2-페닐비닐-1-일기, 2,2-디페닐비닐-1-일기, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일기, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일기, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.
- [0036] 본 발명에 있어서, 아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 6 내지 30인 것이 바람직하다. 단환식 아릴기의 예로는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 스틸벤기 등이 있고, 다환식 아릴기의 예로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 페틸레닐기, 테트라세닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기, 아세나프타세닐기, 트리페닐렌기, 플루오안트렌(fluoranthrene)기 등이 있으나, 본 발명의 범위가 이들 예로만 한정되는 것은 아니다.
- [0037] 본 발명에 있어서, 헤테로고리기는 이종원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로고리기로, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 2 내지 30인 것이 바람직하다. 헤테로고리기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딜기, 비피리딜기, 피리미딜기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딜기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나올린기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 디벤조퓨라닐기, 페난트롤린기, 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페노티아지닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0038] 본 발명에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 30인 것이 바람직하며, 구체적으로 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 3-메틸시클로펜틸기, 2,3-디메틸시클로펜틸기, 시클로헥실기, 3-메틸시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 2,3-디메틸시클로헥실기, 3,4,5-트리메틸시클로헥실기, 4-tert-부틸시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0039] 본 발명에 있어서, 할로젠기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.
- [0040] 본 발명에 있어서, 플루오레닐기는 2개의 고리 유기화합물이 1개의 원자를 통하여 연결된 구조로서, 예로는



등이 있다.

[0041]

본 발명에 있어서, 플루오레닐기는 열린 플루오레닐기의 구조를 포함하며, 여기서 열린 플루오레닐기는 2개의 고리 유기화합물이 1개의 원자를 통하여 연결된 구조에서 한쪽 고리 화합물의 연결이 끊어진 상태의 구조로서,



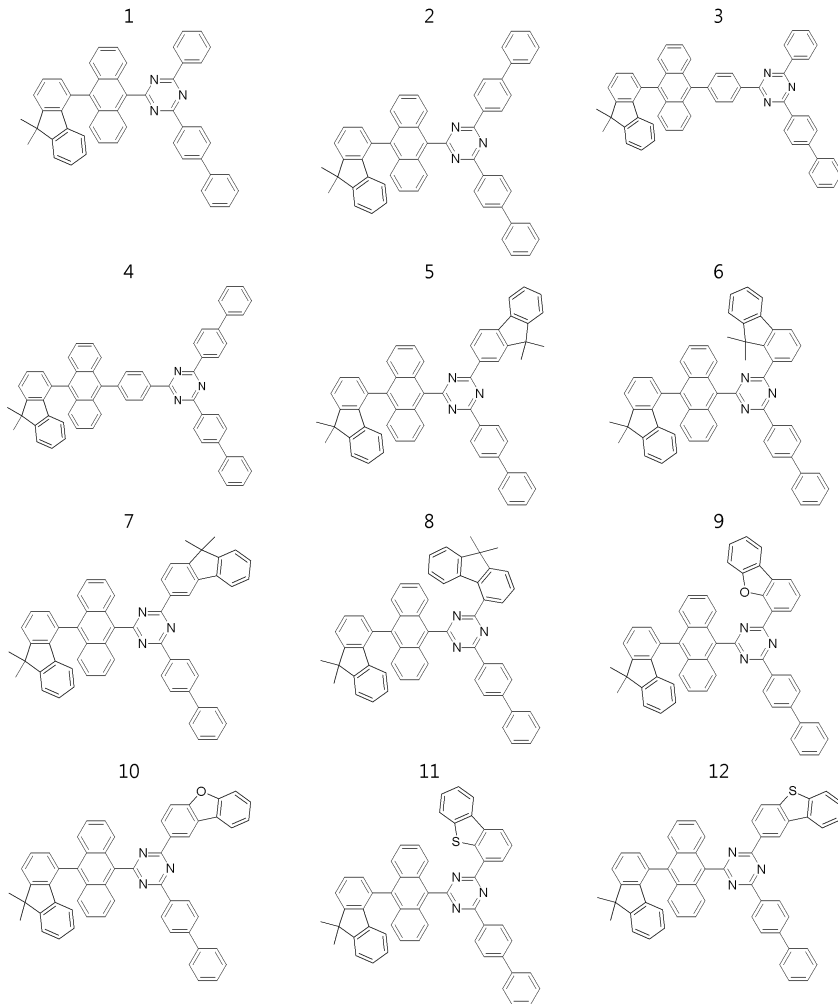
등이 있다.

[0043]

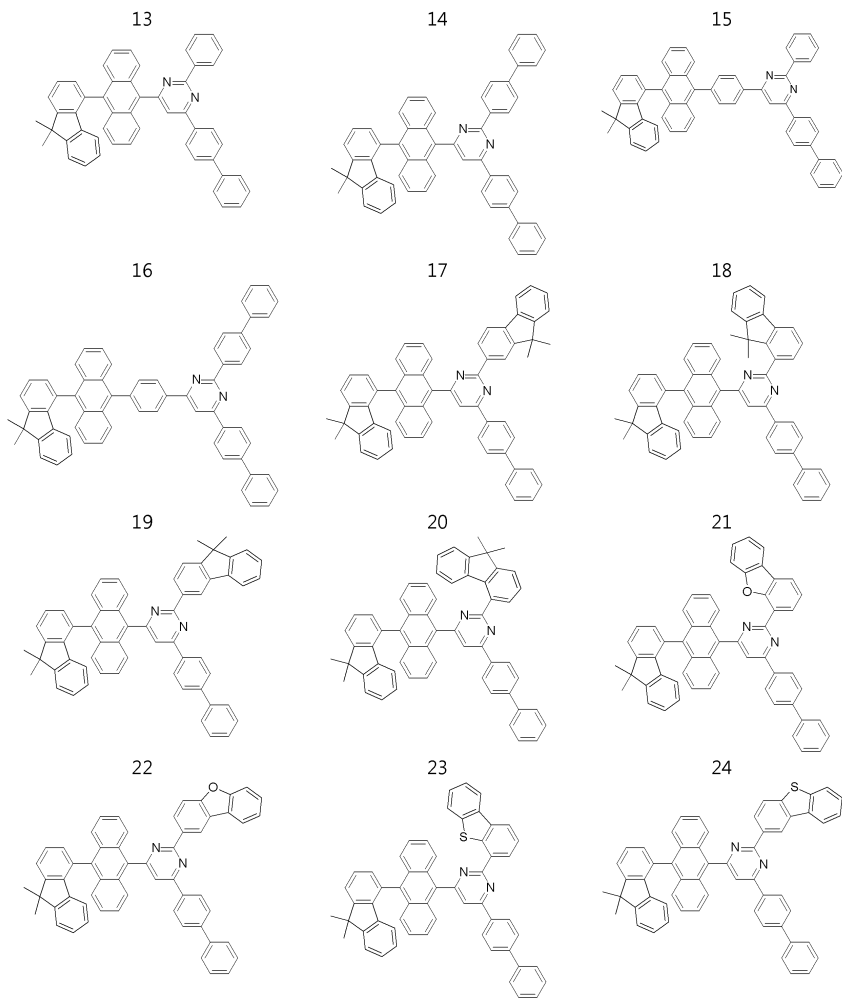
상기 [화학적식 I]로 표시되는 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 그 구조적 특이성으로 인하여 유기발광소자의 유기물층으로 사용될 수 있고, 보다 구체적으로 유기물층의 전자수송층 물질로 사용될 수 있다.

[0044]

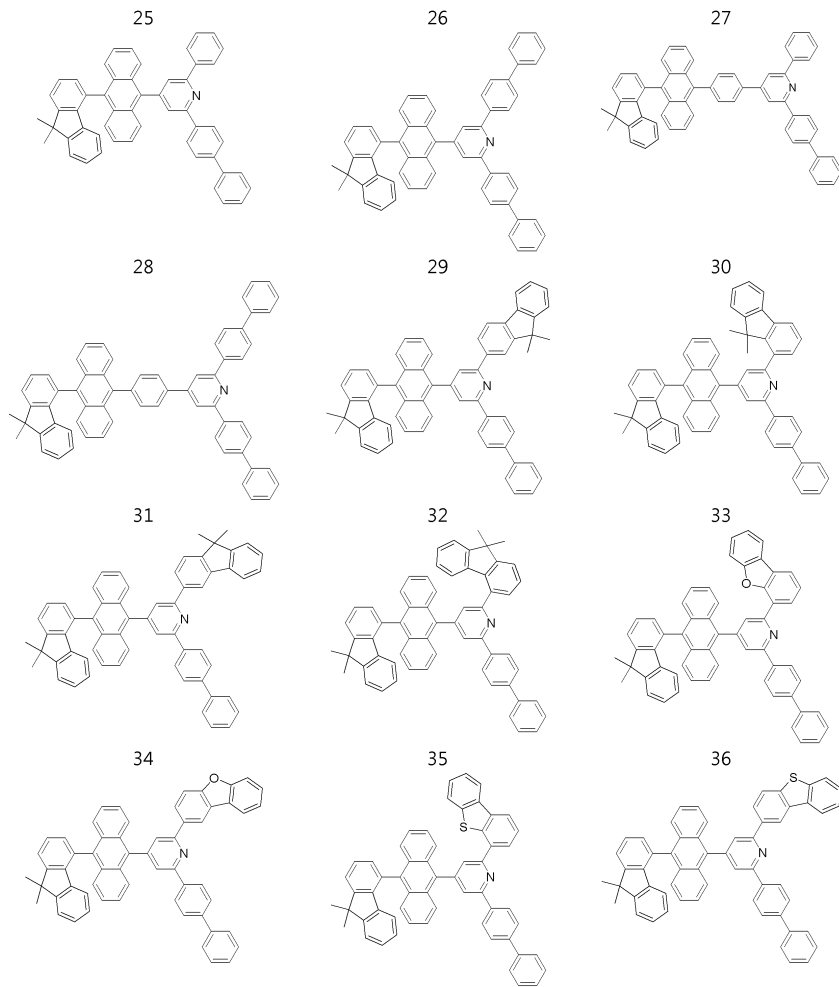
본 발명에 따른 [화학적식 I]로 표시되는 화합물의 바람직한 구체예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.



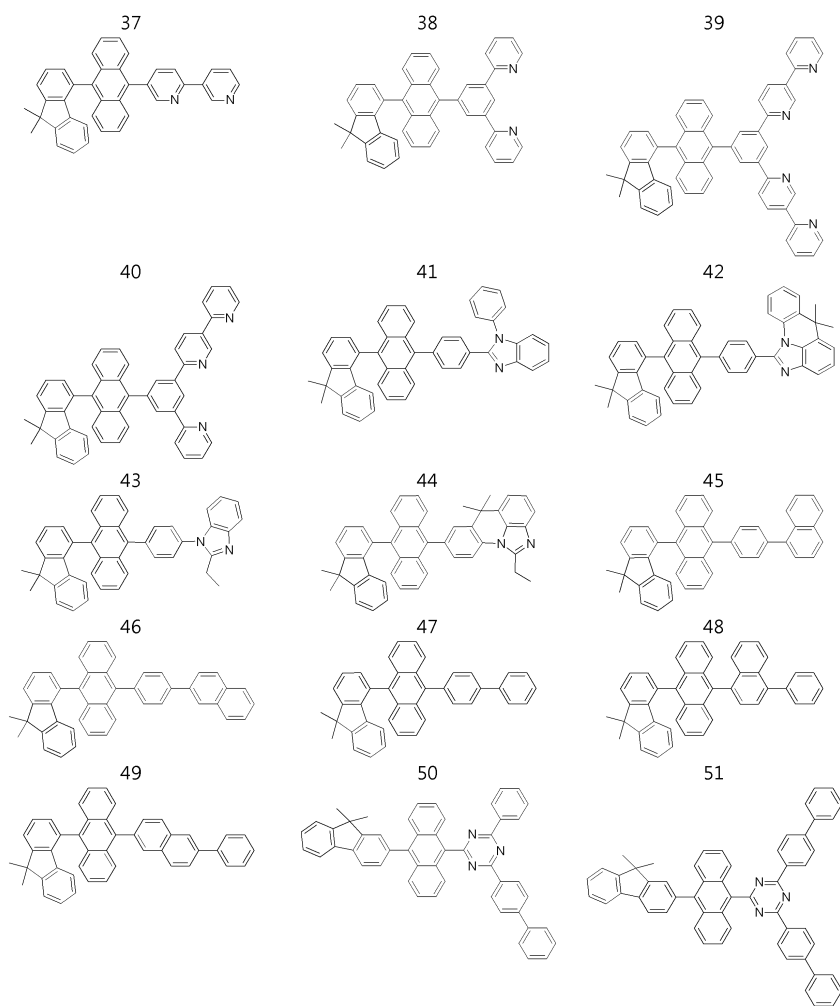
[0045]



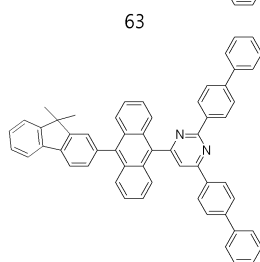
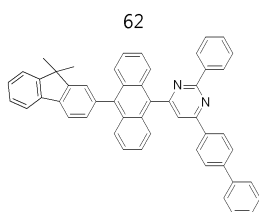
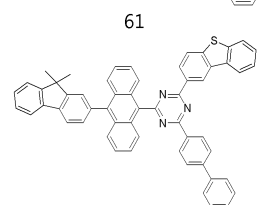
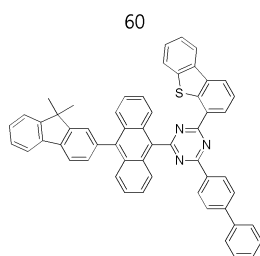
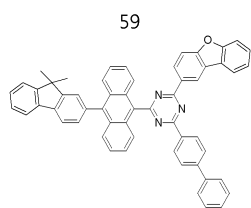
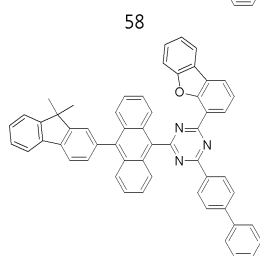
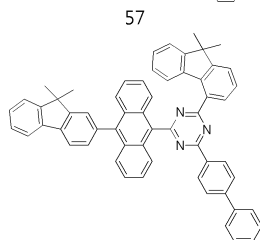
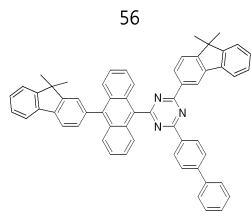
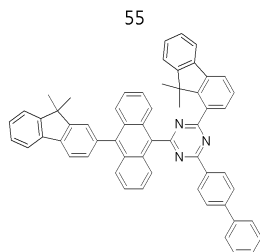
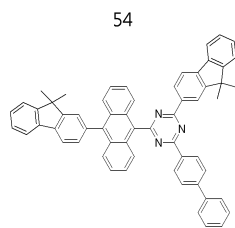
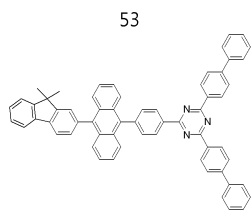
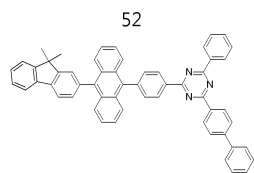
[0046]



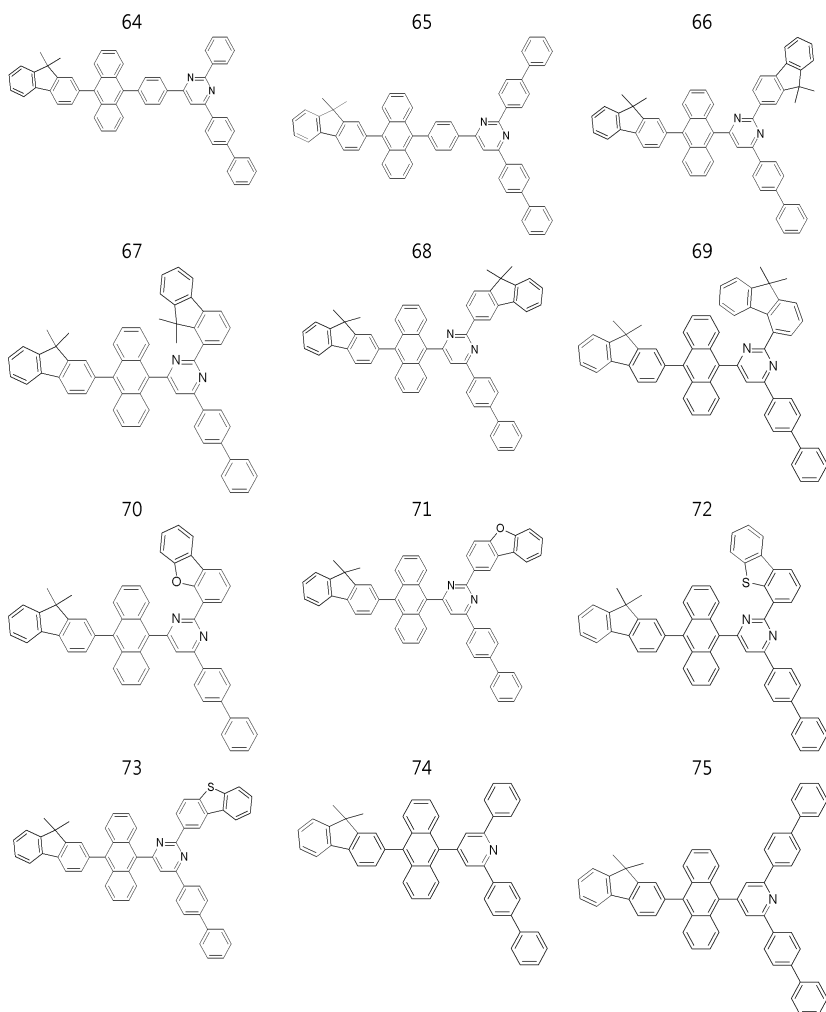
[0047]



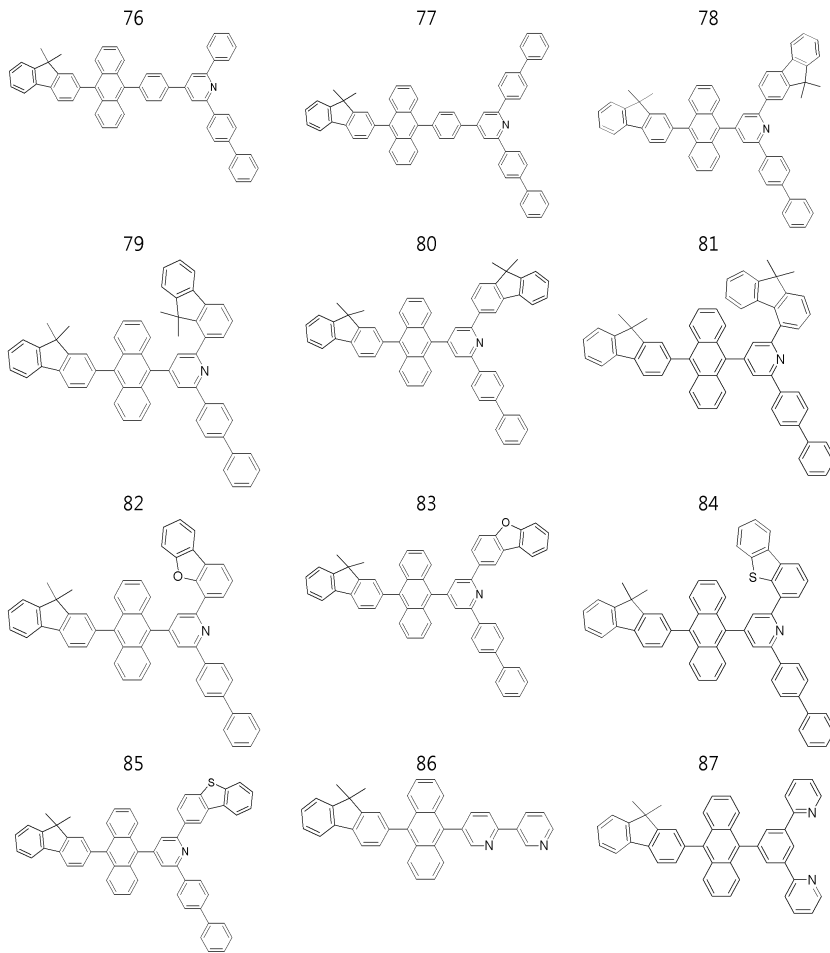
[0048]



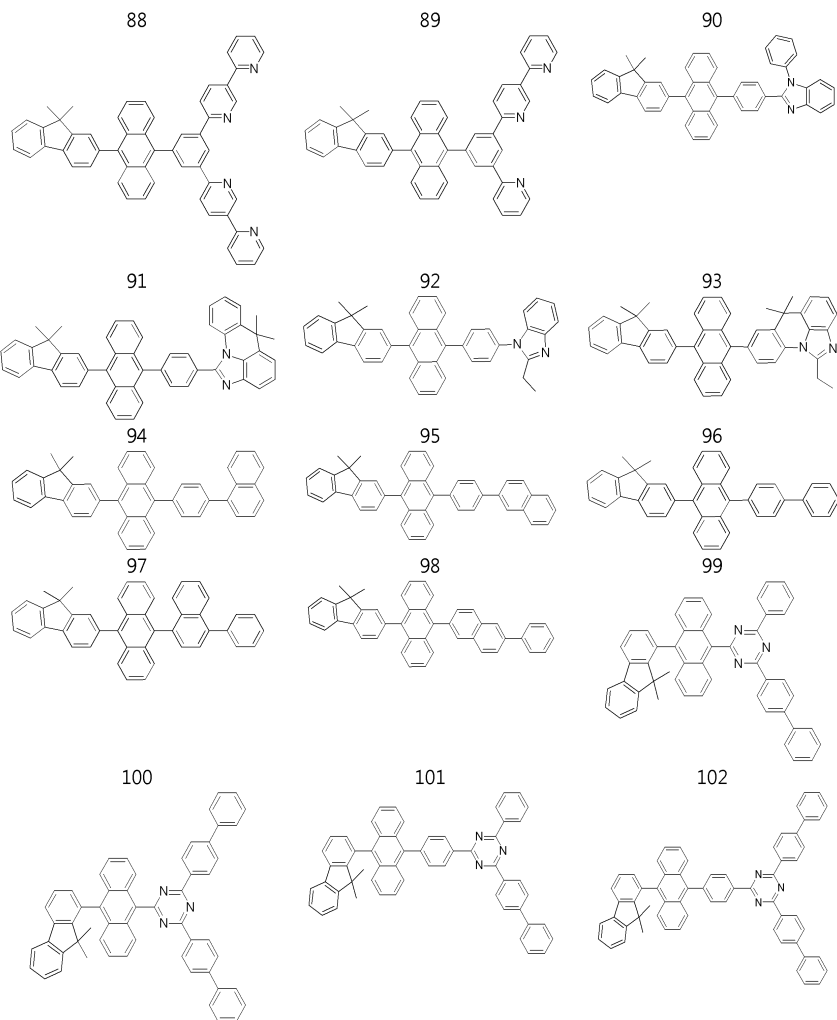
[0049]



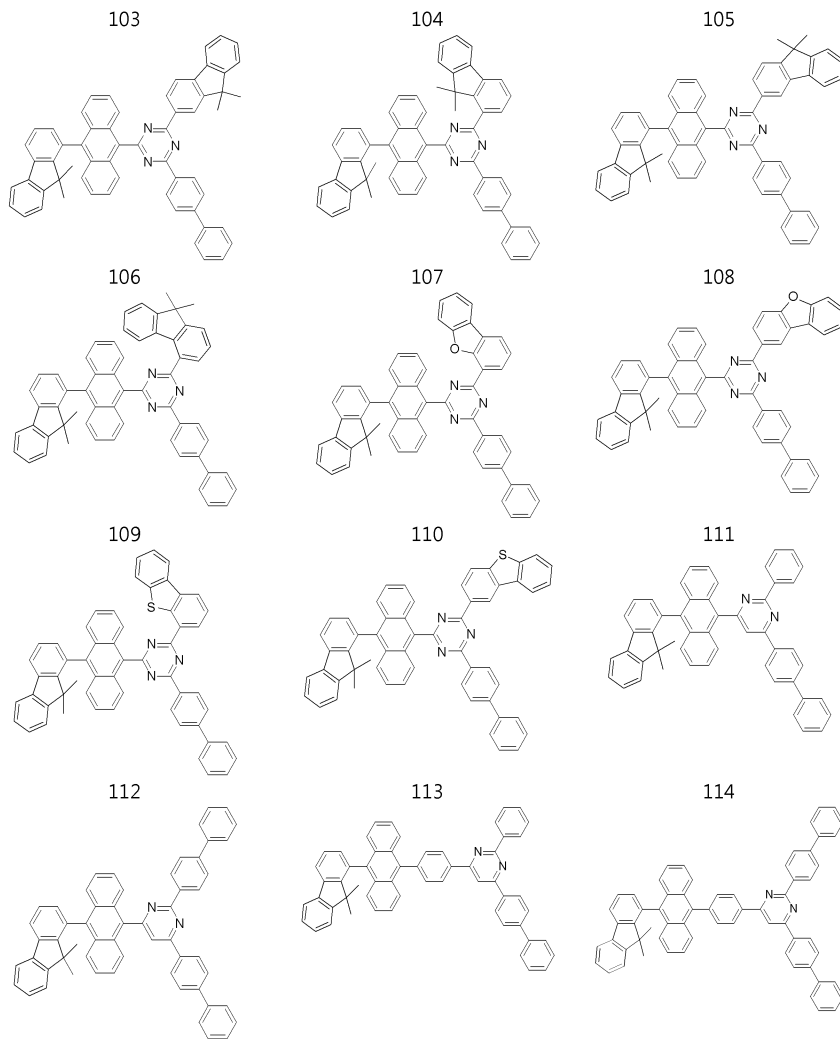
[0050]



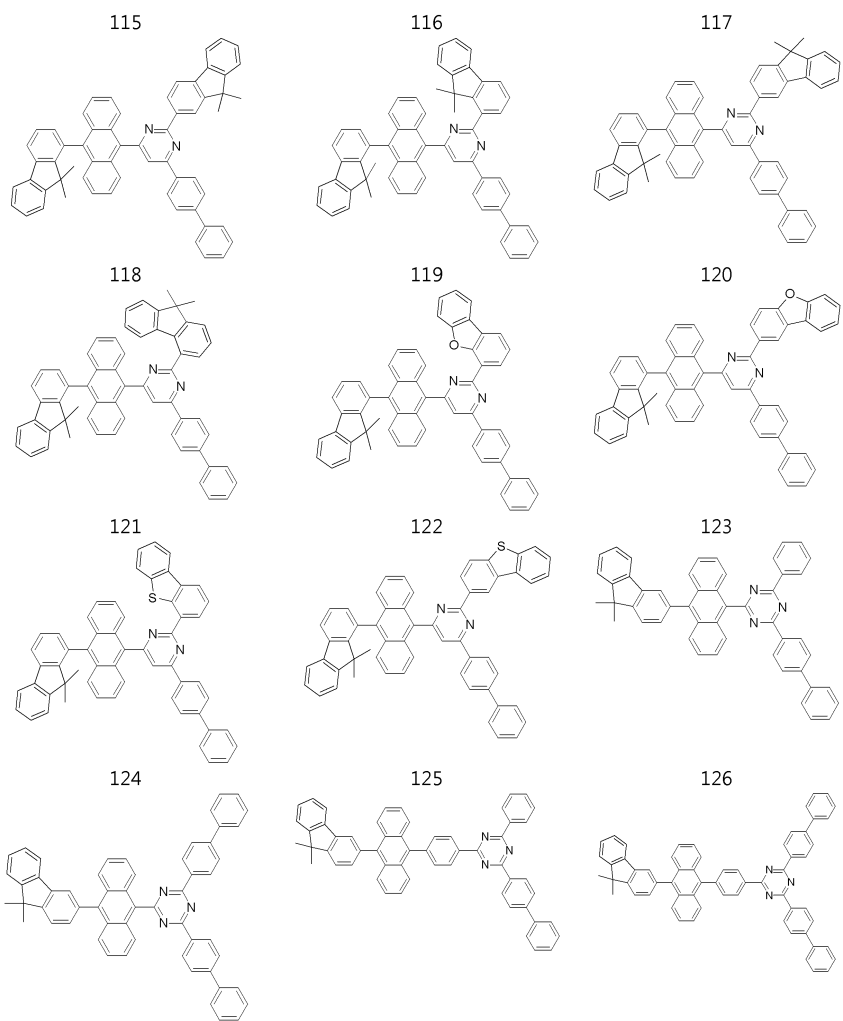
[0051]



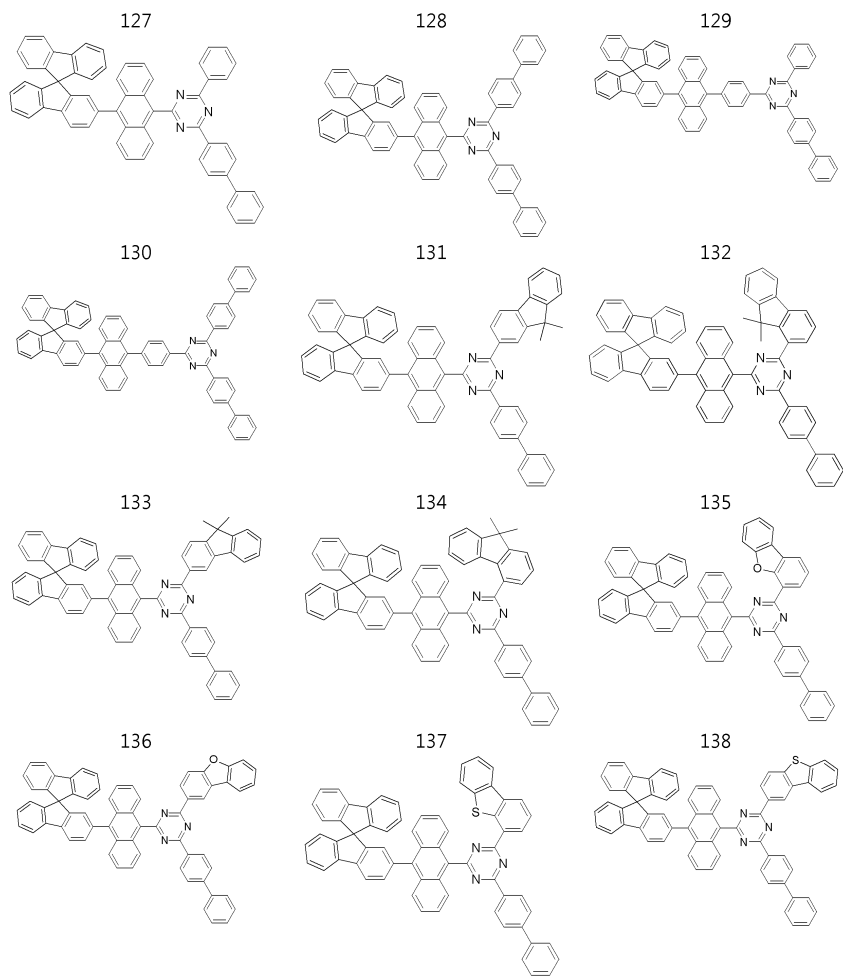
[0052]



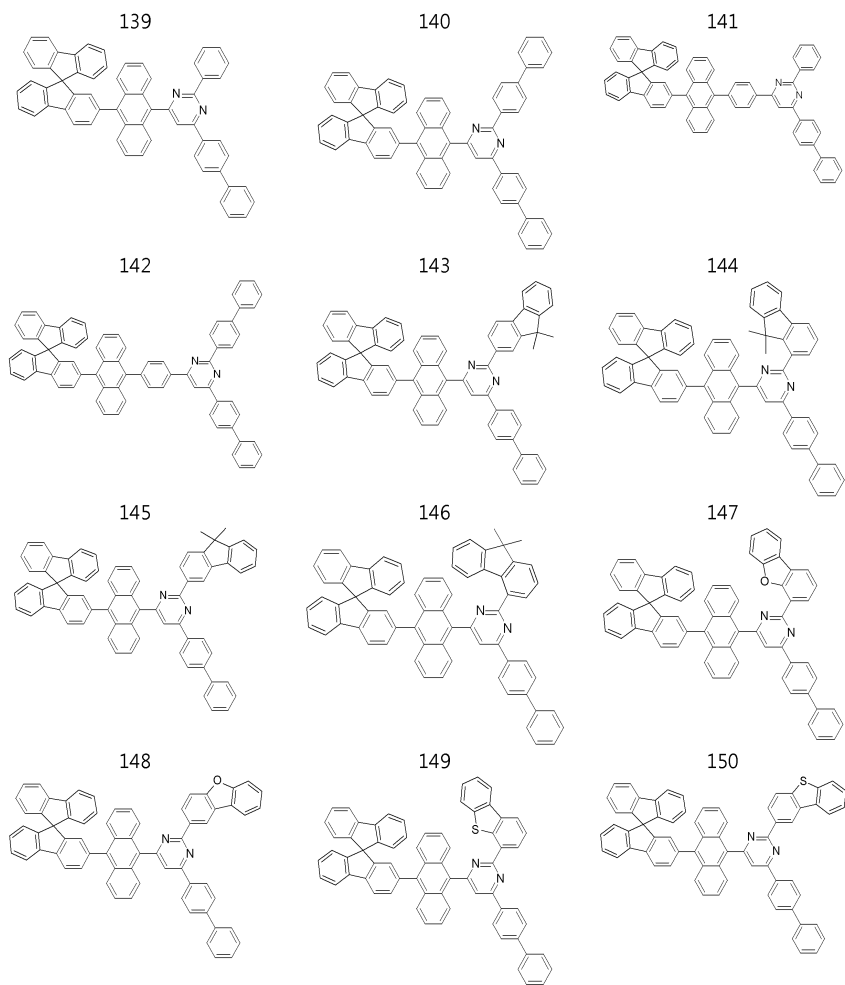
[0053]



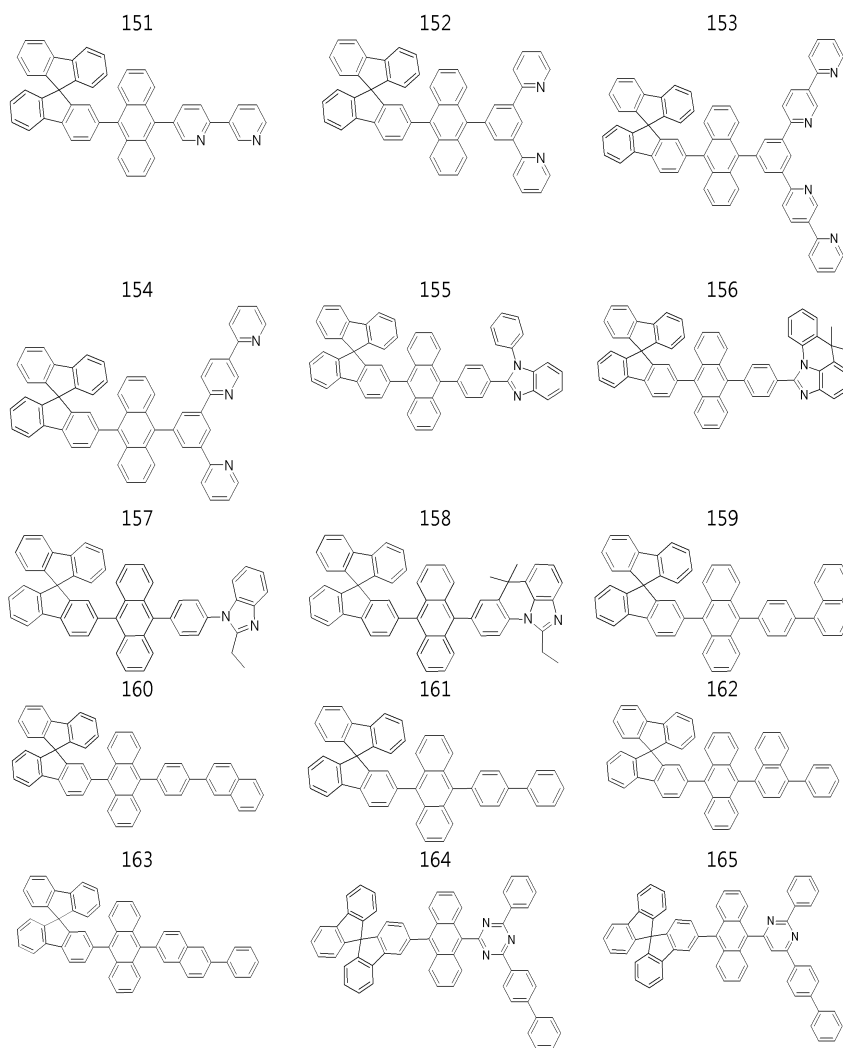
[0054]



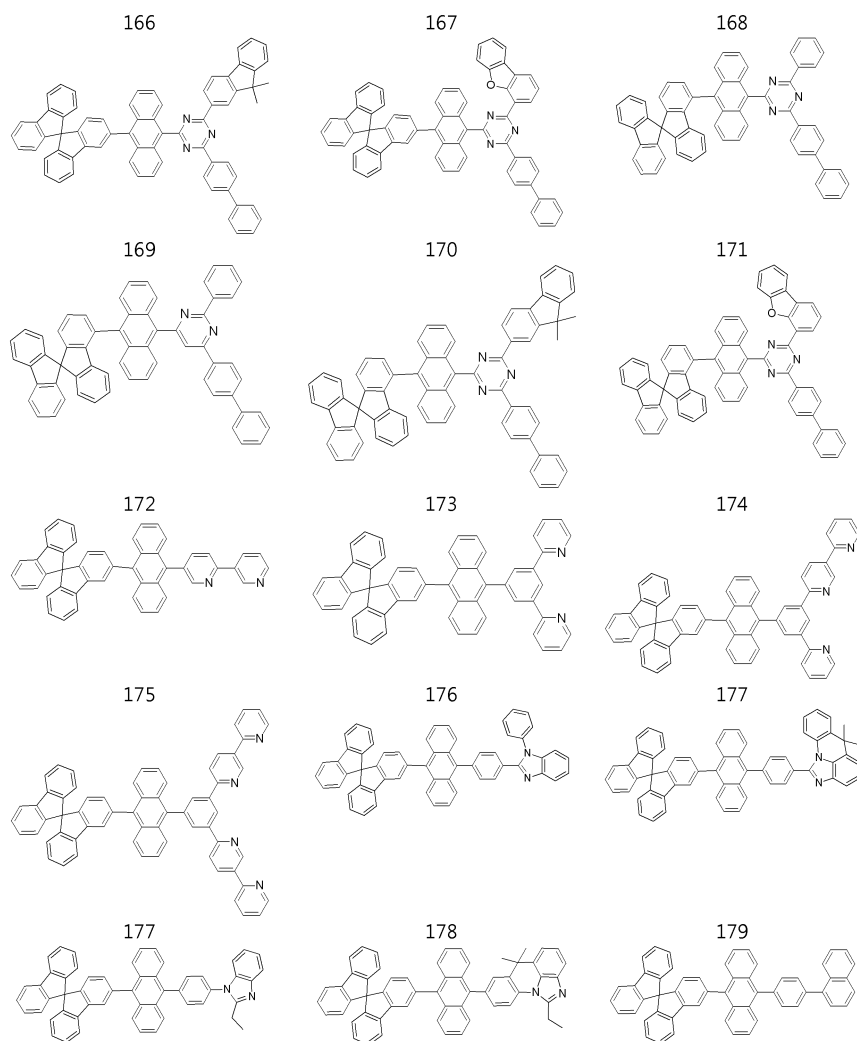
[0055]



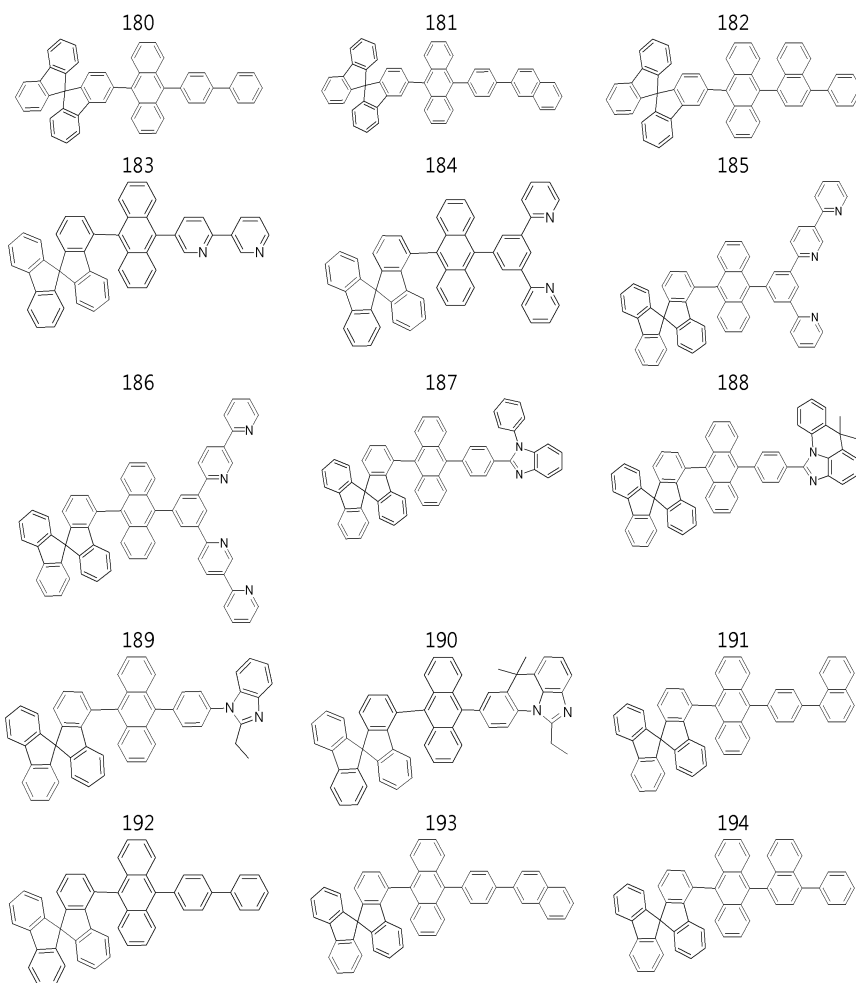
[0056]



[0057]



[0058]



[0059]

[0061]

상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 유기발광 화합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기전계발광소자의 제조시 사용되는 정공 주입층 물질, 정공 수송층 물질, 발광층 물질 및 전자 수송층 물질에 사용되는 치환기를 상기 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 제조할 수 있으며, 특히, 본 발명에 따른 [화학식 I]의 화합물을 단독으로 전자수송층 물질로 채용하거나, 전자수송층을 복수층으로 설계한 후에, 종래 전자수송층 물질과 함께 복수의 전자수송층으로 적용할 경우 소자의 발광효율 및 수명 특성을 더욱 향상시킬 수 있다.

[0063]

본 발명에 따른 유기발광 화합물은 통상의 제조방법에 따라 유기전계발광소자에 적용할 수 있다.

[0064]

본 발명의 하나의 실시예에 따른 유기전계발광소자는 제1 전극과 제2 전극 및 이 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 구조로 이루어질 수 있으며, 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 소자의 유기물층에 사용한다는 것을 제외하고는 통상의 소자의 제조 방법 및 재료를 사용하여 제조될 수 있다.

[0066]

본 발명에 따른 유기전계발광소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 이에 한정되지 않고 더 적은 수 또는 더 많은 수의 유기물층을 포함할 수도 있다.

[0067]

따라서, 본 발명에 따른 유기전계발광소자에서, 상기 유기물층은 전자주입층, 전자수송층, 및 전자주입 및 전자수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 [화학식 I]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함할 수 있다.

- [0069] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 전자 소자의 구조는 도 1 내지 5에 예시되어 있다.
- [0070] 도 1에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공주입층(3), 정공수송층(4), 발광층(5), 전자수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 I]로 표시되는 화합물은 상기 정공주입층(3), 정공수송층(4), 발광층(5) 또는 전자수송층(6)에 포함될 수 있으며, 특히, 상기 전자수송층(6)은 제1 전자수송층 및 제2 전자수송층으로 이루어질 수 있으며, 제2 전자수송층은 종래 전자수송 화합물을, 제1 전자수송층은 상기 [화학식 I]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0071] 또한, 도 2에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공주입층(3), 정공수송층(4), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 I]로 표시되는 화합물은 상기 정공주입층(3), 정공수송층(4) 또는 전자수송층(6)에 포함될 수 있으며, 특히, 상기 전자수송층(6)은 제1 전자수송층 및 제2 전자수송층으로 이루어질 수 있으며, 제2 전자수송층은 종래 전자수송 화합물을, 제1 전자수송층은 상기 [화학식 I]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0072] 또한, 도 3에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공수송층(4), 발광층(5), 전자수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 I]로 표시되는 화합물은 상기 정공수송층(4), 발광층(5) 또는 전자수송층(6)에 포함될 수 있으며, 특히, 상기 전자수송층(6)은 제1 전자수송층 및 제2 전자수송층으로 이루어질 수 있으며, 제2 전자수송층은 종래 전자수송 화합물을, 제1 전자수송층은 상기 [화학식 I]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0073] 또한, 도 4에는 기관(1) 위에 양극(2), 발광층(5), 전자수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 I]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5) 또는 전자수송층(6)에 포함될 수 있으며, 특히, 상기 전자수송층(6)은 제1 전자수송층 및 제2 전자수송층으로 이루어질 수 있으며, 제2 전자수송층은 종래 전자수송 화합물을, 제1 전자수송층은 상기 [화학식 I]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0074] 또한, 도 5에는 기관(1) 위에 양극(2), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 I]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5)에 포함될 수 있다.
- [0075] 본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기 [화학식 I]로 표시되는 화합물은 상기 전자수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0077] 예컨대, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기관 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다.
- [0078] 이와 같은 방법 외에도, 기관 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기전계발광소자를 만들 수도 있다. 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.
- [0079] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금, 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물, ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0080] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금, LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들

에만 한정되는 것은 아니다.

[0081] 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입받을 수 있는 물질로서, 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0082] 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0083] 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(AlQ_3), 카르바졸 계열 화합물, 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물, $BAIq$, 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물, 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물, 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자, 스피로(spiro) 화합물, 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

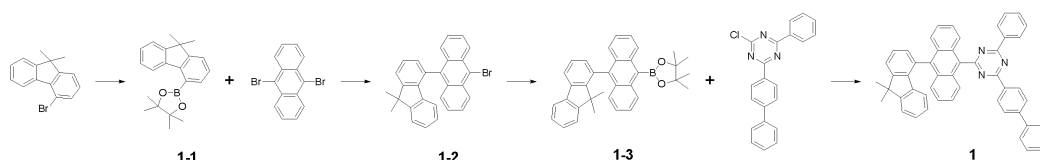
[0084] 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적으로 본 발명에 따른 [화학식 I]로 표시되는 유기발광 화합물일 수 있으며, 또는, 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물, AlQ_3 를 포함한 착물, 유기 라디칼 화합물, 히드록시플라톤-금속 착물 등일 수 있다. 본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기 종래의 전자수송 물질을 포함하는 제2 전자수송층과 본 발명에 따른 [화학식 I]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 제1 전자수송층으로 하는 복수의 층으로 설계할 수 있다.

[0085] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0086] 또한, 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 유기 태양 전지, 유기 감광체, 유기 트랜지스터 등을 비롯한 유기 전자 소자에서도 유기전계발광소자에 적용되는 것과 유사한 원리로 작용할 수 있다.

[0088] 이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 바람직한 화합물의 합성에 및 소자 실시예를 제시한다. 그러나, 하기의 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 이에 의하여 본 발명의 범위가 한정되는 것은 아니다.

[0090] 합성예 1 : 화합물 1의 합성



[0091]

[0093] (1) 중간체 1-1의 합성

[0094] 4-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (30 g, 0.076 mol, yurui), Bis(pinacolato)diboron (23.26 g, 0.09 mol, sigma aldrich), $Pd(dppf)Cl_2$ (2.79 g, 0.003 mol, sigma aldrich), potassium acetate (22.47 g, 0.23 mol, sigma aldrich)에 1,4-dioxane 500 mL를 넣고 3시간 동안 환류 시키며 교반하였다. 반응 종료 후, 반응 혼합물을 냉각시킨 다음 증류수로 상기 반응물을 세척하고 메틸렌클로라이드로 추출하여 유기층을 모았다. 모아진 유기층을 무수 황산 마그네슘으로 건조한 다음, 감압 증류를 이용하여 용매를 제거하였다. 얻어진 잔류물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피를 통하여 중간체 1-1을 20 g(수율 82%) 수득하였다.

[0095] LC/MS : $m/z=320[(M+1)^+]$

[0097] (2) 중간체 1-2의 합성

[0098] 중간체 1-1 (19.7 g, 0.044 mol), 9,10-dibromoanthracene (11 g, 0.044 mol, sigma aldrich), $Pd(PPh_3)_4$ (2.564 g, 0.002 mol, sigma aldrich)에 THF 300 mL와 2M potassium carbonate 100 mL를 넣고 4시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후, 반응 혼합물을 냉각시킨 다음 증류수로 상기 반응물을 세척하고 에틸아세테이트로 추출하여 유기층을 모았다. 모아진 유기층을 무수 황산 마그네슘으로 건조한 다음, 감압 증류를 이용하여 용매를 제거하였다. 얻어진 잔류물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피를 통하여 중간체 1-2을 15 g(수율 75.3%) 수득하였다.

[0099] LC/MS : $m/z=496[(M+1)^+]$

[0101] (3) 중간체 1-3의 합성

[0102] 상기 중간체 1-1의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 1-3, 15 g(수율 87%) 수득하였다.

[0103] LC/MS : $m/z=448[(M+1)^+]$

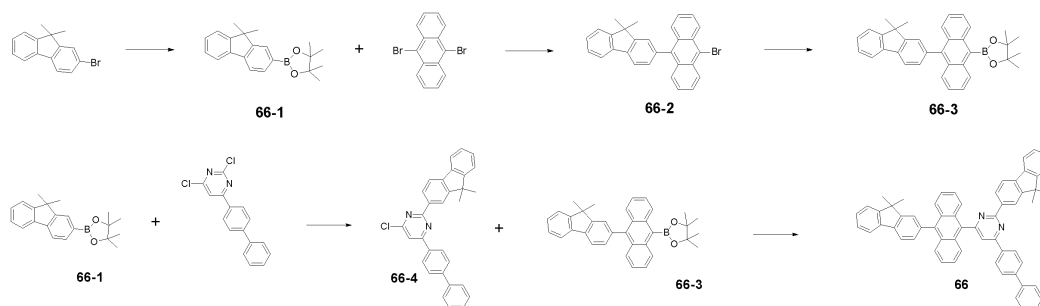
[0105] (4) 화합물 1의 합성

[0106] 2-(biphenyl-4-yl)-4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine (15 g, 0.069 mol), 중간체 1-3 (13.2 g, 0.083 mol), $Pd(PPh_3)_4$ (tetrakis(triphenylphosphine) palladium(0)) (4.01 g, 0.0034 mol, sigma aldrich), XPhos (3.31 g, 0.007 mol, sigma aldrich)을 반응 플라스크에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. 톨루엔 200 mL를 상기 반응 플라스크에 넣어 화합물들을 용해시킨 다음, 에탄올 50 mL 및 2.0M K_2CO_3 수용액 50 mL를 첨가하고 3 시간 동안 환류 시키며 교반하였다. 반응 종료 후, 반응 혼합물을 냉각시킨 다음 증류수로 상기 반응물을 세척하고 메틸렌클로라이드로 추출하여 유기층을 모았다. 모아진 유기층을 무수 황산 마그네슘으로 건조한 다음, 감압 증류를 이용하여 용매를 제거하였다. 얻어진 잔류물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피를 통하여 화합물 1을 28 g(수율 60%) 수득하였다.

[0107] 1H -NMR (400 MHz, $CDCl_3$) : δ ppm, 8.28 (d, 2H), 7.91 (d, 4H), 7.87(d, 1H), 7.85(d, 2H), 7.63 (d, 1H), 7.55 (d, 1H), 7.52 (d, 2H), 7.51 (m, 5H), 7.41 (t, 2H), 7.39 (m, 4H), 7.38 (m, 3H), 7.25 (d, 2H), 1.72 (s, 6H)

[0108] LC/MS : $m/z=677[(M+1)^+]$

[0110] 합성예 2 : 화합물 66의 합성



[0111]

[0113] (1) 중간체 66-1의 합성

[0114] 상기 중간체 1-1의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 66-1, 25 g (수율 : 77 %)을 얻었다.

[0115] LC/MS : $m/z=320[(M+1)^+]$

[0117] (2) 중간체 66-2의 합성

[0118] 상기 중간체 1-2의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 66-2, 15 g (수율 : 82 %)을 얻었다.

[0119] LC/MS : $m/z=448[(M+1)^+]$

[0121] (3) 중간체 66-3의 합성

[0122] 상기 중간체 1-3의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 66-3, 15 g (수율 : 87 %)을 얻었다.

[0123] LC/MS : $m/z=496[(M+1)^+]$

[0125] (4) 중간체 66-4의 합성

[0126] 상기 화합물 1-4의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 66-4, 20 g (수율 : 60 %)을 얻었다.

[0127] LC/MS : $m/z=458[(M+1)^+]$

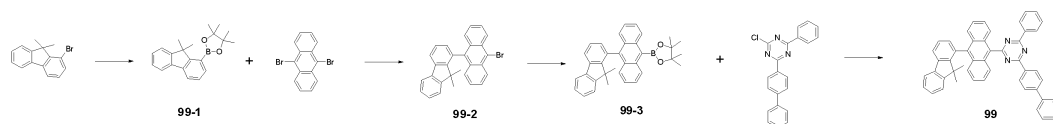
[0129] (5) 화합물 66의 합성

[0130] 상기 화합물 1의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 66, 27 g (수율 : 62 %)을 얻었다.

[0131] $^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) : δ ppm, 8.30 (d, 2H), 8.23 (s, 1H), 7.93 (d, 2H), 7.91 (d, 4H), 7.87 (d, 2H), 7.85 (d, 2H), 7.77 (d, 2H), 7.63 (d, 2H), 7.55 (d, 2H), 7.52 (d, 2H), 7.51 (t, 2H), 7.41 (t, 1H), 7.39 (m, 6H), 7.28 (t, 2H), 1.72 (s, 12H)

[0132] LC/MS : $m/z=792[(M+1)^+]$

[0134] 합성예 3 : 화합물 99의 합성



[0135]

[0137] (1) 중간체 99-1의 합성

[0138] 상기 중간체 1-1의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 99-1, 20 g (수율 : 61 %)을 얻었다.

[0139] LC/MS : $m/z=320[(M+1)^+]$

[0141] (2) 중간체 99-2의 합성

[0142] 상기 중간체 1-2의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 99-2, 14.2 g (수율 : 65.3 %)을 얻었다.

[0143] LC/MS : $m/z=448[(M+1)^+]$

[0145] (3) 중간체 99-3의 합성

[0146] 상기 중간체 1-3의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 99-3, 12.3 g (수율 : 77 %)을 얻었다.

[0147] LC/MS : $m/z=496[(M+1)^+]$

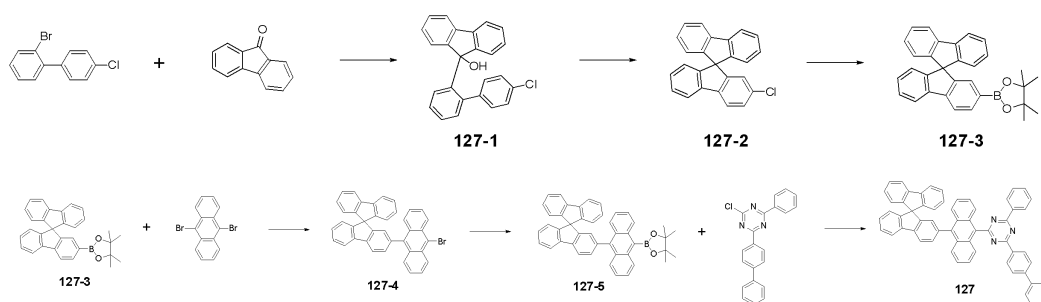
[0149] (4) 화합물 99의 합성

[0150] 상기 화합물 1의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 99, 19.2 g (수율 : 65 %)을 얻었다.

[0151] $^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) : δ ppm, 8.28 (d, 2H), 7.91 (d, 4H), 7.87 (d, 1H), 7.85 (d, 2H), 7.83 (d, 1H), 7.55 (d, 2H), 7.52 (d, 2H), 7.51 (t, 4H), 7.44 (m, 3H), 7.39 (t, 4H), 7.38 (m, 2H), 7.25 (d, 2H), 1.72 (s, 6H)

[0152] LC/MS : $m/z=677[(M+1)^+]$

[0154] 합성예 4 : 화합물 127의 합성



[0155]

[0157] (1) 중간체 127-1의 합성

[0158] 2-bromo-4'-chlorobiphenyl (30 g, 0.112 mol, Yurui)을 반응 플라스크에 넣고 진공 건조한 후 질소가스를 채웠다. THF 300 mL를 상기 반응 플라스크에 넣어 화합물들을 용해 시킨 다음 드라이아이스를 사용하여 -78°C 까지 온도를 낮추었다. 2.5M n-BuLi (7.9 g, 0.123 mol, sigma aldrich)을 플라스크에 천천히 넣어 준 후, 동일 온도상에서 1시간 교반하였다. THF에 녹인 9H-fluoren-9-one (20.2 g, 0.112 mol, sigma aldrich)을 위 반응 플라스크에 천천히 넣어주었고, -78°C 에서 1시간 교반 후 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 증류수로 상기 반응물을 킨칭하며 30분동안 교반한 후 에틸아세테이트로 추출하여 유기층을 모았다. 모아진 유기층을 무수 황산 마그네슘으로 건조한 다음, 감압 증류를 이용하여 용매를 제거하였다. 얻어진 잔류물을 메탄올로 세척한 후 톨루엔을 이용하여 재결정하여 중간체 127-1, 35 g(수율 76%) 수득하였다.

[0159] LC/MS : $m/z=368[(M+1)^+]$

[0161] (2) 중간체 127-2의 합성

[0162] 중간체 127-1 (35 g, 0.094 mol)에 acetic acid (500 mL)와 HCl (40 mL)를 넣고 2시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후, 반응 혼합물을 냉각시킨 다음 증류수로 상기 반응물을 세척하고 필터하였다. 얻어진 잔류물을 메탄올과 헥산으로 세척하여 중간체 127-2, 31 g(수율 93%) 수득하였다.

[0163] LC/MS : $m/z=350[(M+1)^+]$

[0165] (3) 중간체 127-3의 합성

[0166] 중간체 127-2 (30 g, 0.085 mol), Bis(pinacolato)diboron (26.05 g, 0.1 mol, sigma aldrich), Pd(dppf)Cl₂ (2.62 g, 0.003 mol, sigma aldrich), XPhos (3.424 g, 0.007 mol, sigma aldrich), potassium acetate (25.17 g, 0.26 mol, sigma aldrich)에 1,4-dioxane 600 mL를 넣고 3시간 동안 환류 시키며 교반하였다. 반응 종료 후, 반응 혼합물을 냉각시킨 다음 증류수로 상기 반응물을 세척하고 메틸렌클로라이드로 추출하여 유기층을 모았다. 모아진 유기층을 무수 황산 마그네슘으로 건조한 다음, 감압 증류를 이용하여 용매를 제거하였다. 얻어진 잔류물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피를 통하여 중간체 127-3, 32 g(수율 85%) 수득하였다.

[0167] LC/MS : $m/z=442[(M+1)^+]$

[0169] (4) 중간체 127-4의 합성

[0170] 상기 중간체 1-1의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 127-4, 30 g (수율 : 76.6 %)을 얻었다.

[0171] LC/MS : $m/z=571[(M+1)^+]$

[0173] (5) 중간체 127-5의 합성

[0174] 상기 중간체 1-3의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 127-5, 28.5 g (수율 : 88 %)을 얻었다.

[0175] LC/MS : $m/z=618[(M+1)^+]$

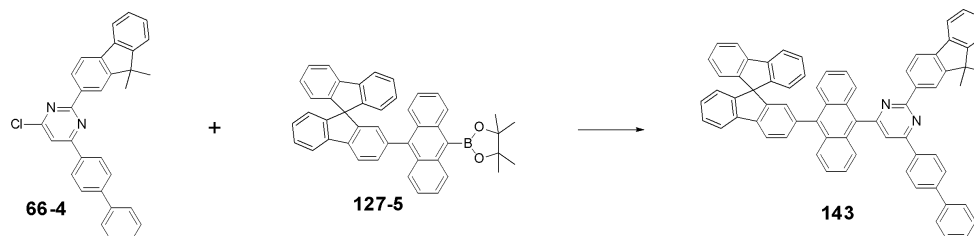
[0177] (6) 화합물 127의 합성

[0178] 상기 화합물 1의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 127, 16.8 g (수율 : 65.1 %)을 얻었다.

[0179] ¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃) : δ ppm, 8.28 (d, 2H), 7.93 (d, 1H), 7.91 (d, 4H), 7.87 (d, 1H), 7.85 (d, 2H), 7.77 (d, 1H), 7.75 (d, 2H), 7.63(d, 1H), 7.55 (d, 1H), 7.52 (d, 2H), 7.51 (d, 4H), 7.41 (t, 2H), 7.39 (t, 4H), 7.35 (m, 3H), 7.28 (t, 1H), 7.25 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.16 (d, 2H)

[0180] LC/MS : $m/z=799[(M+1)^+]$

[0182] 합성예 5 : 화합물 143의 합성



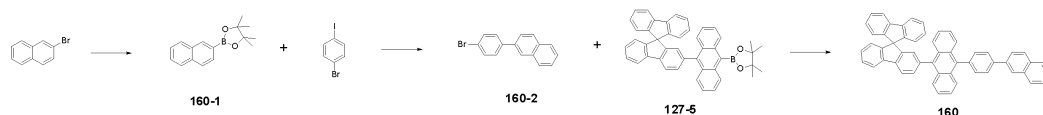
[0183]

[0185] 중간체 66-4, 127-5를 이용하여, 상기 화합물 1의 합성과 동일한 방법으로 화합물 143, 12.3 g (수율 : 61.7 %)을 얻었다.

[0186] $^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) : δ ppm, 8.30 (d, 2H), 8.23 (s, 1H), 7.93 (d, 2H), 7.91 (d, 4H), 7.87 (d, 2H), 7.85 (d, 2H), 7.77 (d, 2H), 7.75 (d, 2H), 7.63 (d, 2H), 7.55 (d, 2H), 7.52 (d, 2H), 7.41 (m, 3H), 7.38 (m, 6H), 7.35 (d, 2H), 7.28 (t, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.16 (t, 2H), 1.72 (s, 6H)

[0187] LC/MS : $m/z=914[(M+1)^+]$

[0189] 합성예 6 : 화합물 160의 합성



[0190]

[0192] (1) 중간체 160-1의 합성

[0193] 상기 중간체 1-1의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 160-1, 29.8 g (수율 : 81%)을 얻었다.

[0194] LC/MS : $m/z=254[(M+1)^+]$

[0196] (2) 중간체 160-2의 합성

[0197] 상기 중간체 1-2의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 160-2, 34.4g (수율 : 86.6%)을 얻었다.

[0198] LC/MS : $m/z=282[(M+1)^+]$

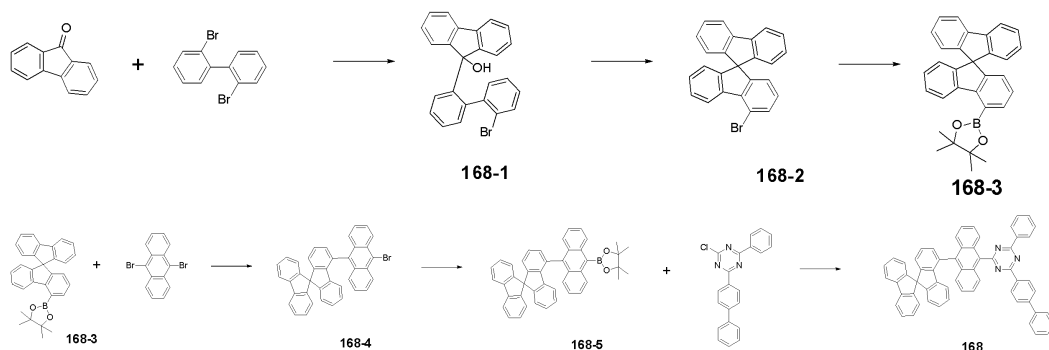
[0200] (3) 화합물 160의 합성

[0201] 상기 중간체 1-2의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 160, 15.4 g (수율 : 78.7%)을 얻었다.

[0202] $^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) : δ ppm, 8.0 (d, 2H), 7.93 (d, 2H), 7.91 (d, 4H), 7.77 (d, 2H), 7.75 (d, 2H), 7.73 (d, 2H), 7.59 (t, 2H), 7.55 (d, 2H), 7.39 (t, 4H), 7.35 (m, 3H), 7.28 (t, 1H), 7.25 (d, 4H), 7.16 (m, 4H)

[0203] LC/MS : $m/z=694[(M+1)^+]$

[0205] 합성예 7 : 화합물 168의 합성



[0206]

[0208] (1) 중간체 168-1의 합성

[0209] 상기 중간체 1-1의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 168-1, 22.3 g (수율 : 85%)을 얻었다.

[0210] LC/MS : $m/z=412[(M+1)^+]$

[0212] (2) 중간체 168-2의 합성

[0213] 상기 중간체 127-2의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 168-2, 17.7 g (수율 : 93%)을 얻었다.

[0214] LC/MS : $m/z=394[(M+1)^+]$

[0216] (3) 중간체 168-3의 합성

[0217] 상기 중간체 127-3의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 168-3, 14.6 g (수율 : 87%)을 얻었다.

[0218] LC/MS : $m/z=442[(M+1)^+]$

[0220] (4) 중간체 168-4의 합성

[0221] 상기 중간체 1-2의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 168-4, 12.6 g (수율 : 68.3%)을 얻었다.

[0222] LC/MS : $m/z=570[(M+1)^+]$

[0224] (5) 중간체 168-5의 합성

[0225] 상기 중간체 1-3의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 168-5, 8.7 g (수율 : 80%)을 얻었다.

[0226] LC/MS : $m/z=618[(M+1)^+]$

[0228] (6) 화합물 168의 합성

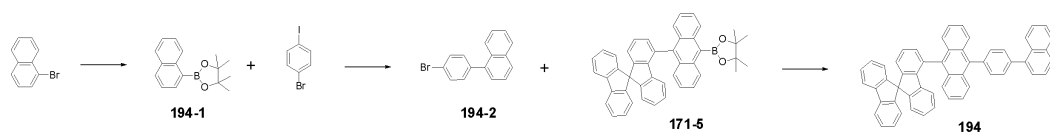
[0229] 상기 화합물 1의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 168, 13.9 g (수율 : 63%)을 얻었다.

[0230] $^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) : δ ppm, 8.28 (d, 2H), 7.91 (d, 4H), 7.85 (d, 3H), 7.75 (d, 2H), 7.55 (d, 2H), 7.52 (d, 2H), 7.51 (d, 5H), 7.41 (t, 2H), 7.39 (t, 4H), 7.35 (m, 3H), 7.28 (m, 2H), 7.25 (d, 2H), 7.16 (m, 4H)

[0231] LC/MS : $m/z=799[(M+1)^+]$

[0233] 합성예 8 : 화합물 191의 합성

[0234]



[0236] (1) 중간체 191-1의 합성

[0237] 상기 중간체 1-1의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 191-1, 28.7 g (수율 : 78%)을 얻었다.

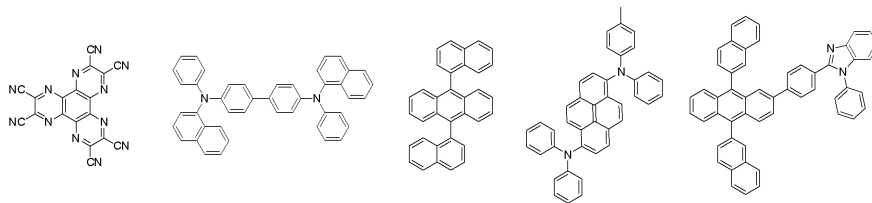
- [0238] LC/MS : $m/z=254[(M+1)^+]$
- [0240] (2) 중간체 191-2의 합성
- [0241] 상기 중간체 1-2의 합성과 동일한 방법을 이용하여 중간체 191-2, 30.9 g (수율 : 64.8%)을 얻었다.
- [0242] LC/MS : $m/z=282[(M+1)^+]$
- [0244] (3) 화합물 191의 합성
- [0245] 상기 중간체 1-2의 합성과 동일한 방법을 이용하여 화합물 191, 17.4g (수율 : 70.7%)을 얻었다.
- [0246] $^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) : δ ppm, 8.42 (d, 2H), 8.04 (d, 2H), 7.91 (d, 4H), 7.75 (d, 3H), 7.61 (m, 2H), 7.55 (m, 4H), 7.39 (t, 4H), 7.35 (m, 3H), 7.28 (m, 2H), 7.25 (d, 4H), 7.16 (m, 4H)
- [0247] LC/MS : $m/z=694[(M+1)^+]$
- [0249] 소자 실시예
- [0250] 본 발명에 따른 실시예에서, ITO 투명 전극은 $25\text{ mm} \times 25\text{ mm} \times 0.7\text{ nm}$ 의 유리 기판 위에, ITO 투명 전극이 부착된 ITO 유리 기판을 이용하여, 발광 면적이 $2\text{ mm} \times 2\text{ mm}$ 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 $1 \times 10^{-6}\text{ torr}$ 가 되도록 한 후 유기물을 상기 ITO 위에 하기 구조로 유기물과 금속을 증착하였다.
- [0252] 소자 실시예 1 내지 12
- [0253] 본 발명에 따른 [화학식 I]로 구현되는 화합물을 제1 전자수송층의 화합물로 하여, 하기와 같은 소자 구조를 갖는 청색 발광 유기전계발광소자를 제조하여, 발광 효율을 포함한 발광 특성을 측정하였다.
- [0254] ITO / 정공주입층(HAT_CN 5 nm) / 정공수송층(a-NPB 100 nm) / 발광층 (20 nm) / 제1 전자수송층(10 nm) / 제2 전자수송층 (201:LiQ 20 nm) / LiF(1 nm) / Al (100 nm)
- [0256] ITO 투명 전극에 정공주입층을 형성하기 위해 [HAT_CN]을 이용하여 정공주입층의 두께를 5 nm로 진공 열증착 방법으로 형성하고, 이후 정공수송층을 a-NPB를 사용하여 성막하였고, 발광층에는 호스트 화합물로는 [BH1]을 사용하고, 도판트 화합물로는 [BD1]을 사용하여 두께가 20 nm 정도가 되도록 성막하였으며, 제1 전자수송층은 본 발명으로 구현되는 화학식 1, 16, 31, 66, 80, 99, 114, 127, 143, 160, 168, 191을 사용하여 10 nm의 두께로 성막하였다. 추가로 제2 전자수송층(하기 [201] 화합물 LiQ 50% 도핑) 20 nm 및 LiF 1 nm 및 알루미늄 100 nm를 증착법으로 성막하여, 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0258] 소자 비교예 1
- [0259] 소자 비교예 1을 위한 유기전계발광소자는 상기 실시예 1의 소자구조에서 전자수송층1를 사용하지 않는 것을 제외하고 동일하게 제작하였다.
- [0261] 실험예 1 : 소자 실시예 1 내지 12의 발광 특성
- [0262] 상기 실시예에 따라 제조된 유기전계발광소자는 Source meter (Model 237, Keithley)와 휘도계 (PR-650, Photo Research)를 이용하여 전압, 전류 및 발광 효율을 측정하였고, 전류 밀도 10 mA/cm^2 가 되는 전압을 "구동 전압"

으로 정의하여 비교하였다. 결과는 하기 [표 1]과 같다.

표 1

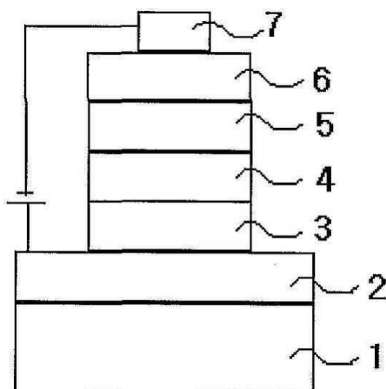
실시예	전자수송층1	V	cd/A	QE(%)	CIE _x	CIE _y
1	화학식 1	4.34	7.21	5.34	0.144	0.154
2	화학식 16	4.42	7.09	5.30	0.145	0.155
3	화학식 31	4.44	7.20	5.39	0.145	0.154
4	화학식 66	4.40	7.0	5.26	0.145	0.155
5	화학식 80	4.45	7.16	5.42	0.144	0.155
6	화학식 99	4.41	7.11	5.55	0.145	0.154
7	화학식 114	4.40	7.13	5.57	0.146	0.155
8	화학식 127	4.44	7.25	5.62	0.144	0.154
9	화학식 143	4.37	7.33	5.58	0.145	0.155
10	화학식 160	4.33	7.51	5.72	0.145	0.155
11	화학식 168	4.46	7.11	5.52	0.146	0.154
12	화학식 191	4.51	7.12	5.51	0.142	0.155
비교예	사용안함	4.45	5.2	4.51	0.147	0.156

상기 [표 1]에 나타난 결과를 살펴보면, 먼저, 본 발명에 따른 화합물을 제1 전자수송층으로 하여 소자에 적용한 경우에 종래 소자(비교예)에 비하여 발광 효율, 양자 효율 등 발광 특성이 현저히 우수함을 확인할 수 있다.

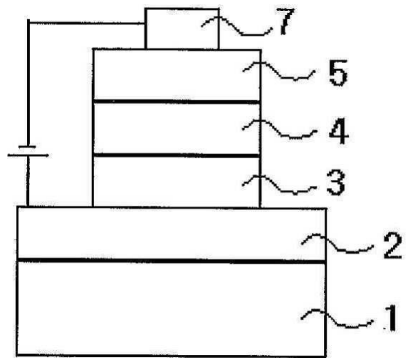


도면

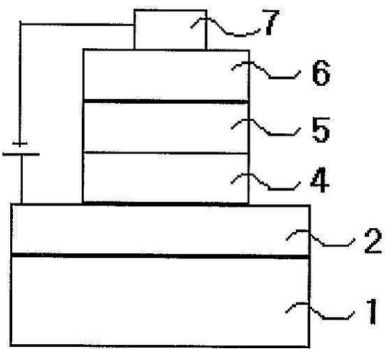
도면1



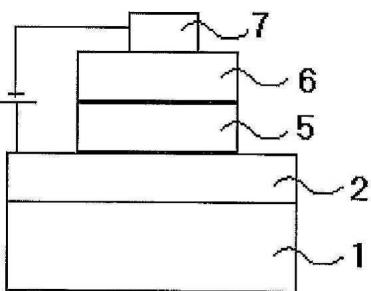
도면2



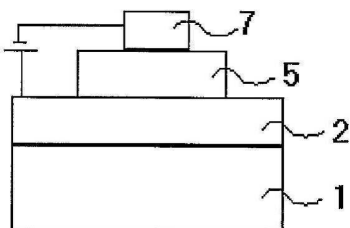
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	有机发光化合物和含有它们的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020180063709A	公开(公告)日	2018-06-12
申请号	KR1020160163811	申请日	2016-12-02
[标]申请(专利权)人(译)	株式会社P&H技术		
申请(专利权)人(译)	(注) 皮恩扎HI TECH		
[标]发明人	HYUN SEO YONG 현서용 JUNG SUNG OUK 정성욱 KIM DONG WON 김동원 IK HWAN KIM 김익환		
发明人	현서용 정성욱 김동원 김익환		
IPC分类号	C09K11/06 C07D251/24 C07D405/04 C07D409/04 H01L51/00		
CPC分类号	C09K11/06 C07D251/24 C07D405/04 C07D409/04 H01L51/0067 H01L51/0073 H01L51/0074 C09K2211/1059 C09K2211/1088 C09K2211/1096 C09K2211/1044		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及由下式 (I) 表示的有机发光化合物，并且当其用作电子传输层的电子传输材料时，可以实现量子效率和发光效率特性优异的有机电致发光器件。 配方I]

