



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2014-0035737  
 (43) 공개일자 2014년03월24일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C09K 11/06* (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2012-0102392  
 (22) 출원일자 2012년09월14일  
 심사청구일자 없음

(71) 출원인  
**롬엔드하스전자재료코리아유한회사**  
 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)  
 (72) 발명자  
**안희춘**  
 경기 수원시 영통구 영통로174번길 62, 105호 (망포동, 신흥빌라)  
**문두현**  
 경기 화성시 병점중앙로 204, 104동 101호 (진안동, 월드메르디앙1단지아파트)  
 (뒷면에 계속)  
 (74) 대리인  
**장훈**

전체 청구항 수 : 총 6 항

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

**(57) 요약**

본 발명은 신규한 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 발광 특성이 우수하고, 소자의 구동 전압을 저하시켜 전력 효율이 향상된 OLED 소자를 제조할 수 있다.

(72) 발명자

**김승애**

경기 안양시 동안구 학의로 146, 208동 205호 (관양동, 한가람삼성아파트)

**이경주**

서울 마포구 새창로8길 72, 210동 1001호 (도화동, 도화현대홈타운아파트)

**이태진**

서울 동대문구 한천로11길 10, 109동 903호 (답십리동, 동아아파트)

**권혁주**

서울 강남구 학동로68길 29, 105동 2003호 (삼성동, 삼성동힐스테이트1단지아파트)

**김봉욱**

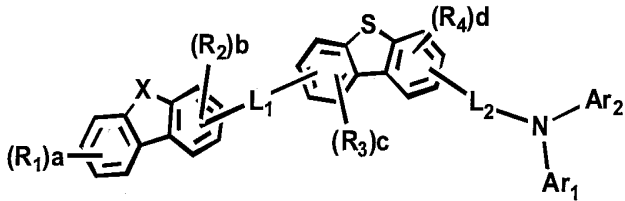
서울 강남구 삼성로111길 8, 208동 401호 (삼성동, 삼성동힐스테이트2단지아파트)

**특허청구의 범위**

**청구항 1**

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고;

Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

X는 산소 원자, 황 원자 또는 -CR<sub>5</sub>R<sub>6</sub>이고;

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>6</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, -NR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, -SiR<sub>13</sub>R<sub>14</sub>R<sub>15</sub>, -SR<sub>16</sub>, -OR<sub>17</sub>, -COR<sub>18</sub> 또는 -B(OR<sub>19</sub>)(OR<sub>20</sub>)이거나, 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원)단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고; 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

R<sub>11</sub> 내지 R<sub>20</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나, 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원)단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고;

a는 1 내지 4의 정수이며, 2 이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>1</sub>은 동일하거나 상이할 수 있고; b 내지 d는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며, 2 이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>2</sub>, 각각의 R<sub>3</sub> 및 각각의 R<sub>4</sub>는 동일하거나 상이할 수 있고;

상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

상기 헤테로시클로알킬은 O, S 및 N에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

**청구항 2**

제1항에 있어서, 상기 L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>6</sub>, 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>20</sub>에서 치환 (C1-C30)알킬, 치환 (C2-C30)알케닐, 치환 (C2-C30)알키닐, 치환 (C1-C30)알콕시, 치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 (C6-C30)아릴(렌), 및 치환 (5-30원)헤테로아릴(렌)의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환되거나 비치환된 (5-30원)헤테로아릴,

(5-30원)헤테로아릴로 치환되거나 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C1-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 화합물.

**청구항 3**

제1항에 있어서, 상기 L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C15) 아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이고;

상기 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub> 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고;

상기 R<sub>1</sub> 및 R<sub>6</sub>는 각각 독립적으로 수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C15)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원) 헤테로아릴, -NR<sub>11</sub>R<sub>12</sub> 또는 -SiR<sub>13</sub>R<sub>14</sub>R<sub>15</sub> 이고, 여기에서 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고, R<sub>13</sub> 내지 R<sub>15</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 화합물.

**청구항 4**

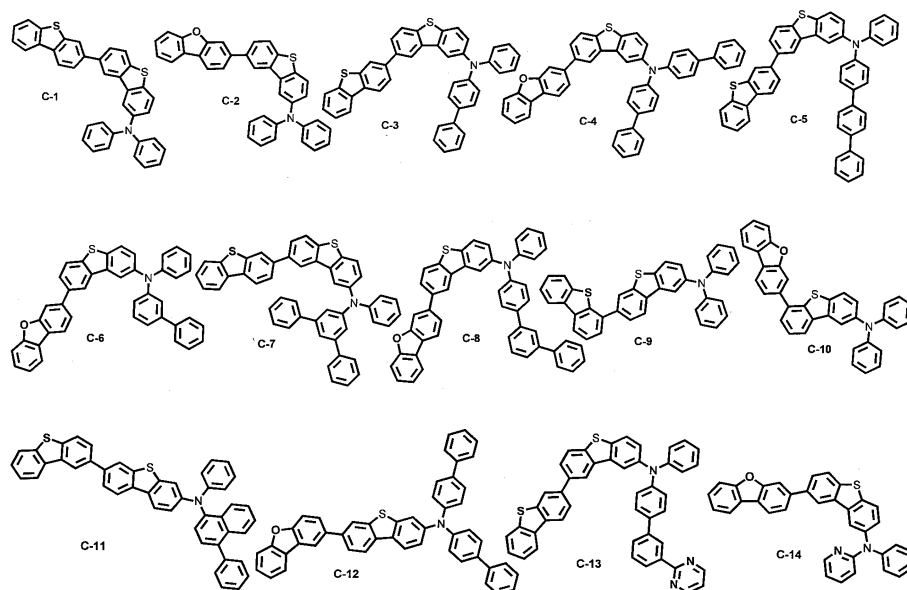
제1항에 있어서, 상기 L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>은 각각 독립적으로 단일결합, 비치환된 (C6-C15)아릴렌, (C6-C15)아릴로 치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 비치환된 (5-10원)헤테로아릴렌이고;

상기 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub> 은 각각 독립적으로 비치환된 (C6-C15)아릴; (C1-C6)알킬, (C6-C15)아릴, (C6-C15)아릴아미노 또는 (C6-C15)아릴(5-10원)헤테로아릴아미노로 치환된 (C6-C15)아릴; 비치환된 (5-10원)헤테로아릴; 또는 (C6-C15)아릴 또는 (C6-C15)아릴아미노로 치환된 (5-10원)헤테로아릴이고,

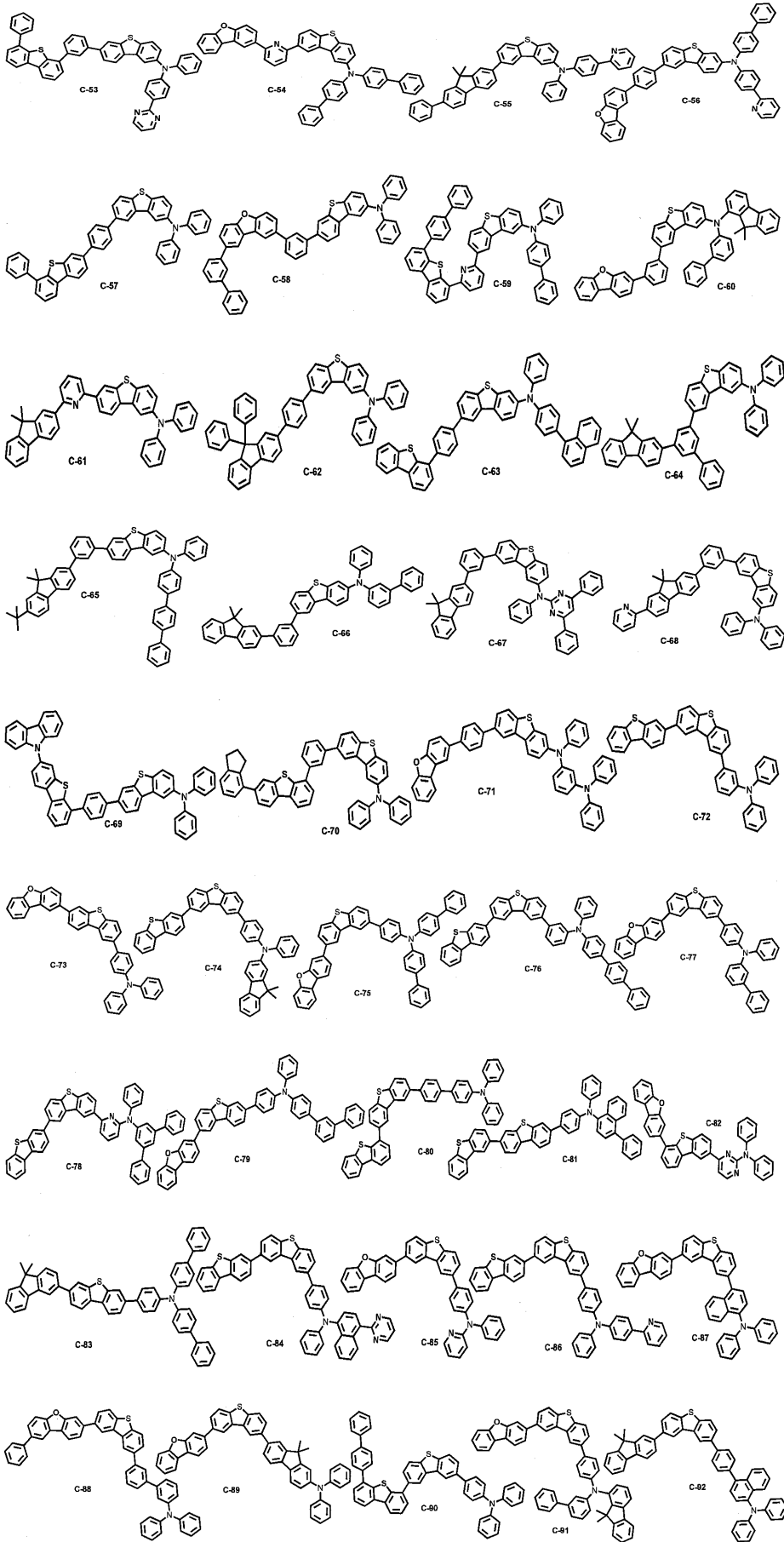
상기 R<sub>1</sub> 및 R<sub>6</sub>는 각각 독립적으로 수소, 할로젠, 비치환된 (C1-C6)알킬, 비치환된 (C6-C20)아릴, 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 또는 (C1-C6)알킬 또는 (C6-C15)아릴로 치환된 (C6-C20)아릴인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 화합물.

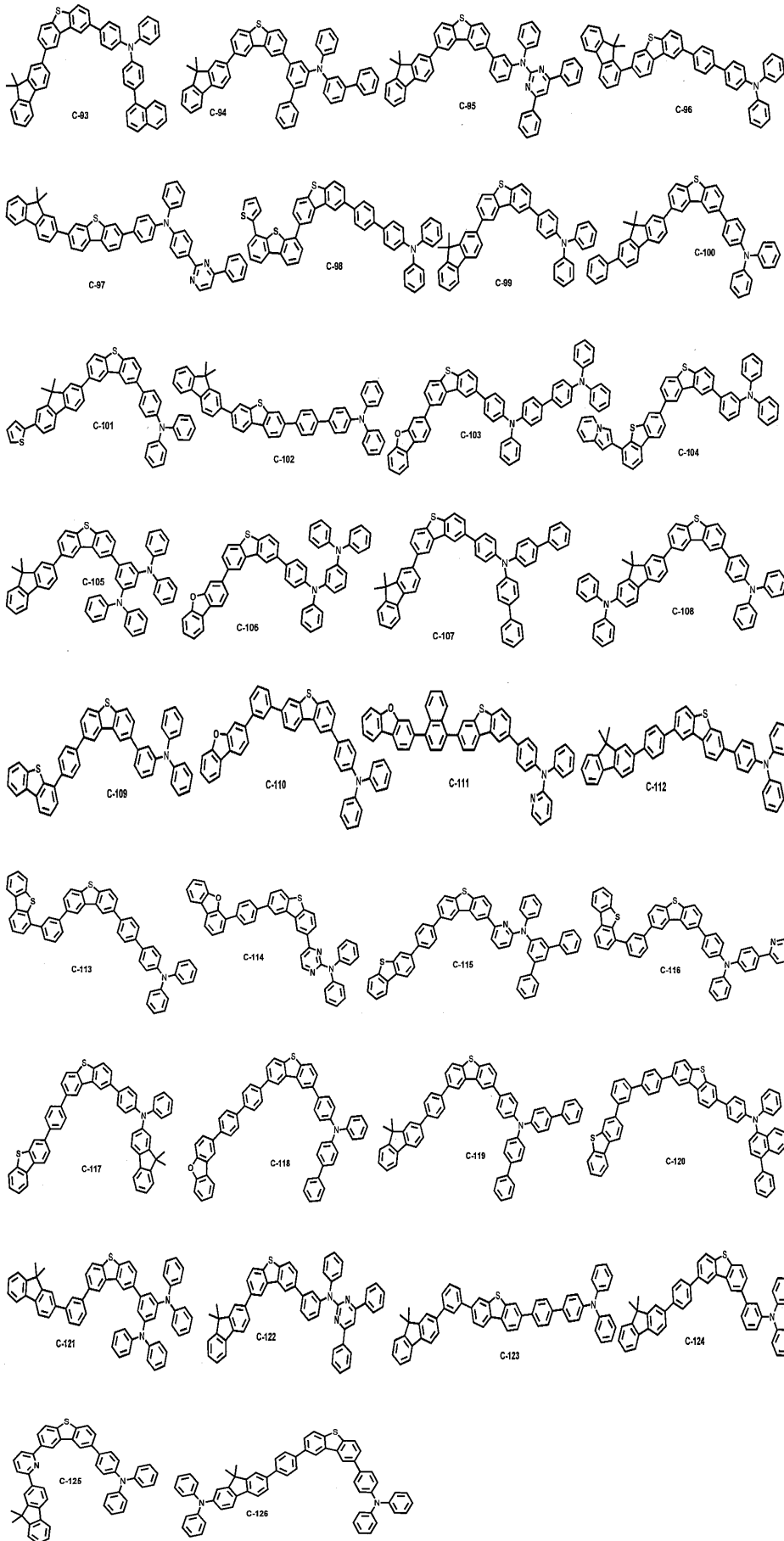
**청구항 5**

제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 화합물.









청구항 6

제1항의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**명세서**

**기술분야**

[0001] 본 발명은 신규한 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

**배경기술**

[0002] 표시 소자 중, 전계 발광 소자(electroluminescence device: EL 소자)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 EL 소자에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재까지 형광 발광 재료가 널리 사용되고 있으나, 전계 발광의 메커니즘상 형광 발광 재료에 비해 인광 발광 재료가 이론적으로 4 배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있다는 점에서 인광 발광 재료의 개발 연구가 널리 수행되고 있다. 현재까지 이리듐(III) 착물 계열이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 각 RGB 별로는 비스(2-(2'-벤조티에닐)-피리디네이토-N,C-3')이리듐(아세틸아세토네이트)[(acac)Ir(btp)<sub>2</sub>], 트리스(2-페닐피리딘)이리듐 [Ir(ppy)<sub>3</sub>] 및 비스(4,6-디플루오로페닐피리디네이토-N,C2)피콜리네이토이리듐 [Firpic] 등의 재료가 알려져 있다.

[0004] 발광 재료는 색순도, 발광 효율 및 안정성을 향상시키기 위해 호스트 재료에 발광 재료(도펀트)를 혼합하여 사용하기도 한다. 이와 같은 발광 재료(도펀트)/호스트 재료 체계를 사용할 때, 호스트 재료는 발광 소자의 효율과 성능에 큰 영향을 미치므로, 그 선택이 중요하다. 종래 기술에서, 인광용 호스트 재료로는 4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐(CBP)이 가장 널리 알려져 있었다. 최근에는, 일본의 파이오니아 등이 정공 차단층의 재료로 사용되던 바토크프로인(Bathocuproine, BCP) 및 알루미늄(III)비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)(4-페닐페놀레이트)(Balq) 등을 호스트 재료로 이용해 고성능의 유기 EL 소자를 개발한 바 있다.

[0005] 그러나 기존의 이러한 인광용 호스트 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 다음과 같은 단점이 있다: (1) 유리 전이 온도가 낮고 열적 안정성이 낮아서, 진공 하에서 고온 증착 공정을 거칠 때, 물질이 변한다. (2) 유기 EL 소자에서 전력효율 = [( $\pi$ /전압) × 전류효율]의 관계에 있으므로 전력 효율은 전압에 반비례한다. 그러나, 인광용 호스트 재료를 사용한 유기 EL 소자는 형광 재료를 사용한 유기 EL 소자에 비해 전류 효율(cd/A)은 높으나, 구동 전압 역시 상당히 높기 때문에 전력 효율(lm/w) 면에서 큰 이점이 없다. (3) 또한, 유기 EL 소자에 사용할 경우, 작동 수명 측면에서도 만족스럽지 못하며, 발광 효율도 여전히 개선이 요구된다.

[0006] 한편, 유기 EL 소자에서 정공 주입 및 수송 재료로서 구리 프탈로시아닌(CuPc), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB), N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민(TPD), 4,4',4"-트리스(3-메틸페닐페닐아미노)트리페닐아민(MTDATA) 등이 사용되어 왔으나, 이러한 물질을 사용한 경우 유기 EL 소자는 양자 효율 및 수명이 저하되는 문제가 있었다. 그 이유는 유기 EL 소자를 높은 전류에서 구동하게 되면, 양극과 정공 주입층 사이에서 열 스트레스(thermal stress)가 발생하고, 이러한 열 스트레스에 의해 소자의 수명이 급격히 저하되기 때문이다. 또한, 정공 주입층에 사용되는 유기물질은 정공의 운동성이 매우 크기 때문에, 정공과 전자의 전하 밸런스(hole-electron charge balance)가 깨지고 이로 인해 양자 효율(cd/A)이 낮아지게 된다.

[0007] 한국 공개특허공보 제2009-0035729호는 카바졸을 포함하는 아민 화합물을 유기 전계 발광 소자용 화합물로 개시하고 있다. 또한, 한국 공개특허공보 제2011-0129766호는 융합된 카바졸을 포함하는 아민 화합물을 유기 전계 발광 소자용 화합물로 개시하고 있다. 그러나, 상기 문헌들에 개시된 화합물들을 포함한 유기 EL 소자들은 전력 효율, 발광 효율, 양자 효율 및 수명 등의 측면에서 여전히 만족스럽지 않다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0008] (특허문헌 0001) 한국 공개특허공보 제2009-0035729호 (2009.04.10 공개)

(특허문헌 0002) 한국 공개특허공보 제2011-0129766호 (2011.12.02 공개)

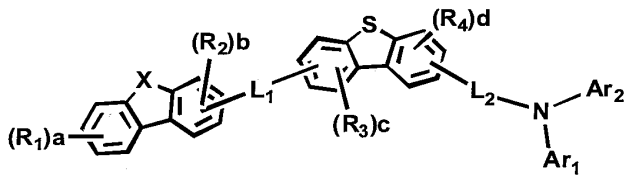
**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

[0009] 따라서 본 발명의 목적은 첫째, 기존의 재료보다 발광 효율 및 소자 수명이 좋은 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며, 둘째, 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 고효율 및 장수명의 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

**과제의 해결 수단**

[0010] 상기의 기술적 과제를 해결하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는, 디아릴아미노 또는 디헤테로아릴아미노로 치환된 디벤조티오펜 유도체 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.[화학식 1]



[0011]

[0012] L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고;

[0013] Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

[0014] X는 산소 원자, 황 원자 또는 -CR<sub>5</sub>R<sub>6</sub>이고;

[0015] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>6</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, -NR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, -SiR<sub>13</sub>R<sub>14</sub>R<sub>15</sub>, -SR<sub>16</sub>, -OR<sub>17</sub>, -COR<sub>18</sub> 또는 -B(OR<sub>19</sub>)(OR<sub>20</sub>)이거나, 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고; 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

[0016] R<sub>11</sub> 내지 R<sub>20</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나, 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고;

[0017] a는 1 내지 4의 정수이며, 2 이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>1</sub>은 동일하거나 상이할 수 있고; b 내지 d는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며, 2 이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>2</sub>, 각각의 R<sub>3</sub> 및 각각의 R<sub>4</sub>는 동일하거나 상이할 수 있고;

[0018] 상기 헤테로아릴렌은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

[0019] 상기 헤테로시클로알킬은 O, S 및 N에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

**발명의 효과**

[0020] 본 발명에 따른 화합물은 발광 효율이 우수하고 재료의 수명 특성이 뛰어나 소자의 구동 수명이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다. 또한, 본 발명에 따른 화합물은 소자의 구동전압을 저하시켜 전력효율이 향상되고 또한 전류효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0021] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.

[0022] 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물, 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료, 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

[0023] 본 발명의 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

[0024] 상기 화학식 1에서,  $L_1$  및  $L_2$ 은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환 (5-30원)헤테로아릴렌이고, 바람직하게는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이고, 더욱 바람직하게는 단일결합, 비치환된 (C6-C15)아릴렌, (C6-C15)아릴로 치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 비치환된 (5-10원)헤테로아릴렌이다.

[0025] 상기 화학식 1에서,  $Ar_1$  및  $Ar_2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고, 더욱 바람직하게는 비치환된 (C6-C15)아릴; (C1-C6)알킬, (C6-C15)아릴, (C6-C15)아릴아미노 또는 (C6-C15)아릴(5-10원)헤테로아릴아미노로 치환된 (C6-C15)아릴; 비치환된 (5-10원)헤테로아릴; 또는 (C6-C15)아릴 또는 (C6-C15)아릴아미노로 치환된 (5-10원)헤테로아릴이다.

[0026] 상기 화학식 1에서, X는 산소 원자, 황 원자 또는  $-CR_5R_6$ 이고,

[0027] 상기 화학식 1에서,  $R_1$  및  $R_6$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴,  $-NR_{11}R_{12}$ ,  $-SiR_{13}R_{14}R_{15}$ ,  $-SR_{16}$ ,  $-OR_{17}$ ,  $-COR_{18}$  또는  $-B(OR_{19})(OR_{20})$ 이거나, 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 바람직하게는 수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C15)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴,  $-NR_{11}R_{12}$  또는  $-SiR_{13}R_{14}R_{15}$  이고, 더욱 바람직하게는 수소, 할로젠, 비치환된 (C1-C6)알킬, 비치환된 (C6-C20)아릴, 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 또는 (C1-C6)알킬 또는 (C6-C15)아릴로 치환된 (C6-C20)아릴이고;

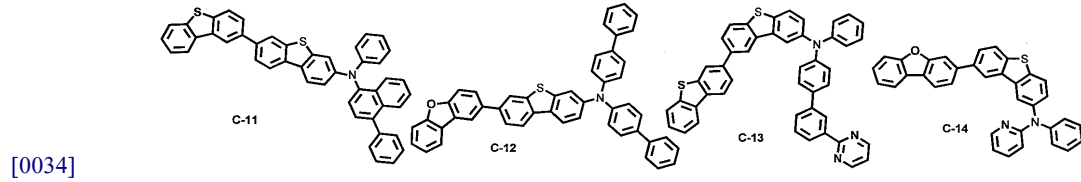
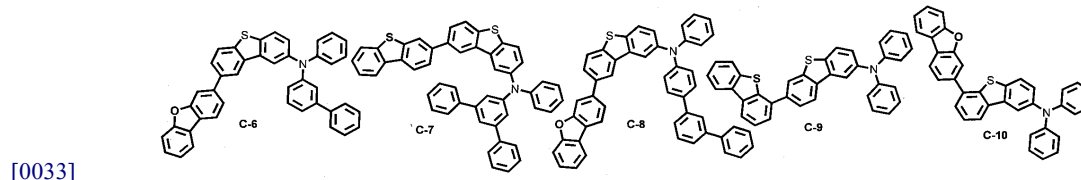
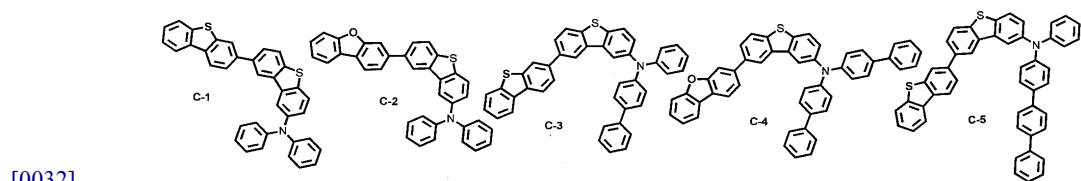
[0028]  $R_{11}$  및  $R_{12}$ 는 바람직하게는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고,  $R_{13}$  내지  $R_{15}$ 는 바람직하게는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬 또는 (C6-C15)아릴이다.

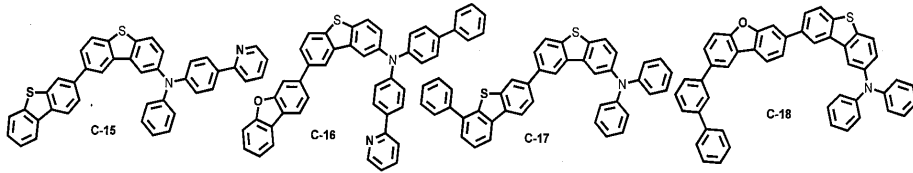
[0029] 본 발명에 기재되어 있는 “(C1-C30)알킬”은 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 15개인 것이 바람직하고, 1 내지 6개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 3급-부틸 등이 있다. 본원에서 “(C2-C30)알케닐”은 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 “(C2-C30)알키닐”은 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알키닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알키닐의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 “(C3-C30)시클로알킬”은 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 여기에서 탄소수가 3 내지 20개인 것이 바람직하고, 3 내지 7개인 것이 더 바람직하다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 “(3-7원) 헤테로시클로알킬”은 환 골격 원자수가 3 내지 7개이고, B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로 이루어진

군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 O, S 및 N에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라히드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 등이 있다. 본원에서 “(C6-C30)아릴(렌)”은 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 여기에서 환 골격 탄소수가 6 내지 20개인 것이 바람직하고, 6 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 플루오레닐, 페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페틸레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐 등이 있다. 본원에서 “(5-30원) 헤테로아릴(렌)”은 환 골격 원자수가 5 내지 30개이고, B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 여기에서 환 골격 원자수가 5 내지 21개인 것이 바람직하고, 5 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합 환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴(렌)은 하나 이상의 헤테로아릴기 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리디, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 “할로겐”은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

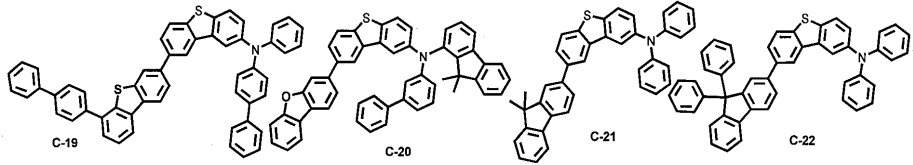
[0030] 또한 본 발명에 기재되어 있는 “치환 또는 비치환”이라는 기재에서 “치환”은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기(즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 상기 화학식 1 에서, 치환 (C1-C30)알킬, 치환 (C2-C30)알케닐, 치환 (C2-C30)알키닐, 치환 (C1-C30)알콕시, 치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환(C6-C30)아릴(렌), 또는 치환 (5-30원)헤테로아릴(렌)의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환되거나 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, (5-30원)헤테로아릴로 치환되거나 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C1-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상인 것이 바람직하다.

[0031] 본 발명에 따른 화합물로는 대표적으로 하기의 화합물을 들 수 있다.

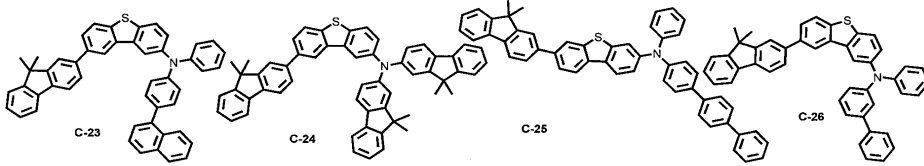




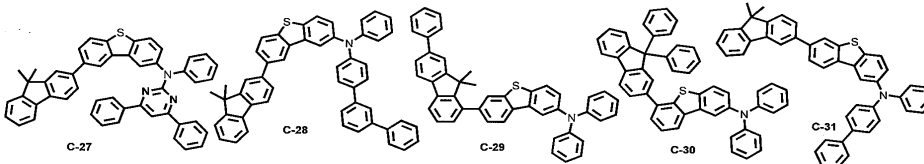
[0035]



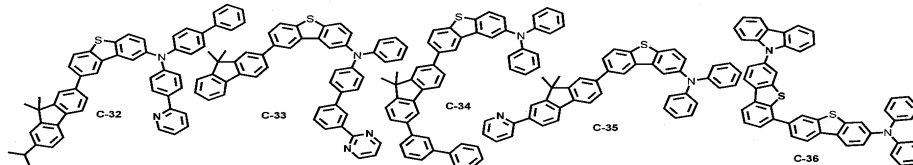
[0036]



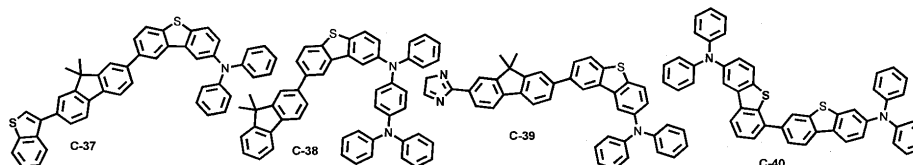
[0037]



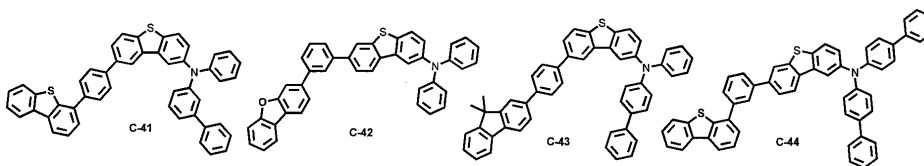
[0038]



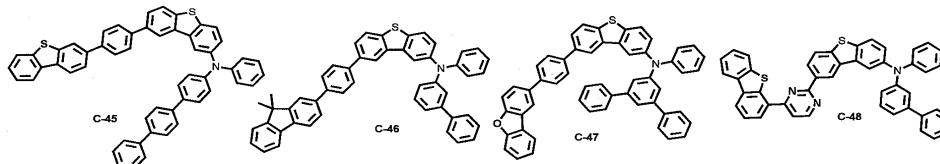
[0039]



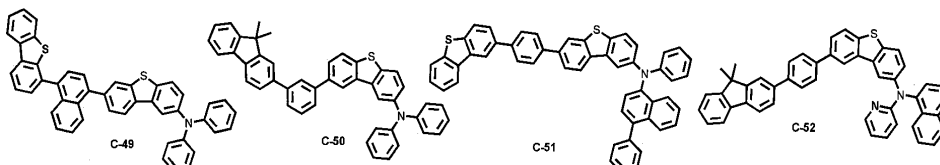
[0040]



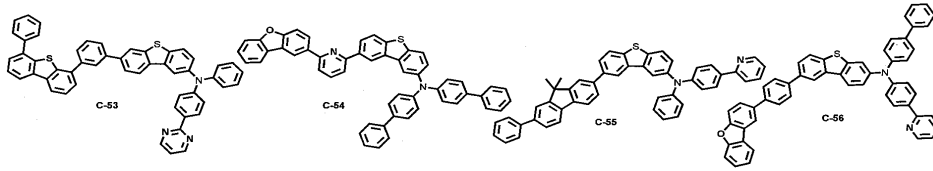
[0041]



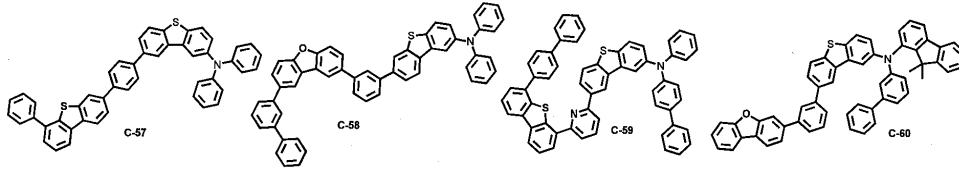
[0042]



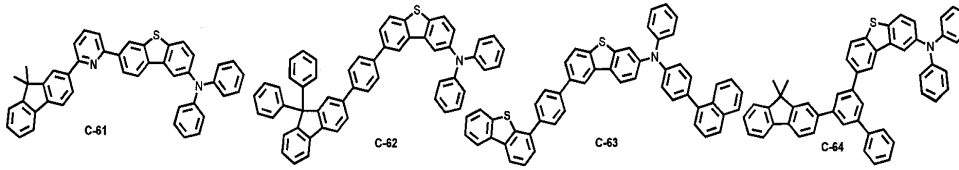
[0043]



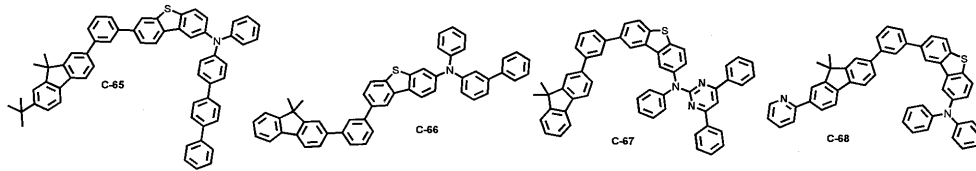
[0044]



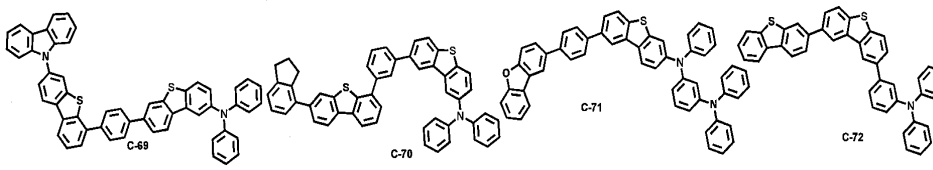
[0045]



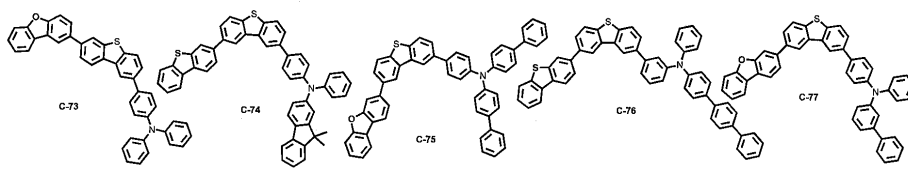
[0046]



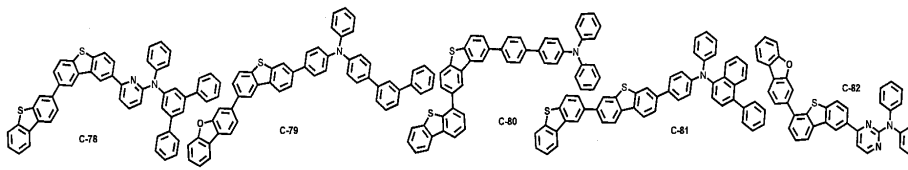
[0047]



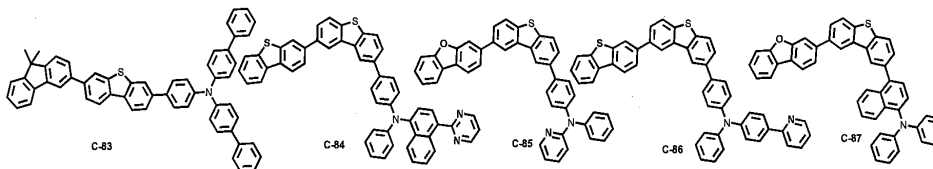
[0048]



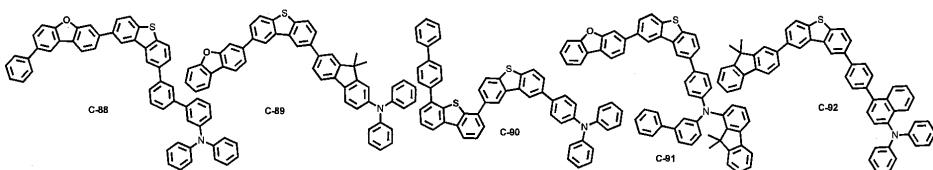
[0049]



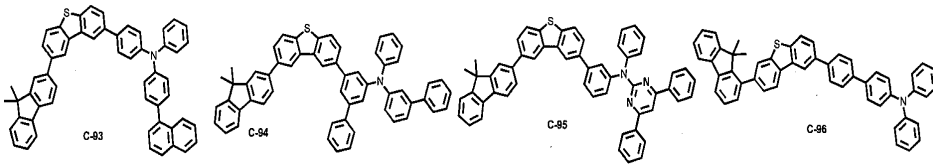
[0050]



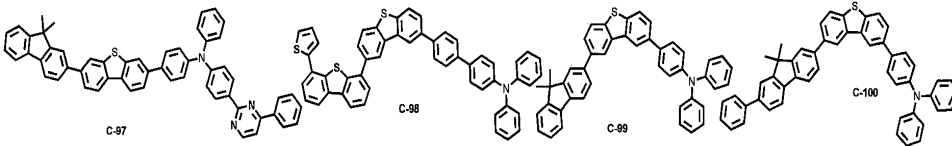
[0051]



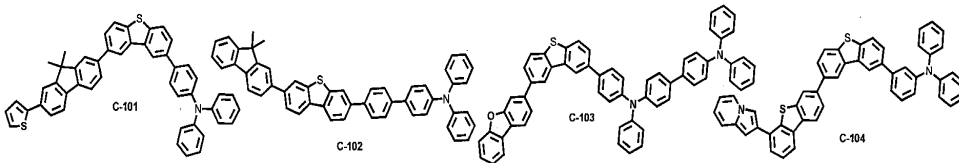
[0052]



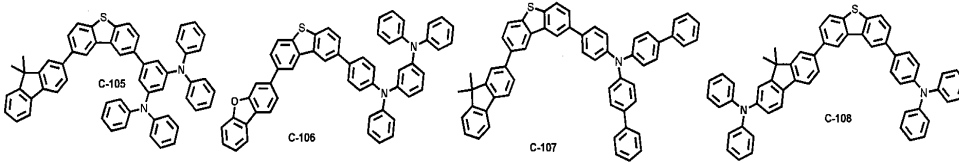
[0053]



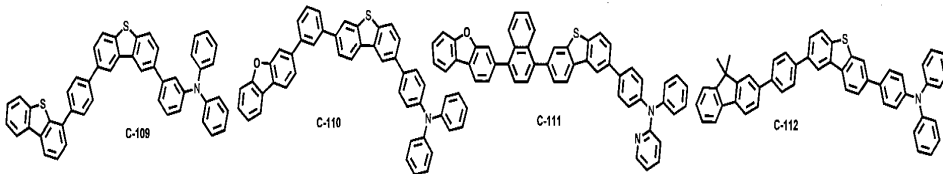
[0054]



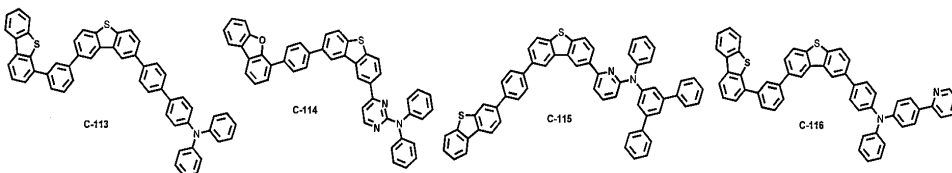
[0055]



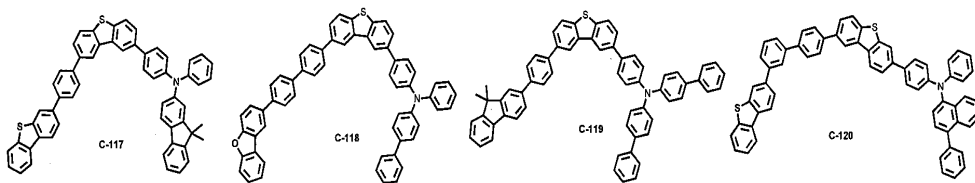
[0056]



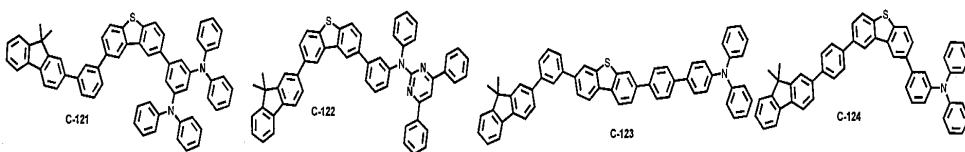
[0057]



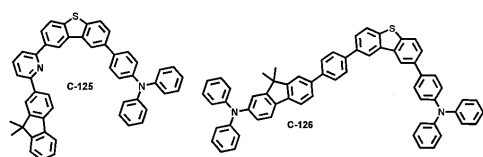
[0058]



[0059]



[0060]

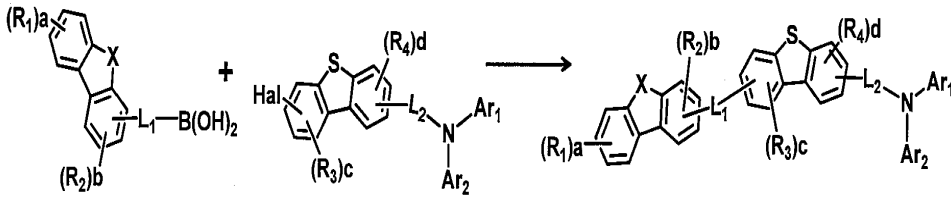


[0061]

[0062] 본 발명에 따른 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식 1에 따라

제조할 수 있다.

[0063] [반응식 1]



[0064]

[0065] [상기 반응식 1에서 X, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, a, b, c 및 d는 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하고, Hal는 할로젠이다]

[0066] 또한, 본 발명은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다. 상기 재료는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다. 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖고, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 화합물을 하나 이상 포함한다.

[0067] 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 수송층, 전자 주입층, 계면층(interlayer) 및 정공 차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

[0068] 본 발명의 화학식 1의 화합물은 상기 발광층 및 정공 수송층 중 하나 이상에 포함될 수 있다. 정공 수송층에 사용될 경우, 본 발명의 화학식 1의 화합물은 정공 수송재료로서 포함될 수 있다. 발광층에 사용될 경우, 본 발명의 화학식 1의 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는 상기 발광층은 하나 이상의 도펀트를 추가로 더 포함할 수 있으며, 필요한 경우, 본 발명의 화학식 1의 화합물 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다.

[0069] 상기 제2 호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하나, 하기 화학식 2 내지 화학식 4로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 발광 효율 면에서 특히 바람직하다.

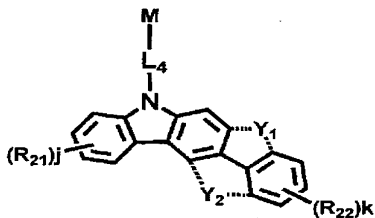
[0070] [화학식 2]

[0071] H-(Cz-L<sub>4</sub>)<sub>h</sub>-M

[0072] [화학식 3]

[0073] H-(Cz)<sub>i</sub>-L<sub>4</sub>-M

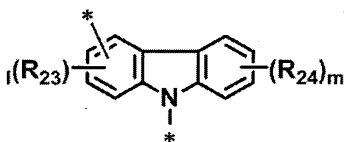
[0074] [화학식 4]



[0075]

[0076] 상기 화학식 2 내지 4에서,

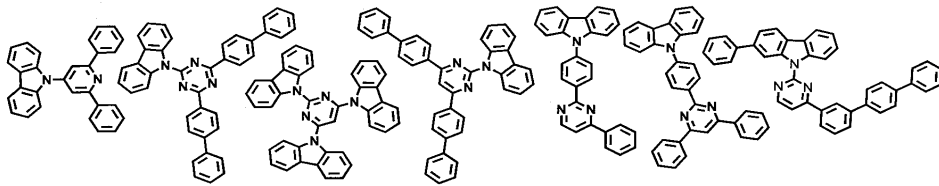
[0077] Cz는 하기 구조이며,



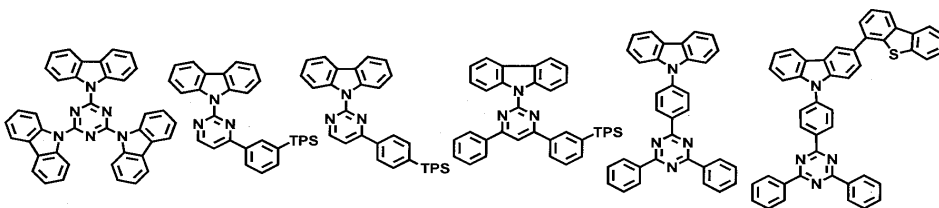
[0078]

[0079]  $R_{21}$  내지  $R_{24}$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원) 헤테로아릴 또는  $R_{25}R_{26}R_{27}Si-$  이며,  $R_{25}$  내지  $R_{27}$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;  $L_4$ 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원) 헤테로아릴렌이고; M은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원) 헤테로아릴이며;  $Y_1$  및  $Y_2$ 는  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-N(R_{31})-$  또는  $-C(R_{32})(R_{33})-$ 이고,  $Y_1$ 과  $Y_2$ 가 동시에 존재하지는 않으며;  $R_{31}$  내지  $R_{33}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고,  $R_{32}$  및  $R_{33}$ 은 동일하거나 상이할 수 있으며; h 및 i는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, j, k, l 및 m은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, h, i, j, k, l 또는 m이 2 이상의 정수인 경우 각각의 (Cz-L<sub>4</sub>), 각각의 (Cz), 각각의  $R_{21}$ , 각각의  $R_{22}$ , 각각의  $R_{23}$  또는 각각의  $R_{24}$ 는 동일하거나 상이할 수 있다.

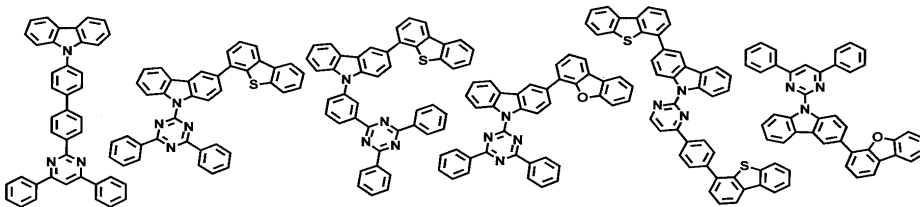
[0080] 구체적으로 상기 제2호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같다.



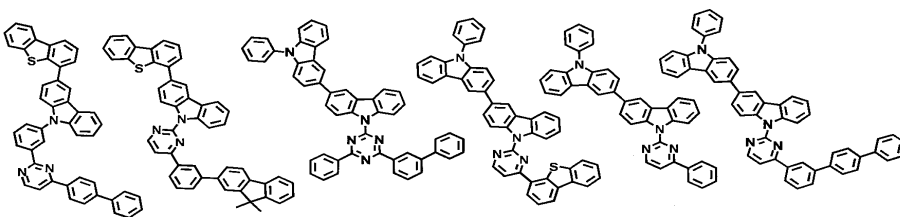
[0081]



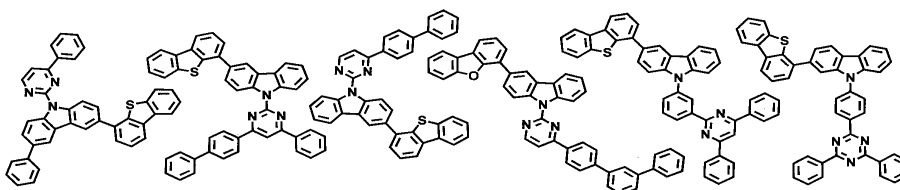
[0082]



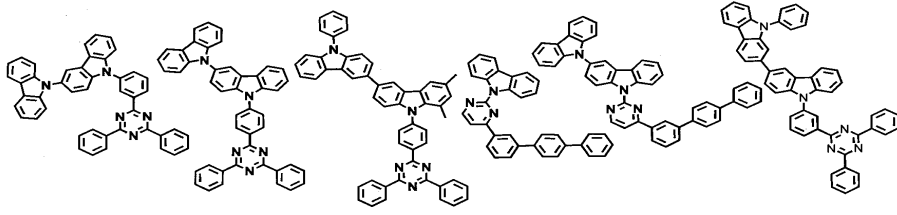
[0083]



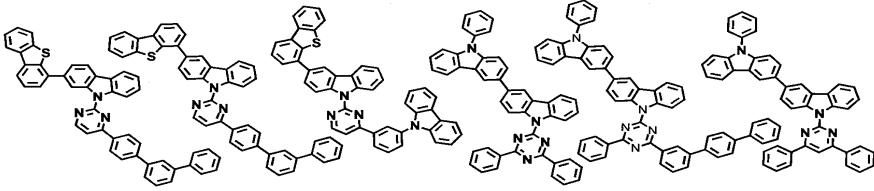
[0084]



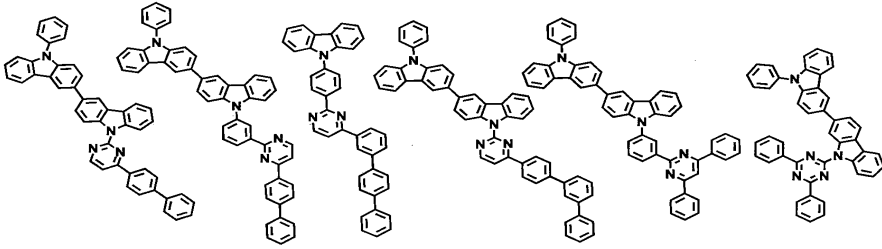
[0085]



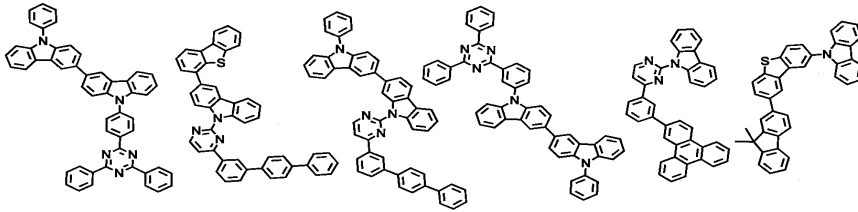
[0086]



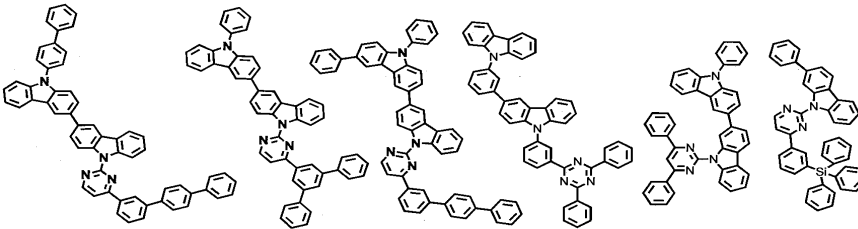
[0087]



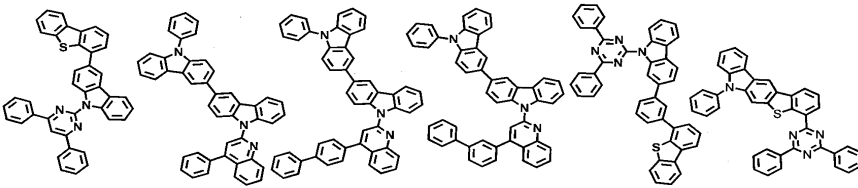
[0088]



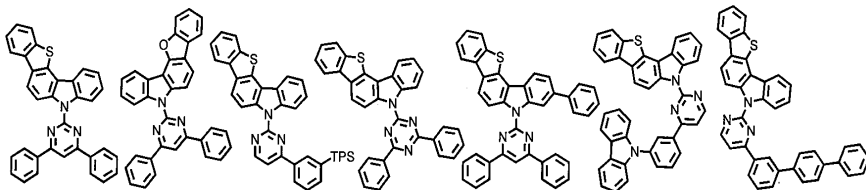
[0089]



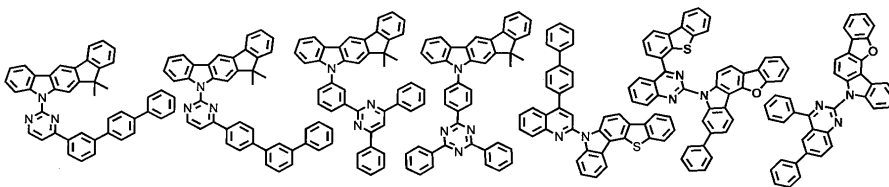
[0090]



[0091]



[0092]

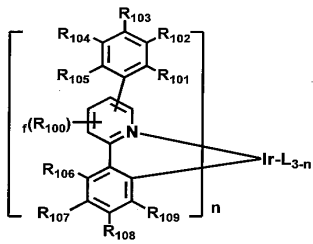


[0093]

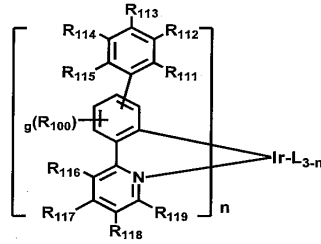
[0094] 본 발명의 유기 전계 발광 소자 제조에 사용되는 도펀트로는 하나 이상의 인광 도펀트가 바람직하다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도펀트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물이 바람직하고, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물이 더욱 바람직하며, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물이 더더욱 바람직하다.

[0095] 상기 인광 도펀트는 하기 화학식 5 내지 화학식 7로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.

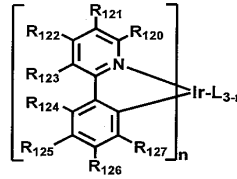
[화학식 5]



[화학식 6]

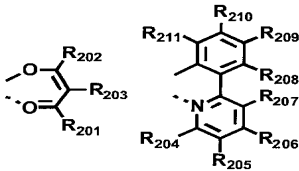


[화학식 7]



[0096]

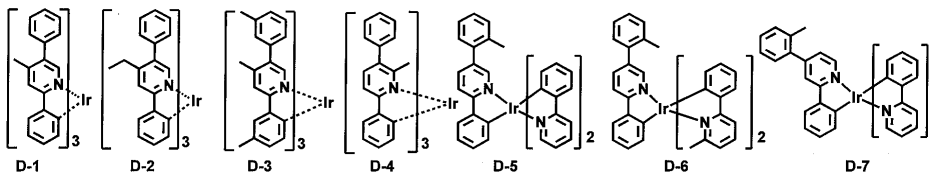
[0097] 상기 화학식 5 내지 7에서, L은 하기 구조중에서 선택되고;



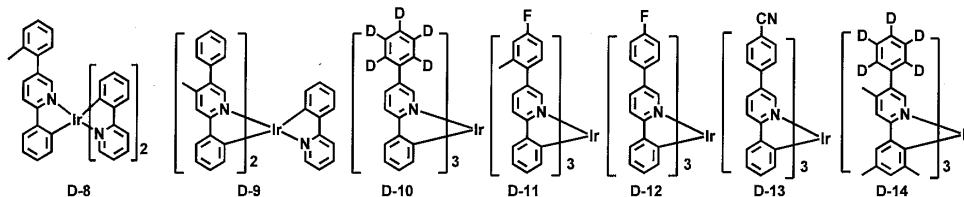
[0098]

[0099] R<sub>100</sub>은 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬이며; R<sub>101</sub> 내지 R<sub>109</sub> 및 R<sub>111</sub> 내지 R<sub>123</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 할로겐이 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; 또는 R<sub>120</sub> 내지 R<sub>123</sub>는 인접 치환기가 서로 연결되어 융합고리를 형성하는데, 예를 들어 퀴놀린 형성이 가능하며; R<sub>124</sub> 내지 R<sub>127</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아릴이며; 또는 R<sub>124</sub> 내지 R<sub>127</sub>가 아릴기인 경우 인접기가 서로 연결되어 융합고리를 형성하는데, 예를 들어 플루오렌 형성이 가능하며; R<sub>201</sub> 내지 R<sub>211</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 또는 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬이며; f 및 g는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며, f 또는 g가 각각 2이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>100</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있고; n은 1 내지 3의 정수이다.

[0100] 상기 인광 도펀트 재료의 구체적인 예로는 다음과 같다.

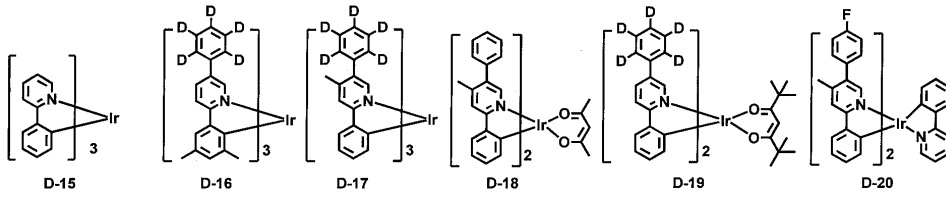


[0101]

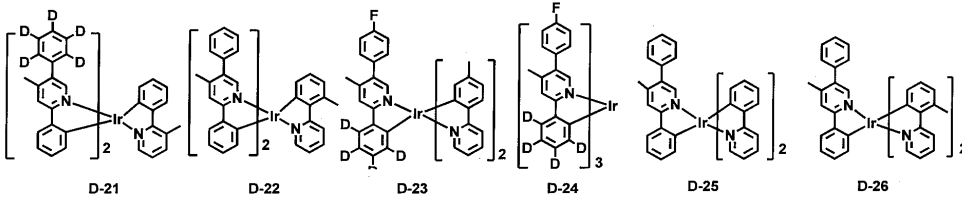


[0102]

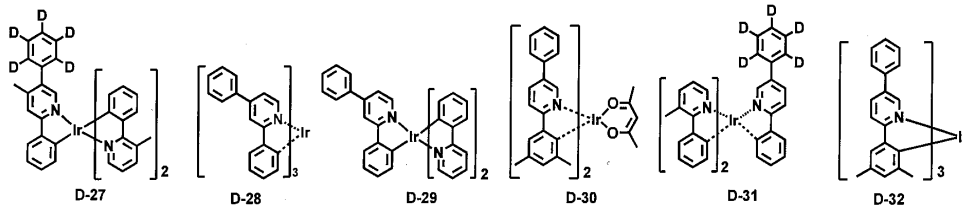
[0103]



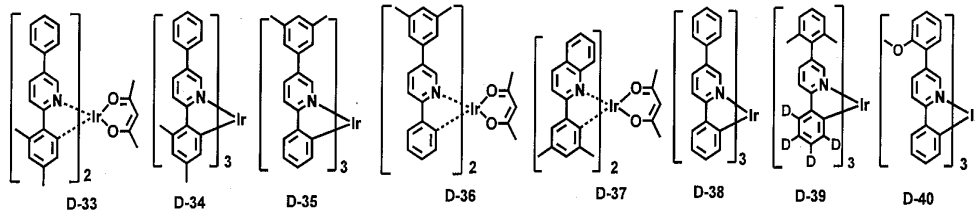
[0104]



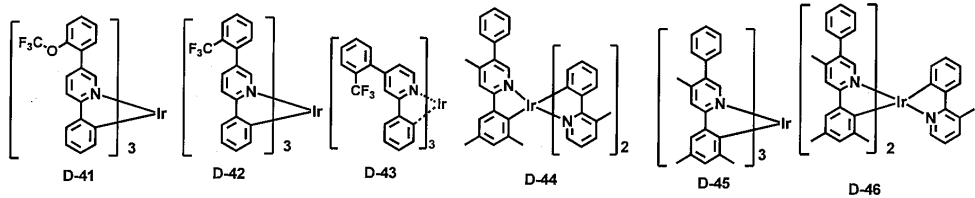
[0105]



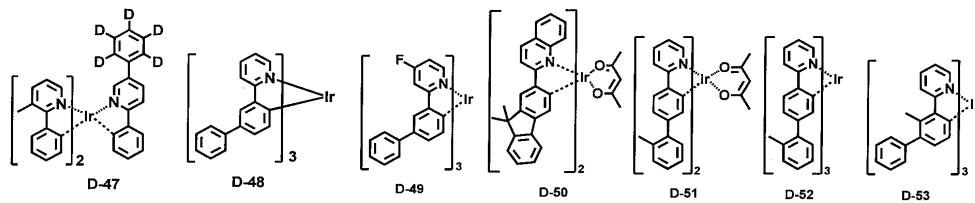
[0106]



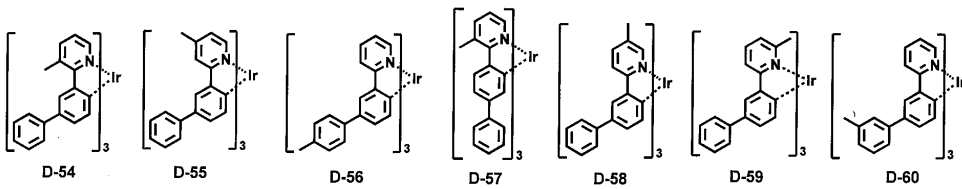
[0107]



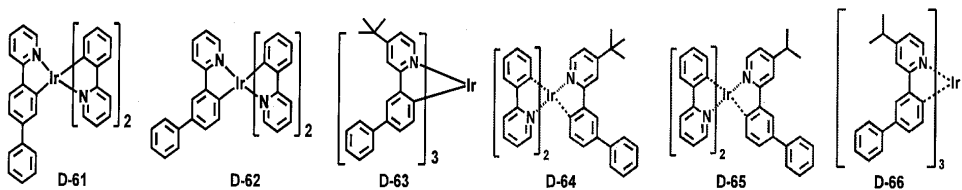
[0108]

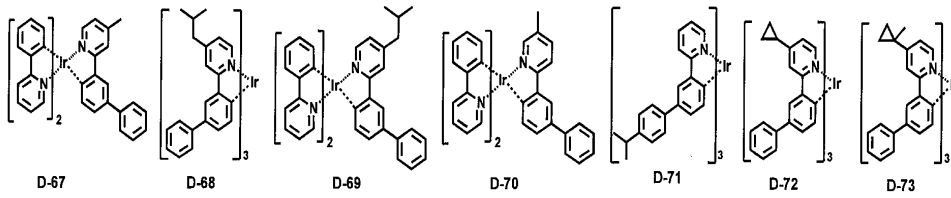


[0109]

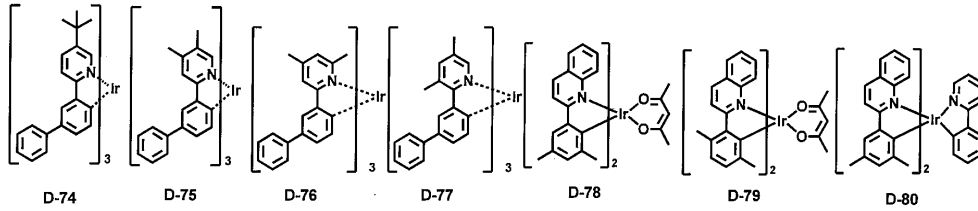


[0110]





[0111]



[0112]

[0113] 본 발명은 추가의 양태로 유기 전계 발광소자 제조용 재료를 제공한다. 상기 재료는 제1호스트 재료 및 제2호스트 재료를 포함하며, 상기 제1호스트 재료로 본 발명의 화합물을 포함한다. 이때 제1 호스트 재료와 제2호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

[0114] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 가지며, 상기 유기물층은 발광층을 포함하며, 상기 발광층은 본 발명의 유기 전계 발광소자용 재료 및 인광 도펀트 재료를 포함하며, 상기 유기 전계발광 소자용 재료는 호스트 재료로 사용된다.

[0115] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 유기물층이 화학식 1의 화합물을 포함하고, 이와 동시에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있다.

[0116] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1의 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타 계열 금속 및 d-전이원소의 유기 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 착체 화합물을 더 포함할 수도 있고, 나아가 상기 유기물층은 발광층 및 전하 생성층을 더 포함할 수 있다.

[0117] 또한, 본 발명의 상기 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 화합물 이외에 당업계에 알려진 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함하는 발광층 하나 이상을 더 포함함으로써 백색 발광을 할 수 있다. 또한, 필요에 따라, 황색 또는 오렌지색 발광층을 더 포함할 수도 있다.

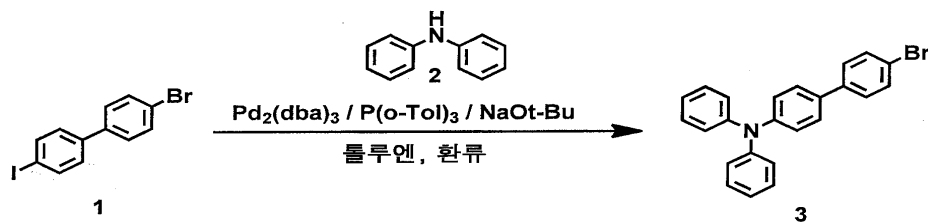
[0118] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측 표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 1층(이하, 이들을 “표면층”이라고 지칭함) 이상을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 금속의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광매체층 측의 음극 표면에 할로젠화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 이것에 의해 구동의 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는  $SiO_x$ ( $1 \leq x \leq 2$ ),  $AlO_x$ ( $1 \leq x \leq 1.5$ ),  $SiON$  또는  $SiAlON$  등이 있고, 할로젠화 금속의 바람직한 예로는  $LiF$ ,  $MgF_2$ ,  $CaF_2$ , 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는  $Cs_2O$ ,  $Li_2O$ ,  $MgO$ ,  $SrO$ ,  $BaO$ ,  $CaO$  등이 있다.

[0119] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 이렇게 제작된 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도펀트의 혼합 영역 또는 정공 수송 화합물과 산화성 도펀트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 수송 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 수송하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도펀트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도펀트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도펀트층을 전하 생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진 백색 유기 전계 발광소자를 제작할 수 있다.

[0120] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광 특성을 설명한다.

[0121] [실시에 1] 화합물 C-80의 제조

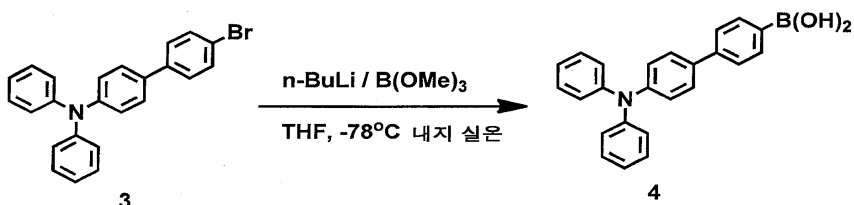
[0122] 1-1: 화합물 3의 합성



[0123]

[0124] 화합물 1, 63g(0.177mol), 화합물 2, 30g(0.177mol), 나트륨 3급-부톡사이드(NaOt-Bu)26g(0.266mol) 및 트리(o-톨릴)포스핀(P(o-Tol)<sub>3</sub>) 4.3g(0.014mol)을 톨루엔 1.7L에 녹인 후, 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(O)(Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>) 3.2g(0.004mol)을 첨가했다. 이 혼합물을 120℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응물을 실온으로 식힌 후 에틸 아세테이트 1L로 추출하여, 얻어진 유기층을 증류수 400mL로 씻었다. 유기 용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 메탄올로 씻어 필터한 후 건조시켰다. 실리카겔 컬럼크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 3, 41g(58%)을 수득하였다.

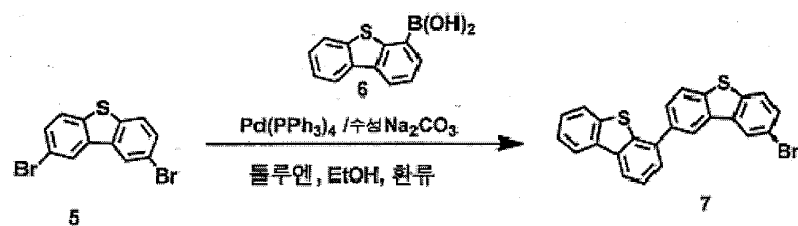
[0125] 1-2: 화합물 4의 합성



[0126]

[0127] 화합물 3, 10g(25mmol)을 THF 150mL에 녹인 후 n-BuLi (2.5M, 헥산 중) 15mL(37.50mol)를 -78℃에서 첨가하였다. 이 혼합물을 -78℃에서 1시간 동안 교반한 후 트리메톡시보란(B(OCH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>) 화합물 4.2mL(37.50mol)를 첨가하였다. 전체 반응물을 2시간 동안 교반한 후 NH<sub>4</sub>Cl 100mL로 반응을 종결시킨 후 에틸 아세테이트 200mL로 추출한 후, 얻어진 유기층을 증류수 100mL로 씻었다. 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시키고, 유기 용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 재결정법으로 분리하여 화합물 4, 5.4g(59%)을 수득하였다.

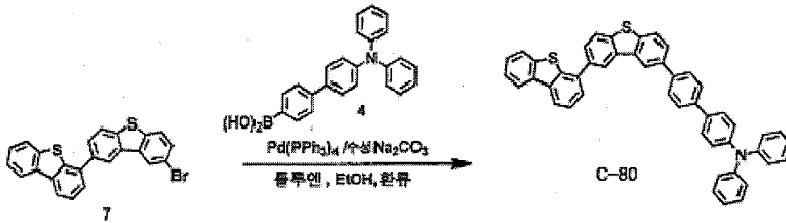
[0128] 1-3: 화합물 7의 합성



[0129]

[0130] 화합물 5, 6.7g(19.60mmol), 화합물 6, 4.1g(17.82mmol) 및 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 4.7g(44.55mmol)을 톨루엔 90mL, 에탄올 20mL 및 증류수 20mL의 혼합 용액에 녹인 후, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 0.6g(0.53mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물을 120℃에서 5시간 동안 교반하였다. 반응물을 실온으로 식힌 후 에틸 아세테이트 200mL로 추출하여, 얻어진 유기층을 증류수 100mL로 씻었다. 유기 용매를 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 메탄올로 씻어 필터한 후 건조시켰다. 실리카겔 컬럼크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 7, 3.7g(47%)을 수득하였다.

[0131] 1-4: 화합물 C-80의 합성

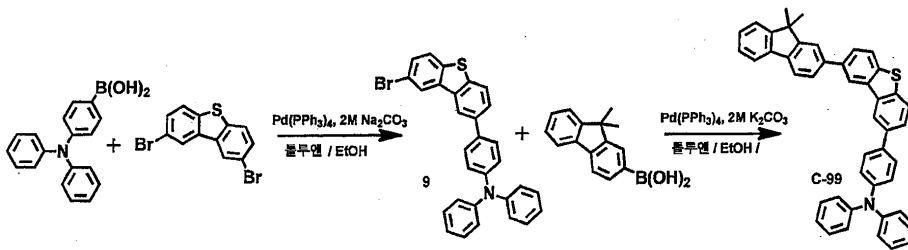


[0132]

[0133] 화합물 7, 3.7g(8.30mmol), 화합물 4, 3.3g(9.10mmol) 및 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 2.2g(20.80mmol)을 톨루엔 44mL, 에탄올 11mL 및 증류수 11mL의 혼합 용액에 녹인 후, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 0.5g(0.4mmol)을 첨가하였다. 이 혼합물을 120℃에서 5시간 동안 교반하였다. 반응물을 실온으로 식힌 후 에틸 아세테이트 200mL로 추출하여, 얻어진 유기층을 증류수 100mL로 씻었다. 유기 용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 메탄올로 씻어 필터한 후 건조시켰다. 실리카겔 컬럼크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 C-80, 1.8g(32%)을 수득하였다.

[0134] MS/ EIMS 측정치 685.90; 계산치 685.19, 녹는점(Mp): 211℃

[0135] [실시예 2] 화합물 C-99의 제조



[0136]

[0137] 2-1: 화합물 9의 합성

[0138] 4-(디페닐아미노)페닐보론산 15g(52mmol), 2,8-디브로모벤조[b,d]티오펜 103.8g(103.8mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)[Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>] 3g(2.6mmol) 및 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 14g(130mmol)을 둥근 플라스크에 넣고, 톨루엔 250mL, EtOH 50mL 및 H<sub>2</sub>O 50mL를 넣었다. 반응 혼합물을 100℃ 상에서 2시간 교반하였다. 에틸 아세테이트(EA)/H<sub>2</sub>O로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 9, 13g(58%)을 수득하였다.

[0139] 2-2: 화합물 C-99의 합성

[0140] 4-(8-브로모디벤조[b,d]티오펜-2-일)-N,N-디페닐아닐린 6g(13.9mmol), 9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일보론산 4g(16.7mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.8g(0.7mmol) 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 4.8g(35mmol)을 둥근 플라스크에 넣고, 톨루엔 45 mL, EtOH 15 mL 및 H<sub>2</sub>O 15mL를 넣었다. 반응 혼합물은 120℃ 상에서 2시간 교반하였다. EA/H<sub>2</sub>O로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 이후 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 C-99, 3.9g(45%)를 얻었다.

[0141] MS/EIMS 측정치 619.8; 계산치 619.23, 녹는점(Mp): 198℃

[0142] [소자 실시예 1] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0143] 본 발명의 발광 재료를 이용한 구조의 OLED 소자를 제작하였다. 우선, OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터 얻어진 투명 전극 ITO 박막(15Ω/□)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기관 홀더에 ITO기관을 장착한 후, 진공 증착장비 내의 셀에 N<sup>1</sup>,N<sup>1'</sup>-([1,1'-비페닐]-4,4'-디일)비스(N<sup>1</sup>-(나프탈렌-1-일)-N<sup>4</sup>,N<sup>4'</sup>-디페닐벤젠-1,4-디아민)을 넣고 챔버 내의 진공도가 10<sup>-6</sup> torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기관 위에 60nm 두께의 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 C-99 를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 정공 주입층 위에 20nm 두께의 정공 수송층을 증착하였다. 정공 주입층, 정공 수송층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한

쪽 셀에 호스트로서 5-(4-([1,1':4',1''-터페닐]-3-일)피리미딘-2-일)-5H-벤조[4,5]티에노[3,2-c]카바졸을 넣고, 또 다른 셀에는 도펀트로서 D-1을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 도펀트와 호스트 합계량에 대해 도펀트를 15중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 정공 수송층위에 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 상기 발광층 위에 전자 전달층으로써 한쪽 셀에 2-(4-(9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센-2-일)페닐)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸을 넣고, 또다른 셀에는 리튬 퀴놀레이트(Lithium quinolate)를 각각 넣은 후, 두 물질을 같은 속도로 증발시켜 각각 50중량%의 양으로 도핑함으로써 30nm의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서 전자 주입층으로 리튬 퀴놀레이트를 2nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착장비를 이용하여 Al 음극을 150nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제작하였다. 재료 별로 각 화합물은  $10^{-6}$  torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0144] 그 결과,  $19.2 \text{ mA/cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $8020 \text{ cd/m}^2$ 의 녹색 발광이 확인되었다.

[0145] [소자 실시예 2] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0146] 정공 수송층으로서 C-80을 20nm 두께로 증착하고 발광층으로서 진공 증착 장비내의 한쪽 셀에 9-(4-([1,1':3',1''-터페닐]-4-일)피리미딘-2-일)-3-(디벤조[b,d]티오펜-4-일)-9H-카바졸을 넣고, 또 다른 셀에는 도펀트로서 D-25를 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 도펀트와 호스트 합계량에 대해 도펀트를 15중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 정공 수송층 위에 30nm 두께의 발광층을 증착한 것 이외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.

[0147] 그 결과,  $6.4 \text{ mA/cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $2630 \text{ cd/m}^2$ 의 녹색 발광이 확인되었다.

[0148] [비교예 1] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제작

[0149] 정공 수송층으로서 N,N'-디(4-비페닐)-N,N'-디(4-비페닐)-4,4'-디아미노비페닐을 20nm 두께로 증착하였고 발광 재료로서 호스트로서 4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐을, 도펀트로서 화합물 D-15를 사용하고, 정공 수송층위에 30nm 두께의 발광층을 증착하고, 정공 저지층으로 알루미늄(III)비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)4-페닐페놀레이트를 10nm 두께로 증착한 것 외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.

[0150] 그 결과,  $9.7 \text{ mA/cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $3350 \text{ cd/m}^2$ 의 녹색 발광이 확인되었다.

[0151] 본 발명에서 개발한 유기 전계 발광 화합물들의 발광 특성이 종래의 재료 대비 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다. 또한 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 사용한 소자는 발광 특성, 전류 효율 및 전력 효율이 뛰어나다.

专利名称(译)	标题：有机电致发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020140035737A</a>	公开(公告)日	2014-03-24
申请号	KR1020120102392	申请日	2012-09-14
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
当前申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	AHN HEE CHOON 안희춘 MOON DOO HYEON 문두현 KIM SEUNG AE 김승애 LEE KYUNG JOO 이경주 LEE TAE JIN 이태진 KWON HYUCK JOO 권혁주 KIM BONG OK 김봉옥		
发明人	안희춘 문두현 김승애 이경주 이태진 권혁주 김봉옥		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	H05B33/14 C09K2211/1092 H01L51/0085 H01L51/0061 C07D409/14 C09K2211/1088 H01L51/0074 C07D409/04 C09K2211/1007 C07D409/10 C09K2211/1014 C07D333/76 H01L51/006 H01L51/5016 H01L51/0059 C09K11/06 C09K2211/1029 C09K2211/1011 H01L51/5056 H01L51/0062		
代理人(译)	李昌勋		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

#### 摘要(译)

本发明涉及一种新型有机电致发光化合物和包含该化合物的有机电致发光器件。根据本发明的有机电致发光化合物可以通过降低器件的驱动电压来制造具有优异的发光特性和改善的驱动效率的OLED器件。

