(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2015년01월19일
(11) 등록번호 10-1483933
(24) 등록일자 2015년01월13일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C07D 401/04 (2006.01) *C07D 409/04* (2006.01)
C07D 409/10 (2006.01) *C07D 409/14* (2006.01)
C07D 417/14 (2006.01) *C07D 209/86* (2006.01)
(21) 출원번호 10-2012-0115201
(22) 출원일자 2012년10월17일
심사청구일자 2013년10월11일
(65) 공개번호 10-2014-0049227
(43) 공개일자 2014년04월25일
(56) 선행기술조사문헌
US20100244008 A1*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
롬엔드하스전자재료코리아유한회사
충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)
(72) 발명자
안희춘
경기 수원시 영통구 영통로174번길 62, 105호 (망포동, 신흥빌라)
양수진
경기 화성시 동탄숲속로 95, 811동 1101호 (능동, 숲속마을광명메이루즈아파트)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
장훈

전체 청구항 수 : 총 6 항 심사관 : 오세주

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

(57) 요 약

본 발명은 신규한 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명에 따른 화합물은 발광 특성 및 수명 특성이 뛰어나다. 또한, 본 발명에 따른 화합물은 발광 특성이 우수하고 전류 효율이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제공할 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)

김봉옥

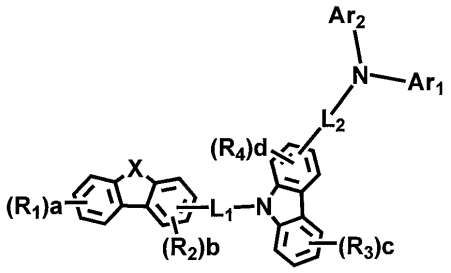
서울 강남구 삼성로111길 8, 208동 401호 (삼성동, 삼성동힐스테이트2단지아파트)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

L_1은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이고;

L_2는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고;

Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나, Ar_1과 L_2는 결합하고 있는 질소와 함께 질소 함유 (5-30원)헤테로아릴을 형성할 수 있고;

X 는 -S-를 나타내고;

R_1 내지 R_4는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

R_{11} 내지 R_{20}는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며;

a 및 c는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이며, 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R_1 및 각각의 R_3은 동일하거나 상이할 수 있고;

b 및 d는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며, 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R_2 및 각각의 R_4는 동일하거나 상이할 수 있고;

상기 헤테로아릴(렌)은 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_1은 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴렌이고;

상기 L_2는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴렌이고;

상기 Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴이고;

상기 R_1 내지 R_4는 각각 독립적으로 수소, 할로겐, 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, R_{11} 및 R_{12}는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고, R_{13} 내지 R_{15}는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬인 것을 특징으로 하는, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 L_1은 비치환된 (C6-C16)아릴렌, 또는 (C1-C6)알킬로 치환된 (C6-C12)아릴렌이고;

상기 L_2은 단일결합, 비치환된 (C6-C16)아릴렌, (C1-C6)알킬로 치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 비치환된 (5-10원)헤테로아릴렌이고;

상기 Ar_1 및 Ar_2은 각각 독립적으로 비치환된 (C6-C15)아릴; (C1-C6)알킬, (C6-C20)아릴, (C1-C6)알킬(C6-C20)아릴, 디(C6-C20)아릴아미노, (C6-C20)아릴(5-21원)헤테로아릴아미노 또는 (5-21원)헤테로아릴로 치환된 (C6-C15)아릴; 비치환된 (5-15원)헤테로아릴; 또는 (C1-C6)알킬, (C6-C20)아릴, (C1-C6)알킬(C6-C20)아릴 또는 디(C6-C20)아릴아미노로 치환된 (5-15원)헤테로아릴이고;

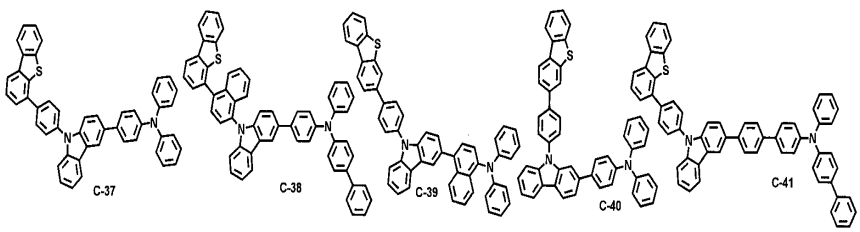
상기 R_1 내지 R_4는 각각 독립적으로 수소, 할로겐, 비치환된 (C1-C6)알킬, (C1-C6)알킬로 치환된 실릴, (C1-C6)알킬로 치환되거나 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴인 것을 특징으로 하는, 유기 전계 발광 화합물.

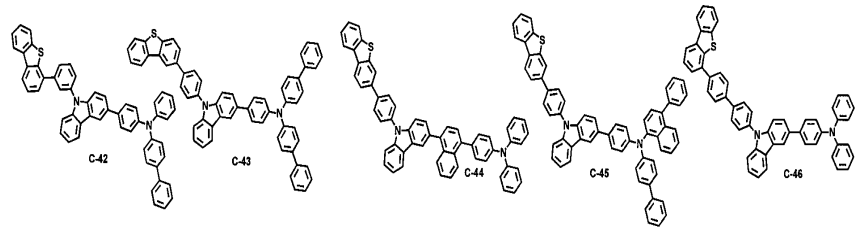
청구항 4

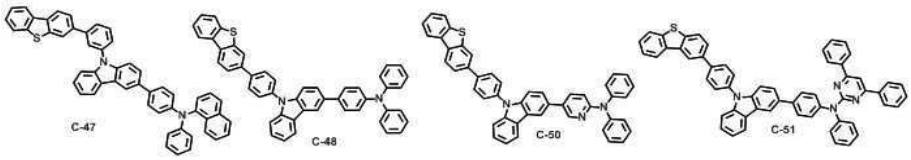
제1항에 있어서, 상기 L_1, L_2, Ar_1, Ar_2, R_1 내지 R_4 및 R_{11} 내지 R_{20}에서 치환 알킬, 치환 알케닐, 치환 알키닐, 치환 알콕시, 치환 시클로알킬, 치환 시클로알케닐, 치환 헤테로시클로알킬, 치환 아릴(렌) 및 치환 헤테로아릴(렌)의 치환체는 서로 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (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, (C6-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.

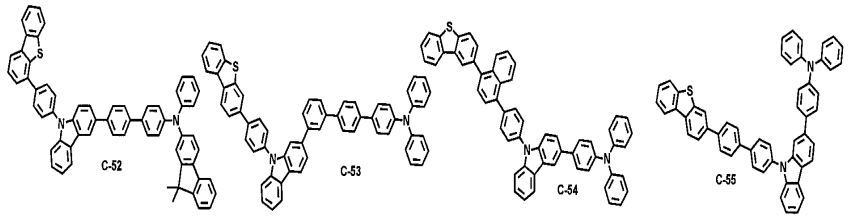
청구항 5

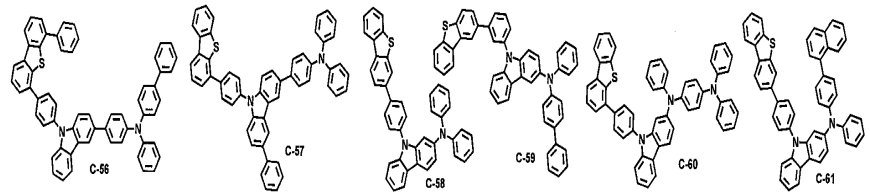
제 1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는, 유기 전계 발광 화합물.

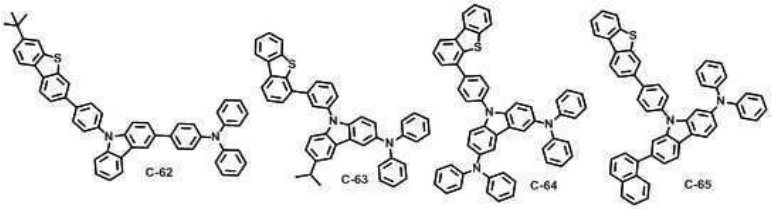


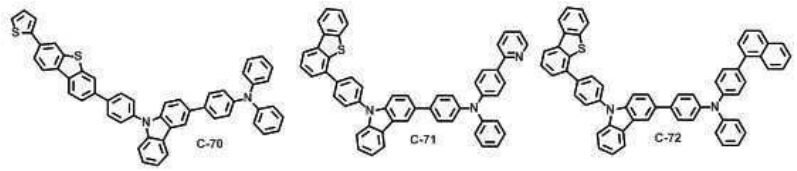

C-42
C-43
C-44
C-45
C-46

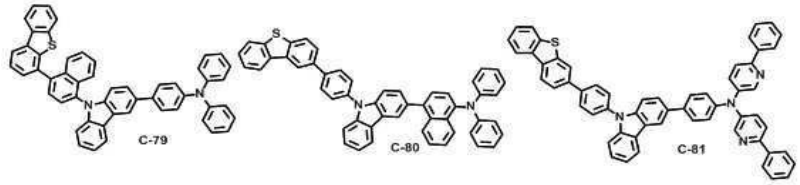

C-47
C-48
C-50
C-51

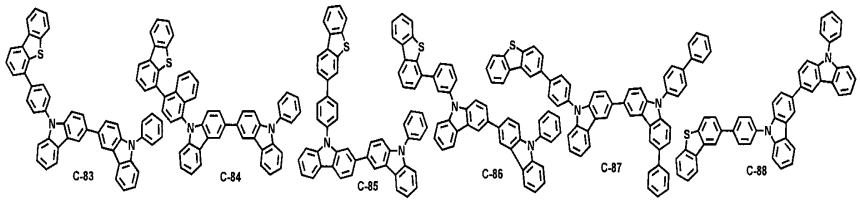

C-52
C-53
C-54
C-55

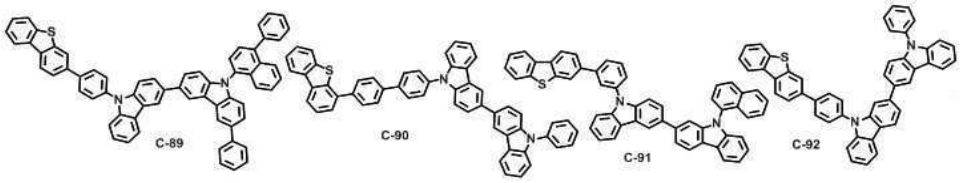

C-56
C-57
C-58
C-59
C-60
C-61

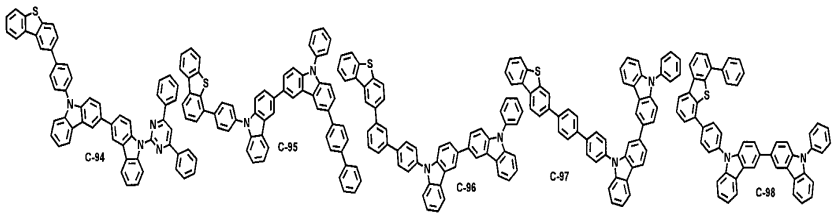

C-62
C-63
C-64
C-65

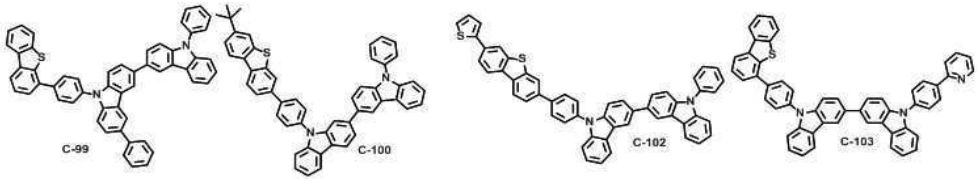

C-70
C-71
C-72

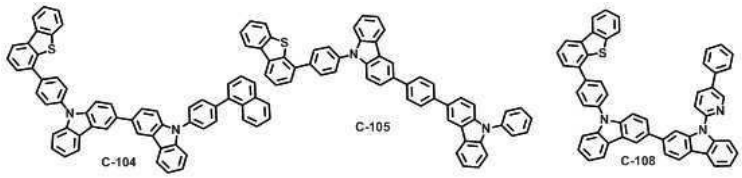

C-79
C-80
C-81

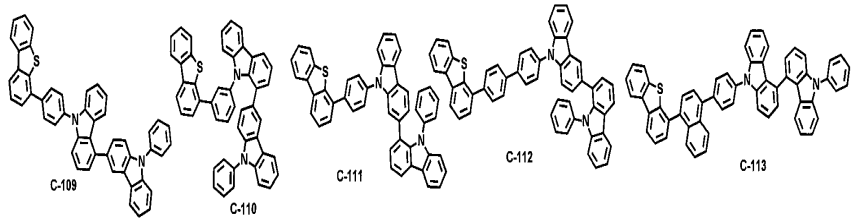

C-83
C-84
C-85
C-86
C-87
C-88

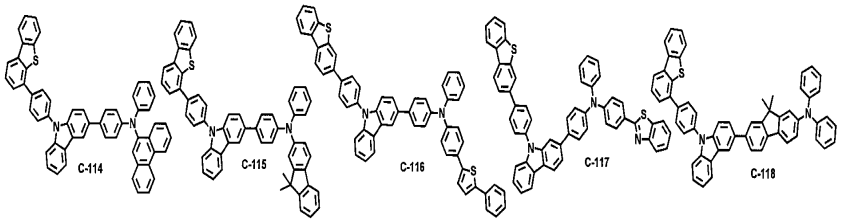

C-89
C-90
C-91
C-92

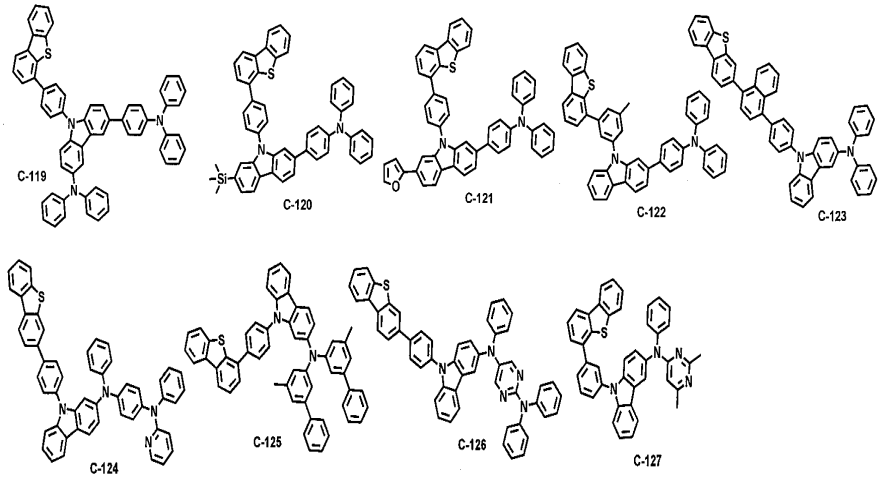

C-94
C-95
C-96
C-97
C-98


C-99
C-100
C-102
C-103


C-104
C-105
C-108


C-109
C-110
C-111
C-112
C-113


C-114
C-115
C-116
C-117
C-118



청구항 6

제1항의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

명 세 서

기 술 분 야

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

배 경 기 술

[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 4배까지 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)$_2$], 트리스(2-페닐피리딘)이리듐 [Ir(ppy)$_3$] 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'-디카르바졸-비페닐(CBP)이 가장 널리 알려져 있었다. 최근에는, 일본의 파이오니어 등이 정공 차단층의 재료로 사용되던 바토큐프로인(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 = [(π전압) > 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]바이페닐(NPB), N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-(1,1'-바이페닐)-4,4'-다이아민(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 제2011-0117168호는 2개 이상의 헤테로아릴환이 아릴기를 통해 연결된 치환기가 아릴기를 통해 아민에 결합한 화합물을 유기 전계 발광 소자용 화합물로 개시하고 있다. 그러나, 상기 문헌에 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 제2011-0117168호 (2011년 10월 26일 공개)

발명의 내용

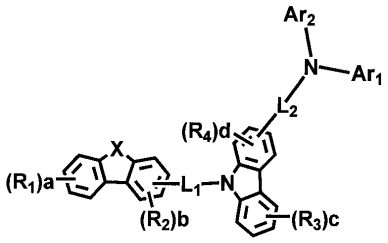
해결하려는 과제

[0009] 따라서 본 발명의 목적은 첫째, 기존의 재료보다 발광 효율 및 소자 수명이 우수한 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 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0011] [화학식 1]

[0012] 

[0013] 상기 화학식 1에서

[0014] L_1 및 L_2는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고;

[0015] Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나, Ar_1과 L_2는 결합하고 있는 질소와 함께 질소 함유 (5-30원)헤테로아릴을 형성할 수 있고;

[0016] X 는 -S- 또는 $-C(R_5)(R_6)-$를 나타내고;

[0017] R_1 내지 R_6는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

[0018] R_{11} 내지 R_{20}는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며;

[0019] a 및 c는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이며, 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R_1 및 각각의 R_3은 동일하거나 상이할 수 있고;

[0020] b 및 d는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며, 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R_2 및 각각의 R_4는 동일하거나 상이할 수 있고;

[0021] 상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

[0022] 상기 헤테로시클로알킬은 O, S 및 N에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며,

[0023] 단, X가 $-C(R_5)(R_6)-$인 경우, Ar_1과 L_2가 융합하여 형성되는 헤테로아릴에서 카바졸 고리는 제외된다.

발명의 효과

[0024] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 발광 효율이 좋고 수명 특성이 뛰어나다. 또한, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 구동 전압이 낮고 전류 효율 및 작동 수명이 향상된 OLED 소자를 제공한다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0025] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.

[0026] 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.

[0027] 본 발명의 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

[0028] 상기 화학식 1에서, 바람직하게는,

[0029] 상기 L_1 및 L_2는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C20) 아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴렌이고;

[0030] 상기 Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴이고;

[0031] 상기 R_1 및 R_6는 각각 독립적으로 수소, 할로겐, 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, R_{11} 및 R_{12}는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고, R_{13} 내지 R_{15}는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬이다.

[0032] 상기 화학식 1에서, 보다 바람직하게는,

[0033] 상기 L_1 및 L_2은 각각 독립적으로 단일결합, 비치환된 (C6-C16)아릴렌, (C1-C6)알킬로 치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 비치환된 (5-10원)헤테로아릴렌이고;

[0034] 상기 Ar_1 및 Ar_2은 각각 독립적으로 비치환된 (C6-C15)아릴; (C1-C6)알킬, (C6-C20)아릴, (C1-C6)알킬(C6-C20)아릴, 디(C6-C20)아릴아미노, (C6-C20)아릴(5-21원)헤테로아릴아미노 또는 (5-21원)헤테로아릴로 치환된 (C6-C15)아릴; 비치환된 (5-15원)헤테로아릴; 또는 (C1-C6)알킬, (C6-C20)아릴, (C1-C6)알킬(C6-C20)아릴 또는 디(C6-C20)아릴아미노로 치환된 (5-15원)헤테로아릴이고;

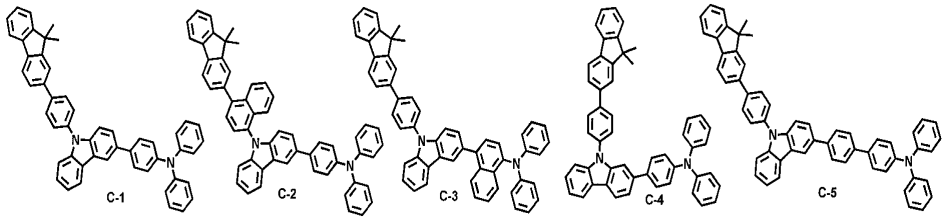
[0035] 상기 R_1 내지 R_6는 각각 독립적으로 수소, 할로겐, 비치환된 (C1-C6)알킬, (C1-C6)알킬로 치환된 실릴, (C1-C6)알킬로 치환되거나 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 비치환된 (5-21원)헤테로아릴이다.

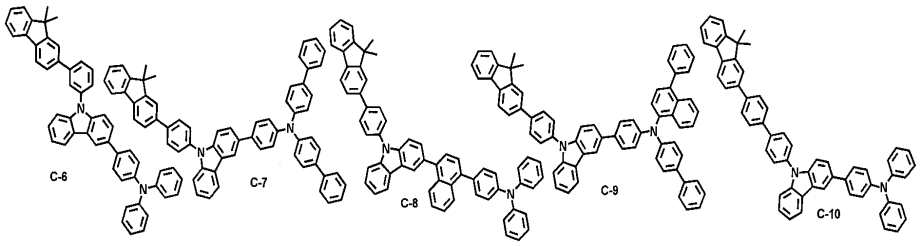
[0036] 본 발명에 기재되어 있는 "(C1-C30)알킬"은 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 3급-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알케닐"은 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 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 15개인 것이 바람직하다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 플루오레닐, 페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 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 아릴 기를 의미한다. 여기에서 환 골격 원자수가 5 내지 15개인 것이 바람직하다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴(렌)은 하나 이상의 헤테로아릴 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, 피리딜, 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.

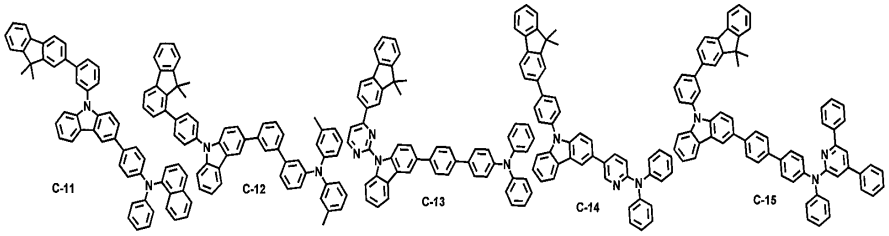
[0037] 또한 본 발명에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기(즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 상기 화학식 1 에서, 치환 알킬, 치환 알케닐, 치환 알키닐, 치환 알콕시, 치환 시클로알킬, 치환 시클로알케닐, 치환 헤테로시클로알킬, 치환 아릴(렌) 또는 치환 헤테로아릴(렌)의 치환체는 서로 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (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, (C6-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-

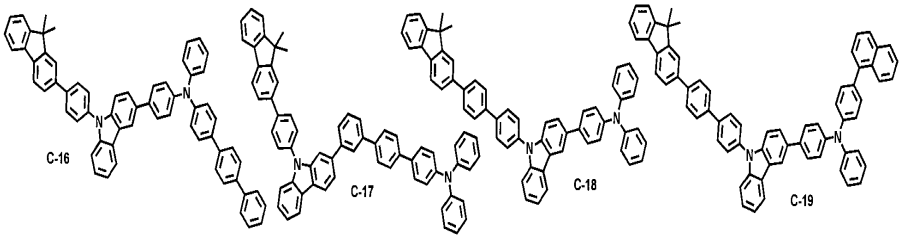
C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상인 것이 바람직하다.

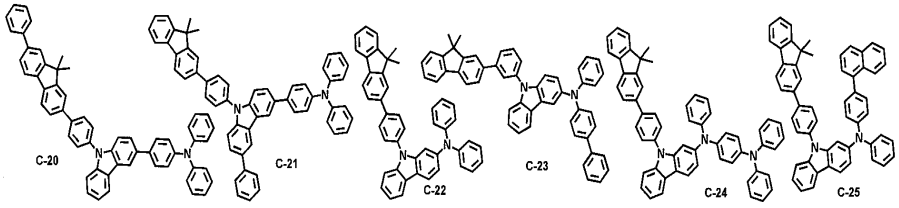
[0038] 본 발명에 따른 화합물로는 대표적으로 하기의 화합물을 들 수 있다.

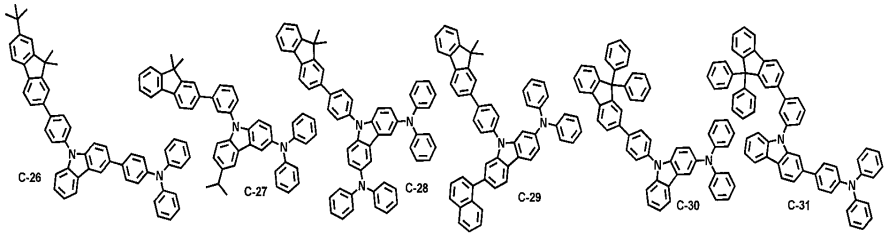
[0039] 

[0040] 

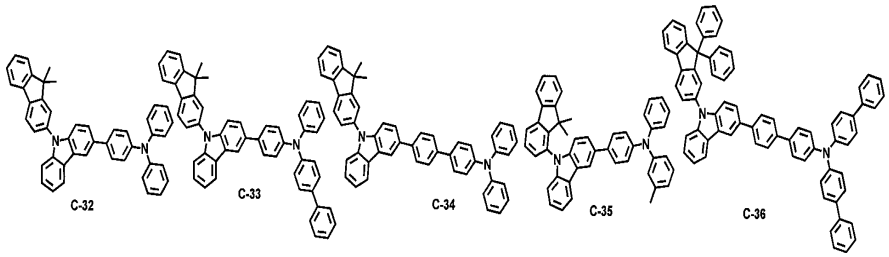
[0041] 

[0042] 

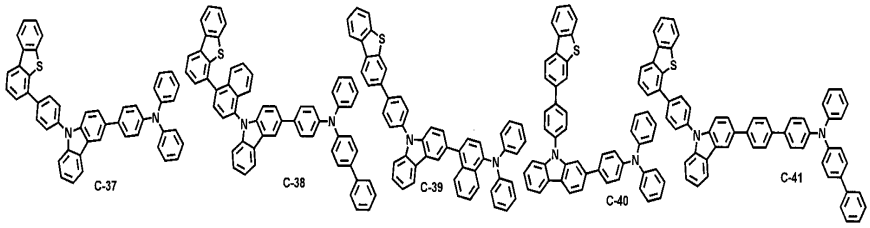
[0043] 

[0044] 

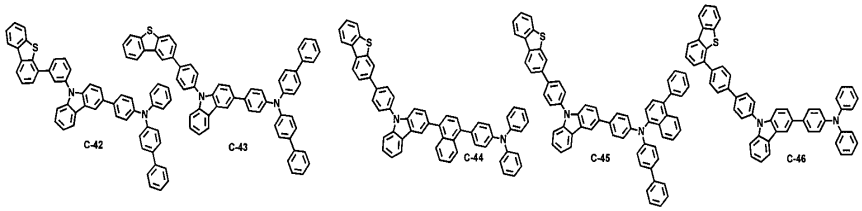
[0045]



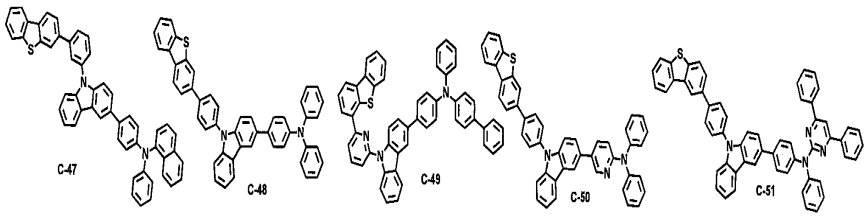
[0046]



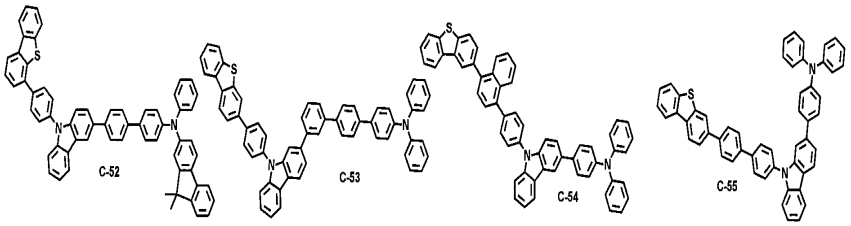
[0047]



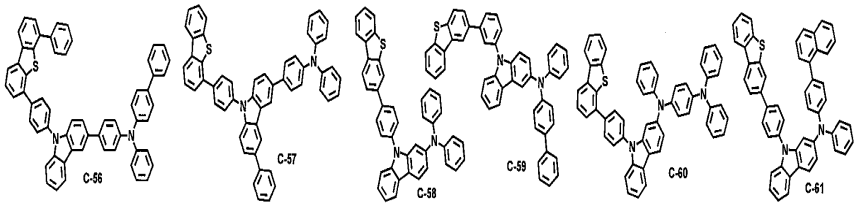
[0048]



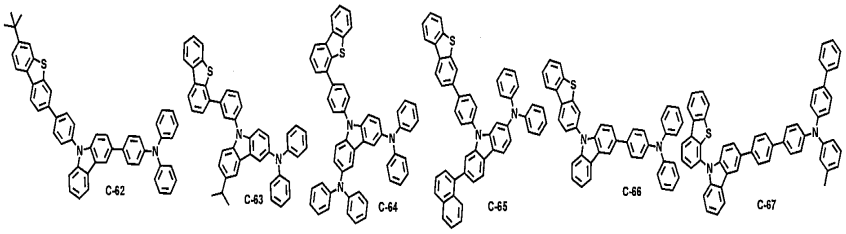
[0049]



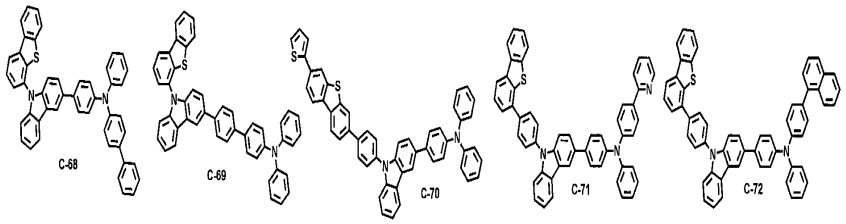
[0050]



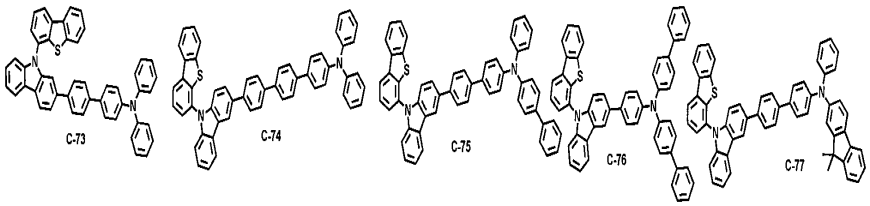
[0051]



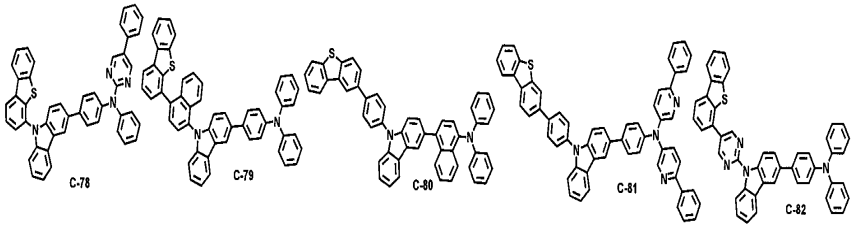
[0052]



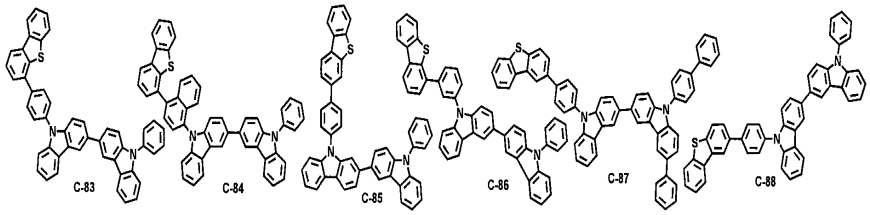
[0053]



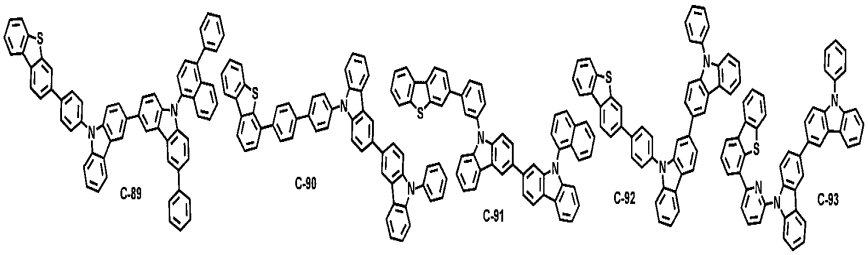
[0054]



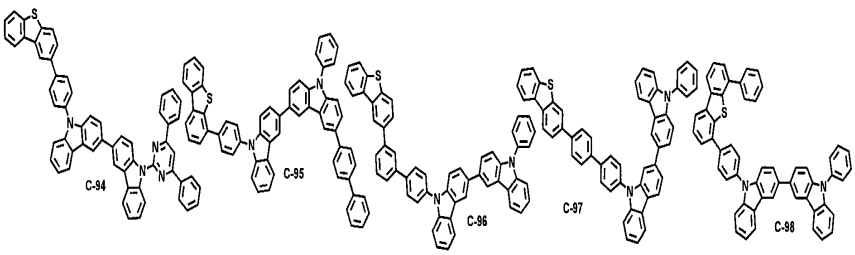
[0055]



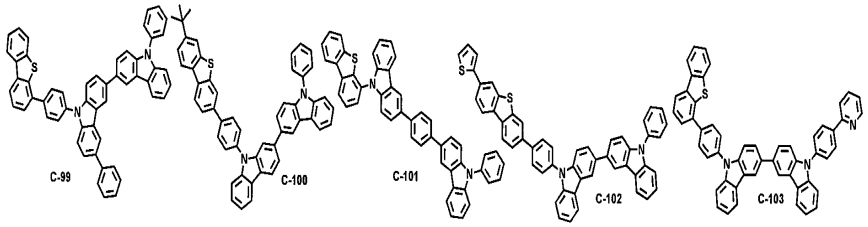
[0056]



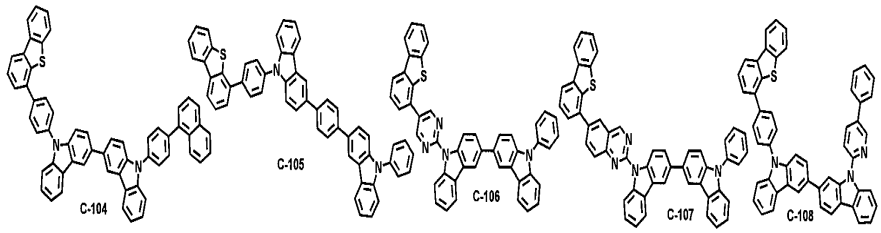
[0057]



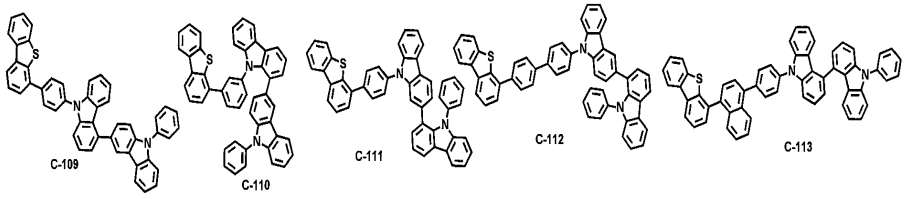
[0058]



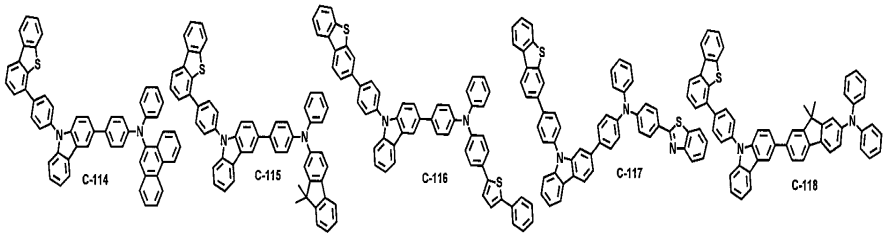
[0059]



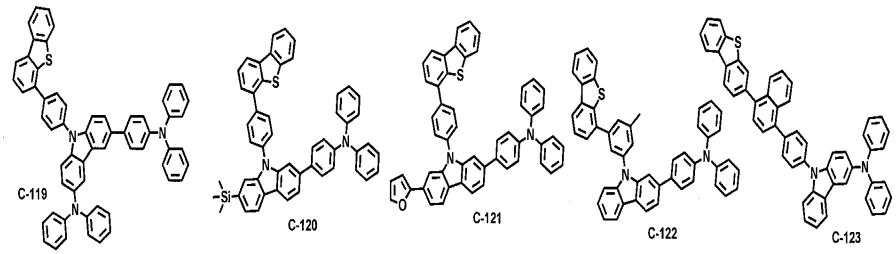
[0060]



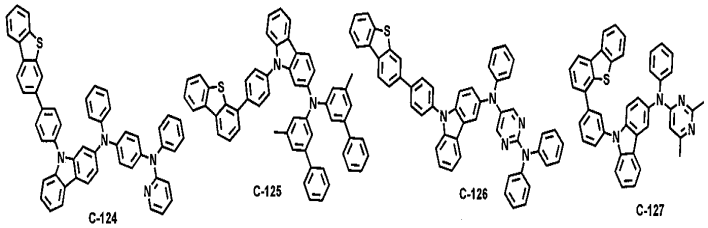
[0061]



[0062]

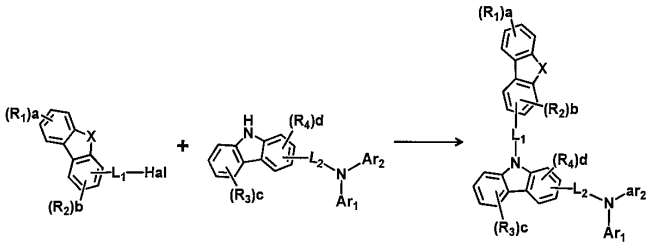


[0063]



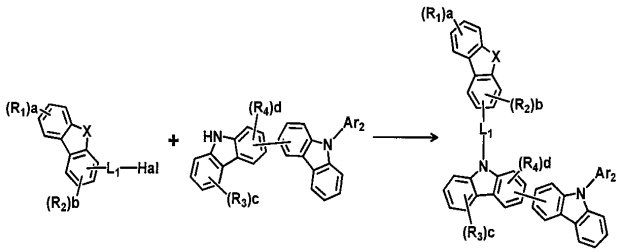
[0064] 본 발명에 따른 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면, 하기 반응식 1 또는 반응식 2에 따라 제조할 수 있다.

[0065] [반응식 1]



[0066]

[0067] [반응식 2]



[0068]

[0069] [상기 반응식 1및 2에서 X, L_1, L_2, Ar_1, Ar_2, R_1 내지 R_4, a, b, c 및 d는 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하고, Hal는 할로겐이다]

[0070] 본 발명의 추가의 양태로, 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 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖고, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 화합물을 하나 이상 포함한다.

[0071] 상기 제1전극과 제2전극 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.

[0072] 본 발명의 화학식 1의 화합물은 상기 발광층 및 정공 수송층중 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.

[0073] 상기 제2 호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하나, 하기 화학식 2 내지 4로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 발광 효율 면에서 특히 바람직하다.

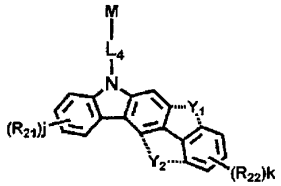
[0074] [화학식 2]

[0075] $H-(Cz-L_4)_h-M$

[0076] [화학식 3]

[0077] $H-(Cz)_i-L_4-M$

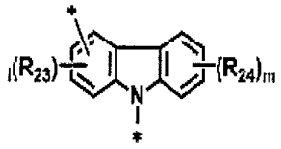
[0078] [화학식 4]



[0079]

[0080] 상기 화학식 2 내지 4에서,

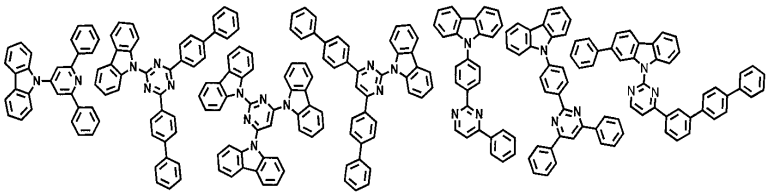
[0081] Cz는 하기 구조이며,

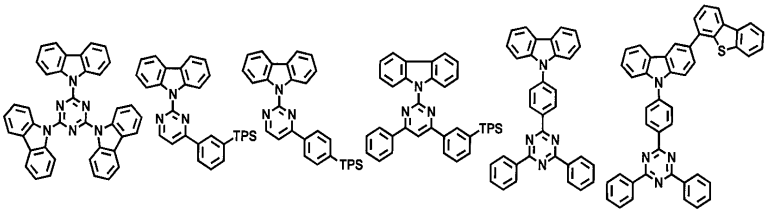


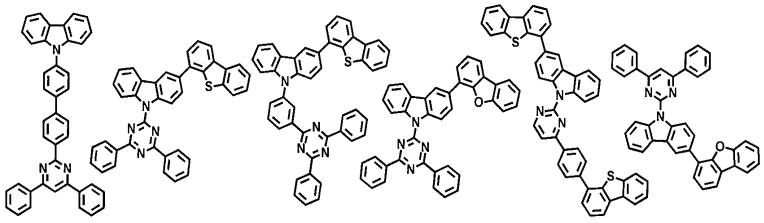
[0082]

[0083] R_{21} 내지 R_{24}는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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}은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; L_4는 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_2는 -O-, -S-, $-N(R_{31})-$ 또는 $-C(R_{32})(R_{33})-$이고, Y_1과 Y_2가 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 ($Cz-L_4$), 각각의 (Cz), 각각의 R_{21}, 각각의 R_{22}, 각각의 R_{23} 또는 각각의 R_{24}는 동일하거나 상이할 수 있다.

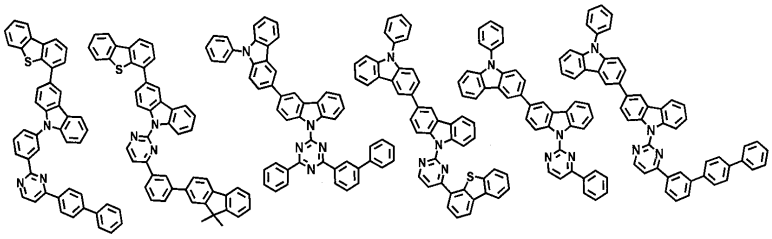
[0084] 구체적으로 상기 제2호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같다.

[0085] 

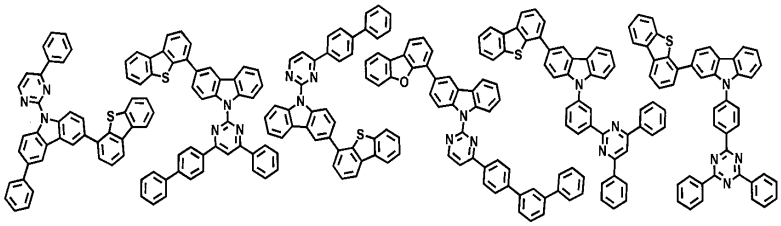
[0086] 

[0087] 

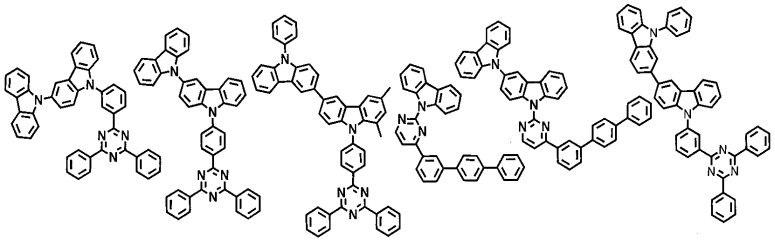
[0088]



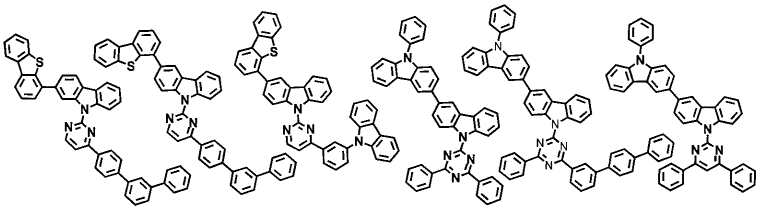
[0089]



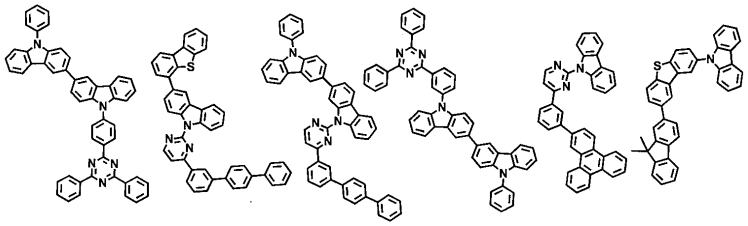
[0090]



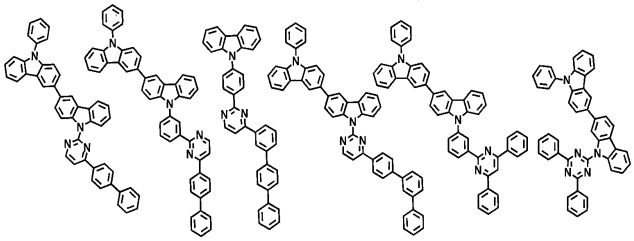
[0091]

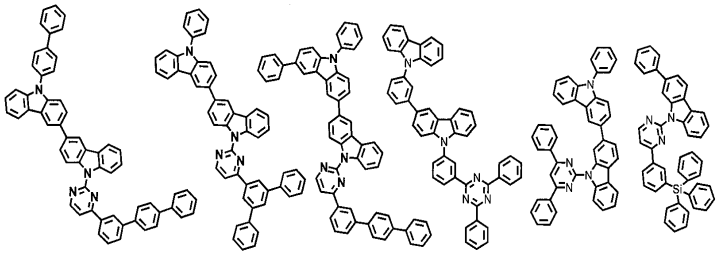


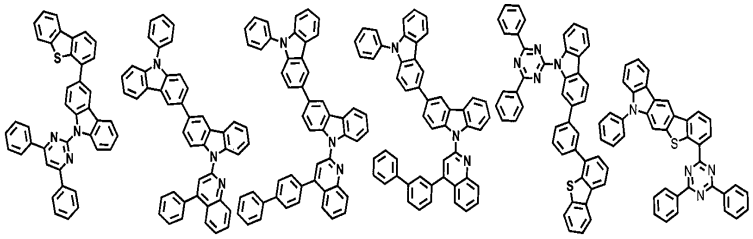
[0092]

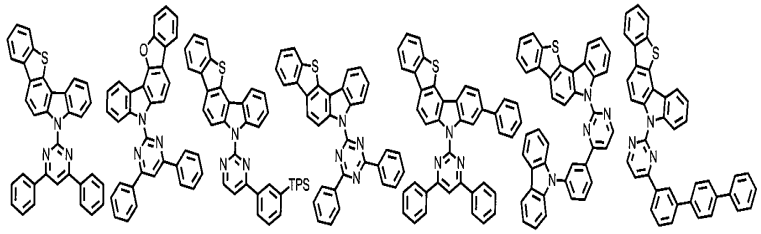


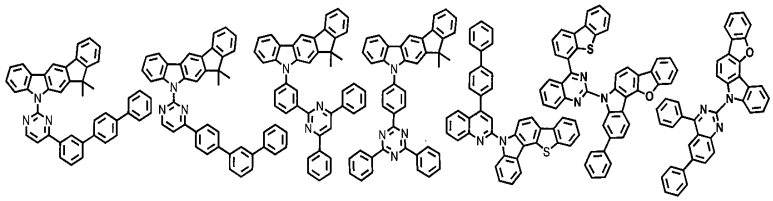
[0093]





[0094] 

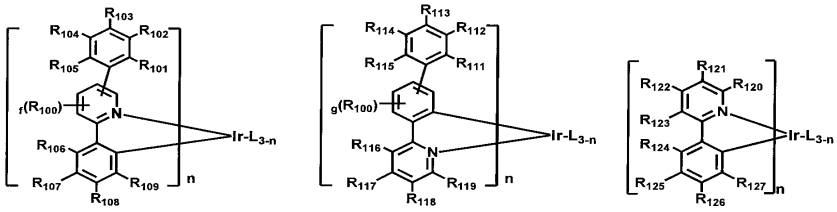
[0095] 

[0096] 

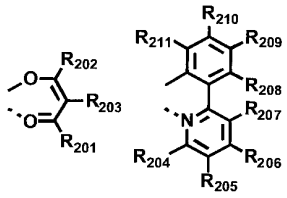
[0097] 본 발명의 유기 전계 발광 소자 제조에 사용되는 도펀트로는 하나 이상의 인광 도펀트가 바람직하다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도펀트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물이 바람직하고, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물이 더욱 바람직하며, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물이 더더욱 바람직하다.

[0098] 상기 인광 도펀트는 하기 화학식으로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.

[0099] [화학식 5] [화학식 6] [화학식 7]

[0100] 

[0101] 상기 화학식 5 내지 7에서, L은 하기 구조중에서 선택되고;

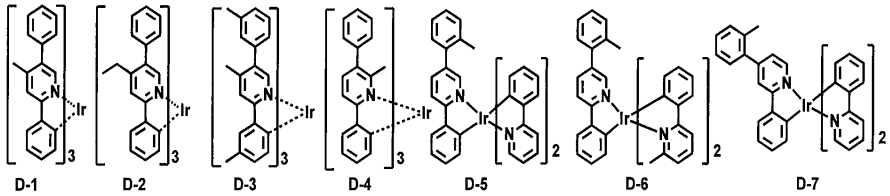
[0102] 

[0103] R_{100}은 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬이며; R_{101} 내지 R_{109} 및 R_{111} 내지 R_{123}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 할로겐이 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; 또는 R_{120} 내지 R_{123}는 인접 치환기가 서로 연결되어 융합고리를 형성하는데, 예를 들어 퀴놀린 형성이 가능하며; R_{124} 내지 R_{127}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아릴이며; 또는 R_{124} 내지 R_{127}가 아릴기인 경우 인접기가 서로 연결되어 융합고

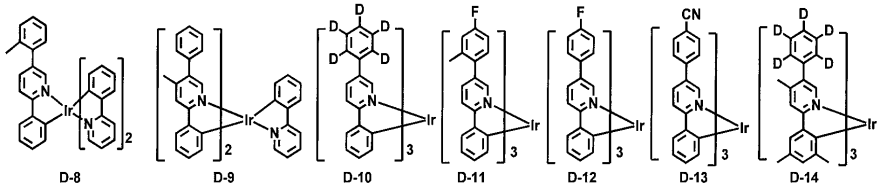
리를 형성하는데, 예를 들어 플루오렌 형성이 가능하며; R_{201} 내지 R_{211}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 또는 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬이며; f 및 g는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며, f 또는 g가 각각 2이상의 정수인 경우 각각의 R_{100}은 서로 동일하거나 상이할 수 있고; n은 1 내지 3의 정수이다.

[0104] 상기 인광 도펀트 재료의 구체적인 예로는 다음과 같다.

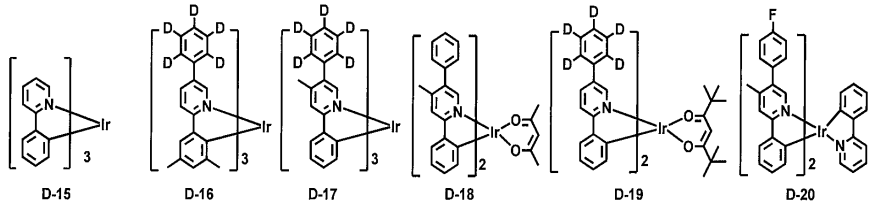
[0105]



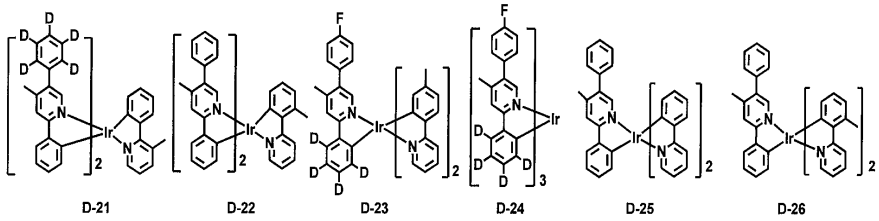
[0106]



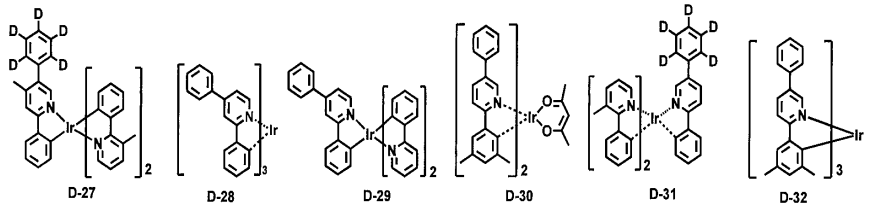
[0107]



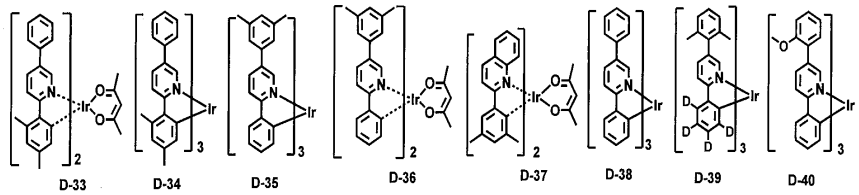
[0108]

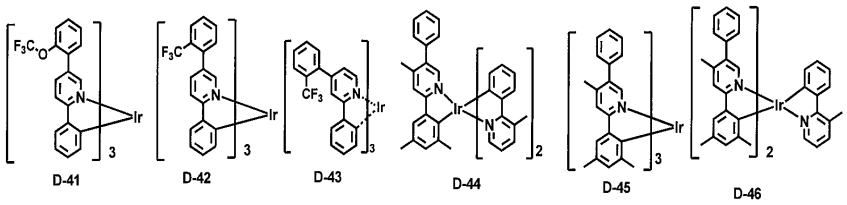


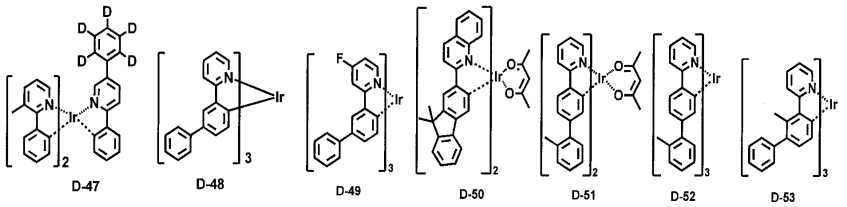
[0109]

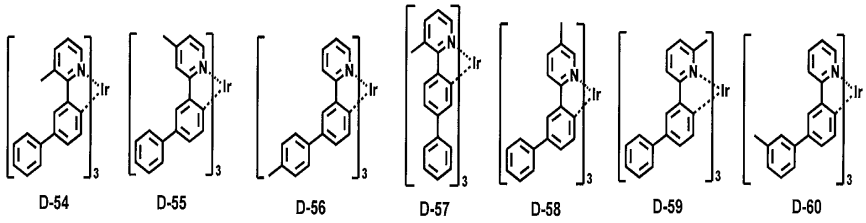


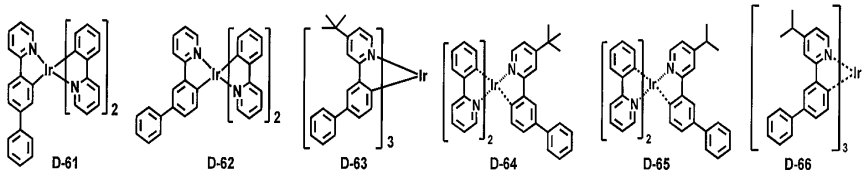
[0110]

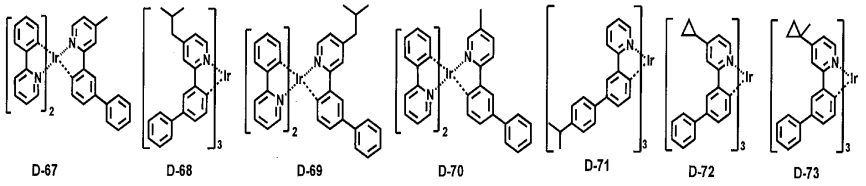


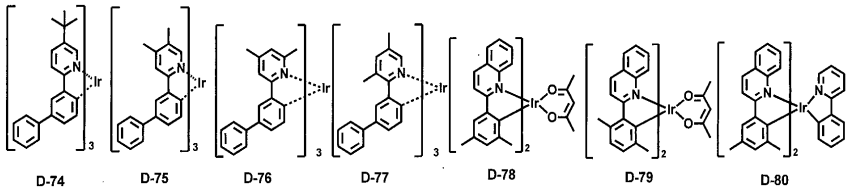
[0111] 

[0112] 

[0113] 

[0114] 

[0115] 

[0116] 

[0117] 본 발명은 추가의 양태로 유기 전계 발광소자 제조용 재료를 제공한다. 상기 재료는 호스트 재료 또는 정공 수송층 재료로서 본 발명의 화합물을 포함한다. 본 발명의 화합물이 호스트 재료로 포함될 경우 상기 재료는 제2 호스트 재료를 추가로 포함할 수 있으며, 이때 제1 호스트 재료와 제2 호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

[0118] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 가지며, 상기 유기물층은 본 발명의 유기 전계 발광 소자용 재료를 포함한다.

[0119] 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.

[0120] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1의 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란탄 계열 금속 및 d-전이원소의 유기 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금

속 또는 착체화합물을 더 포함할 수도 있고, 나아가 상기 유기물층은 발광층 및 전하생성층을 더 포함할 수 있다.

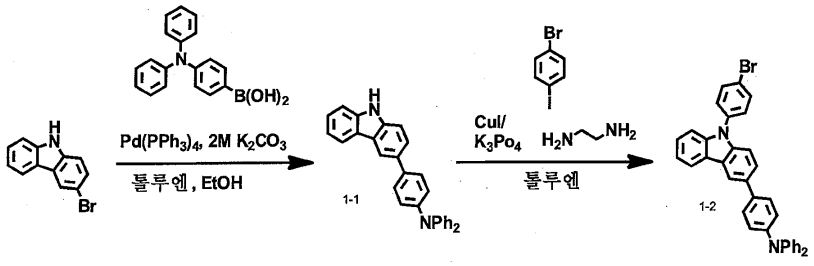
[0121] 또한, 본 발명의 상기 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 화합물 이외에 당업계에 알려진 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함하는 발광층 하나 이상을 더 포함함으로써 백색 발광을 할 수 있다. 또한, 필요에 따라, 황색 또는 오렌지색 발광층을 더 포함할 수도 있다.

[0122] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측 표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 금속층 및 금속 산화물층으로 부터 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 발광 매체층 측의 음극 표면에 할로겐화 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, 할로겐화 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.

[0123] 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.

[0124] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광 특성을 설명한다.

[0125] [실시예 1] 화합물 C-37의 제조



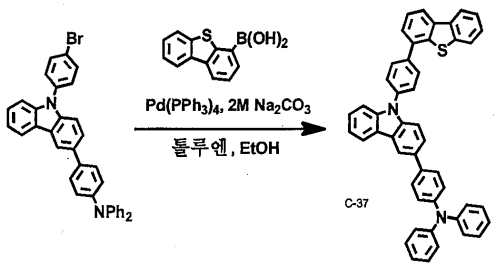
[0126]

[0127] 화합물 1-1의 제조

[0128] 둥근 바닥 플라스크에 3-브로모카바졸 10.6g(178 mmol), 트리페닐아민-4-보론산 15g(52mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)[$Pd(PPh_3)_4$] 2.5g(2.2mmol), K_2CO_3 14g(104mmol), 톨루엔 150mL, 에탄올 50mL 및 물 50mL를 넣고, 환류하에 4시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물은 에틸 아세테이트(EA)/H_2O로 끝처리하고, $MgSO_4$로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 조 생성물을 메틸렌 클로라이드(MC):헥산(Hx)으로 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 1-1, 11g(62%)을 흰색 고체로 수득하였다.

[0129] 화합물 1-2의 제조

[0130] 둥근 바닥 플라스크에 화합물 1-1[4-(9H-카바졸-3-일)-N,N-디페닐아닐린] 10g(24.4mmol), 요오도-4-브로모벤젠 13.8g(48.8mmol), CuI 2.3g(12.2mmol), 에틸렌디아민 1.6mL(24.4mmol), K_3PO_4 13g(61mmol) 및 톨루엔 150mL를 넣고, 환류하에 밤새 교반하였다. 반응 혼합물을 EA/H_2O로 추출하고, $MgSO_4$로 남아 있는 수분을 제거하였다. 감압증류하여 얻은 조 생성물을 MC:Hx으로 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 1-2, 11g(80%)의 생성물을 수득하였다.



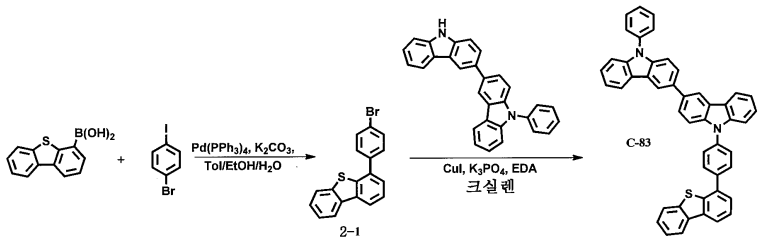
[0131]

[0132] 화합물 C-37의 제조

[0133] 둥근 바닥 플라스크에 화합물 1-2[4-(9-(4-브로모페닐)-9H-카바졸-3-일)-N,N-디페닐아닐린] 6g(10.6mmol), 디벤조티오펜-4-보론산 2.9g(12.7mmol), $Pd(PPh_3)_4$ 0.6g(0.53mmol), K_2CO_3 3.6g(26.5mmol), 톨루엔 45mL, 에탄올 15mL 및 물 15mL를 넣고, 환류하에 4시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물은 EA/H_2O로 추출하고, $MgSO_4$로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 조 생성물을 MC:Hx으로 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 C-37, 5.2g(73%)을 흰색 고체로 수득하였다.

[0134] MS/ EIMS 측정치 668.8; 계산치 668.23,

[0135] [실시예 2] 화합물 C-83의 제조



[0136]

[0137] 화합물 2-1의 제조

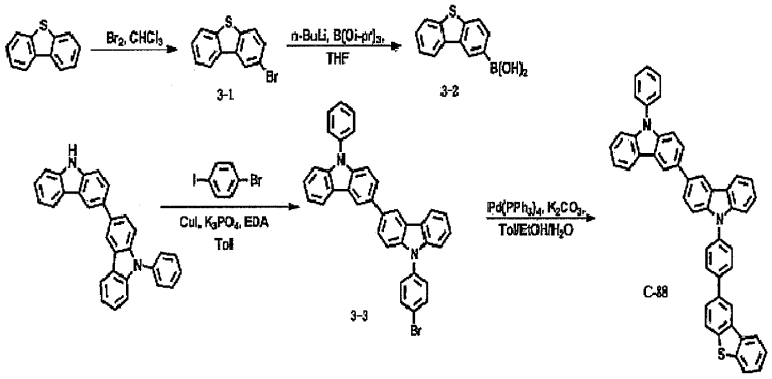
[0138] 둥근 바닥 플라스크에 디벤조[b,d]디오펜-4-일 보론산(30g, 0.13mol), 1-브로모-4-요오도벤젠(93g, 0.33mol), $Pd(PPh_3)_4$(7.6g, 0.0065mol), Na_2CO_3(28g, 0.26mol), 톨루엔(400mL) 및 H_2O(130mL)를 넣은 후 120℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 에틸 아세테이트를 사용하여 추출한 뒤 유기층을 $MgSO_4$로 건조시키고, 여과한 후 감압 하에서 용매를 제거한 후, 컬럼 크로마토그래피하여 흰색 고체로서 화합물 2-1(24g, 54%)을 수득하였다.

[0139] 화합물 C-83의 제조

[0140] 둥근 바닥 플라스크에 화합물 2-1(6.00g, 17.7mmol), 9-페닐-9H,9'H-3,3'-비카바졸(7.59g, 18.6mmol), CuI(1.68g, 8.84mmol), K_3PO_4(11.3g, 53.0mmol) 및 크실렌(120mL)을 넣은 후 160℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 여과하고 메탄올로 세척하고, 실리카 여과하였다. 감압 하에서 용매를 제거한 후, 재결정화하여 흰색 고체로서 화합물 C-83(5.5g, 47%)을 수득하였다.

[0141] MS/ EIMS 측정치 666.8; 계산치 666.21,

[0142] [실시예 3] 화합물 C-88의 제조



[0143]

[0144] 화합물 3-1의 제조

[0145] 둥근 바닥 플라스크에디벤조[b,d]티오펜(70g, 0.37mol), 브롬(17.6mL, 0.34mol) 및 클로로포름(2000mL)을 넣은 후 상온에서 48시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌 클로라이드를 사용하여 추출한 뒤 유기층을 $MgSO_4$로 건조시키고, 여과한 후 감압 하에서 용매를 제거한 후, 재결정화하여 흰색 고체로서 화합물 3-1(43g, 43%)을 수득하였다.

[0146] 화합물 3-2의 제조

[0147] 무수 조건의 둥근 바닥 플라스크에 무수 테트라하이드로푸란(THF) (1200mL) 및 화합물 3-1(25g, 0.095mol)을 넣은 후 질소하에서 교반하면서 -78℃에서 *n*-BuLi(95mL, 헥산 중 2.25M 용액)을 천천히 넣어주었다. -78℃에서 1시간 동안 교반하고, -78℃에서 붕소 트리-이소프로폭사이드[$B(O\text{-}iPr)_3$](110mL, 0.47mol)를 천천히 넣은 후 상온으로 온도를 올려 12시간 동안 반응시켰다. 반응 종결 후 에틸 아세테이트를 사용하여 추출한 뒤 유기 층을 $MgSO_4$로 건조시키고, 여과한 후 감압 하에서 용매를 제거한 후, 재결정화하여 흰색 고체로서 화합물 3-2(20g, 92%)를 수득하였다.

[0148] 화합물 3-3의 제조

[0149] 둥근 바닥 플라스크에 9-페닐-9H,9'H-3,3'-비카바졸(20g, 0.49mol), 1-브로모-4-요오도벤젠(28g, 0.98mol), CuI(9.3g, 0.49mol), K_3PO_4(26g, 0.12mol), 에틸렌디아민(EDA)(3.3ml, 0.05mmol) 및 톨루엔(300mL)을 넣은 후 120℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 여과하고 메탄올로 세척하고 컬럼 크로마토그래피하였다. 감압 하에서 용매를 제거한 후, 재결정화하여 흰색 고체로서 화합물 3-3(17g, 62%)을 수득하였다.

[0150] 화합물 C-88의 제조

[0151] 둥근 바닥 플라스크에 화합물 3-3(6.2g, 11.0mmol), 화합물 3-2(3.3g, 14.4mol), $Pd(PPh_3)_4$(0.64g, 0.55mol), Na_2CO_3(2.33g, 0.022mol), 톨루엔(70ml) 및 H_2O(10mL)를 넣은 후 120℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 여과하고 메탄올로 세척하고 컬럼 크로마토그래피하였다. 감압 하에서 용매를 제거한 후, 재결정화하여 흰색 고체로서 화합물 C-88(3g, 41%)을 수득하였다.

[0152] MS/ EIMS 측정치 666.8; 계산치 666.21,

[0153] [소자 실시예 1] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0154] 본 발명의 발광 재료를 이용한 구조의 OLED 소자를 제작하였다. 우선, OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막(15Ω/□)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 이어서, 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO기판을 장착한 후, 진공 증착장비 내의 셀에 N^1,$N^{1'}$-([1,1'-바이페닐]-4,4'-디일)비스(N^1-(나프탈렌-1-일)-N^4,N^4-다이페닐벤젠-1,4-다이아민)을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 60nm 두께의 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 C-37을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 정공 주입층 위에 20nm 두께의 정공 수송층을 증착하였

다. 정공 주입층 및 정공 수송층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 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-1**을 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 전달층으로서 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. 재료별로 각 화합물은 10^{-6}torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0155] 그 결과, 10.5mA/cm^2의 전류가 흘렀으며, 4300cd/m^2의 녹색 발광이 확인되었다.

[0156] [소자 실시예 2] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0157] 정공 수송층으로서 C-83을 20nm 두께로 증착하고 발광층으로서 진공 증착 장비내의 한쪽 셀에 9-(4-([1,1'-비페닐]-4-일)퀴나졸린-2-일)-9'-페닐-9H,9'H-3,3'-비카바졸을 넣고, 또 다른 셀에는 도펀트로서 **D-78**을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 도펀트와 호스트 합계량에 대해 도펀트를 3중량%로 도핑함으로써 상기 정공 수송층 위에 30nm 두께의 발광층을 증착한 것 이외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0158] 그 결과, 10.0mA/cm^2의 전류가 흘렀으며, 1480cd/m^2의 적색 발광이 확인되었다.

[0159] [비교예 1] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제작

[0160] 정공 수송층으로서 N,N'-디(4-비페닐)-N,N'-디(4-비페닐)-4,4'-디아미노비페닐을 20nm 두께로 증착하였고 발광재료로서 호스트에는 4,4 '-N,N'-디카바졸-비페닐을, 도펀트로는 화합물 **D-15**를 사용하고, 정공 수송층위에 30nm 두께의 발광층을 증착하고, 정공 저지층으로 알루미늄(III) 비스(2-메틸-8-퀴놀리네이토)4-페닐페놀레이트를 10nm 두께로 증착한 것 외에는 소자 실시예1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.

[0161] 그 결과, 15.30mA/cm^2의 전류가 흘렀으며, 4750cd/m^2의 녹색 발광이 확인되었다.

[0162] [비교예 2] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제작

[0163] 정공 수송층으로서 N,N'-디(4-비페닐)-N,N'-디(4-비페닐)-4,4'-디아미노비페닐을 20nm 두께로 증착하였고, 발광재료로서 호스트에는 CBP를, 도펀트로는 **D-50**을 사용해서 정공 수송층위에 30nm 두께의 발광층을 증착하고 정공 저지층으로 알루미늄(III) 비스(2-메틸-8-퀴놀리네이토)4-페닐페놀레이트를 10nm 두께로 증착한 것 외에는 소자 실시예1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.

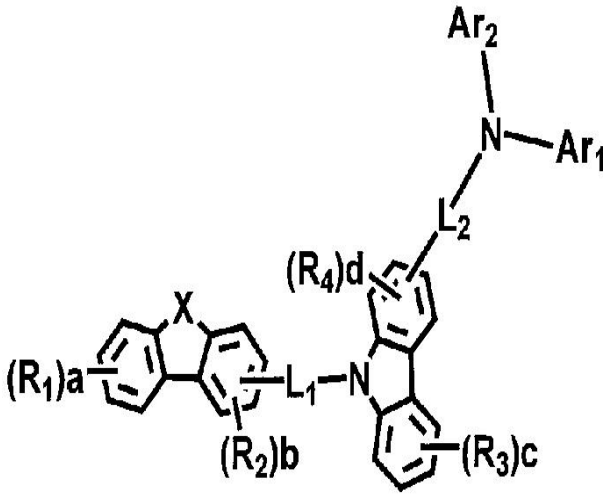
[0164] 그 결과, 27.2A/cm^2의 전류가 흘렀으며, 3480cd/m^2의 적색 발광이 확인되었다

[0165] 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 특성이 뛰어나고 전류 효율이 향상된다.

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	KR101483933B1	公开(公告)日	2015-01-19
申请号	KR1020120115201	申请日	2012-10-17
[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)	롬엔드하스전자재료코리아유한회사		
当前申请(专利权)人(译)	롬엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	AHN HEE CHOON 안희춘 YANG SOO JIN 양수진 KIM SEUNG AE 김승애 LEE KYUNG JOO 이경주 LEE TAE JIN 이태진 KWON HYUCK JOO 권혁주 KIM BONG OK 김봉옥		
发明人	안희춘 양수진 김승애 이경주 이태진 권혁주 김봉옥		
IPC分类号	H01L51/00 H01L51/50 C07D401/04 C07D409/04 C07D409/10 C07D409/14 C07D417/14 C07D209/86		
CPC分类号	C09K2211/1011 C07F7/0812 H01L51/5012 H01L51/0072 C09K2211/1029 C09K2211/1092 H01L51/0061 C09K2211/1037 C07D409/14 C07D401/12 C07D417/14 C07D409/04 C09K2211/1007 C09K11/06 H01L51/0074 C07D209/86 C09K2211/1088 C09K2211/1044 C07D409/10 C07D401/04 C07D209/88		
代理人(译)	李昌勋		
其他公开文献	KR1020140049227A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及一种新型有机电致发光化合物和含有该化合物的有机电致发光器件。通过使用根据本发明的有机电致发光化合物，有机电致发光器件可以具有高发光效率，长寿命和高电流效率。


Ar2
N
Ar1
L2
(R4)d
X
(R1)a
L1
N
(R2)b
(R3)c