



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2013-0091888
 (43) 공개일자 2013년08월20일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *C07D 491/048* (2006.01)
C07D 251/12 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2012-0013204
 (22) 출원일자 2012년02월09일
 심사청구일자 2013년02월22일

(71) 출원인
단국대학교 산학협력단
 경기도 용인시 수지구 죽전동 126 단국대학교 내
 (72) 발명자
이준엽
 경기도 성남시 분당구 금곡동 분당두산위브아파트
 105동 304호
이철원
 경기도 용인시 수지구 죽전동 1329 성현마을 우미
 이노스빌 205동 1203호
 (74) 대리인
특허법인 다해

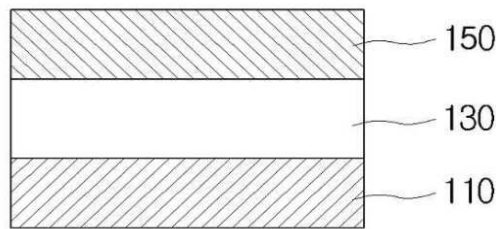
전체 청구항 수 : 총 12 항

(54) 발명의 명칭 **트리아진 유도체 화합물 및 이를 포함하는 유기전계 발광소자**

(57) 요약

본 발명은 트리아진 유도체 화합물 및 이를 포함하는 유기전계 발광소자에 관한 발명으로서, 본 발명에 따르면, 기존의 유기전계 발광소자용 화합물과 비교하여 우수한 양자효율을 나타내며, 구동전압이 향상된 유기전계 발광소자용 트리아진 유도체 화합물 및 이를 포함하는 유기전계 발광소자를 제공한다.

대표도 - 도1



이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 KI002104

부처명 지식경제부/정보통신연구진흥원

연구사업명 산업원천기술개발사업

연구과제명 플렉서블 복합 기능 유기 전자 소자 기반 기술 개발

주관기관 서울대학교

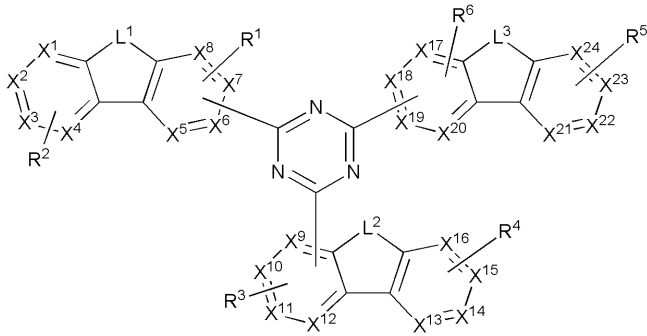
연구기간 2011.03.01 ~ 2012.02.28

특허청구의 범위

청구항 1





하기 구조식 1로 표시되는 유기전계 발광소자용 트리아진 유도체 화합물.

[구조식 1]



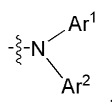
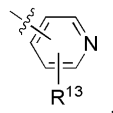
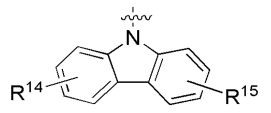
구조식 1에서,

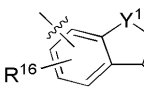
X¹ 내지 X²⁴는 각각 독립적으로 탄소원자 또는 질소원자이고, X¹ 내지 X²⁴ 중에서 선택된 1종 이상은 질소원자이고,

L¹ 내지 L³은 각각 독립적으로 산소원자, 황원자, , ,  및  중에서 선택된 1종이 고,

R⁷ 내지 R¹²는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C₁₋₉의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅₋₃₀의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 헤테로 아릴기이거나,

R⁷과 R⁸, 또는 R⁹와 R¹⁰은 서로 결합하여, 이들 사이에 존재하는 탄소 또는 규소원자 함께, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 포화 스파이로 고리 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 불포화 스파이로 고리를 형성하고,

R¹ 내지 R⁶은 각각 독립적으로 수소원자, , , ,

, 치환 또는 비치환된 C₁₋₉의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅₋₃₀의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 헤테로 아릴기이고,

R¹³ 내지 R¹⁷는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C₁₋₉의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅₋₃₀의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 헤테로아릴기이고,

Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 헤테로아릴기이고,

Y¹은 산소원자 또는 황원자이고,

R¹ 내지 R¹⁷, Ar¹ 및 Ar²에서의 "치환"에 해당하는 기는 각각 독립적으로 할로젠 원자, 시아노기, 나이트로기,

C₆₋₃₀의 아릴기, C₂₋₃₀의 헤테로 아릴기, C₁₋₉의 알킬기, C₅₋₃₀의 알킬환기, C₁₋₃₀의 티오기, 또는 C₁₋₃₀의 실릴기이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

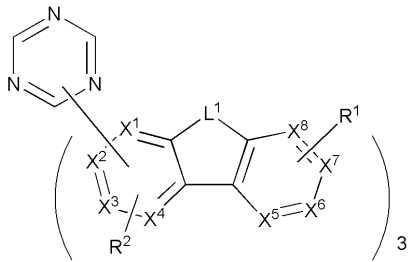
L¹ 내지 L³은 각각 독립적으로 산소원자 및 황원자 중에서 선택된 1종이고,

R¹ 내지 R⁶은 수소원자인 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자용 트리아진 유도체 화합물.

청구항 3

하기 구조식 2로 표시되는 유기전계 발광소자용 트리아진 유도체 화합물.

[구조식 2]



구조식 2에서,

X¹ 내지 X⁸은 각각 독립적으로 탄소원자 또는 질소원자이고, X¹ 내지 X⁸ 중에서 선택된 1종 이상은 질소원자이고,

L¹은 산소원자, 황원자, $\begin{matrix} \text{R}^7 \\ \text{C} \\ \text{R}^8 \end{matrix}$, $\begin{matrix} \text{R}^9 \\ \text{Si} \\ \text{R}^{10} \end{matrix}$, N-R^{11} 및 $\begin{matrix} \text{O} \\ \text{P} \\ \text{R}^{12} \end{matrix}$ 중에서 선택된 1종이고,

R⁷ 내지 R¹²는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C₁₋₉의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅₋₃₀의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 헤테로 아릴기이거나,

R⁷과 R⁸, 또는 R⁹와 R¹⁰은 서로 결합하여, 이들 사이에 존재하는 탄소 또는 규소원자 함께, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 포화 스파이로 고리 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 불포화 스파이로 고리를 형성하고,

R¹ 및 R²는 각각 독립적으로 수소원자, $\begin{matrix} \text{Ar}^1 \\ \text{N} \\ \text{Ar}^2 \end{matrix}$, $\begin{matrix} \text{N} \\ \text{R}^{13} \end{matrix}$, $\begin{matrix} \text{R}^{14} \\ \text{N} \\ \text{R}^{15} \end{matrix}$, $\begin{matrix} \text{Y}^1 \\ \text{R}^{16} \\ \text{R}^{17} \end{matrix}$, 치환 또는 비치환된 C₁₋₉의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅₋₃₀의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 헤테로 아릴기이고,

R¹³ 내지 R¹⁷는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C₁₋₉의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅₋₃₀의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 헤테로아릴기이고,

Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 헤테로아릴기이고,

Y¹은 산소원자 또는 황원자이고,

R¹, R², R¹³ 내지 R¹⁷, Ar¹ 및 Ar²에서의 "치환"에 해당하는 기는 각각 독립적으로 할로겐 원자, 시아노기, 나이트

로기, C₆₋₃₀의 아틸기, C₂₋₃₀의 헥테로 아틸기, C₁₋₉의 알킬기, C₅₋₃₀의 알킬환기, C₁₋₃₀의 티오기, 또는 C₁₋₃₀의 실릴기이다.

청구항 4

제3항에 있어서,

L¹은 산소원자 및 황원자 중에서 선택된 1종이고,

R¹ 및 R²는 수소원자인 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자용 트리아진 유도체 화합물.

청구항 5

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 형성된 유기물층;을 포함하는 유기전계 발광소자에 있어서,

상기 유기물층은 제1항에 따른 트리아진 유도체 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

청구항 6

제5항에 있어서,

상기 유기물층은 전자수송층인 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

청구항 7

제5항에 있어서,

상기 유기물층은 전자주입층인 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

청구항 8

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 형성된 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트와 도펀트를 포함하는 유기전계 발광소자에 있어서,

상기 호스트는 제1항에 따른 트리아진 유도체 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

청구항 9

제8항에 있어서,

상기 제1전극과 발광층 사이에 정공수송층을 추가로 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

청구항 10

제8항에 있어서,

상기 제1전극과 발광층 사이에 정공주입층을 추가로 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

청구항 11

제8항에 있어서,

상기 제2전극과 발광층 사이에 전자수송층을 추가로 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

청구항 12

제8항에 있어서,

상기 제2전극과 발광층 사이에 전자주입층을 추가로 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 트리아진 유도체 화합물에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 유기전계 발광소자에 적용시 저전압 구동 및 고효율의 발광특성을 구현하는 트리아진 유도체 화합물 및 이를 포함하는 유기전계 발광소자에 관한 발명이다.

배경기술

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

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

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

[0005] 또한 기존의 트리아진 유도체들은 중앙에 트리아진 코어(triazine core)에 단순히 아릴 구조나 방향족 아민 또는 아릴옥시 치환기를 도입하여 발광호스트재료 또는 전자수송층 재료로 이용되어 왔다. 그러나 현재까지 청색 및 녹색 인광 소자의 효율 및 구동전압 측면에서 상용화 가능한 수준까지의 특성 개선을 기대하기 어려운 문제점이 있다. 따라서 기존의 트리아진 유도체 화합물 특성을 개선하여 소자의 구동전압을 낮추고 소자의 효율을 증진시킬 수 있는 새로운 트리아진 유도체의 개발이 요구되고 있다.

발명의 내용

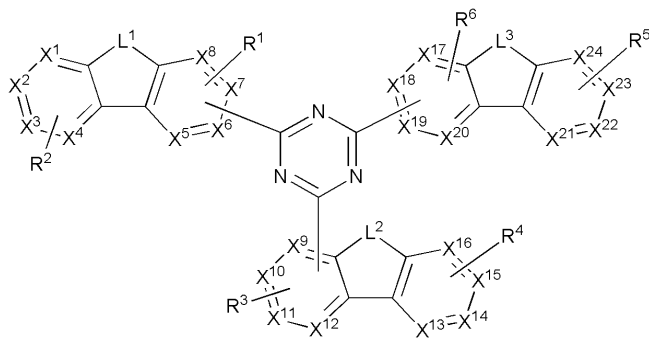
해결하려는 과제

[0006] 따라서 본 발명은 상기 종래기술의 문제점을 해결하기 위한 것으로 발광층의 호스트 물질, 전자수송 물질, 및 전자주입 물질 등으로 유기전계 발광소자에 적용 시 구동전압을 낮추고 높은 양자효율을 나타내는 트리아진 유도체 화합물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0007] 본 발명의 하나의 양태는 하기 구조식 1로 표시되는 유기전계 발광소자용 트리아진 유도체 화합물을 제공한다.





[0008] [구조식 1]



[0009]

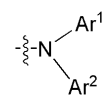
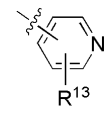
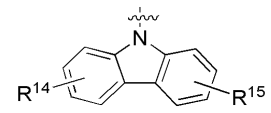
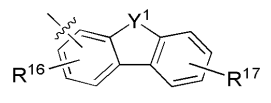
[0010] 구조식 1에서,

[0011] X^1 내지 X^{24} 는 각각 독립적으로 탄소원자 또는 질소원자이고, X^1 내지 X^{24} 중에서 선택된 1종 이상은 질소원자이고,

[0012] L^1 내지 L^3 은 각각 독립적으로 산소원자, 황원자, , ,  및  중에서 선택된 1종이 고,

[0013] R^7 내지 R^{12} 는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C_{1-9} 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_{5-30} 의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 헤테로 아릴기이거나,

[0014] R^7 과 R^8 , 또는 R^9 와 R^{10} 은 서로 결합하여, 이들 사이에 존재하는 탄소 또는 규소원자 함께, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 포화 스파이로 고리 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 불포화 스파이로 고리를 형성하고,

[0015] R^1 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소원자, , , , , 치환 또는 비치환된 C_{1-9} 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_{5-30} 의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 헤테로 아릴기이고,

[0016] R^{13} 내지 R^{17} 는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C_{1-9} 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_{5-30} 의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 헤테로아릴기이고,

[0017] Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 헤테로아릴기이고,

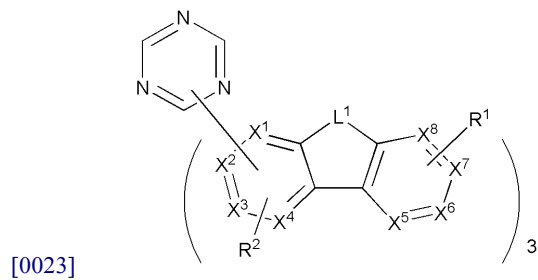
[0018] Y^1 은 산소원자 또는 황원자이고,

[0019] R^1 내지 R^{17} , Ar^1 및 Ar^2 에서의 치환에 해당하는 기는 각각 독립적으로 할로젠 원자, 시아노기, 나이트로기, C_{5-30} 의 아릴기, C_{2-30} 의 헤테로 아릴기, C_{1-9} 의 알킬기, C_{5-30} 의 알킬환기, C_{1-30} 의 티오기, 또는 C_{1-30} 의 실릴기이다.

[0020] 본 발명에 있어서 보다 바람직하게는 구조식 1에서 L^1 내지 L^3 은 각각 독립적으로 산소원자 및 황원자 중에서 선택된 1종이고, R^1 내지 R^6 은 수소원자이다.





[0021] 본 발명의 하나의 양태는 하기 구조식 2로 표시되는 유기전계 발광소자용 트리아진 유도체 화합물을 제공한다.

[0022] [구조식 2]



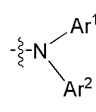
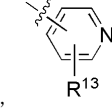
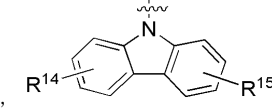
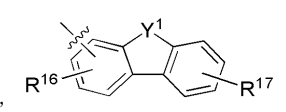
[0024] 구조식 2에서,

[0025] X^1 내지 X^8 은 각각 독립적으로 탄소원자 또는 질소원자이고, X^1 내지 X^8 중에서 선택된 1종 이상은 질소원자이고,

[0026] L^1 은 산소원자, 황원자, , ,  및  중에서 선택된 1종이고,

[0027] R^7 내지 R^{12} 는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C_{1-9} 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_{5-30} 의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 헤테로 아릴기이거나,

[0028] R^7 과 R^8 , 또는 R^9 와 R^{10} 은 서로 결합하여, 이들 사이에 존재하는 탄소 또는 규소원자 함께, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 포화 스파이로 고리 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 불포화 스파이로 고리를 형성하고,

[0029] R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, , , , , 치환 또는 비치환된 C_{1-9} 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_{5-30} 의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 헤테로 아릴기이고,

[0030] R^{13} 내지 R^{17} 는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C_{1-9} 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_{5-30} 의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 헤테로아릴기이고,

[0031] Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 헤테로아릴기이고,

[0032] Y^1 은 산소원자 또는 황원자이고,

[0033] R^1 , R^2 , R^{13} 내지 R^{17} , Ar^1 및 Ar^2 에서의 치환에 해당하는 기는 각각 독립적으로 할로젠 원자, 시아노기, 나이트로기, C_{5-30} 의 아릴기, C_{2-30} 의 헤테로 아릴기, C_{1-9} 의 알킬기, C_{5-30} 의 알킬환기, C_{1-30} 의 티오기, 또는 C_{1-30} 의 실릴기이다.

[0034] 본 발명에 있어서 보다 바람직하게는 구조식 2에서, L^1 은 산소원자 및 황원자 중에서 선택된 1종이고, R^1 및 R^2 는 수소원자이다.

[0035] 본 발명의 하나의 양태는

[0036] 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 형성된 유기물층;을 포함하는 유기전계 발광소자에 있어서,

[0037] 상기 유기물층은 본 발명에 따른 트리아진 유도체 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자를 제공한다.

[0038] 본 발명에서 상기 유기물층은 전자수송층일 수 있다.

[0039] 본 발명에서 상기 유기물층은 전자주입층일 수 있다.

[0040] 본 발명의 하나의 양태는

[0041] 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 형성된 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트와 도펀트를 포함하는 유기전계 발광소자에 있어서,

[0042] 상기 호스트는 본 발명에 따른 트리아진 유도체 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자를 제공한다.

[0043] 본 발명에서 상기 제1전극과 발광층 사이에 정공수송층을 추가로 포함할 수 있다.

[0044] 본 발명에서 상기 제1전극과 발광층 사이에 정공주입층을 추가로 포함할 수 있다.

[0045] 본 발명에서 상기 제2전극과 발광층 사이에 전자수송층을 추가로 포함할 수 있다.

[0046] 본 발명에서 상기 제2전극과 발광층 사이에 전자주입층을 추가로 포함할 수 있다.

발명의 효과

[0047] 본 발명은 발광층의 호스트 물질, 전자수송 물질, 및 전자주입 물질 등으로 유기전계 발광소자에 적용 시 구동 전압을 낮추고 우수한 양자효율을 나타내는 트리아진 유도체 화합물을 제공할 수 있다.

[0048] 또한 본 발명은 낮은 구동전압을 갖고 양자효율이 높은 유기전계 발광소자를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0049] 도 1은 본 발명에 따른 유기전계 발광소자의 단면도이다.

도 2는 본 발명에 따른 유기전계 발광소자의 단면도이다.

도 3은 본 발명의 하나의 실시예와 비교예에 따른 유기전계 발광소자의 전압과 전류와의 관계를 나타내는 그래프이다.

도 4는 본 발명의 하나의 실시예와 비교예에 따른 유기전계 발광소자의 휘도와 양자효율과의 관계를 나타내는 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0050] 이하 본 발명에 따른 유기전계 발광소자용 트리아진 유도체 화합물 및 이를 포함하는 유기전계 발광소자의 바람직한 실시예를 화학식 및 첨부도면을 참조하여 상세히 설명하기로 하되, 첨부도면을 참조함에 있어서 동일하거나 대응하는 구성요소는 동일한 도면번호를 부여하고 이에 대한 중복되는 설명은 생략하기로 한다.

[0051] 그러나 이하의 설명은 본 발명을 특정한 실시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변형, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 본 발명을 설명함에 있어서 관련된 공지 기술에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우 그 상세한 설명을 생략한다.

[0052] 또한, 이하에서 사용될 제1, 제2 등과 같이 서수를 포함하는 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되지는 않는다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다.

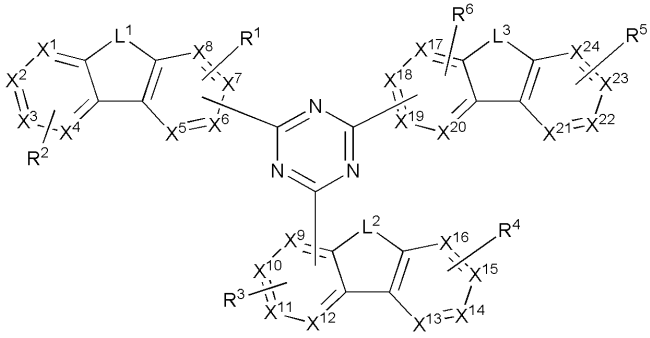
[0053] 또한, 어떤 구성요소가 다른 구성요소 상에 "형성되어" 있다거나 "적층되어" 있다고 언급된 때에는, 그 다른 구성요소의 표면 상의 전면 또는 일면에 직접 부착되어 형성되어 있거나 적층되어 있을 수도 있지만, 중간에 다른 구성요소가 더 존재할 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.

[0054] 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 출원에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.

[0055] 또한 본 발명에서 특별하게 언급하지 않는 한 수소원자는 일중수소원자(hydrogen, H), 이중수소원자(deterium, D) 및 삼중수소원자(tritium, T) 중 선택된 어느 하나, 바람직하게는 일중수소원자(hydrogen, H) 및 이중수소원자(deterium, D) 중 선택된 어느 하나, 보다 바람직하게는 일중수소원자(hydrogen, H)를 의미한다.

[0056] 상술한 기술적 과제를 달성하기 위한 기술적 수단으로서, 본 발명의 하나의 양태는 하기 구조식 1로 표시되는 유기전계 발광소자용 트리아진 유도체 화합물을 제공한다.





[구조식 1]



[0058]

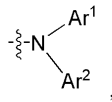
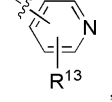
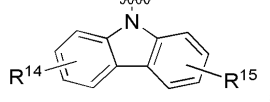
[0059] 구조식 1에서,

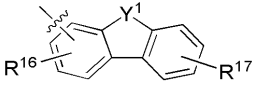
[0060] X¹ 내지 X²⁴는 각각 독립적으로 탄소원자 또는 질소원자이고, X¹ 내지 X²⁴ 중에서 선택된 1종 이상은 질소원자이고,

[0061] L¹ 내지 L³은 각각 독립적으로 산소원자, 황원자, , ,  및  중에서 선택된 1종이 고,

[0062] R⁷ 내지 R¹²는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C₁₋₉의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅₋₃₀의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 헤테로 아릴기이거나,

[0063] R⁷과 R⁸, 또는 R⁹와 R¹⁰은 서로 결합하여, 이들 사이에 존재하는 탄소 또는 규소원자 함께, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 포화 스파이로 고리 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 불포화 스파이로 고리를 형성하고,

[0064] R¹ 내지 R⁶은 각각 독립적으로 수소원자, , , ,

, 치환 또는 비치환된 C₁₋₉의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅₋₃₀의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 헤테로 아릴기이고,

[0065] R¹³ 내지 R¹⁷는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C₁₋₉의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅₋₃₀의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 헤테로아릴기이고,

[0066] Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C₆₋₃₀의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂₋₃₀의 헤테로아릴기이고,

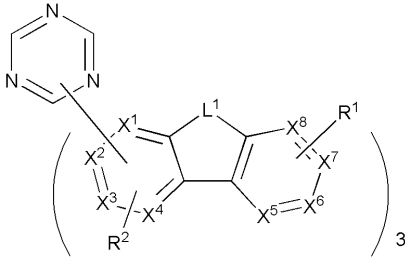
[0067] Y¹은 산소원자 또는 황원자이고,

[0068] R¹ 내지 R¹⁷, Ar¹ 및 Ar²에서의 치환에 해당하는 기는 각각 독립적으로 할로젠 원자, 시아노기, 나이트로기, C₅₋₃₀의 아릴기, C₂₋₃₀의 헤테로 아릴기, C₁₋₉의 알킬기, C₅₋₃₀의 알킬환기, C₁₋₃₀의 티오기, 또는 C₁₋₃₀의 실릴기이다.

[0069] 본 발명에 있어서 보다 바람직하게는 구조식 1에서 L¹ 내지 L³은 각각 독립적으로 산소원자 및 황원자 중에서 선택된 1종이고, R¹ 내지 R⁶은 수소원자이다.

[0070] 본 발명의 하나의 양태는 하기 구조식 2로 표시되는 유기전계 발광소자용 트리아진 유도체 화합물을 제공한다.





[0071] [구조식 2]



[0072]

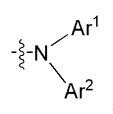
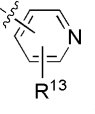
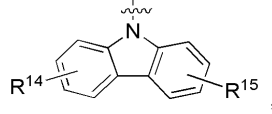
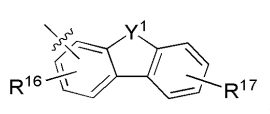
[0073] 구조식 2에서,

[0074] X^1 내지 X^8 은 각각 독립적으로 탄소원자 또는 질소원자이고, X^1 내지 X^8 중에서 선택된 1종 이상은 질소원자이고,

[0075] L^1 은 산소원자, 황원자, , ,  및  중에서 선택된 1종이고,

[0076] R^7 내지 R^{12} 는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C_{1-9} 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_{5-30} 의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 헤테로 아릴기이거나,

[0077] R^7 과 R^8 , 또는 R^9 와 R^{10} 은 서로 결합하여, 이들 사이에 존재하는 탄소 또는 규소원자 함께, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 포화 스파이로 고리 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 불포화 스파이로 고리를 형성하고,

[0078] R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소원자, , , , , 치환 또는 비치환된 C_{1-9} 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_{5-30} 의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 헤테로 아릴기이고,

[0079] R^{13} 내지 R^{17} 는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C_{1-9} 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_{5-30} 의 알킬환기, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 헤테로아릴기이고,

[0080] Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C_{6-30} 의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_{2-30} 의 헤테로아릴기이고,

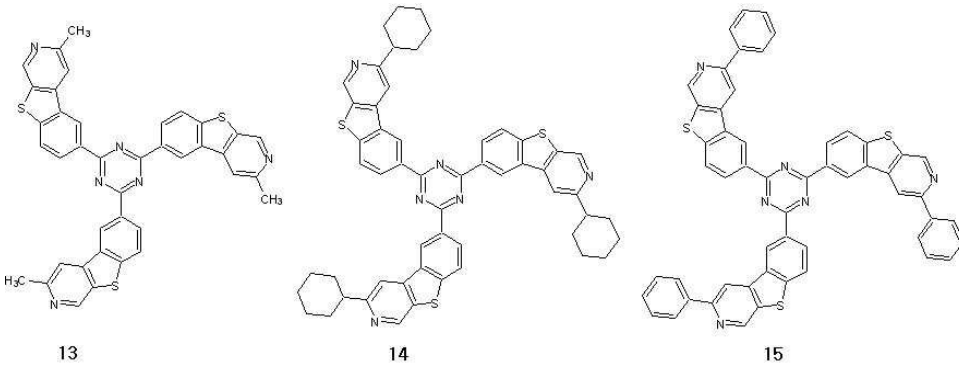
[0081] Y^1 은 산소원자 또는 황원자이고,

[0082] R^1 , R^2 , R^{13} 내지 R^{17} , Ar^1 및 Ar^2 에서의 치환에 해당하는 기는 각각 독립적으로 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, C_{6-30} 의 아릴기, C_{2-30} 의 헤테로 아릴기, C_{1-9} 의 알킬기, C_{5-30} 의 알킬환기, C_{1-30} 의 티오기, 또는 C_{1-30} 의 실릴기이다.

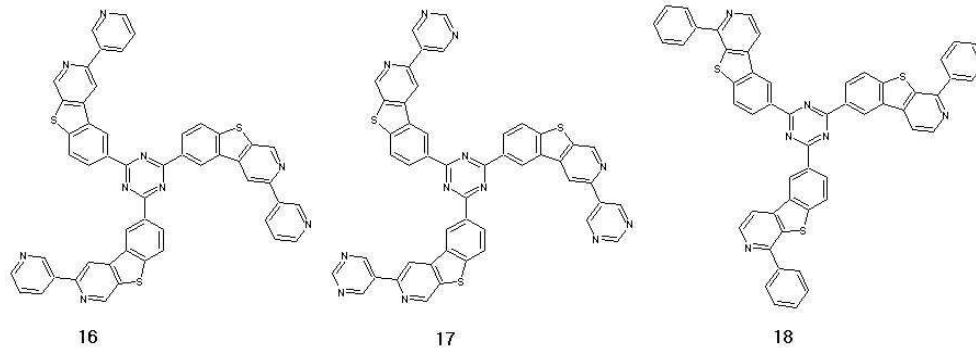
[0083] 본 발명에 있어서 보다 바람직하게는 구조식 2에서, L^1 은 산소원자 및 황원자 중에서 선택된 1종이고, R^1 및 R^2 는 수소원자이다.

[0084] 상기 R^1 내지 R^{17} , Ar^1 및 Ar^2 의 C_{6-30} 의 아릴기의 구체적인 예로서는, 페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 1-페난트릴기, 2-페난트릴기, 3-페난트릴기, 4-페난트릴기, 9-페난트릴기, 1-나프타센일기, 2-나프타센일기, 9-나프타센일기, 1-피렌일기, 2-피렌일기, 4-피렌일기, 2-바이페닐일기, 3-바이페닐일기, 4-바이페닐일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, p-tert-부틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 3-메틸-2-나프틸기, 4-메틸-1-나프틸기, 4-메틸-1-안트릴기, 4-메틸바이페닐일기 또는 4-tert-부틸-p-터페닐-4-일기 등을 들 수 있다.

- [0085] 또한 상기 R^1 내지 R^{17} , Ar^1 및 Ar^2 의 C_{2-30} 의 헤테로아릴기의 구체적인 예로서는 1-피롤릴기, 2-피롤릴기, 3-피롤릴기, 피라진일기, 피리미딜기, 피리다질기, 2-피리딘일기, 3-피리딘일기, 4-피리딘일기, 1-인돌릴기, 2-인돌릴기, 3-인돌릴기, 4-인돌릴기, 5-인돌릴기, 6-인돌릴기, 7-인돌릴기, 1-아이소인돌릴기, 2-아이소인돌릴기, 3-아이소인돌릴기, 4-아이소인돌릴기, 5-아이소인돌릴기, 6-아이소인돌릴기, 7-아이소인돌릴기, 2-퓨릴기, 3-퓨릴기, 2-벤조퓨란일기, 3-벤조퓨란일기, 4-벤조퓨란일기, 5-벤조퓨란일기, 6-벤조퓨란일기, 7-벤조퓨란일기, 1-아이소벤조퓨란일기, 3-아이소벤조퓨란일기, 4-아이소벤조퓨란일기, 5-아이소벤조퓨란일기, 6-아이소벤조퓨란일기, 7-아이소벤조퓨란일기, 1-다이벤조퓨란일기, 2-다이벤조퓨란일기, 3-다이벤조퓨란일기, 6-다이벤조퓨란일기, 7-다이벤조퓨란일기, 8-다이벤조퓨란일기, 9-다이벤조퓨란일기, 2-벤조사이오펜, 3-벤조사이오펜, 4-벤조사이오펜, 5-벤조사이오펜, 6-벤조사이오펜, 7-벤조사이오펜, 1-다이벤조사이오펜, 2-다이벤조사이오펜, 3-다이벤조사이오펜, 4-다이벤조사이오펜, 6-다이벤조사이오펜, 7-다이벤조사이오펜, 8-다이벤조사이오펜, 9-다이벤조사이오펜, 2-벤조포스폴, 3-벤조포스폴, 4-벤조포스폴, 5-벤조포스폴, 6-벤조포스폴, 7-벤조포스폴, 1-다이벤조포스폴, 2-다이벤조포스폴, 3-다이벤조포스폴, 4-벤조포스폴, 6-벤조포스폴, 7-다이벤조포스폴, 8-다이벤조포스폴, 9-벤조포스폴, 2-벤조포스폴옥사이드, 3-벤조포스폴옥사이드, 4-벤조포스폴옥사이드, 5-벤조포스폴옥사이드, 6-벤조포스폴옥사이드, 7-벤조포스폴옥사이드, 1-다이벤조포스폴옥사이드, 2-다이벤조포스폴옥사이드, 3-다이벤조포스폴옥사이드, 4-다이벤조포스폴옥사이드, 6-다이벤조포스폴옥사이드, 7-다이벤조포스폴옥사이드, 8-다이벤조포스폴옥사이드, 9-다이벤조포스폴옥사이드, 퀴놀릴기, 3-퀴놀릴기, 4-퀴놀릴기, 5-퀴놀릴기, 6-퀴놀릴기, 7-퀴놀릴기, 8-퀴놀릴기, 1-아이소퀴놀릴기, 3-아이소퀴놀릴기, 4-아이소퀴놀릴기, 5-아이소퀴놀릴기, 6-아이소퀴놀릴기, 7-아이소퀴놀릴기, 8-아이소퀴놀릴기, 2-퀴놀살린일기, 5-퀴놀살린일기, 6-퀴놀살린일기, 1-페난트리딘일기, 2-페난트리딘일기, 3-페난트리딘일기, 4-페난트리딘일기, 6-페난트리딘일기, 7-페난트리딘일기, 8-페난트리딘일기, 9-페난트리딘일기, 10-페난트리딘일기, 1-아크리딘일기, 2-아크리딘일기, 3-아크리딘일기, 4-아크리딘일기, 9-아크리딘일기, 1,7-페난트롤린-2-일기, 1,7-페난트롤린-3-일기, 1,7-페난트롤린-4-일기, 1,7-페난트롤린-5-일기, 1,7-페난트롤린-6-일기, 1,7-페난트롤린-8-일기, 1,7-페난트롤린-9-일기, 1,7-페난트롤린-10-일기, 1,8-페난트롤린-2-일기, 1,8-페난트롤린-3-일기, 1,8-페난트롤린-4-일기, 1,8-페난트롤린-5-일기, 1,8-페난트롤린-6-일기, 1,8-페난트롤린-7-일기, 1,8-페난트롤린-9-일기, 1,8-페난트롤린-10-일기, 1,9-페난트롤린-2-일기, 1,9-페난트롤린-3-일기, 1,9-페난트롤린-4-일기, 1,9-페난트롤린-5-일기, 1,9-페난트롤린-6-일기, 1,9-페난트롤린-7-일기, 1,9-페난트롤린-8-일기, 1,9-페난트롤린-10-일기, 1,10-페난트롤린-2-일기, 1,10-페난트롤린-3-일기, 1,10-페난트롤린-4-일기, 1,10-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-1-일기, 2,9-페난트롤린-3-일기, 2,9-페난트롤린-4-일기, 2,9-페난트롤린-5-일기, 2,9-페난트롤린-6-일기, 2,9-페난트롤린-7-일기, 2,9-페난트롤린-8-일기, 2,9-페난트롤린-10-일기, 2,8-페난트롤린-1-일기, 2,8-페난트롤린-3-일기, 2,8-페난트롤린-4-일기, 2,8-페난트롤린-5-일기, 2,8-페난트롤린-6-일기, 2,8-페난트롤린-7-일기, 2,8-페난트롤린-9-일기, 2,8-페난트롤린일기, 2,7-페난트롤린-1-일기, 2,7-페난트롤린-3-일기, 2,7-페난트롤린-4-일기, 2,7-페난트롤린-5-일기, 2,7-페난트롤린-6-일기, 2,7-페난트롤린-8-일기, 2,7-페난트롤린-9-일기, 2,7-페난트롤린-10-일기, 1-페나진일기, 2-페나진일기, 1-페노싸이아진일기, 2-페노싸이아진일기, 3-페노싸이아진일기, 4-페노싸이아진일기, 10-페노싸이아진일기, 1-페녹사진일기, 2-페녹사진일기, 3-페녹사진일기, 4-페녹사진일기, 10-페녹사진일기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사다이하졸릴기, 5-옥사다이하졸릴기, 3-퓨라잔일기, 2-싸이엔일기, 3-싸이엔일기, 2-메틸피롤-1-일기, 2-메틸피롤-3-일기, 2-메틸피롤-4-일기, 2-메틸피롤-5-일기, 3-메틸피롤-1-일기, 3-메틸피롤-2-일기, 3-메틸피롤-4-일기, 3-메틸피롤-5-일기, 2-tert-뷰틸피롤-4-일기, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일기, 2-메틸-1-인돌릴기, 4-메틸-1-인돌릴기, 2-메틸-3-인돌릴기, 4-메틸-3-인돌릴기, 2-tert-뷰틸-1-인돌릴기, 4-tert-뷰틸-1-인돌릴기, 2-tert-뷰틸-3-인돌릴기 또는 4-tert-뷰틸-3-인돌릴기 등을 들 수 있다.
- [0086] 또한 상기 R^1 내지 R^{17} 의 C_{1-9} 의 알킬기의 구체적인 예로서는 메틸, 에틸, n-프로필, n-펜틸기, n-뷰틸, n-헥실기, n-헵틸기, n-옥틸기, 아이소프로필기, sec-뷰틸기, 아이소뷰틸기, tert-뷰틸기 등을 들 수 있다.
- [0087] 또한 상기 R^1 내지 R^{17} 의 C_{5-30} 의 알킬환기의 구체적인 예로서는 사이클로헥실기, 사이클로헵틸기, 사이클로옥틸기 등을 들 수 있다.
- [0088] 상기 “치환”에 해당하는 기로서 C_{1-30} 의 티오기의 구체적인 예로, 메틸티오, 에틸티오, 프로필티오, 뷰틸티오, 펜틸티오, 헥실티오, 트라이(아이소프로필)티오, 트라이(아이소뷰틸)티오, 트라이(tert-뷰틸)티오, 트라이(2-뷰틸)티오, 페닐티오, 나프틸티오, 바이페닐티오, (3-메틸페닐)티오, (4-메틸나프틸)티오, (2-메틸바이페닐)티오



[0095]



[0096]

[0097] 본 발명에 따른 유기전계 발광소자를 첨부도면을 참조하여 설명하기로 한다. 도 1은 본 발명의 유기전계 발광소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다. 상기한 구조식 1로 표시되는 트리아진 유도체 화합물을 포함하는 유기전계 발광소자는 다양한 구조로 실현될 수 있다.

[0098] 도 1을 참고하면, 본 발명의 하나의 실시예는, 제1전극(110); 제2전극(150); 및 상기 제1전극(110)과 상기 제2전극(150) 사이에 형성된 유기물층(130)을 포함하는 유기전계 발광소자에 있어서, 상기 유기물층(130)은 상기 트리아진 유도체 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자를 제공한다.

[0099] 또한 본 발명의 다른 실시예에 따르면, 상기 유기물층(130)은 전자수송층일 수 있다.

[0100] 또한 본 발명의 다른 실시예에 따르면, 상기 유기물층(130)은 전자주입층일 수 있다.

[0101] 도 2를 참고하며, 본 발명의 다른 실시예는, 제1전극(110); 제2전극(150); 및 상기 제1전극(110)과 상기 제2전극(150) 사이에 형성된 발광층(135)을 포함하고, 상기 발광층(135)은 호스트와 도펀트를 포함하는 유기전계 발광소자에 있어서, 상기 호스트는 본 발명에 따른 트리아진 유도체 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자를 제공할 수 있다.

[0102] 또한 본 발명의 다른 실시예에 따르면, 상기 제1전극(110)과 발광층(135) 사이에 정공수송층(133)을 추가로 포함할 수 있다.

[0103] 또한 본 발명의 다른 실시예에 따르면, 상기 제1전극(110)과 발광층(135) 사이에 정공주입층(131)을 추가로 포함할 수 있다.

[0104] 또한 본 발명의 다른 실시예에 따르면, 상기 제2전극(150)과 발광층(135) 사이에 전자수송층(137)을 추가로 포함할 수 있다.

[0105] 또한 본 발명의 다른 실시예에 따르면, 상기 제2전극(150)과 발광층(135) 사이에 전자주입층(139)을 추가로 포함할 수 있다.

[0106] 상기 유기전계 발광소자는 바람직하게는 투명기판에 의하여 지지된다. 투명기판의 재료로는 양호한 기계적 강도, 열안정성 및 투명성을 갖는 한 특별한 제한은 없다. 구체적인 예를 들면, 유리, 투명 플라스틱 필름 등을 사용할 수 있다.

[0107] 본 발명의 유기전계 발광소자의 양극재료로서는 4eV 이상의 일함수를 갖는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 또는 이의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적으로는 금속인 Au 또는 CuI, ITO(인듐 주석 산화물), SnO₂ 및 ZnO와 같은

투명 전도성 재료를 들 수 있다. 양극 필름의 두께는 10 내지 200nm 가 바람직하다.

[0108] 본 발명의 유기전계 발광소자의 음극 재료로서는 4eV 미만의 일함수를 갖는 금속, 합금, 전기 전도성 화합물 또는 이의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적으로는, Na, Na-K 합금, 칼슘, 마그네슘, 리튬, 리튬 합금, 인듐, 알루미늄, 마그네슘 합금, 알루미늄 합금을 들 수 있다. 이외에, 알루미늄/AlO₂, 알루미늄/리튬, 마그네슘/은 또는 마그네슘/인듐 등도 사용될 수 있다. 음극필름의 두께는 10 내지 200nm 가 바람직하다. 유기 전계 발광소자의 발광효율을 높이기 위해서는 하나 이상의 전극은 바람직하게는 10% 이상의 광투과율을 가지는 것이 바람직하다. 전극의 쉬트저항은 바람직하게는 수백 Ω/mm 이하이다. 전극의 두께는 10nm 내지 1μm, 보다 바람직하게는 10 내지 400nm 이다. 이러한 전극은 화학적 기상증착(CVD), 물리적 기상증착(PVD) 등의 기상증착법 또는 스퍼터링법을 통하여 상기한 전극 재료를 박막으로 형성하여 제조할 수 있다.

[0109] 본 발명의 정공수송층 또는 정공주입층은 정공 수송 물질 및 정공 주입 물질로서 광전도성 재료 중에서 정공 수송 물질로서 통상적으로 사용되는 재료 및 유기 EL 소자의 정공 수송층 또는 정공 주입층의 형성에 사용되는 공지된 재료를 포함할 수 있다. 예를 들면, N,N-디카발로닐-3,5-벤젠(mCP), 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜):폴리스틸렌설포네이트 (PEDOT:PSS), N, N'-다이(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(NPD), N,N'-디페닐-N,N'-디(3-메틸페닐)-4,4'-디아미노비페닐(TPD), N,N'-디페닐-N,N'-디나프틸-4,4'-디아미노비페닐, N,N,N',N'-테트라-p-톨릴-4,4'-디아미노비페닐, N,N,N',N'-테트라페닐-4,4'-디아미노비페닐, 코퍼(II)1,10,15,20-테트라페닐-21H,23H-포피린 등과 같은 포피린(porphyrin)화합물 유도체, 주쇄 또는 측쇄내에 방향족 3차아민을 갖는 중합체, 1,1-비스(4-디-p-톨릴아미노페닐)시클로헥산, N,N,N-트리(p-톨릴)아민, 4,4',4'-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트리페닐아민과 같은 트리아릴아민 유도체, N-페닐카르바졸 및 폴리비닐카르바졸과 같은 카르바졸 유도체, 무금속 프탈로시아닌, 구리프탈로시아닌과 같은 프탈로시아닌 유도체, 스타버스트 아민 유도체, 엔아민스틸벤계 유도체, 방향족 삼급아민과 스티릴 아민 화합물의 유도체, 및 폴리실란 등을 들 수 있다.

[0110] 본 발명의 전자 수송층은 공지의 전자 수송 물질, 예를 들면 포스핀 옥사이드계 유도체, 알루미늄 착체, 실릴 유도체, 페난트론 유도체, 퍼플루오리네이티드 화합물, 팔치환 사이클로옥타테트라엔 화합물 등을 포함할 수 있다.

[0111] 본 발명의 유기전계 발광소자에 있어서, 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 수송층 및 정공 주입층은 상기한 화합물의 하나 이상의 종류를 함유하는 단일 층으로 형성되거나, 또는 상호 적층된, 상이한 종류의 화합물을 함유하는 복수의 층으로 구성될 수 있다.

[0112] 본 발명의 유기전계 발광소자의 발광층은 공지된 발광재료, 예를 들면 촉광 형광재료, 형광증백제, 레이저 색소, 유기 신틸레이터 및 형광 분석용 시약을 포함할 수 있다. 구체적으로는, 카바졸계 화합물, 포스핀옥사이드계 화합물, 포스핀 옥사이드가 도입된 아민 또는 카바졸계 화합물, 비스((3,5-디플루오로-4-시아노페닐)피리딘) 이리듐 피콜리네이트와 같은 이리듐 착체, tris(8-hydroxyquinoline) aluminum(Alq₃), 안트라센, 페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 코로넨, 루브렌 및 퀴나크리돈과 같은 폴리아로마틱 화합물, 쿼터페닐과 같은 올리고페닐렌 화합물, 1,4-비스(2-메틸스티릴)벤젠, 1,4-비스(4-메틸스티릴)벤젠, 1,4-비스(4-메틸-5-페닐-2-옥사졸릴)벤젠, 1,4-비스(5-페닐-2-옥사졸릴)벤젠, 2,5-비스(5-t-부틸-2-벤즈옥사졸릴)사이오펜, 1,4-디페닐-1,3-부타디엔, 1,6-디페닐-1,3,5-헥사트리엔,1,1,4,4-테트라페닐-1,3-부타디엔과 같은 액체신틸레이션용 신틸레이터, 옥신 유도체의 금속착체, 쿠마린 색소, 디시아노메틸렌피란 색소, 디시아노메틸렌사이오피란 색소, 폴리메틴 색소, 옥소벤즈안트라센 색소, 크산텐 색소, 카르보스티릴 색소, 페릴렌 색소, 옥사진 화합물, 스티벤 유도체, 스피로 화합물, 옥사디아졸 화합물 등을 포함할 수 있다.

[0113] 본 발명의 유기 EL 소자를 구성하는 각 층은 진공 증착, 스프인 코팅 또는 캐스팅과 같은 공지된 방법을 통하여 박막으로 형성시키거나, 각 층에서 사용되는 재료를 이용하여 제조할 수 있다. 이들 각층의 막두께에 대해서는 특별한 제한은 없으며, 재료의 특성에 따라 알맞게 선택할 수 있으나, 보통 2nm 내지 5,000nm의 범위에서 결정될 수 있다.

[0114] 본 발명의 따른 구조식 1의 화합물은 진공 증착법에 의하여 형성될 수 있으므로, 박막 형성 공정이 간편하고, 핀홀(pin hole)이 거의 없는 균질한 박막으로 용이하게 얻을 수 있는 장점이 있다.

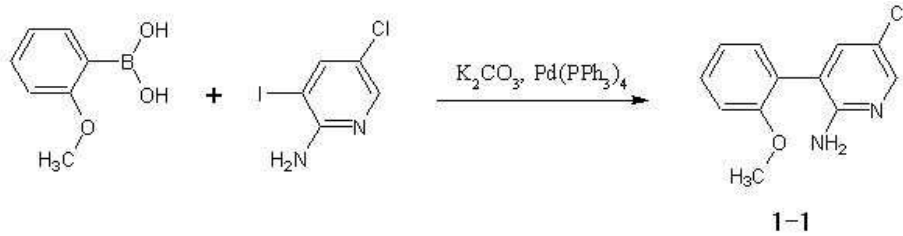
[0115] 이하, 실시예를 통하여 본 발명에 따른 트리아진 유도체 화합물 및 이를 포함하는 유기전계 발광소자의 제조방법을 더욱 구체적으로 설명한다. 그러나 이는 예시를 위한 것으로서 이에 의하여 본 발명의 범위가 한정되는 것이 아니다.

[0116] [실시예]

[0117] 본 발명의 트리아진 유도체 화합물을 제조하였고, 이 화합물을 사용하여 유기전계 발광소자를 제조하였다. 하기 제조예 및 실시예는 본 발명을 구체적으로 예시하기 위한 것으로, 이로써 본 발명이 제한되어서는 안 된다.

[0118] 제조예 1. 화합물 1의 합성

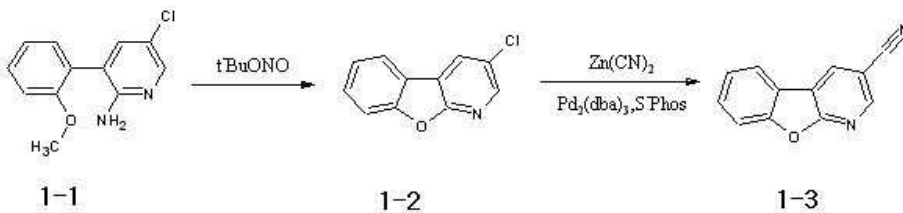
[0119] (1) 중간체 1-1의 합성



[0120]

[0121] 2-메톡시페닐보로닉에시드(4.9g, 32.2 mmol)와 2-아미노-5-클로로-3-아이오도피리딘(8.2 g, 32.2 mmol)을 톨루엔(200 ml)에 녹인 후 질소 버블링을 통해 용액 내의 산소를 제거한다. 탄산칼륨(13.4g, 96.7 mmol)을 증류수(100 ml)에 녹인 후 질소 버블링을 통해 산소를 제거하고 상기 용액에 첨가한다. 테트라키스 트리페닐포스피노 팔라듐 (1.04 g, 0.97 mmol)을 투입하고 24시간 동안 환류 교반한다. 반응용액을 에틸아세테이트로 추출한 후 에틸아세테이트/헥산 혼합용매를 전개용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 5.8 g의 중간체 1-1을 얻었다.

[0122] (2) 중간체 1-2 및 1-3의 합성

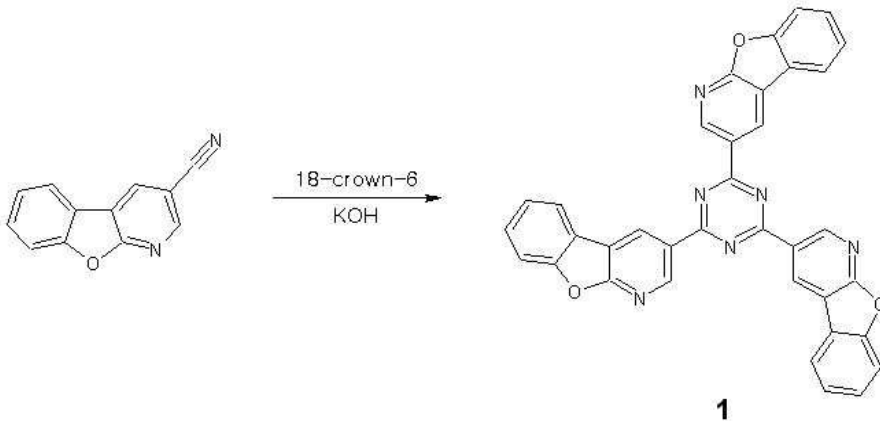


[0123]

[0124] 중간체 1-1 (5.8 g, 24.7 mmol)을 아세트산/THF(60 ml/30 ml) 혼합용매에 용해시킨 후 반응물의 온도를 -10℃ 낮춘다. t-부틸 나이트라이트(7.65 g, 74.1 mmol)을 천천히 투입하고 12시간동안 동일온도에서 교반 한다. 반응 용액에 증류수 100ml를 투입하고 1시간 동안 상온에서 교반한 후 석출된 고형분을 여과한다. 여과물을 증류수로 3회 세척한 후 진공건조하여 3.5 g의 중간체 1-2를 얻었다.

[0125] 중간체 1-2 (3.5 g, 17.2 mmol), Zn(CN)₂(2.22 g, 18.9 mmol), 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐(0.63g, 0.69 mmol) 그리고 2-다이사이클로헥실포스피노-2',6'-다이메톡시바이페닐(0.85 g, 2.1 mmol)을 DMF/증류수(140 ml/1.4 ml) 혼합용매에 녹인 후 질소 버블링을 통해 용액내의 산소를 제거한다. 반응물의 온도를 120℃로 상승시킨 후 12시간 동안 교반한다. 반응용액을 1N의 수산화나트륨 수용액을 첨가한 후 에틸아세테이트로 추출한다. 유기층을 분리하고 마그네슘설페이트로 건조시킨다. 용매를 제거한 후 다이클로로메탄/헥산 혼합용매를 전개용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 1.8g의 중간체 1-3을 얻었다.

[0126] (3) 화학식 1의 합성



[0127]

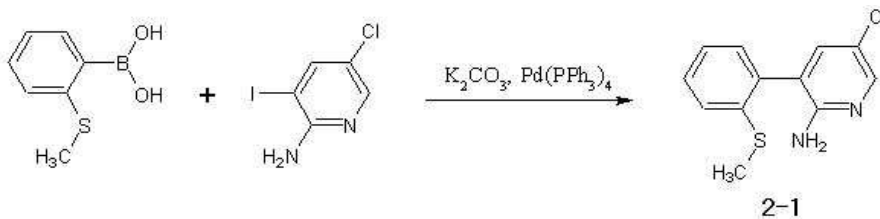
[0128] 반응 촉매인 18-크라운-6(0.12g, 0.46 mmol)과 수산화칼륨 (0.027 g, 0.48 mmol)을 메탄올 1 ml에 녹인 후 후드에서 methanol을 완전히 제거한다. 오일상의 반응촉매에 중간체 1-3 (1.8 g, 9.3 mmol)과 데칼린 2ml를 첨가한 후 질소분위기에서 12시간동안 환류 교반한다. 반응혼합물을 헥산에 침전하고 생성된 고형분을 여과한 후 증류수로 세척하여 0.8g의 화학식 1의 화합물을 얻었다.

[0129] $^1\text{H-NMR}$ (200 MHz, CDCl_3) : δ 9.41(s, 3H), 9.25(s, 3H), 8.10-7.97(d, 3H), 7.73-7.72(d, 3H), 7.65-7.63(t, 3H), 7.42-7.39(t, 3H)

[0130] MS (FAB) m/z 583

[0131] 제조예 2. 화합물 2의 합성

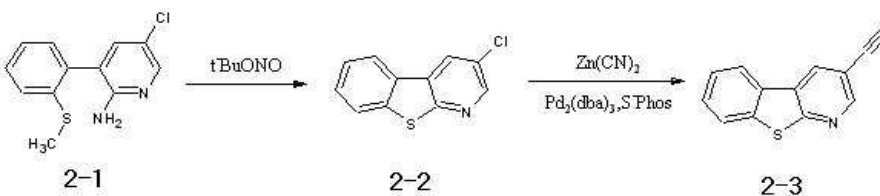
[0132] (1) 중간체 2-1의 합성



[0133]

[0134] 2-(메틸싸이오)페닐보로닉에시드(24.4 g, 144 mmol)와 2-아미노-5-클로로-3-아이오도피리딘(37.0 g, 144 mmol)을 THF(210 ml)에 녹인 후 질소 버블링을 통해 용액내의 산소를 제거한다. 탄산칼륨(59.7g, 432 mmol)을 증류수 (70 ml)에 녹인 후 질소 버블링을 통해 산소를 제거하고 상기 용액에 첨가한다. 테트라키스 트리페닐포스피노 팔라듐 (4.67 g, 4.32 mmol)을 투입하고 24시간 동안 환류 교반한다. 반응용액을 에틸아세테이트로 추출한 후 에틸아세테이트/헥산 혼합용매를 전개용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 34.0 g의 중간체 2-1을 얻었다.

[0135] (2) 중간체 2-2 및 2-3의 합성

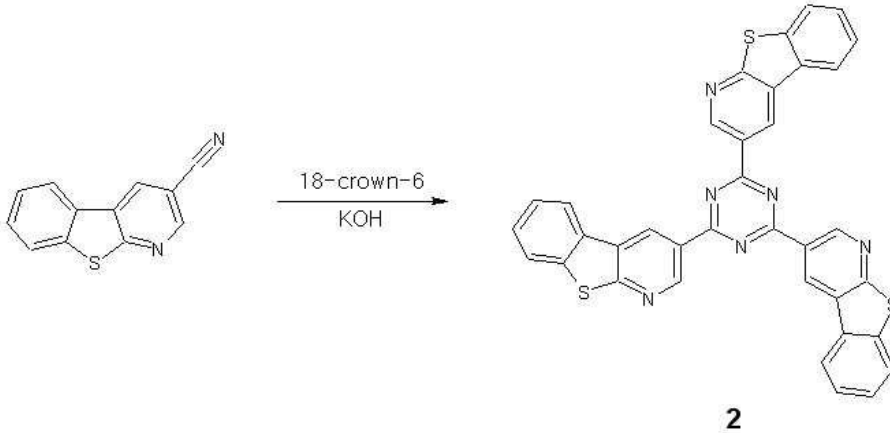


[0136]

[0137] 중간체 2-1 (34.0 g, 136 mmol)을 아세트산/THF(340 ml/200 ml) 혼합용매에 용해시킨 후 반응물의 온도를 -10 °C 낮춘다. t-부틸 나이트라이트(41.9 g, 407 mmol)을 천천히 투입하고 12시간동안 동일온도에서 교반 한다. 반응용액을 증류수와 에틸아세테이트로 추출한 후 다이클로로메탄/헥산 혼합용매를 전개용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 14.0 g의 중간체 2-2를 얻었다.

[0138] 중간체 2-2 (14 g, 63.7 mmol), Zn(CN)₂(8.23 g, 70.1 mmol), 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐(2.33 g, 2.55 mmol) 그리고 2-다이사이클로헥실포스포노-2',6'-다이메톡시바이페닐(3.14 g, 7.65 mmol)을 DMF/증류수 (560 ml/5.6 ml) 혼합용매에 녹인 후 질소 버블링을 통해 용액내의 산소를 제거한다. 반응물의 온도를 120°C로 상승시킨 후 12시간 동안 교반한다. 반응용액을 1N의 수산화나트륨 수용액 (1200 ml)을 첨가한 후 에틸아세테이트로 추출한다. 유기층을 분리하고 마그네슘 설페이트로 건조시킨다. 용매를 제거한 후 다이클로로메탄/헥산 혼합용매를 전개용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 7.7 g의 중간체 2-3을 얻었다.

[0139] (3) 화학식 2의 합성



[0140]

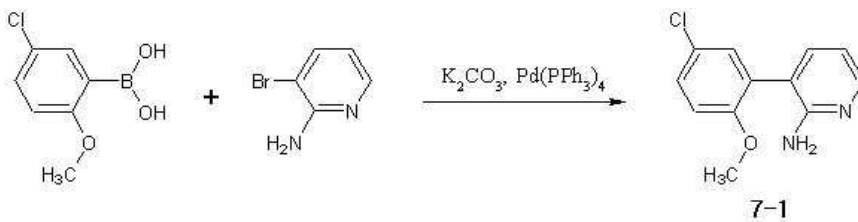
[0141] 반응 촉매인 18-크라운-6(0.52g, 2.0 mmol)과 수산화칼륨 (0.12 g, 2.1 mmol)을 메탄올 10 ml에 녹인 후 후드에서 methanol을 완전히 제거한다. 오일상의 반응촉매에 중간체 2-3 (7.7 g, 39.7 mmol)과 데칼린 10 ml를 첨가한 후 질소분위기에서 12시간동안 환류 교반한다. 반응혼합물을 헥산에 침전하고 생성된 고형분을 여과한 후 증류수로 세척하여 2.3 g의 화학식 2의 화합물을 얻었다.

[0142] NMR-¹H(200 MHz, CDCl₃) : δ 9.67(s, 3H), 9.40(s, 3H), 8.24-8.25(d, 3H), 7.97-7.99(d, 3H), 7.70-7.54(m, 6H)

[0143] MS (FAB) m/z 632

[0144] 제조예 3. 화합물 7의 합성

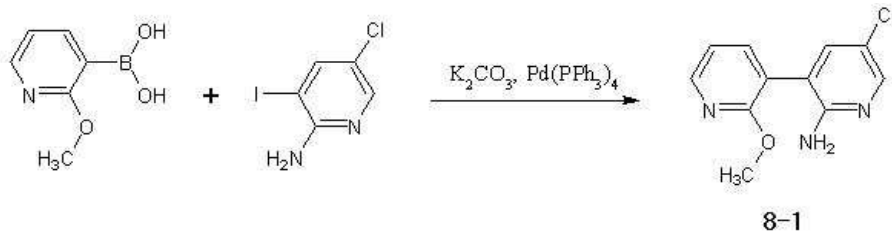
[0145] (1) 중간체 7-1의 합성



[0146]

[0147] 5-클로로-2-메톡시페닐 보로닉에시드(25 g, 127 mmol)와 2-아미노-3-브로모피리딘(22.5 g, 127.4 mmol)을 톨루엔(800 ml)에 녹인 후 질소 버블링을 통해 용액내의 산소를 제거한다. 탄산칼륨(52.8 g, 382 mmol)을 증류수 (400 ml)에 녹인 후 질소 버블링을 통해 산소를 제거하고 상기 용액에 첨가한다. 테트라키스 트리페닐포스포노 팔라듐 (4.13 g, 3.82 mmol)을 투입하고 24시간 동안 환류 교반한다. 반응용액을 에틸아세테이트로 추출한 후 에틸아세테이트/헥산 혼합용매를 전개용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 20.0 g의 중간체 7-1을 얻었다.

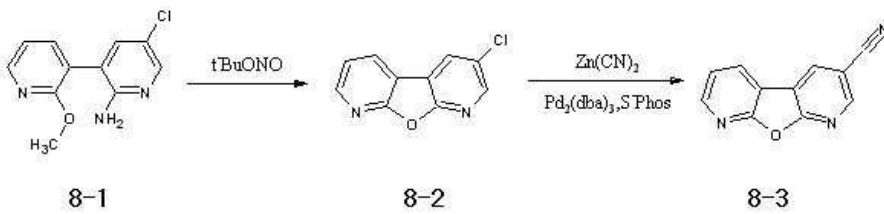
[0158] (1) 중간체 8-1의 합성



[0159]

[0160] 2-메톡시-3-피리딜보로닉에시드(14.4 g, 93.4 mmol)와 2-아미노-5-클로로-3-아이오도피리딘(20.0 g, 144 mmol)을 THF(150 ml)에 녹인 후 질소 버블링을 통해 용액내의 산소를 제거한다. 탄산칼륨(32.3 g, 233 mmol)을 증류수 (50 ml)에 녹인 후 질소 버블링을 통해 산소를 제거하고 상기 용액에 첨가한다. 테트라키스 트리페닐포스피노 팔라듐 (3.60 g, 3.11 mmol)을 투입하고 24시간 동안 환류 교반한다. 반응용액을 에틸아세테이트로 추출한 후 에틸아세테이트/헥산 혼합용매를 전개용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 11.0 g의 중간체 8-1을 얻었다.

[0161] (2) 중간체 8-2 및 8-3의 합성

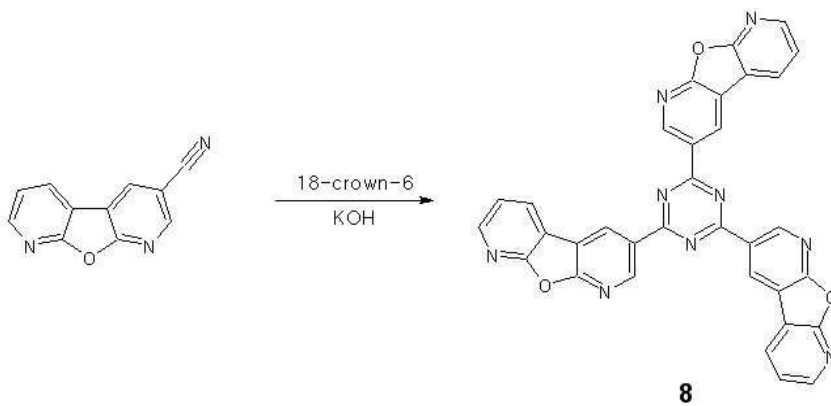


[0162]

[0163] 중간체 8-1 (11.0 g, 46.7 mmol)을 아세트산/THF(120 ml/60 ml) 혼합용매에 용해시킨 후 반응물의 온도를 -10 °C 낮춘다. t-부틸 나이트라이트(14.4 g, 140 mmol)을 천천히 투입하고 12시간동안 동일온도에서 교반 한다. 반응용액을 증류수와 에틸아세테이트로 추출한 후 에틸아세테이트/헥산 혼합용매를 전개용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 6.0 g의 중간체 8-2를 얻었다.

[0164] 중간체 8-2 (6.0 g, 29.3 mmol), Zn(CN)₂(3.9 g, 32.3 mmol), 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐(1.07 g, 1.17 mmol) 그리고 2-다이사이클로헥실포스피노-2',6'-다이메톡시바이페닐(1.45 g, 3.52 mmol)을 DMF/증류수 (240 ml/2.4 ml) 혼합용매에 녹인 후 질소 버블링을 통해 용액내의 산소를 제거한다. 반응물의 온도를 120°C로 상승시킨 후 12시간 동안 교반한다. 반응용액을 1N의 수산화나트륨 수용액 (500 ml)을 첨가한 후 에틸아세테이트로 추출한다. 유기층을 분리하고 마그네슘 설페이트로 건조시킨다. 용매를 제거한 후 에틸아세테이트/헥산 혼합용매를 전개용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 3.7 g의 중간체 8-3을 얻었다.

[0165] (3) 화합물 8의 합성



[0166]

[0167] 반응 촉매인 18-크라운-6(0.25 g, 0.95 mmol)과 수산화칼륨 (0.055 g, 0.99 mmol)을 메탄올 4 ml에 녹인 후 후드에서 methanol을 완전히 제거한다. 오일상의 반응촉매에 중간체 8-3 (3.7 g, 19.0 mmol)과 데칼린 4 ml를 첨가한 후 질소분위기에서 6 시간동안 환류 교반한다. 반응혼합물을 헥산에 침전하고 생성된 고형분을 여과한

후 증류수로 세척하여 1.2 g의 화학식 8의 화합물을 얻었다.

- [0168] NMR-¹H(200 MHz, CDCl₃) : δ 9.55(s, 3H), 9.34(s, 3H), 8.70-8.68(d, 3H), 8.39-8.37(d, 3H), 7.56-7.53(t, 3H)
- [0169] MS (FAB) m/z 586
- [0170] 실시예 1
- [0171] 본 발명에서 합성한 화합물 1을 청색 인광소자의 전자수송층 재료로서 적용하여 청색인광소자를 제작하였다. 소자의 구조는 ITO/DNTPD/NPB/mCP/mCP:FIrpic/화합물 1/Alq₃/LiF/Al 이었다.
- [0172] 소자의 제작은 다음과 같은 방법으로 수행하였다.
- [0173] ITO 기판은 순수와 이소프로필 알코올을 이용하여 초음파에서 30분간 세정한 후 ITO 기판을 단파장의 자외선을 이용하여 표면처리한 후 1x10⁻⁶ torr의 압력 하에서 유기물을 진공 증착하였다. DNTPD, NPB, mCP, 화합물 1, Alq₃은 0.1 nm/s의 속도로 증착하여 각 두께에 해당하는 막을 형성하였고, 청색 인광 호스트 재료인 mCP는 인광 도펀트 재료인 FIrpic과 동시에 진공 증착하였으며, 이때 증착속도는 mCP가 0.1 nm/s, FIrpic는 0.005 nm/s였다. LiF는 0.01 nm/s의 속도로 1 nm의 두께로 형성하였고, Al은 0.5nm/sec의 증착속도로 100 nm의 두께로 형성하였다. 소자 형성후 CaO 흡습제와 유리 커버 글라스를 이용하여 소자를 밀봉하였다.
- [0174] 실시예 2
- [0175] 본 발명에서 합성한 화합물 2를 전자수송층 재료로서 적용하여 유기전계 발광소자를 제작하였다.
- [0176] 소자의 구조는 ITO/DNTPD/NPB/mCP/mCP:FIrpic/화합물2/Alq₃/LiF/Al 이었다. 소자의 제작과정은 전자수송층에 화합물 2를 적용한 것 이외에는 실시예 1과 동일하였다.
- [0177] 실시예 3
- [0178] 본 발명에서 합성한 화합물 7을 전자수송층 재료로서 적용하여 유기전계 발광소자를 제작하였다.
- [0179] 소자의 구조는 ITO/DNTPD/NPB/mCP/mCP:FIrpic/화합물7/Alq₃/LiF/Al 이었다. 소자의 제작과정은 전자수송층에 화합물 7을 적용한 것 이외에는 실시예 1과 동일하였다.
- [0180] 실시예 4
- [0181] 본 발명에서 합성한 화합물 8을 전자수송층 재료로서 적용하여 유기전계 발광소자를 제작하였다.
- [0182] 소자의 구조는 ITO/DNTPD/NPB/mCP/mCP:FIrpic/화합물8/Alq₃/LiF/Al 이었다. 소자의 제작과정은 전자수송층에 화합물 2를 적용한 것 이외에는 실시예 1과 동일하였다.
- [0183] 비교예 1
- [0184] 화합물 1 대신에 일반적으로 전자수송층으로 사용되는 2,9-디메틸-4,7-디페닐1-1,10-p페난트롤린(BCP)을 청색 인광 소자의 전자수송층 물질로서 적용하였다.
- [0185] 소자의 구조는 ITO/DNTPD/NPB/mCP/mCP:FIrpic/BCP/Alq₃/LiF/Al 이었다. 소자의 제작과정은 전자수송층 물질로서 BCP를 적용한 것 이외에는 실시예 1과 동일하였다.
- [0186] 실시예 5
- [0187] 본 발명에서 합성한 화합물 2를 녹색 인광소자의 전자수송층 물질로서 적용하였다. 소자의 구조는 ITO/DNTPD/TCTA/CBP:Ir(ppy)₃/화합물 2/LiF/Al 이었다.
- [0188] 소자의 제작은 다음과 같은 방법으로 수행하였다.
- [0189] ITO 기판은 순수와 이소프로필 알코올을 이용하여 초음파에서 30분간 세정한 후 ITO 기판을 단파장의 자외선을 이용하여 표면처리한 후 1x10⁻⁶ torr의 압력 하에서 유기물을 진공 증착하였다. DNTPD, TCTA, 화합물 2는 0.1 nm/s의 속도로 증착하여 각 두께에 해당하는 막을 형성하였고, 녹색인광 호스트 재료인 CBP는 Ir(ppy)₃ 도펀트와

진공증착하였으며, 이때 증착속도는 CBP는 0.1 nm/s, Ir(ppy)₃은 0.01 nm/s였다. LiF는 0.01 nm/s의 속도로 1 nm의 두께로 형성하였고, Al은 0.5nm/sec의 증착속도로 100 nm의 두께로 형성하였다. 소자 형성후 CaO 흡습제와 유리 커버 글라스를 이용하여 소자를 밀봉하였다.

[0190] 비교예 2

[0191] 화합물 1 대신에 일반적으로 전자수송층으로 사용되는 2,9-디메틸-4,7-디페닐1-1,10-페난트롤린(BCP)을 녹색 인광 소자의 전자수송층 물질로서 적용하였다.

[0192] 소자의 구조는 ITO/DNTPD/TCTA/CBP:Ir(ppy)₃/BCP/LiF/Al 이었다. 소자의 제작과정은 전자수송층 물질로서 BCP를 적용한 것 이외에는 실시예 5와 동일하였다.

[0193] 실시예 1 내지 5, 비교예 1 및 비교예 2의 양자효율은 Forrest 논문(G. Gu and S. R. Forrest, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, Vol. 4, No. 1, January / February 1998, p. 83 - 99)에 기재된 바에 따라 측정하여 표 1에 나타내었다.

[0194] 구동전압은 휘도 1000cd/m²의 전압값으로 나타내었다.

[0195] 표 1과 도 3을 참고로 설명하면, 청색 인광 발광소자에서는 동일전압에서 본 발명에 따른 재료를 이용한 소자가 비교예보다 높은 전류밀도값을 나타내고 있으며, 이를 통하여 비교예보다 낮은 구동전압을 갖는 것을 확인할 수 있다.

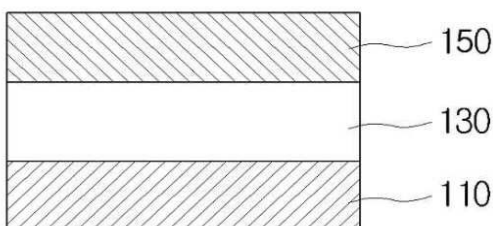
[0196] 표 1과 도 4를 참조하여 설명하면, 녹색 인광 발광소자의 경우 본 발명에 따른 재료를 이용한 소자가 비교예 보다 높은 양자효율 값을 나타내고 있음을 확인할 수 있다.

표 1

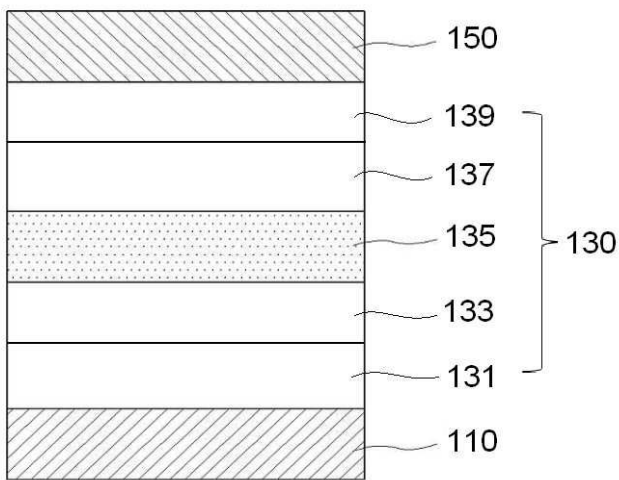
	구동전압(V)	양자효율(%)	색좌표
실시예 1	9.0	10.7	0.15, 0.32
실시예 2	7.5	13.2	0.15, 0.30
실시예 3	6.5	13.2	0.14, 0.29
실시예 4	8.0	16.7	0.14, 0.29
실시예 5	5.5	19.0	0.26, 0.64
비교예 1	8.5	6.3	0.15, 0.35
비교예 2	5.5	16.3	0.27, 0.63

도면

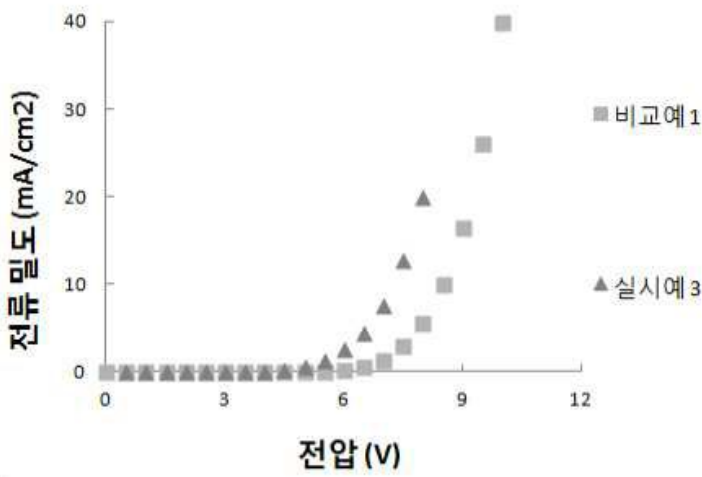
도면1



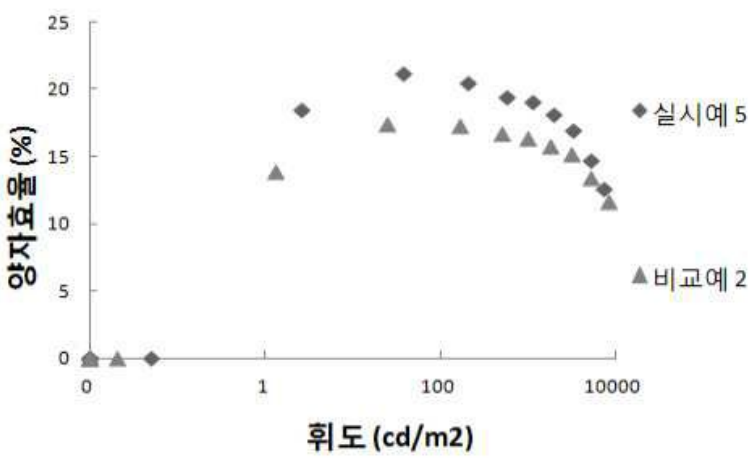
도면2



도면3



도면4



专利名称(译)	标题：三嗪生物化合物和含有它们的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020130091888A	公开(公告)日	2013-08-20
申请号	KR1020120013204	申请日	2012-02-09
[标]申请(专利权)人(译)	檀国大学校产学协力团		
申请(专利权)人(译)	檀国大学学术合作		
当前申请(专利权)人(译)	檀国大学学术合作		
[标]发明人	LEE JUN YEOB 이준엽 LEE CHIL WON 이칠원		
发明人	이준엽 이칠원		
IPC分类号	C09K11/06 C07D491/048 C07D251/12 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0059 H01L51/0062 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/5088 H01L51/5092		
其他公开文献	KR101460621B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明提供根据本发明，与现有的有机电致发光器件用化合物相比，具有改善的驱动电压的用于有机电致发光器件的三嗪生物化合物和包含其的有机电致发光器件具有优异的量子效率本发明涉及三嗪生物化合物和包含其的有机电致发光器件。

