

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2017-0066241 (43) 공개일자 2017년06월14일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) <i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>C07D 403/04</i> (2006.01) <i>C07D 405/14</i> (2006.01) <i>C07D 487/14</i> (2006.01) <i>H01L 51/00</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01) (52) CPC특허분류 <i>C09K 11/06</i> (2013.01) <i>C07D 403/04</i> (2013.01) (21) 출원번호 10-2016-0158003 (22) 출원일자 2016년11월25일 심사청구일자 없음 (30) 우선권주장 1020150172324 2015년12월04일 대한민국(KR)		(71) 출원인 롬엔드하스전자재료코리아유한회사 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동) (72) 발명자 문두현 경기도 화성시 병점3로 117 906동 1304호 (74) 대리인 장훈

전체 청구항 수 : 총 6 항

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

(57) 요약

본 발명은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 구동 수명이 현저히 개선된 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

(52) CPC특허분류

C07D 405/14 (2013.01)

C07D 487/14 (2013.01)

H01L 51/0071 (2013.01)

H01L 51/0072 (2013.01)

H01L 51/50 (2013.01)

C09K 2211/1011 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

C09K 2211/1044 (2013.01)

C09K 2211/1088 (2013.01)

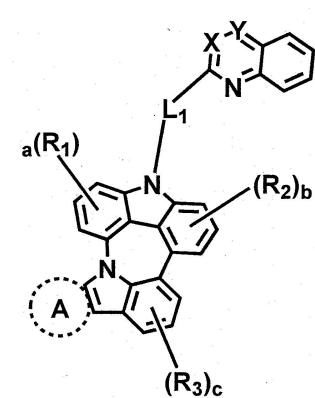
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X 및 Y는 각각 독립적으로 CR₄ 또는 N이고;

L₁은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고;

A는 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고;

R₁ 내지 R₃은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환체와 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 상기 지환족과 방향족의 융합 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족, 방향족, 또는 융합 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며;

R₄는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이고;

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

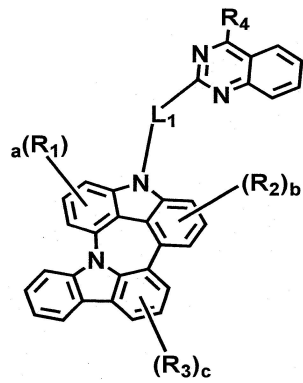
a 내지 c는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며,

a, b 또는 c가 각각 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R₁, R₂ 또는 R₃은 동일하거나 상이할 수 있다.

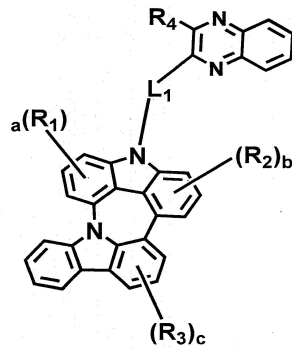
청구항 2

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 9 중 어느 하나로 표시되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

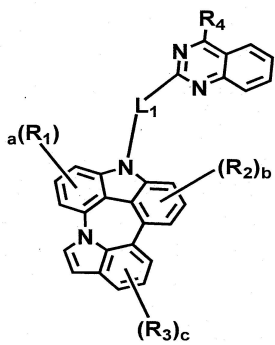
[화학식 2]



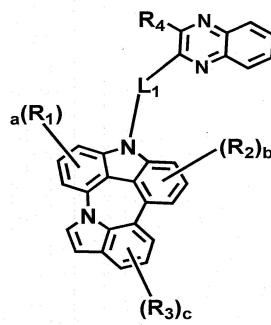
[화학식 3]



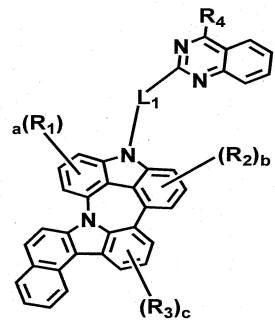
[화학식 4]



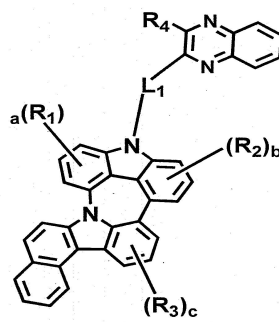
[화학식 5]



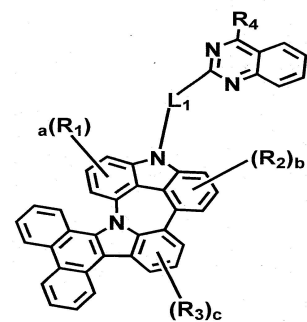
[화학식 6]



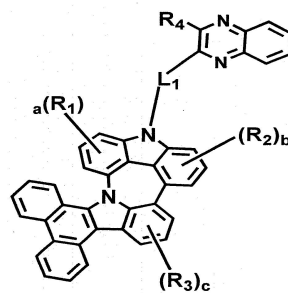
[화학식 7]



[화학식 8]



[화학식 9]



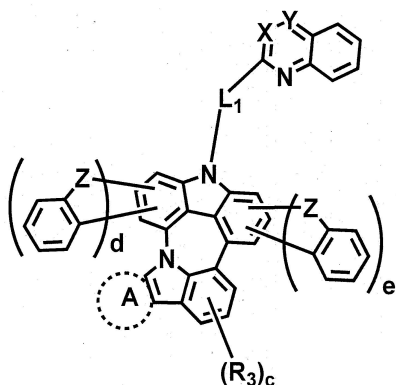
상기 화학식 2 내지 9에서,

L_1 , R_1 내지 R_4 , 및 a 내지 c 는 제1항에서 정의된 바와 같다.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 10으로 표시되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 10]



상기 화학식 10에서,

X, Y, L₁, A, R₃, 및 c는 제1항에서 정의된 바와 같고,

Z는 O, S, CR₅R₆, 또는 NR₇이고,

R₅ 내지 R₇은 각각 독립적으로 제1항에 기재된 R₄의 정의와 동일하고,

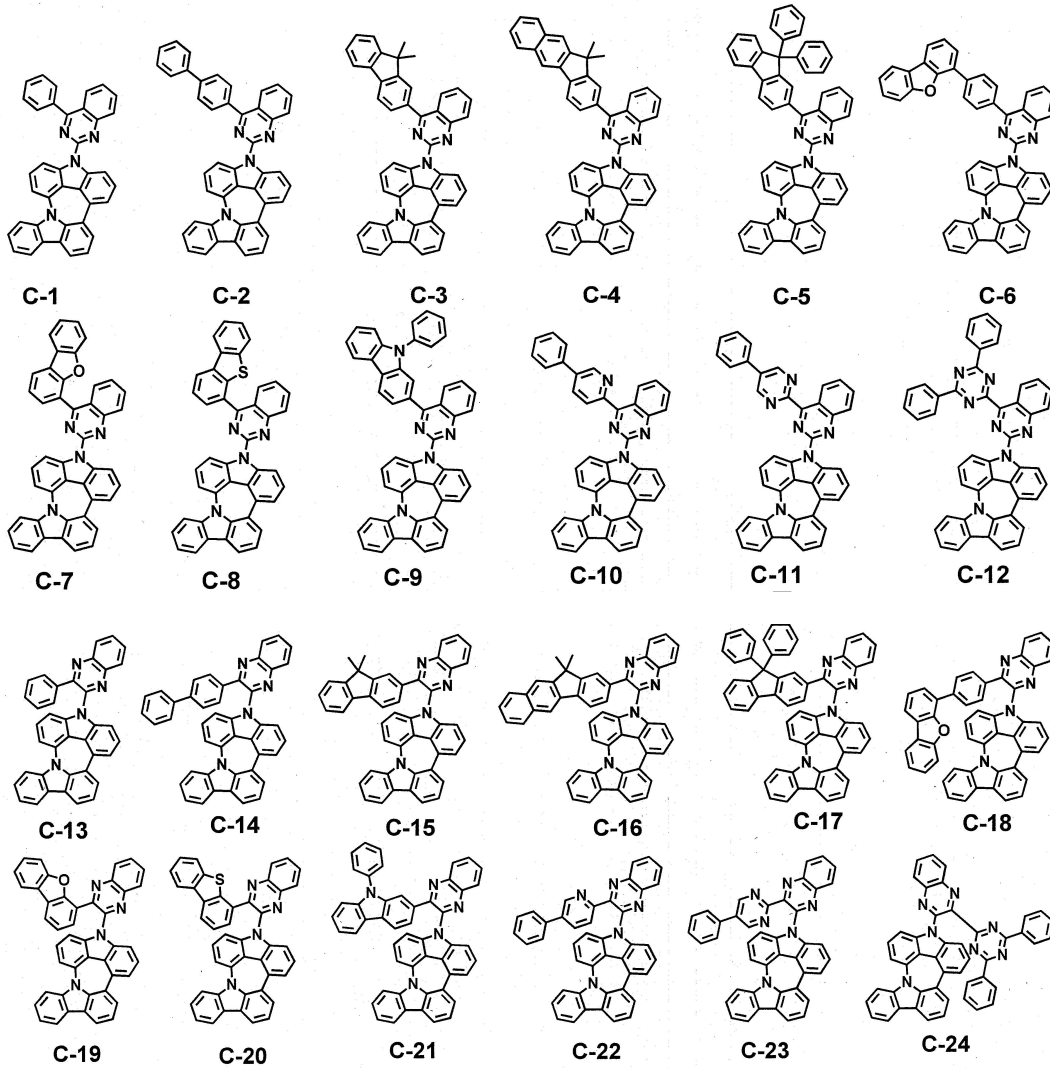
d 및 e는 각각 독립적으로 0 또는 1이다.

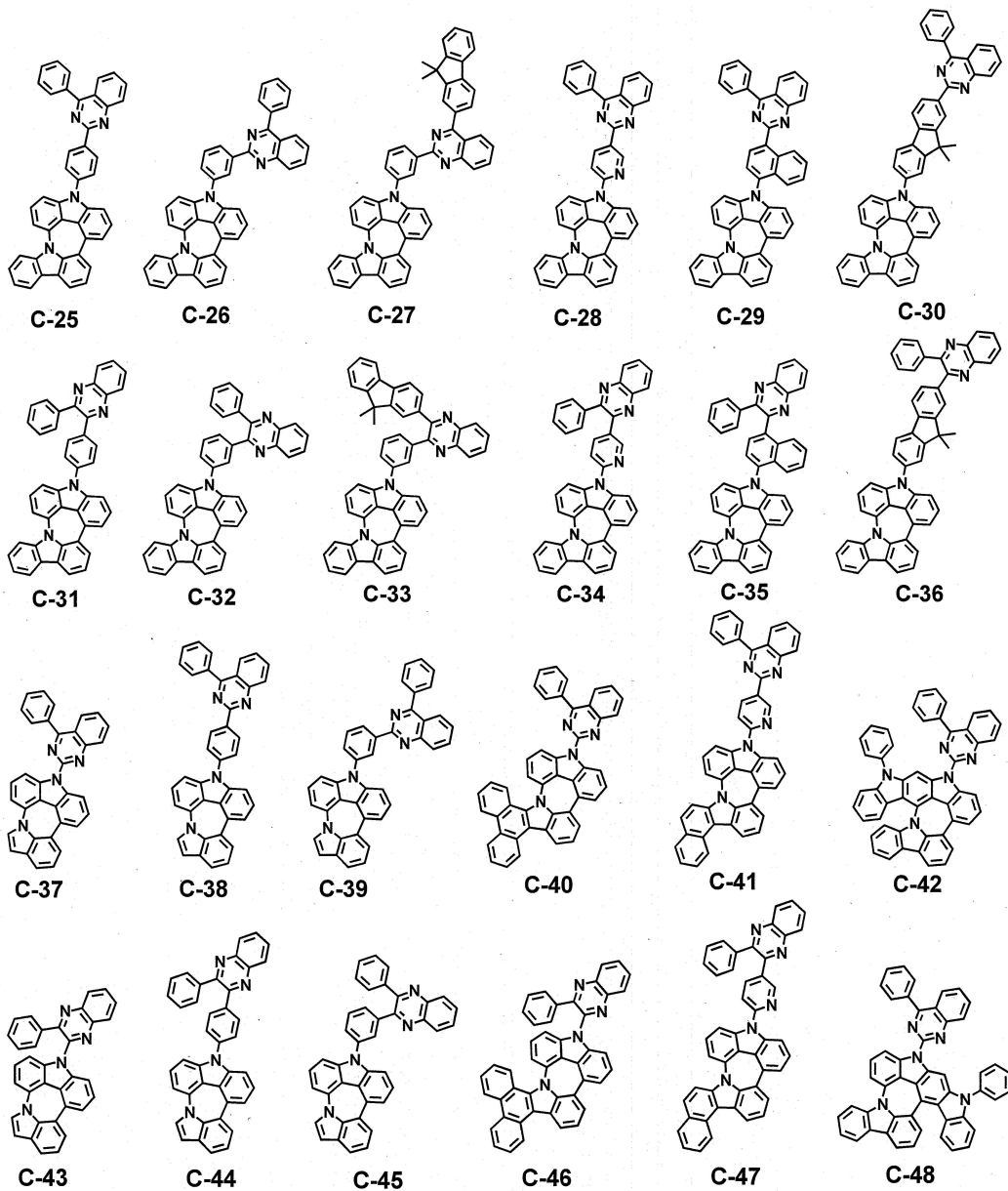
청구항 4

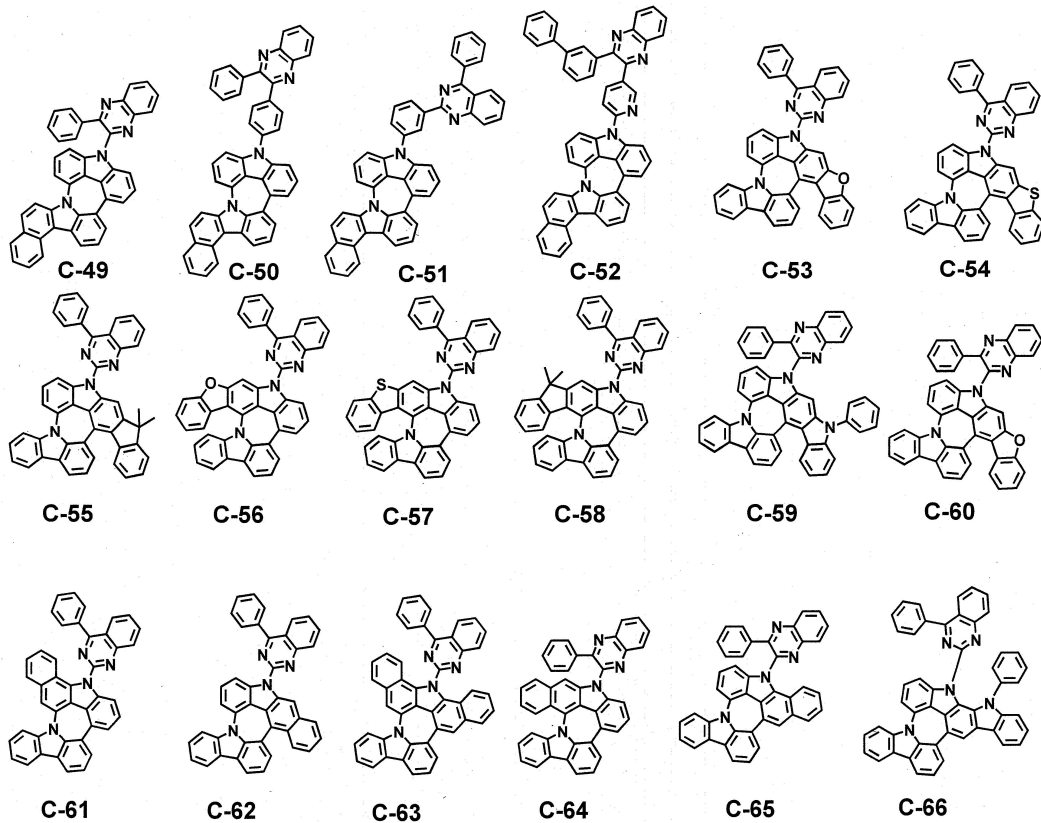
제1항에 있어서, 상기 L₁, A 및 R₁ 내지 R₄에서 치환된 아릴(렌), 치환된 헤테로아릴(렌), 치환된 알킬, 치환된 시클로알킬, 치환된 알콕시, 치환된 트리알킬실릴, 치환된 디알킬아릴실릴, 치환된 알킬디아릴실릴, 치환된 트리아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디-알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디-아릴아미노, 치환된 알킬아릴아미노, 및 치환된 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 상기 지환족과 방향족의 융합 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소; 할로젠; 시아노; 카르복실; 니트로; 히드록시; (C1-C30)알킬; 할로(C1-C30)알킬; (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; (C1-C30)알킬 또는 (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴; (3-30원)헤테로아릴로 치환 또는 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 하나 이상인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기에서 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.







청구항 6

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

[0002] 표시 소자 중, 전기 발광 소자(electroluminescent device: EL device)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[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 전계 발광 소자에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재까지 형광 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)-피리디네이트-N,C-3')이리듐(아세틸아세토네이트)[(acac)Ir(btp)₂], 트리스(2-페닐피리딘)이리듐[Ir(ppy)₃], 비스(4,6-디플루오로페닐피리디네이트-N,C2)피콜리네이트이리듐(Firpic) 등의 재료가 알려져 있다.

[0004] 종래 기술에서, 인광용 호스트 재료로는 4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐(CBP)이 가장 널리 알려져 있었다. 최근에는, 일본의 파이오니어 등이 정공 차단층의 재료로 사용되던 바토큐프로인(Bathocuproine, BCP), 알루미늄(III) 비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)(4-페닐페놀레이트)(Balq) 등을 호스트 재료로 이용해 고성능의 유기 전계 발광 소자를 개발한 바 있다.

[0005] 그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 다음과 같은 단점이 있다: (1) 유리 전이 온도가 낮고 열적 안정성이 낮아서, 진공 하에서 고온 증착 공정시 열화되며, 소자의 수명이 저하된다. (2) 유

기 전계 발광 소자에서 전력효율 = $[(\pi/\text{전압}) \times \text{전류효율}]$ 의 관계에 있으므로 전력 효율은 전압에 반비례하는데, 인광용 호스트 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자는 형광 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자에 비해 전류효율(cd/A)은 높으나, 구동 전압 역시 상당히 높기 때문에 전력 효율(lm/w) 면에서 큰 이점이 없다. (3) 또한, 유기 전계 발광 소자에 사용할 경우, 작동 수명 측면에서도 만족스럽지 못하며, 발광 효율도 여전히 개선이 요구된다. 따라서, 유기 EL 소자의 우수한 특성을 구현하기 위해서는 소자 내 유기물층을 구성하는 재료들, 특히 발광 재료를 구성하는 호스트 또는 도판트를 적절히 선택해야 한다.

[0006] 일본 공개특허공보 제2014-160813호는 피롤, 방향족 아릴 및 7원 아릴이 축합하여 이루어진 질소 함유 헤테로아릴 화합물을 호스트/도판트 재료로 포함하는 유기 전계 발광 소자를 개시하고 있으나, 카바졸과 인돌이 7원 고리와 함께 융합되어 환을 형성하는 구조에 대해서는 구체적으로 개시하고 있지 않다.

[0007] 한국 공개특허공보 제10-2015-077220호는 카바졸, 플루오렌, 또는 5원 헤테로환을 포함하는 디벤조 잔기에 아민기가 융합되어 환을 형성하는 화합물을 개시하고 있으나, 카바졸과 인돌이 7원 고리와 함께 융합되어 형성된 모핵이 질소 함유 10원 헤테로 아릴과 직접, 또는 아릴렌이나 헤테로아릴렌을 링커로 하여 연결된 구조의 화합물에 대해서는 구체적으로 개시하고 있지 않다.

선행기술문헌

특허문헌

[0008] (특허문헌 0001) 일본 공개특허공보 제2014-160813호 (2014. 9. 4. 발행)
(특허문헌 0002) 한국 공개특허공보 제10-2015-077220호 (2015. 7. 7. 발행)

발명의 내용

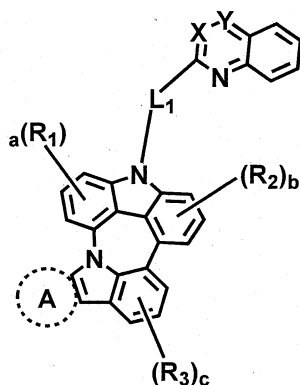
해결하려는 과제

[0009] 본 발명의 목적은, 첫째로 구동 수명이 현저히 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며, 둘째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0010] 상기의 기술적 과제를 해결하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자는 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0011] [화학식 1]



[0012]

[0013] 상기 화학식 1에서,

[0014] X 및 Y는 각각 독립적으로 CR₄ 또는 N이고;

[0015] L₁은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C₆-C₃₀)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고;

- [0016] A는 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고;
- [0017] R_1 내지 R_3 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환체와 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 상기 지환족과 방향족의 융합 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족, 방향족, 또는 융합 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며;
- [0018] R_4 는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이고;
- [0019] 상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;
- [0020] a 내지 c는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며,
- [0021] a, b 또는 c가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R_1 , R_2 또는 R_3 은 동일하거나 상이할 수 있다.

발명의 효과

- [0022] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 구동 수명이 현저히 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0023] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.
- [0024] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다. 본원에서 "유기 전계 발광 화합물"은 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 화합물을 의미하며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다.
- [0025] 상기 화학식 1에서, X 및 Y는 각각 독립적으로 CR_4 또는 N이고, 바람직하게는 X 및 Y 중 어느 하나가 CR_4 이고, 다른 하나가 N이다.
- [0026] 상기 화학식 1에서, L_1 은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고, 바람직하게는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴렌이고, 더욱 바람직하게는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴렌, 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴렌이고, 예를 들면, 단일 결합, 비치환된 페닐, 비치환된 나프틸, 디메틸로 치환된 플루오레닐, 또는 비치환된 피리딜일 수 있다.
- [0027] 상기 화학식 1에서, A는 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고, 바람직하게는 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴이고, 더욱 바람직하게는 수소, 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이고, 예를 들면, 수소, 비치환된 페닐, 비치환된 나프틸, 또는 비치환된 페난트레닐일 수 있다.
- [0028] 상기 화학식 1에서, R_1 내지 R_3 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된

모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환체와 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 상기 지환족과 방향족의 융합 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족, 방향족, 또는 융합 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며, 바람직하게는, 수소, 또는 인접한 치환체와 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C25)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며, 더욱 바람직하게는 수소, 또는 인접한 치환체와 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C5-C18)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며, 예를 들면, 수소, 또는 인접한 치환체와 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 벤젠 고리, 치환 또는 비치환된 나프탈렌 고리, 치환 또는 비치환된 인돌 고리, 치환 또는 비치환된 벤조푸란 고리, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜 고리, 또는 치환 또는 비치환된 인덴 고리, 구체적으로, 비치환된 벤젠 고리, 비치환된 나프탈렌 고리, 페닐로 치환된 인돌 고리, 비치환된 벤조푸란 고리, 비치환된 벤조티오펜 고리, 또는 디메틸로 치환된 인덴 고리를 형성할 수 있다.

[0029] 상기 화학식 1에서, R_4 는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴이고, 더욱 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴이고, 예를 들면, 벤조푸란으로 치환 또는 비치환된 페닐, 비치환된 비페닐, 디메틸 또는 디페닐로 치환된 플루오레닐, 디메틸로 치환된 벤조플루오레닐, 비치환된 벤조푸란일, 비치환된 벤조티오펜일, 페닐로 치환된 카바졸릴, 페닐로 치환된 피리딜, 페닐로 치환된 피리미딘일, 또는 페닐로 치환된 트리아진일일 수 있다.

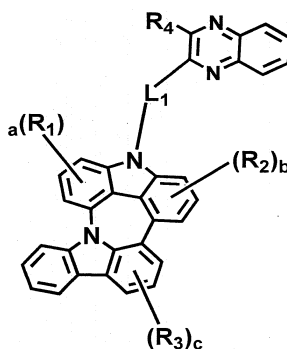
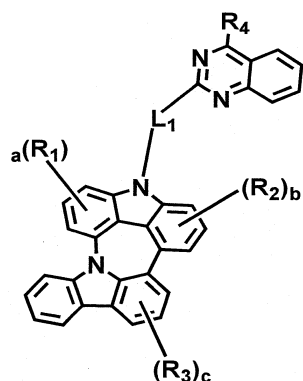
[0030] 상기 화학식 1에서, 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고, 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

[0031] 상기 화학식 1에서, a 내지 c는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, 바람직하게는 1 또는 2의 정수이며; a, b 또는 c가 각각 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R_1 , R_2 또는 R_3 은 동일하거나 상이할 수 있다.

[0032] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 9 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0033] [화학식 2]

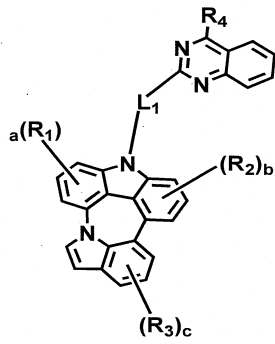
[화학식 3]



[0034]

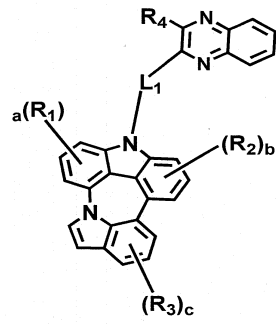
[0035]

[화학식 4]



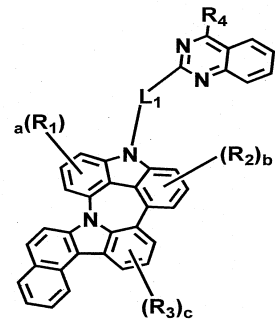
[0036]

[화학식 5]



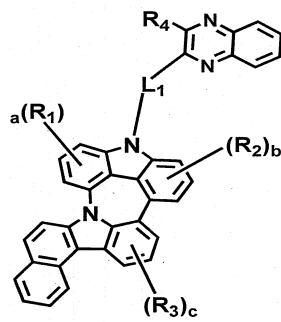
[0037]

[화학식 6]



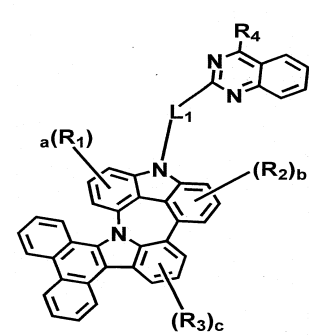
[0038]

[화학식 7]



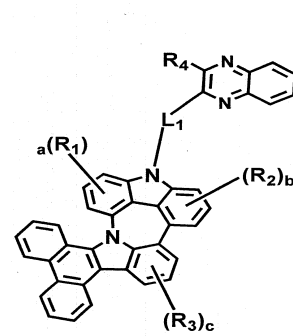
[0039]

[화학식 8]



[0040]

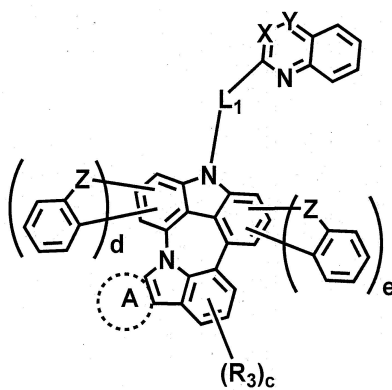
[화학식 9]



[0041] 상기 화학식 2 내지 9에서, L₁, R₁ 내지 R₄, 및 a 내지 c는 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[0042] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 10으로 표시될 수 있다.

[0043] [화학식 10]



[0044]

[0045] 상기 화학식 10에서, X, Y, L₁, A, R₃, 및 c는 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[0046] 상기 화학식 10에서, Z는 O, S, CR₅R₆, 또는 NR₇이고, 여기서, R₅ 내지 R₇은 각각 독립적으로 화학식 1에 기재된 R₁의 정의와 동일하다. 구체적으로, R₅ 내지 R₇은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴이고, 더욱 바람직하게는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이다. 예를 들면, R₅ 및 R₆은 각각 독립적으로 비치환된 메틸일 수 있고, R₇은 비치환된 페닐일 수 있다.

[0047] 상기 화학식 10에서, d 및 e는 각각 독립적으로 0 또는 1이다.

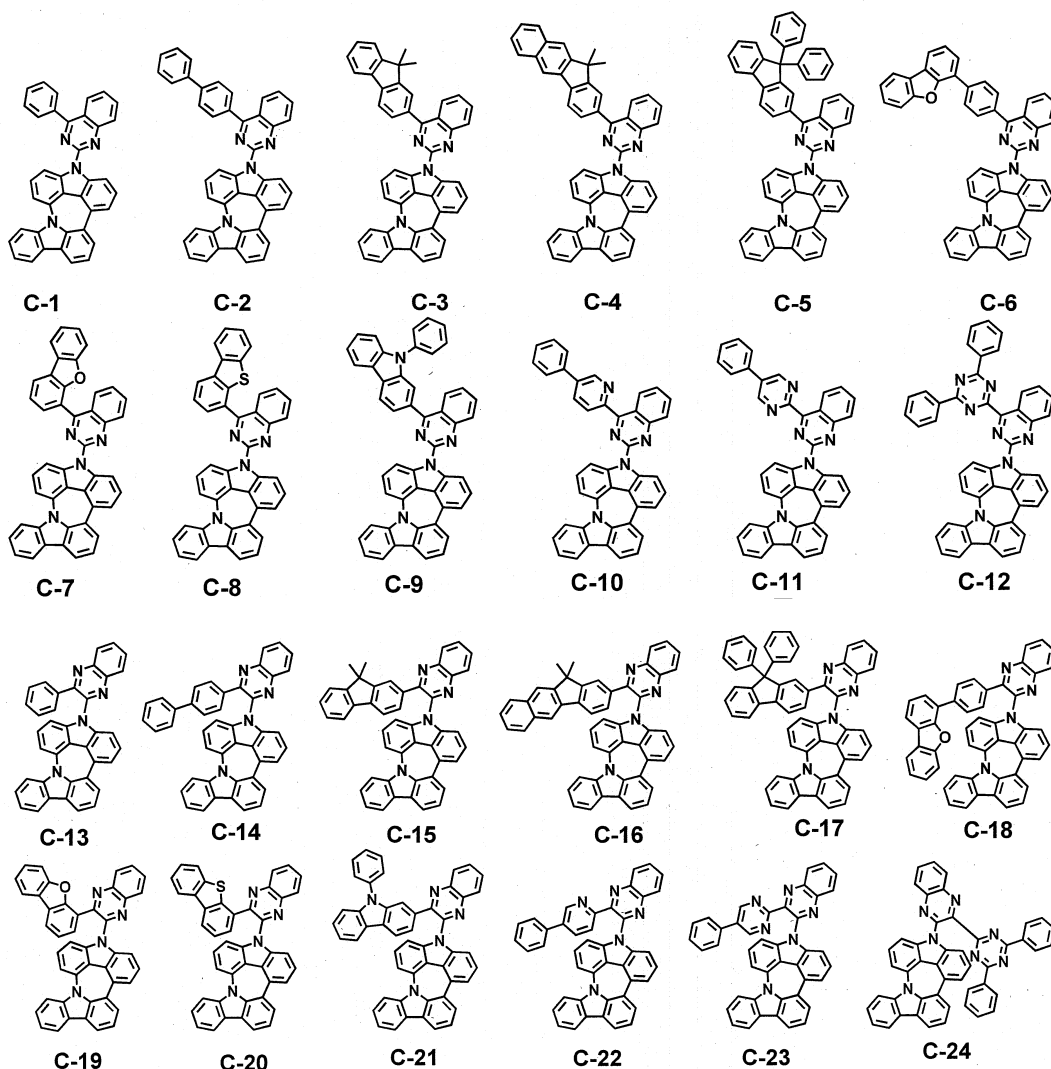
[0048] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은쇄를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 1 내지 20개, 더 바람직하게는 1 내지 10개이다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알케닐"은쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알키닐"은쇄를 구성하는 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 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 상기 탄소수는 바람직하게는 3 내지 20개, 더 바람직하게는 3 내지 7개이다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(3-7원) 헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 3 내지 7개, 바람직하게는 5 내지 7개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군, 바람직하게는 O, S 및 N로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라히드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴(렌)"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 상기 탄소수는 바람직하게는 6 내지 20개, 더 바람직하게는 6 내지 15개이다. 상기 아릴은 스피로 구조를 가진 것을 포함한다. 상기 아릴의 예로서 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐 나프틸, 나프틸페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 스피로비플루오레닐 등이 있다. 본원에서 "(3-30원) 헤테로아릴(렌)"은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함하며, 스피로 구조를 가진 것도 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 단일환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페녹사진일, 페노티아진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로젠"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0049] 또한, 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기(즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 본원의 L₁, A 및 R₁ 내지 R₄에서 치환된 아릴(렌), 치환된 헤테로아릴(렌), 치환된 알킬, 치환된 시클로알킬, 치환된 알콕시, 치환된 트리알킬실릴, 치환된 디알킬아릴실릴, 치환된 알킬디아릴실릴, 치환된 트리아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디-알킬아미노, 치환된 모노- 또는

디-아릴아미노, 치환된 알킬아릴아미노, 및 치환된 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 상기 지환족과 방향족의 융합 고리의 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; (C1-C30)알킬 또는 (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴; (3-30원)헤테로아릴로 치환 또는 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 하나 이상이며, 바람직하게는, 각각 독립적으로 (C1-C20)알킬, 비치환된 (C6-C25)아릴, 및 비치환된 (5-25원)헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상이고, 더욱 바람직하게는, 각각 독립적으로 (C1-C10)알킬, 비치환된 (C6-C18)아릴, 및 비치환된 (5-18원)헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상이고, 예를 들면, 메틸, 비치환된 페닐, 및 비치환된 벤조푸란 일로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상일 수 있다.

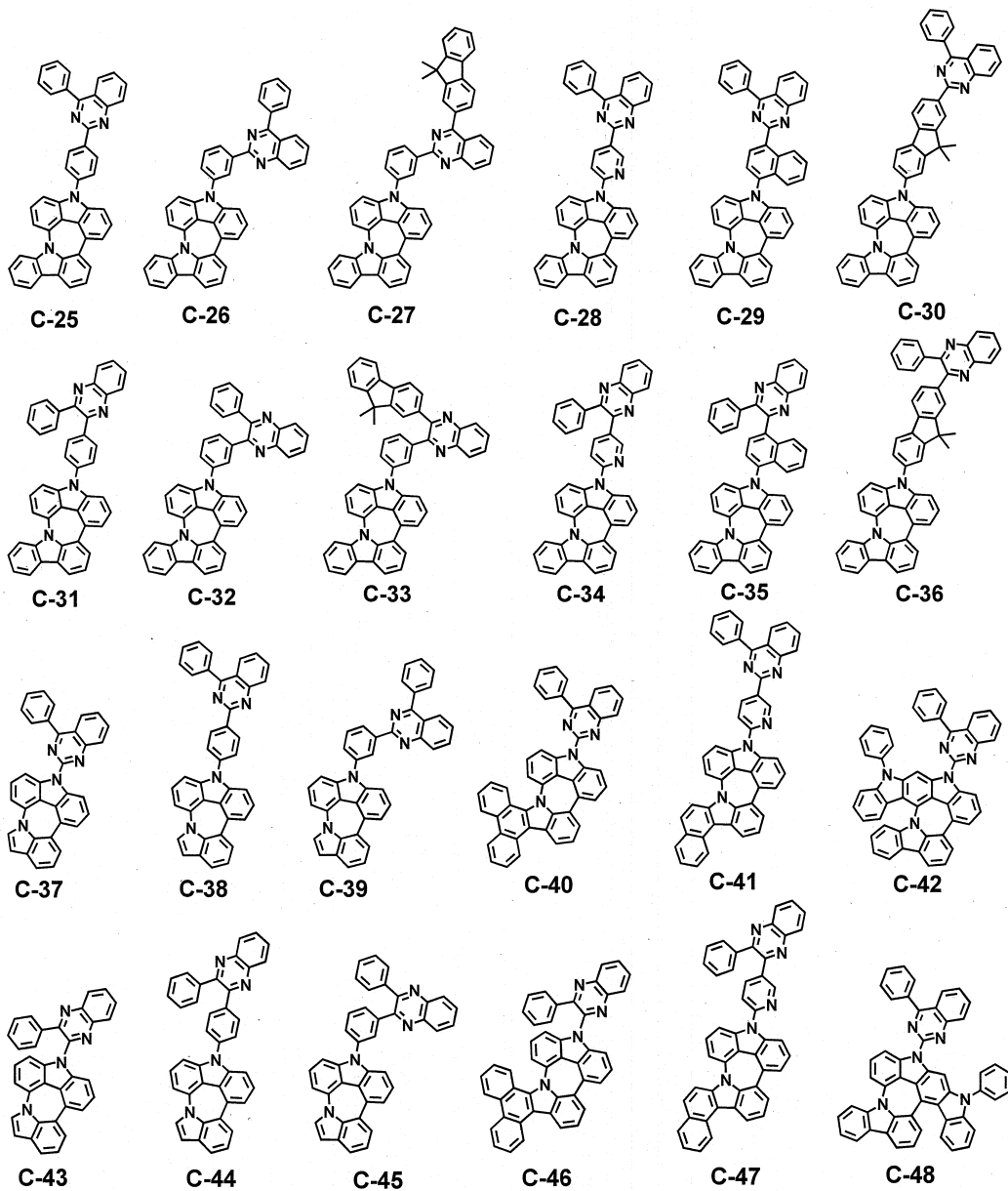
[0050]

상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

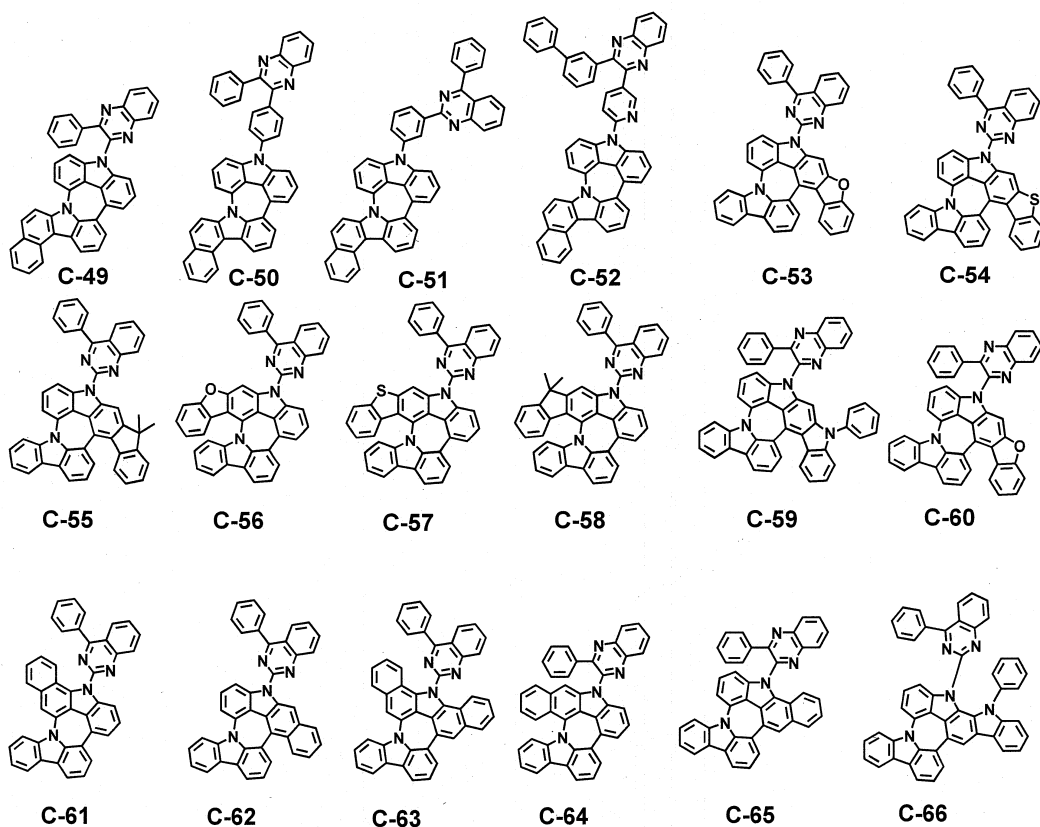


[0051]

[0052]



[0053]



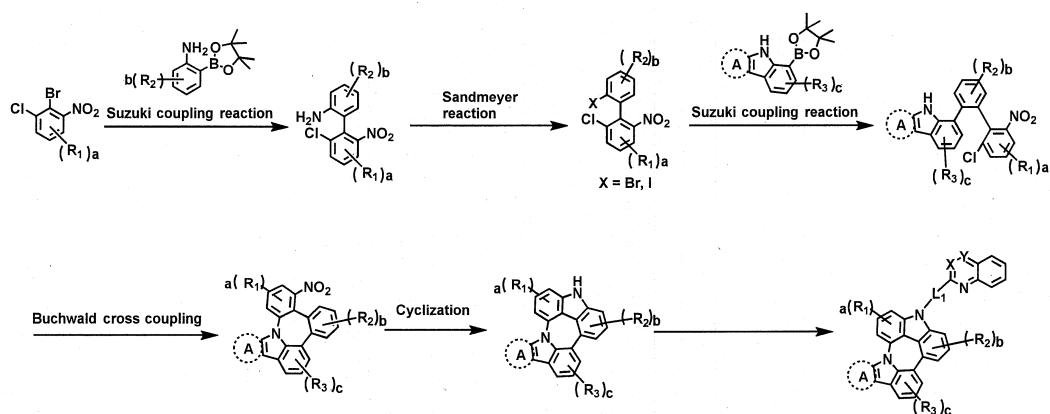
[0054]

[0055]

본원에 따른 유기 전계 발광 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식 1에 나타난 바와 같이 제조할 수 있다.

[0056]

[반응식 1]

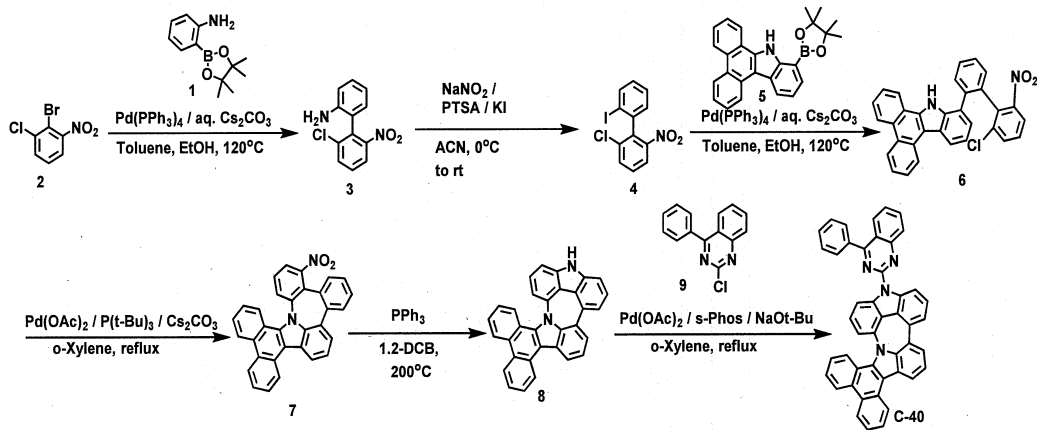


[0057]

[0058]

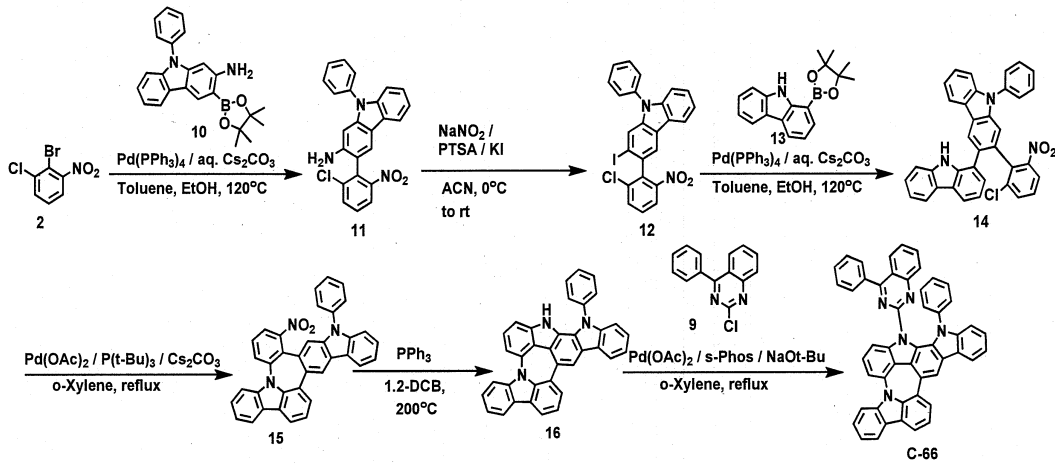
상기 반응식 1의 합성 방법에 대한 구체적 예로서, 본원 발명에 따른 화합물 C-40 및 C-66은 하기 반응식 2 및 3에 나타난 바와 같이 합성할 수 있다.

[0059] [반응식 2]



[0060]

[0061] [반응식 3]



[0062]

[0063] 상기 반응식 1에서 X, Y, L₁, A, R₁ 내지 R₃, 및 a 내지 c는 화학식 1에서의 정의와 동일하다.

[0064] 또한, 본원은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0065] 상기 재료는 본원의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0066] 본원에 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 유기 전계 발광 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다.

[0067] 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공주입층, 정공전달층, 정공보조층, 발광보조층, 전자전달층, 전자주입층, 계면층(interlayer), 정공차단층, 전자차단층, 및 전자 버퍼층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다. 여기서, 발광보조층은 애노드와 발광층 사이에 위치하거나, 캐소드와 발광층 사이에 위치하는 층으로서; 상기 애노드와 발광층 사이에 위치할 경우, 정공의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 전자의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용되거나, 상기 캐소드와 발광층 사이에 위치할 경우, 전자의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 정공의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있다. 또한, 상기 정공보조층은 정공전달층(또는 정공주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도(또는 주입 속도)를 원활하게 하거나 블록킹하는 효과를 나타낼 수 있으며, 이에 따라 전하 밸런스(charge balance)를 조절할 수 있는 층이다. 또한, 상기 전자차단층은 정공전달층(또는 정공주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 발광층으로부터의 전자의 오버플로우를 차단하여 엑시톤을 발광층 내에 가두어 발광 누수를 방지하는 층이다. 상기 정공 전달층을 2층 이상 포함할 경우, 추가로 포함되는 층을 상기 정공 보조층

또는 상기 전자 차단층의 용도로 사용할 수 있다. 상기 정공보조층과 전자차단층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및 수명의 개선효과를 갖는다.

[0068] 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다. 발광층에 사용될 경우, 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는, 상기 발광층은 하나 이상의 도판트를 추가로 더 포함할 수 있으며, 필요한 경우, 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다. 이때, 제1 호스트 재료와 제 2 호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

[0069] 상기 제2 호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하나, 하기 화학식 11 내지 화학식 16으로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 발광 효율 면에서 특히 바람직하다.

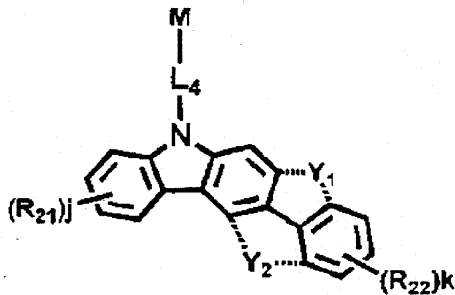
[0070] [화학식 11]

[0071] $H-(Cz-L_4)_h-M$

[0072] [화학식 12]

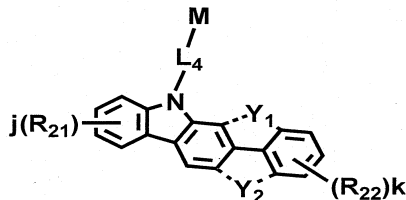
[0073] $H-(Cz)_i-L_4-M$

[0074] [화학식 13]



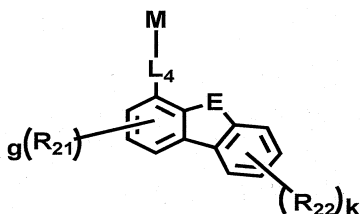
[0075]

[0076] [화학식 14]



[0077]

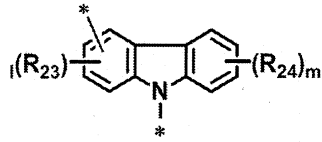
[0078] [화학식 15]



[0079]

[0080] 상기 화학식 11 내지 15에서,

[0081] Cz는 하기 구조이며,

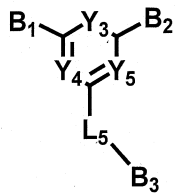


[0082]

[0083] E는 0 또는 S이고;

[0084] R₂₁ 내지 R₂₄는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴 또는 -SiR₂₅R₂₆R₂₇이며, R₂₅ 내지 R₂₇은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; L₄는 단일 결합, 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; Y₁ 및 Y₂는 각각 독립적으로 O, S, -N(R₃₁)-, 또는 -C(R₃₂)(R₃₃)- 이고, Y₁과 Y₂가 동시에 존재하지는 않으며; R₃₁ 내지 R₃₃은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, R₃₂ 및 R₃₃은 동일하거나 상이할 수 있으며; h 및 i는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, g는 0 내지 3의 정수이고, j, k, l 및 m은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, g, h, i, j, k, l 또는 m이 2 이상의 정수인 경우 각각의 (Cz-L₄), 각각의 (Cz), 각각의 R₂₁, 각각의 R₂₂, 각각의 R₂₃ 또는 각각의 R₂₄는 동일하거나 상이할 수 있다.

[0085] [화학식 16]



[0086]

[0087] 상기 화학식 16에서,

[0088] Y₃ 내지 Y₅는 각각 독립적으로 CR₃₄ 또는 N이고

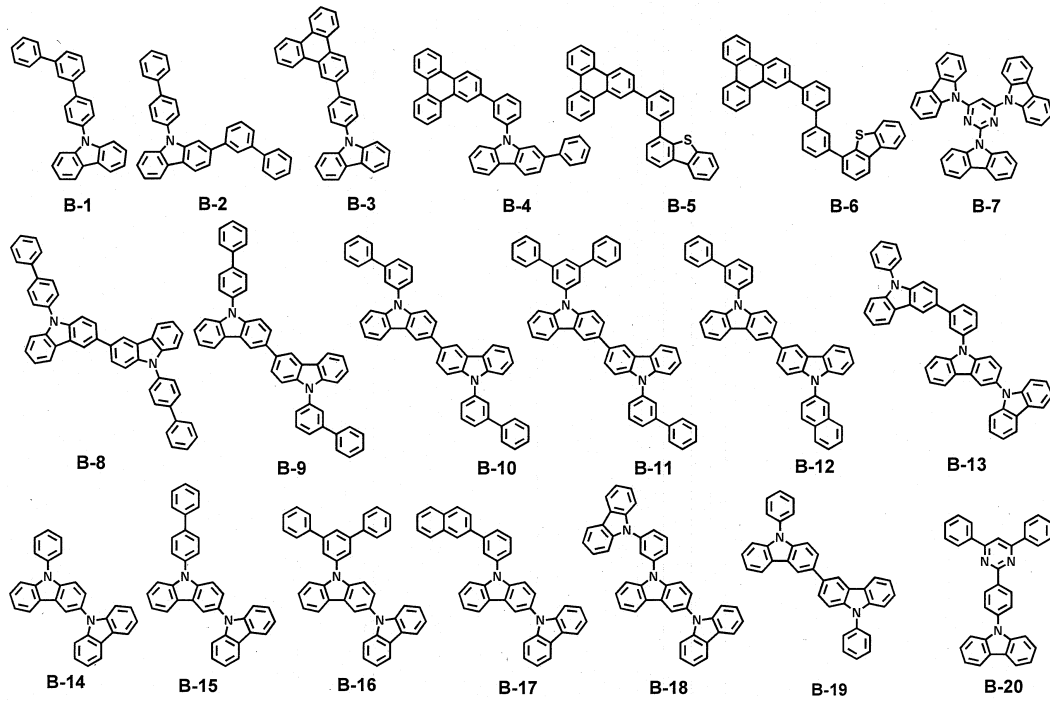
[0089] R₃₄는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

[0090] B₁ 및 B₂는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

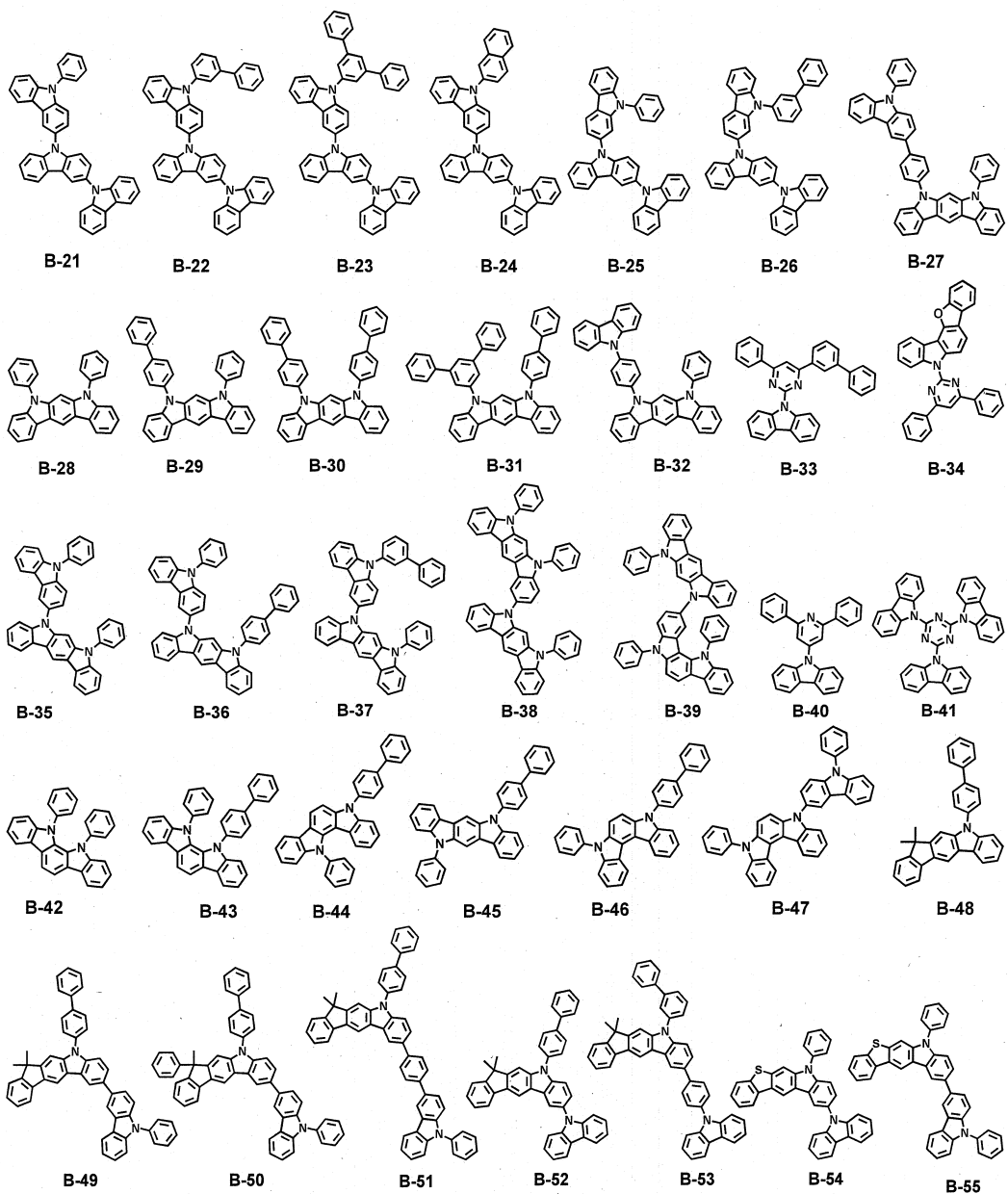
[0091] B₃은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

[0092] L₅는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이다.

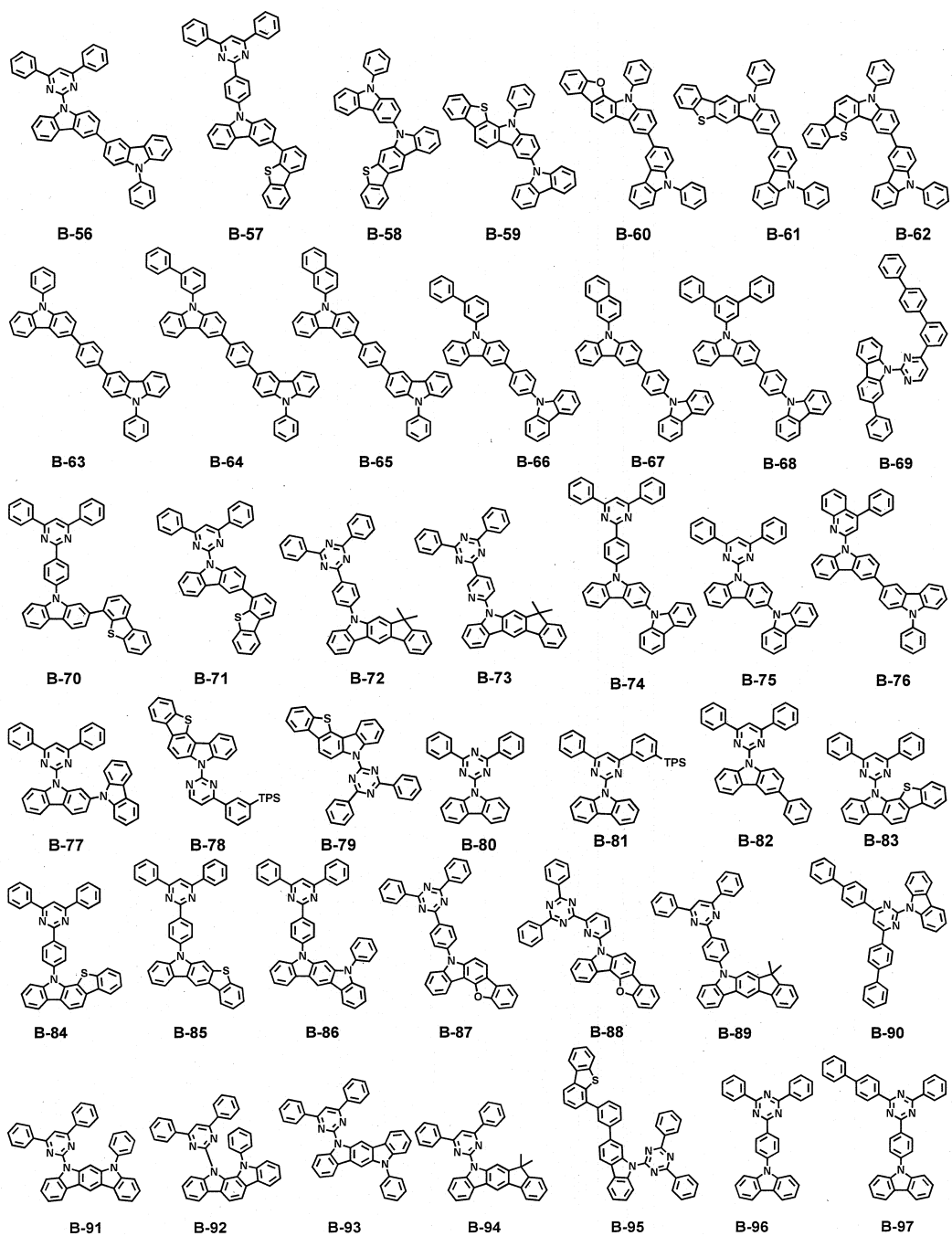
[0093] 구체적으로 상기 제2 호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같다.



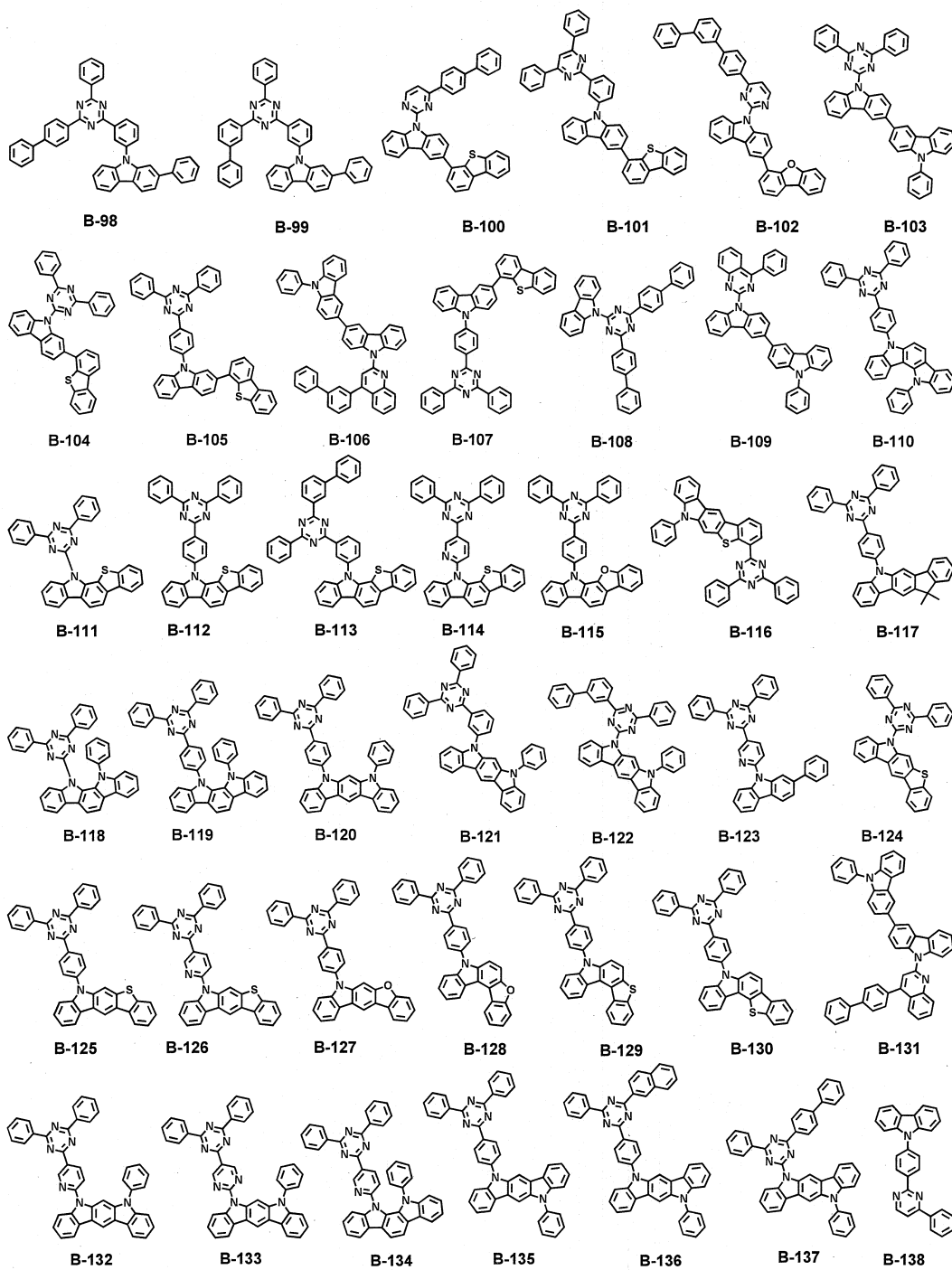
[0094]



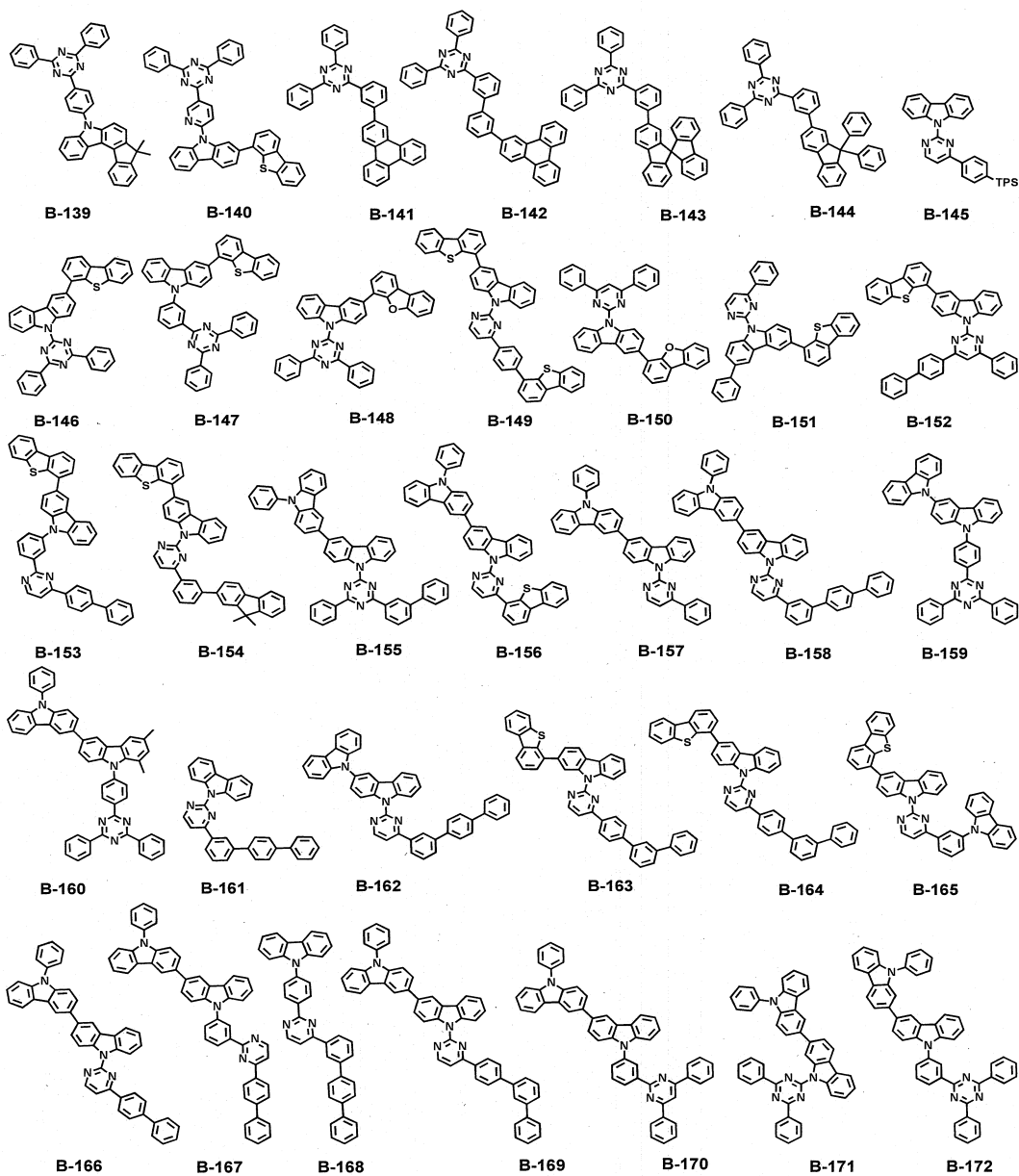
[0095]



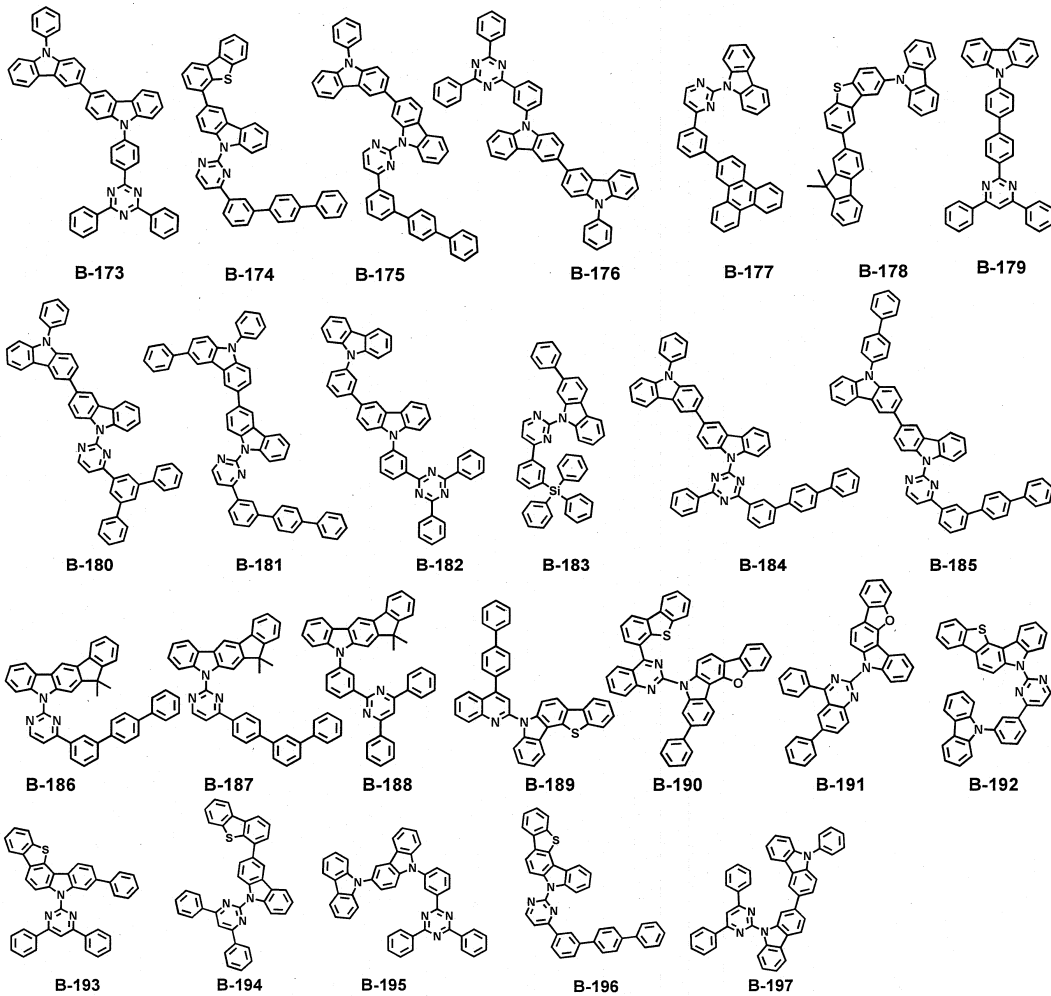
[0096]



[0097]



[0098]



[0099]

[0100]

[0101]

[0102]

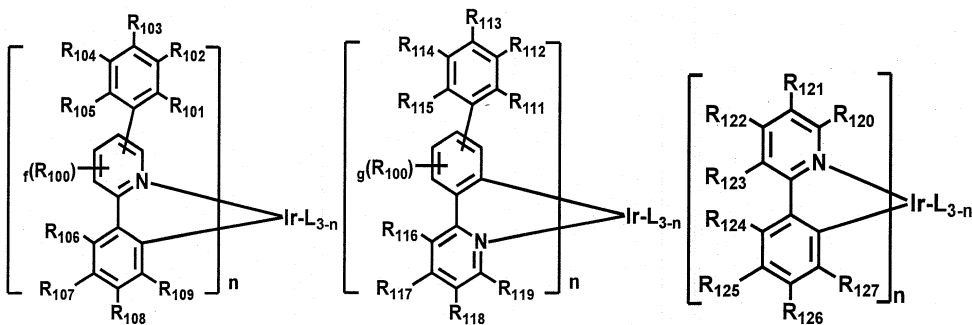
[0103]

[여기서, TPS는 트리페닐실릴(triphenylsilyl)기이다]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로는 하나 이상의 인광 도판트가 바람직하다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 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.

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 101 내지 103으로 표시되는 화합물을 사용할 수 있다.

[화학식 101] [화학식 102] [화학식 103]

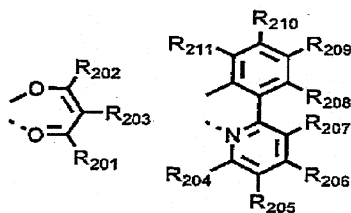


[0104]

[0105]

상기 화학식 101 내지 103에서,

[0106] L은 하기 구조에서 선택되고;



[0107]

[0108] R_{100} 은 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이며;

[0109] R_{101} 내지 R_{109} 및 R_{111} 내지 R_{123} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; R_{106} 내지 R_{109} 는 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며; R_{120} 내지 R_{123} 은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬 또는 아릴로 치환 또는 비치환된 퀴놀린 형성이 가능하며;

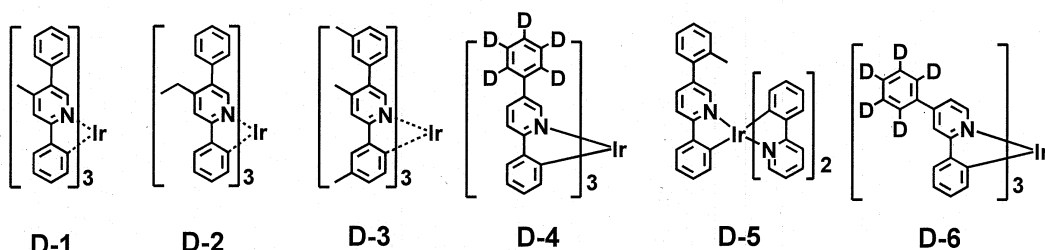
[0110] R_{124} 내지 R_{127} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; R_{124} 내지 R_{127} 은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

[0111] R_{201} 내지 R_{211} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-30)아릴이고, R_{208} 내지 R_{211} 은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합 고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

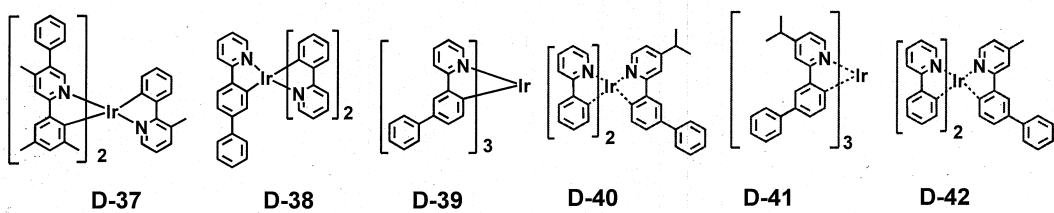
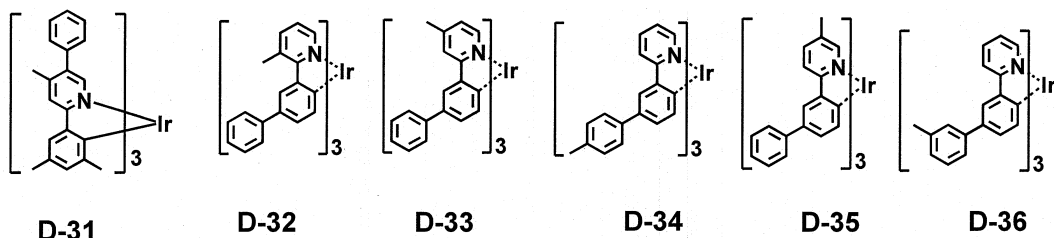
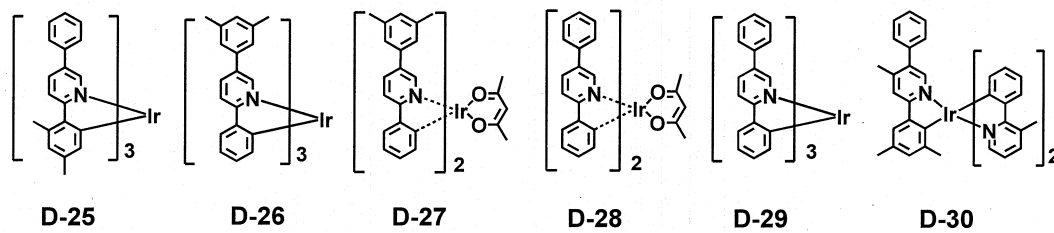
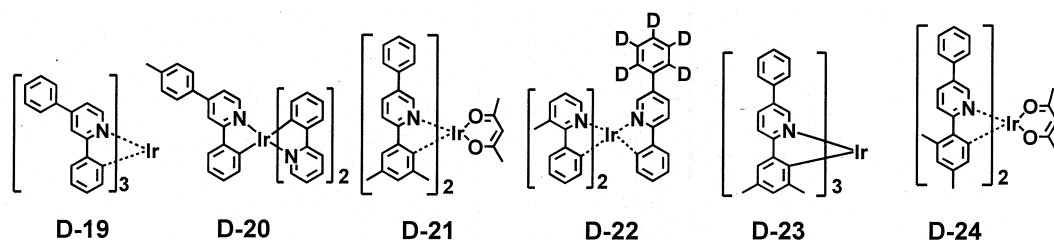
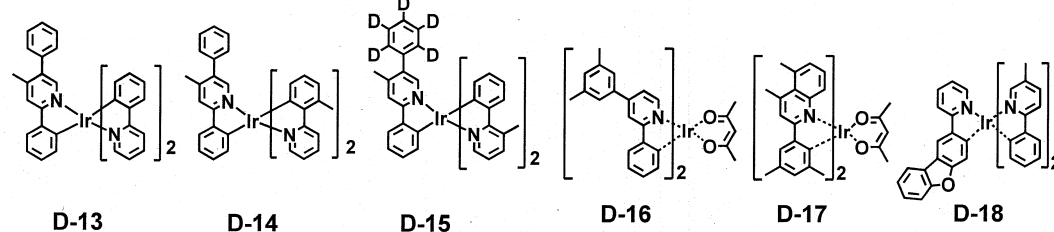
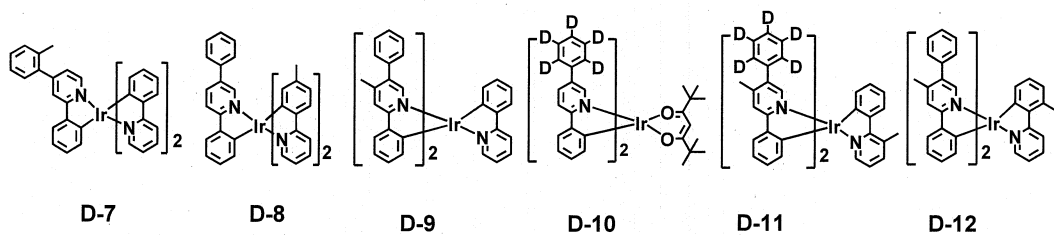
[0112] f 및 g는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며; f 또는 g가 각각 2 이상의 정수인 경우 각각의 R_{100} 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

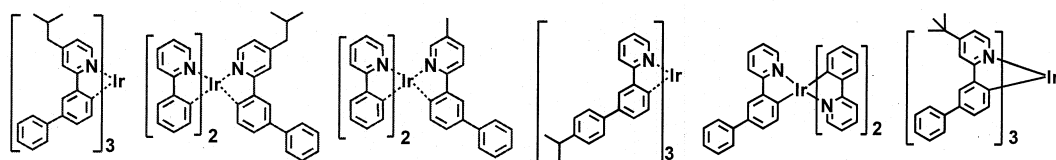
[0113] n은 1 내지 3의 정수이다.

[0114] 상기 도판트 화합물의 구체적인 예는 다음과 같다.



[0115]





D-43

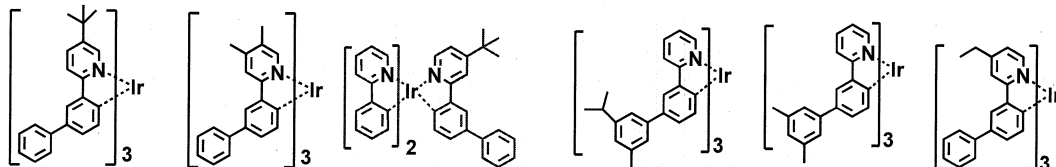
D-44

D-45

D-46

D-47

D-48



D-49

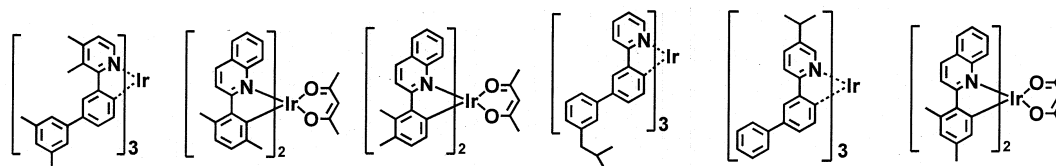
D-50

D-51

D-52

D-53

D-54



D-55

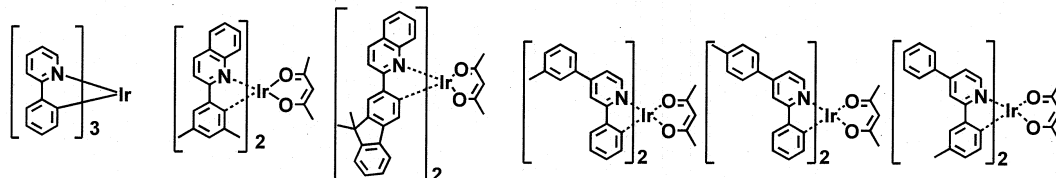
D-56

D-57

D-58

D-59

D-60



D-61

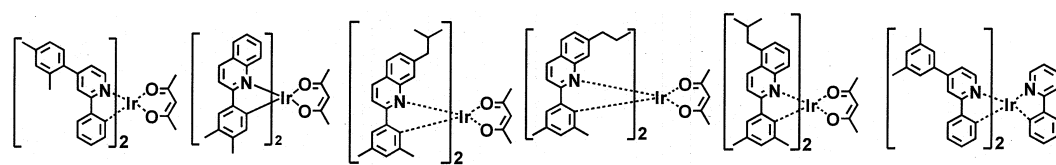
D-62

D-63

D-64

D-65

D-66



D-67

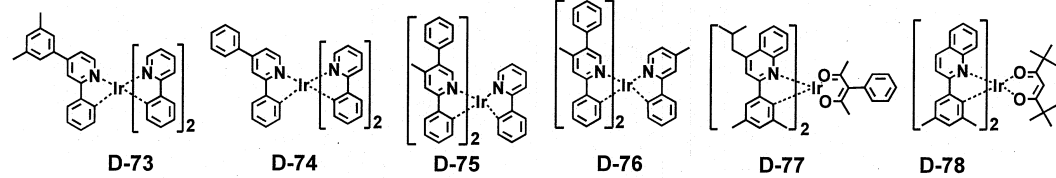
D-68

D-69

D-70

D-71

D-72



D-73

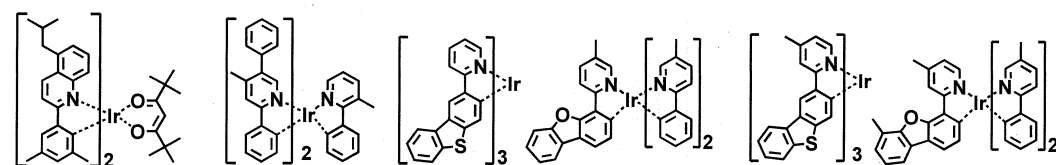
D-74

D-75

D-76

D-77

D-78



D-79

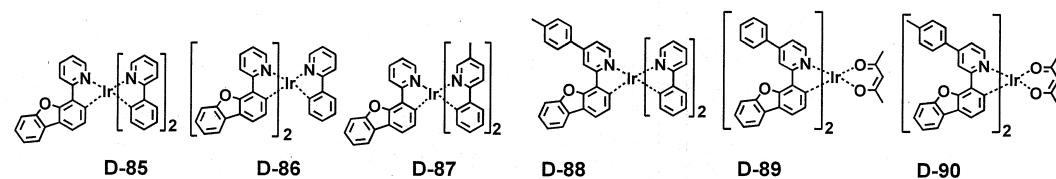
D-80

D-81

D-82

D-83

D-84



D-85

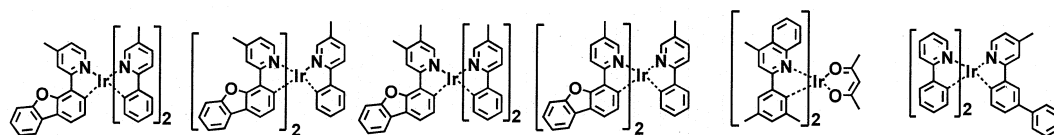
D-86

D-87

D-88

D-89

D-90



D-91

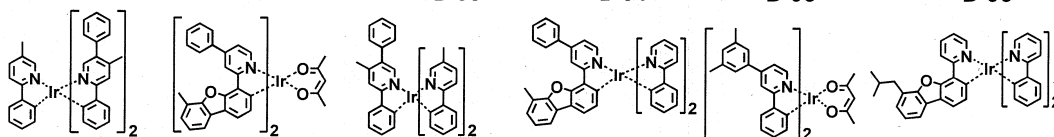
D-92

D-93

D-94

D-95

D-96



D-97

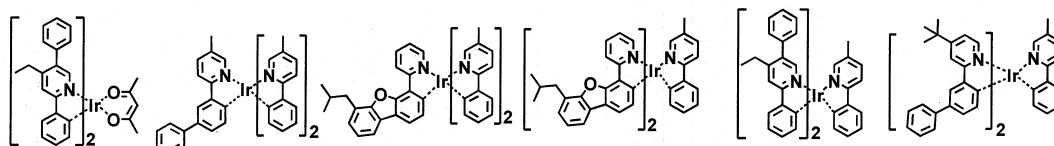
D-98

D-99

D-100

D-101

D-102



D-103

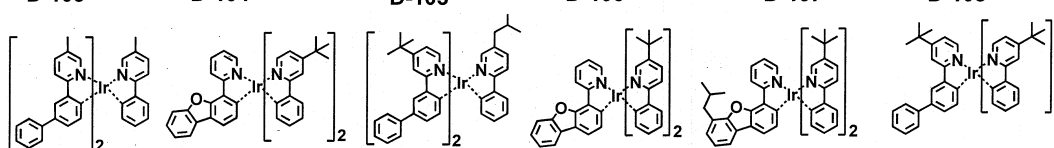
D-104

D-105

D-106

D-107

D-108



D-109

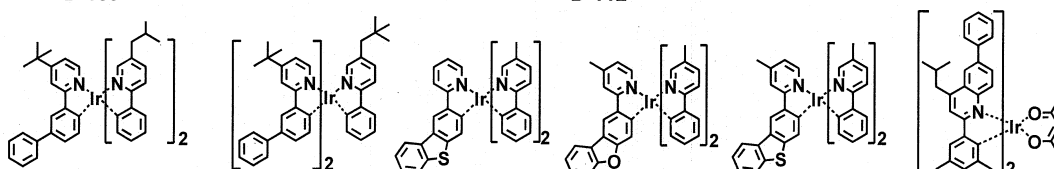
D-110

D-111

D-112

D-113

D-114



D-115

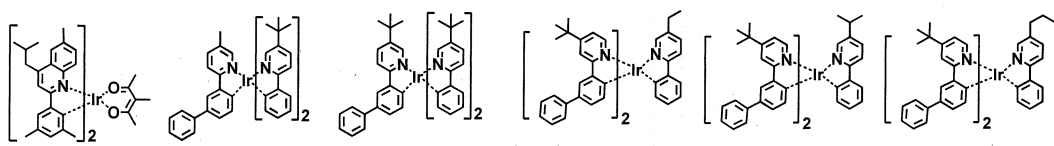
D-116

D-117

D-118

D-119

D-120



D-121

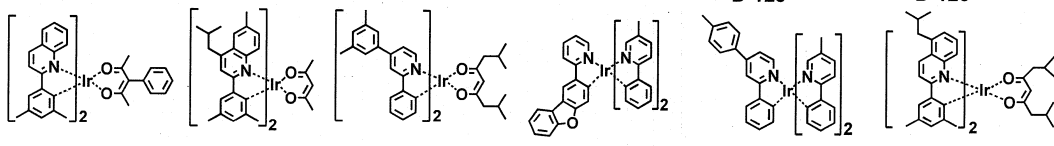
D-122

D-123

D-124

D-125

D-126



D-127

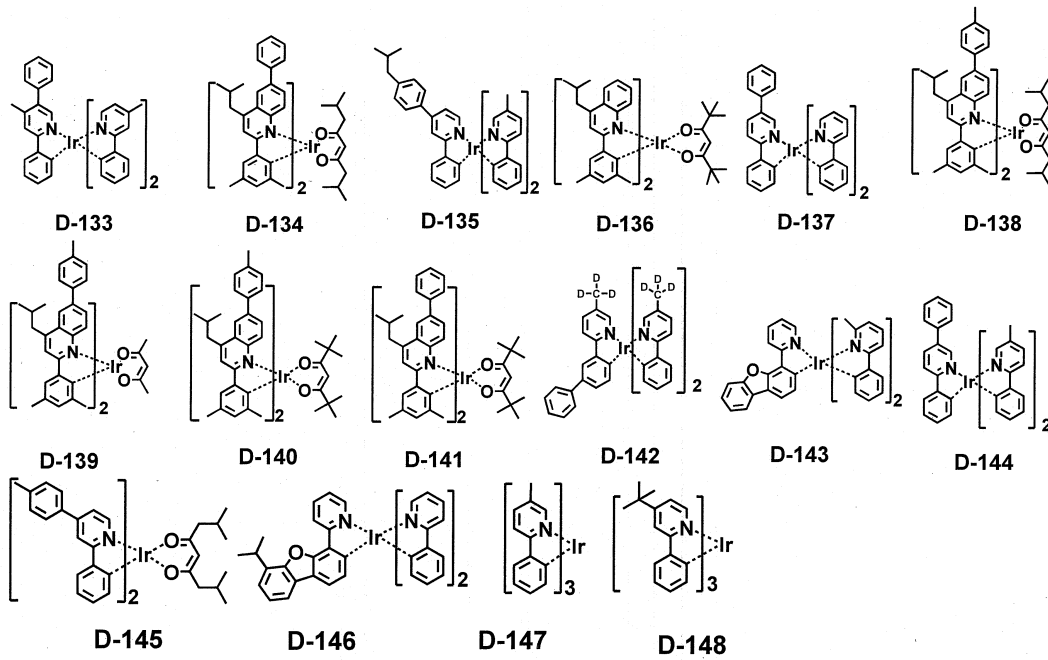
D-128

D-129

D-130

D-131

D-132



[0126]

[0127]

본 발명은 추가의 양태로 유기 전계 발광 소자 제조용 조성물을 제공한다. 상기 조성물은 호스트 재료 또는 정공전달층 재료로서 본 발명의 화합물을 포함할 수 있다.

[0128]

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 발광 소자용 조성물을 포함할 수 있다.

[0129]

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

[0130]

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타넘계열 금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 착체화합물을 더 포함할 수도 있고, 나아가 상기 유기물층은 발광층에 추가하여, 발광 보조층, 정공 보조층 및 전하생성층 중에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

[0131]

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.

[0132]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측 표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 일층(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 , 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.

[0133]

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 이렇게 제조된 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 역셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도판트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하생성층으로 사용하여 두 개 이

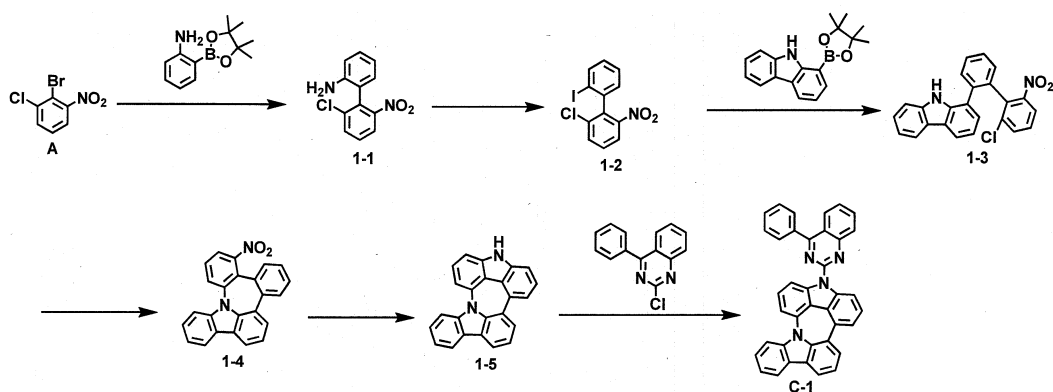
상의 발광층을 가진 백색 유기 전계 발광소자를 제조할 수 있다.

[0134] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막 법이나 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

[0135] 습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로푸란, 디옥산 등의 적절한 용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 각 층을 형성하는 재료가 용해 또는 분산될 수 있고, 성막성에 문제가 없는 것이라면 어느 것이어도 된다.

[0136] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광특성을 설명한다.

[실시예 1] 화합물 C-1의 제조



[0138]

1) 화합물 1-1의 합성

[0139] 반응용기에 화합물 A(36.0g, 152.3mmol), 2-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥사보란-2-일)아닐린(40g, 182.7mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(5.28g, 4.6mmol), 탄산세슘(124.0g, 380.6mmol), 톨루엔(760mL), 에탄올(190mL), 및 증류수(190mL)를 넣은 뒤, 120℃에서 5시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고, 에틸 아세테이트로 추출한 뒤, 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-1(19.3g, 수율: 50.4%)를 얻었다.

2) 화합물 1-2의 합성

[0142] 반응용기에 화합물 1-1(19.2g, 77.2mmol) 및 아세트나이트릴(768mL)을 넣은 뒤, 0℃에서 파라-톨루엔설폰산 모노수화물(44.06g, 231.6mmol)을 첨가한다. 10분 후 아질산나트륨(10.66g, 154.4mmol), 요오드화칼륨(32.0g, 193.0mmol)을 증류수(576mL)에 녹인 후, 이를 혼합물에 천천히 적가한다. 적가가 끝나면 반응온도를 상온으로 서서히 올려주고, 5시간 동안 추가로 교반하였다. 반응이 끝나면 반응 용액에 티오황산나트륨 수용액을 넣어 반응을 종료하고, 에틸 아세테이트로 추출한 뒤, 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-2(18.6g, 수율: 67.0%)를 얻었다.

3) 화합물 1-3의 합성

[0144] 반응용기에 화합물 1-2(18.6g, 51.7mmol), 1-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥사보란-2-일)-9H-카바졸(15.3g, 62.1mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(3.0g, 2.6mmol), 탄산세슘(13.7g, 129.3mmol), 톨루엔(260mL), 에탄올(65mL), 및 증류수(65mL)를 넣은 뒤, 120℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고, 에틸 아세테이트로 추출한 뒤, 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-3(11.4g, 수율: 55.3%)를 얻었다.

4) 화합물 1-4의 합성

[0146] 반응용기에 화합물 1-3(11.0g, 27.6mmol), 팔라듐(II) 아세테이트(3.1g, 13.8mmol), 트리-tert-부틸포스핀(11.16g, 27.6mmol), 탄산세슘(35.94g, 110.4mmol), 및 o-자일렌(184mL)를 넣고 3시간 동안 환류교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고, 에틸 아세테이트로 추출한 뒤, 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-4(5.4g, 수율: 54.0%)를 얻었다.

다.

[0147] 5) 화합물 1-5의 합성

[0148] 반응용기에 화합물 1-4(5.4g, 14.9mmol), 트리페닐포스핀(11.7g, 44.7mmol), 및 1,2-디클로로벤젠(75mL)를 넣고, 200℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 감압증류하여 용매를 제거 후, 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤, 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-5(4.5g, 수율: 91.3%)를 얻었다.

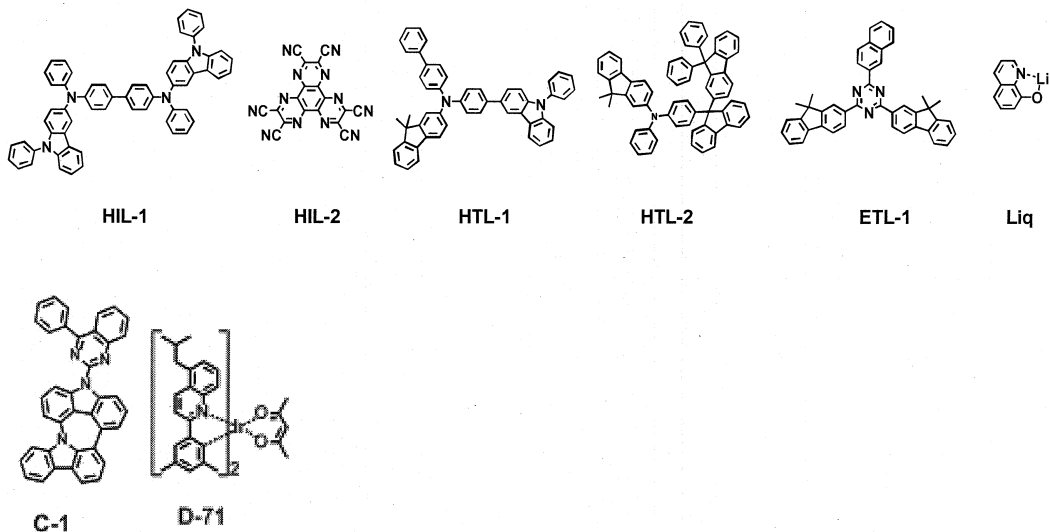
[0149] 6) 화합물 C-1의 합성

[0150] 반응용기에 화합물 1-5(3.5g, 10.6mmol), 2-클로로-4-페닐퀴나졸린(3.06g, 12.7mmol), 디메틸아미노피리딘(DMAP)(0.65g, 5.3mmol), 탄산칼륨(1.47g, 10.6mmol), 및 디메틸포름아마이드(53mL)를 넣고, 155℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 5℃ 내지 10℃로 식히고, 메탄올(50mL), 및 증류수(60mL)를 첨가하여 30분 동안 교반하고 여과하여 화합물 C-1(5.4g, 수율: 95.3%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P.
C-1	534.62	404nm	519nm	265℃

[0152] [소자 제조예 1] 호스트로서 본 발명에 따른 화합물을 증착한 OLED 소자 제조

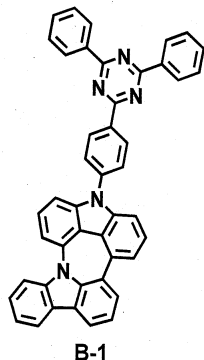
[0153] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조) 기판 상의 투명전극 ITO 박막(10Ω/□)을 아세톤, 이소프로판올을 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착장비 내의 셀에 화합물 HIL-1을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 80nm 두께의 제1 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HIL-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공주입층 위에 5nm 두께의 제2 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HTL-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공주입층 위에 10nm 두께의 제1 정공전달층을 증착하였다. 진공증착장비 내의 다른 셀에 화합물 HTL-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공전달층 위에 60nm 두께의 제2 정공전달층을 증착하였다. 정공주입층, 정공전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 호스트로서 화합물 C-1을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-71을 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 정공전달층 위에 40nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또다른 셀 두 군데에 화합물 ETL-1과 화합물 Liq를 1:1의 속도로 증발시켜 발광층 위에 30nm 두께의 전자전달층을 증착하였다. 이어서, 전자주입층으로 화합물 Liq를 2nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 80nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다.



[0155] 그 결과, 5000nit의 휘도에서 전류를 일정하게 가하였을 때, 처음 나오는 빛의 세기를 100%로 하는 경우, 빛의 세기가 98%로 떨어지는데 걸린 시간은 80시간 이상이었다.

[0156] [비교예 1] 호스트로서 종래의 화합물을 포함하는 OLED 소자 제조

[0157] 발광층의 호스트로서 하기의 화합물 B-1을 사용한 것 외에는 소자 제조에 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.



[0158]

[0159] 소자 제조에 1과 동일하게, 5000nit의 휘도에서 전류를 일정하게 가하였을 때, 처음 나오는 빛의 세기를 100%로 하는 경우, 빛의 세기가 98% 떨어지는데 걸린 시간은 40시간 이상이였다.

[0160] 상기 소자 제조에 및 비교예로부터, 본원의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 종래의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 비해 구동 수명이 훨씬 개선되는 우수한 특성을 가짐을 확인할 수 있다. 상기 비교예에서 사용된 B-1이나 앞서 설명한 한국 공개특허공보 제10-2015-077220호에서 제시하는 트리아진 유도체는 트리아진이 편평한 형태(planar)를 갖기 때문에 구동 전압면에서 우수하다. 하지만, 그러한 형태적 특성으로 인해 분자간 상호작용이 강하여 높은 Ts(Sublimation Temperature)를 갖기 때문에, 열 안정성이 부족하다. 또한, 트리아진은 컨쥬게이션(conjugation)이 상대적으로 짧은데, 이러한 컨쥬게이션은 전자(라디칼)를 안정시키는 작용을 하기 때문에, 짧은 컨쥬게이션은 물질 자체의 불안정성을 초래하는 경향이 있다.

[0161] 이에 반해, 본 발명은 트리아진에 대응하는 치환기의 위치에, 퀴나졸린 또는 퀴녹살린과 같이 나프탈렌을 기반으로 하는 치환기를 갖는데, 이러한 나프탈렌계 치환기는 트리아진에 비하여 편평하지 못한 구조이기 때문에 구동 전압은 상대적으로 다소 높아질 수 있는 경향이 있지만, 그와 반대로 낮은 Ts를 갖고 컨쥬게이션이 상대적으로 더 길기 때문에 열 안정성 및 전자 안정화 특성이 더 우수할 수 있다.

[0162] 소자 제조에 및 비교예에서 확인된 본원 발명에 따른 효과는 그러한 트리아진과 나프탈렌계 치환기 사이의 특성이 종합적으로 구동 수명에 영향을 줌으로써, 트리아진에 비하여 나프탈렌계 치환기가 더 우수한 구동 수명을 발휘될 수 있었던 것으로 예측할 수 있다.

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	KR1020170066241A	公开(公告)日	2017-06-14
申请号	KR1020160158003	申请日	2016-11-25
[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		
[标]发明人	MOON DOO HYEON 문두현		
发明人	문두현		
IPC分类号	C09K11/06 C07D403/04 C07D405/14 C07D487/14 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C07D487/16 C09K11/06 H01L51/0072 H01L51/5016 C09K2211/1018 H01L51/001 H01L51/0067 H01L51/5064 H01L51/5072 H01L51/5088 H01L51/56 H01L2251/558		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020150172324 2015-12-04 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及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提供具有显著改善的驱动寿命的有机电致发光器件。

