(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0122078
(43) 공개일자 2019년10월29일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/50 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2018-0045763
(22) 출원일자 2018년04월19일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
롬엔드하스전자재료코리아유한회사
충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)
(72) 발명자
임영묵
경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
이태진
경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
(74) 대리인
장훈

전체 청구항 수 : 총 10 항

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

(57) 요 약

본원은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써 전력효율 및/또는 수명 특성이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

(52) CPC특허분류
C09K 2211/1014 (2013.01)
C09K 2211/1022 (2013.01)
C09K 2211/1088 (2013.01)
C09K 2211/1092 (2013.01)

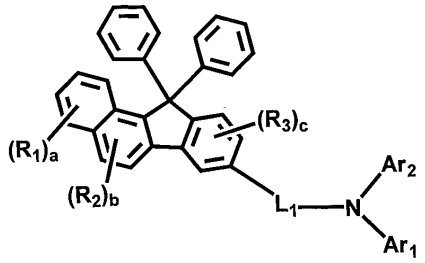
명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 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, Ar_1과 Ar_2는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 단, Ar_1 또는 Ar_2가 (3-30원)헤테로아릴인 경우 카바졸은 제외되고;

L_1은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이며;

R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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;

a는 1 내지 4의 정수이며, b는 1 또는 2이고, c는 1 내지 3의 정수이고, a, b 및 c가 2 이상인 경우 각각의 R_1, 각각의 R_2 및 각각의 R_3는 동일하거나 상이할 수 있다.

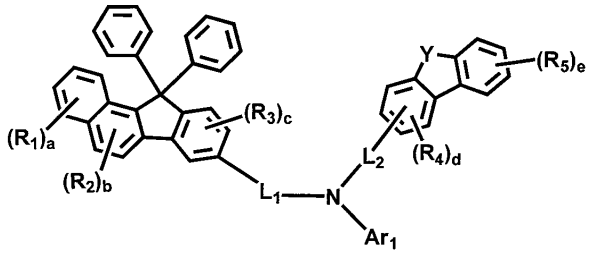
청구항 2

제1항에 있어서, 상기 Ar_1, Ar_2, L_1 및 R_1 내지 R_3에서 치환된 알킬, 치환된 아릴(렌), 치환된 헤테로아릴(렌), 치환된 시클로알킬, 치환된 알콕시, 치환된 트리알킬실릴, 치환된 디알킬아릴실릴, 치환된 알킬디아릴실릴, 치환된 트리아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- 알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- 아릴아미노, 및 치환된 알킬아릴아미노의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30 원)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, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 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.

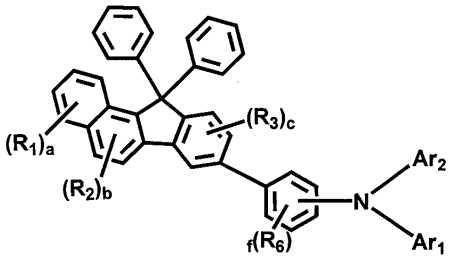
청구항 3

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 5 중 어느 하나로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물.

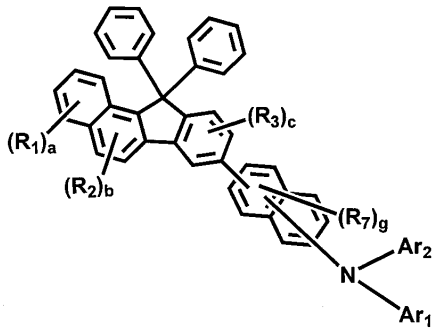
[화학식 2]



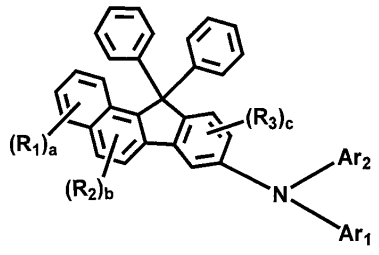
[화학식 3]



[화학식 4]



[화학식 5]



상기 화학식 2 내지 5에서,

Ar_1, Ar_2, L_1, R_1 내지 R_3 및 a 내지 c는 청구항 1에서의 정의와 동일하고,

L_2는 L_1의 정의와 동일하며;

Y는 O, S 또는 CR_8R_9이며;

R_4 내지 R_9는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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, R_8 및 R_9는 서로 연결되어 고리를 형성하여 스피로 구조를 형성할 수 있으며;

d는 1 내지 3의 정수이고, e 및 f는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이며, g는 1 내지 6의 정수이고, d 내지 g가 2 이상인 경우 각각의 R_4, 각각의 R_5, 각각의 R_6 및 각각의 R_7은 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 4

제1항에 있어서,

Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고;

L_1은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이며;

R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고;

a 내지 c는 각각 1인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬 및 (C6-C12)아릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고;

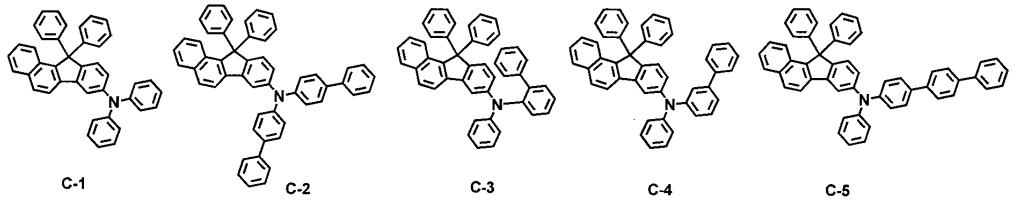
L_1은 단일결합, 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이며;

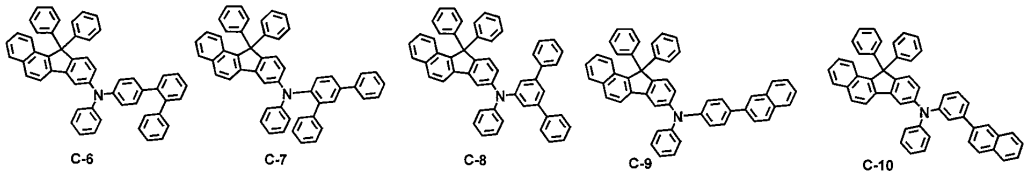
R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소이고;

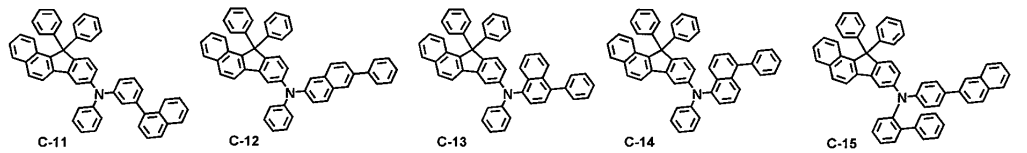
a 내지 c는 각각 1인, 유기 전계 발광 화합물.

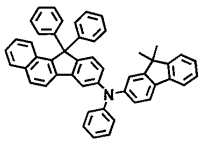
청구항 6

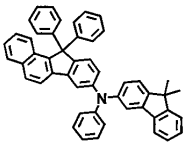
제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물로부터 선택되는, 유기 전계 발광 화합물.

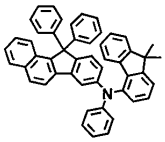


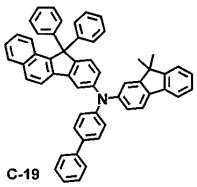


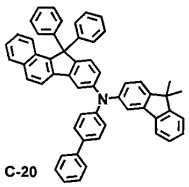


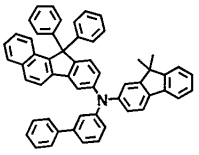

C-16

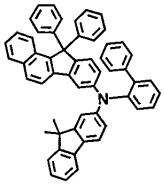

C-17

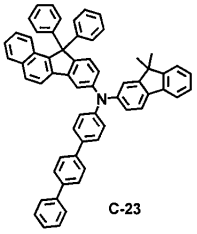

C-18

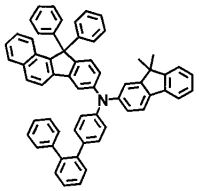

C-19

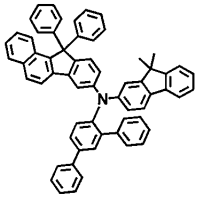

C-20

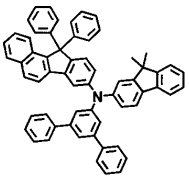

C-21

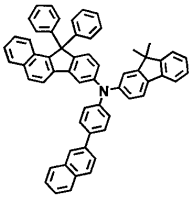

C-22

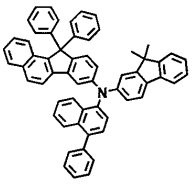

C-23

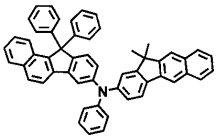

C-24

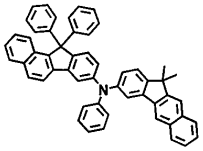

C-25

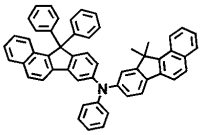

C-26

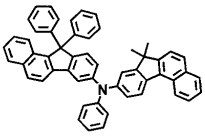

C-27

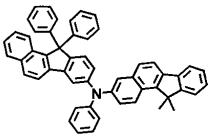

C-28

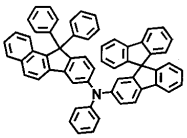

C-29

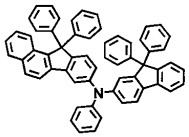

C-30

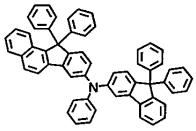

C-31

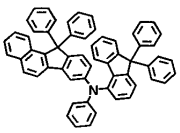

C-32

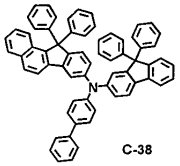

C-33

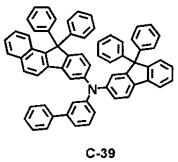

C-34

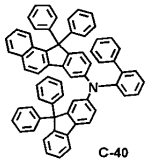

C-35

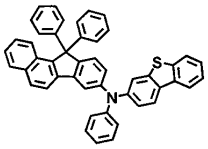

C-36

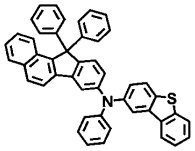

C-37

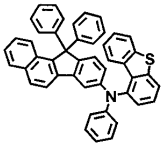

C-38

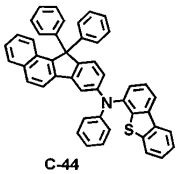

C-39

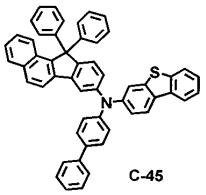

C-40

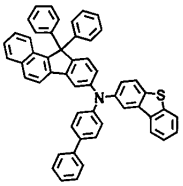

C-41

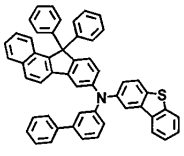

C-42

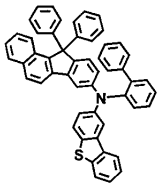

C-43

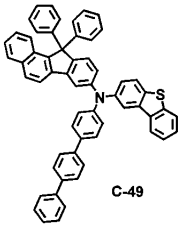

C-44

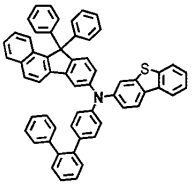

C-45

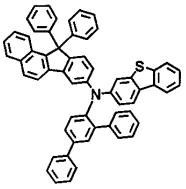

C-46

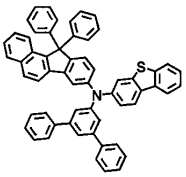

C-47

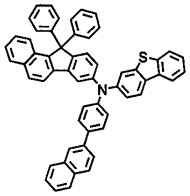

C-48

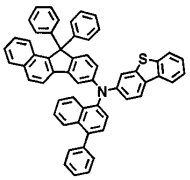

C-49

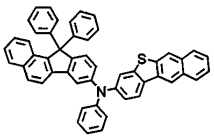

C-50

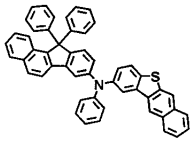

C-51

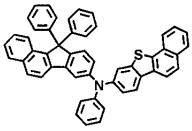

C-52

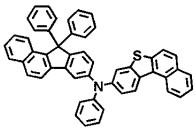

C-53

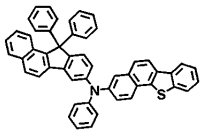

C-54

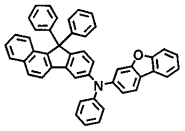

C-55

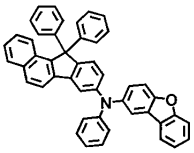

C-56

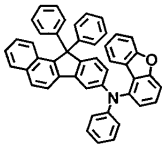

C-57

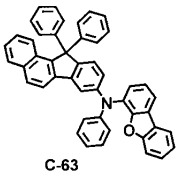

C-58

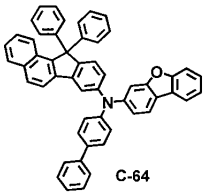

C-59

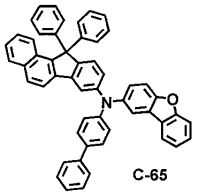

C-60

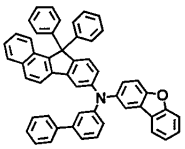

C-61

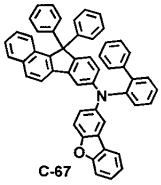

C-62

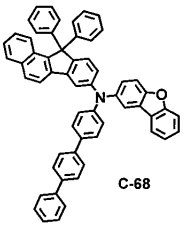

C-63

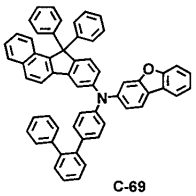

C-64

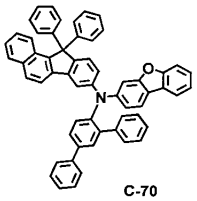

C-65

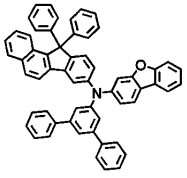

C-66

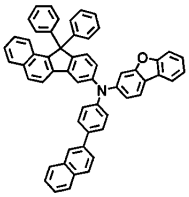

C-67

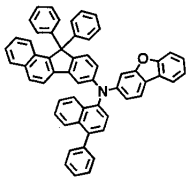

C-68

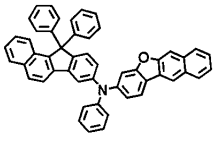

C-69

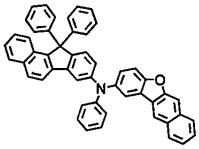

C-70

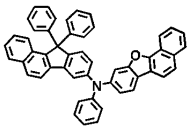

C-71

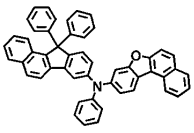

C-72

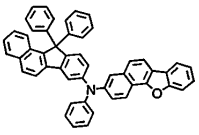

C-73

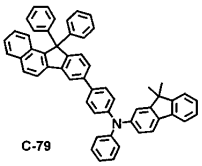

C-74

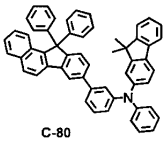

C-75

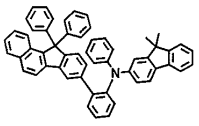

C-76

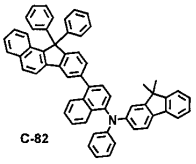

C-77

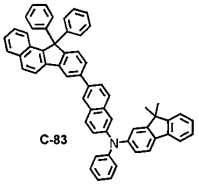

C-78

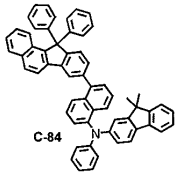

C-79

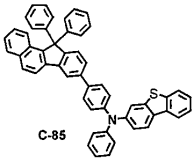

C-80

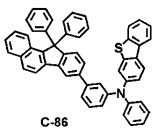

C-81

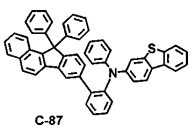

C-82

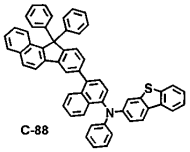

C-83

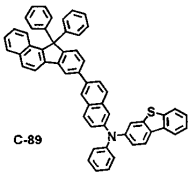

C-84

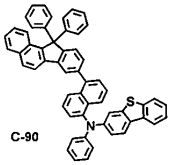

C-85

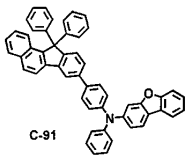

C-86

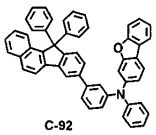

C-87

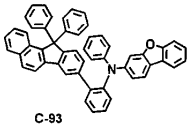

C-88

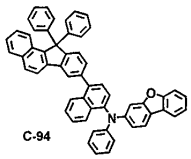

C-89

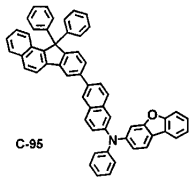

C-90

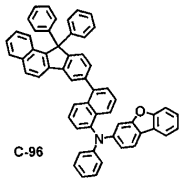












청구항 7

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 재료.

청구항 8

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

청구항 9

제8항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 화합물을 정공전달 대역에 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

청구항 10

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 디스플레이 장치.

발명의 설명

기 술 분 야

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

배 경 기 술

[0002] 표시 소자 중, 전계 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 소자는 이의 효율성 및 안정성을 높이기 위해 정공 주입층, 정공 전달층, 발광층, 전자 전달층 및 전자 주입층 등을 포함하는 다층 구조로 이루어진다. 이때, 정공 전달층 등에 포함되는 화합물의 선정이 발광층으로의 정공 전달 효율, 발광 효율 및 수명 시간과 같은 소자 특성을 향상시킬 수 있는 수단 중 하나로 인식되고 있다.

[0004] 이와 관련해, 유기 전계 발광 소자에서 정공 주입 및 전달 재료로서 구리 프탈로시아닌(CuPc), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB), N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민(TPD), 4,4',4"-트리스(3-메틸페닐페닐아미노)트리페닐아민(MTDATA) 등이 사용되어 왔으나, 이러한 물질을 사용한 경우 유기 전계 발광 소자는 양자 효율 및 수명이 저하되는 문제가 있었다. 그 이유는 유기 전계 발광 소자를 높은 전류에서 구동하게 되면, 양극(애노드)과 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.

[0005] 따라서, 유기 전계 발광 소자의 성능 향상을 위한 정공 전달층의 개발이 여전히 요구되고 있다.

[0006] 한국 공개특허공보 제10-2017-0088601호는 벤조플루오렌 구조에 디아릴아미노가 결합된 유기 전계 발광 화합물을 개시하나, 정공전달대역에 사용하기에 충분히 만족스럽지 못하다.

선행기술문헌

특허문헌

[0007] (특허문헌 0001) 한국 공개특허공보 제10-2017-0088601호 (2017. 8. 2 공개)

발명의 내용

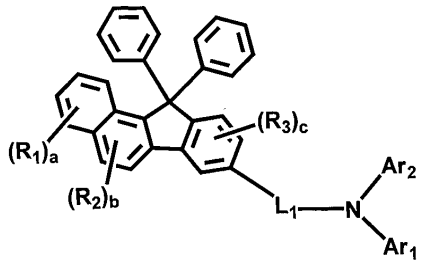
해결하려는 과제

[0008] 본원의 목적은, 첫째로 전력효율 및/또는 수명 특성이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조하는데 효과적인 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며, 둘째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0009] 상기의 기술적 과제를 해결하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0010] [화학식 1]



[0011]

[0012] 상기 화학식 1에서,

[0013] Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 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, Ar_1과 Ar_2는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 단, Ar_1 또는 Ar_2가 (3-30원)헤테로아릴인 경우 카바졸은 제외되고;

[0014] L_1은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이며;

[0015] R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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;

[0016] a는 1 내지 4의 정수이며, b는 1 또는 2이고, c는 1 내지 3의 정수이고, a, b 및 c가 2 이상인 경우 각각의 R_1, 각각의 R_2 및 각각의 R_3는 동일하거나 상이할 수 있다.

발명의 효과

[0017] 본 발명의 화합물은 전력효율 및/또는 수명 특성이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0018] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.

[0019] 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.

[0020] 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.

[0021] 본원에서 "유기 전계 발광 재료"는 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 재료를 의미하고, 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있으며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다. 예를 들면, 상기 유기 전계 발광 재료는 정공주입 재료, 정공전달 재료, 정공보조 재료, 발광보조 재료, 전자차단 재료, 발광 재료, 전자버퍼 재료, 정공차단 재료, 전자전달 재료, 또는 전자주입 재료일 수 있다.

[0022] 본원의 유기 전계 발광 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 상기 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자를 구성하는 1 이상의 층에 포함될 수 있고, 이에 한정되는 것은 아니지만 정공전달 대역 중 적어도 하나의 층에 포함될 수 있으며, 정공전달층, 정공보조층 또는 발광보조층에 포함되는 경우 정공전달 재료, 정공보조 재료 또는 발광보조 재료로 포함될 수 있다.

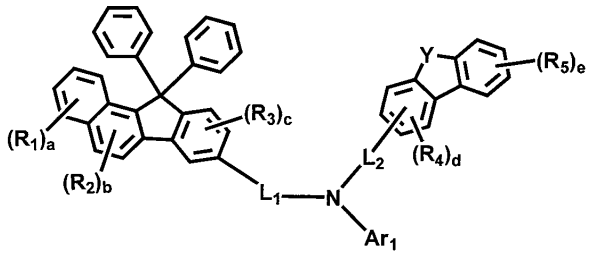
[0023] 본 발명에 기재되어 있는 "(C1-C30)알킬"은 쇄를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 10개인 것이 바람직하고, 1 내지 6개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알케닐"은 쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 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"은 쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알키닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개 인 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, 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, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 O, S 및 N에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라하이드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라하이드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴(렌)"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 여기에서 환 골격 탄소수가 6 내지 20개인 것이 바람직하고, 6 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 상기 아릴은 스피로 구조를 가진 것을 포함한다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 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. 여기에서 환 골격 원자수가 5 내지 20개인 것이 바람직하고, 5 내지 15개인 것이 더 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, 벤조나프토티오펜일, 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.

[0024] 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 1의 Ar_1, Ar_2, L_1 및 R_1 내지 R_3에서 치환된 알킬, 치환된 아릴(렌), 치환된 헤테로아릴(렌), 치환된 시클로알킬, 치환된 알콕시, 치환된 트리알킬실릴, 치환된 디알킬아릴실릴, 치환된 알킬디아릴실릴, 치환된 트리아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- 알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- 아릴아미노, 및 치환된 알킬아릴아미노의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30 원)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, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 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 것을 의미하고, 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬 및 (C6-C20)아릴 중 하나 이상인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메틸, 페닐 및 나프틸 중 하나 이상일 수 있다.

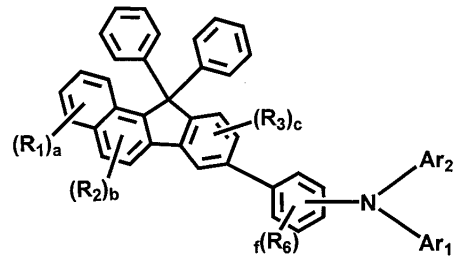
[0025] 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 5 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0026] [화학식 2]



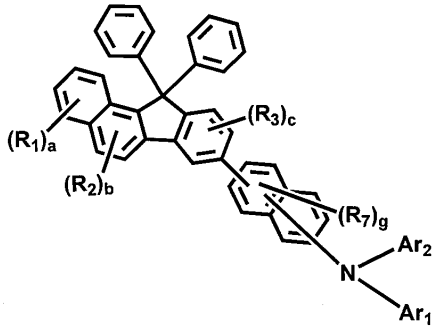
[0027]

[0028] [화학식 3]



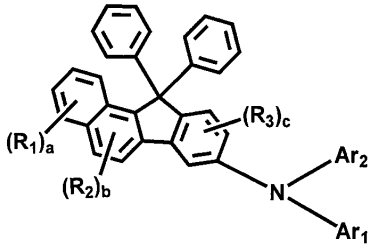
[0029]

[0030] [화학식 4]



[0031]

[0032] [화학식 5]



[0033]

[0034] 상기 화학식 2 내지 5에서,

[0035] Ar_1, Ar_2, L_1, R_1 내지 R_3 및 a 내지 c는 화학식 1에서의 정의와 동일하고,

[0036] L_2는 L_1의 정의와 동일하며;

[0037] Y는 O, S 또는 CR_8R_9이며;

[0038] R_4 내지 R_9는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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, R_8 및 R_9는 서로 연결되어 고리를 형성하여 스피로 구조를 형성할 수 있으며;

[0039] d는 1 내지 3의 정수이고, e 및 f는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이며, g는 1 내지 6의 정수이고, d 내지 g가 2 이상인 경우 각각의 R_4, 각각의 R_5, 각각의 R_6 및 각각의 R_7은 동일하거나 상이할 수 있다.

[0040] 상기 화학식 1에서, Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 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, Ar_1과 Ar_2는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 단, Ar_1 또는 Ar_2가 (3-30원)헤테로아릴인 경우 카바졸은 제외된다. 본 발명의 일양태에 있어서는, Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고, 본 발명의 다른 일양태에 있어서는, Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬 및 (C6-C12)아릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이다. 구체적으로, 각각 독립적으로 페닐, 비페닐, 나프틸페닐, 페닐나프틸, 터페닐, 디메틸플루오레닐, 디페닐플루오레닐, 스피로비플루오레닐, 디메틸벤조플루오레닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오페닐, 벤조나프토푸라닐, 벤조나프토티오페닐 등일 수 있다.

[0041] L_1은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고, 본 발명의 일양태에 있어서는, L_1은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이고, 본 발명의 다른 일양태에 있어서는, L_1은 단일결합, 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이다. 구체적으로, 단일결합, 페닐렌, 나프틸렌 등일 수 있다.

[0042] R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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, 본 발명의 일양태에 있어서는, R_1 내

지 R_3은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고, 본 발명의 다른 일양태에 있어서는, R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소이다.

[0043] a는 1 내지 4의 정수이며, b는 1 또는 2이고, c는 1 내지 3의 정수이고, a, b 및 c가 2 이상인 경우 각각의 R_1, 각각의 R_2 및 각각의 R_3는 동일하거나 상이할 수 있다. 본원의 일양태에 있어서는, a 내지 c는 각각 1이다.

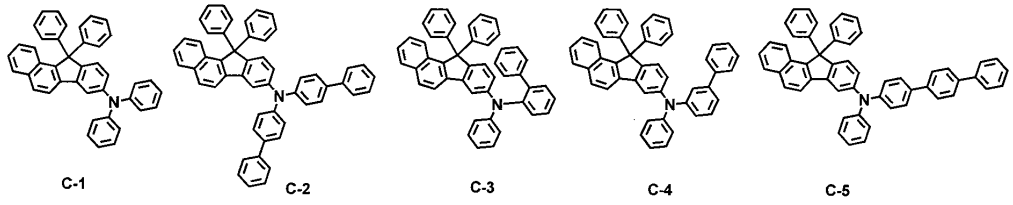
[0044] 본원 발명의 일양태에 따르면, 상기 화학식 1에서, Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고; L_1은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이며; R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고; a 내지 c는 각각 1이다.

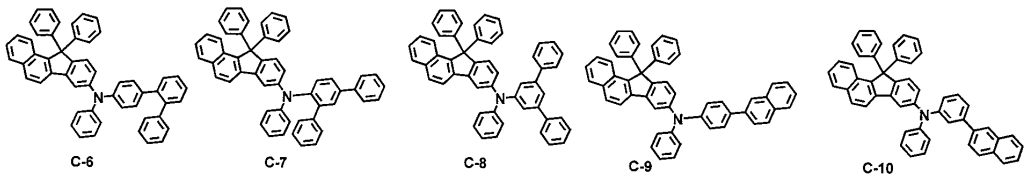
[0045] 본원 발명의 다른 일양태에 따르면, 상기 화학식 1에서, Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬 및 (C6-C12)아릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고; L_1은 단일결합, 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이며; R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소이고; a 내지 c는 각각 1이다.

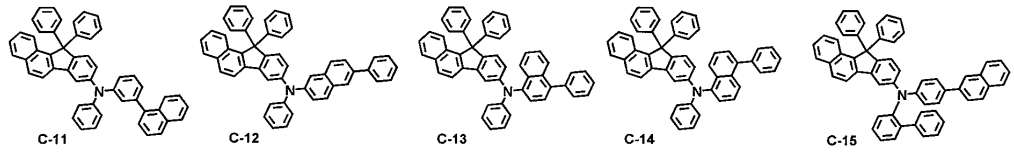
[0046] 본원 화학식에서, 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 고리를 형성하는 경우, 상기 고리는 치환 또는 비치환된 (3-30원) 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리일 수 있다. 또한, 상기 고리는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다.

[0047] 본원 화학식에서, 헤테로아릴(렌)은 각각 독립적으로, B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다. 또한, 상기 헤테로원자는 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)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, 및 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-30)아릴아미노로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기가 결합될 수 있다.

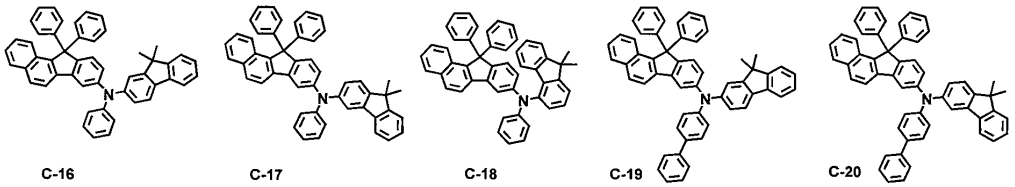
[0048] 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[0049] 

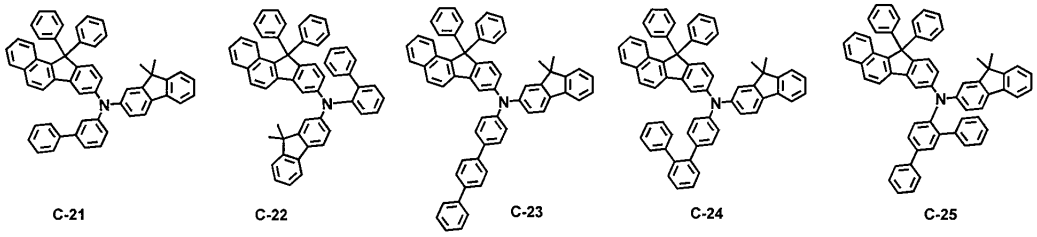
[0050] 

[0051] 

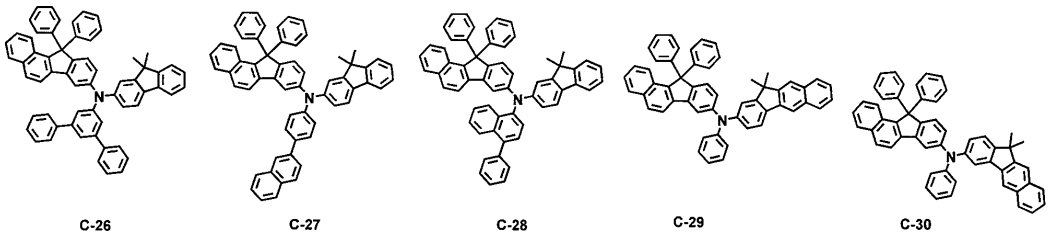
[0052]



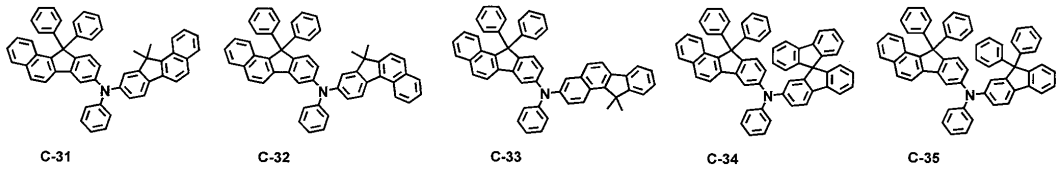
[0053]



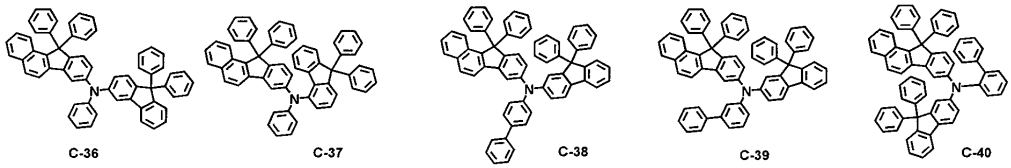
[0054]



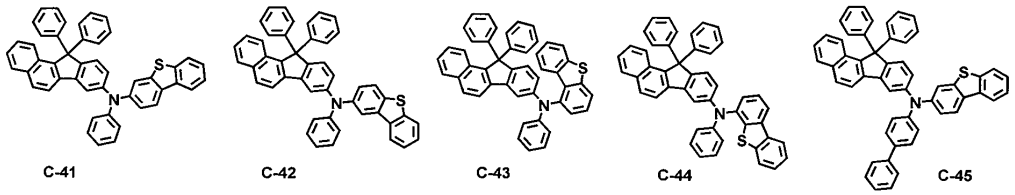
[0055]



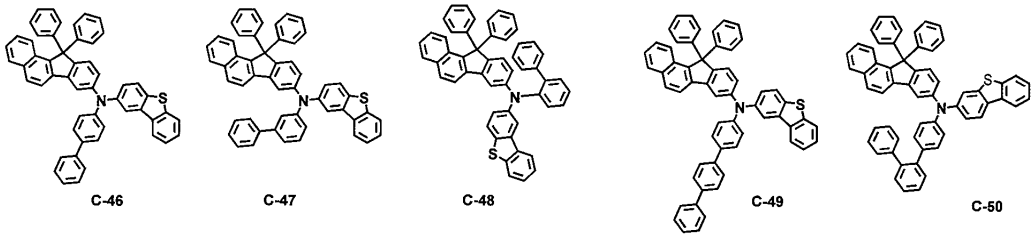
[0056]



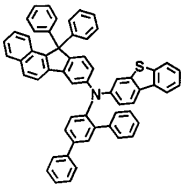
[0057]

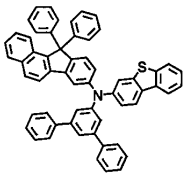


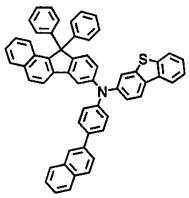
[0058]

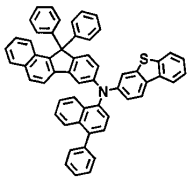


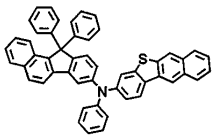
[0059]


C-51

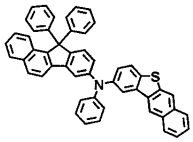

C-52

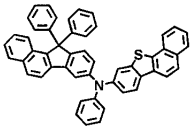

C-53

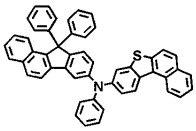

C-54

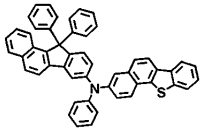

C-55

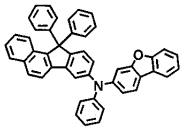
[0060]


C-56

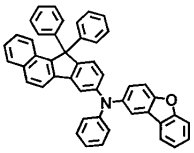

C-57

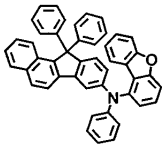

C-58

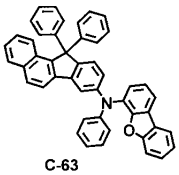

C-59

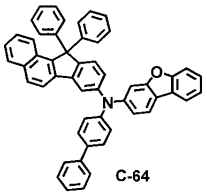

C-60

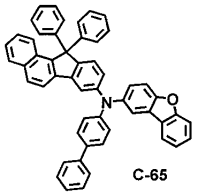
[0061]


C-61

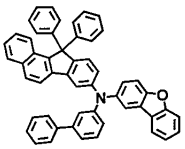

C-62

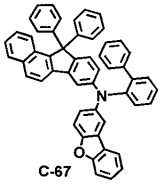

C-63

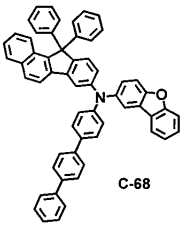

C-64

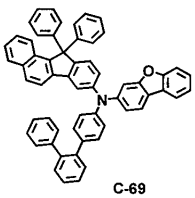

C-65

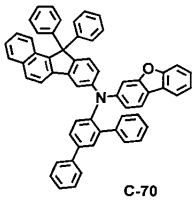
[0062]


C-66

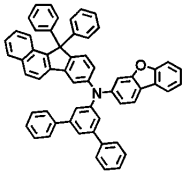

C-67

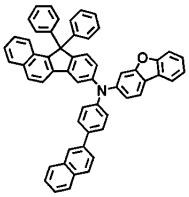

C-68

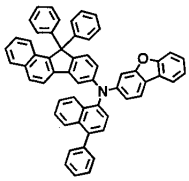

C-69

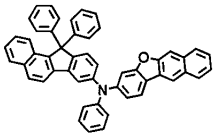

C-70

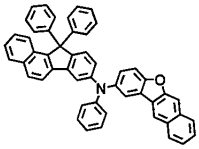
[0063]


C-71

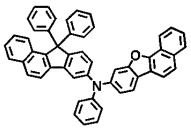

C-72

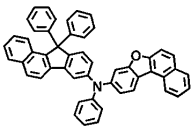

C-73

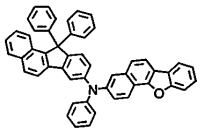

C-74

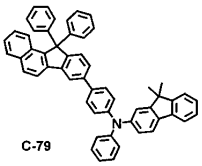

C-75

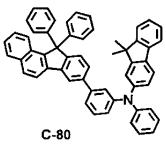
[0064]


C-76

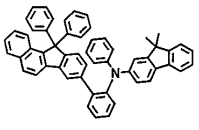

C-77

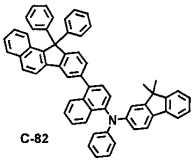

C-78

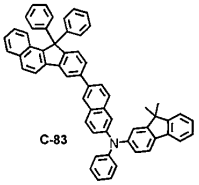

C-79

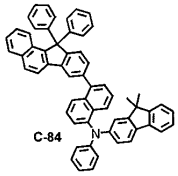

C-80

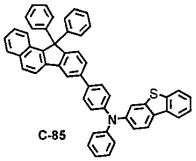
[0065]


C-81

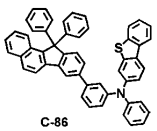

C-82

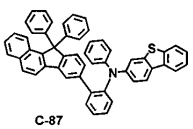

C-83

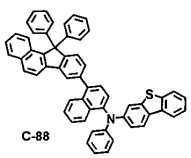

C-84

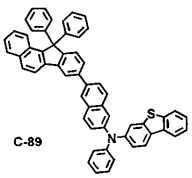

C-85

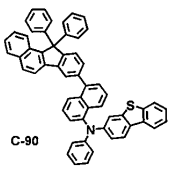
[0066]

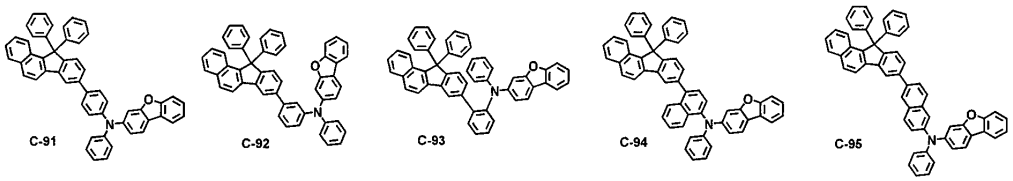

C-86

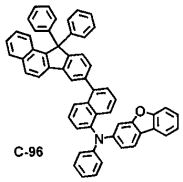

C-87


C-88


C-89

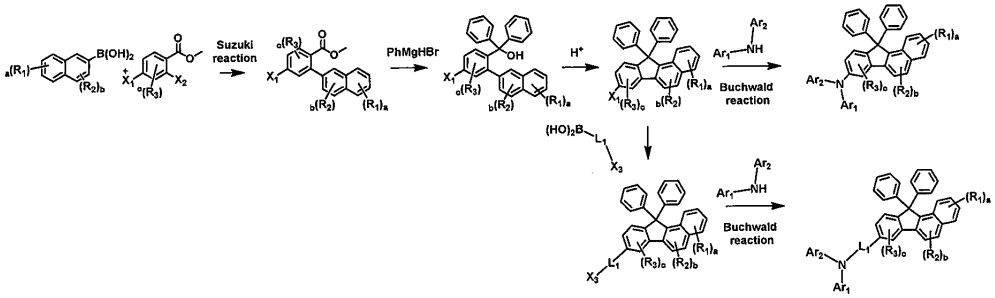

C-90

[0067] 

[0068] 

[0069] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식에 나타난 바와 같이 제조할 수 있다.

[0070] [반응식 1]

[0071] 

[0072] 상기 반응식에서 Ar_1, Ar_2, L_1, R_1 내지 R_3, 및 a 내지 c는 화학식 1에서의 정의와 동일하고, X_1 내지 X_3는 할로겐이다.

[0073] 본 발명의 정공전달 대역은 정공전달층, 정공주입층, 전자차단층 및 정공보조층으로 이루어진 군으로부터 하나 이상의 층으로 구성될 수 있고, 상기 각 층들은 하나 이상의 층으로 이루어질 수 있다.

[0074] 본 발명의 일양태에 의하면, 상기 정공전달 대역은 정공전달층을 포함한다. 또한, 상기 정공전달 대역은 정공전달층을 포함하고, 정공주입층, 전자차단층 및 정공보조층 중 하나 이상의 층을 추가로 더 포함할 수 있다.

[0075] 또한, 본 발명은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0076] 상기 재료는 정공전달재료, 정공보조재료 또는 발광보조재료, 구체적으로 적색 발광 유기 전계 발광 소자의 정공전달재료, 정공보조재료 또는 발광보조재료일 수 있고, 정공전달층이 2개 층 이상일 경우 발광층에 인접한 정공전달층에 포함되는 정공전달재료(정공보조재료)일 수 있다.

[0077] 상기 재료는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0078] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖고, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다.

[0079] 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공주입층, 정공전달층, 정공보조층, 발광보조층, 전자전달층, 전자버퍼층, 전자주입층, 계면층(interlayer), 정공차단층 및 전자차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

[0080] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층, 정공주입층, 정공전달층, 정공보조층, 발광보조층, 전자전달층, 전자버퍼층, 전자주입층, 계면층(interlayer), 정공차단층 및 전자차단층 중 어느 하나 이상의 층에 포함될 수 있다. 경우에 따라 바람직하게는, 정공전달층, 정공보조층 또는 발광보조층 중 하나 이상에 포함될 수 있다.

정공전달층이 2개 층 이상인 경우 그 중 적어도 하나의 층에 사용될 수 있다. 정공전달층에 사용될 경우, 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 정공전달 재료로서 포함될 수 있다.

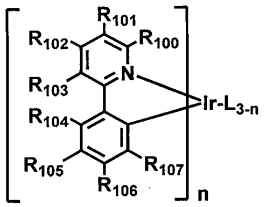
[0081] 상기 발광층은 하나 이상의 호스트 및 하나 이상의 도판트를 포함할 수 있다. 필요한 경우, 상기 발광층은 코호스트(co-host) 재료, 즉, 두 개 이상의 복수의 호스트 재료를 포함할 수 있다.

[0082] 본 발명에 사용되는 호스트는 인광성 호스트 화합물 또는 형광성 호스트 화합물일 수 있고, 이들 호스트 화합물은 특별히 제한되지 않는다.

[0083] 본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로는 하나 이상의 인광 또는 형광 도판트를 사용할 수 있고, 인광 도판트가 바람직할 수 있다. 본원의 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 화합물일 수 있고, 경우에 따라 바람직하게는, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물일 수 있으며, 경우에 따라 더 바람직하게는, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물일 수 있다.

[0084] 본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 101로 표시되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

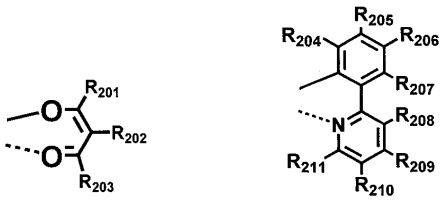
[0085] [화학식 101]

[0086] 

[0087] 상기 화학식 101에서,

[0088] L은 하기 구조 1 및 2에서 선택되고;

[0089] [구조 1] [구조 2]

[0090] 

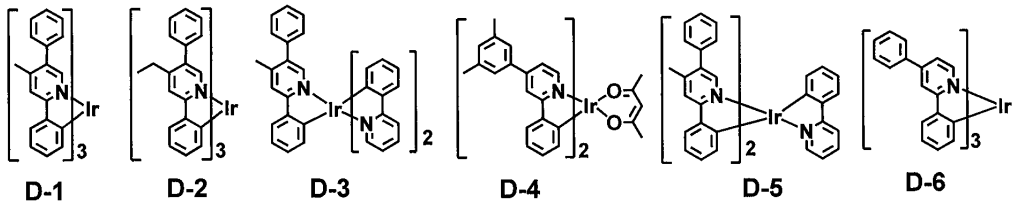
[0091] R_{100} 내지 R_{103}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된 (3-30원) 헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이거나; R_{100} 내지 R_{103}은 인접 치환기가 서로 연결되어 피리딘과 함께 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 퀴놀린, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조푸로피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조푸로퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조티에노퀴놀린, 또는 치환 또는 비치환된 인데노퀴놀린 형성이 가능하며;

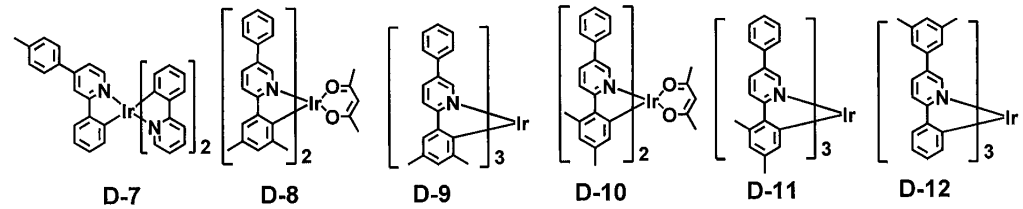
[0092] R_{104} 내지 R_{107}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이거나; R_{104} 내지 R_{107}은 인접 치환기가 서로 연결되어 벤젠과 함께 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조푸로피리딘, 또는 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘 형성이 가능하며;

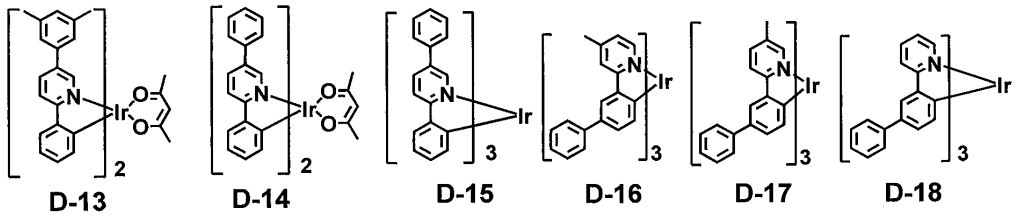
[0093] R_{201} 내지 R_{211}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이거나; R_{201} 내지 R_{211}은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있으며;

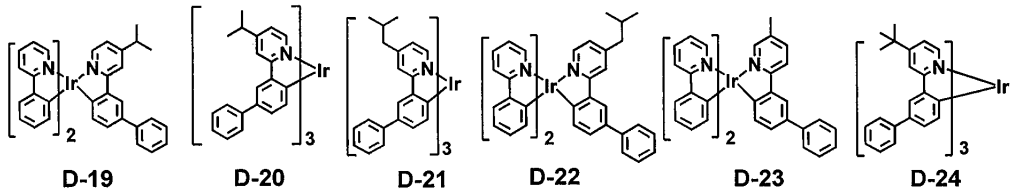
[0094] n은 1 내지 3의 정수이다.

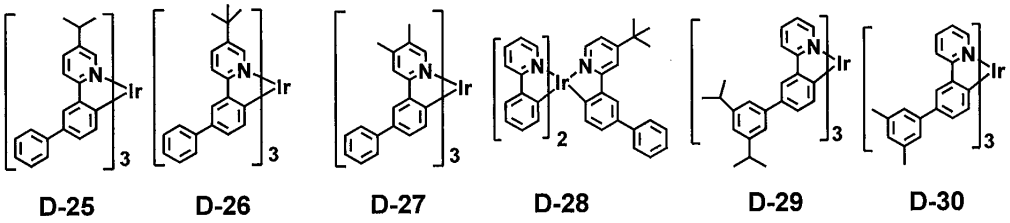
[0095] 구체적으로, 상기 도판트 화합물의 구체적인 예는 다음과 같으나, 이에 한정되지는 않는다.

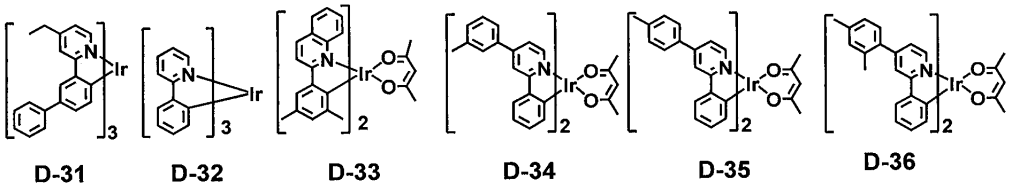
[0096] 

[0097] 

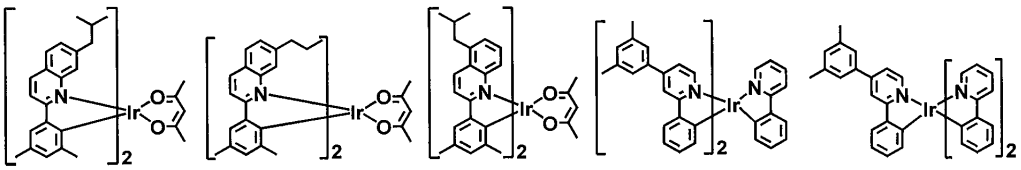
[0098] 

[0099] 

[0100] 

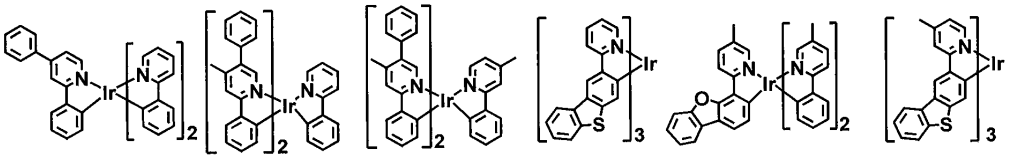
[0101] 

[0102]



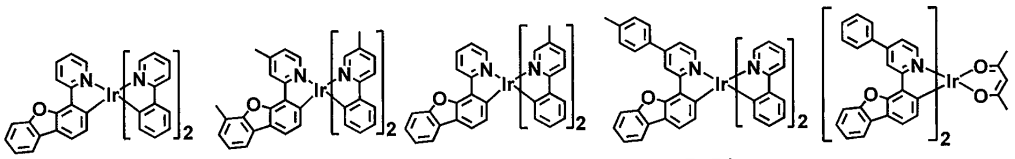
D-37 D-38 D-39 D-40 D-41

[0103]



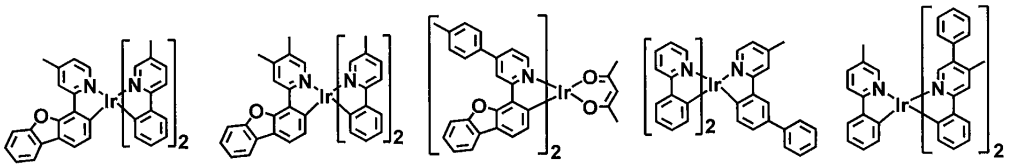
D-42 D-43 D-44 D-45 D-46 D-47

[0104]



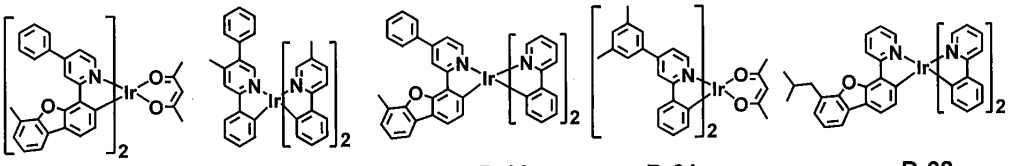
D-48 D-49 D-50 D-51 D-52

[0105]



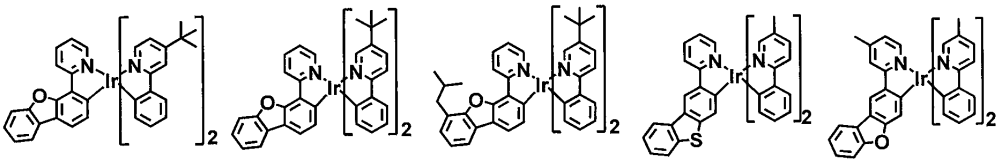
D-53 D-54 D-55 D-56 D-57

[0106]



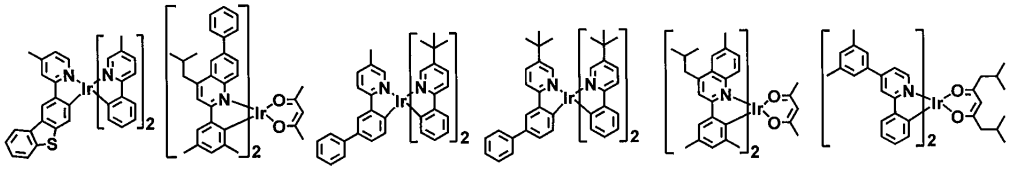
D-58 D-59 D-60 D-61 D-62

[0107]



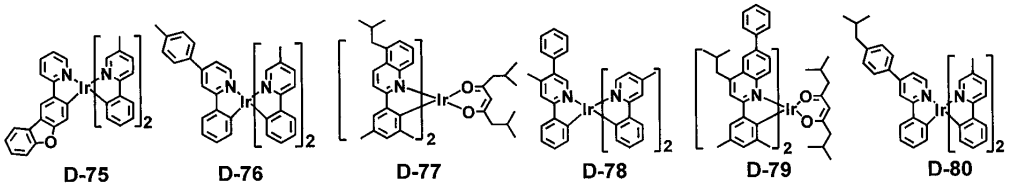
D-63 D-64 D-65 D-66 D-67

[0108]

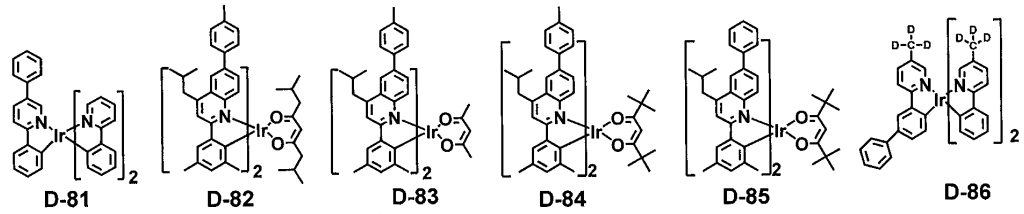


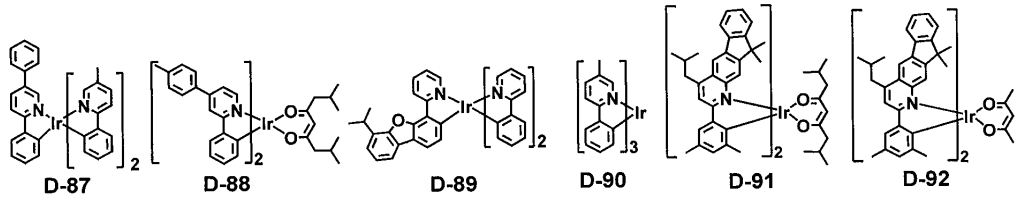
D-68 D-69 D-70 D-71 D-72 D-73

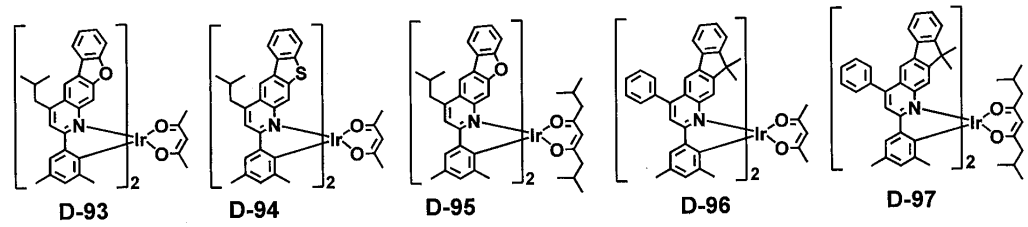
[0109]

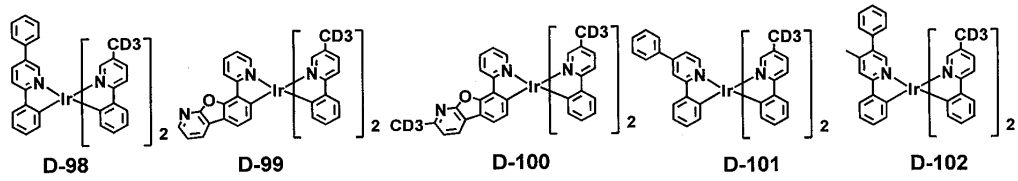


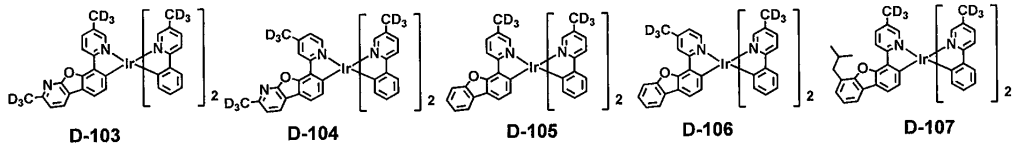
D-75 D-76 D-77 D-78 D-79 D-80

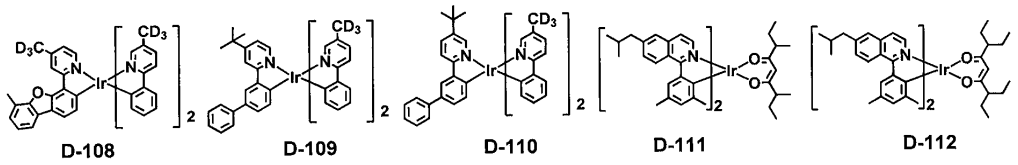
[0110] 

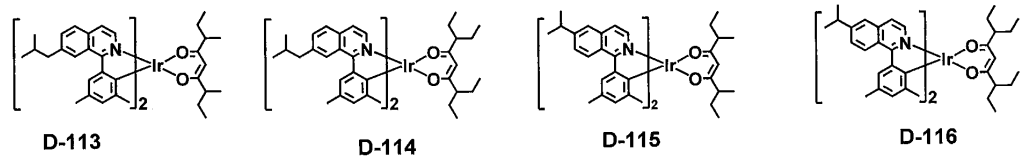
[0111] 

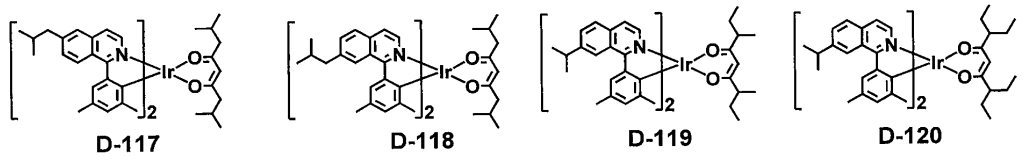
[0112] 

[0113] 

[0114] 

[0115] 

[0116] 

[0117] 

[0118] 본 발명은 추가의 양태로 유기 전계 발광 소자 제조용 조성물을 제공한다. 상기 조성물은 바람직하게는 유기 전계 발광 소자의 정공전달층, 정공보조층 또는 발광보조층 제조용 조성물이고 본 발명의 화합물을 포함한다. 정공전달층이 2개 층 이상인 경우 발광층에 인접한 정공전달층(정공보조층) 제조용 조성물에 본 발명의 화합물이 포함될 수 있다.

[0119] 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 정공전달층, 정공보조층 또는 발광보조층을 포함하며, 상기 정공전달층, 정공보조층 또는 발광보조층은 본 발명의 유기 전계 발광 소자용 조성물을 포함할 수 있다.

[0120] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하고, 이와 동시에 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 추가로 포함할 수 있다.

[0121] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란탄계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체화합물을 더 포함할 수도 있다.

[0122] 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.

[0123] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 하나 이상의 층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 애노드 표면에 규소 및 알루미늄의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 음극(캐소드) 표면에 할로겐화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 유기 전계 발광 소자의 구동 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.

[0124] 애노드와 발광층 사이에 정공주입층, 정공전달층 또는 전자차단층 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 정공주입층은 애노드에서 정공전달층 또는 전자차단층으로의 정공주입 장벽(또는 정공주입 전압)을 낮출 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공전달층 또는 전자차단층도 복수의 층이 사용될 수 있다.

[0125] 발광층과 캐소드 사이에 전자버퍼층, 정공차단층, 전자전달층 또는 전자주입층 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 전자버퍼층은 전자주입을 조절하고 발광층과 전자주입층 사이의 계면 특성을 향상시킬 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공차단층 또는 전자전달층도 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다.

[0126] 여기서, 상기 정공보조층 또는 상기 발광보조층은 상기 정공전달층과 상기 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도를 조절하는 용도로 사용될 수 있다. 상기 정공보조층 또는 상기 발광보조층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및 수명의 개선 효과를 제공할 수 있다.

[0127] 또한, 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 정공전달층을 2층 이상 포함할 경우, 추가로 포함되는 층을 상기 정공보조층 또는 상기 전자차단층의 용도로 사용할 수 있다. 상기 정공보조층과 전자차단층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및/또는 수명의 개선효과를 갖는다.

[0128] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽 표면에 전자전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역, 또는 정공전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자전달 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 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도판트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이

들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진, 백색 발광을 하는 유기 전계 발광소자를 제조할 수 있다.

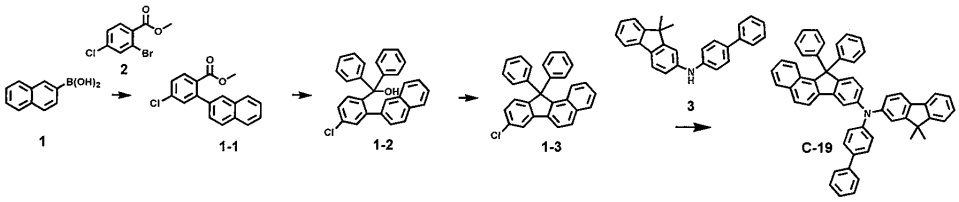
[0129] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막법이나, 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

[0130] 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.

[0131] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 디스플레이 장치, 예를 들면, 스마트폰, 태블릿, 노트북, PC, TV 또는 차량용의 디스플레이 장치, 또는 조명 장치, 예를 들면, 옥외 또는 옥내용 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

[0132] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물의 제조방법 및 이의 물성, 그리고 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자의 발광특성을 설명한다.

[0133] **[실시예 1] 화합물 C-19의 제조**



[0134]

[0135] 화합물 1-1의 제조

[0136] 플라스크에 화합물 1 (33 g, 0.192 mol), 화합물 2 (50.26 g, 0.201 mol), $Pd(PPh_3)_4$ (6.65 g, 0.006 mol), K_2CO_3 (58.3 g, 0.422 mol), 톨루엔 800 mL, EtOH 220 mL 및 H_2O 220 mL를 넣은 후, 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 완료되면, 냉각 후 에틸아세테이트(EA)와 H_2O로 추출하고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-1 (41 g, 수율:72%)을 얻었다.

[0137] 화합물 1-2의 제조

[0138] 플라스크에 화합물 1-1 (41 g, 0.138 mol)을 테트라히드로푸란(THF) 500 mL에 녹인 후 0℃로 냉각하였다. 여기에, PhMgBr 138 mL (3 M, 0.414 mol)을 천천히 적가한 후 0℃에서 2시간, 상온에서 1시간 동안 교반하였다. 반응이 완료되면, EA와 H_2O로 추출하고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-2 (28 g, 수율: 48%)을 얻었다.

[0139] 화합물 1-3의 제조

[0140] 플라스크에 화합물 1-2 (28 g, 0.067 mol)을 아세트산(AcOH) 300 mL에 용해하고, 여기에 H_3PO_4 (65 g, 0.665 mol)을 투입하고, 100℃에서 3시간 동안 가열하였다. 반응이 완료되면, 0℃로 냉각하여 교반한 후 결정을 여과하였고, 정제수로 pH 중성이 될 때까지 결정을 세척하였다. 결정을 건조하여 흰색 고체 화합물 1-3 (21 g, 수율: 78%)을 얻었다.

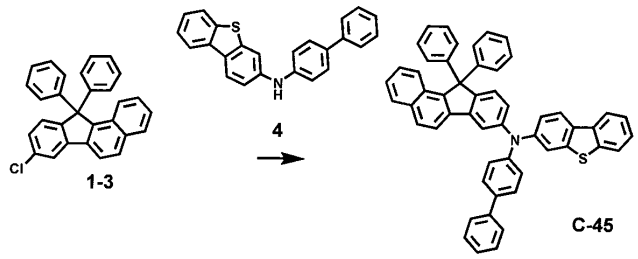
[0141] 화합물 C-19의 제조

[0142] 플라스크에 화합물 1-3 (5.6 g, 0.014 mol), 화합물 3 (5.024 g, 0.014 mol), $Pd(OAc)_2$ (0.156 g, 0.0007 mol), 50% $P(t\text{-}Bu)_3$ (0.7 mL, 0.0014 mol), NaO-t-Bu (3 g, 0.031 mol) 및 o-자일렌 100 mL를 넣고, 1시간 동안 환류교반하였다. 반응이 완료되면, EA와 H_2O로 추출하고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-19 (4 g, 수율: 40%)을 얻었다.

화합물	MW	M.P.
C-19	727.95	282℃

[0143]

[0144] **[실시예 2] 화합물 C-45의 제조**



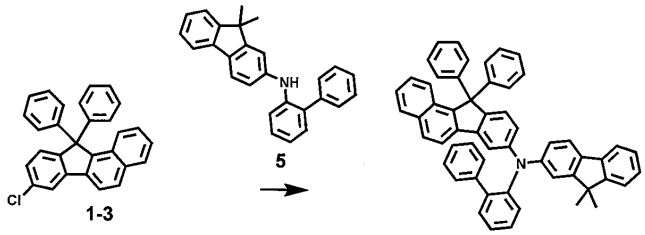
[0145]

[0146] 플라스크에 화합물 1-3 (5.8 g, 0.014 mol), 화합물 4 (5.06 g, 0.014 mol), $Pd(OAc)_2$ (0.162 g, 0.0007 mol), 50% $P(t\text{-}Bu)_3$ (0.7 mL, 0.0014 mol), NaO-t-Bu (3.04 g, 0.031 mol), o-자일렌 100 mL를 넣고, 1시간 동안 환류교반하였다. 반응이 완료되면, EA와 H_2O로 추출하고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-45 (2 g, 수율: 20%)을 얻었다.

화합물	MW	M.P.
C-45	717.93	298℃

[0147]

[0148] **[실시예 3] 화합물 C-22의 제조**



[0149]

[0150] 플라스크에 화합물 1-3 (5.6 g, 0.014 mol), 화합물 5 (5.0 g, 0.014 mol), $Pd(OAc)_2$ (0.155 g, 0.0007 mol), 50% $P(t\text{-}Bu)_3$ (0.7 mL, 0.0014 mol), NaO-t-Bu (3.0 g, 0.031 mol), o-자일렌 100 mL를 넣고, 1시간 동안 환류교반하였다. 반응이 완료되면, EA와 H_2O로 추출하고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-22 (4 g, 수율: 40%)을 얻었다.

화합물	MW	M.P.
C-22	727.95	275℃

[0151]

[0152] **[소자 제조예 1 내지 3] 본원에 따른 OLED 소자의 제조**

[0153] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막(10Ω/□)을 아세톤, 이소프로판알콜을 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판알콜에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 HI-1을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 90 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HI-2을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HT-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10 nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 하기 표 1에 표시된 제2 정공 전달층(보조층)의 화합물을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 60 nm 두께의 제2 정공 전달층(또는 보조층)을 증착하였다. 정공 주입층, 정공 전달층(또는

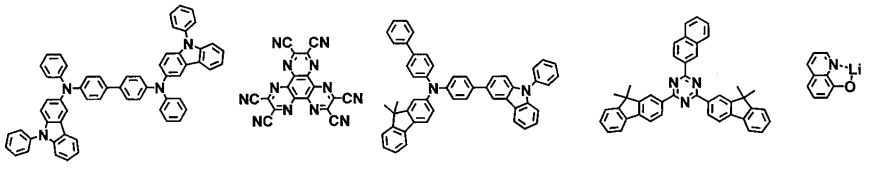
보조층)을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 발광층 호스트로서 화합물 H-1을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-39를 각각 넣은 후, 두 물질을 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 2 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ET-1 과 화합물 EI-1을 1:1의 속도로 증발시켜 발광층 위에 35 nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서, 전자 주입층으로 화합물 EI-1를 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 캐소드를 1500 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다.

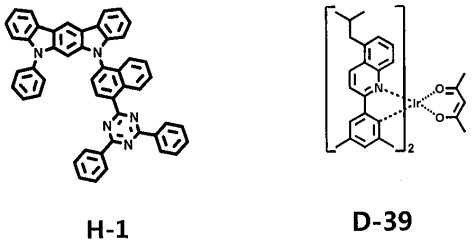
[0154] **[비교예] 본원에 따르지 않는 OLED 소자의 제조**

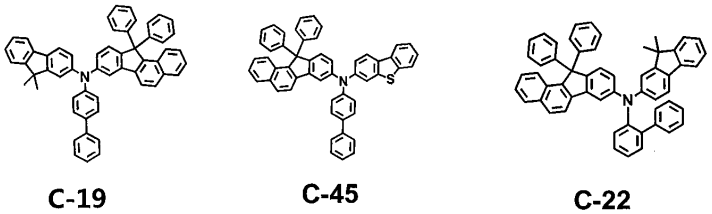
[0155] 제2 정공 전달층에 하기 표 1에 표시된 화합물을 사용한 것 외에는, 소자 제조예 1 내지 3과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

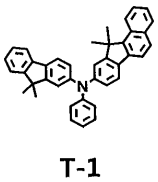
[0156] 소자 제조예 1 내지 3 및 비교예의 유기 전계 발광 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 구동전압, 전력효율, CIE 색좌표와 5,000 nits휘도 기준의 정전류에서 16.7시간이 지났을 때 처음 휘도 100%에서 감소한 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[0157] 소자 제조예 1 내지 3 및 비교예에서 사용된 물질들은 하기와 같다.

[0158] 

[0159] 

[0160] 

[0161] 

[0162] [표 1]

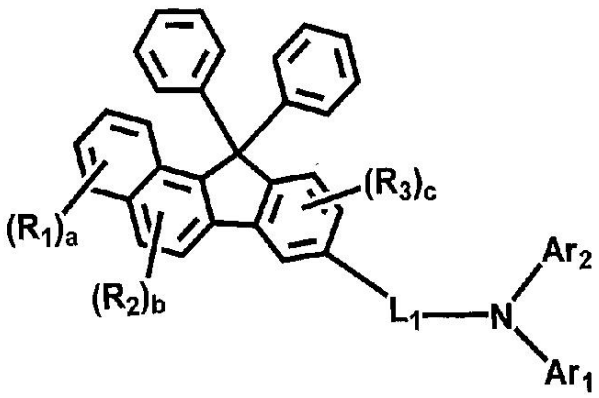
[0163]

	제2 정공 전달층 (보조층)	호스트	구동전압 (V) @1000 nits	전력효율 (Lm/W) @1000 nits	CIE (x,y)		수명 @5000 nits 16.7 시간후
소자 제조예 1	C-19	H-1	2.9	20.4	0.667	0.332	99.7%
소자 제조예 2	C-45		3.7	23.8	0.669	0.331	104.1%
소자 제조예 3	C-22		3.1	22.5	0.668	0.331	99.8%
비교예	T-1		3.0	13.5	0.664	0.334	98.9%

[0164] 본원의 유기 전계 발광 화합물들과 종래의 재료와 대비하였을 때 본원의 화합물이 높은 전력효율 및/또는 장수명 특성을 갖는 OLED 소자를 제조할 수 있음을 확인할 수 있었다.

专利名称(译)	有机电致发光化合物和包括该化合物的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020190122078A	公开(公告)日	2019-10-29
申请号	KR1020180045763	申请日	2018-04-19
[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		
[标]发明人	LIM YOUNG MOOK 임영묵 LEE TAE JIN 이태진		
发明人	임영묵 이태진		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	C09K2211/1088 C09K2211/1014 C09K11/06 C09K2211/1022 H01L51/50 C09K2211/1092		
代理人(译)	张本勋		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及有机电致发光化合物和包括该有机电致发光化合物的有机电致发光器件。通过包含根据本申请的有机电致发光化合物，可以提供具有改善的功率效率和/或寿命特性的有机电致发光器件。

[화학식 1]