



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2015-0034390  
(43) 공개일자 2015년04월03일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

*C09K 11/06* (2006.01) *C07D 307/91* (2006.01)

*H01L 51/50* (2006.01)

(21) 출원번호 10-2013-0114402

(22) 출원일자 2013년09월26일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

**룸엔드하스전자재료코리아유한회사**

충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)

(72) 발명자

**이경주**

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

**김치식**

경기 화성시 동탄반석로 71, 441동 1201호 (반송동, 솔빛마을쌍용예가아파트)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

**장훈**

전체 청구항 수 : 총 6 항

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

**(57) 요약**

본 발명은 신규한 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 정공 전달 능력이 뛰어나 정공전달층에 사용될 수 있고, 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 전류 효율 및 전력 효율이 개선된다.

(72) 발명자

**안희춘**

경기 수원시 영통구 영통로174번길 62, 105호 (매포동, 신흥빌라)

**양수진**

경기 화성시 동탄숲속로 95, 811동 1101호 (능동, 숲속마을광명메이루즈아파트)

**문두현**

경기 화성시 병점중앙로 204, 104동 101호 (진안동, 월드메르디앙1단지아파트)

**전지송**

경기 화성시 효행로1039번길 8-13, 403호 (진안동, 발렌티노빌)

**조영준**

경기 성남시 분당구 관교로 393, 더이디터원 204동 701호 (삼평동, 붓들마을이디터원아파트)

**이태진**

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

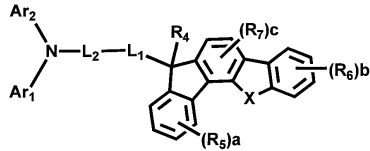
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

L<sub>1</sub>은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이며;

L<sub>2</sub>는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이며;

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

X는 -O-, -S-, -C(R<sub>1</sub>)(R<sub>2</sub>)- 또는 -N(R<sub>3</sub>)-이고;

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나; R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 서로 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 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 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, -N(R<sub>10</sub>)(R<sub>11</sub>), -Si(R<sub>12</sub>)(R<sub>13</sub>)(R<sub>14</sub>), -S(R<sub>15</sub>), -O(R<sub>16</sub>), 시아노, 니트로, 또는 하이드록시이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

R<sub>10</sub> 내지 R<sub>16</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있고;

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

a 및 b 는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 또는 b가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>5</sub> 및 각각의 R<sub>6</sub> 치환체는 동일하거나 상이할 수 있으며;

c는 1 또는 2의 정수이고, c가 2인 경우, 각각의 R<sub>7</sub> 치환체는 동일하거나 상이할 수 있다.

**청구항 2**

제1항에 있어서,  $L_1$  및  $L_2$ 가 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴렌이며,  $Ar_1$  및  $Ar_2$ 가 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이고,  $R_1$  내지  $R_3$ 이 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이고,  $R_4$  내지  $R_7$ 이 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴, 또는  $-N(R_{10})(R_{11})$ 이고,  $R_{10}$  내지  $R_{16}$ 이 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴인 유기 전계 발광 화합물.

**청구항 3**

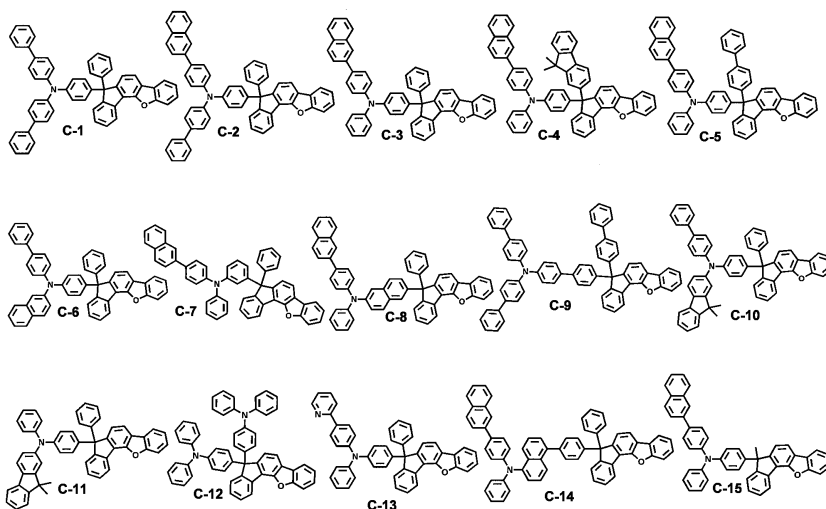
제1항에 있어서,  $L_1$  및  $L_2$ 가 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이며,  $Ar_1$  및  $Ar_2$ 가 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고,  $R_1$  내지  $R_3$ 이 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고,  $R_4$  내지  $R_7$ 이 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 또는  $-N(R_{10})(R_{11})$ 이고,  $R_{10}$  내지  $R_{16}$ 이 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴인 유기 전계 발광 화합물.

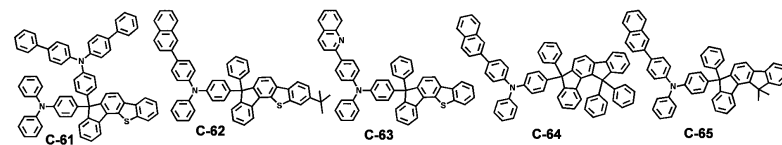
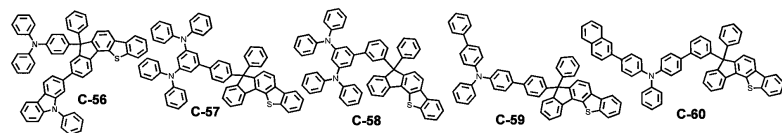
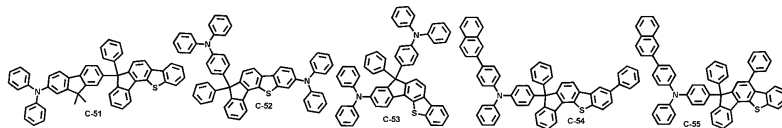
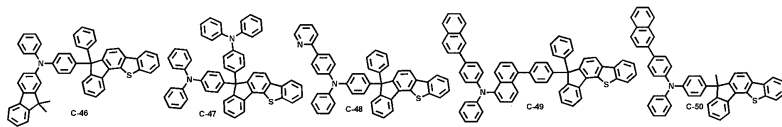
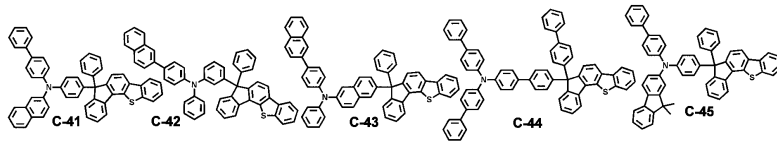
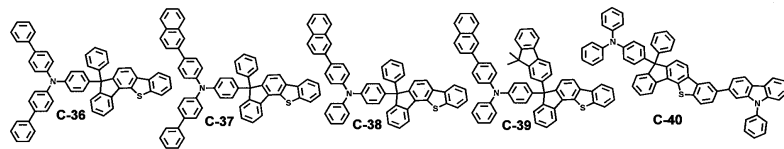
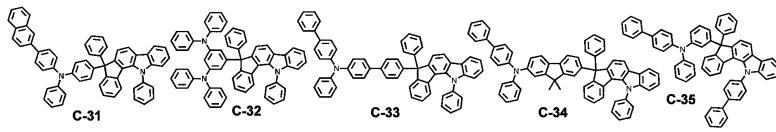
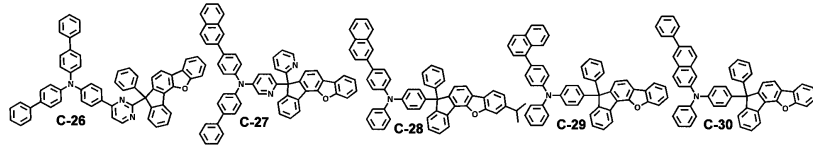
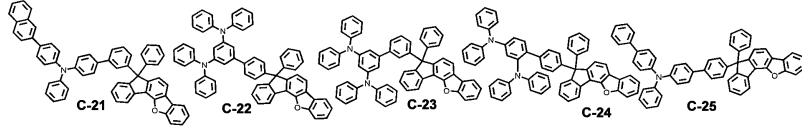
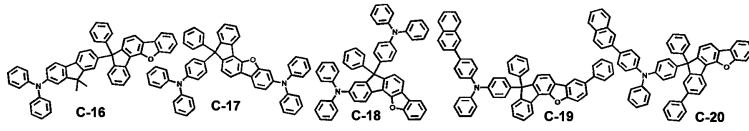
**청구항 4**

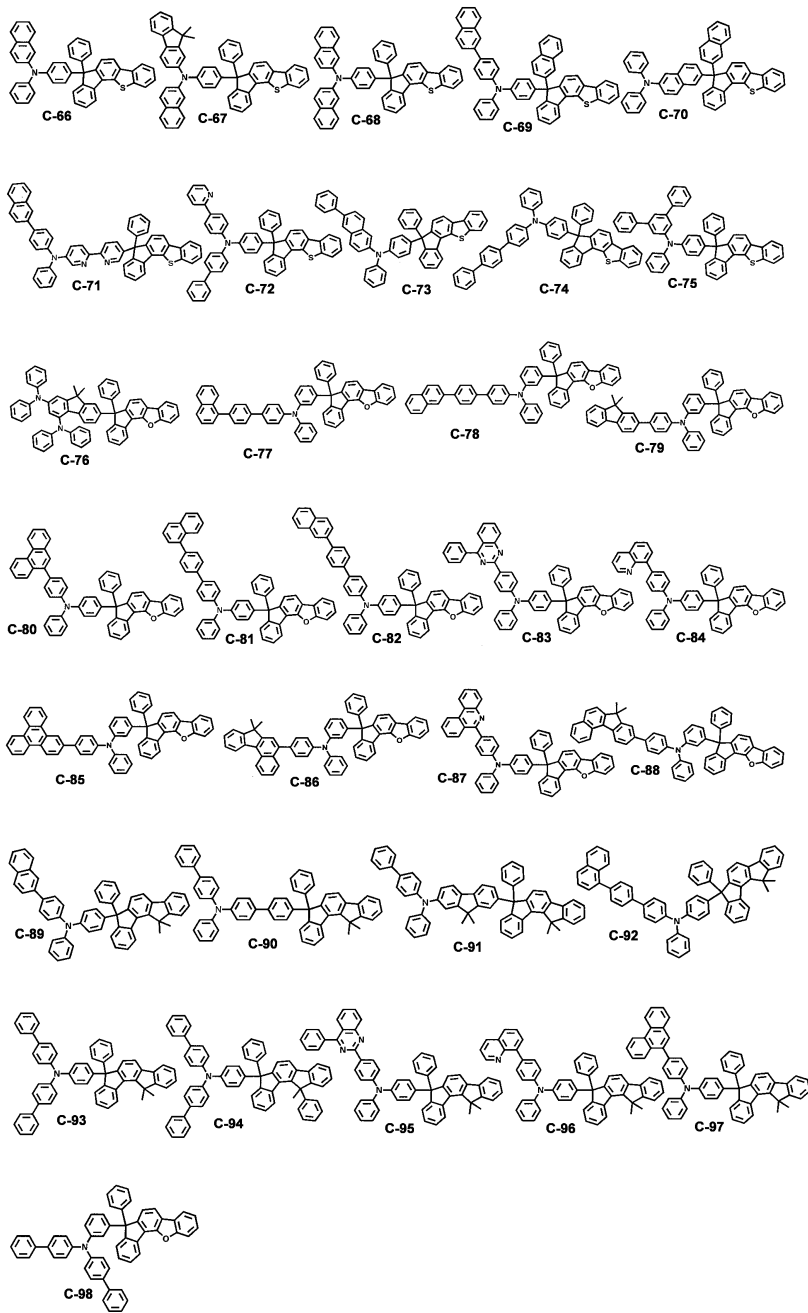
제1항에 있어서, 상기  $L_1$ ,  $L_2$ ,  $Ar_1$ ,  $Ar_2$ ,  $R_1$  내지  $R_7$  및  $R_{10}$  내지  $R_{16}$ 에서 치환 (C1-C30)알킬, 치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 (C6-C30)아릴(렌) 및 치환 (5-30원)헤테로아릴(렌)의 치환체가 각각 독립적으로, 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환되거나 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, (3-30원)헤테로아릴로 치환되거나 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬 디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬 (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상의 것인 유기 전계 발광 화합물.

**청구항 5**

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







**청구항 6**

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

**발명의 설명**

**기술분야**

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

**배경기술**

[0002] 전계 발광 소자(electroluminescence device: EL 소자)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발

광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 다이아민과 알루미늄 착물을 이용하는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913, 987].

[0003] 유기 EL 소자는 유기 발광 재료에 전기를 가해 전기 에너지를 빛으로 바꾸는 소자로서, 통상 애노드 및 캐소드와 이들 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 유기 EL 소자의 유기물층은 정공주입층, 정공전달층, 발광층(호스트 및 도판트 재료 포함), 전자전달층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있으며, 유기물층에 사용되는 재료는 기능에 따라 정공주입 재료, 정공전달 재료, 발광 재료, 전자전달 재료, 전자주입 재료 등으로 나뉜다. 이러한 유기 EL 소자에서는 전압 인가에 의해 애노드에서 정공이, 캐소드에서 전자가 발광층에 주입되고, 정공과 전자의 재결합에 의해 에너지가 높은 엑시톤이 형성된다. 이 에너지에 의해 발광 유기 화합물이 여기 상태로 되며, 발광 유기 화합물의 여기 상태가 기저 상태로 돌아가면서 에너지를 빛으로 방출하여 발광하게 된다. 유기 EL 소자에서 정공전달층 및 전자전달층은 발광층의 엑시톤이 방출되지 않도록 하기 위해 사용된다.

[0004] 유기 EL 소자의 발광 재료는 소자의 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인으로서, 발광 재료는 양자 효율이 높고 전자와 정공의 이동도가 커야 하고, 형성된 발광 재료층은 균일하고 안정해야 한다. 이러한 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색 또는 적색 발광 재료로 나뉘고, 추가로 노란색 또는 주황색 발광 재료도 있다. 또한, 발광 재료는 여기 상태에 따라 형광 발광 재료(일중항 여기상태) 및 인광 발광 재료(삼중항 여기상태)로 분류된다. 초기의 유기 EL 소자는 형광 발광 재료를 주로 사용하였으나, 인을 주성분으로 하는 인광 발광 재료가 형광 재료에 비해 전기를 빛으로 바꾸는 효율(발광 효율)이 4배 이상 높고 소비전력 절감이 가능해 상대적으로 수명이 길어지는 효과가 있다는 점에서 인광 발광 재료의 개발 연구가 널리 수행되고 있다.

[0005] 현재까지 이리듐(III) 착물 계열이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 각각의 적색, 녹색 및 청색 발광별로 (acac)Ir(btp)<sub>2</sub>(비스(2-(2'-벤조티에닐)-피리디네이토-N,C-3'))이리듐(아세틸아세토네이트)), Ir(ppy)<sub>3</sub>(트리스(2-페닐피리딘)이리듐) 및 Firpic(비스(4,6-다이플루오로페닐피리디네이토-N,C2)피콜리네이토이리듐) 등의 재료가 알려져 있다.

[0006] 발광 재료는 색순도, 발광효율 및 안정성을 향상시키기 위해 호스트와 도판트를 혼합하여 사용할 수 있다. 이와 같은 도판트/호스트 재료 체계를 사용할 때, 호스트 재료는 발광 소자의 효율과 성능에 큰 영향을 미치므로, 그 선택이 중요하다. 종래 기술에서, 인광용 호스트 재료로는 4,4'-N,N'-다이카바졸-바이페닐(CBP)이 가장 널리 알려져 있었다. 최근에는, 일본의 파이오니어 등이 정공차단층의 재료로 사용되던 바토큐프로인(Bathocuproine, BCP) 및 알루미늄(III)비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)(4-페닐페놀레이트)(Balq) 등을 호스트 재료로 이용해 고성능의 유기 EL 소자를 개발한 바 있다.

[0007] 그러나, 기존의 이러한 인광용 호스트 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 다음과 같은 단점이 있다: (1) 유리 전이 온도가 낮고 열적 안정성이 낮아서, 진공 하에서 고온 증착 공정을 거칠 때, 물질이 변한다. (2) 유기 EL 소자에서 전력 효율 = [( $\pi$ /전압) × 전류 효율]의 관계에 있으므로 전력 효율은 전압에 반비례한다. 인광용 호스트 재료를 사용한 유기 EL 소자는 형광 호스트 재료를 사용한 유기 EL 소자에 비해 전류 효율(cd/A)은 높으나, 구동 전압 역시 상당히 높기 때문에 전력 효율(lm/w) 면에서 큰 이점이 없다. (3) 유기 EL 소자에 사용할 경우, 작동 수명 측면에서도 만족스럽지 못하며, 발광 효율도 여전히 개선이 요구된다.

[0008] 한편, 유기 EL 소자에서 정공 주입 및 전달 재료로서 구리 프탈로시아닌(CuPc), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]바이페닐(NPB), N,N'-다이페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-(1,1'-바이페닐)-4,4'-다이아민(TPD), 4,4',4"-트리스(3-메틸페닐페닐아미노)트리페닐아민(MTDATA) 등이 사용되어 왔으나, 이러한 물질을 사용한 경우 유기 EL 소자는 양자 효율 및 수명이 저하되는 문제가 있었다. 그 이유는 유기 EL 소자를 높은 전류에서 구동하게 되면, 양극과 정공 주입층 사이에서 열 스트레스(thermal stress)가 발생하고, 이러한 열 스트레스에 의해 소자의 수명이 급격히 저하되기 때문이다. 또한, 정공주입층에 사용되는 유기 물질은 정공의 운동성이 매우 크기 때문에, 정공과 전자의 전하 밸런스(hole-electron charge balance)가 깨지고 이로 인해 양자 효율이 낮아지게 된다.

[0009] 따라서, 유기 EL 소자의 양자 효율이 저하되지 않도록 하고 소자의 발광 효율을 증대시키기 위해서는 소자내의 발광층에서의 정공과 전자의 결합이 원활히 이루어져야 한다. 유기 EL 소자의 발광 특성 향상을 위해서는 호스트와 도판트의 개발도 중요하나, 정공 및 전자 전달 재료의 개발 역시 중요하다. 이에 따라 전극으로부터 정공과 전자를 발광층으로 효율적으로 전달할 수 있는 유기 화합물에 대한 관심이 점차 증대되고 있다.

[0010] 대한민국 공개특허공보 제10-2012-0014913호 및 제10-2012-0047706호는 각각 정공 전달 화합물로서의 플루오렌 유도체, 및 정공 주입 및 전달 또는 전자 주입 및 전달 화합물로서의 융합된 헤테로사이클 유도체를 개시하고 있는데, 전류 효율 및 전력 효율 면에서 상기 문헌들에 기재되어 있는 화합물보다 더 우수한 특성을 제공할 수

있는 유기 화합물이 요구되고 있다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

- [0011] (특허문헌 0001) 대한민국 공개특허공보 제10-2012-0014913호(공개일: 2012년 2월 20일)
- (특허문헌 0002) 대한민국 공개특허공보 제10-2012-004706호(공개일: 2012년 5월 14일)

**발명의 내용**

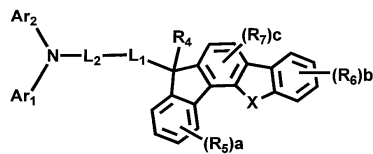
**해결하려는 과제**

- [0012] 따라서, 본 발명의 목적은, 첫째로 정공 전달 능력이 좋은 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며, 둘째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 정공전달층에 포함하는, 전력 효율 및 전류 효율이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

**과제의 해결 수단**

- [0013] 상기의 기술적 과제를 해결하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

- [0014] [화학식 1]



- [0015] 상기 화학식 1에서,
- [0016] L<sub>1</sub>은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이며;
- [0017] L<sub>2</sub>는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이며;
- [0018] Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며;
- [0019] X는 -O-, -S-, -C(R<sub>1</sub>)(R<sub>2</sub>)- 또는 -N(R<sub>3</sub>)-이고;
- [0020] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나; R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 서로 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;
- [0021] R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C<sub>3</sub>-C<sub>30</sub>)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아르(C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>)알킬, -N(R<sub>10</sub>)(R<sub>11</sub>), -Si(R<sub>12</sub>)(R<sub>13</sub>)(R<sub>14</sub>), -S(R<sub>15</sub>), -O(R<sub>16</sub>), 시아노, 니트로, 또는 하이드록시이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

- [0023] R<sub>10</sub> 내지 R<sub>16</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있고;
- [0024] 상기 헤테로아릴(렌) 및 헤테로시클로알킬은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;
- [0025] a 및 b 는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 또는 b가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>5</sub> 및 각각의 R<sub>6</sub> 치환체는 동일하거나 상이할 수 있으며;
- [0026] c는 1 또는 2의 정수이고, c가 2인 경우, 각각의 R<sub>7</sub> 치환체는 동일하거나 상이할 수 있다.

**발명의 효과**

- [0027] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 정공 전달 능력이 뛰어나, 이러한 화합물을 정공전달층에 포함하는 유기 전계 발광 소자는 전류 밀도가 증가되고 이에 따라 구동 전압이 저하되므로, 전류 효율 및 전력 효율이 증가한다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

- [0028] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 것으로 해석되어서는 안된다.
- [0029] 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.
- [0030] 본원에 기재되어 있는 "(C1-C30)알킬(렌)"은 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬(렌)을 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 20개인 것이 바람직하고, 1 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 3급-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알케닐"은 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알키닐"은 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알키닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알키닐의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸헥트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 여기에서 탄소수가 3 내지 20개인 것이 바람직하고, 3 내지 7개인 것이 더 바람직하다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(3-7원)헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 3 내지 7개, 바람직하게는 5 내지 7개이고, B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 O, S 및 N에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라히드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴(렌)"은 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 여기에서 환 골격 탄소수가 6 내지 20개인 것이 바람직하고, 6 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 바이페닐, 터페닐, 나프틸, 플루오레닐, 페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페틸레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐 등이 있다. 본원에서 "(3-30원)헤테로아릴(렌)"은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 여기에서 환 골격 원자수가 3 내지 20개인 것이 바람직하고, 3 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴(렌)은 하나 이상의 헤테로아릴기 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴,

푸라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로겐"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0031]

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. 본 발명의 화학식 1의 L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>7</sub> 및 R<sub>10</sub> 내지 R<sub>16</sub>에서 치환 (C1-C30)알킬, 치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 (C6-C30)아릴(렌) 및 치환 (5-30원)헤테로아릴(렌)의 치환체는 각각 독립적으로, 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환되거나 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, (3-30원)헤테로아릴로 치환되거나 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상의 것이다.

[0032]

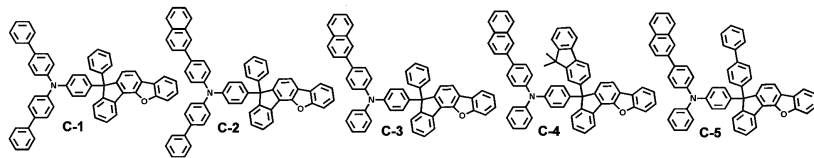
상기 화학식 1에서, 바람직하게는, L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴렌이며, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이고, R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴, 또는 -N(R<sub>10</sub>)(R<sub>11</sub>)이고, R<sub>10</sub> 내지 R<sub>16</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이다.

[0033]

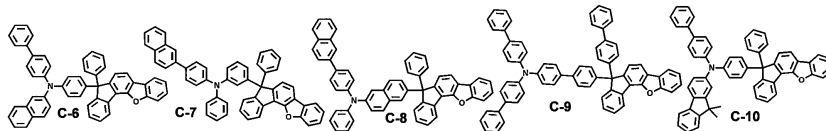
상기 화학식 1에서, 보다 바람직하게는, L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이며, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고, R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 또는 -N(R<sub>10</sub>)(R<sub>11</sub>)이고, R<sub>10</sub> 내지 R<sub>16</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이다.

[0034]

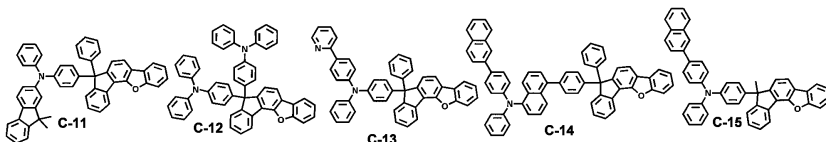
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물로부터 선택된다



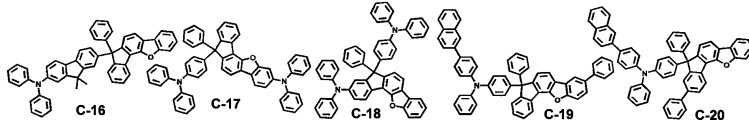
[0035]



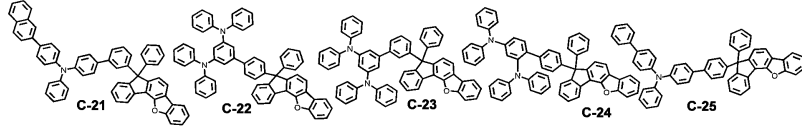
[0036]



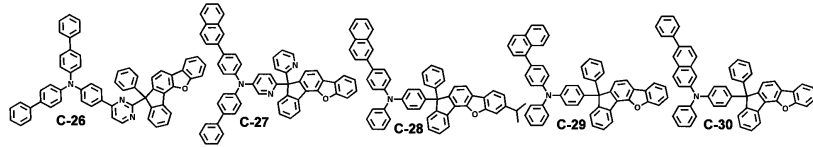
[0037]



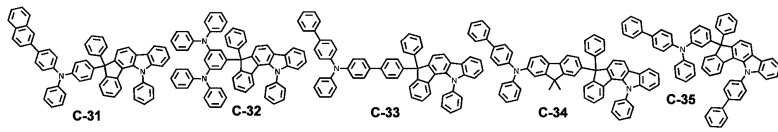
[0038]



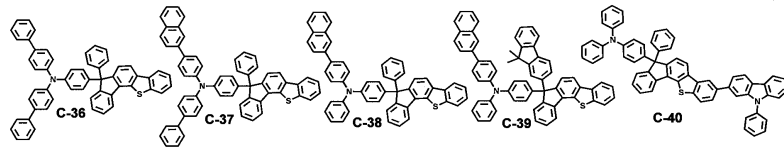
[0039]



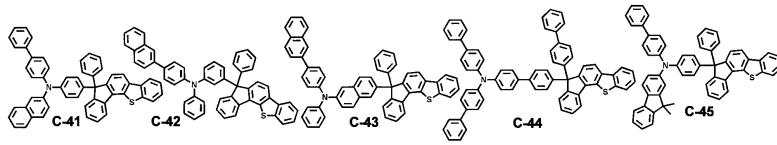
[0040]



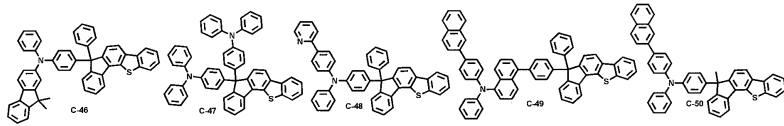
[0041]



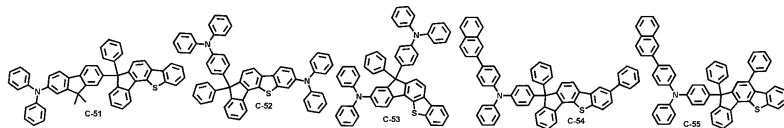
[0042]



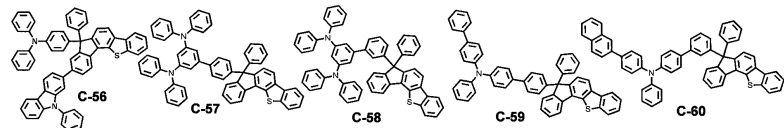
[0043]



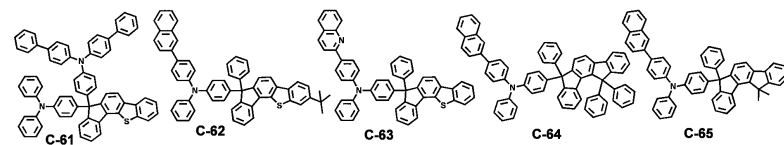
[0044]



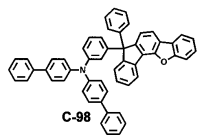
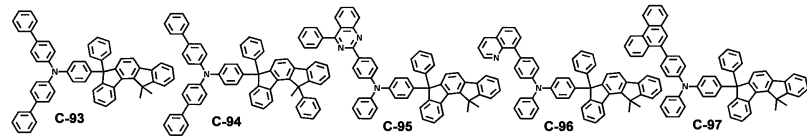
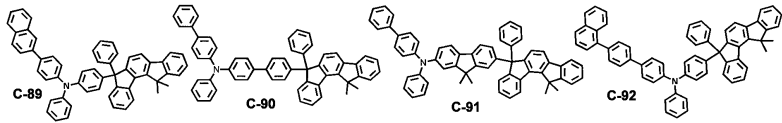
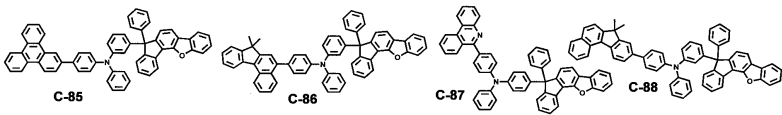
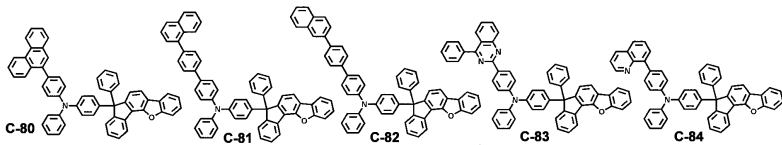
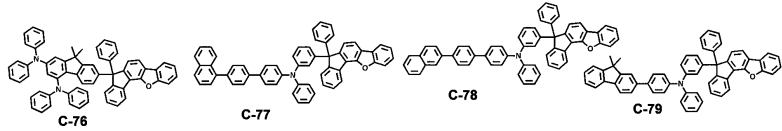
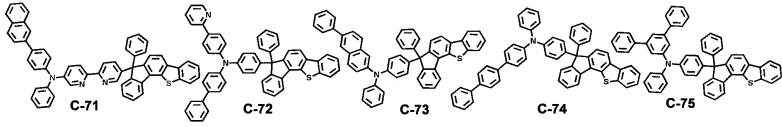
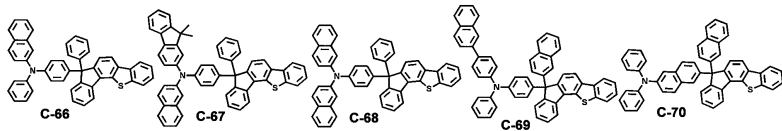
[0045]



[0046]

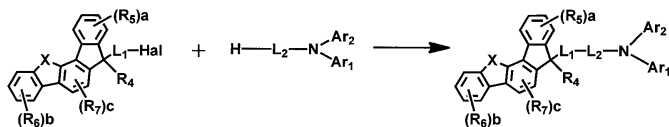


[0047]



본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면, 하기 반응식 1에 따라 제조할 수 있다.

[반응식 1]



상기 반응식 1에서 X, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>, a, b 및 c는 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하고, Hal는 할로겐이다.

본 발명은 추가의 양태로 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다. 상기 재료는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루

어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 물질들을 추가로 포함할 수 있다. 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖고, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 화합물을 하나 이상 포함한다.

[0061] 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공주입층, 정공전달층, 전자전달층, 전자주입층, 계면층(interlayer) 및 정공차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다. 본 발명의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 정공전달층에 포함될 수 있다.

[0062] 정공수송층에 사용될 경우, 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 정공수송 재료로서 포함될 수 있다. 발광층에 사용될 경우, 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다.

[0063] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 이외의 하나 이상의 다른 화합물을 호스트 재료로서 더 포함할 수 있으며, 하나 이상의 도판트를 더 포함할 수 있다.

[0064] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물이 발광층의 호스트 재료(제1 호스트 재료)로서 포함되는 경우, 그 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 포함할 수 있다. 이 때, 제1 호스트 재료와 제2 호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

[0065] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 이외의 다른 화합물의 호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하나, 하기 화학식 6 내지 화학식 8로 표시되는 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 것이 발광 효율 면에서 특히 바람직하다.

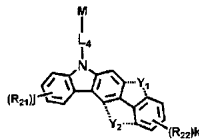
[0066] [화학식 6]



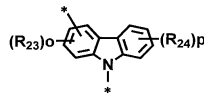
[0068] [화학식 7]



[0070] [화학식 8]

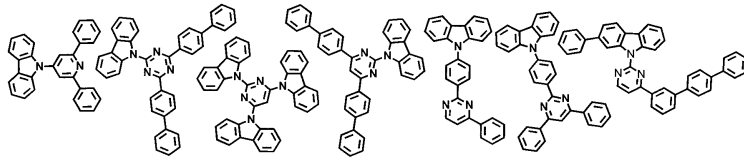


[0071] 상기 화학식 6 내지 8에서,  
 [0072] Cz는 하기 구조이며,

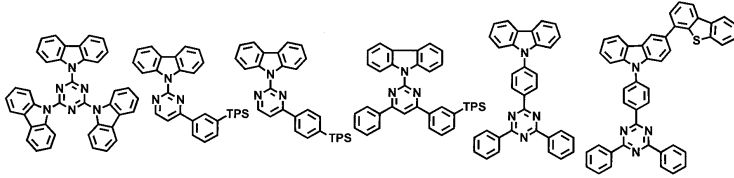


[0074] R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴 또는 R<sub>25</sub>R<sub>26</sub>R<sub>27</sub>Si-이며, R<sub>25</sub> 내지 R<sub>27</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; L<sub>4</sub>은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고; M은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며; Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 -O-, -S-, -N(R<sub>31</sub>)- 또는 -(R<sub>32</sub>)(R<sub>33</sub>)-이고, Y<sub>1</sub>과 Y<sub>2</sub>가 동시에 존재하지는 않으며; R<sub>31</sub> 내지 R<sub>33</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, R<sub>32</sub> 및 R<sub>33</sub>은 동일하거나 상이할 수 있으며; h 및 i는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, j, k, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, h, i, j, k, o 또는 p가 2 이상의 정수인 경우 각각의 (Cz-L<sub>4</sub>), 각각의 (Cz), 각각의 R<sub>21</sub>, 각각의 R<sub>22</sub>, 각각의 R<sub>23</sub> 또는 각각의 R<sub>24</sub>는 동일하거나 상이할 수 있다.

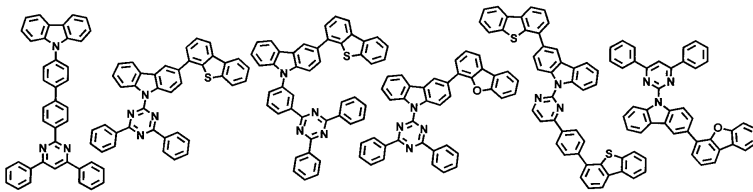
[0076] 구체적으로 상기 호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같다.



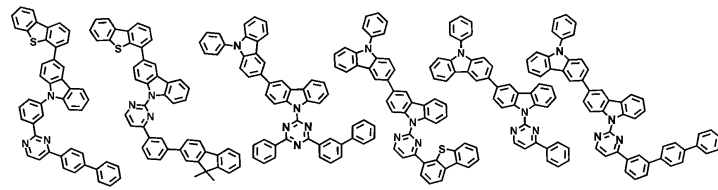
[0077]



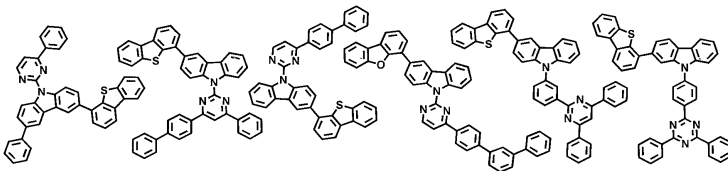
[0078]



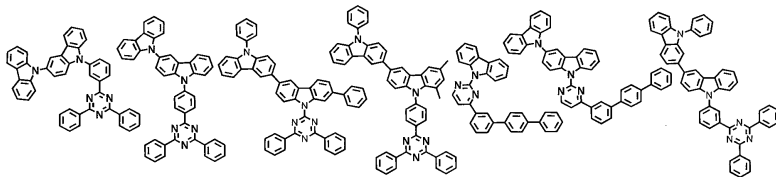
[0079]



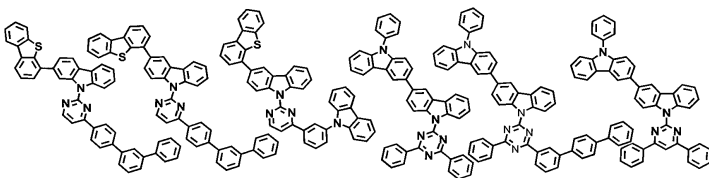
[0080]



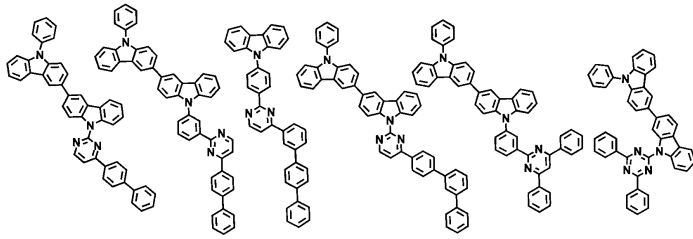
[0081]



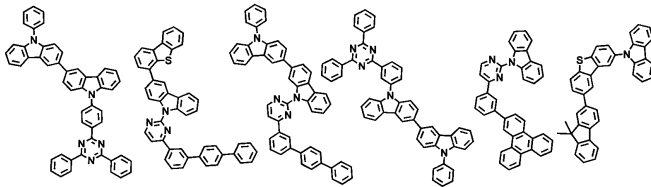
[0082]



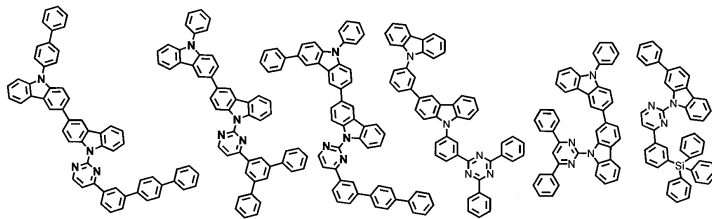
[0083]



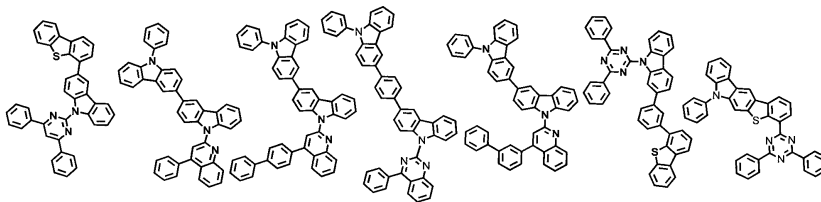
[0084]



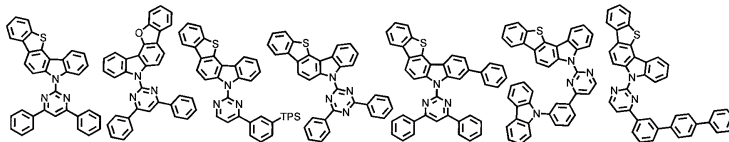
[0085]



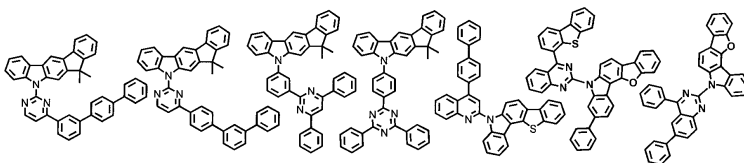
[0086]



[0087]



[0088]



[0089]

[0090]

(여기서, TPS는 트리페닐실릴이다)

[0091]

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.

[0092]

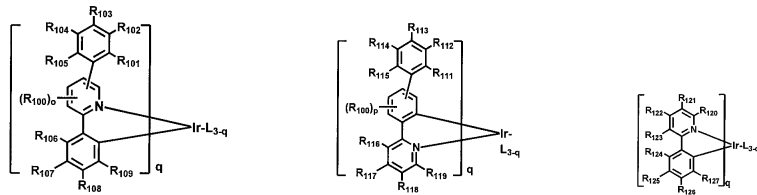
상기 인광 도판트는 하기 화학식 9 내지 화학식 11로 표시되는 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.

[0093]

[화학식 9]

[화학식 10]

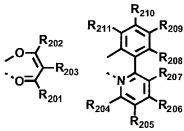
[화학식 11]



[0094]

[0095]

상기 화학식 9 내지 11에서, L은 하기 구조에서 선택되고;



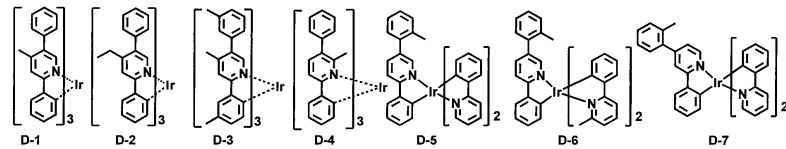
[0096]

[0097]

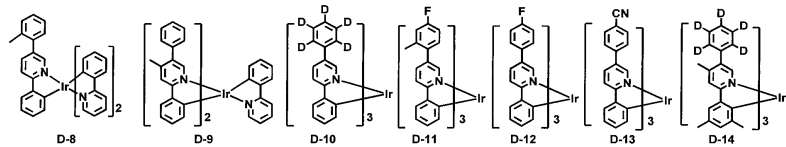
R<sub>100</sub>은 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬이며; R<sub>101</sub> 내지 R<sub>109</sub> 및 R<sub>111</sub> 내지 R<sub>123</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고; R<sub>120</sub> 내지 R<sub>123</sub>은 인접 치환기와 연결되어 융합고리를 형성하는데, 예를 들어 퀴놀린 형성이 가능하며; R<sub>124</sub> 내지 R<sub>127</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이며; R<sub>124</sub> 내지 R<sub>127</sub>이 아릴기인 경우 인접기와 연결되어 융합고리를 형성하는데, 예를 들어 플루오렌 형성이 가능하며; R<sub>201</sub> 내지 R<sub>211</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 또는 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬이며; o 및 p는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며, o 또는 p가 각각 2 이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>100</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있고; q는 1 내지 3의 정수이다.

[0098]

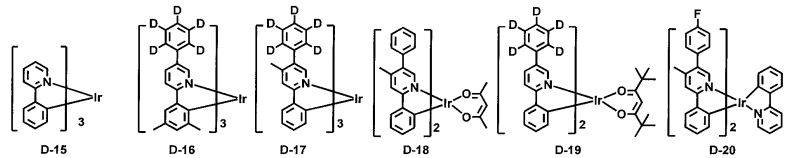
상기 인광 도판트 재료의 구체적인 예로는 다음과 같다.



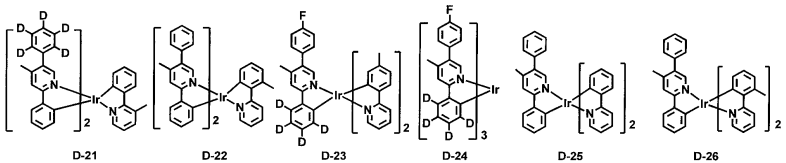
[0099]



[0100]

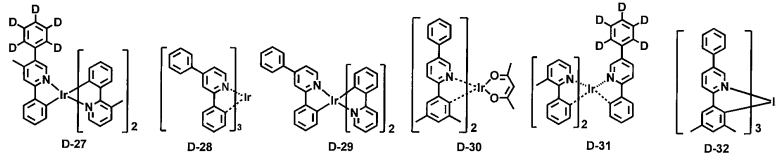


[0101]

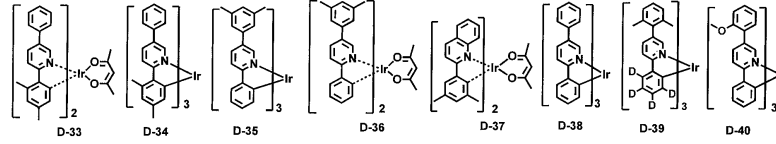


[0102]

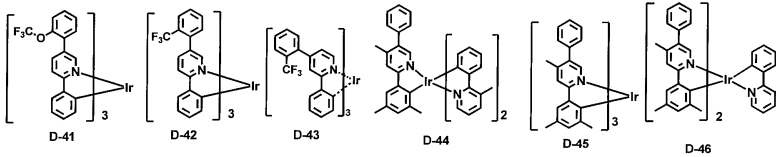
[0103]



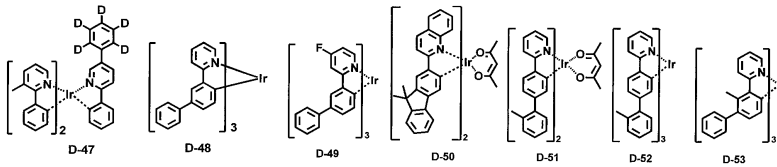
[0104]



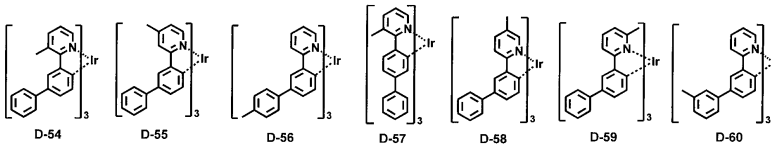
[0105]



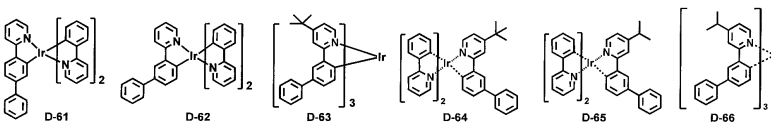
[0106]



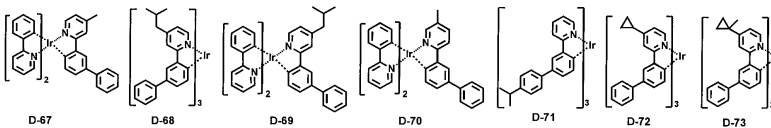
[0107]



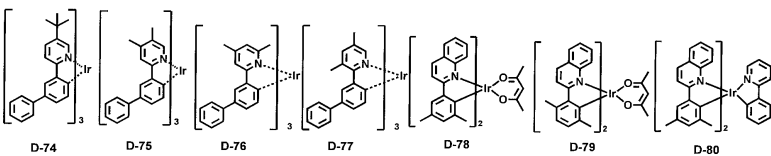
[0108]



[0109]



[0110]



[0111]

본 발명은 추가의 양태로 유기 전계 발광 소자 제조용 조성물을 제공한다. 상기 조성물은 호스트 재료 또는 정공수송층 재료로서 본 발명의 화합물을 포함한다.

[0112]

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.

[0113]

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

[0114] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란타 계열 금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속, 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체 화합물을 더 포함할 수도 있다.

[0115] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 이외에 당업계에 알려진 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함하는 발광층을 하나 이상 포함함으로써 백색 발광을 할 수 있다. 또한, 필요에 따라, 노란색 또는 주황색 발광층을 더 포함할 수도 있다.

[0116] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측 표면에, 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 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 음극 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.

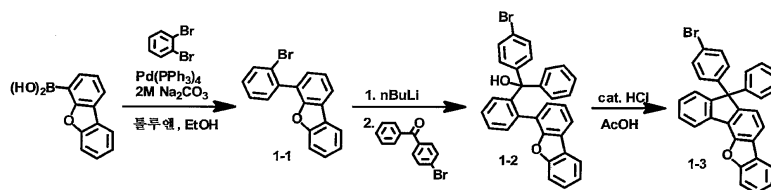
[0117] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역, 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 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 이상의 발광층을 가진, 백색 발광을 하는 유기 전계 발광소자를 제작할 수 있다.

[0118] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 각 층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막 법이나, 스핀코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

[0119] 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.

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

[0121] [실시에 1] 화합물 C-3의 제조



[0122]

[0123] 화합물 1-1의 제조

[0124] 반응 용기에 1,2-다이브로모벤젠 31g(130mmol), 4-다이벤조퓨란보닉에시드 25g(120mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐[Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>] 4.1g(3.54mmol), 탄산나트륨 31g(295mmol), 톨루엔 600mL 및 에탄올 150mL를 넣고, 증류수 150mL를 첨가한 후 120℃로 6시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-1, 22g(59%)을 얻었다.

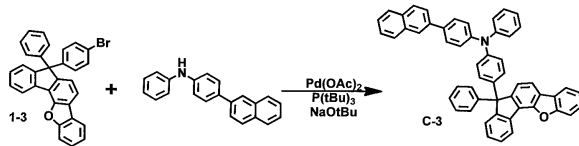
[0125] 화합물 1-2 및 1-3의 제조

[0126]

반응 용기에 화합물 1-1, 22g(69mmol) 및 테트라하이드로퓨란 250mL를 넣고, 질소 조건을 만든 뒤 -78℃로 온도를 내렸다. 여기에 n-부틸 리튬 33mL(2.5M, 83mmol)를 천천히 적가하였다. 2시간 동안 -78℃에서 교반한 후, 250mL의 테트라하이드로퓨란에 녹아 있는 4-브로모벤조페논을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 반응 온도를 상온으로 서서히 올려주고 30분 동안 추가로 교반하였다. 반응 용액에 염화암모늄 수용액을 넣어 반응을 종료하고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 얻은 화합물 1-2에 아세트산 700mL 및 HCl 0.5mL를 넣고 120℃에서 밤새 교반하였다. 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-3, 22g(65%)을 얻었다.

[0127]

화합물 C-3의 제조



[0128]

[0129]

반응 용기에 화합물 1-3, 8g(16.41mmol), 4-(나프탈렌-2-일)-N-페닐아닐린 4.8g(16.41mmol), 팔라듐(II) 아세테이트[Pd(OAc)<sub>2</sub>] 0.15g(0.66mmol), 트라이-t-부틸 포스핀[P(tBu)<sub>3</sub>] 0.8mL(50%, 1.64mmol), 소듐ium tert-부톡사이드(NaOtBu) 2.4g(24.62 mmol) 및 o-자일렌 80 mL를 넣고 2시간 동안 환류하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후 고체는 여과하여 메틸렌 클로라이드(MC)로 씻어 주었다. 여액을 감압증류하고 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 생성물로서 화합물 C-3, 5.9g(51%)을 얻었다.

[0130]

[실시예 2] 화합물 C-1의 제조

[0131]

반응 용기에 화합물 1-3, 6g(12.31mmol), 다이([1,1'-바이페닐]-4-일)아민 4g(12.31mmol), 팔라듐(II) 아세테이트 0.11g(0.50mmol), 트라이-t-부틸 포스핀 0.5mL(50%, 1.00mmol), 소듐ium tert-부톡사이드 1.8g(18.47mmol) 및 o-자일렌 62 mL를 넣고 2시간 동안 환류하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후 고체는 여과하여 MC로 씻어 주었다. 여액을 감압증류하고 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 생성물로서 화합물 C-1, 1.7g(19%)을 얻었다.

[0132]

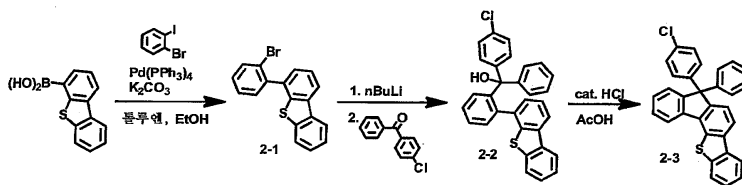
[실시예 3] 화합물 C-25의 제조

[0133]

반응 용기에 화합물 1-3, 7g(14.36mmol), (4-([1,1'-바이페닐]-4-일(페닐)아미노)보론산 6.3g(17.23mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 0.5g(0.43mmol), 탄산나트륨 3.8g(35.90mmol), 톨루엔 72mL 및 에탄올 18mL를 넣고, 증류수 18mL를 첨가한 후 120℃로 6시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 C-25, 25.2g(50%)을 얻었다.

[0134]

[실시예 4] 화합물 C-38의 제조



[0135]

[0136]

화합물 2-1의 제조

[0137]

반응 용기에 다이벤조[b,d]사이오펜-4-일보로닉 에시드 30g(132mmol), 1-브로모-2-아이오도벤젠 74g(263mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 7.6g(6.5mmol), 탄산칼륨 36.3g(263mmol), 톨루엔 900mL 및 에탄올 130mL를 넣고 120℃로 12시간 동안 교반하였다. 상온으로 식힌 반응 용액은 에틸 아세테이트로 희석하고 증류수로 씻어주고 무수 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여

화합물 2-1, 29g(56%)을 얻었다.

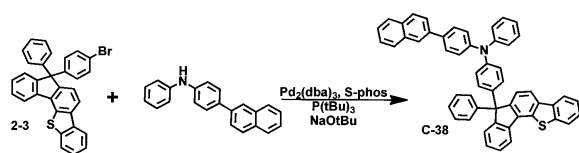
[0138] 화합물 2-2의 제조

[0139] 반응 용기에 화합물 2-1, 29.2g(86.1mmol)을 테트라하이드로퓨란 500mL에 녹인 후 -78℃ 하에서 n-부틸리튬 51.6mL(2.5 M, 헥세인에서)을 천천히 첨가한다. 1시간 후 (4-클로로페닐)(페닐)메타논 22.4g(103mmol)을 테트라하이드로퓨란 100mL에 녹여 천천히 첨가한다. 온도를 상온까지 올려 12시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 황산마그네슘으로 건조시켰다. 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 2-2, 28g(68%)을 얻었다.

[0140] 화합물 2-3의 제조

[0141] 반응 용기에 화합물 2-2, 28g(58.7mmol)과 염산 0.24mL(2.93mmol) 및 아세트산 600mL를 넣고 130℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 메틸렌 클로라이드로 추출한 후 황산마그네슘으로 건조시켰다. 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 2-3, 13g(48%)을 얻었다.

[0142] 화합물 C-38의 제조



[0143]

[0144] 반응 용기에 화합물 2-3, 7g(15.2 mmol), 4-(나프탈렌-2-일)-N-페닐아닐린 4.9g(16.8mmol), 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐(0) [Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>] 0.7g(7.6mmol), S-포스(phos)(2-디사이클로헥실포스포노-2',6'-디메톡시바이페닐) 0.75g(18.3 mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.66g(38.1mmol) 및 o-자일렌 100mL를 넣고, 180℃에서 1시간 동안 교반하였다. 상온으로 식힌 반응 용액은 에틸 아세테이트로 희석하고 물로 여러 번 씻어주었다. 무수 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 1.8g(16%)의 화합물 C-38을 얻었다.

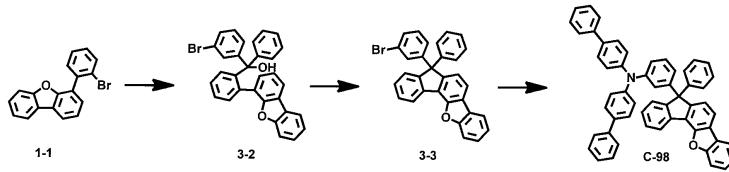
[0145] [실시에 5] 화합물 C-36의 제조

[0146] 반응 용기에 화합물 2-3, 6g(13.1mmol), 다이([1,1'-바이페닐]-4-일)아민 4.62g(14.4 mmol), 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐(0) 0.6g(0.65mmol), S-포스 0.64g(1.57mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.14g(32.7mmol) 및 o-자일렌 90mL를 넣고, 180℃에서 1시간 동안 교반하였다. 상온으로 식힌 반응 용액은 에틸 아세테이트로 희석하고 증류수로 씻어주고 무수 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 C-36, 3.0g(31%)을 얻었다.

[0147] [실시에 6] 화합물 C-11의 제조

[0148] 반응 용기에 화합물 1-3, 7.3g(15.07 mmol), 9,9-다이메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민 4.3g(15.07 mmol), 팔라듐(II) 아세테이트 0.13g(0.60 mmol), 트라이-t-부틸 포스핀 0.7mL(50%, 1.51 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 2.2g(22.61 mmol) 및 o-자일렌 75mL를 넣고 2시간 동안 환류하였다. 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후 고체는 여과하여 메틸렌 클로라이드로 씻어 주었다. 여액을 감압증류하고 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 C-11, 4g(38%)을 얻었다.

[0149] [실시예 7] 화합물 C-98의 제조



[0150]

[0151] 화합물 3-3의 제조

[0152] 반응 용기에 화합물 1-1(10g, 30.9 mmol) 및 테트라하이드로퓨란 125mL를 넣고, 질소 조건을 만든 후 -78℃로 온도를 내렸다. 여기에 n-부틸 리튬 13mL(2.5M, 34.0mmol)를 천천히 적가하였다. 1시간 동안 -78℃에서 교반한 후, 40mL의 테트라하이드로퓨란에 녹아 있는 3-브로모벤조페논(8.4g, 32.4mmol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 반응 온도를 상온으로 서서히 올려주고 16시간 동안 교반하였다. 반응 용액에 염화암모늄 수용액을 넣어 반응을 종료하고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 생성된 화합물 3-2에 아세트산 200mL 및 HCl 0.3mL를 넣고 120℃에서 밤새 교반하였다. 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 3-3(12g, 80%)을 얻었다.

[0153] 화합물 C-98의 제조

[0154] 반응 용기에 화합물 1-3(5.5g, 11.2mmol), 비스바이페닐아민(3.6g, 11.2mmol), 팔라듐 아세테이트(0.1g, 0.45mmol), S-포스(0.4g, 1.12mmol), 나트륨 tert-부톡사이드(2.7g, 28.2mmol) 및 톨루엔 60mL를 넣고 1 시간 동안 환류하였다. 반응이 끝나면 증류수로 세척하고 메틸렌 클로라이드(MC)로 유기층을 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 C-98(7g, 86%)을 얻었다.

[0155] 상기 실시예 1 내지 7에서 제조된 화합물의 구체적인 물성 데이터를 하기 표 1에 나타낸다.

[0156] [표 1]

화합물	UV 스펙트럼	PL 스펙트럼	MP(℃)	MS/EIMS	
	(톨루엔에서, nm)	(톨루엔에서, nm)		측정값	계산값
C-3	386	405	258	701.85	701.27
C-1	384	397	240	727.89	707.29
C-25	378	397	161	727.89	727.29
C-38	380	405	289	718.25	717.25
C-36	374	393	242	744.26	743.26
C-11	378	389	153	691.86	691.29
C-98	360	392	282	727.89	727.29

[0157]

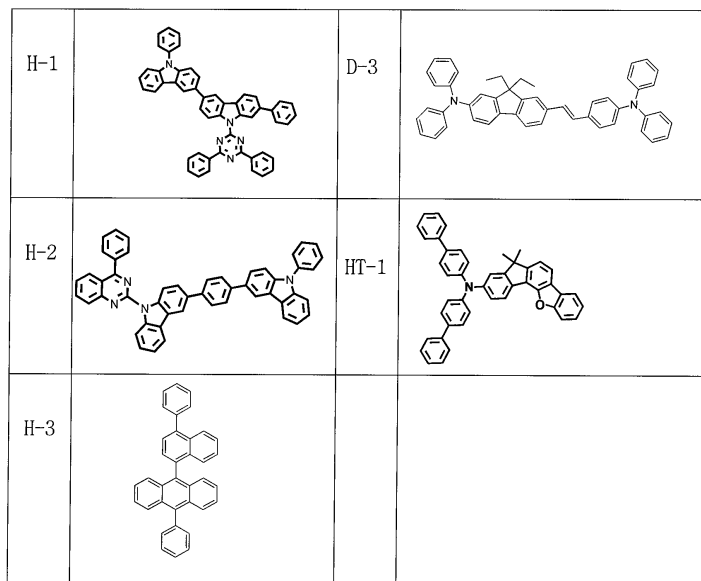
[0158] [소자 실시예1] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0159] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 구조의 OLED 소자를 제작하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍 제조)로부터 얻어진 투명 전극 ITO 박막(10Ω/□)을, 아세톤 및 이소프로판 알콜을 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판 알콜에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기관 홀더에 ITO 기관을 장착한 후, 진공 증착장비 내의 셀에 N<sup>1</sup>,N<sup>1</sup>-([1,1'-바이페닐]-4,4'-디일)비스(N<sup>1</sup>-(나프탈렌-1-일)-N<sup>4</sup>,N<sup>4</sup>-다이페닐벤젠-1,4-디아민)을 넣고 챔버 내의 진공도가 10<sup>-6</sup> torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기관 위에 60nm 두께의 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 본 발명의 화합물 C-25를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 정공주입층 위에 20nm 두께의 정공전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 하기 화학식의 H-1을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 상기 화학식의 D-1을 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 각각 15중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 정공 전달층위에 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 한쪽 셀에 2-(4-(9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센-2-일)페닐)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸을 넣고, 또 다른 셀에는 리튬 퀴놀레이트(Lithium quinolate)를 넣은 후, 두 물질을 같은 속도로 증발시켜 각각 50중량%의 양으로 도핑함으로써 30nm의 상기 발광층 위에 전자전달층을 증착하였다. 이어서 전자 주입층으로 리튬 퀴놀레이트를 2nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착장비를 이용하여 Al

음극을 150nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제작하였다. 재료 별로 각 화합물은  $10^{-6}$  torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

- [0160] 그 결과,  $2.7\text{mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $1300\text{cd}/\text{m}^2$ 의 녹색 발광이 확인되었다.
- [0161] [소자 실시예 2] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작
- [0162] 정공전달층으로서 본 발명의 화합물 **C-1**을 20nm 두께로 증착하고 발광층으로서 진공 증착 장비내의 한쪽 셀에 호스트로서 하기 화학식의 H-2를 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 상기 화학식의 D-78을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 각각 3중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 정공전달층 위에 30nm 두께의 발광층을 증착한 것 이외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0163] 그 결과,  $10.2\text{mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $1500\text{cd}/\text{m}^2$ 의 적색 발광이 확인되었다.
- [0164] [소자 실시예 3] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작
- [0165] 정공전달층으로서 본 발명의 화합물 **C-3**을 사용하고 호스트로서 하기 화학식의 H-3과 하기 화학식의 D-3을 사용한 것 외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0166] 그 결과,  $17.3\text{mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $900\text{cd}/\text{m}^2$ 의 청색 발광이 확인되었다.
- [0167] [소자 실시예 4] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작
- [0168] 정공전달층으로서 본 발명의 화합물 **C-36**을 20nm 두께로 증착한 것 이외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0169] 그 결과,  $1.7\text{mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $800\text{cd}/\text{m}^2$ 의 녹색 발광이 확인되었다.
- [0170] [소자 실시예 5] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작
- [0171] 정공전달층으로서 본 발명의 화합물 **C-98**을 20nm 두께로 증착한 것 이외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0172] 그 결과,  $2.3\text{mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $1100\text{cd}/\text{m}^2$ 의 녹색 발광이 확인되었다.
- [0173] [소자 실시예 6] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작
- [0174] 정공전달층으로서 본 발명의 화합물 **C-11**을 20nm 두께로 증착한 것 이외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0175] 그 결과,  $6.3\text{mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $1000\text{cd}/\text{m}^2$ 의 적색 발광이 확인되었다.
- [0176] [비교예 1] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제작
- [0177] 정공전달층으로서 N,N'-디(4-바이페닐)-N,N'-디(4-바이페닐)-4,4'-디아미노바이페닐을 20nm 두께로 증착한 것 이외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0178] 그 결과,  $26.5\text{mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $10000\text{cd}/\text{m}^2$ 의 녹색 발광이 확인되었다.

- [0179] [비교예 2] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제작
- [0180] 정공전달층으로서 N,N'-디(4-바이페닐)-N,N'-디(4-바이페닐)-4,4'-디아미노바이페닐을 20nm 두께로 증착한 것 이외에는 소자 실시예 3과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0181] 그 결과, 108.1mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 4000cd/m<sup>2</sup>의 청색발광이 확인되었다.
- [0182] [비교예 3] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제작
- [0183] 정공전달층으로서 N,N'-디(4-바이페닐)-N,N'-디(4-바이페닐)-4,4'-디아미노바이페닐을 20nm 두께로 증착한 것 이외에는 소자 실시예 2와 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0184] 그 결과, 102.6mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 8000cd/m<sup>2</sup>의 적색발광이 확인되었다.
- [0185] [비교예 4] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제작
- [0186] 정공전달층으로서 하기 화학식의 N,N-디([1,1'-바이페닐]-4-일)-7,7-디메틸-7H-플루오레노[4,3-b]벤조푸란-9-아민(HT-1)을 20nm 두께로 증착한 것 이외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.
- [0187] 그 결과, 17.2mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 7000cd/m<sup>2</sup>의 녹색 발광이 확인되었다.



- [0188]
- [0189] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물들의 발광 특성이 종래의 발광 재료에 비해 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다. 또한 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 사용한 소자는 발광 특성이 뛰어나고 전류효율 및 전력효율이 개선되며 수명 특성이 좋다.

专利名称(译)	标题：有机电致发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020150034390A</a>	公开(公告)日	2015-04-03
申请号	KR1020130114402	申请日	2013-09-26
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
当前申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	LEE KYUNG JOO 이경주 KIM CHI SIK 김치식 AHN HEE CHOON 안희춘 YANG SOO JIN 양수진 MOON DOO HYEON 문두현 JUN JI SONG 전지송 CHO YOUNG JUN 조영준 LEE TAE JIN 이태진		
发明人	이경주 김치식 안희춘 양수진 문두현 전지송 조영준 이태진		
IPC分类号	C09K11/06 C07D307/91 H01L51/50		
CPC分类号	C07D333/76 C07C211/54 C07D307/91 C07D409/04 C07D215/12 C09K11/06 C07D409/12 C07D405/12 C07D209/94 C07D405/04 C07D239/74 H01L51/0059 C07D409/10 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C09K2211/1088 C09K2211/1092 H01L51/0052 H01L51/0058 H01L51/006 H01L51/0061 H01L51/0067 H01L51/0072 H01L51/5056 H01L51/0062 H01L51/0065 H01L51/0068		
代理人(译)	李昌勋		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

#### 摘要(译)

本发明涉及一种新型有机电致发光化合物和包含该化合物的有机电致发光器件。本发明的有机电致发光化合物具有优异的空穴传输能力，因此可用于空穴传输层。通过包含本公开的有机电致发光化合物，可以提供显示出改善的电流效率，改善的功率效率和长寿命的有机电致发光器件。

