

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2016-0007393 (43) 공개일자 2016년01월20일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) <i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>C07D 209/82</i> (2006.01) <i>C07D 403/04</i> (2006.01) <i>C07D 487/04</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01) (52) CPC특허분류 <i>C09K 11/06</i> (2013.01) <i>C07D 209/82</i> (2013.01) (21) 출원번호 10-2015-0096899 (22) 출원일자 2015년07월08일 심사청구일자 없음 (30) 우선권주장 1020140086690 2014년07월10일 대한민국(KR)		(71) 출원인 룸엔드하스전자재료코리아유한회사 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동) (72) 발명자 이미자 경기도 화성시 영통로26번길 24 305-1503 김빛나리 경기도 안양시 동안구 동안로 101 목련선경아파트 102-2401 (뒷면에 계속) (74) 대리인 장훈

전체 청구항 수 : 총 8 항

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

(57) 요약

본 발명은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하면, 발광 효율, 특히, 전류 효율이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

(52) CPC특허분류

C07D 403/04 (2013.01)

C07D 487/04 (2013.01)

H01L 51/50 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

C09K 2211/1044 (2013.01)

C09K 2211/1059 (2013.01)

(72) 발명자

김남균

경기도 용인시 수지구 포은대로 219 (상현동 서원
마을 3단지 아이파크 아파트)302동 1801호

강희룡

서울특별시 관악구 인현12나길 31 (봉천동, 삼성그
린맨)

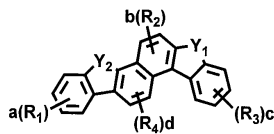
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Y_1 및 Y_2 은 각각 독립적으로 NR_{11} , $CR_{12}R_{13}$, O, 또는 S이고;

단, Y_1 및 Y_2 중 적어도 하나는 NR_{11} 이며;

R_{11} 은 $*-L_1-Ar$ 이고;

*는 연결 부위를 표시하고;

L_1 은 단일 결합, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환 (5-30원) 헤테로아릴렌이며;

Ar 은 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환 (5-30원)헤테로아릴이고;

R_{12} 및 R_{13} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환 (5-30원) 헤테로아릴이거나; 서로 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환의 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

R_1 및 R_3 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 서로 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환의 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

R_2 및 R_4 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환 (5-30원) 헤테로아릴, 치환 또는 비치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이며;

a 및 c 은 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 또는 c 가 2 이상인 경우 각각의 R_1 또는 R_3 은 동일하거나 상이할 수 있으며;

b 및 d 는 각각 독립적으로 1 내지 2의 정수이고, b 또는 d 가 2 이상인 경우 각각의 R_2 또는 R_4 는 동일하거나 상이할 수 있고;

상기 헤테로아릴(렌) 및 헤테로시클로알킬은 각각 독립적으로 B, N, O, S, Si, 및 P로 부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 L_1 , Ar, R_{12} , R_{13} , 및 R_1 내지 R_4 에서 치환 알킬, 치환 아릴(렌), 치환 헤테로아릴(렌), 치환 시클로알킬, 치환 헤테로시클로알킬, 치환 알콕시, 치환 트리알킬실릴, 치환 트리아릴실릴, 치환 디알킬아릴실릴, 치환 알킬디아릴실릴, 치환 모노- 또는 디-알킬아미노, 치환 모노- 또는 디-아릴아미노, 치환 알킬아릴아미노, 및 치환의 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리의 치환체는, 각각 독립적으로, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (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 이상인 유기 전계 발광 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 Y_1 및 Y_2 중 적어도 하나는 상기 L_1 이 단일 결합 또는 치환 또는 비치환 (C6-C21)아릴렌이고, 상기 Ar이 치환 또는 비치환 (5-30원)헤테로아릴인 NR_{11} 인 유기 전계 발광 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서, 상기 Y_1 및 Y_2 중 하나는 NR_{11a} 이고, 다른 하나는 NR_{11b} , $CR_{12}R_{13}$, O, 또는 S이고;

R_{11a} 는 *- L_{1a} -Ar_a이고, R_{11b} 는 *- L_{1b} -Ar_b이고;

상기 L_{1a} 및 L_{1b} 는 각각 독립적으로 단일 결합 또는 치환 또는 비치환 (C6-C21)아릴렌이고;

상기 Ar_a는 치환 또는 비치환 (5-30원)헤테로아릴이고;

상기 Ar_b는 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴이고;

상기 R_{12} 및 R_{13} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환 (C6-C21)아릴, 또는 치환 또는 비치환 (5-21원) 헤테로아릴이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환의 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있는 유기 전계 발광 화합물.

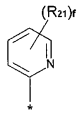
청구항 5

제4항에 있어서, 상기 L_{1a} 는 단일 결합, 치환 또는 비치환 페닐렌, 치환 또는 비치환 비페닐렌, 또는 치환 또는 비치환 나프틸렌이고; 상기 Ar_a는 치환 또는 비치환 피리딜, 치환 또는 비치환 피리미딘일, 치환 또는 비치환 트리아진일, 치환 또는 비치환 피라진일, 치환 또는 비치환 퀴놀릴, 치환 또는 비치환 이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환 퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환 나프틸리딘일, 치환 또는 비치환 카바졸릴, 치환 또는 비치환 디벤조티오펜일, 또는 치환 또는 비치환 디벤조푸란일인 유기 전계 발광 화합물.

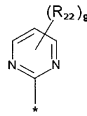
청구항 6

제5항에 있어서, 상기 Ar_a 는 하기 화학식 2-1 내지 2-7 중에서 선택되는 유기 전계 발광 화합물.

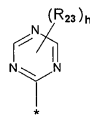
[화학식 2-1]



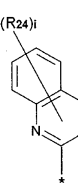
[화학식 2-2]



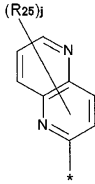
[화학식 2-3]



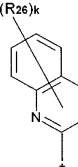
[화학식 2-4]



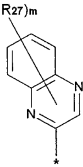
[화학식 2-5]



[화학식 2-6]



[화학식 2-7]



상기 화학식 2-1 내지 2-7에서,

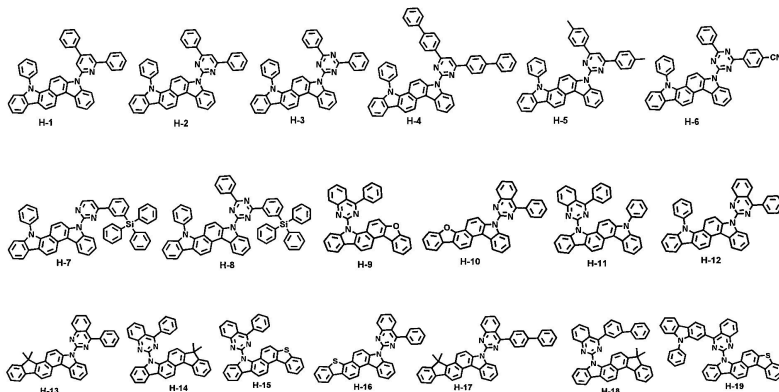
R_{21} 내지 R_{27} 은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠; 시아노; (C1-C30)알킬; (C3-C30)시클로알킬; 할로젠, 시아노, (C1-C30)알킬, (5-18원)헤테로아릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 또는 트리(C6-C30)아릴실릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴; 할로젠, 시아노, (C1-C30)알킬, (C6-C18)아릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 또는 트리(C6-C30)아릴실릴로 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴; 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴; (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴; 또는 트리(C6-C30)아릴실릴이고;

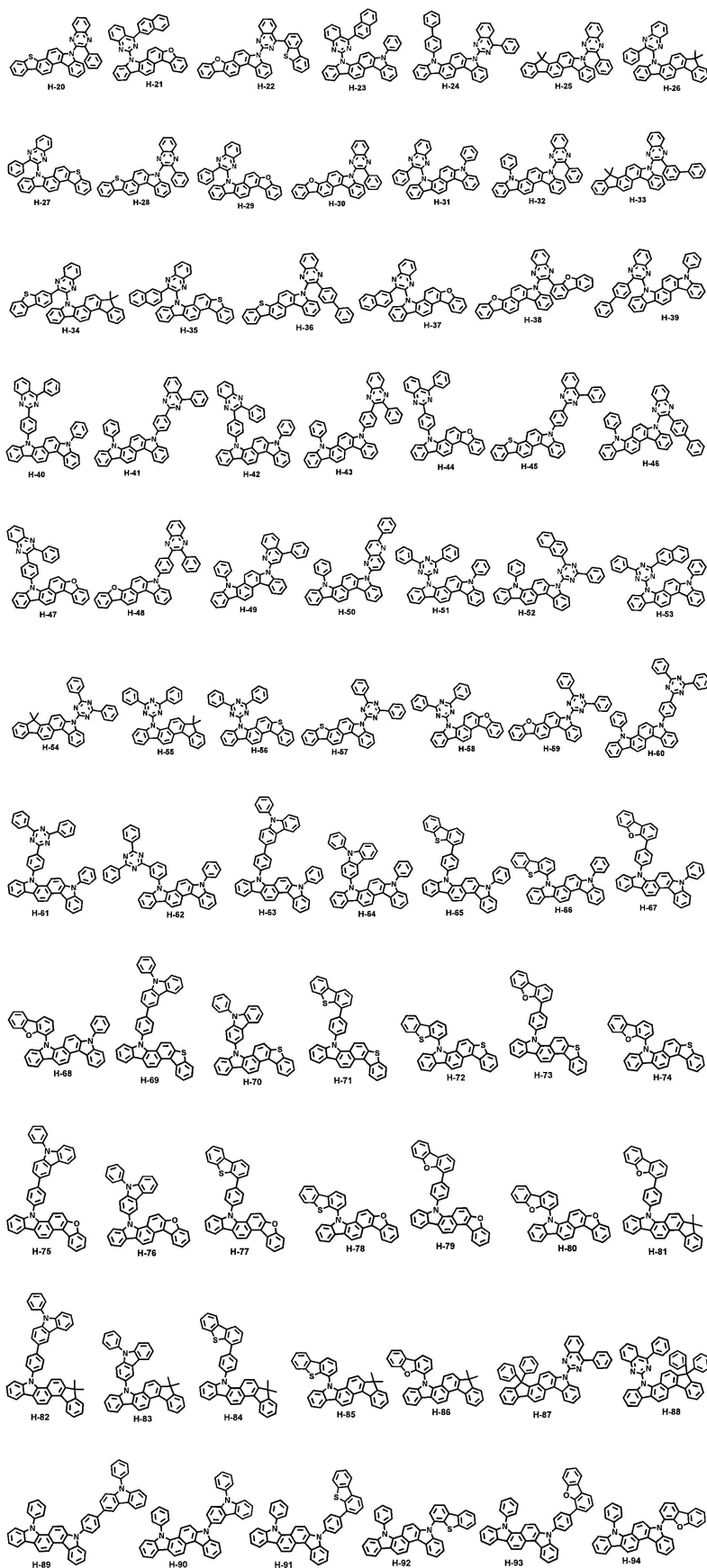
f 는 1 내지 4의 정수이고; g 는 1 내지 3의 정수이고; h 는 1 또는 2의 정수이고; i 는 1 내지 6의 정수이고; j , k 및 m 은 각각 독립적으로 1 내지 5의 정수이고; f , g , h , i , j , k , 또는 m 이 2 이상의 정수일 경우, 각각의 R_{21} , R_{22} , R_{23} , R_{24} , R_{25} , R_{26} , 또는 R_{27} 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

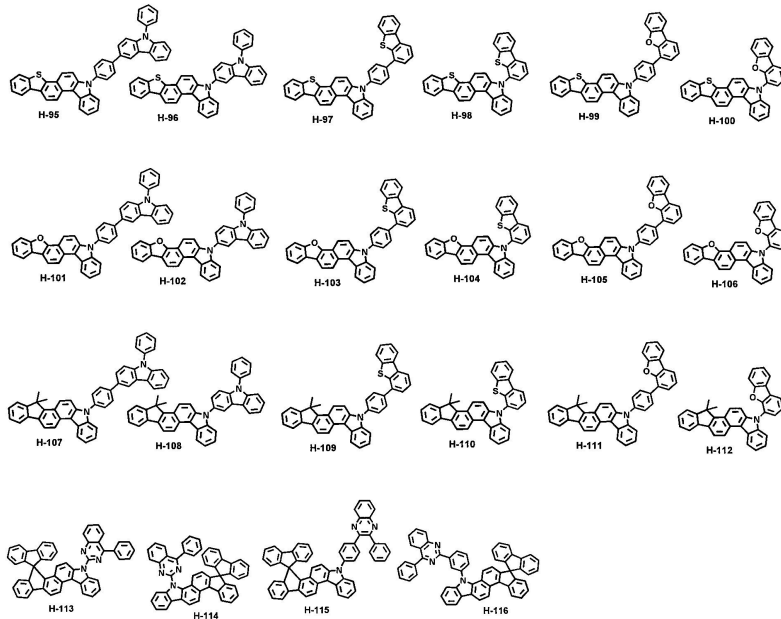
상기 헤테로아릴은 N, O, 및 S로 부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

청구항 7

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







청구항 8

제1항에 기재된 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

[0002] 표시 소자 중, 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 소자에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재까지 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 전계 발광의 메커니즘상 형광 발광 재료에 비해 인광 발광 재료가 이론적으로 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있다는 점에서 인광 발광 재료의 개발 연구가 널리 수행되고 있다. 현재까지 이리듐(III)착물 계열이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 각 RGB 별로는 비스(2-(2'-벤조티에닐)-피리디네이트-N,C-3')이리듐(아세틸아세토네이트) [(acac)Ir(btp)₂], 트리스(2-페닐피리딘)이리듐 [Ir(ppy)₃] 및 비스(4,6-디플루오로페닐피리디네이트-N,C2)피콜리네이트이리듐 (Firpic) 등의 재료가 알려져 있다.

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

[0005] 그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 다음과 같은 단점이 있다: (1) 유리 전이 온도가 낮고 열적 안정성이 낮아서, 진공 하에서 고온 증착 공정을 거칠 때, 물질이 변한다. (2) 유기 전계 발광 소자에서 전력효율 = [(π /전압) $\times$ 전류효율]의 관계에 있으므로 전력 효율은 전압에 반비례하는데, 인광용 호스트 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자는 형광 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자에 비해 전류 효율(cd/A)은 높으나, 구동 전압 역시 상당히 높기 때문에 전력 효율(lm/w) 면에서 큰 이점이 없다. (3) 또한, 유기 전계 발광 소자에 사용할 경우, 작동 수명 측면에서도 만족스럽지 못하며, 발광 효율도 여전히 개선이 요구된다.

[0006] 한국 공개특허공보 제10-2013-0059265호는 카바졸의 벤젠 고리에 벤조티오펜, 벤조푸란 등이 융합된 구조의 골격(backbone)을 갖는 화합물을 유기 전계 발광 소자용 화합물로서 개시한다. 그러나, 상기 문헌은 카바졸의 벤젠 고리와, 디벤조티오펜, 디벤조푸란, 플루오렌, 또는 카바졸의 벤젠 고리가 서로 융합된 구조의 골격을 갖는 화합물은 개시하지 않는다.

[0007] [선행기술분헌]

[0008] [특허문헌]

[0009] (특허문헌 1) 한국 공개특허공보 제10-2013-0059265호 (2013.06.05. 공개)

발명의 내용

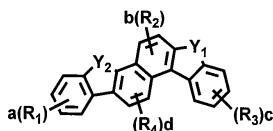
해결하려는 과제

[0010] 본 발명의 목적은 첫째로 발광 효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며, 둘째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0011] 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.

[0012] [화학식 1]



[0013]

[0014] 상기 화학식 1에서,

[0015] Y₁ 및 Y₂은 각각 독립적으로 NR₁₁, CR₁₂R₁₃, O, 또는 S이고;

[0016] 단, Y₁ 및 Y₂ 중 적어도 하나는 NR₁₁이며;

[0017] R₁₁은 *-L₁-Ar 이고;

[0018] *는 연결 부위를 표시하고;

[0019] L₁은 단일 결합, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환 (5-30원) 헤테로아릴렌이며;

[0020] Ar은 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환 (5-30원)헤테로아릴이고;

[0021] R₁₂ 및 R₁₃는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환 (5-30원) 헤테로아릴이거나; 서로 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환의 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환측 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환측 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

[0022] R₁ 및 R₃은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 서로 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환의 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환측 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환측 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

[0023] R_2 및 R_4 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환 (5-30원) 헤테로아릴, 치환 또는 비치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이며;

[0024] a 및 c은 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 또는 c가 2 이상인 경우 각각의 R_1 또는 R_3 은 동일하거나 상이할 수 있으며;

[0025] b 및 d는 각각 독립적으로 1 내지 2의 정수이고, b 또는 d가 2 이상인 경우 각각의 R_2 또는 R_4 는 동일하거나 상이할 수 있고;

[0026] 상기 헤테로아릴(렌) 및 헤테로시클로알킬은 각각 독립적으로 B, N, O, S, Si, 및 P로 부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

발명의 효과

[0027] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 발광 효율, 특히 전류 효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 유기 전계 발광 화합물을 제조할 수 있는 장점이 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0028] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.

[0029] 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물, 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

[0030] 본 발명의 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

[0031] 본 발명에 기재되어 있는 "알킬"의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸 등이 있다. 본원에서 "알케닐"의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "알키닐"의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "시클로알킬"의 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, 테트라히드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 등이 있다. 본원에서 "아릴(렌)"은 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 하나의 원자를 통해 2개의 고리가 연결된 스피로 화합물도 포함한다. 상기 아릴의 예로서 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페틸레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 스피로비플루오레닐 등이 있다. 본원에서 "(5-30원) 헤테로아릴(렌)"은 환 골격 원자수가 5 내지 30개이고, B, N, O, S, Si, 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴(렌)은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 나프틸리딘일, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로젠"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0032]

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. 본 발명에서, L_1 , L_{1a} , L_{1b} , L_4 , M , Ar , Ar_a , Ar_b , R_1 내지 R_4 , R_{12} , R_{13} , R_{31} 내지 R_{37} , R_{41} 내지 R_{43} , R_{100} 내지 R_{109} , R_{111} 내지 R_{127} 및 R_{201} 내지 R_{211} 에서 치환 알킬, 치환 아릴(렌), 치환 헤테로아릴(렌), 치환 시클로알킬, 치환 헤테로시클로알킬, 치환 알콕시, 치환 트리알킬실릴, 치환 트리알킬실릴, 치환 디알킬아릴실릴, 치환 알킬디아릴실릴, 치환 모노- 또는 디-알킬아미노, 치환 모노- 또는 디-아릴아미노, 치환 알킬아릴아미노, 및 치환의 단일환 또는 다환의 치환측 또는 방향족 고리의 치환체는, 각각 독립적으로, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (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 이상이다.

[0033]

상기 화학식 1에서, 바람직하게는, 상기 Y_1 및 Y_2 중 적어도 하나는 상기 L_1 이 단일 결합 또는 치환 또는 비치환 (C6-C21)아릴렌이고, 상기 Ar 이 치환 또는 비치환 (5-30원)헤테로아릴인 NR_{11} 일 수 있다. 상기 L_1 은 구체적으로는 단일 결합, 치환 또는 비치환 페닐렌, 치환 또는 비치환 비페닐렌, 또는 치환 또는 비치환 나프틸렌일 수 있다. 상기 Ar 이 치환 또는 비치환 헤테로아릴일 경우, Ar 은 구체적으로는 치환 또는 비치환 피리딜, 치환 또는 비치환 피리미딘일, 치환 또는 비치환 트리아진일, 치환 또는 비치환 피라진일, 치환 또는 비치환 퀴놀릴, 치환 또는 비치환 이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환 퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환 나프틸리딘일, 치환 또는 비치환 카바졸릴, 치환 또는 비치환 디벤조티오펜일, 또는 치환 또는 비치환 디벤조푸란일 일 수 있다.

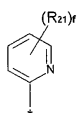
[0034]

바람직하게는, 상기 Y_1 및 Y_2 중 하나는 NR_{11a} 이고, 다른 하나는 NR_{11b} , $CR_{12}R_{13}$, 0, 또는 S일 수 있고; R_{11a} 는 *- L_{1a} - Ar_a 이고, R_{11b} 는 *- L_{1b} - Ar_b 이고; L_{1a} 및 L_{1b} 는 각각 독립적으로 단일 결합 또는 치환 또는 비치환 (C6-C21)아릴렌이고; Ar_a 는 치환 또는 비치환 (5-30원)헤테로아릴이고; Ar_b 는 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴이고; R_{12} 및 R_{13} 은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다. 상기 L_{1a} 및 L_{1b} 는 각각 독립적으로 구체적으로는 단일 결합, 치환 또는 비치환 페닐렌, 치환 또는 비치환 비페닐렌, 또는 치환 또는 비치환 나프틸렌일 수 있다. 상기 Ar_a 는 바람직하게는 치환 또는 비치환 질소 함유 (5-21원)헤테로아릴일 수 있다. 상기 Ar_a 는 구체적으로는 치환 또는 비치환 피리딜, 치환 또는 비치환 피리미딘일, 치환 또는 비치환 트리아진일, 치환 또는 비치환 피라진일, 치환 또는 비치환 퀴놀릴, 치환 또는 비치환 이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환 퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환 나프틸리딘일, 치환 또는 비치환 카바졸릴, 치환 또는 비치환 디벤조티오펜일, 또는 치환 또는 비치환 디벤조푸란일일 수 있다. 상기 Ar_b 는 구체적으로는 치환 또는 비치환 페닐, 치환 또는 비치환 비페닐, 또는 치환 또는 비치환 나프틸일 수 있다.

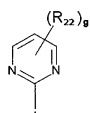
[0035]

보다 구체적으로는, 상기 Ar 및 Ar_a 는 각각 독립적으로 하기 화학식 2-1 내지 2-7 중에서 선택될 수 있다.

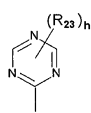
[화학식 2-1]



[화학식 2-2]

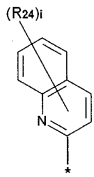


[화학식 2-3]

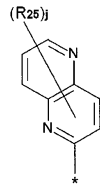


[0036]

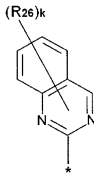
[화학식 2-4]



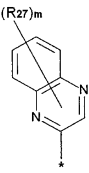
[화학식 2-5]



[화학식 2-6]



[화학식 2-7]



상기 화학식 2-1 내지 2-7에서,

R_{21} 내지 R_{27} 은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠; 시아노; (C1-C30)알킬; (C3-C30)시클로알킬; 할로젠, 시아노, (C1-C30)알킬, (5-18원)헤테로아릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 또는 트리(C6-C30)아릴실릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴; 할로젠, 시아노, (C1-C30)알킬, (C6-C18)아릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 또는 트리(C6-C30)아릴실릴로 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴; 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴; (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴; 또는 트리(C6-C30)아릴실릴이고;

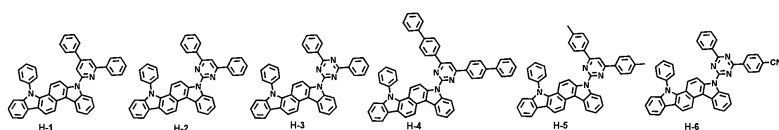
f 는 1 내지 4의 정수이고; g 는 1 내지 3의 정수이고; h 는 1 또는 2의 정수이고; i 는 1 내지 6의 정수이고; j , k 및 m 은 각각 독립적으로 1 내지 5의 정수이고; f , g , h , i , j , k , 또는 m 이 2 이상의 정수일 경우, 각각의 R_{21} , R_{22} , R_{23} , R_{24} , R_{25} , 또는 R_{27} 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

상기 헤테로아릴은 N, O, 및 S로 부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

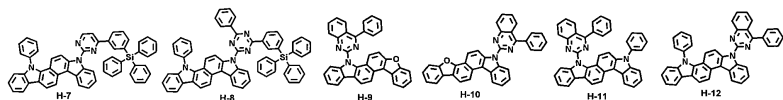
바람직하게는, 상기 R_{12} 및 R_{13} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환 (C6-C21)아릴, 또는 치환 또는 비치환 (5-21원) 헤테로아릴이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환의 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고; 더 바람직하게는, 치환 또는 비치환 (C1-C10)알킬 또는 치환 또는 비치환 (C6-C18)아릴이거나 $CR_{12}R_{13}$ 의 C와 함께 치환 또는 비치환의 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있다. 구체적으로는, 상기 R_{12} 및 R_{13} 는 각각 독립적으로 비치환 (C1-C10)알킬 또는 비치환 페닐이거나, $CR_{12}R_{13}$ 의 C와 함께 플루오렌을 형성할 수 있다.

본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 Y_1 및 Y_2 중 하나는 NR_{11a} 이고, 다른 하나는 NR_{11b} , $CR_{12}R_{13}$, O, 또는 S이고; R_{11a} 는 $*-L_{1a}-Ar_a$ 이고, R_{11b} 는 $*-L_{1b}-Ar_b$ 이고; 상기 L_{1a} 및 L_{1b} 는 각각 독립적으로 단일 결합 또는 치환 또는 비치환 (C6-C21)아릴렌이고; 상기 Ar_a 는 치환 또는 비치환 (5-30원)헤테로아릴이고; 상기 Ar_b 는 치환 또는 비치환 (C6-C30)아릴이고; 상기 R_{12} 및 R_{13} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환 (C6-C21)아릴, 또는 치환 또는 비치환 (5-21원) 헤테로아릴이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환의 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있다.

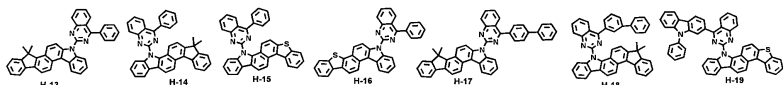
본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



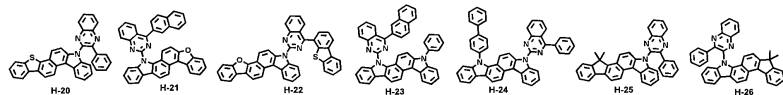
[0047]



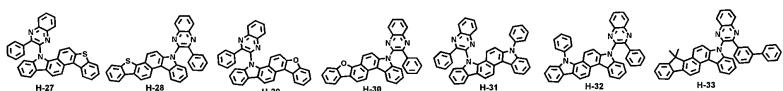
[0048]



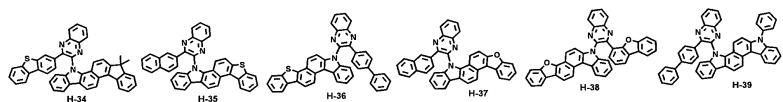
[0049]



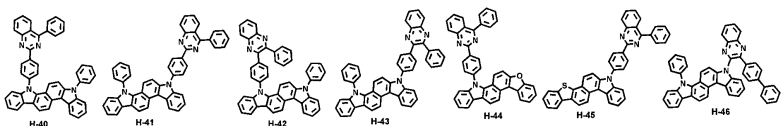
[0050]



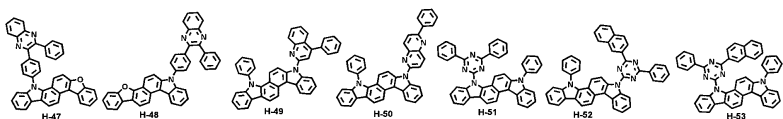
[0051]



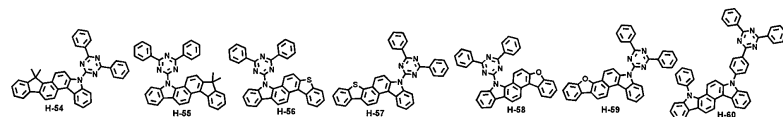
[0052]



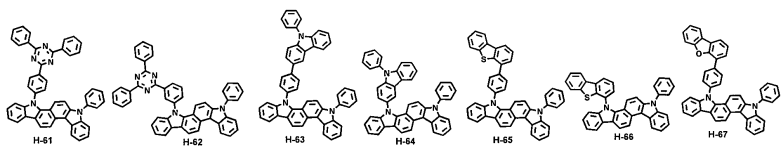
[0053]



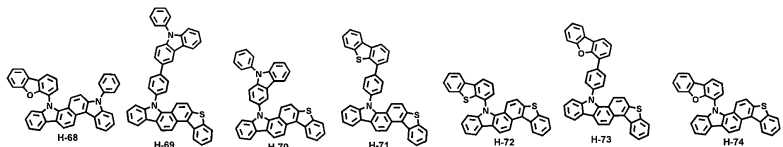
[0054]



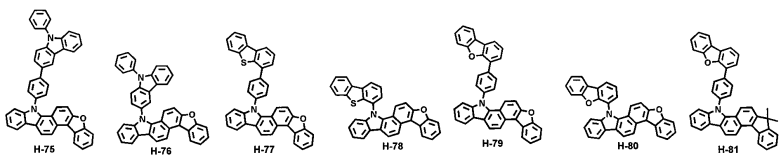
[0055]

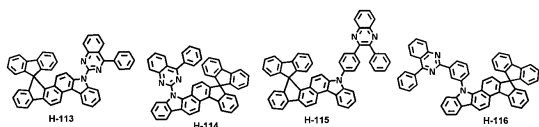
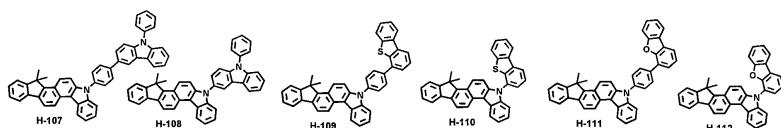
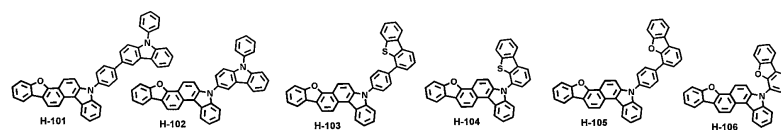
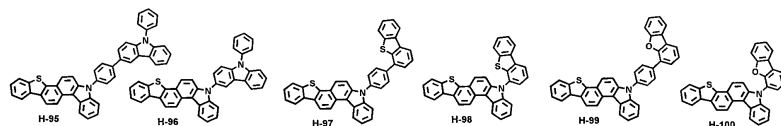
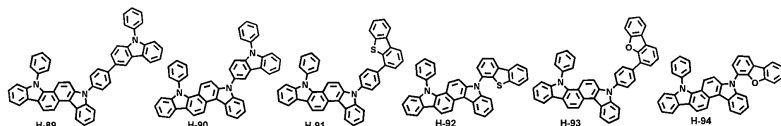
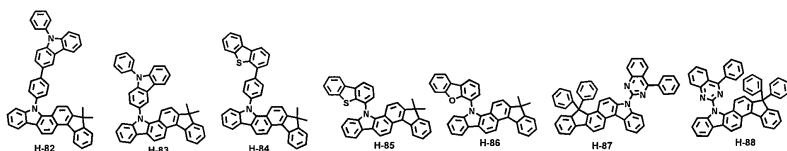


[0056]



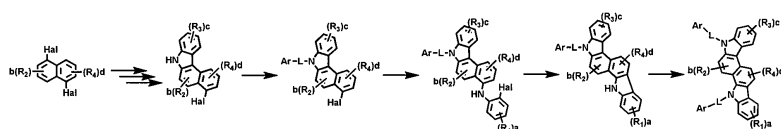
[0057]



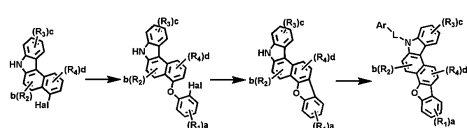


본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식 1 내지 4에 나타난 바와 같이 제조할 수 있다.

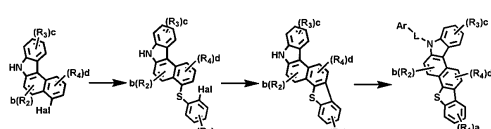
[반응식 1]



[반응식 2]



[반응식 3]





[0074] 또한, 본 발명은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

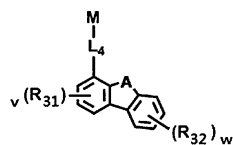
[0076] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖고, 상기 유기물층은 상기 화합식 1의 유기 전계 발광 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다.

[0078] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다. 발광층에 사용되는 경우, 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는 상기 발광층은 하나 이상의 도펀트를 추가로 더 포함할 수 있으며, 필요한 경우, 본 발명의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다. 상기 제2호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하다. 본 발명의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물과 제2호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위일 수 있다.

[0080] [화학식 11]



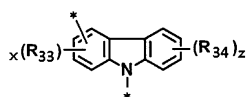
[0088] [화학식 15]



[0089]

[0090] 상기 화학식 11 내지 15에서,

[0091] Cz는 하기 구조이며,

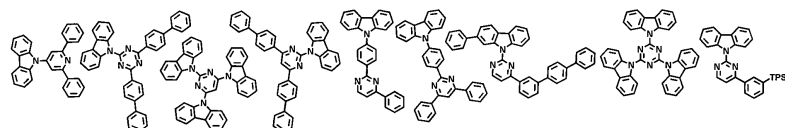


[0092]

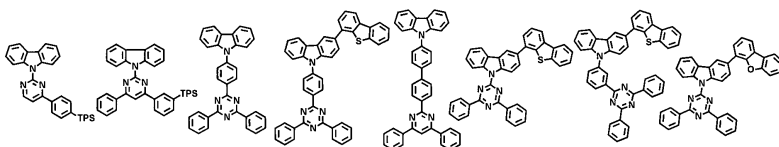
[0093] A는 -O- 또는 -S-이고;

[0094] R₃₁ 내지 R₃₄는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴 또는 -SiR₃₅R₃₆R₃₇이며, R₃₅ 내지 R₃₇는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; L₄은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고; M은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며; Y₃ 및 Y₄는 -O-, -S-, -N(R₄₁)-, 또는 -C(R₄₂)(R₄₃)- 이고, Y₃과 Y₄가 동시에 존재하지는 않으며; R₄₁ 내지 R₄₃은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, R₄₂ 및 R₄₃은 동일하거나 상이할 수 있으며; t 및 u는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, v, w, x 및 z는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, t, u, v, w, x, 또는 y가 2 이상의 정수인 경우 각각의 (Cz-L₄), 각각의 (Cz), 각각의 R₃₁, 각각의 R₃₂, 각각의 R₃₃ 또는 각각의 R₃₄는 동일하거나 상이할 수 있다.

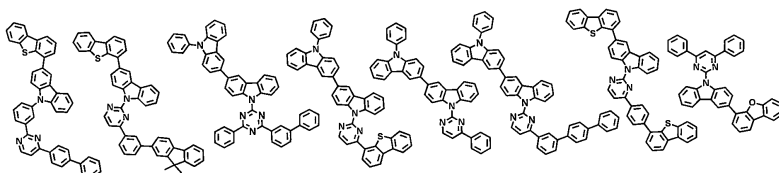
[0095] 구체적으로 상기 제2 호스트 재료는 하기 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



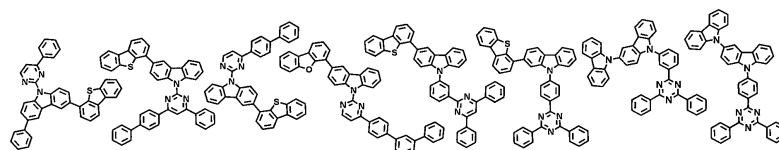
[0096]



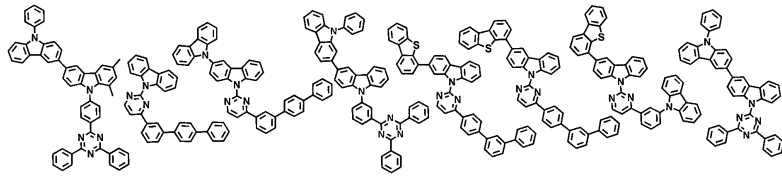
[0097]



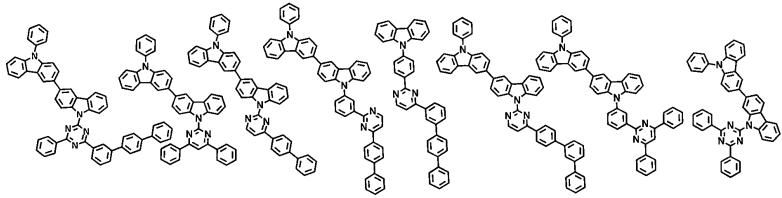
[0098]



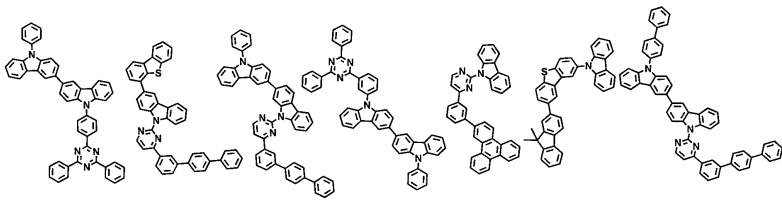
[0099]



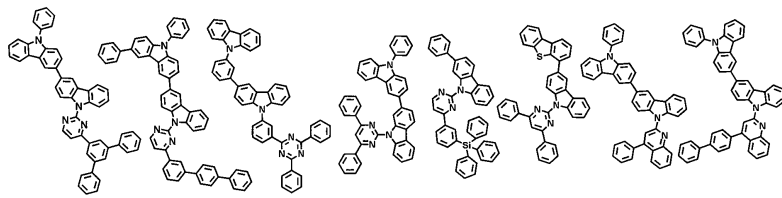
[0100]



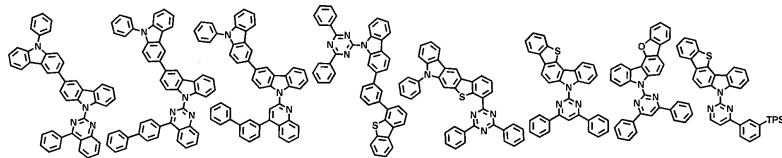
[0101]



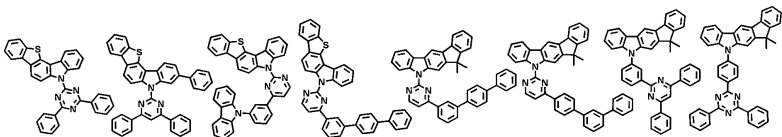
[0102]



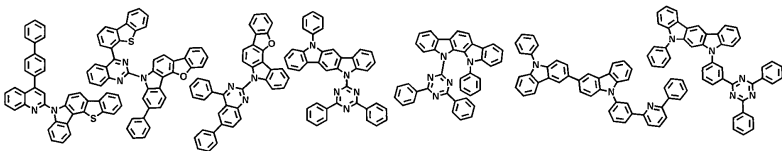
[0103]



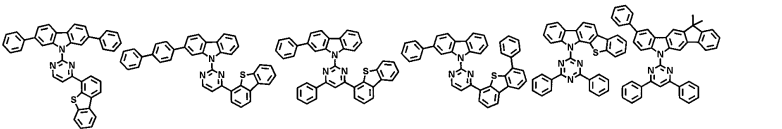
[0104]



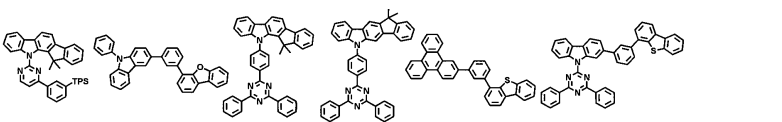
[0105]



[0106]



[0107]

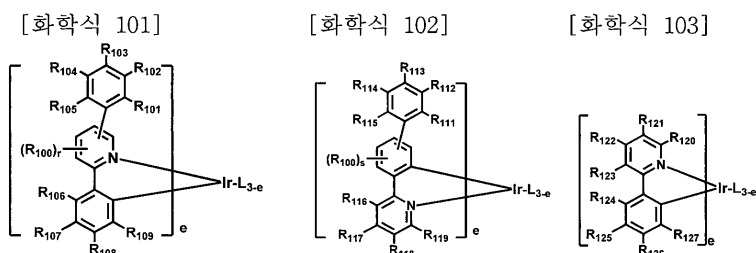


[0108]

[0109] [여기서, TPS는 트리페닐실릴(triphenylsilyl)기이다.]

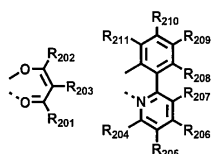
[0110] 상기 도판트로는 하나 이상의 인광 도판트가 바람직하다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물이 바람직하고, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물이 더욱 바람직하며, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물이 더더욱 바람직하다.

[0111] 상기 인광 도판트는 하기 화학식 101 내지 화학식 103으로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.



[0112]

[0113] 상기 화학식 101 내지 103에서, L은 하기 구조에서 선택되고;



[0114]

[0115] R₁₀₀은 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이며;

[0116] R₁₀₁ 내지 R₁₀₉ 및 R₁₁₁ 내지 R₁₂₃은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; R₁₀₆ 내지 R₁₀₉는 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며; R₁₂₀ 내지 R₁₂₃는 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬 또는 아릴로 치환 또는 비치환된 퀴놀린 형성이 가능하며;

[0117] R₁₂₄ 내지 R₁₂₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; R₁₂₄ 내지 R₁₂₇은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

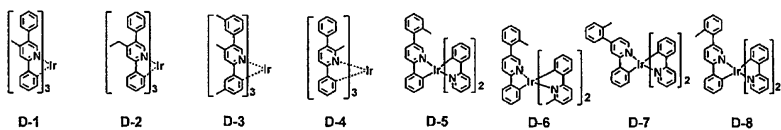
[0118] R₂₀₁ 내지 R₂₁₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고, R₂₀₈ 내지 R₂₁₁은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

[0119] r 및 s는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며; r 또는 s가 각각 2 이상의 정수인 경우 각각의 R₁₀₀은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

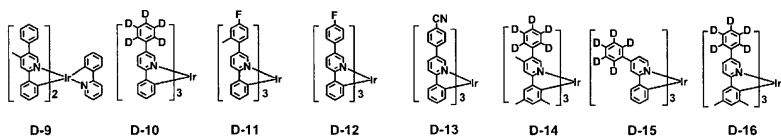
[0120] e는 1 내지 3의 정수이다.

[0121] 구체적으로, 상기 인광 도판트 재료는 하기 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

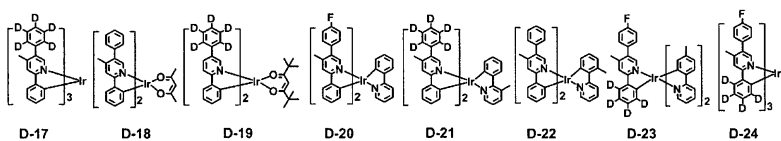
[0122]



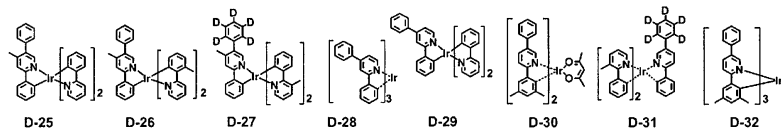
[0123]



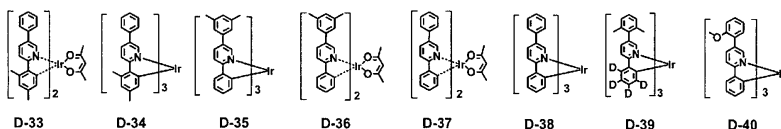
[0124]



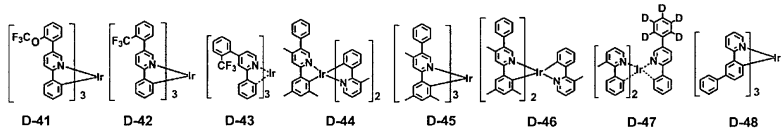
[0125]



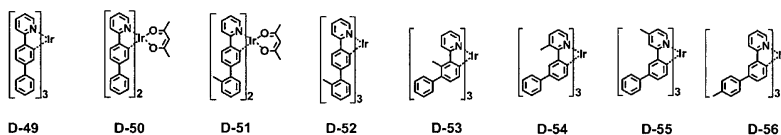
[0126]



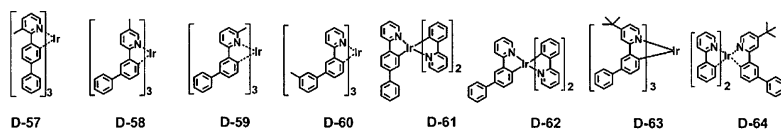
[0127]



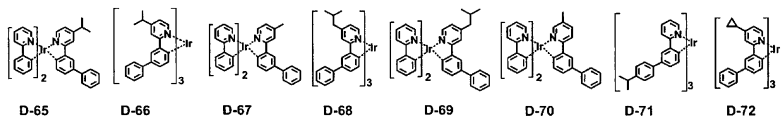
[0128]



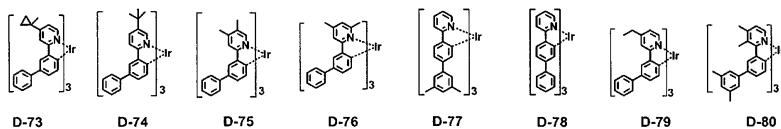
[0129]

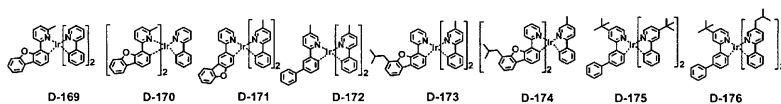
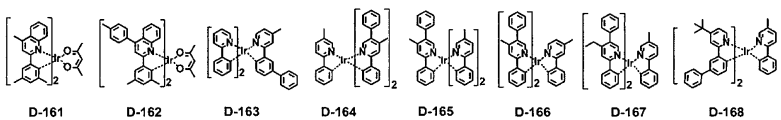
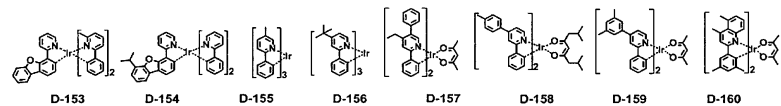
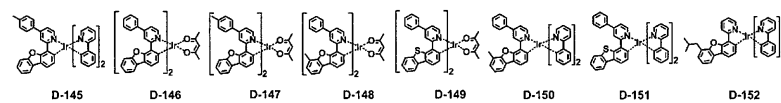
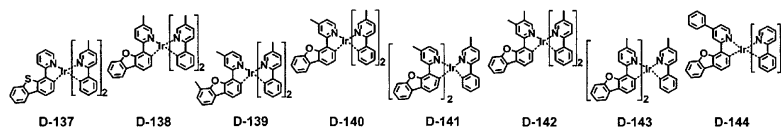
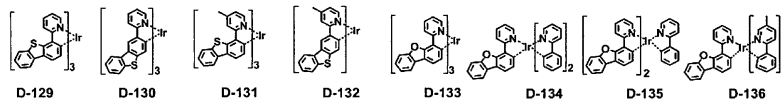
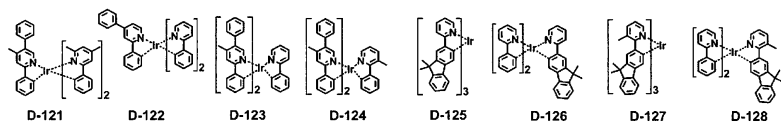
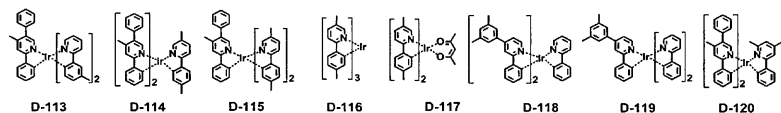
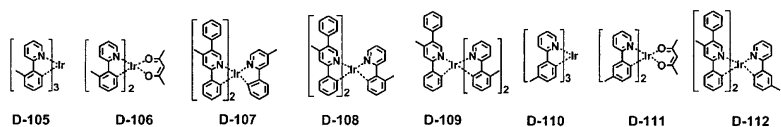
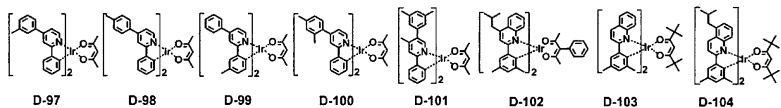
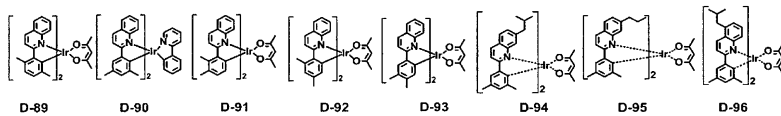
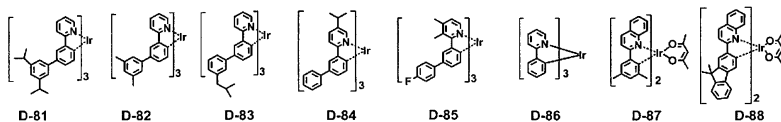


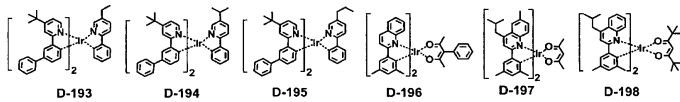
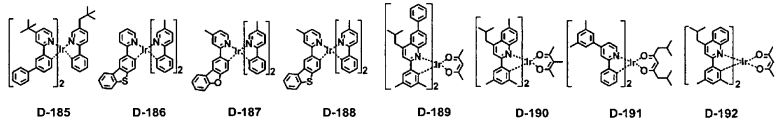
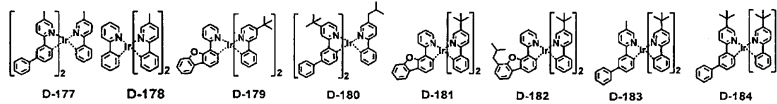
[0130]



[0131]







본 발명은 추가의 양태로 유기 전계 발광 소자 제조용 혼합물 또는 조성물을 제공한다. 상기 혼합물 또는 조성물은 본 발명의 화합물을 포함한다. 상기 혼합물 또는 조성물은 유기 전계 발광 소자의 발광층 제조용 혼합물 또는 조성물일 수 있다. 상기 유기 전계 발광 소자의 발광층 제조용 혼합물 또는 조성물은 인광 또는 형광 발광층 제조용 혼합물 또는 조성물일 수 있다. 본 발명의 화합물이 상기 혼합물 또는 조성물에 포함될 경우, 본 발명의 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 본 발명의 화합물이 호스트 재료로 포함될 경우 상기 혼합물 또는 조성물은 제2 호스트 재료를 추가로 포함할 수 있다. 본 발명의 화합물과 상기 제2호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위일 수 있다.

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 가지며, 상기 유기물층은 본 발명의 유기 전계 발광 소자용 재료를 포함할 수 있다.

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

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1의 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타넘 계열 금속 및 d-전이 원소의 유기 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 착체 화합물을 더 포함할 수도 있고, 나아가 상기 유기물층은 추가로 포함되는 하나 이상의 발광층 및 전하생성층을 더 포함할 수 있다.

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.

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측 표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 1층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함) 이상을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 금속의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광매체층 측의 음극 표면에 할로젠화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 이것에 의해 구동의 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 SiO_x ($1 \leq x \leq 2$), AlO_x ($1 \leq x \leq 1.5$), SiON 또는 SiAlON 등이 있고, 할로젠화 금속의 바람직한 예로는 LiF , MgF_2 , CaF_2 , 불화 회토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등이 있다.

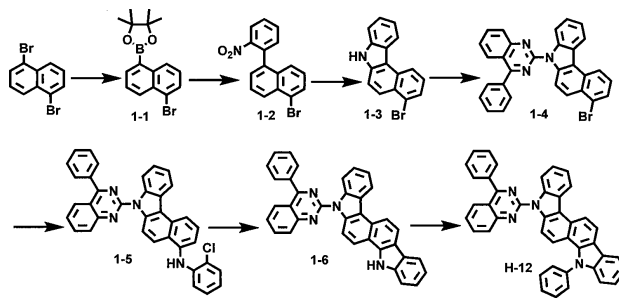
또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 이렇게 제조된 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 액셉터(acceptor)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

[0154] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막 법이나 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

[0155] 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.

[0156] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광특성을 설명한다.

[0157] [실시예 1] 화합물 H-12의 제조



[0158]

[0159] 화합물 1-1의 제조

[0160] 1,5-디브로모나프탈렌 (65g, 209.8 mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-옥타메틸-2,2'-비(1,3,2-디옥사보롤란) (53g, 209.5 mmol), 칼륨 아세테이트(KOAc) (65g, 618 mmol), 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 [Pd(PPh₃)₄] (15g, 20.9 mmol)을 테트라하이드로푸란(THF) (500 mL)으로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 **화합물 1-1** (57g, 수율: 81%)을 얻었다.

[0161] 화합물 1-2의 제조

[0162] 화합물 **1-1** (56g, 167.8 mmol), 1-브로모-2-니트로벤젠 (34g, 167.8 mmol), Pd(PPh₃)₄ (10g, 8.3 mmol), 및 2M Na₂CO₃ (250mL)을 톨루엔 (500mL), 에탄올 (250mL)으로 녹인 후 120℃에서 5시간 동안 환류시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-2** (50g, 수율: 88%)을 얻었다.

[0163] 화합물 1-3의 제조

[0164] 화합물 **1-2** (17.7g, 54 mmol), 트리페닐포스핀 (28.5g, 108 mmol)을 디클로로벤젠(DCB) (300mL)에 녹이고, 24시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료후 상온으로 식히고 진공 증류하고, 메탄올(MeOH)을 넣고, 생성된 고체를 감압 여과하고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-3** (10g, 수율: 75%)을 얻었다.

[0165] 화합물 1-4의 제조

[0166] 250mL 반응 플라스크에 화합물 **1-3** (2.7g, 11.0 mmol), 2-클로로-4-페닐퀴나졸린 (3.1g, 13.2 mmol), 수소화나트륨 (0.53g, 22.0 mmol)을 넣고 상온에서 5시간 동안 교반하였다. 반응 종료후, MeOH, H₂O를 넣는다. 생성된 고체를 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 **화합물 1-4** (4 g, 수율: 77%)을 얻었다.

[0167] 화합물 1-5의 제조

[0168] 화합물 **1-4** (8g, 17.1 mmol), 2-클로로아닐린 (2.6g, 20.5 mmol), 팔라듐 아세테이트 [Pd(OAc)₂] (0.2g, 0.86 mmol), 소듐 tert-부톡사이드(NaOtBu) (5g, 51.3 mmol), P(t-Bu)₃ (5.1g, 20.5 mmol)를 톨루엔 (100mL)에 녹이고 24시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료후 상온으로 식히고 진공 증류하고, MeOH를 넣고, 생성된 고체를 감압 여과하고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-5** (8g, 수율: 88%)을 얻었다.

[0169]

화합물 1-6의 제조

[0170]

화합물 **1-5** (8g, 15 mmol), 트리시클로헥실 포스포늄 테트라플루오로보레이트 (0.6g, 1.5 mmol), Cs₂CO₃ (15g, 45 mmol), Pd(OAc)₂ (0.2g, 0.75 mmol)를 디메틸아세트아미드(DMA) (50mL)에 녹이고, 4시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료후 상온으로 식히고, MeOH를 넣고, 생성된 고체를 감압 여과하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-6** (8g, 수율: 65%)을 얻었다.

[0171]

화합물 H-12의 제조

[0172]

화합물 **1-6** (2.3g, 4.5 mmol), 요오도벤젠 (1.4g, 6.75 mmol), K₃PO₄ (3g, 13.5 mmol), CuI (0.5g, 2.3 mmol), 에틸렌디아민(EDA) (0.3mL, 4.5 mmol)를 톨루엔 (50mL)에 녹이고 4시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료후 상온으로 식히고, MeOH를 넣고, 생성된 고체를 감압 여과하고, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **H-12** (2g, 수율: 75%)을 얻었다.

[0173]

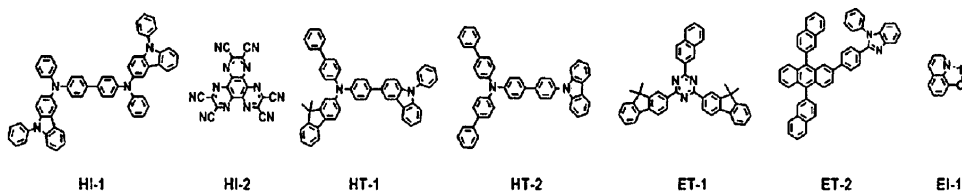
물성데이터: 융점(mp) 309℃, UV 391nm(톨루엔 중에서), PL 527nm(톨루엔 중에서), MS/EIMS 586.08

[0174]

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

[0175]

본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조) 상의 투명 전극 ITO 박막(10Ω/□)을 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기관 홀더에 ITO기관을 장착한 후, 진공 증착장비 내의 셀에 **HI-1**을 넣고 챔버 내의 진공도가 10⁻⁶ torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기관 위에 80nm 두께의 제1 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 **HI-2**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5nm 두께의 제 2 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 셀에 **HT-1**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10nm 두께의 제1 정공전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 **HT-2**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 60nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착하였다. 정공주입층, 정공전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀에 호스트로서 화합물 **H-12**를 넣고, 또 다른 셀에는 **D-96**을 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 정공 전달층 위에 40nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 **ET-1**과 **EI-1**을 1:1의 속도로 증발시켜 발광층 위에 30nm 두께의 전자전달층을 증착하였다. 이어서, 전자주입층으로 **EI-1**를 2nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착장비를 이용하여 Al 음극을 80nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다. 그 결과, 1000nit의 휘도에서 10.4cd/A의 효율이 나오는 적색 발광이 확인되었다.



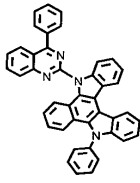
[0176]

[0177]

[비교예 1] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조

[0178]

발광층의 호스트 재료로서 하기 비교 화합물-1을 사용하고, 전자전달층에서 ET-1 대신 **ET-2**를 사용한 것 외에는 실시예1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다. 그 결과, 1000nit의 휘도에서 8.8cd/A의 효율이 나오는 적색 발광이 확인되었다.



비교 화합물-1

[0179]

[0180]

본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 종래의 유기 전계 발광 화합물과 대비하여 발광 효율, 특히 전류 효율이 우수하다는 것이 상기 소자 실시예와 비교예로부터 확인되었다.

专利名称(译)	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	KR1020160007393A	公开(公告)日	2016-01-20
申请号	KR1020150096899	申请日	2015-07-08
[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 MI JA 이미자 KIM BITNARI 김빛나리 KIM NAM KYUN 김남균 KANG HEE RYONG 강희룡		
发明人	이미자 김빛나리 김남균 강희룡		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 C07D403/04 C07D487/04 H01L51/50		
CPC分类号	C07D403/04 C07D403/10 C07D405/04 C07D405/10 C07D409/04 C07D409/10 C07D409/14 C07D487/04 C07D491/048 C07D495/04 C07D519/00 C07F7/0812 C09K11/025 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1029 C09K2211/1088 C09K2211/1092 C09K2211/185 H01L51/0072 H01L51/0085 H01L51/5016 H05B33/14 H05B33/22		
代理人(译)	李昌勋		
优先权	1020140086690 2014-07-10 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及由化学式1表示的有机电致发光化合物。本发明还涉及包含该有机电致发光化合物的有机电致发光器件。通过使用本发明的有机电致发光化合物，可以制造具有改善的发光效率，特别是电流效率的有机电致发光器件。

