



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2012-0083203
 (43) 공개일자 2012년07월25일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) **H05B 33/14** (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2011-0104825
 (22) 출원일자 2011년10월13일
 심사청구일자 없음
 (30) 우선권주장
 1020110004523 2011년01월17일 대한민국(KR)

(71) 출원인
삼성모바일디스플레이주식회사
 경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
에스에프씨 주식회사
 충청북도 청원군 오창읍 각리 653-9
 (72) 발명자
김명숙
 경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
제종태
 충청북도 청주시 상당구 용암동 건영아파트
 106-801
 (뒷면에 계속)
 (74) 대리인
리엔목특허법인

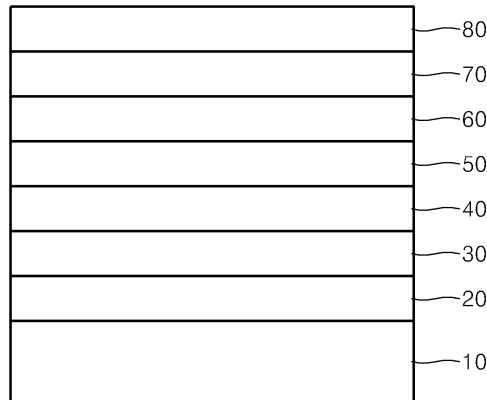
전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 **축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자**

(57) 요약

축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

이세진

대전광역시 동구 성동로7번길 52-1 (자양동)

박석배

충청남도 금산군 금산읍 후곶천길 18, 1동 201호
(해맑은 아파트)

유세진

경상북도 경산시 사동 180 사동휴먼시아1단지
109-1105

임재건

대전광역시 중구 대종로593번길 20-1 (선화동)

최병기

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

김태경

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

이정인

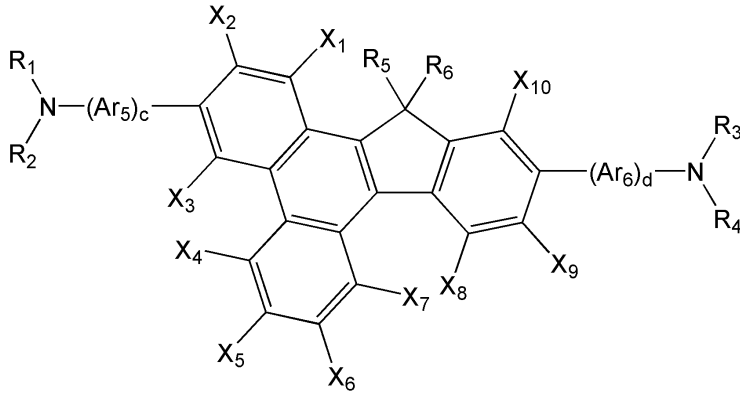
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

R₁은 -(Ar₁)_{a1}-(R₁₁)_{b1}으로 표시되고, R₂는 -(Ar₂)_{a2}-(R₁₂)_{b2}으로 표시되고, R₃는 -(Ar₃)_{a3}-(R₁₃)_{b3}로 표시되고, R₄은 -(Ar₄)_{a4}-(R₁₄)_{b4}로 표시되고;

상기 Ar₁ 내지 Ar₄은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀ 방향족 연결기(aromatic linking group), 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀ 헤테로방향족 연결기이고;

상기 Ar₅ 및 Ar₆은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기이고;

R₅, R₆ 및 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 비공유 전자쌍, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀축합환기이고;

상기 a₁ 내지 a₄는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수이고;

상기 b₁ 내지 b₄는 서로 독립적으로 1 내지 5의 정수이고;

c 및 d는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수이고;

X₁ 내지 X₁₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, -Si(R₂₁)(R₂₂)(R₂₃) 또는 -N(R₂₄)(R₂₅)이고;

R₂₁ 내지 R₂₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-

C₆₀아릴싸이오기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1-C10알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 펜탈레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인데닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphthyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphthyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 페날레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 파이레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크라이세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 나프타세닐기(naphthacenyl), 치환 또는 비치환된 피세닐기(picenyl), 치환 또는 비치환된 페릴레닐기(perylenyl), 치환 또는 비치환된 펜타세닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl), 치환 또는 비치환된 시클로펜틸기, 치환 또는 비치환된 시클로헥실기, 치환 또는 비치환된 시클로헵틸기, 치환 또는 비치환된 디히드로나프틸기, 치환 또는 비치환된 테트라히드로나프틸기, 또는 치환 또는 비치환된 디히드로-인데닐기인, 축합환 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

Ar₁ 내지 Ar₄는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 벤젠 연결기, 치환 또는 비치환된 펜탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 인덴 연결기, 치환 또는 비치환된 나프탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 아줄렌 연결기, 치환 또는 비치환된 헵탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 인다센 연결기, 치환 또는 비치환된 아세나프탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 플루오렌 연결기, 치환 또는 비치환된 페날렌 연결기, 치환 또는 비치환된 페난트렌 연결기, 치환 또는 비치환된 안트라센 연결기, 치환 또는 비치환된 플루오란텐 연결기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌 연결기, 치환 또는 비치환된 파이렌 연결기, 치환 또는 비치환된 크라이센 연결기, 치환 또는 비치환된 나프타센 연결기, 치환 또는 비치환된 피센 연결기, 치환 또는 비치환된 페릴렌 연결기, 치환 또는 비치환된 펜타센 연결기, 또는 치환 또는 비치환된 헥사센 연결기인, 축합환 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

a₁ 내지 a₄는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고, b₁ 내지 b₄는 서로 독립적으로 1 또는 2인, 축합환 화합물.

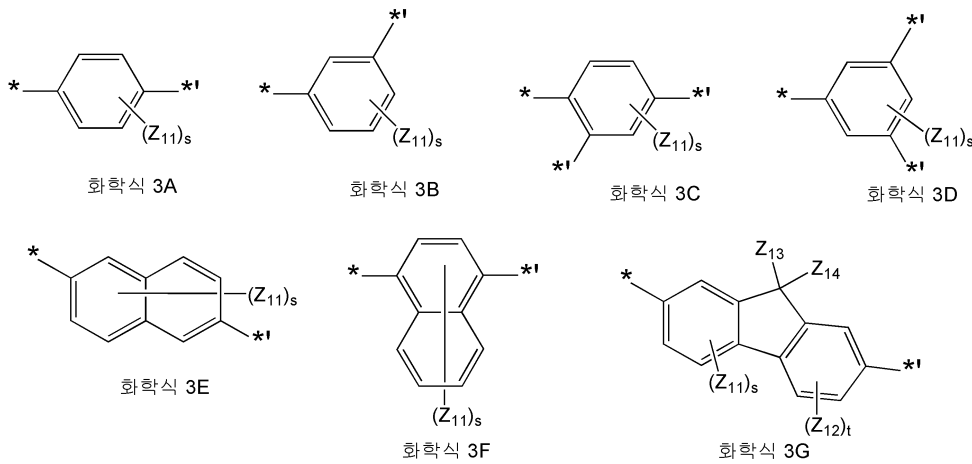
청구항 5

제1항에 있어서,

상기 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C₁-C₁₀알킬기; 페닐기; 나프틸기; 페난트레닐기; 플루오레닐기; 파이레닐기; 시클로펜틸기; 시클로헥실기; 테트라히드로나프틸기; 디히드로-인데닐기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃) 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 테트라히드로나프틸기 및 디히드로-인데닐기; 중 하나이고;

상기 Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기 또는 C₅-C₁₄아릴기이고;

Ar₁ 내지 Ar₄는 서로 독립적으로, 하기 화학식 3A 내지 3G 중 어느 하나로 표시되는, 축합환 화합물:



상기 화학식 3A 내지 3G 중

Z₁₁ 내지 Z₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기이고;

s는 1 내지 6의 정수이고;

t는 1 내지 3의 정수이다.

청구항 6

제1항에 있어서

상기 R₅ 및 R₆이 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C₅-C₂₀아릴기인, 축합환 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서,

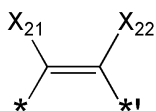
상기 R₅ 및 R₆이 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C₁-C₁₀알킬기; 페닐기; 나프틸기; 및 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기 및 나프틸기; 중 하나인, 축합환 화합물.

청구항 8

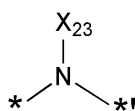
제1항에 있어서,

상기 R₅과 R₆이, 단일 결합, 하기 화학식 4A의 연결기, 또는 하기 화학식 4B의 연결기를 사이에 두고 서로 연결된, 축합환 화합물:

<화학식 4A>



<화학식 4B>



상기 화학식 4A 및 4B 중,

X₂₁ 내지 X₂₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기,

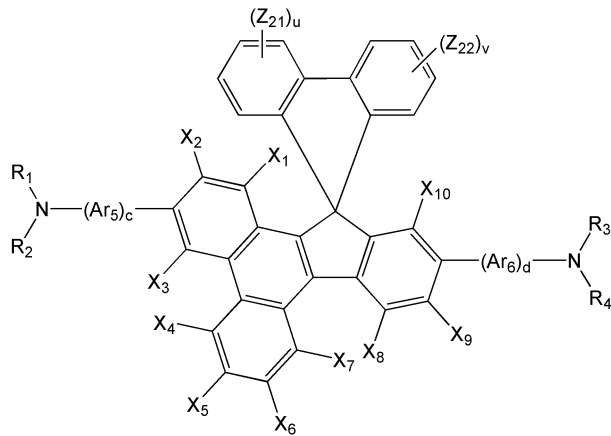
아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기이다.

청구항 9

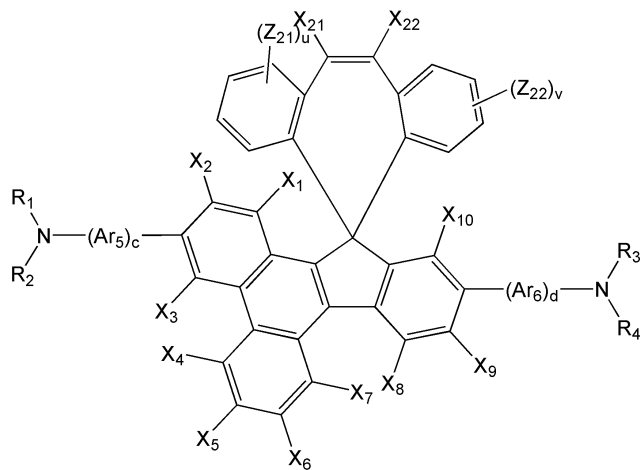
제8항에 있어서,

화학식 1A 내지 1D 중 어느 하나로 표시되는, 축합환 화합물.

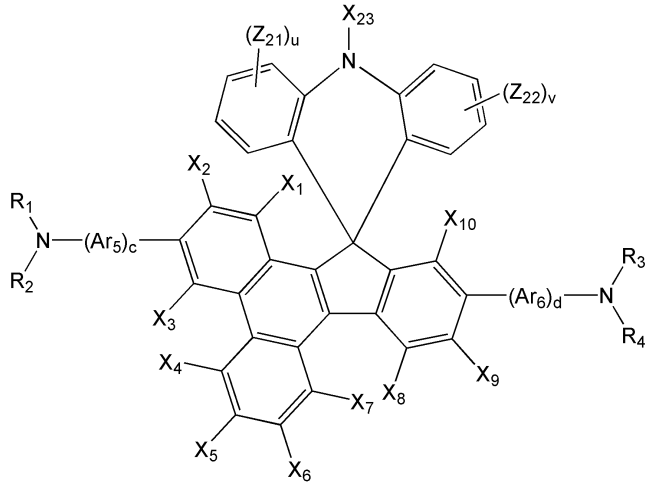
<화학식 1A>



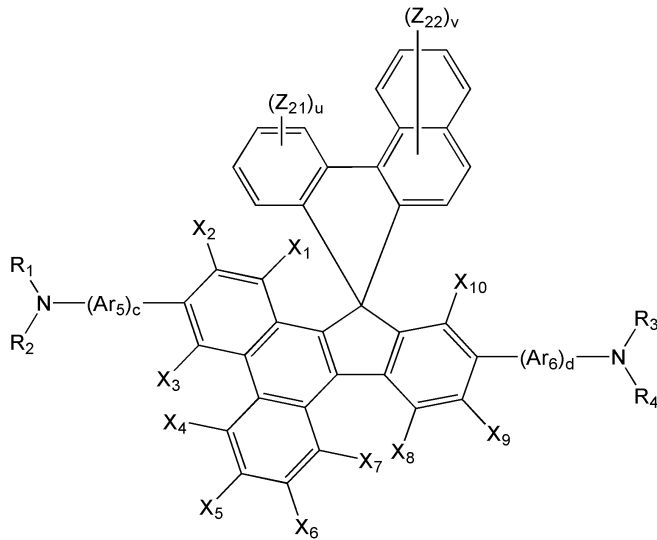
<화학식 1B>



<화학식 1C>



<화학식 1D>



상기 화학식 1A 내지 1D 중,

R₁ 내지 R₄, Ar₅, Ar₆, c, d 및 X₁ 내지 X₁₀에 대한 정의는 제1항에 기재된 바와 동일하고;

X₂₁ 내지 X₂₃에 대한 정의는 제8항에 기재된 바와 동일하고;

Z₂₁ 및 Z₂₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기이고;

u는 1 내지 4의 정수이고;

v는 1 내지 6의 정수이다.

청구항 10

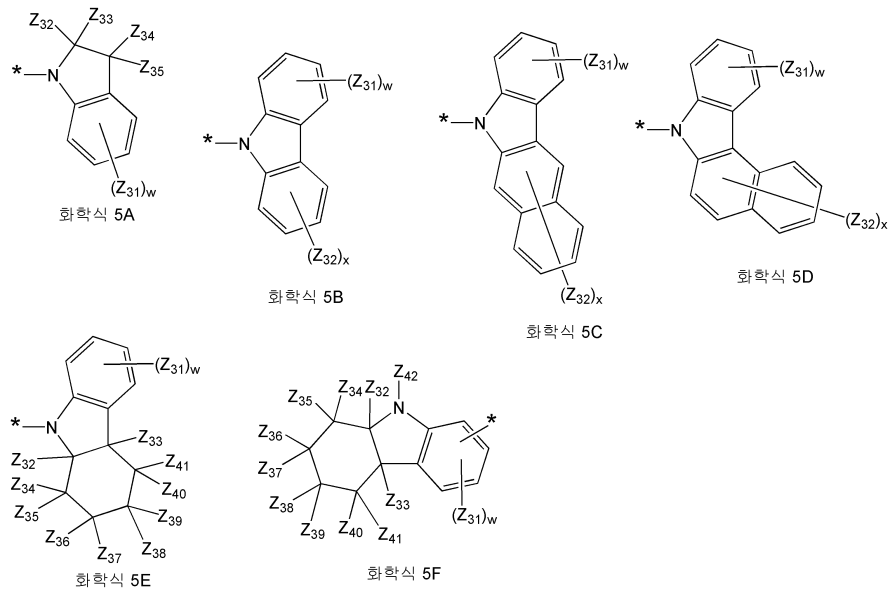
제1항에 있어서,

상기 R₁와 R₂ 및 R₃와 R₄ 중 하나 이상의 조합이 서로 연결되어 있는, 축합환 화합물.

청구항 11

제10항에 있어서,

상기 화학식 1 중, $-N(R_1)(R_2)$ 및 $-N(R_3)(R_4)$ 중 하나 이상이 하기 화학식 5A 내지 5F 중 하나로 표시되는, 축합환 화합물:



상기 화학식 5A 내지 5F 중,

Z_{31} 내지 Z_{42} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기, C_1 - C_{60} 알콕시기 또는 C_5 - C_{60} 아릴기이고;

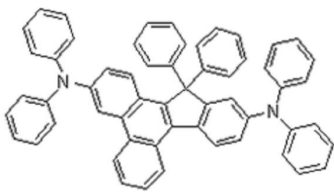
w 및 x는 서로 독립적으로, 1 내지 8의 정수이다.

청구항 12

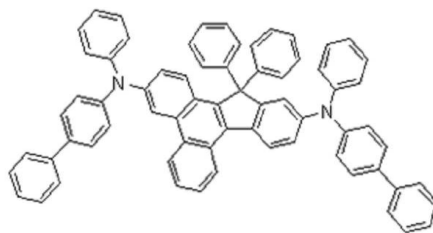
제1항에 있어서,

하기 화합물 1, 3, 9, 10, 11, 12, 14, 17, 22, 26, 28, 29, 54, 64 또는 68인, 축합환 화합물.

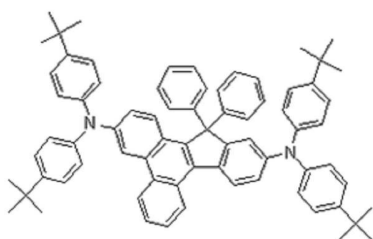
<화합물 1>



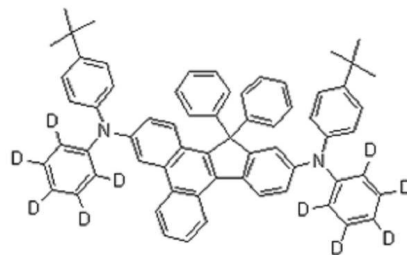
<화합물 3>



<화합물 9>

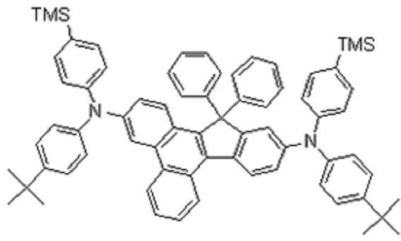


<화합물 10>

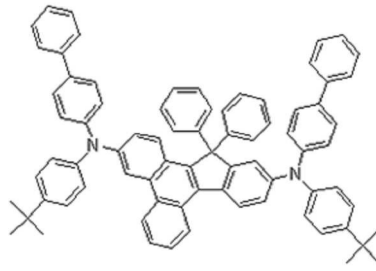


<화합물 11>

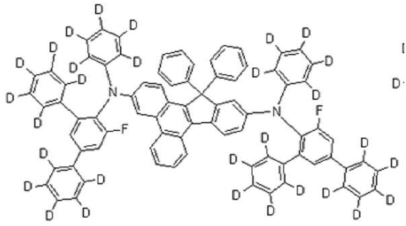
<화합물 12>



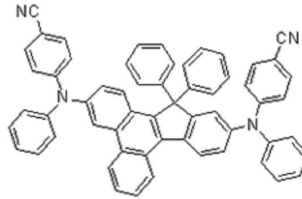
<화합물 14>



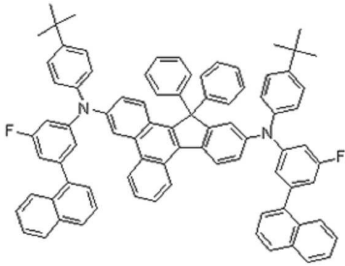
<화합물 17>



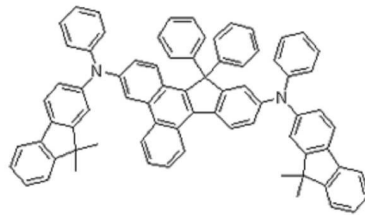
<화합물 22>



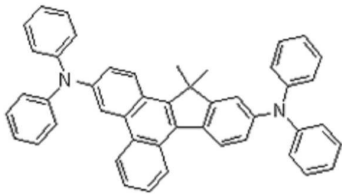
<화합물 26>



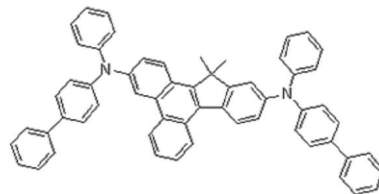
<화합물 28>



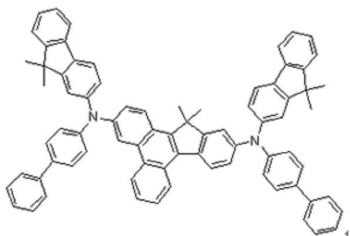
<화합물 29>



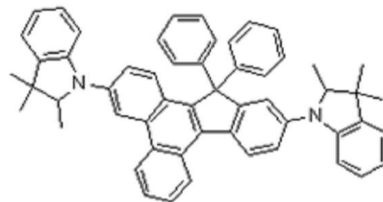
<화합물 54>

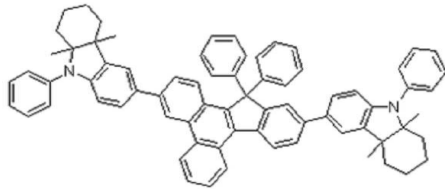


<화합물 64>



<화합물 68>





청구항 13

제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 제1항 내지 제12항 중 어느 한 항의 축합환 화합물을 단일 물질 또는 서로 다른 물질의 조합의 형태로 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 14

제13항에 있어서,

상기 유기층이, 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층, 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 15

제14항에 있어서,

상기 유기층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층에 상기 축합환 화합물이 포함되어 있는, 유기 발광 소자.

청구항 16

제15항에 있어서,

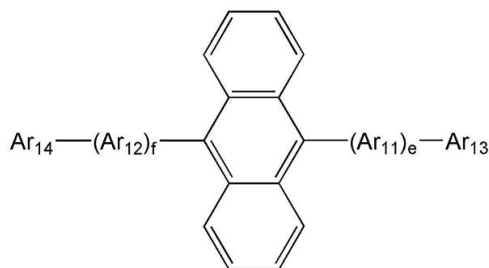
상기 발광층이 호스트를 더 포함하고, 상기 발광층에 포함된 상기 축합환 화합물이 도펀트의 역할을 하는, 유기 발광 소자.

청구항 17

제16항에 있어서,

상기 호스트가 하기 화학식 60으로 표시되는 안트라센계 화합물인, 유기 발광 소자:

<화학식 60>



상기 화학식 60 중,

상기 Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기이고;

상기 Ar₁₃ 및 Ar₁₄는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기이고;

e 및 f는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수이다.

청구항 18

제14항에 있어서,

상기 유기층이 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층이 전자 수송성 유기 화합물 및 금속-함유 물질을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 19

제18항에 있어서,

상기 금속-함유 물질이 리튬 착체인, 유기 발광 소자.

청구항 20

제14항에 있어서,

상기 유기층이 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나가, 전하-생성 물질을 포함한, 유기 발광 소자.

명세서

기술분야

[0001] 축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.

배경기술

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting diode)는 자발광형 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라, 응답시간이 빠르며, 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.

[0003] 일반적인 유기 발광 소자는 기판 상부에 애노드가 형성되어 있고, 이 애노드 상부에 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 여기에서 정공수송층, 발광층 및 전자수송층은 유기화합물로 이루어진 유기 박막들이다.

[0004] 상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기 발광 소자의 구동 원리는 다음과 같다.

[0005] 상기 애노드 및 캐소드간에 전압을 인가하면, 애노드로부터 주입된 정공은 정공수송층을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자수송층을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exiton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저 상태로 변하면서 광이 생성된다.

발명의 내용

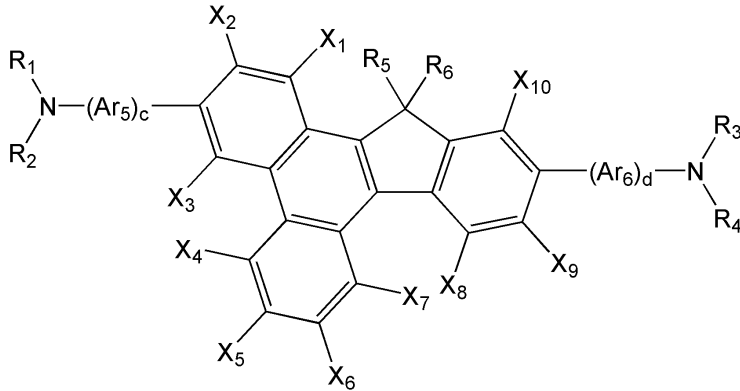
해결하려는 과제

[0006] 신규 구조를 갖는 축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자를 제공한다.

과제의 해결 수단

[0007] 하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 제공된다:

[0008] <화학식 1>



[0009]

[0010] 상기 화학식 1 중,

[0011] R₁은 -(Ar₁)_{a1}-(R₁₁)_{b1}으로 표시되고, R₂는 -(Ar₂)_{a2}-(R₁₂)_{b2}으로 표시되고, R₃는 -(Ar₃)_{a3}-(R₁₃)_{b3}로 표시되고, R₄은 -(Ar₄)_{a4}-(R₁₄)_{b4}로 표시되고;

[0012] 상기 Ar₁ 내지 Ar₄은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀ 방향족 연결기(aromatic linking group), 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀ 헤테로방향족 연결기이고;

[0013] 상기 Ar₅ 및 Ar₆은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기이고;

[0014] R₅, R₆ 및 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 비공유 전자쌍, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀축합환기이고;

[0015] 상기 a₁ 내지 a₄는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수이고;

[0016] 상기 b₁ 내지 b₄는 서로 독립적으로 1 내지 5의 정수이고;

[0017] c 및 d는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수이고;

[0018] X₁ 내지 X₁₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, -Si(R₂₁)(R₂₂)(R₂₃) 또는 -N(R₂₄)(R₂₅)이고;

[0019] R₂₁ 내지 R₂₅는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기이다.

[0020] 또한, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상기 축합환 화합물을 단일 물질 또는 서로 다른 물질의 조합의 형태로 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

[0021] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 우수한 내열성 및 발광 특성을 제공할 수 있으므로, 이를 채용한 유기 발광 소자의 구동 전압, 효율, 휘도, 양자 효율, 수명 등이 향상될 수 있다.

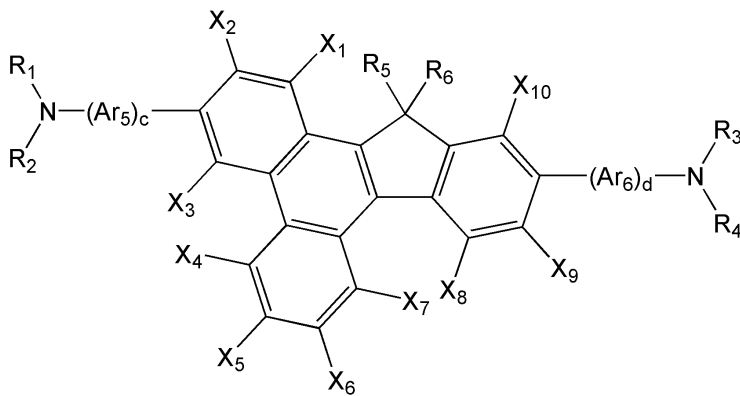
도면의 간단한 설명

[0022] 도 1은 유기 발광 소자의 일 구현예를 개략적으로 나타낸 도면이다.
 도 2는 실시예 1 내지 4 및 비교예 1의 수명특성을 나타낸 그래프이다.
 도 3은 실시예 5 내지 8 및 비교예 2의 수명특성을 나타낸 그래프이다.
 도 4는 실시예 1 내지 4 및 비교예 1의 전류밀도 및 전압변화를 나타낸 그래프이다.
 도 5는 실시예 5 내지 8 비교예 2의 전류밀도 및 전압변화를 나타낸 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0023] 상기 축합환 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0024] <화학식 1>



[0025] 상기 화학식 1 중, R₁은 -(Ar₁)_{a1}-(R₁₁)_{b1}으로 표시되고, R₂는 -(Ar₂)_{a2}-(R₁₂)_{b2}으로 표시되고, R₃는 -(Ar₃)_{a3}-(R₁₃)_{b3}로 표시되고, R₄은 -(Ar₄)_{a4}-(R₁₄)_{b4}로 표시된다.

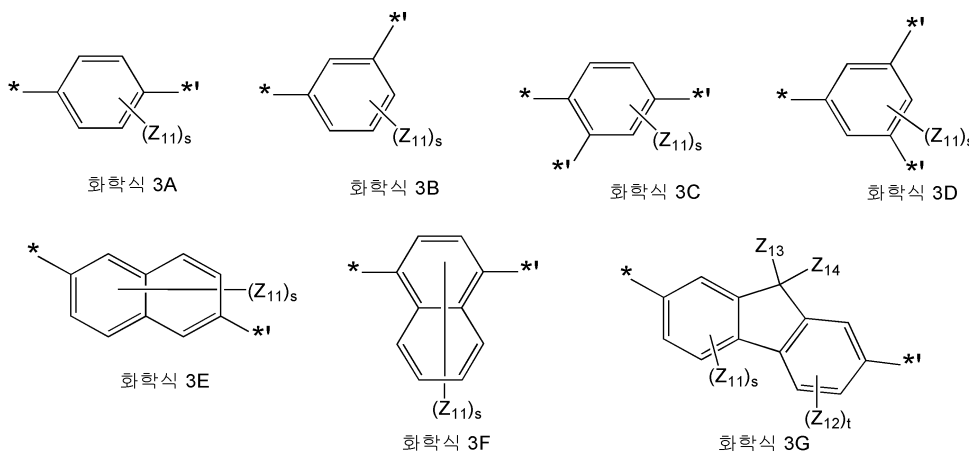
[0027] 상기 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 비공유 전자쌍, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀축합환기일 수 있다.

[0028] 예를 들어, 상기 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 펜탈레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인데닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphthyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphthyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 페날레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 피아레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크라이세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 나프타세닐기(naphthacenyl), 치환 또는 비치환된 피세닐기(picenyl), 치환 또는 비치환된 페릴레닐기(perylene), 치환 또는 비치환된 펜타세닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl), 치환 또는 비치환된 시클로펜틸기, 치환 또는 비치환된 시클로헥실기, 치환 또는 비치환된 시클로헵틸기, 치환 또는 비치환된 디히드로나프틸기, 치환 또는 비치환된 테트라히드로나프틸기, 또는 치환 또는 비치환된 디히드로-인데닐기일 수 있으나, 이에 한정되

되는 R₁₁ 내지 R₁₄ 각각의 개수에 따라, 2가 연결기(예를 들면, 하기 화학식 3A 참조), 3가 연결기(예를 들면, 하기 화학식 3C 참조), 4가 연결기, 5가 연결기 등일 수 있으며, 이는 상기 축합환 화합물의 구체예인 화합물 1 내지 78을 참조하여 용이하게 이해될 수 있는 것이다.

[0036] 상기 화학식 1 중, Ar₁ 내지 Ar₄은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 벤젠 연결기, 치환 또는 비치환된 펜탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 인덴 연결기, 치환 또는 비치환된 나프탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 아줄렌 연결기, 치환 또는 비치환된 헵탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 인다센 연결기, 치환 또는 비치환된 아세나프탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 플루오렌 연결기, 치환 또는 비치환된 페날렌 연결기, 치환 또는 비치환된 페난트렌 연결기, 치환 또는 비치환된 안트라센 연결기, 치환 또는 비치환된 플루오란텐 연결기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌 연결기, 치환 또는 비치환된 파이렌 연결기, 치환 또는 비치환된 크라이센 연결기, 치환 또는 비치환된 나프타센 연결기, 치환 또는 비치환된 피센 연결기, 치환 또는 비치환된 페틸렌 연결기, 치환 또는 비치환된 펜타센 연결기, 또는 치환 또는 비치환된 헥사센 연결기일 수 있다.

[0037] 예를 들어, 상기 Ar₁ 내지 Ar₄은 서로 독립적으로, 하기 화학식 3A 내지 3G 중 어느 하나로 표시될 수 있다:



[0038] 상기 화학식 3A 내지 3G 중, Z₁₁ 내지 Z₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기(예를 들면, C₁-C₁₀알킬기), C₂-C₆₀알케닐기(예를 들면, C₂-C₁₀알케닐기), C₂-C₆₀알키닐기(예를 들면, C₂-C₁₀알키닐기), C₁-C₆₀알콕시기(예를 들면, C₁-C₁₀알콕시기)이고; s는 1 내지 6의 정수이고; t는 1 내지 3의 정수일 수 있다.

[0040] 예를 들어, 상기 화학식 3A 내지 3G 중, Z₁₁ 내지 Z₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 또는 헵톡시기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0041] 상기 화학식 3A 내지 3G 중 *는 화학식 1 중 "N"과의 결합 사이트를 나타낸 것이고, *'은 R₁₁ 내지 R₁₄ 각각과의 결합 사이트를 나타낸 것이다.

[0042] 상기 화학식 1 중, 상기 a₁ 내지 a₄는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수이고, 상기 b₁ 내지 b₄는 서로 독립적으로 1 내지 5의 정수일 수 있다. 예를 들어, a₁ 내지 a₄는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고, b₁ 내지 b₄는 서로 독립적으로 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. a₁이 2 이상일 경우, 2 이상의 Ar₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, a₂이 2 이상일 경우, 2 이상의 Ar₂은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, a₃이 2 이상일 경우, 2 이상의 Ar₃은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, a₄가 2 이상일 경우, 2 이상의 Ar₄는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, b₁이 2 이상일 경우 2 이상의 R₁₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, b₂이 2 이상일 경우 2 이상의 R₁₂은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, b₃가 2 이상일 경우 2 이상의 R₁₃은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, b₄가 2 이상일 경우 2 이상의 R₁₄는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0043] 상술한 바를 참조하여, 화학식 1 중, R₁ 내지 R₄가 서로 독립적으로, 선택될 수 있다. 예를 들어, 상기 R₁₁

내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; C₁-C₁₀알킬기; 페닐기; 나프틸기; 페난트레닐기; 플루오레닐기; 파이레닐기; 시클로펜틸기; 시클로헥실기; 테트라히드로나프틸기; 디히드로-인테닐기; 및 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃) 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 테트라히드로나프틸기 및 디히드로-인테닐기; 중 하나이고(여기서, 상기 Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기 또는 C₅-C₁₄아릴기임); Ar₁ 내지 Ar₄는 서로 독립적으로, 상기 화학식 3A 내지 3G 중 어느 하나로 표시되도록 R₁ 내지 R₄가 서로 독립적으로 선택될 수 있다.

[0044] 또는, 상기 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소 및 상기 화학식 2A 내지 2K 중 어느 하나로 표시되고, Ar₁ 내지 Ar₄는 서로 독립적으로, 상기 화학식 3A 내지 3G 중 어느 하나로 표시되도록, R₁ 내지 R₄가 서로 독립적으로 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0045] 상기 화학식 1 중 R₁ 내지 R₄는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0046] 상기 화학식 1 중, 상기 Ar₅ 및 Ar₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기일 수 있다.

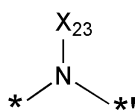
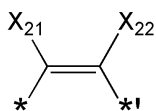
[0047] 예를 들어, 상기 Ar₅ 및 Ar₆은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜탈레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인테닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기, 치환 또는 비치환된 헵탈레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페날레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기, 치환 또는 비치환된 파이레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기일 수 있다.

[0048] 예를 들어, 상기 R₅ 및 R₆은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; C₁-C₁₀알킬기; 페닐기; 나프틸기; 및 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기 등), C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기 등) 중 하나 이상으로 치환된 페닐기 및 나프틸기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0049] 상기 화학식 1 중, c 및 d는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수일 수 있다. 예를 들어, 상기 c 및 d는 서로 독립적으로 0 또는 1일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0050] 상기 화학식 1 중, 상기 R₅과 R₆는, 단일 결합, 하기 화학식 4A의 연결기, 또는 하기 화학식 4B의 연결기를 사이에 두고 서로 연결될 수 있다:

[0051] <화학식 4A> <화학식 4B>



[0052]

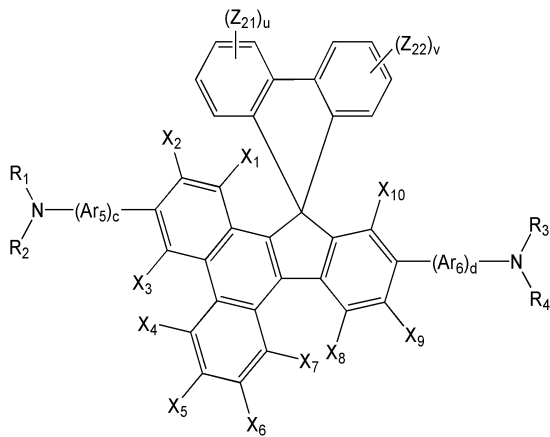
[0053] 상기 화학식 4A 및 4B 중, X₂₁ 내지 X₂₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기, 또는 치환 또는

비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기일 수 있다.

[0054] 예를 들어, 상기 화학식 4A 및 4B 중, X₂₁ 내지 X₂₃은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C₁-C₁₀알킬기; 페닐기; 나프틸기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기 등), C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기 등) 중 하나 이상으로 치환된 페닐기 및 나프틸기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

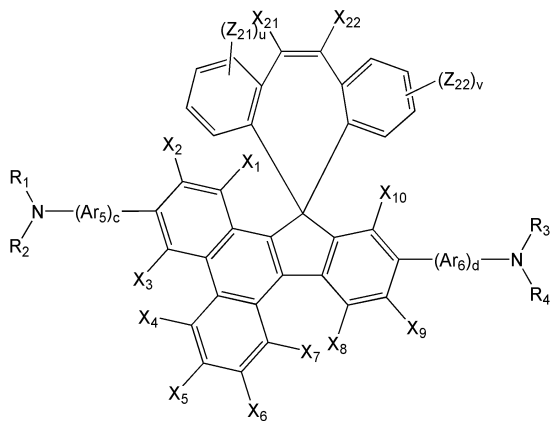
[0055] 상술한 바와 같이, 상기 화학식 1 중, 상기 R₅과 R₆이 단일 결합, 하기 화학식 4A의 연결기, 또는 하기 화학식 4B의 연결기를 사이에 두고 서로 연결될 경우, 상기 축합환 화합물은 하기 화학식 1A 내지 1D(화학식 1 중, R₅ 및 R₆ = 치환 또는 비치환된 페닐기) 중 어느 하나로 표시될 수 있다:

[0056] <화학식 1A>



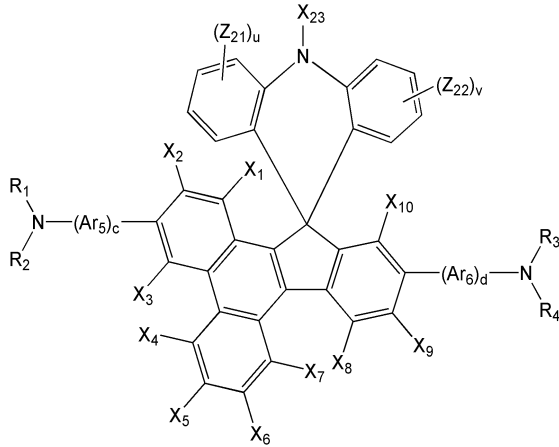
[0057]

[0058] <화학식 1B>



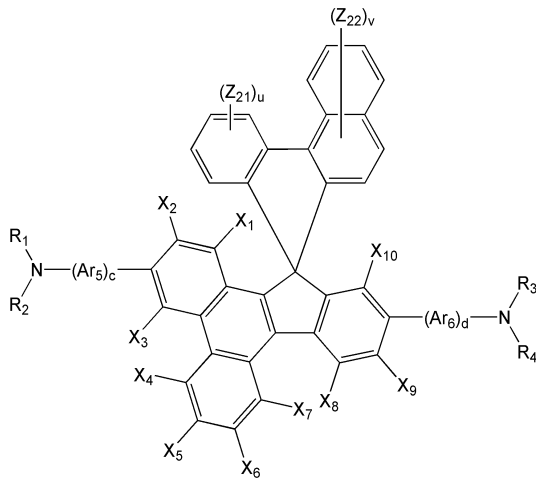
[0059]

[0060] <화학식 1C>



[0061]

[0062] <화학식 1D>

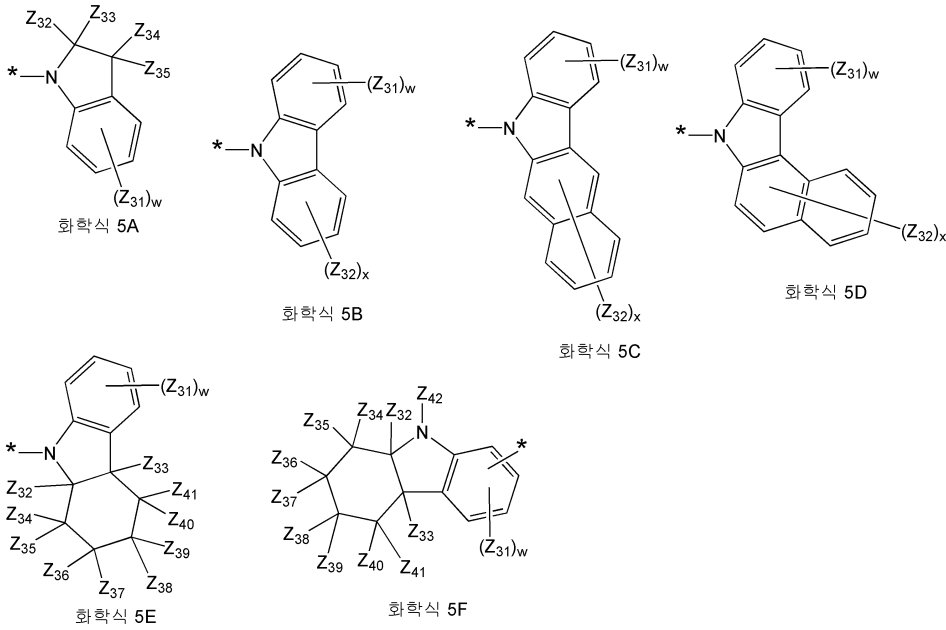


[0063]

[0064] 상기 화학식 1A 내지 1D 중, R₁ 내지 R₄, Ar₅, Ar₆, c, d, X₁ 내지 X₁₀ 및 X₂₁ 내지 X₂₃에 대한 정의는 상술한 바와 동일하고; Z₂₁ 및 Z₂₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기이고; u는 1 내지 4의 정수이고; v는 1 내지 6의 정수일 수 있다.

[0065] 예를 들어, 상기 화학식 1A 내지 1D 중, Z₂₁ 및 Z₂₂는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 또는 헥톡시기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0066] 상기 화학식 1 중, 상기 R₁와 R₂ 및 R₃와 R₄ 중 하나 이상의 조합은 서로 연결될 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1 중, -N(R₁)(R₂) 및 -N(R₃)(R₄) 중 하나 이상은 하기 화학식 5A 내지 5F 중 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0067]

[0068]

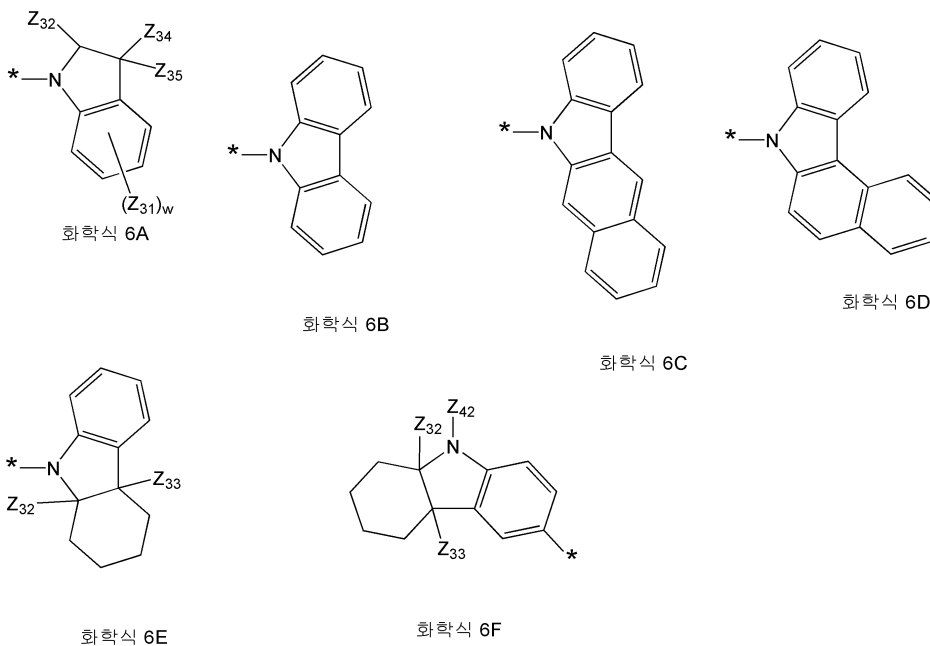
상기 화학식 5A 내지 5F 중, Z_{31} 내지 Z_{42} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기, C_1 - C_{60} 알콕시기 또는 C_5 - C_{60} 아릴기이고; w 및 x는 서로 독립적으로, 1 내지 8의 정수일 수 있다.

[0069]

예를 들어, 상기 화학식 5A 내지 5F 중, Z_{31} 내지 Z_{42} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기 또는 안트릴기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0070]

예를 들어, 상기 화학식 1 중, $-N(R_1)(R_2)$ 및 $-N(R_3)(R_4)$ 중 하나 이상은 하기 화학식 6A 내지 6F 중 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

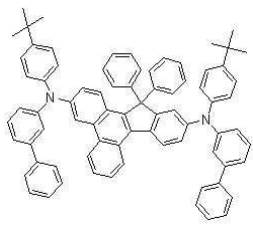


[0071]

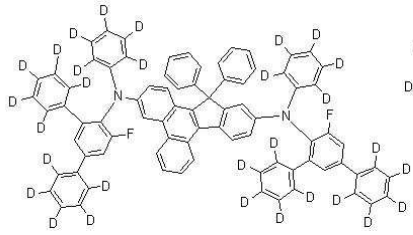
[0072]

상기 화학식 6A 내지 6F 중 Z_{31} , Z_{32} , Z_{33} , Z_{34} , Z_{35} 및 Z_{42} 에 대한 설명은 상술한 바를 참조한다. 예를 들어, 상기 Z_{31} , Z_{32} , Z_{33} , Z_{34} 및 Z_{35} 는 서로 독립적으로 수소 또는 C_1 - C_{10} 알킬기일 수 있고, Z_{42} 는 페닐기, 나프틸기 또는 안트릴기일 수 있다.

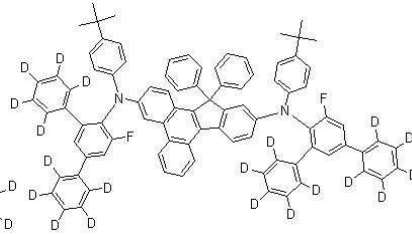
[0084] <화합물 13>



<화합물 14>

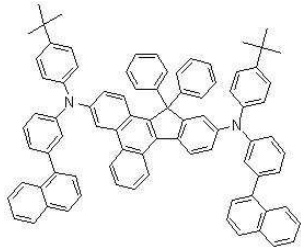


<화합물 15>

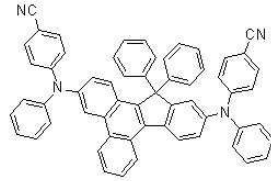


[0085]

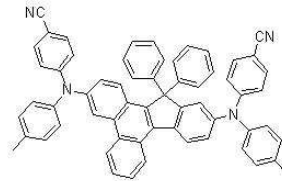
[0086] <화합물 16>



<화합물 17>

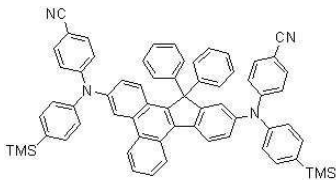


<화합물 18>

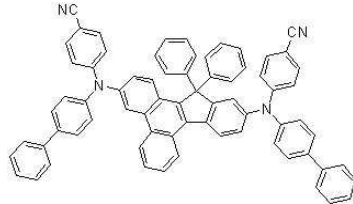


[0087]

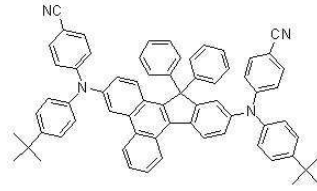
[0088] <화합물 19>



<화합물 20>

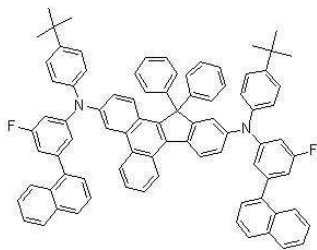


<화합물 21>

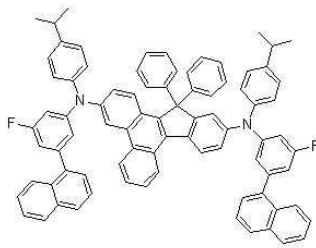


[0089]

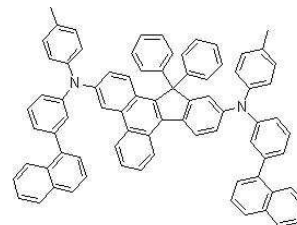
[0090] <화합물 22>



<화합물 23>

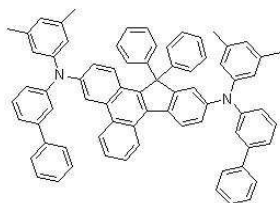


<화합물 24>

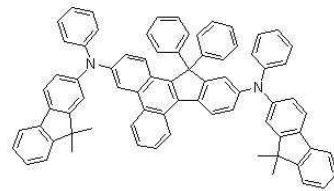


[0091]

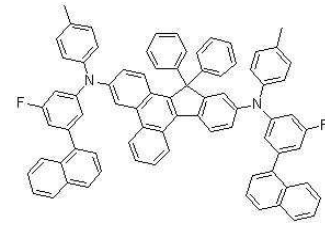
[0092] <화합물 25>



<화합물 26>

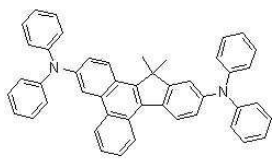


<화합물 27>

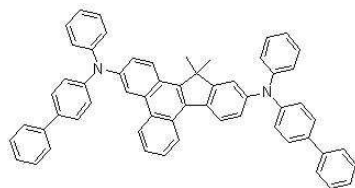


[0093]

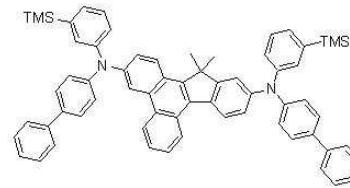
[0094] <화합물 28>



<화합물 29>



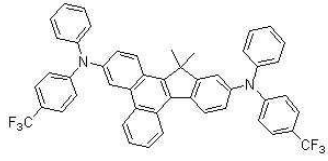
<화합물 30>



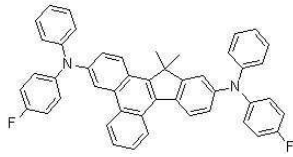
[0095]

[0096]

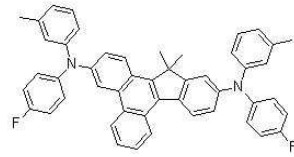
<화합물 31>



<화합물 32>



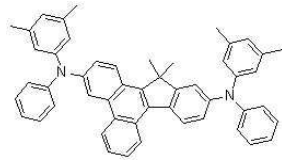
<화합물 33>



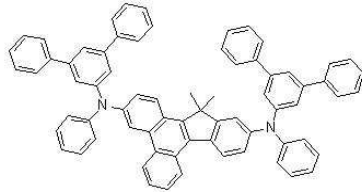
[0097]

[0098]

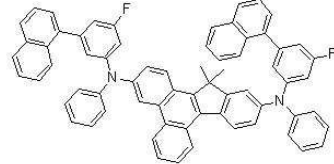
<화합물 34>



<화합물 35>



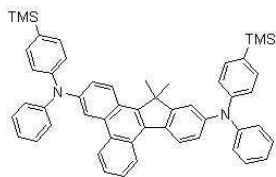
<화합물 36>



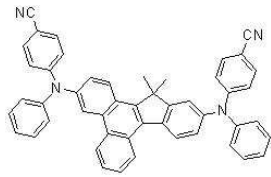
[0099]

[0100]

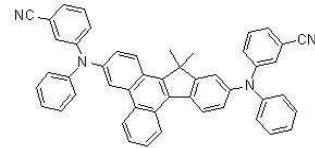
<화합물 37>



<화합물 38>



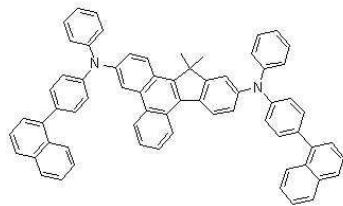
<화합물 39>



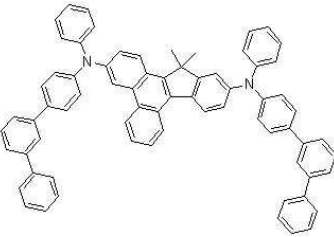
[0101]

[0102]

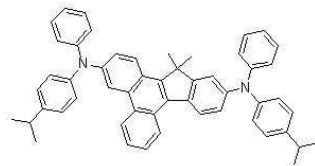
<화합물 40>



<화합물 41>



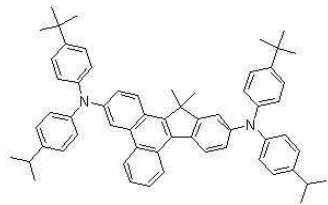
<화합물 42>



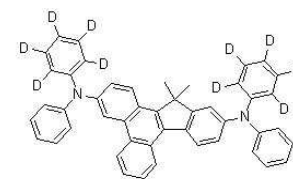
[0103]

[0104]

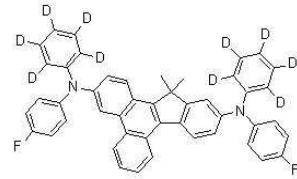
<화합물 43>



<화합물 44>



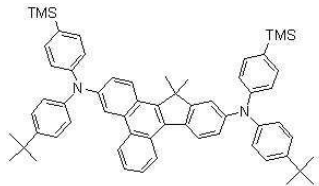
<화합물 45>



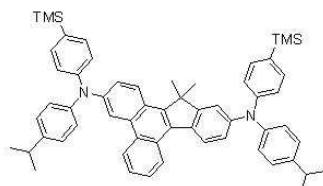
[0105]

[0106]

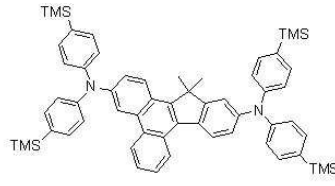
<화합물 46>



<화합물 47>



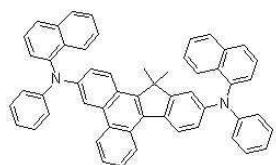
<화합물 48>



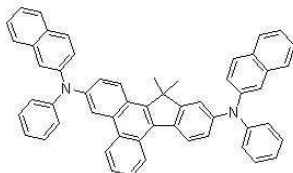
[0107]

[0108]

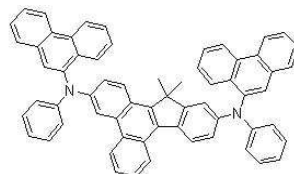
<화합물 49>



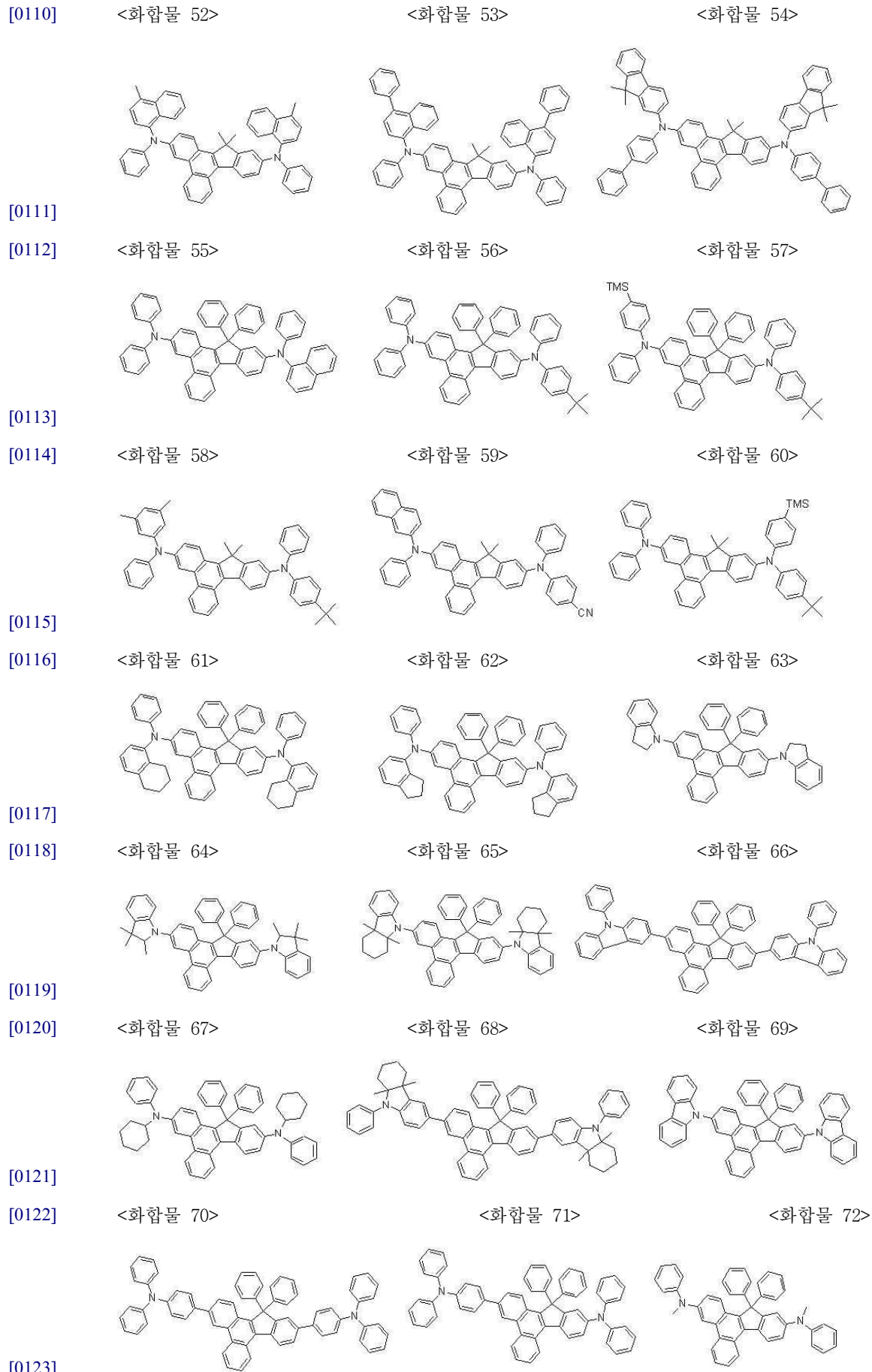
<화합물 50>



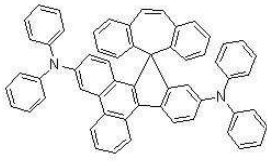
<화합물 51>



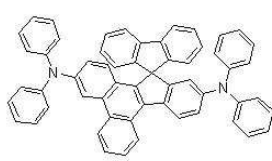
[0109]



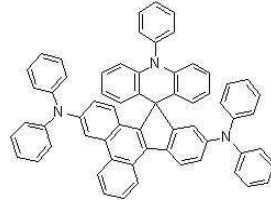
[0124] <화합물 73>



<화합물 74>

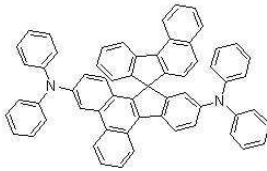


<화합물 75>

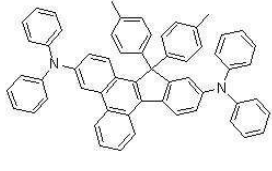


[0125]

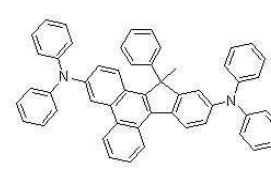
[0126] <화합물 76>



<화합물 77>



<화합물 78>



[0127]

[0128] 본 명세서 중, 비치환된 C₁-C₆₀알킬기(또는 C₁-C₆₀알킬기)의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있고, 치환된 C₁-C₆₀알킬기는 상기 비치환된 C₁-C₆₀알킬기 중 하나 이상의 수소가, 중수소; 할로겐 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C₁-C₆₀알킬기; C₂-C₆₀알케닐기; C₂-C₆₀알키닐기; C₁-C₆₀알콕시기; C₃-C₆₀시클로알킬기; C₅-C₆₀아릴기; C₅-C₆₀아릴옥시기; C₅-C₆₀아릴싸이오기; C₂-C₆₀헤테로아릴기; 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₆₀시클로알킬기, C₅-C₆₀아릴기, C₅-C₆₀아릴옥시기, C₅-C₆₀아릴싸이오기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기; -N(Q₁)(Q₂); 또는 -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅);로 치환된 것이다(여기서, 상기 Q₁ 내지 Q₅은 서로 독립적으로, C₃-C₆₀시클로알킬기; C₅-C₆₀아릴기; C₅-C₆₀아릴옥시기; C₅-C₆₀아릴싸이오기; C₂-C₆₀헤테로아릴기; 및 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₆₀시클로알킬기, C₅-C₆₀아릴기, C₅-C₆₀아릴옥시기, C₅-C₆₀아릴싸이오기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기; 중 하나이다).

[0129] 본 명세서 중 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기(또는 C₁-C₆₀알콕시기)는 -OA(단, A는 상술한 바와 같은 비치환된 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 가지며, 이의 구체적인 예로서, 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시, 등이 있고, 이들 알콕시기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0130] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기(또는 C₂-C₆₀알케닐기)는 상기 비치환된 C₂-C₆₀알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 에테닐, 프로페닐, 부테닐 등이 있다. 이들 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0131] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기(또는 C₂-C₆₀알키닐기)는 상기 정의된 바와 같은 C₂-C₆₀알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 에티닐(ethynyl), 프로피닐(propynyl), 등이 있다. 이들 알키닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0132] 본 명세서 중 비치환된 C₅-C₆₀아릴기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 5 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기는 하나 이상의 방

방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 5 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 아릴기 및 아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 상기 아릴기 및 아릴렌기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 치환된 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

[0133] 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기의 예로는 페닐기, C₁-C₁₀알킬페닐기(예를 들면, 에틸페닐기), C₁-C₁₀알킬비페닐기(예를 들면, 에틸비페닐기), 할로페닐기(예를 들면, o-, m- 및 p-플루오로페닐기, 디클로로페닐기), 디시아노페닐기, 트리플루오로메톡시페닐기, o-, m-, 및 p-토릴기, o-, m- 및 p-쿠메닐기, 메시틸기, 페녹시페닐기, (α, α-디메틸벤젠)페닐기, (N,N'-디메틸)아미노페닐기, (N,N'-디페닐)아미노페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 할로나프틸기(예를 들면, 플루오로나프틸기), C₁-C₁₀알킬나프틸기(예를 들면, 메틸나프틸기), C₁-C₁₀알콕시나프틸기(예를 들면, 메톡시나프틸기), 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 안트라퀴놀일기, 메틸안트릴기, 페난트릴기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리세닐기, 에틸-크리세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 클로로페릴레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기 등을 들 수 있으며, 치환된 C₅-C₆₀아릴기의 예는 상술한 바와 같은 비치환된 C₅-C₆₀아릴기의 예와 상기 치환된 C₁-C₆₀알킬기의 치환기를 참조하여 용이하게 인식할 수 있다. 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기의 예를 참조하여 용이하게 인식될 수 있다.

[0134] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하고 나머지 고리원자가 C인 하나 이상의 방향족 고리로 이루어진 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하고 나머지 고리원자가 C인 하나 이상의 방향족 고리로 이루어진 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 여기서, 상기 헤테로아릴기 및 헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리는 서로 융합될 수 있다. 상기 헤테로아릴기 및 헤테로아릴렌기 중 하나 이상의 수소원자는 상술한 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

[0135] 상기 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기의 예에는, 피라졸일기, 이미다졸일기, 옥사졸일기, 티아졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조이미다졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 등을 들 수 있다. 상기 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀아릴렌기의 예를 참조하여 용이하게 인식될 수 있다.

[0136] 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기는 -OA₂(여기서, A₂는 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기임)를 가리키고, 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기는 -SA₃(여기서, A₃는 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기임)를 가리킨다.

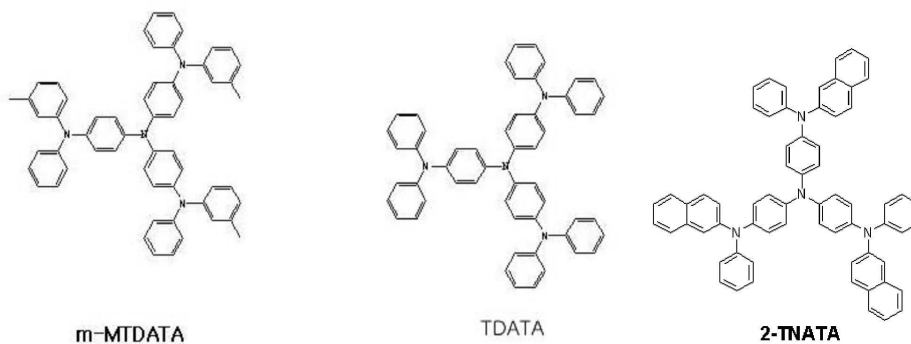
[0137] 상기 화학식 1을 갖는 축합환 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 축합환 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자에게 용이하게 인식될 수 있다.

[0138] 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 우수한 내열성 및 발광 특성을 가질 수 있다. 구체적으로, 화학식 1의 A 위치의 탄소 및 B 위치의 탄소가, 선택적으로 Ar₅ 및 Ar₆을 사이에 두고, -N(R₁)(R₂) 및 -N(R₃)(R₄)와 결합되어 있다.

[0139] 일반적으로 본체 축합고리의 콘주게이션 길이가 길어지는 경우 밴드갭이 작아져 발광과장이 장파장 쪽으로 이동하게 되나, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 아민이 연결된 A 및 B의 탄소사이의 축합고리중 C 위치가 콘주게이션이 깨진 형태로서 콘주게이션으로 이어진 구조보다 넓은 밴드갭을 형성할 수 있다. 따라서, 상기 축합환 화합물은 적절한 콘주게이션 상태에 의한 넓은 밴드갭 효과에 의해 청색 발광물질로 유용하게 사용될 수 있다.

참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다. 상기 유기 발광 소자는 기관(10), 제1전극(20), 정공 주입층(30), 정공 수송층(40), 발광층(50), 전자 수송층(60), 전자 주입층(70) 및 제2전극(80)을 차례로 구비한다.

- [0155] 먼저, 상기 기관(10)으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기관을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기관 또는 투명 플라스틱 기관을 사용할 수 있다.
- [0156] 상기 제1전극(20)은 기관 상부에 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(20)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록 제1전극용 물질은 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(20)은 반사형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 이용하면, 상기 제1전극(20)을 반사형 전극으로 형성할 수도 있다.
- [0157] 상기 제1전극(20)은 단일층 또는 2 이상의 다층 구조를 가질 수 있는 등, 다양한 변형예가 가능하다.
- [0158] 상기 제1전극(20) 상부로는 정공 주입층(30), 정공 수송층(40), 발광층(50), 전자 수송층(60) 및 전자 주입층(70)을 포함한 유기층이 형성되어 있다.
- [0159] 상기 정공 주입층(30)은 상기 제1전극(20) 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0160] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층(30)을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층(30)의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층(30)의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500℃, 진공도 약 10⁻⁸ 내지 약 10⁻³ torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0161] 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층(30)을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공 주입층(30)의 재료로서 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층(30)의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80℃ 내지 200℃의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0162] 정공 주입 물질로는 공지된 정공 주입 물질을 사용할 수 있는데, 공지된 정공 주입 물질로는, 예를 들면, N,N'-디페닐-N,N'-비스-[4-(페닐-m-톨일-아미노)-페닐]-비페닐-4,4'-디아민(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine: DNTPD), 구리프탈로시아닌(CuPc) 등의 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA [4,4',4''-tris (3-methylphenylphenylamino) triphenylamine], TDATA, 2-TNATA, Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐린/도데실벤젠설포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid: 폴리아닐린/캄페르설포산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리아닐린/폴리(4-스티렌설포네이트)등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.



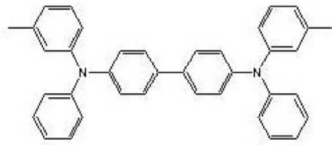
- [0163]
- [0164] 상기 정공 주입층(30)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 주입층(30)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족

스러운 정도의 정공 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0165] 다음으로 상기 정공 주입층(30) 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공 수송층(40)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의하여 정공 수송층(40)을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층(30)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0166] 정공 수송 물질로는 공지된 정공 수송 물질을 사용할 수 있다. 공지된 정공 수송 재료로는, 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), NPD(N,N'-di-1-naphthyl-N,N'-diphenyl-1,1'-

[0167] biphenyl-4,4'diamine) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



TPD

[0168]

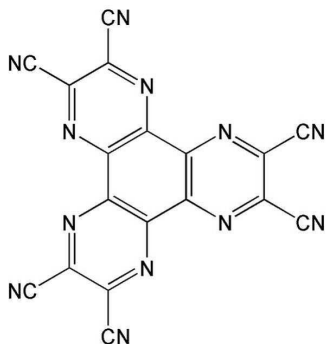
[0169] 상기 정공 수송층(40)의 두께는 약 50Å 내지 약 2000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1500Å일 수 있다. 상기 정공 수송층(40)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0170] 또는, 상술한 바와 같은 정공 주입층과 정공 수송층 대신, 정공 주입 기능과 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층을 형성할 수 있다. 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 물질은 공지된 재료 중에서 선택될 수 있다.

[0171] 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 공지된 정공 주입 물질, 공지된 정공 수송 물질 및/또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 물질 외에, 막의 도전성 등을 향상시키기 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.

[0172] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라사이아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라사이아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 200 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0173] <화합물 200>



[0174]

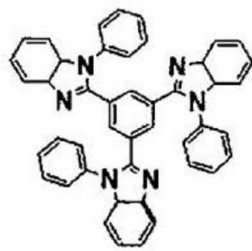
[0175] 상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층이 상기 전하-생성 물질을 더 포함할 경우, 상기 전하-생성 물질은 상기 층들 중에 균일하게(homogeneous) 분산되거나, 또는 불균일하게 분포될 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0176] 상기 정공 수송층(40) (또는, 선택적으로 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층) 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(50)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀코팅법에 의해 발광층(50)을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만,

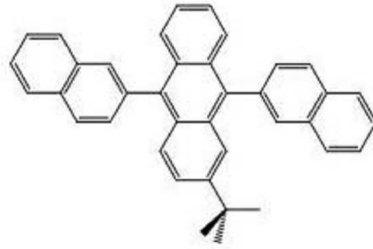
일반적으로 정공 주입층(30)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0177] 상기 발광층 물질로는 상기 화학식 1의 축합환 화합물 및/또는 공지의 발광 재료(호스트 및/또는 도펀트) 중 1종 이상의 물질을 사용할 수 있다. 예를 들어, 상기 발광층은 공지의 호스트를 포함하고, 도펀트로서, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함할 수 있다. 여기서, 상기 축합환 화합물은 청색 도펀트로서의 역할을 할 수 있다.

[0178] 공지의 호스트의 예로는 Alq_3 , CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), PVK(폴리(n-비닐카바졸)), 9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센(ADN), TCTA, TPBI(1,3,5-트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene)), TBADN(3-tert-부틸-9,10-디(나프트-2-일) 안트라센), E3, DSA(디스티릴 아릴렌) 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

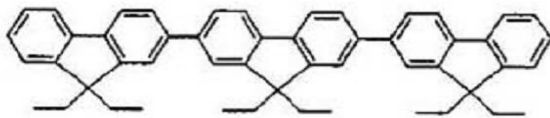


TPBI



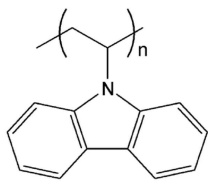
TBADN

[0179]



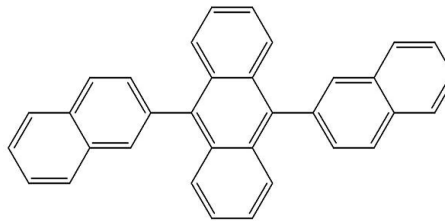
E3

[0180]



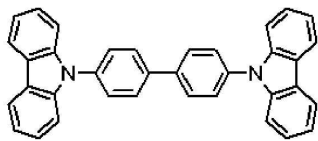
[0181]

PVK



[0182]

ADN

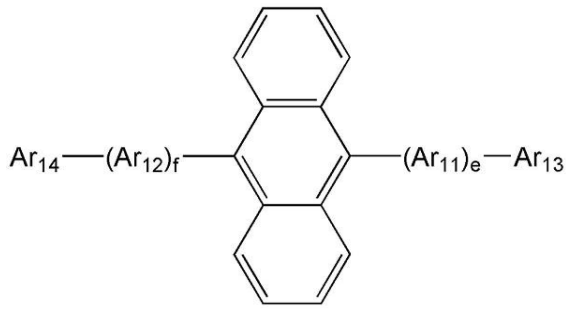


CBP

[0183]

[0184] 또는, 상기 호스트는 하기 화학식 60으로 표시되는 안트라센계 화합물일 수 있다:

[0185] <화학식 60>



[0186]

[0187] 상기 화학식 60 중, Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴렌기이고; 상기 Ar_{13} 및 Ar_{14} 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 아릴기이고; e 및 f는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수일 수 있다.

[0188] 예를 들어, 상기 화학식 60 중, Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 페닐렌기; 또는 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중 하나 이상으로 치환된 페닐렌기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

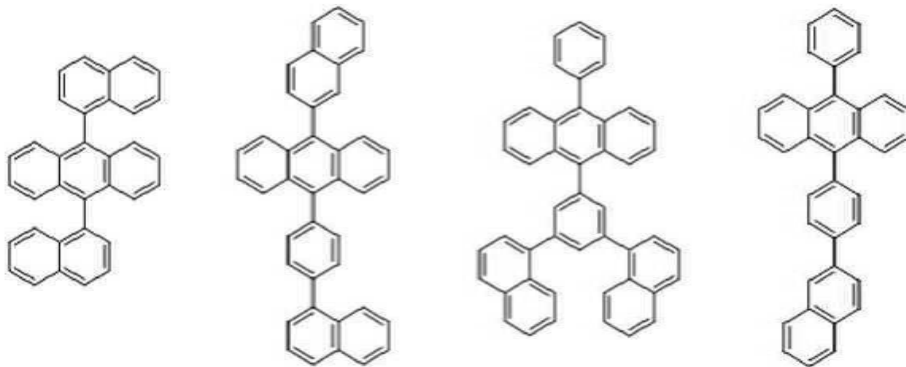
[0189] 상기 화학식 60 중 e 및 f는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0190] 상기 화학식 60 중, Ar_{13} 및 Ar_{14} 는 서로 독립적으로, 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중 하나 이상으로 치환된 C_1 - C_{10} 알킬기; 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 파이레닐기; 페난트레닐기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1 - C_{60} 알킬기, C_2 - C_{60} 알케닐기, C_2 - C_{60} 알키닐기 및 C_1 - C_{60} 알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 파이레닐기 및 페난트레닐기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0191] 예를 들어, 상기 화학식 60 중, Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 페닐렌기; 또는 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중 하나 이상으로 치환된 페닐렌기;이고, e 및 f는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고; Ar_{13} 및 Ar_{14} 는 서로 독립적으로, 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중 하나 이상으로 치환된 C_1 - C_{10} 알킬기; 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 파이레닐기; 및 페난트레닐기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0192] 예를 들어, 상기 화학식 60으로 표시된 안트라센계 화합물은 하기 화합물 BH1 내지 BH39 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

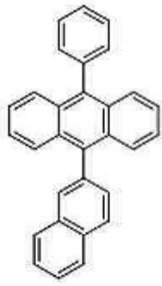
[0193] BH01 BH02 BH03 BH04



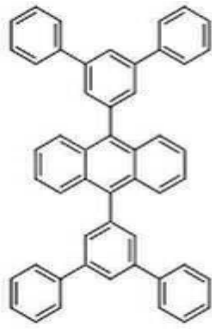
[0194]

[0195]

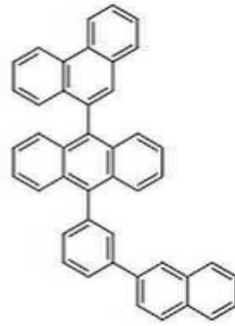
BH05



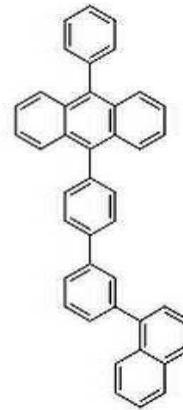
BH06



BH07



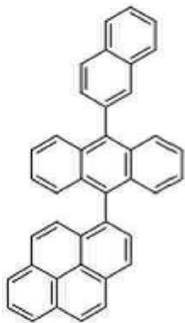
BH08



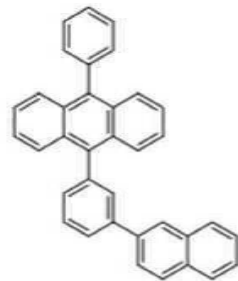
[0196]

[0197]

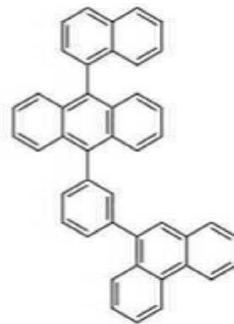
BH09



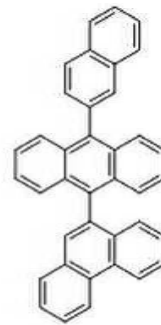
BH10



BH11



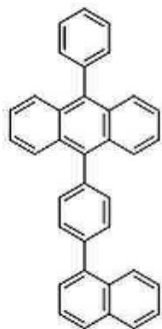
BH12



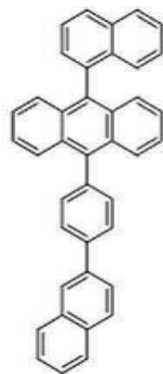
[0198]

[0199]

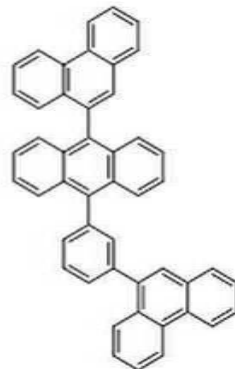
BH13



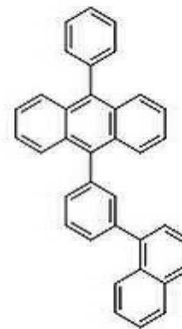
BH14



BH15

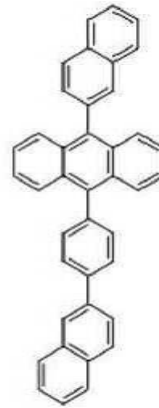
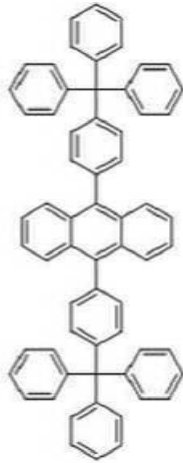
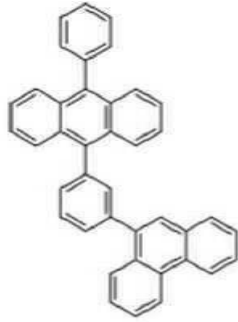
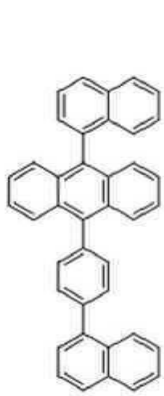


BH16



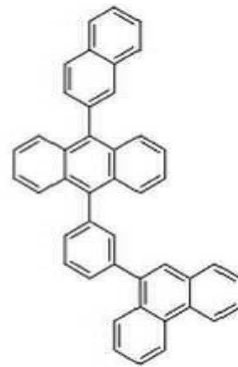
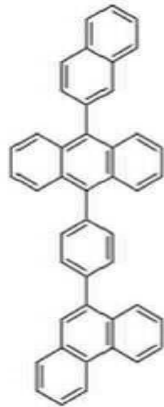
[0200]

[0201] BH17 BH18 BH19 BH20



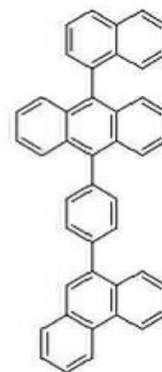
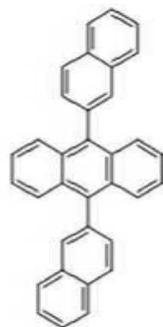
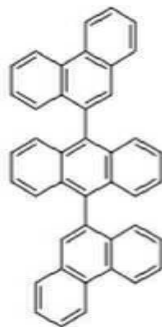
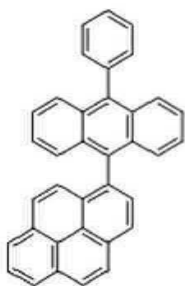
[0202]

[0203] BH21 BH22 BH23 BH24



[0204]

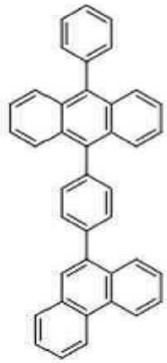
[0205] BH25 BH26 BH27 BH28



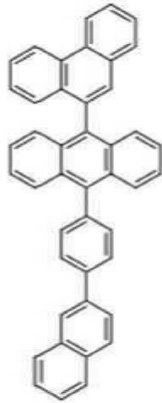
[0206]

[0207]

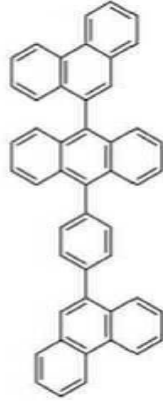
BH29



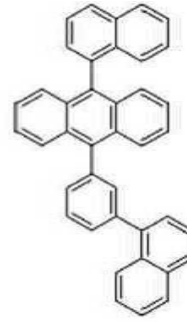
BH30



BH31



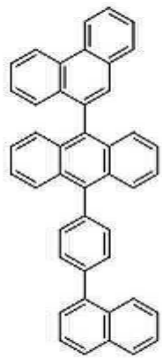
BH32



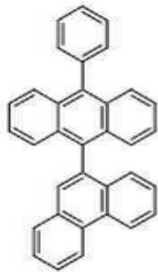
[0208]

[0209]

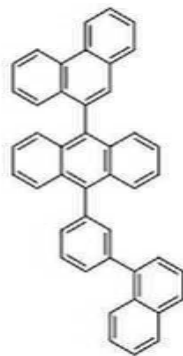
BH33



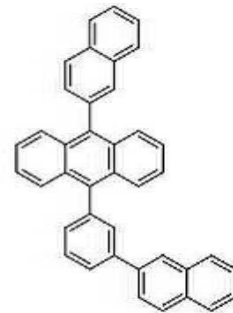
BH34



BH35



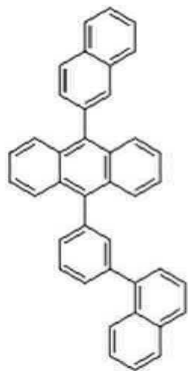
BH36



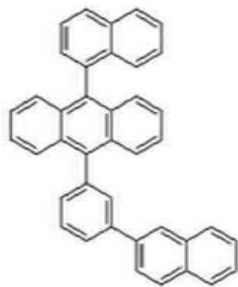
[0210]

[0211]

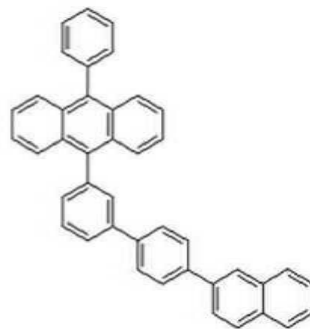
BH37



BH38



BH39



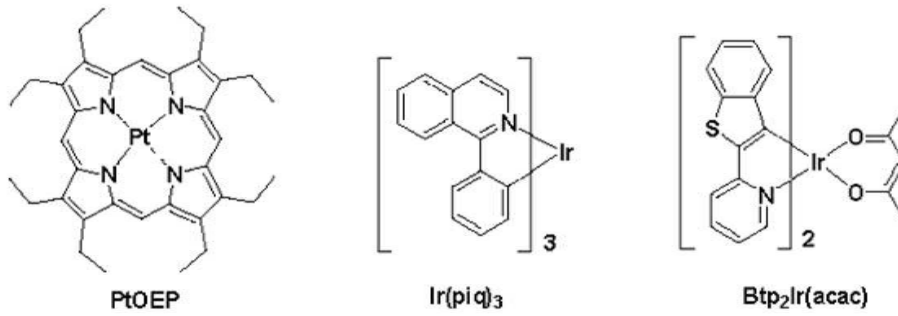
[0212]

[0213]

한편, 풀 컬러 유기 발광 소자를 형성하기 위하여, 적색 발광층 및 녹색 발광층을 추가로 패터닝할 수 있다.

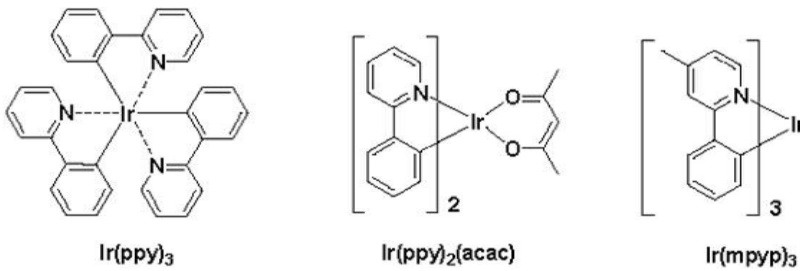
[0214]

이 때, 공지된 적색 도펀트로서 PtOEP, Ir(piq)₃, Btp₂Ir(acac) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

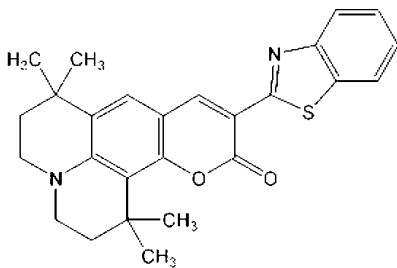


[0215]

[0216] 또한, 공지된 녹색 도펀트로서, Ir(ppy)₃ (ppy = 페닐피리딘), Ir(ppy)₂(acac), Ir(mpyp)₃, C545T 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0217]



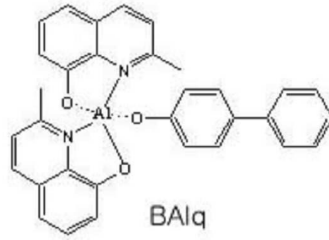
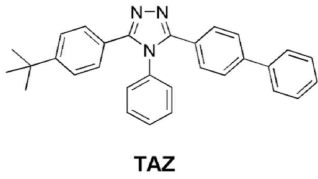
[0218]

[0219] C545T

[0220] 상기 발광층(50) 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

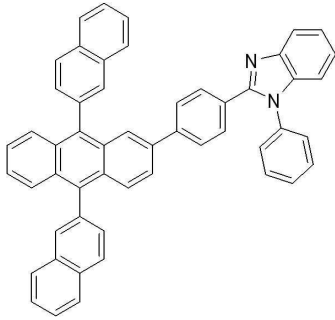
[0221] 상기 발광층(50)의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층(50)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

[0222] 다음으로 전자 수송층(60)을 진공증착법, 또는 스펀코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공증착법 및 스펀코팅법에 의해 전자 수송층(60)을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층(30)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 상기 전자 수송층 재료로는 전자 주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 공지의 전자 수송 물질을 사용할 수 있다. 공지의 전자 수송 물질의 예로는, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq₃), TAZ, Balq, 베릴륨 비스(벤조퀴놀리노-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: Bebq₂), ADN, 화합물 201, 화합물 202 등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

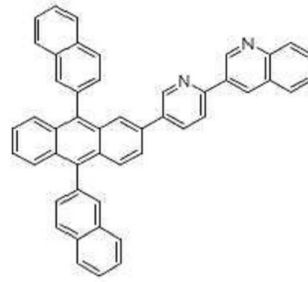


[0223]

[0224] <화합물 201>



<화합물 202>



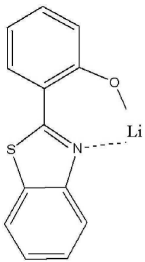
[0225]

[0226] 상기 전자 수송층(60)의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층(60)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0227] 또는, 상기 전자 수송층(60)은 상술한 바와 같은 공지의 전자 수송성 유기 화합물 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0228] 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체의 비제한적인 예로는, 리튬 퀴놀레이트 (LiQ) 또는 하기 화합물 203 등을 들 수 있다:

[0229] <화합물 203>



[0230]

[0231] 또한 전자 수송층(60) 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(70)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

[0232] 상기 전자 주입층 형성 재료로는 LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0233] 상기 전자 주입층(70)의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층(70)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0234] 전자 주입층(70) 상부로는 제2전극(80)이 구비되어 있다. 상기 제2전극(80)은 전자 주입 전극인 캐소드(Cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극 형성용 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 박막으로 형성하여 투과형 전극을 얻을 수 있다. 한편, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용한 투과형 전극을 형성할 수 있

는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0235] 상기 유기 발광 소자는 디스플레이 장치 및 단색 또는 백색 조명 장치 등에 사용될 수 있다. 상기 디스플레이 장치 및 조명 장치는 하나 이상의 박막 트랜지스터를 더 구비할 수 있으며, 상기 유기 발광 소자의 제1전극은 상기 박막 트랜지스터에 포함된 소스 및 드레인 전극 중 하나와 접촉될 수 있다.

[0236] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0237] [실시예]

[0238] **합성예 1: 화합물 1의 합성**

[0239] **합성예 1-(1): 중간체 1-a의 합성**

[0240] 하기 반응식 1에 따라, 중간체 1-a를 합성하였다:

[0241] <반응식 1>



[0242]

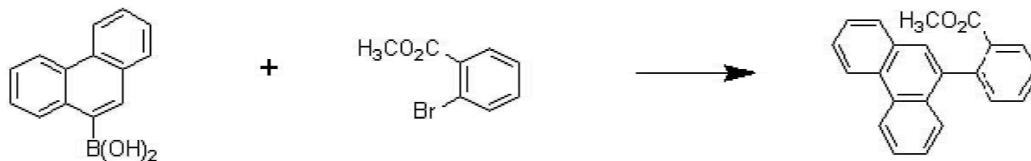
[0243] 중간체 1-a

[0244] 테트라하이드로퓨란 500ml가 들어 있는 둥근 바닥 플라스크에 9-브로모 페난트렌 50g(194mmol)을 넣어준 후 질소 분위기 하에서 온도를 -78℃로 조절하였다. 30분 후 노르말 부틸리튬 146ml(233mmol)을 천천히 적가한 다음, 1시간 후 트리메틸보레이트 28.3g(274mmol)을 천천히 적가하고, 상온까지 승온시켰다. 상온에서 약 12시간 정도 교반 후 2N(노르말) 염산 수용액을 산이 될 때까지 반응 용액에 적가한 다음, 추출하여 유기층을 모아 감압증류하였다. 노르말 hex산을 가지고 재결정을 한 후 필터하여 건조한 결과, 흰색 고체의 중간체 1-a (35g, 수율 81%)를 수득하였다.

[0245] **합성예 1-(2): 중간체 1-b의 합성**

[0246] 하기 반응식 2에 따라 중간체 1-b를 합성하였다:

[0247] <반응식 2>



[0248]

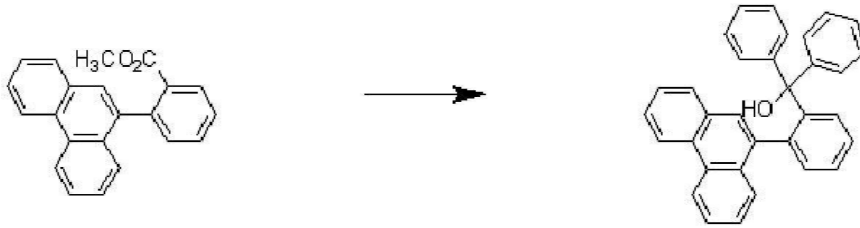
[0249] 중간체 1-b

[0250] 둥근 바닥 플라스크에 메틸 2-브로모벤조에이트 24g (112mmol), 중간체 1-a 34.7g(0.156mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 {Pd(PPh₃)₄} 2.6 g (2 mmol), 탄산칼륨 30.9 g (223mmol), 물 50 mL, 톨루엔 125 ml 및 테트라하이드로퓨란 125 mL를 투입하고 12시간 동안 환류시켰다. 반응 종결 후 반응물을 층 분리하여 유기층을 감압 농축 후, 컬럼분리 하여 건조한 결과, 흰색 고체인 중간체 1-b(25 g, 수율 72%)를 수득하였다.

[0251] **합성예 1-(3): 중간체 1-c의 합성**

[0252] 하기 반응식 3에 따라, 중간체 1-c를 합성하였다:

[0253] <반응식 3>



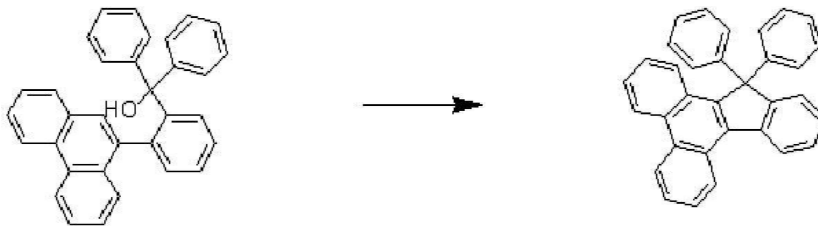
[0254]
 [0255] 중간체 1-c

[0256] 테트라하이드로퓨란 250ml가 들어 있는 둥근 바닥 플라스크에 중간체 1-b 25g(80mmol)을 넣어준 후, 질소 분위기 하에서 온도를 -78℃까지 내렸다. 30분 후 1.6M 페닐리튬 150ml(240mmol)을 천천히 적가하면서, 1시간 후 상온까지 승온시켰다. 상온에서 약 2 시간 정도 교반 후 염화 암모니움 수용액을 적가한 다음, 추출하여 유기층을 모아 감압증류하였다. 노르말 헥산으로 재결정한 후 필터하여 건조한 결과, 흰색 고체인 중간체 1-c(29g, 수율 83%)를 수득하였다.

[0257] 합성예 1-(4): 중간체 1-d의 합성

[0258] 하기 반응식 4에 따라 중간체 1-d를 합성하였다:

[0259] <반응식 4>



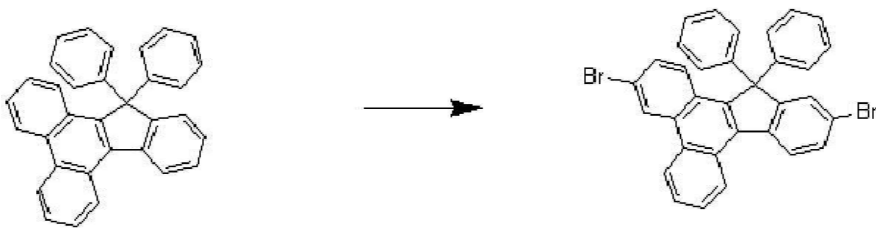
[0260]
 [0261] 중간체 1-d

[0262] 아세트산 290ml가 들어 있는 둥근 바닥 플라스크에 중간체 1-c 29g(66mmol)을 넣었다. 이후, 온도를 80℃까지 승온시킨 후 염산 수용액 1~2방울을 추가하고, 2시간 정도 환류시킨 다음, 온도를 상온으로 조정하였다. 이로부터 생성된 고체를 필터하여 건조시킨 결과, 흰색 고체인 중간체 1-d(27g, 수율 93%)의 흰색 고체를 수득하였다.

[0263] 합성예 1-(5): 중간체 1-e의 합성

[0264] 하기 반응식 5에 따라 중간체 1-e를 합성하였다:

[0265] <반응식 5>



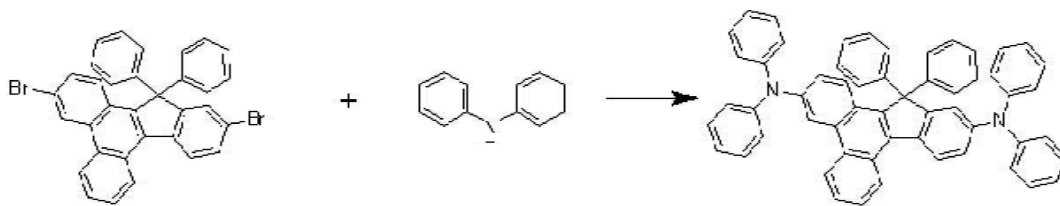
[0266]
 [0267] 중간체 1-e

[0268] 클로로포름 216ml가 들어 있는 둥근 바닥 플라스크에 중간체 1-d 27g(65mmol)을 넣어준 후 교반하였다. 브로민 28.9g(181mmol)을 클로로포름 54ml로 희석시킨 후 이를 천천히 적가하고, 48시간 동안 상온에서 교반시켰다. 이로부터 생성된 고체를 필터 후 건조시킨 결과, 흰색 고체인 중간체 1-e(27g, 수율 93%)를 수득하였다.

[0269] 합성예 1-(6): 화합물 1의 합성

[0270] 하기 반응식 7에 따라 화합물 1을 합성하였다:

[0271] <반응식 7>



[0272]

[0273]

화합물 1

[0274] 둥근 바닥 플라스크에 중간체 1-e 10g (17 mmol), 디페닐아민 7.6 g(45mmol), 팔라듐 아세테이트 {Pd(OAc)₂} 0.2 g (0.7 mmol), 소듐 터셔리 부톡사이드 6.7 g (69 mmol), 트리 터셔리 부틸포스핀 0.14 g (0.7 mmol) 및 톨루엔 100ml를 투입하고 100℃의 반응온도 하에서 2시간 동안 반응시켰다. 반응이 종결되면, 필터 후 여액을 농축시킨 후 컬럼크로마토그래피로 분리하였다. 톨루엔과 메탄올로 재결정하여 생성된 고체를 여과 후 건조한 결과, 화합물 1(5.7 g, 연노란색 고체, 수율 40%)을 수득하였다.

[0275] MS: m/z 752 [M]⁺

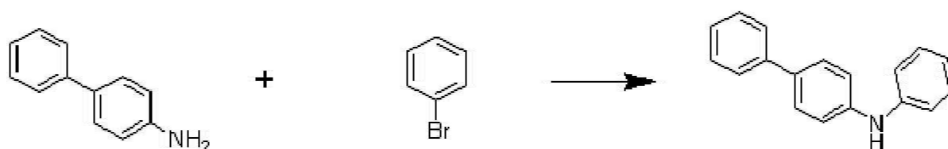
[0276] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.89 (d, 1H), 8.47(d, 1H), 8.40(s, 1H), 8.24(d, 1H), 7.73(t, 1H), 7.63(m, 2H), 7.27(m, 23H), 7.01(m, 10H)

[0277] **합성예 2: 화합물 3의 합성**

[0278] **합성예 2-(1): 중간체 2-a의 합성**

[0279] 하기 반응식 8에 따라 중간체 2-a를 합성하였다:

[0280] <반응식 8>



[0281]

[0282]

중간체 2-a

[0283] 둥근 바닥 플라스크에 4-아미노 비페닐 16.3g (96 mmol), 브로모벤젠 15.8g(101 mmol), 팔라듐 아세테이트 0.32g(1.4mmol), 2,2-비스 다이페닐포스피노-1,1'-바이나프틸 0.9g(1.4mmol), 소듐 터셔리 부톡사이드 18.5g(193mmol)과 톨루엔 160ml를 투입 후 24시간 환류하였다. 상온으로 온도를 조절한 후, 필터하여 여액을 농축하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하였다. 이 후, 디클로로메탄과 메탄올로 재결정하여 여과 후 건조한 결과 흰색 고체인 중간체 2-a(15g, 수율 60%)를 수득하였다.

[0284] **합성예 2-(2): 화합물 3의 합성**

[0285] 상기 합성예 1-(6)에서 디페닐 아민 대신 중간체 2-a를 사용한 것을 제외하고는, 합성예 1-(6)과 동일한 방법을 이용하여 화합물 3(3.7g, 연노란색 고체, 수율 31%)을 수득하였다.

[0286] MS: m/z 904[M]⁺

[0287] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.90(d, 1H), 8.51(m, 2H), 8.27(d, 1H), 7.75(t, 2H), 7.61(m, 6H), 7.48(m, 9H), 7.36(m, 9H), 7.23(m, 11H), 7.12(m, 7H)

[0288] **합성예 3: 화합물 9의 합성**

[0289] 합성예 2-(1)에서 4-아미노 비페닐 대신 4-터셔리-부틸아닐린을 사용하고, 브로모 벤젠 대신 1-브로모-4-터셔

리-부틸벤젠을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 9(4.7g, 연노란색 고체, 수율 39%)를 수득하였다.

[0290] MS: m/z 977[M]⁺

[0291] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.89(s, 1H), 8.49(d, 1H), 8.23(s, 1H), 7.68(m, 3H), 7.31(m, 21H), 7.05(m, 9H), 1.38(s, 18H), 1.37(s, 18H)

[0292] **합성예 4: 화합물 10의 합성**

[0293] 합성예 2-(1)에서 4-아미노 비페닐 대신 4-터셔리-부틸아닐린을 사용하고, 브로모 벤젠 대신 브로모 벤젠-d₅을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 10(2.7g, 연노란색 고체, 수율 24%)을 수득하였다.

[0294] MS: m/z 875[M]⁺

[0295] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.91(d, 1H), 8.45(m, 2H), 8.26(d, 1H), 7.67(m, 3H), 7.30(m, 15H), 7.07(m, 6H)

[0296] **합성예 5: 화합물 11의 합성**

[0297] 합성예 2-(1)에서 4-아미노 비페닐 대신 4-터셔리-부틸아닐린을 사용하고, 브로모 벤젠 대신 1-브로모-4-(트리메틸실릴)벤젠을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여, 화합물 11(6.4g, 연노란색 고체, 수율 67%)을 수득하였다.

[0298] MS: m/z 1009[M]⁺

[0299] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.88(d, 1H), 8.51(d, 1H), 8.43(s, 1H), 8.24(d, 1H), 7.73(t, 1H), 7.64(m, 2H), 7.21(m, 29H), 1.36(s, 9H), 1.35(s, 9H), 0.30(s, 9H), 0.29(s, 9H)

[0300] **합성예 6: 화합물 12의 합성**

[0301] 합성예 2-(1)에서 브로모 벤젠 대신 브로모 벤젠 대신 1-브로모-4-터셔리-부틸벤젠을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여, 화합물 12(5.1g, 연노란색 고체, 수율 49%)를 수득하였다.

[0302] MS: m/z 1017[M]⁺

[0303] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.93(s, 1H), 8.50(m, 2H), 8.29(d, 1H), 7.40(m, 42H), 1.41(s, 9H), 1.40(s, 9H)

[0304] **합성예 7: 화합물 28의 합성**

[0305] 합성예 1-(3)에서 페닐 리튬 대신 메틸 마그네슘 브로마이드를 사용한 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 연노란색 고체인 화합물 28(3.3g, 연노란색 고체, 수율 38%)을 수득하였다.

[0306] MS: m/z 628[M]⁺

[0307] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.84(s, 1H), 8.53(m, 2H), 8.26(s, 2H), 7.42(m, 25H), 1.75(s, 6H)

[0308] **합성예 8: 화합물 29의 합성**

[0309] 합성예 1-(3)에서 페닐 리튬 대신 메틸 마그네슘 브로마이드를 사용하고, 합성예 1-(6)에서 디페닐 아민 대신

중간체 2-a를 사용한 것을 제외하고는, 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 29(3.3g, 연노란색 고체, 수율 38%)를 수득하였다.

[0310] MS: m/z 780[M]⁺

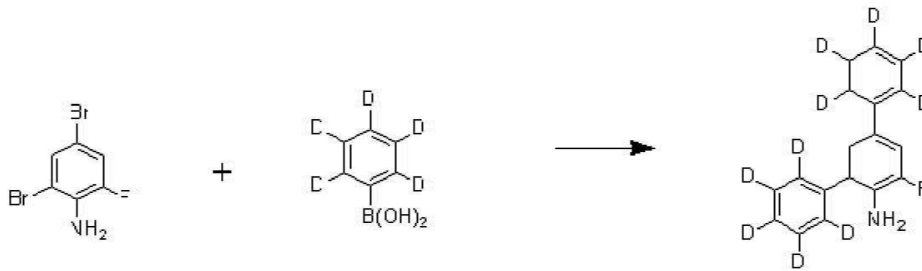
[0311] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.85(s, 1H), 8.55(m, 2H), 8.28(s, 2H), 7.47(m, 33H), 1.76(s, 6H)

[0312] **합성예 9: 화합물 14의 합성**

[0313] **합성예 9-(1): 중간체 9-a의 합성**

[0314] 하기 반응식 9에 따라 중간체 9-a를 합성하였다:

[0315] <반응식 9>



[0316]

[0317]

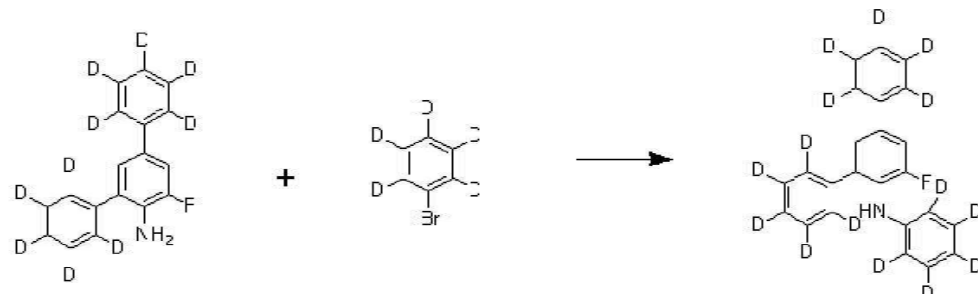
중간체 9-a

[0318] 1L 둥근 바닥 플라스크에 2,4-다이브로모-6-플루오로아닐린 30 g(111.56 mmol), 페닐보론산-d₅ 31.2 g(245.44 mmol), 탄산칼륨 61.9 g(446.27 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 2.6 g(2.20 mmol), 물 120mL, 톨루엔 300ml 및 테트라하이드로퓨란 300mL를 투입하고 80℃의 반응온도 하에서 24시간 동안 반응시켰다. 반응이 종결되면, 반응의 결과물을 층 분리하여 수층을 제거하고 유기층을 분리하여 감압농축한 후, 헥산과 디클로로메탄을 전개용매로 사용하여 칼럼크로마토그래피로 분리하여 얻은 고체를 건조한 결과, 흰색고체인 중간체 9-a(24.2 g 수율 79.4%)를 수득하였다.

[0319] **합성예 9-(2): 중간체 9-b의 합성**

[0320] 하기 반응식 10에 따라 중간체 9-b를 합성하였다:

[0321] <반응식 10>



[0322]

[0323]

중간체 9-b

[0324] 둥근 바닥 플라스크에 중간체 9-b 15g (55 mmol), 브로모벤젠-d₅ 8.9g(55mmol), 팔라듐 아세테이트 0.25g(1.1mmol), 2,2-비스 다이페닐포스피노-1,1'-바이나프틸 0.68g(1.1mmol), 소듐 터셔리 부톡사이드 10.6g(110mmol)과 톨루엔 150ml를 투입 후 24시간 환류하였다. 필터하여 여액을 농축하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하였다. 이 후, 디클로로메탄과 메탄올로 재결정하여 여과 후 건조한 결과 흰색 고체인 중간체 9-b(14g, 수율 72%)를 수득하였다.

[0325] 합성예9-(3): 화합물 14의 합성

[0326] 합성예 1-(6) 중 디페닐아민 대신 상기 중간체 9-b를 사용하였다는 점을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 14(3.1g, 연노란색 고체, 수율 24%)를 수득하였다.

[0327] 합성예 1-6 과 동일한 방법을 이용하여 화합물 14(3.1g, 연노란색 고체, 수율 24%)를 수득하였다.

[0328] MS: m/z 1123[M]⁺

[0329] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.81(s, 1H), 8.35(d, 1H), 8.05(s, 2H), 7.71(t, 2H), 7.34(m, 16H), 6.84(d, 2H)

[0330] 합성예 10: 화합물 17의 합성

[0331] 합성예 2-(1) 중 4-아미노 비페닐 대신 3-시아노아닐린을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 17(4.3g, 연노란색 고체, 수율 42%)를 수득하였다.

[0332] MS: m/z 803[M]⁺

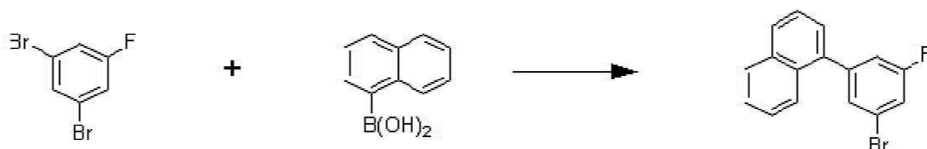
[0333] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.90(d, 1H), 8.51(m, 2H), 8.33(d, 1H), 7.74(m, 3H), 7.25(m, 29H), 6.93(d, 2H)

[0334] 합성예 11: 화합물 22의 합성

[0335] 합성예 11-(1): 중간체 11-a의 합성

[0336] 하기 반응식 11에 따라 중간체 11-a를 합성하였다:

[0337] <반응식 11>



[0338]

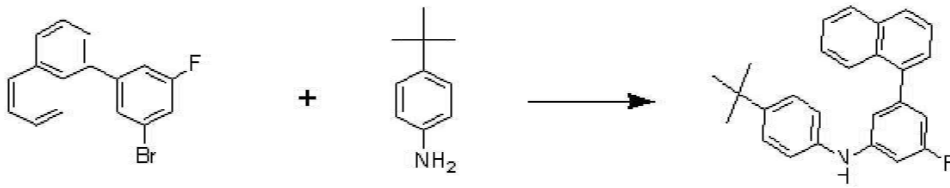
[0339] 중간체 11-a

[0340] 반응 용기에 중간체 1,3-디브로모-5-플루오로벤젠 50g (197mmol), 중간체 1-나프틸 보론산28.8(167mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 4.6g(3.9mmol), 포타슘카보네이트 54.4g(394mmol), 톨루엔 450ml과 물 150ml를 넣은 후 환류시켰다. 반응이 완료되면 추출하여 유기층을 감압증류하고, 컬럼크로마토그래피로 분리하여 투명한 액상의 중간체 11-a(25g, 수율42%)를 수득하였다.

[0341] 합성예 11-(2): 중간체 11-b의 합성

[0342] 하기 반응식 12에 따라 중간체 11-b를 합성하였다:

[0343] <반응식 12>



[0344]
 [0345] 중간체 11-b

[0346] 상기 반응식 8에서 4-아미노 비페닐 대신 4-tert-부틸아닐린, 브로모벤젠 대신 중간체 15-a를 사용한 것을 제외하고 동일한 방법을 사용하여 중간체 11-b를 합성하였다.

[0347] 합성예 11-(3): 화합물 22의 합성

[0348] 합성예 1-(6) 중 디페닐아민 대신 상기 중간체 11-b를 사용하였다는 점을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 22(1.6g, 연노란색 고체, 수율 21%)를 수득하였다.

[0349] 합성예 1-6과 동일한 방법을 이용하여 화합물 22(1.6g, 연노란색 고체, 수율 21%)를 수득하였다.

[0350] MS: m/z 1153[M]⁺

[0351] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.88(d, 1H), 8.56(m, 2H), 8.28(d, 1H), 7.88(m, 6H), 7.71(m, 3H), 7.30(m, 30H), 6.86(m, 5H), 1.35(s, 9H), 1.34(s, 9H)

[0352] 합성예 12: 화합물 26의 합성

[0353] 합성예 1-(6) 중 디페닐아민 대신 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluorene-2-amine)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 26(2.7g, 연노란색 고체, 수율 36%)를 수득하였다.

[0354] MS: m/z 985[M]⁺

[0355] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.89(s, 1H), 8.37(m, 3H), 7.64(m, 7H), 7.24(m, 33H), 1.42(s, 6H), 1.36(s, 6H)

[0356] 합성예 13: 화합물 54의 합성

[0357] 합성예 2-(1) 중, 브로모벤젠 대신 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 54(3.3g, 연노란색 고체, 수율 37%)를 수득하였다.

[0358] MS: m/z 1013[M]⁺

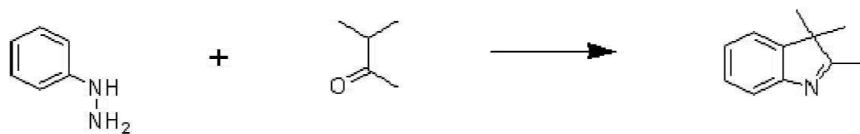
[0359] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.86(s, 1H), 8.50(d, 1H), 8.30(s, 2H), 7.53(m, 39H), 1.76(s, 6H), 1.49(s, 12H)

[0360] 합성예 14: 화합물 64의 합성

[0361] 합성예 14-(1): 중간체 14-a의 합성

[0362] 하기 반응식 13에 따라 중간체 14-a를 합성하였다:

[0363] <반응식 13>



[0364]

[0365]

중간체 14-a

[0366]

반응용기에 아세트산 500ml, 3-메틸-2부타논 120g(1.39mol)을 넣은 후 60도 까지 승온시킨다. 페닐히드라진 150g(1.39mol)을 천천히 적가 후 환류시킨다. 반응이 종료되면 물 500ml 넣고 수산화 나트륨으로 중화시킨다. 에틸아세테이트를 넣어 여러 차례 추출을 반복 후 유기층을 감압증류한다. 컬럼크로마토 그래피로 분리하여 중간체 14-a(156g, 수율 71%)를 얻었다.

[0367]

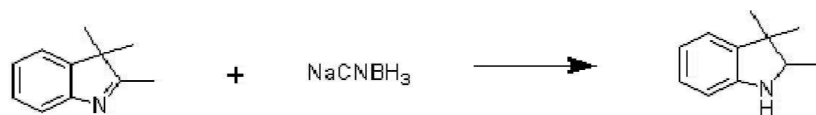
합성예 14-(2): 중간체 14-b의 합성

[0368]

하기 반응식 14에 따라 중간체 14-b를 합성하였다:

[0369]

<반응식 14>



[0370]

중간체 14-b

[0371]

중간체 14-a 100g(0.628mol) 과 아세트산 500ml를 반응용기에 넣는다. 소듐 사이아노 보로 하이드라이드 118g(1.88mo)을 발열이 심하지 않게 천천히 적가해준다. 5시간동안 교반시켜준 후 물 300ml를 넣고 수산화 나트륨으로 염기성을 만든다. 에틸아세테이트로 넣은 후 여러 번 추출하여 유기층을 농축한다. 컬럼 크로마토 그래피로 분리하여, 중간체 14-b(55g, 수율 54%)를 얻었다.

[0372]

합성예 14-(3): 화합물 64의 합성

[0373]

합성예 1-(6) 중 디페닐아민 대신 상기 중간체 14-b을 사용하였다는 점을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 64(1.8g, 연노란색 고체, 수율 34%)를 수득하였다.

[0374]

MS: m/z 737[M]⁺

[0375]

¹H NMR (CDCl₃) δ 8.90(s, 1H), 8.76(d, 1H), 8.57(s, 1H), 8.43(d, 1H), 7.78(m, 3H), 7.16(m, 2H), 4.01(s, 1H), 3.83(s, 1H), 1.37(s, 3H), 1.35(s, 3H), 1.26(m, 6H), 1.14(m, 6H)

[0376]

합성예15: 화합물 68의 합성

[0377]

합성예 15-(1): 중간체 15-a의 합성

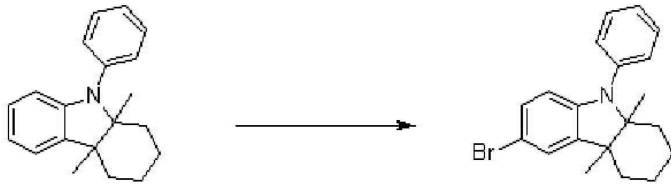
[0378]

하기 반응식 15에 따라 중간체 15-a를 합성하였다:

[0397] 합성예 15-(4): 중간체 15-d의 합성

[0398] 하기 반응식 18에 따라 중간체 15-d를 합성하였다:

[0399] <반응식 18>



[0400]

[0401]

중간체 15-d

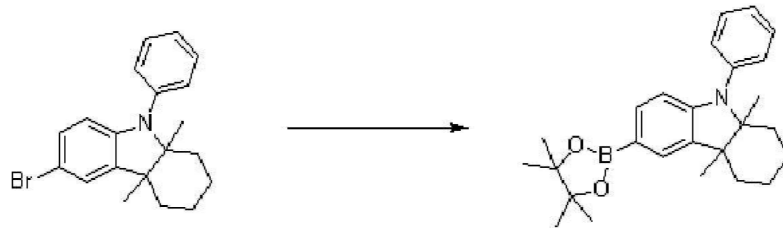
[0402] 500ml 둥근 바닥 플라스크에 반응식 3로부터 얻은 중간체 1-c 44g (0.158mol)와 디메틸포름아마이드 130ml를 넣은 후 0도로 온도를 낮춘다. N-브로모수신이미드 25.2g(0.142mol)을 디메틸포름아마이드 220ml에 녹여 천천히 적가하였다. 적가 완료 후 상온으로 승온하여 2시간 동안 교반하였다.

[0403] 반응이 완료되면 물과 디클로로메탄으로 추출하여 유기층을 황산 마그네슘으로 무수 처리하여 감압 농축한다. 헥산을 부어 생성된 결정을 여과한다. 중간체 15-d(45g 수율80%)를 수득하였다.

[0404] 합성예 15-(5): 중간체 15-e의 합성

[0405] 하기 반응식 19에 따라 중간체 15-e를 합성하였다:

[0406] <반응식 19>



[0407]

[0408]

중간체 15-e

[0409] 1L 둥근 바닥 플라스크에 반응식 4로부터 얻은 중간체 1-d 40g (0.112mol), 비스(피나콜라토)디보론 34g(0.134mol), 팔라듐(II) 클로라이드-1-,1'-비스(디페닐포스포노)페로센 2.73g(0.003mol), 포타슘아세테이트 32.9g(0.335mol)과 톨루엔 480ml를 넣은 후 8시간 동안 환류시킨다. 반응이 완료되면 셀라이트를 깔고 여과한 후 감압 농축한다. 헥산과 에틸아세테이트를 전개 용매로 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하여, 중간체 1-e(26g 수율58%)를 수득하였다.

[0410] 합성예 15-(6): 화합물 68의 합성

[0411] 둥근 바닥 플라스크에 중간체 1-e 5.0g (9mmol), 중간체 1-e 8.4g(2.1mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.4g(0.3mmol), 포타슘카보네이트 3.6g(26mmol), 1,4-다이옥산 25ml, 톨루엔 25ml과 물 10ml를 넣은 후 환류시켰다. 반응이 완료되면 물과 헥산을 넣는다. 생성된 결정을 여과한다. 결정을 재결정하여 화합물 68(5.3g 수율57%)를 수득하였다.

[0412] MS: m/z 969[M]⁺

[0413] ¹H NMR (CDC₁₃) δ 9.07(d, 1H), 8.95(m, 2H), 8.48(d, 1H), 7.75(m, 6H), 7.37(m, 24H), 6.62(s, 2H), 2.00(m, 2H), 1.60(m, 14H), 1.30(s, 3H), 1.28(s, 3H), 1.18(s, 3H), 1.15(s, 3H)

[0414] **실시예 1**

[0415] ITO 글래스의 발광면적이 2mm × mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 상기 ITO 글래스를 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1×10^{-7} torr가 되도록 한 후 상기 ITO 상에 CuPc를 증착하여 800Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상에 α-NPD를 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 상기 정공 수송층 상에 화합물 BH1 및 화합물 1(3중량%)을 공증착하여 250Å 두께의 발광층을 형성한 다음, 상기 발광층 상에 Alq₃를 증착하여 350Å 두께의 전자 수송층을 형성하였다. 이어서, 5Å 두께의 LiF 전자 주입층 및 500Å 두께의 Al 전극을 차례로 형성하여, 유기 발광 소자를 완성하였다.

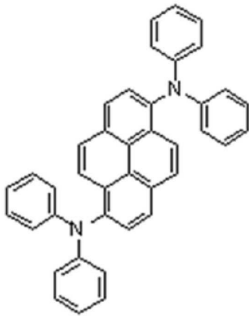
[0416] **실시예 2 내지 8**

[0417] 화합물 1 대신 화합물 3, 9, 10, 11, 12, 28 및 29을 각각 사용하였다는 점을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0418] **비교예 1**

[0419] 화합물 1 대신 하기 화합물 A를 사용하였다는 점을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0420] <화합물 A>

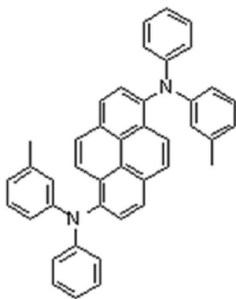


[0421]

[0422] **비교예 2**

[0423] 화합물 1 대신 하기 화합물 B를 사용하였다는 점을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0424] <화합물 B>



[0425]

[0426] **평가예 1**

[0427] 실시예 1 내지 8 및 비교예 1 및 2에 따라 제조된 유기 발광 소자에 대하여, 구동 전압, 전류, 휘도(0.4mA에서 측정), 색 좌표 및 수명(T80)을 PR650 Spectroscan Source Measurement Unit.(PhotoResearch사 제품임)을 이용하여 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 아울러, 수명 데이터는 도 2 및 3에, 전류 밀도 데이터는 도 4 및 5에 각각 나타내었다. T80은 측정 휘도가 초기 휘도에 비해 80%로 감소되는데 소요되는 시간

을 의미하며 3,000 nit에서 측정하였다.

표 1

	도펀트	전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	외부양자 효율	휘도 (cd/m ²)	CIEx	CIEy	T80 (hr)
실시예1	1	4.0	10	5.61	471	0.145	0.096	187
실시예2	3	3.6	10	6.83	690	0.142	0.123	379
실시예3	9	3.8	10	6.09	695	0.141	0.148	257
실시예4	10	3.8	10	6.33	624	0.143	0.120	207
실시예5	11	4.0	10	6.71	677	0.142	0.125	180
실시예6	12	3.8	10	6.16	693	0.141	0.145	211
실시예7	28	3.8	10	5.43	480	0.145	0.103	150
실시예8	29	3.9	10	6.46	663	0.141	0.127	194
비교예1	A	4.3	10	5.06	534	0.133	0.137	45
비교예2	B	4.3	10	4.59	504	0.134	0.144	35

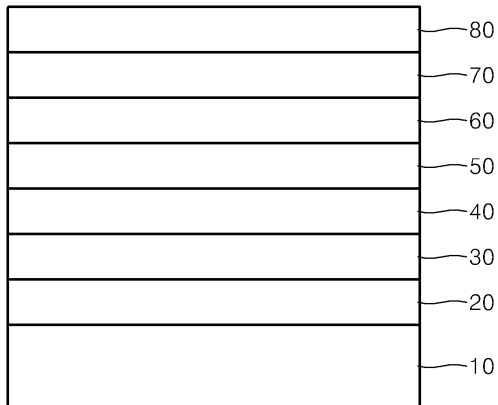
[0429] 표 1 및 도 2 내지 5로부터, 실시예 1 내지 8의 유기 발광 소자는 비교예 1 및 2의 유기 발광 소자에 비하여 우수한 구동 전압, 외부 양자 효율, 휘도, 색순도 및 수명 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

부호의 설명

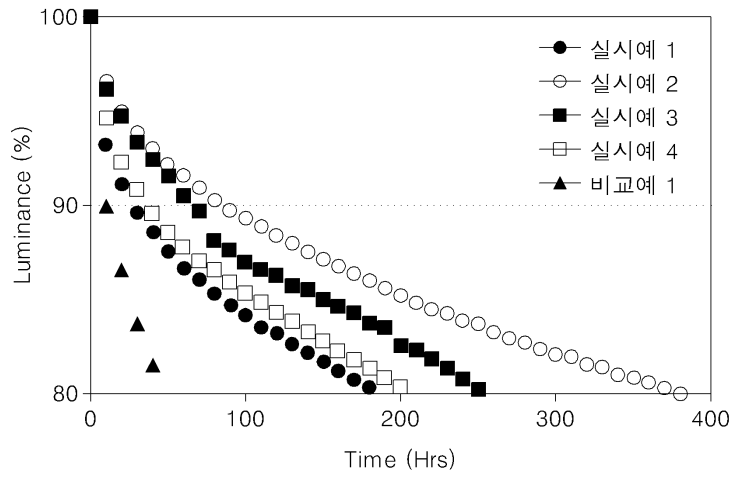
- [0430]
- 80: 제2전극
 - 70: 전자 주입층
 - 60: 전자 수송층
 - 50: 발광층
 - 40: 정공 수송층
 - 30: 정공 주입층
 - 20: 제1전극
 - 10: 기판

도면

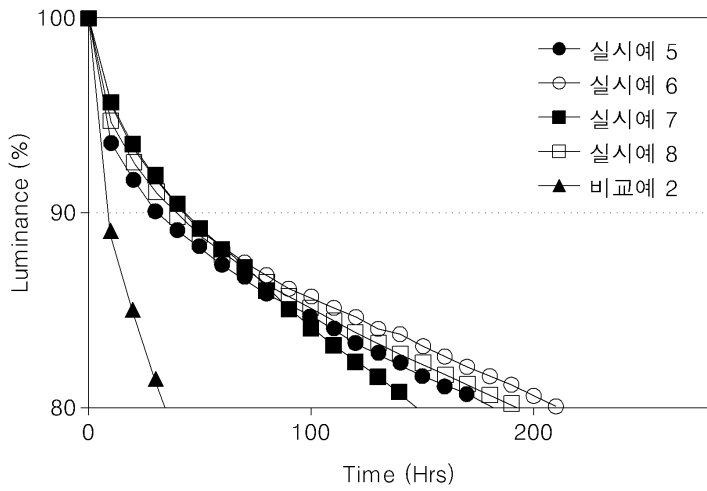
도면1



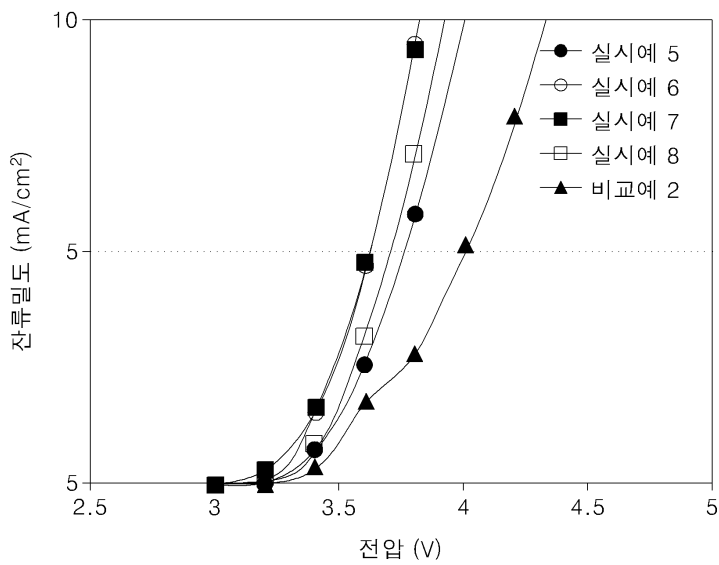
도면2



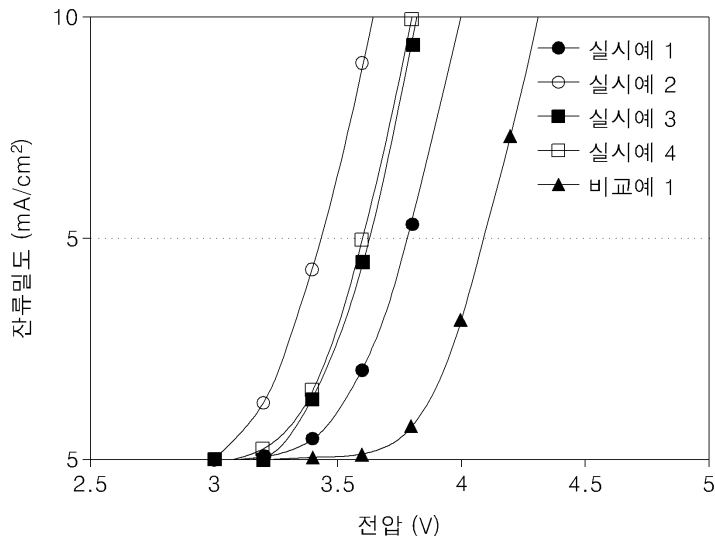
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	缩合环化合物和含有它的有机发光器件		
公开(公告)号	KR1020120083203A	公开(公告)日	2012-07-25
申请号	KR1020110104825	申请日	2011-10-13
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司 SFC股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司 에스에프씨주식회사		
当前申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司 에스에프씨주식회사		
[标]发明人	KIM MYEONG SUK 김명숙 JE JONG TAE 제종태 LEE SE JIN 이세진 PARK SEOK BAE 박석배 YU SE JIN 유세진 LIM JEA GEON 임재건 CHOI BYOUNG KI 최병기 KIM TAE KYUNG 김태경 YI JEOUNG IN 이정인		
发明人	김명숙 제종태 이세진 박석배 유세진 임재건 최병기 김태경 이정인		
IPC分类号	C09K11/06 H05B33/14 H01L51/50 H01L51/00		
CPC分类号	Y02B20/181 C09K11/06 H01L51/50 H05B33/14 H01L51/0059 C09K2211/1011		
优先权	1020110004523 2011-01-17 KR		
其他公开文献	KR101921550B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

公开了稠环化合物和含有它的有机发光器件。

