



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2014-0125576  
 (43) 공개일자 2014년10월29일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C09K 11/06* (2006.01) *C07D 491/04* (2006.01)  
*C07D 495/04* (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2013-0043531  
 (22) 출원일자 2013년04월19일  
 심사청구일자 없음

(71) 출원인  
**롬엔드하스전자재료코리아유한회사**  
 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)  
 (72) 발명자  
**문두현**  
 경기 화성시 병점중앙로 204, 104동 101호 (진안동, 월드메르디앙1단지아파트)  
**안희춘**  
 경기 수원시 영통구 영통로174번길 62, 105호 (매포동, 신흥빌라)  
 (뒷면에 계속)  
 (74) 대리인  
**장훈**

전체 청구항 수 : 총 7 항

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

**(57) 요약**

본 발명은 신규한 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 발광층 또는 정공 수송층에 사용될 수 있고, 발광 특성이 우수하여, 전류 특성이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

(72) 발명자

**이태진**

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

**김치식**

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

**조영준**

경기 성남시 분당구 판교로 393, 더이지더원 204동 701호 (삼평동, 붓들마을이지더원아파트)

**이경주**

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

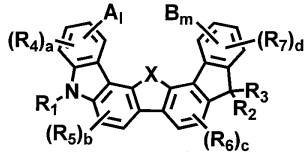
---

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

R<sub>1</sub> 및 R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (5-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, -NR<sub>10</sub>R<sub>11</sub>, -SiR<sub>12</sub>R<sub>13</sub>R<sub>14</sub>, -SR<sub>15</sub>, -OR<sub>16</sub>, 시아노, 니트로 또는 하이드록시이고;

R<sub>2</sub> 및 R<sub>3</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나, R<sub>2</sub>와 R<sub>3</sub>은 융합되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고;

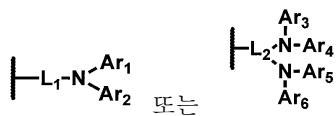
X는 화학결합, -O-, -S-, -C(R<sub>17</sub>R<sub>18</sub>)-, -Si(R<sub>19</sub>R<sub>20</sub>)- 또는 -N(R<sub>21</sub>)-이고;

R<sub>10</sub> 내지 R<sub>21</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (5-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나, 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

a 및 d는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 또는 d가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>4</sub> 또는 각각의 R<sub>7</sub>은 동일하거나 상이할 수 있으며;

b 및 c는 각각 독립적으로 1 또는 2의 정수이고, b 또는 c가 2인 경우, 각각의 R<sub>5</sub> 또는 각각의 R<sub>6</sub>은 동일하거나 상이할 수 있으며;

A 및 B는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴,



서로 동일하거나 상이할 수 있고; L<sub>1</sub>은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이며; L<sub>2</sub>는 치환 또는 비치환된 (C1-C30) 비환식 탄화수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30) 방향족 탄화수소, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)방향족 헤테로환으로부터 유도된 3가 잔기이고; Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>6</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나; Ar<sub>1</sub>과 Ar<sub>2</sub>, Ar<sub>3</sub>과 Ar<sub>4</sub>, 또는 Ar<sub>5</sub>와 Ar<sub>6</sub>은 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (3-30원) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있으며;

l 및 m은 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이고, l 또는 m이 2 이상의 정수인 경우, 각각의 A 또는 각각의 B는

동일하거나 상이할 수 있으며;

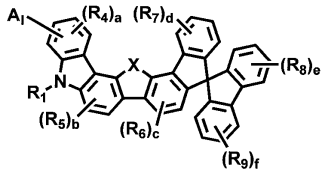
상기 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴(렌)은 각각 독립적으로 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

**청구항 2**

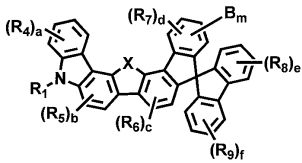
제1에 있어서,

화학식 1의 화합물이 화학식 2내지 6으로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 유기 전계 발광 화합물.

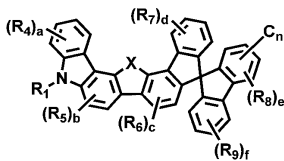
[화학식 2]



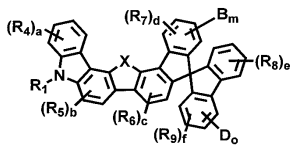
[화학식 3]



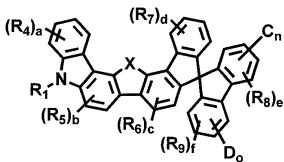
[화학식 4]



[화학식 5]



[화학식 6]



상기 화학식 2 내지 6에서,

A, B, X, R<sub>1</sub>, R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>, a 내지 d, l 및 m은 청구항 1에서 정의된 것과 같고,

C 및 D는 청구항 1의 A의 정의와 동일하고,

R<sub>8</sub> 및 R<sub>9</sub>는 청구항 1의 R<sub>1</sub>의 정의와 동일하며,

e 및 f는 청구항 1의 a의 정의와 동일하고, e 또는 f가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>8</sub> 또는 각각의 R<sub>9</sub>는 동일하거나 상이할 수 있고,

n 및 o는 청구항 1의 l의 정의와 동일하고, n 또는 o가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 C 또는 각각의 D는 동일

하거나 상이할 수 있다.

**청구항 3**

제1항에 있어서, 상기 헤테로아릴은 피롤릴, 이미다졸릴, 트리아진릴, 테트라진릴, 피리딜, 피라진릴, 피리미딘릴, 피리다진릴, 디벤조푸란릴, 디벤조티오펜릴, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페녹사진일 및 페난트리딘일로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 유기 전계 발광 화합물.

**청구항 4**

제1항 또는 제2항에 있어서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>21</sub>, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, 및 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>6</sub>에서 치환 (C1-C30)알킬(렌), 치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 (C6-C30)아릴(렌), 치환 (5-30원)헤테로아릴(렌) 및 치환 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬의 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 (5-30원)헤테로아릴, (5-30원)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 하나 이상의 치환체인, 유기 전계 발광 화합물.

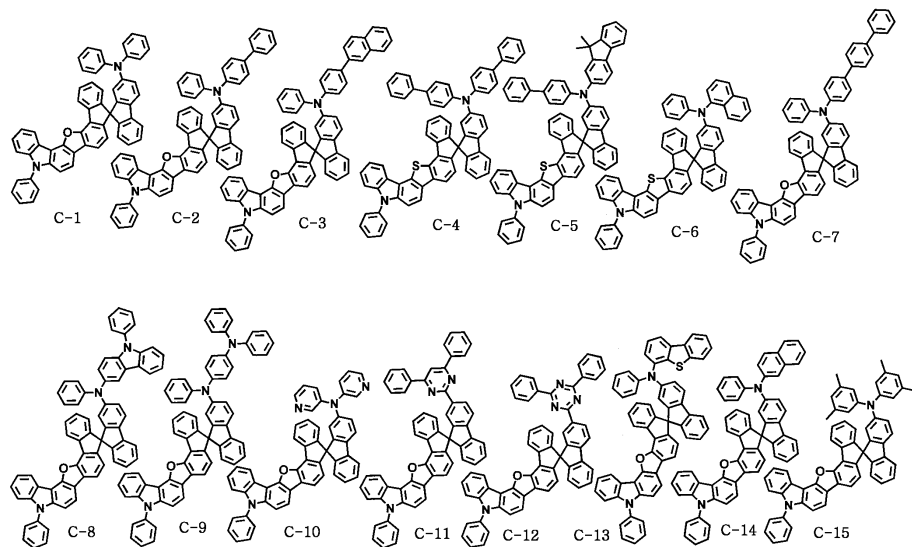
**청구항 5**

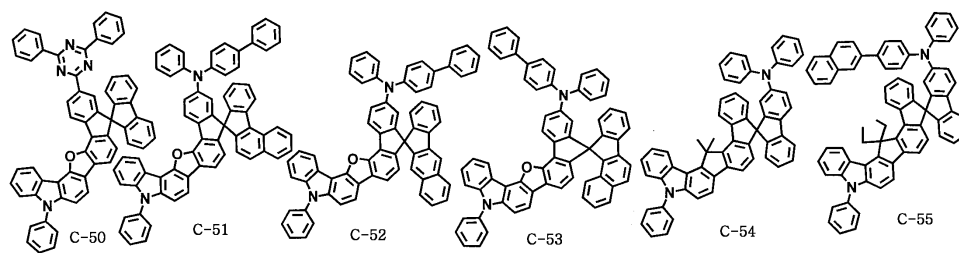
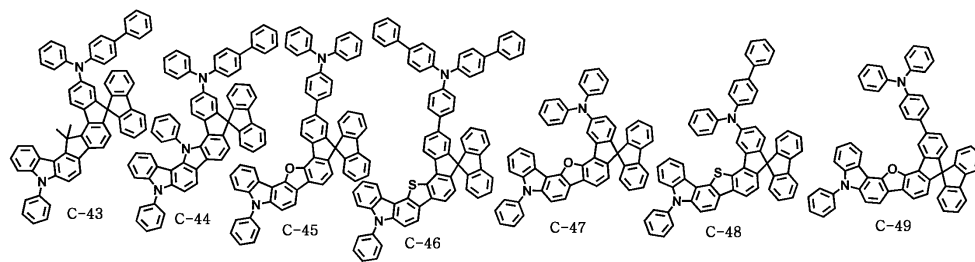
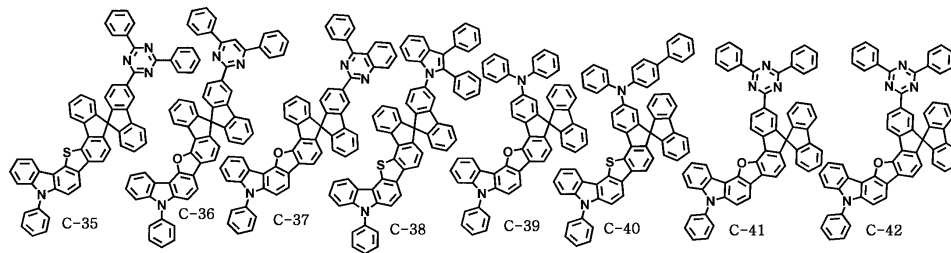
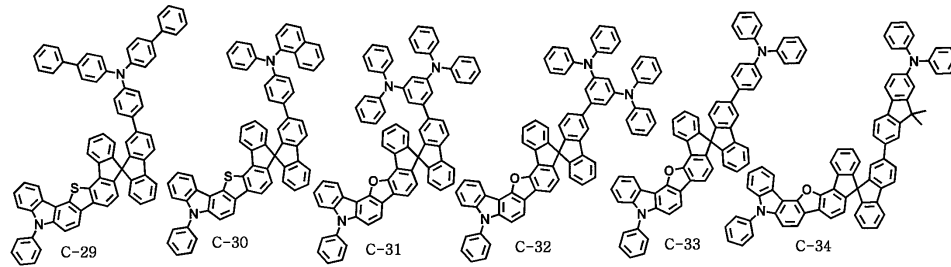
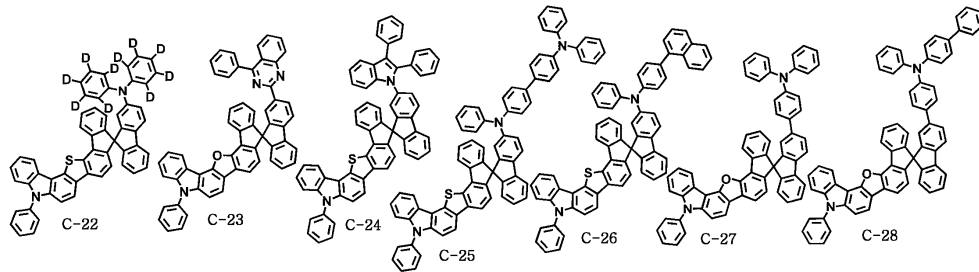
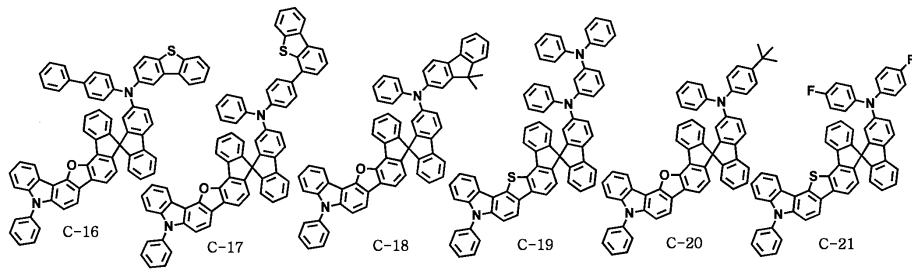
제1항에 있어서, R<sub>1</sub> 및 R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>이 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (5-7원)헤테로시클로알킬 또는 -NR<sub>10</sub>R<sub>11</sub>이고, R<sub>2</sub>와 R<sub>3</sub>이 융합되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성하고, X가 -O-, -S-, -C(R<sub>17</sub>R<sub>18</sub>)- 또는 -N(R<sub>21</sub>)-인, 유기 전계 발광 화합물.

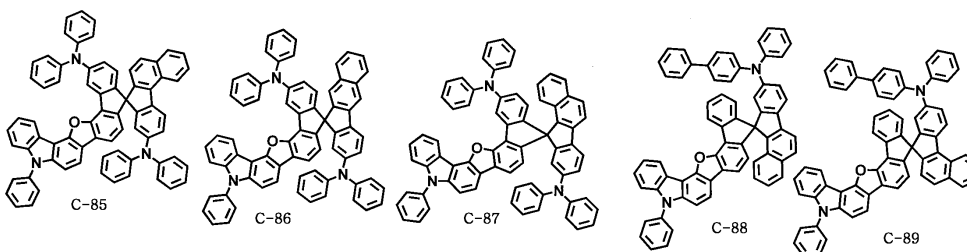
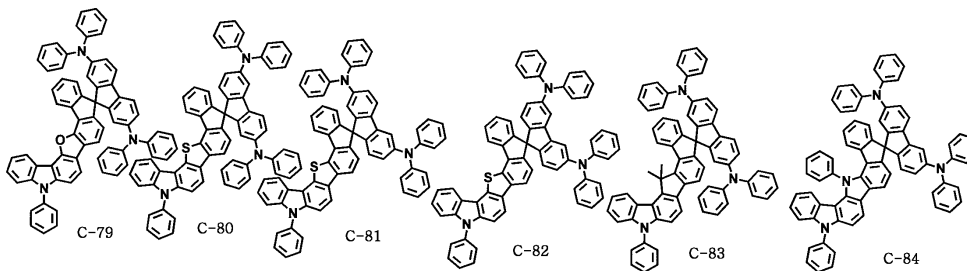
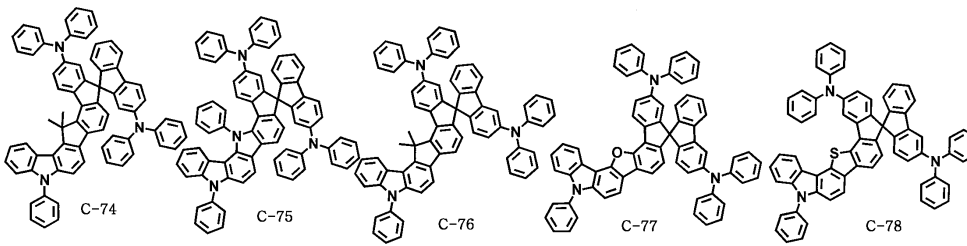
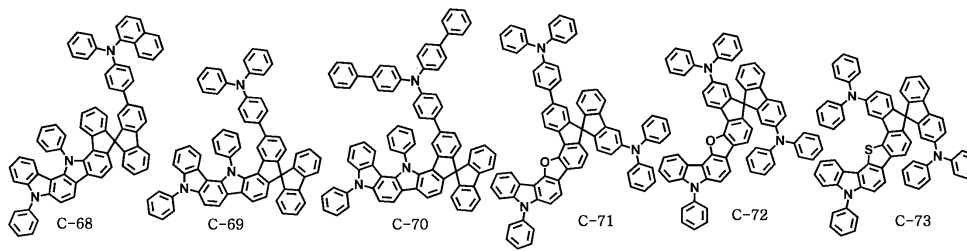
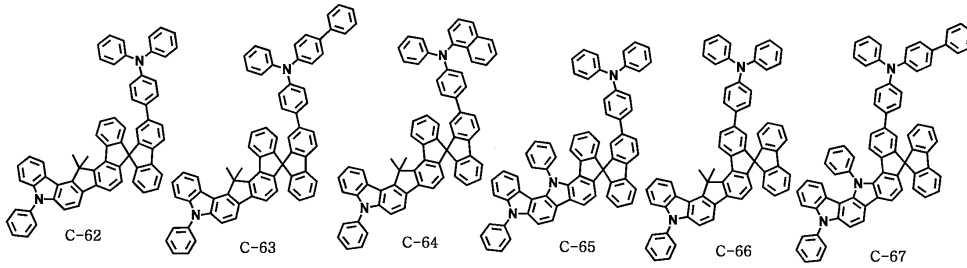
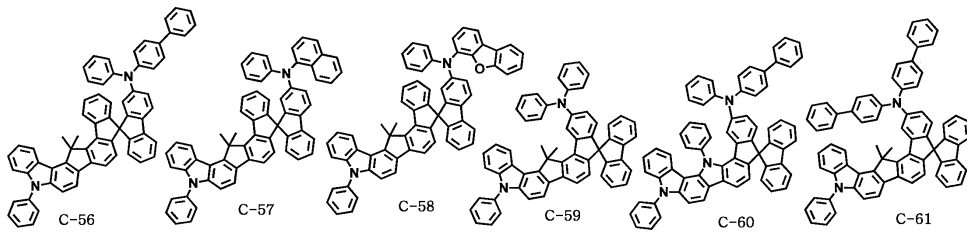
**청구항 6**

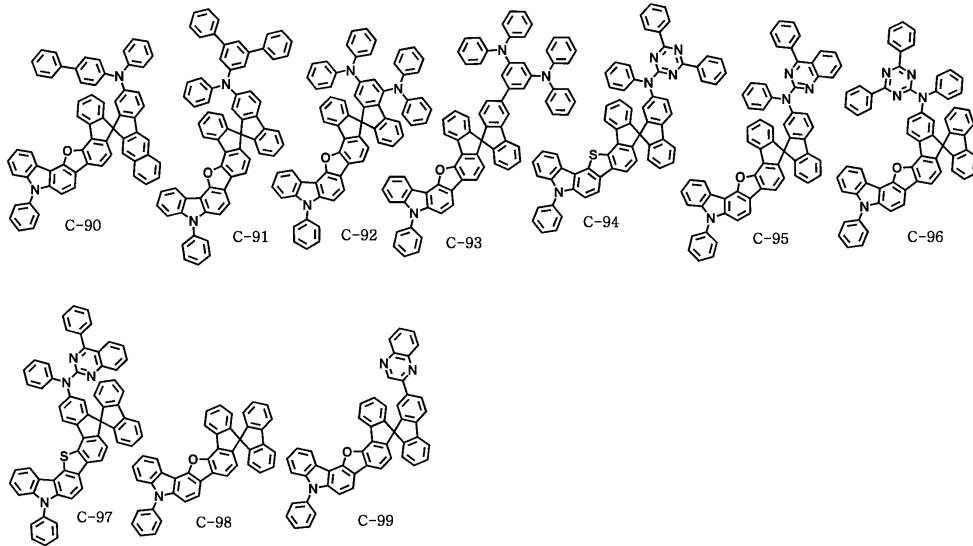
제1항에 있어서,

화학식 1의 화합물이 하기 화합물로부터 선택되는 것인 유기 전계 발광 화합물.









**청구항 7**

제1항의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

**명세서**

**기술분야**

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

**배경기술**

[0002] 전계 발광 소자(electroluminescence device: EL 소자)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 다이아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 EL 소자에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재까지 형광 발광 재료가 널리 사용되고 있으나, 전계 발광의 메커니즘상 형광 발광 재료에 비해 인광 발광 재료가 이론적으로 4 배까지 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 (acac)Ir(btp)<sub>2</sub>(비스(2-(2'-벤조티에닐)-피리디네이트-N,C-3')이리듐(아세틸아세토네이트)), Ir(ppy)<sub>3</sub>(트리스(2-페닐피리딘)이리듐) 및 Firpic(비스(4,6-다이플루오로페닐피리디네이트-N,C2)피콜리네이트이리듐) 등의 재료가 알려져 있다.

[0004] 발광 재료는 색순도, 발광효율 및 안정성을 향상시키기 위해 호스트 재료에 도펀트를 혼합하여 사용하기도 한다. 이와 같은 도펀트/호스트 재료 체계를 사용할 때, 호스트 재료는 발광 소자의 효율과 성능에 큰 영향을 미치므로, 그 선택이 중요하다. 종래 기술에서, 인광용 호스트 재료로는 4,4'-N,N'-다이카바졸-바이페닐(CBP)이 가장 널리 알려져 있었다. 최근에는, 일본의 파이오니어 등이 정공 차단층의 재료로 사용되던 바토크프로인(Bathocuproine, BCP) 및 알루미늄(III)비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)(4-페닐페놀레이트)(Balq) 등을 호스트 재료로 이용해 고성능의 유기 EL 소자를 개발한 바 있다.

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



된다.

[0006] 한편, 유기 EL 소자에서 정공 주입 및 수송 재료로서 구리 프탈로시아닌(CuPc), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]바이페닐(NPB), N,N'-다이페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-(1,1'-바이페닐)-4,4'-다이아민(TPD), 4,4',4"-트리스(3-메틸페닐페닐아미노)트리페닐아민(MTDATA) 등이 사용되어 왔으나, 이러한 물질을 사용한 경우 유기 EL 소자는 양자 효율 및 수명이 저하되는 문제가 있었다. 그 이유는 유기 EL 소자를 높은 전류에서 구동하게 되면, 양극과 정공 주입층 사이에서 열 스트레스(thermal stress)가 발생하고, 이러한 열 스트레스에 의해 소자의 수명이 급격히 저하되기 때문이다. 또한, 정공주입층에 사용되는 유기 물질은 정공의 운동성이 매우 크기 때문에, 정공과 전자의 전하 밸런스(hole-electron charge balance)가 깨지고 이로 인해 양자 효율(cd/A)이 낮아지게 된다.

[0007] 국제공개공보 제W0 2012/034627호는 스피로바이폴루오렌계 트리아릴아민 화합물 또는 스피로바이폴루오렌에 다환의 치환족 또는 방향족 환이 결합된 화합물을 유기 EL 소자용 화합물로 개시하고 있다.

[0008] 또한, 미국 특허 제7,714,145호는 이치환된 스피로바이폴루오렌계 트리아릴다이아민 화합물을 유기 EL 소자용 화합물로서 개시하고 있다.

[0009] 그러나, 상기 문헌들에 개시된 화합물들을 포함한 유기 EL 소자들은 전력 효율, 발광 효율, 양자 효율 및 수명 등의 측면에서 여전히 만족스럽지 않다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

- [0010] (특허문헌 0001) 국제공개공보 제W0 2012/034627호 (2012. 3. 22)
- (특허문헌 0002) 미국 특허 제7,714,145호 (2010.5.11)

**발명의 내용**

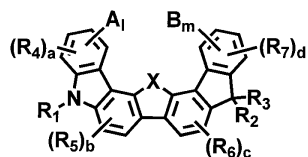
**해결하려는 과제**

[0011] 따라서 본 발명의 목적은 첫째로, 발광 효율 및 소자 수명이 우수한 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며 둘째로, 상기 유기 전계 발광 화합물을 발광층 또는 정공 수송층에 포함하는 고효율 및 긴 수명의 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

**과제의 해결 수단**

[0012] 상기의 기술적 과제를 해결하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0013] [화학식 1]



[0014] [0015] 상기 화학식 1에서,

[0016] R1 및 R4 내지 R7은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (5-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, -NR10R11, -SiR12R13R14,

-SR<sub>15</sub>, -OR<sub>16</sub>, 시아노, 나이트로 또는 하이드록시이고;

[0017] R<sub>2</sub> 및 R<sub>3</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나, R<sub>2</sub>와 R<sub>3</sub>은 융합되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고;

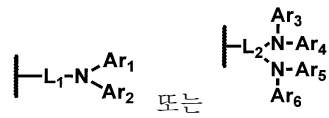
[0018] X는 화학결합, -O-, -S-, -C(R<sub>17</sub>R<sub>18</sub>)-, -Si(R<sub>19</sub>R<sub>20</sub>)- 또는 -N(R<sub>21</sub>)-이고;

[0019] R<sub>10</sub> 내지 R<sub>21</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (5-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나, 인접한 치환체와 연결되어 (3-30원) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

[0020] a 및 d는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, a 또는 d가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>4</sub> 또는 각각의 R<sub>7</sub>은 동일하거나 상이할 수 있으며;

[0021] b 및 c는 각각 독립적으로 1 또는 2의 정수이고, b 또는 c가 2인 경우, 각각의 R<sub>5</sub> 또는 각각의 R<sub>6</sub>은 동일하거나 상이할 수 있으며;

[0022] A 및 B는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴,

 이며, 서로 동일하거나 상이할 수 있고; L<sub>1</sub>은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이며; L<sub>2</sub>는 치환 또는 비치환된 (C1-C30) 비환식 탄화수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30) 방향족 탄화수소환, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)방향족 헤테로환으로부터 유도된 3가 잔기이고; Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>6</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이거나; Ar<sub>1</sub>과 Ar<sub>2</sub>, Ar<sub>3</sub>과 Ar<sub>4</sub>, 또는 Ar<sub>5</sub>와 Ar<sub>6</sub>은 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (3-30원) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있으며;

[0023] l 및 m은 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이고, l 또는 m이 2 이상의 정수인 경우, 각각의 A 또는 각각의 B는 동일하거나 상이할 수 있으며;

[0024] 상기 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴(렌)은 각각 독립적으로 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

**발명의 효과**

[0025] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 발광 효율이 우수하여 구동 수명이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다. 또한, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 발광층 또는 정공 수송층에 사용될 수 있고, 소자의 전류특성을 개선시킴으로써 전력효율이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0026] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 것으로 해석되어서는 안된다.

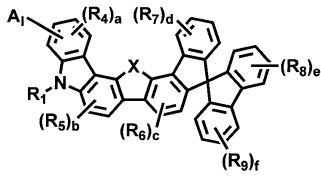
[0027] 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물, 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

[0028] 본 발명에 기재되어 있는 "(C1-C30)알킬(렌)"은 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬(렌)을 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 20개인 것이 바람직하고, 1 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 3급-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알케닐"은 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알키닐"은 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알키닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알키닐의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 여기에서 탄소수가 3 내지 20개인 것이 바람직하고, 3 내지 7개인 것이 더 바람직하다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(5-7원)헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 5 내지 7개이고, B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 O, S 및 N에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라히드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴(렌)"은 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일 환계 또는 융합 환계 라디칼을 의미하고, 여기에서 환 골격 탄소수가 6 내지 20개인 것이 바람직하고, 6 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 플루오레닐, 페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐 등이 있다. 본원에서 "(5-30원)헤테로아릴(렌)"은 환 골격 원자수가 5 내지 30개이고, B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 여기에서 환 골격 원자수가 5 내지 20개인 것이 바람직하고, 5 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합 환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴(렌)은 하나 이상의 헤테로아릴기 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 디아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리딘, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로겐"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0029] 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 발명의 화학식들의 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>21</sub>, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, 및 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>6</sub>에서 치환 (C1-C30)알킬(렌), 치환 (C3-C30)시클로알킬, 치환 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 (C6-C30)아릴(렌), 치환 (5-30원)헤테로아릴(렌) 및 치환 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬의 치환체는, 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 나이트로, 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 (5-30원)헤테로아릴, (5-30원)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 하나 이상의 치환체이다.

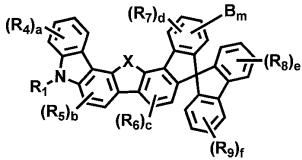
[0030] 본 발명의 화학식 1의 화합물은 바람직하게는 하기 화학식 2 내지 6으로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0031] [화학식 2]



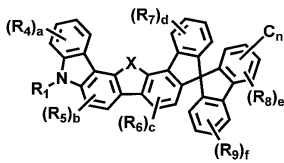
[0032]

[0033] [화학식 3]



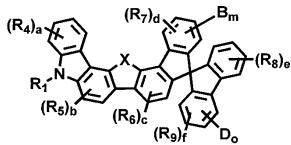
[0034]

[0035] [화학식 4]



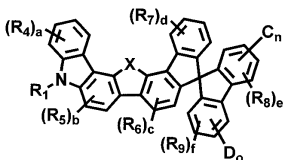
[0036]

[0037] [화학식 5]



[0038]

[0039] [화학식 6]



[0040]

[0041] 상기 화학식 2 내지 6에서,

[0042] A, B, X, R<sub>1</sub>, R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>, a 내지 d, l 및 m은 청구항 1에서 정의된 것과 같고,

[0043] C 및 D는 청구항 1의 A의 정의와 동일하고,

[0044] R<sub>8</sub> 및 R<sub>9</sub>는 청구항 1의 R<sub>1</sub>의 정의와 동일하며,

[0045] e 및 f는 청구항 1의 a의 정의와 동일하고, e 또는 f가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>8</sub> 또는 각각의 R<sub>9</sub>는 동일하거나 상이할 수 있고,

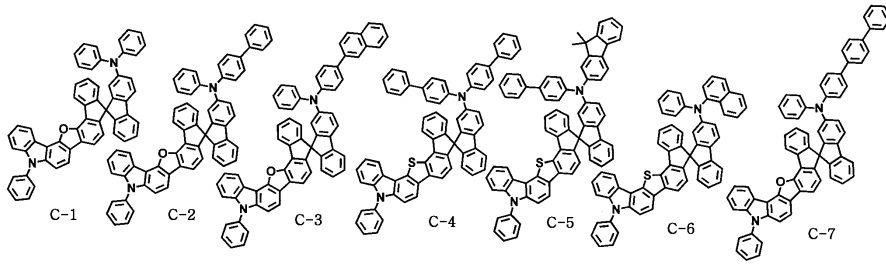
[0046] n 및 o는 청구항 1의 l의 정의와 동일하고, n 또는 o가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 C 또는 각각의 D는 동일하거나 상이할 수 있다.

[0047] 상기 화학식 1의 화합물에 있어서, 상기 헤테로아릴의 예로서, 피롤릴, 이미다졸릴, 트리아진릴, 테트라진릴, 피리딜, 피라진릴, 피리미딘릴, 피리다진릴, 디벤조푸란릴, 디벤조티오펜릴, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페녹사진릴, 페난트리딘릴 등이 있다.

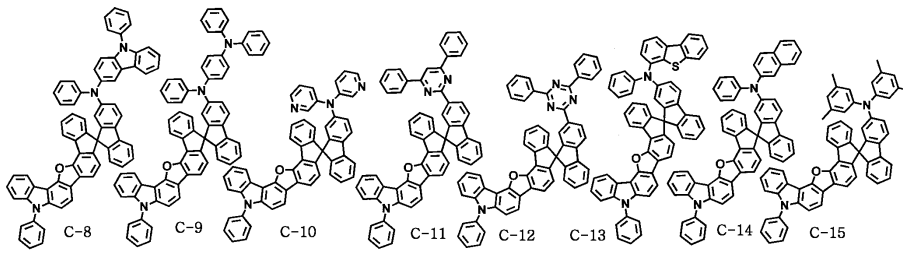
[0048] 바람직하게는, R<sub>1</sub> 및 R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (5-7원)헤테로시클로알킬 또는

-NR<sub>10</sub>R<sub>11</sub>이고; R<sub>2</sub>와 R<sub>3</sub>은 융합되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있고; X는 -O-, -S-, -C(R<sub>17</sub>R<sub>18</sub>)- 또는 -N(R<sub>21</sub>)-이다.

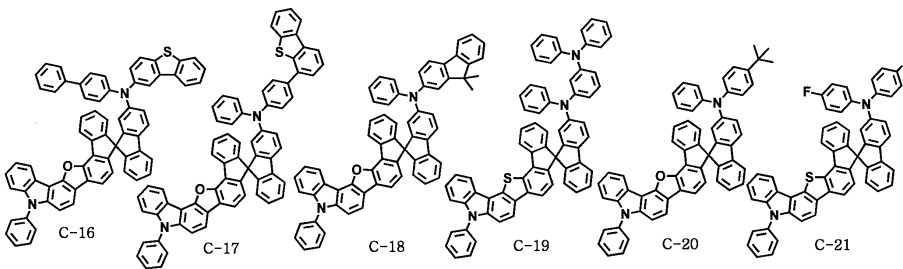
[0049] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물의 예로는 하기의 화합물을 들 수 있다.



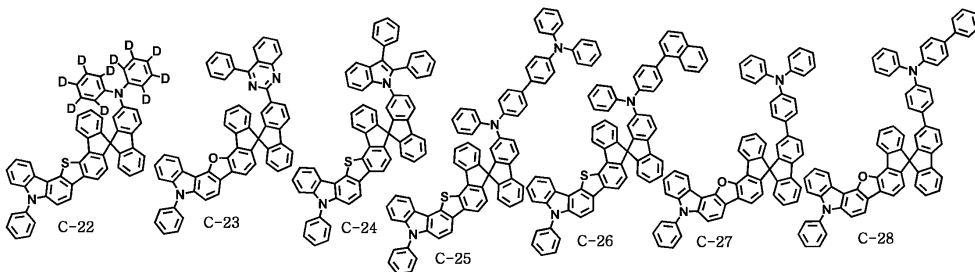
[0050]



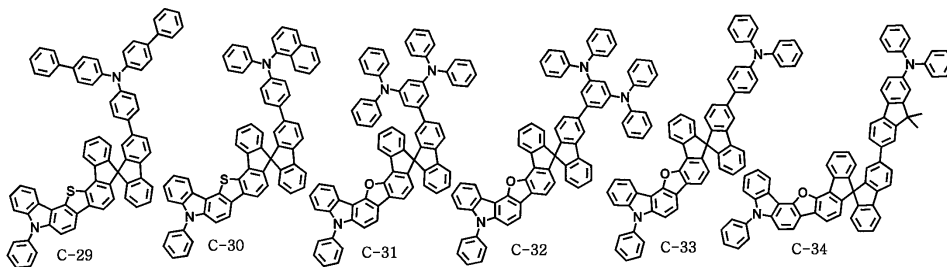
[0051]



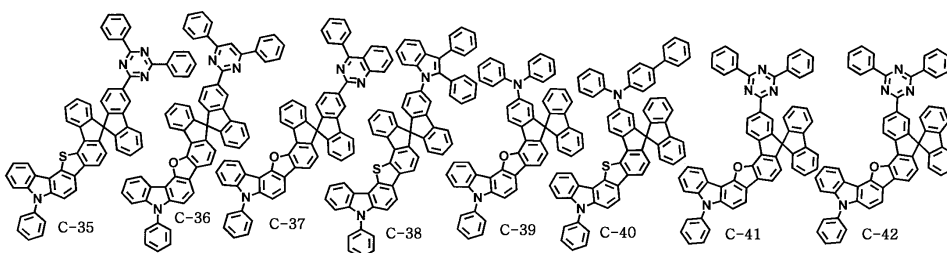
[0052]



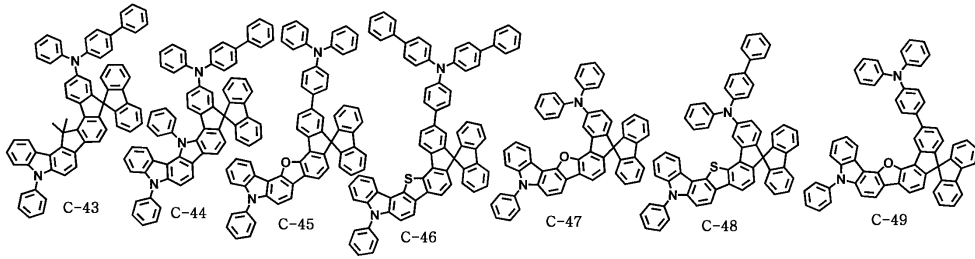
[0053]



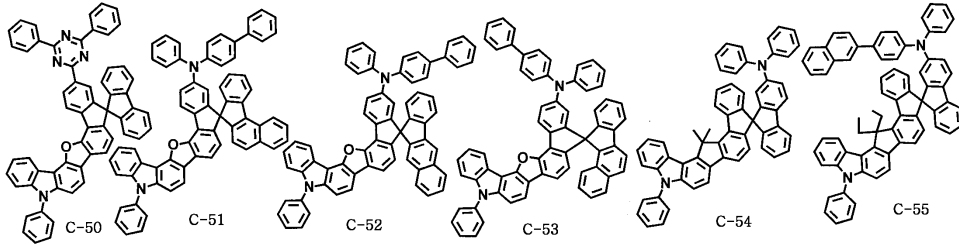
[0054]



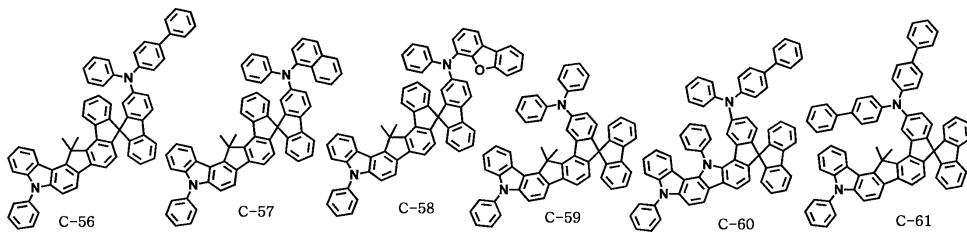
[0055]



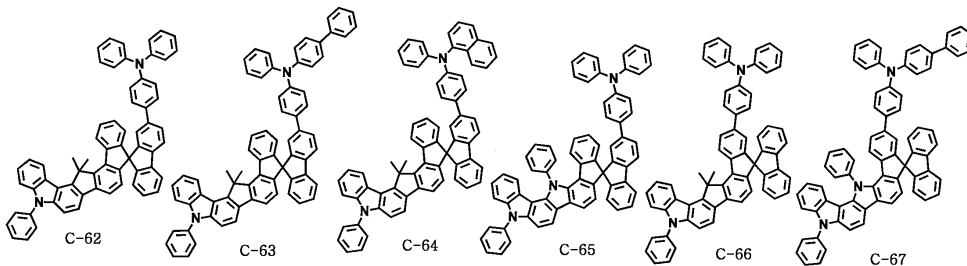
[0056]



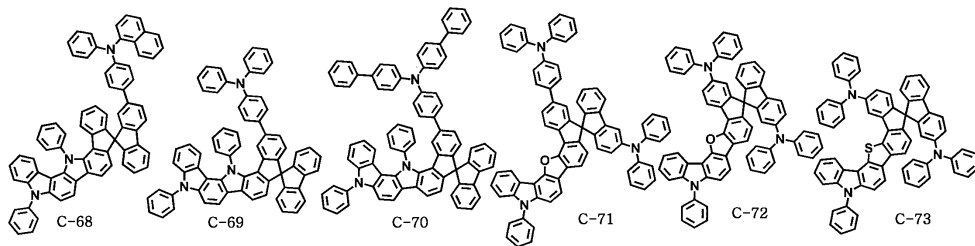
[0057]



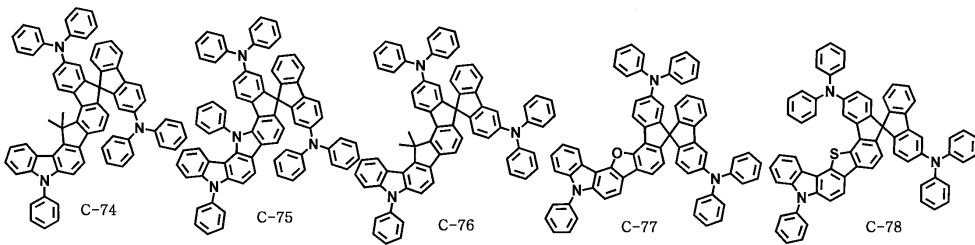
[0058]



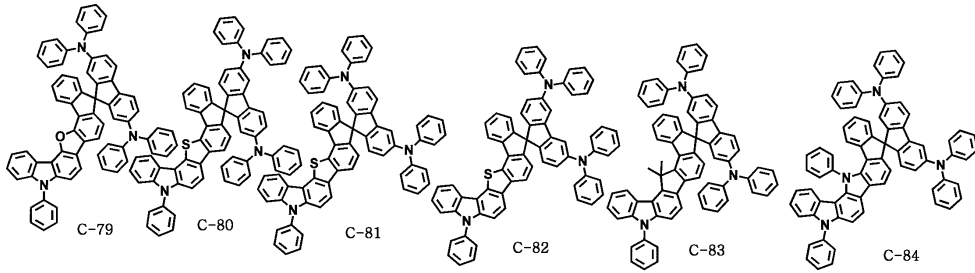
[0059]



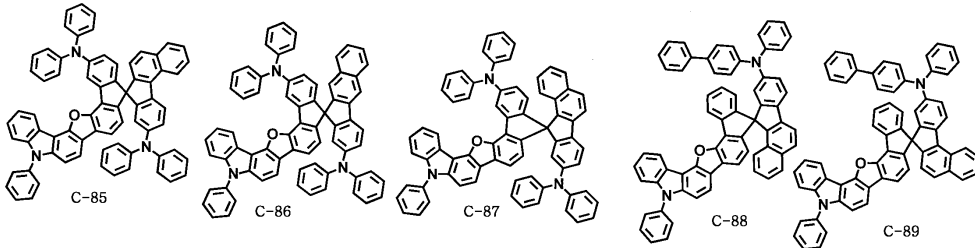
[0060]



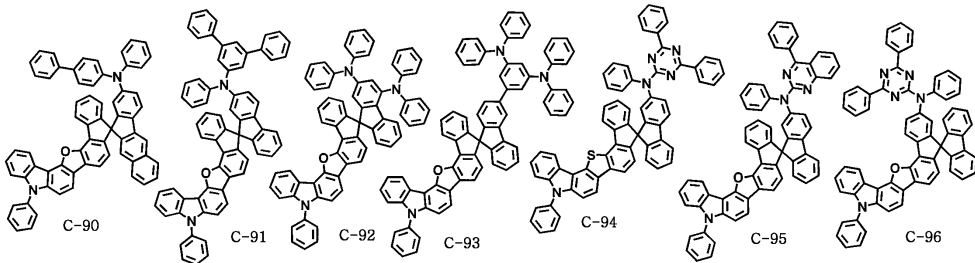
[0061]



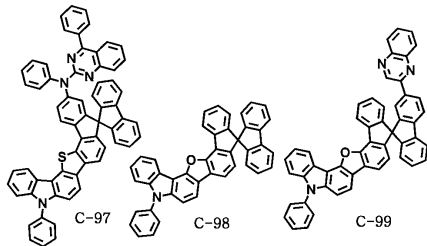
[0062]



[0063]



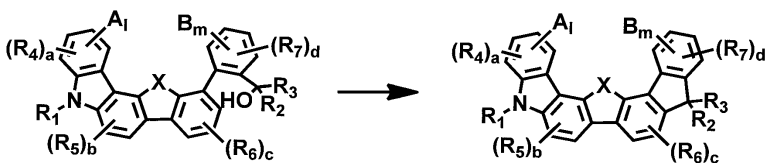
[0064]



[0065]

[0066]

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



[0067]

[0068]

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

[0069]

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

[0070]

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

[0071]

상기 제1전극과 제2전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공주입층, 정공수송층, 전자수송층, 전자주입층, 계면층(interlayer), 정공차단층 및 전자차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

[0072] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층 및 정공수송층 중 하나 이상에 포함될 수 있다. 정공수송층에 사용될 경우, 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 정공수송 재료로서 포함될 수 있다. 발광층에 사용될 경우, 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다.

[0073] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 이외의 하나 이상의 다른 화합물을 호스트 재료로서 더 포함할 수 있으며, 하나 이상의 도펀트를 더 포함할 수 있다.

[0074] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물이 발광층의 호스트 재료(제1 호스트 재료)로서 포함되는 경우, 그 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 포함할 수 있다. 이 때, 제1 호스트 재료와 제2 호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

[0075] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 이외의 다른 화합물의 호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하나, 하기 화학식 6 내지 화학식 8로 표시되는 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 것이 발광 효율 면에서 특히 바람직하다.

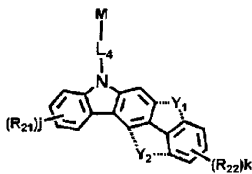
[0076] [화학식 6]

[0077]  $H-(Cz-L_4)_h-M$

[0078] [화학식 7]

[0079]  $H-(Cz)_i-L_4-M$

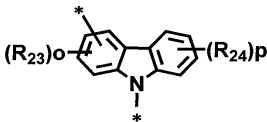
[0080] [화학식 8]



[0081]

[0082] 상기 화학식 6 내지 8에서,

[0083] Cz는 하기 구조이며,

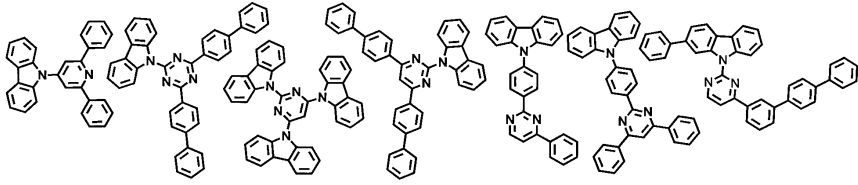


[0084]

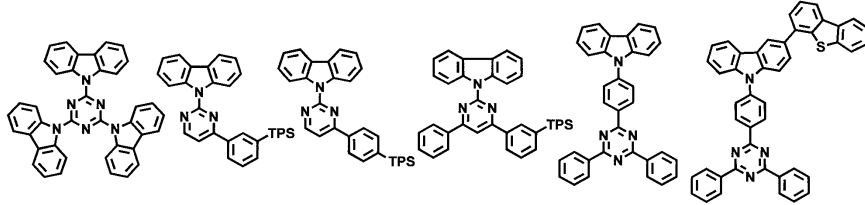
[0085]  $R_{21}$  내지  $R_{24}$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴 또는  $R_{25}R_{26}R_{27}Si-$ 이며,  $R_{25}$  내지  $R_{27}$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;  $L_4$ 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고; M은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며;  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 -O-, -S-, -N( $R_{31}$ )-, -C( $R_{32}$ )( $R_{33}$ )- 이고,  $Y_1$ 과  $Y_2$ 가 동시에 존재하지는 않으며;  $R_{31}$  내지  $R_{33}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고,  $R_{32}$  및  $R_{33}$ 은 동일하거나 상이할 수 있으며; h 및 i는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, j, k, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, h, i, j, k, o 또는 p가 2 이상의 정수인 경우 각각의 (Cz- $L_4$ ), 각각의 (Cz), 각각의  $R_{21}$ , 각각의  $R_{22}$ , 각각의  $R_{23}$  또는 각각의  $R_{24}$ 는 동일하거나 상이할 수 있다.



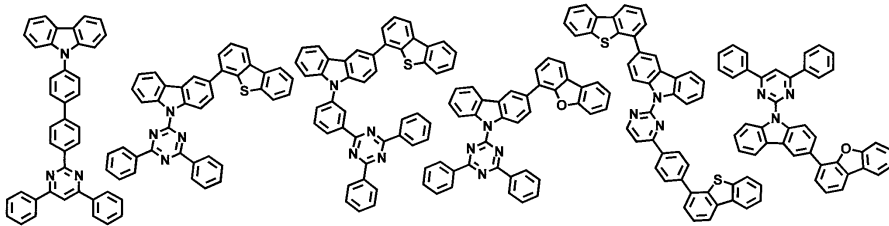
[0086] 구체적으로 상기 호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같다.



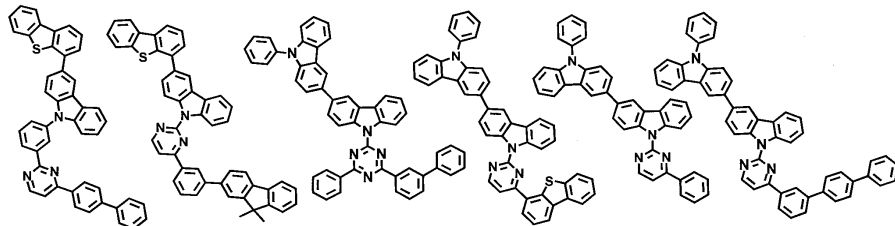
[0087]



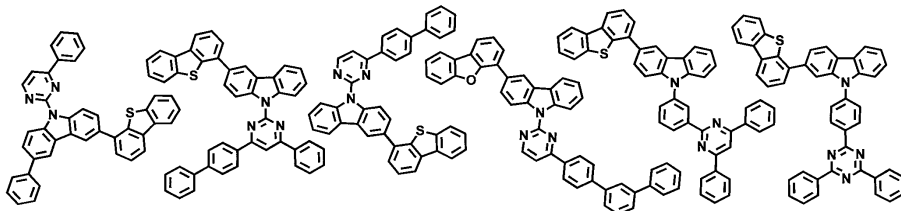
[0088]



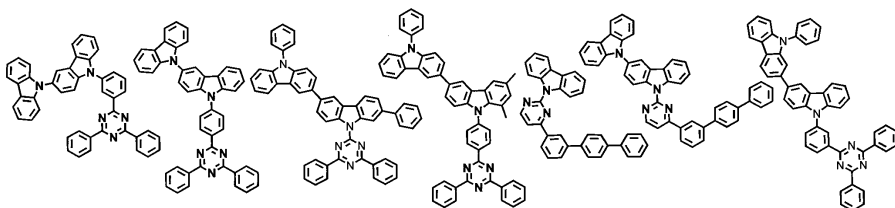
[0089]



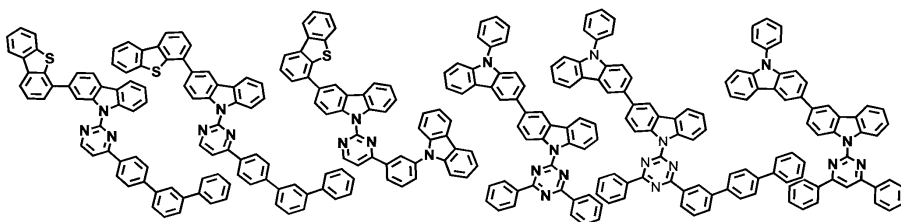
[0090]



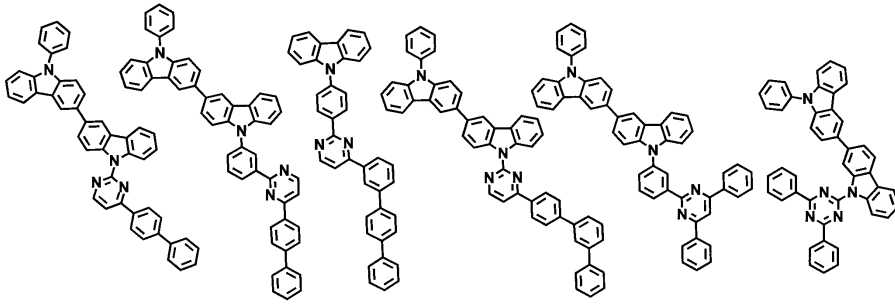
[0091]



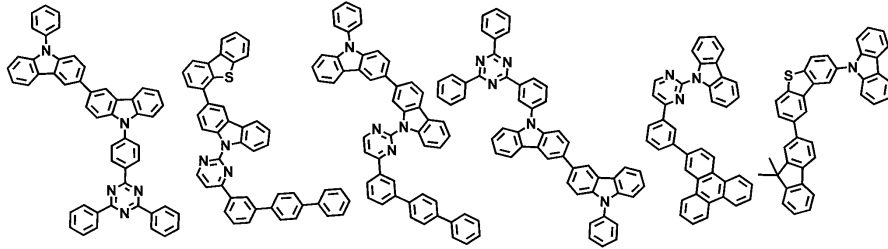
[0092]



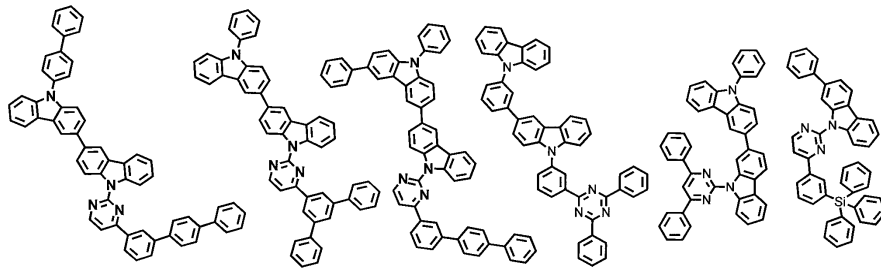
[0093]



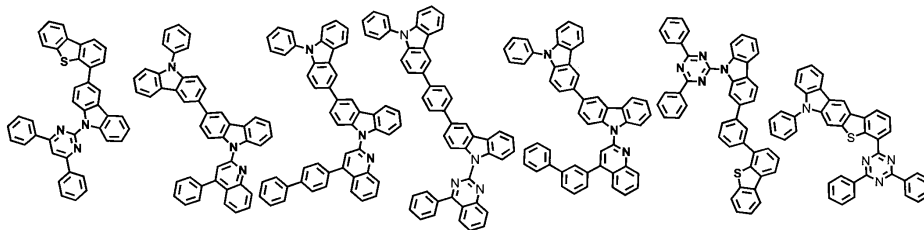
[0094]



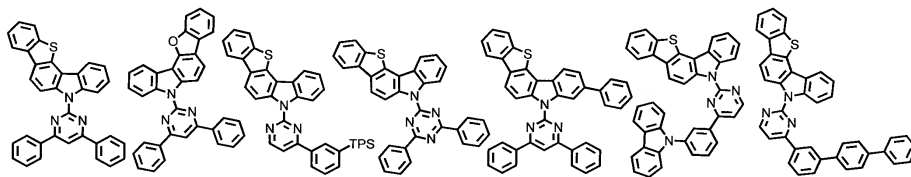
[0095]



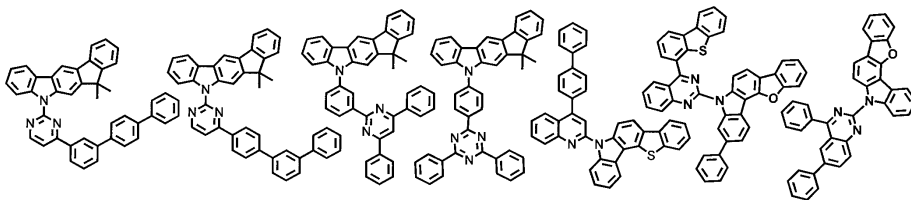
[0096]



[0097]



[0098]

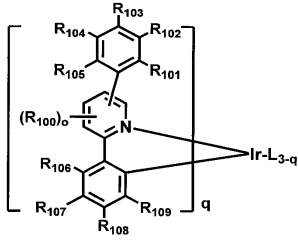


[0099]

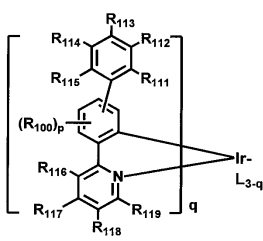
[0100] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도펀트로는 하나 이상의 인광 도펀트가 바람직하다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도펀트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물이 바람직하고, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물이 더욱 바람직하며, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물이 더더욱 바람직하다.

[0101] 상기 인광 도펀트는 하기 화학식 9 내지 화학식 11로 표시되는 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.

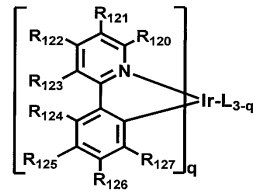
[화학식 9]



[화학식 10]



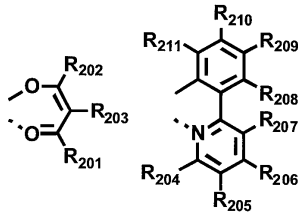
[화학식 11]



[0102]

[0103]

상기 화학식 9 내지 11에서, L은 하기 구조에서 선택되고;



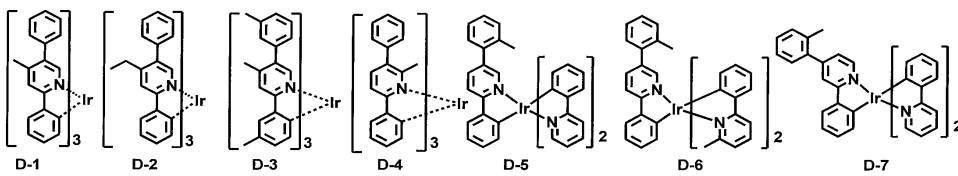
[0104]

[0105]

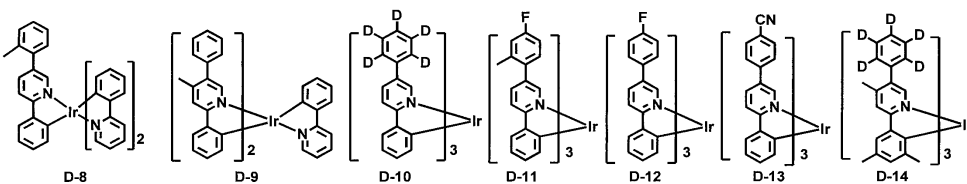
R<sub>100</sub>은 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬이며; R<sub>101</sub> 내지 R<sub>109</sub> 및 R<sub>111</sub> 내지 R<sub>123</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고; R<sub>120</sub> 내지 R<sub>123</sub>는 인접 치환기와 연결되어 융합고리를 형성하는데, 예를 들어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

[0106]

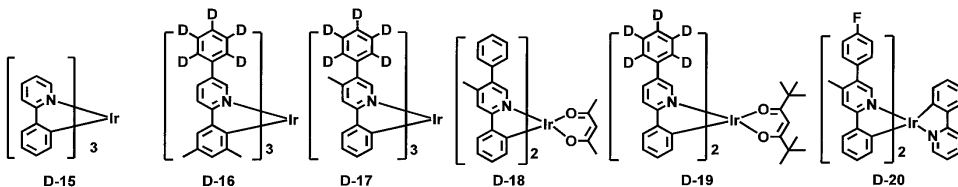
상기 인광 도펀트 재료의 구체적인 예로는 다음과 같다.



[0107]

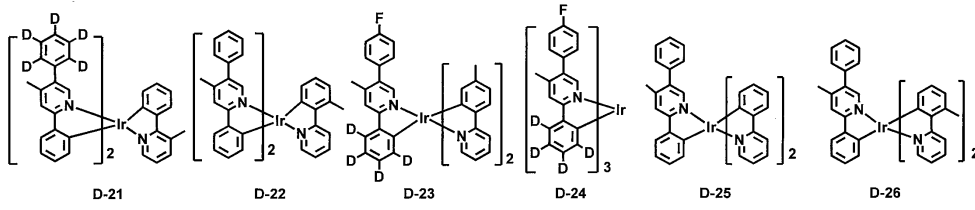


[0108]

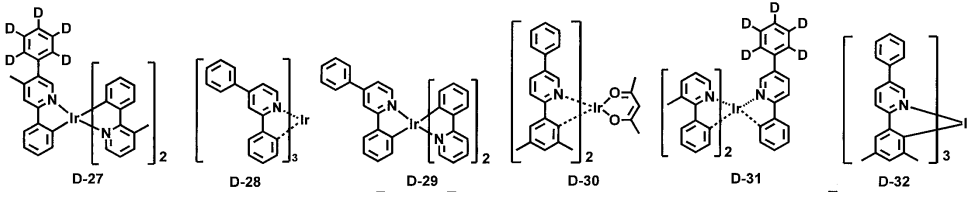


[0109]

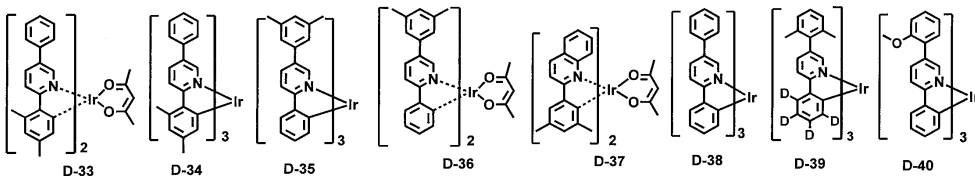
[0110]



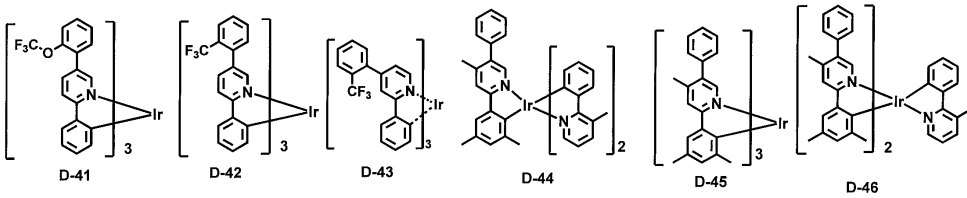
[0111]



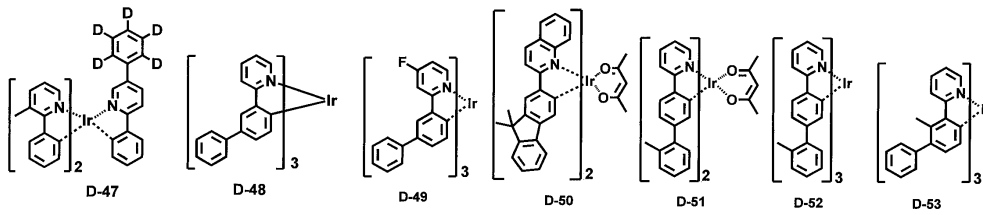
[0112]



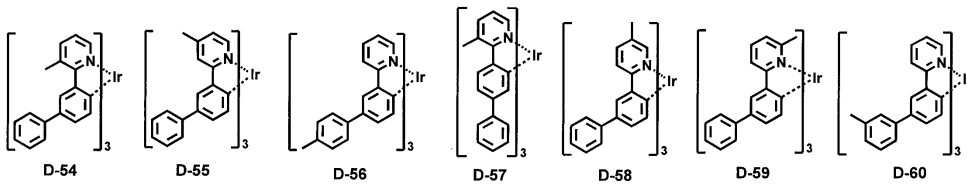
[0113]



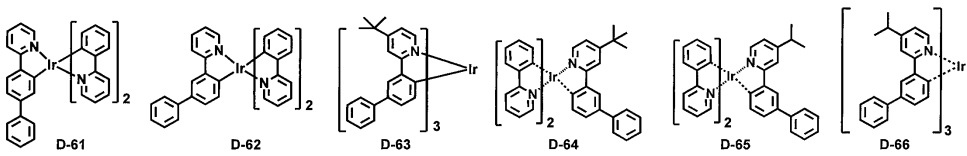
[0114]



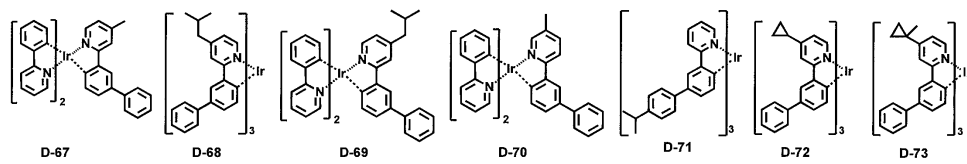
[0115]

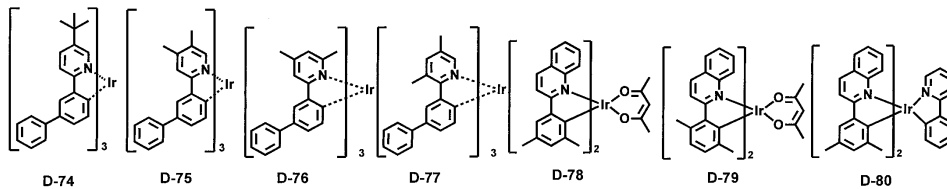


[0116]



[0117]





[0118]

[0119]

[0120]

[0121]

[0122]

[0123]

[0124]

[0125]

[0126]

[0127]

[0128]

[0129]

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

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

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

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기 및 5주기 전이금속, 란타 계열 금속 및 d-전이원소의 유기 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 이의 착체 화합물을 더 포함할 수도 있고, 나아가 상기 유기물층은 발광층 및 전하 생성층을 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 발광층을 하나 이상 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 하나 이상의 층(이하, 이들을 “표면층”이라고 지칭함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄 금속의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 음극 표면에 할로젠화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 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 희토류 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, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 수송 화합물과 환원성 도펀트의 혼합 영역 또는 정공 수송 화합물과 산화성 도펀트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 수송 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 수송하기 용이해진다. 또한, 정공 수송 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 수송하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도펀트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도펀트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도펀트층을 전하생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진 백색 발광의 유기 전계 발광 소자를 제작할 수 있다.

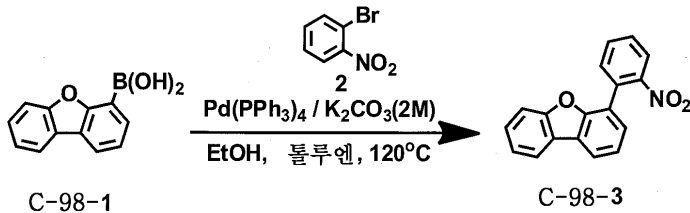
본 발명의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막 법이나 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

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.

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

[실시예 1] 화합물 C-98의 제조

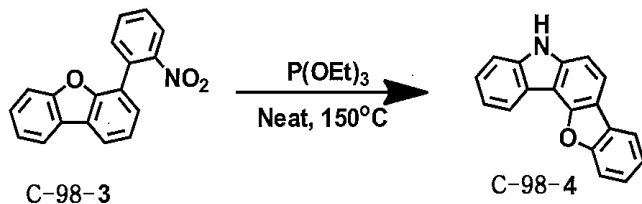
[0130] 화합물 C-98-3의 제조



[0131]

[0132] 4-디벤조퓨란보닉에시드(화합물 C-98-1) 127g(0.60mol), 2-브로모-나이트로벤젠 100g(0.50mol), 탄산칼륨 159g(1.50mol) 및 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐[Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>] 29g(0.03mol)을 톨루엔 3L, 에탄올 750mL 및 정제수 750mL에 투입한 후 하룻 동안 환류 교반하였다. 에틸 아세테이트 2L로 추출한 후, 수득한 유기층을 증류수 500mL로 씻었다. 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조시키고, 유기 용매를 감압하에서 제거하였다. 수득한 고체는 실리카겔 컬럼 크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 C-98-3 126g(87%)을 수득하였다.

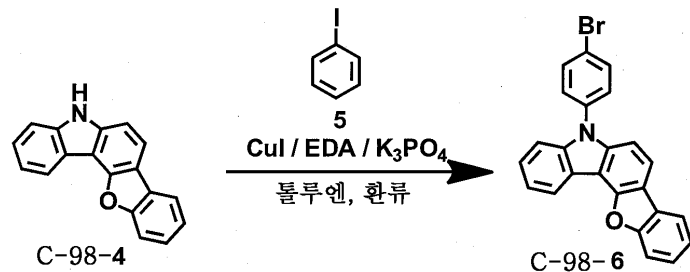
[0133] 화합물 C-98-4의 제조



[0134]

[0135] 4-(2-나이트로페닐)다이벤조[b,d]퓨란(화합물 C-98-3) 126g(0.44mol)을 트리에틸포스파이트[P(OEt)<sub>3</sub>] 1.1L에 녹이고 150°C로 환류 교반하였다. 5시간 후 상온으로 냉각시키고 감압 증류하였다. 실리카겔 컬럼 크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 C-98-4 80g(71%)을 수득하였다.

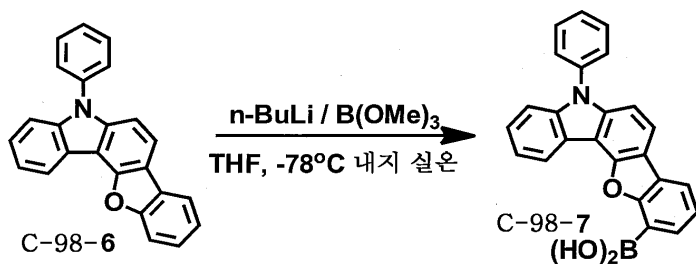
[0136] 화합물 C-98-6의 제조



[0137]

[0138] 5H-벤조퓨로[3,2-c]카바졸(화합물 C-98-4) 30g(116.60mmol), 아이오도벤젠 20mL(174.90mmol), 요오드화구리 11g(58.30mmol), 인산칼륨 74.2g(349.80mmol) 및 에틸렌다이아민(EDA) 16mL(233.20mmol)를 톨루엔 600mL에 넣고, 환류 교반하였다. 반응물을 실온으로 식힌 후, 에틸 아세테이트 300mL로 추출한 후, 수득한 유기층을 증류수 100mL로 두 번 씻었다. 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조시키고, 유기 용매는 감압하에서 제거하였다. 실리카겔 컬럼 크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 C-98-6 31g(80%)을 수득하였다.

[0139] 화합물 C-98-7의 제조

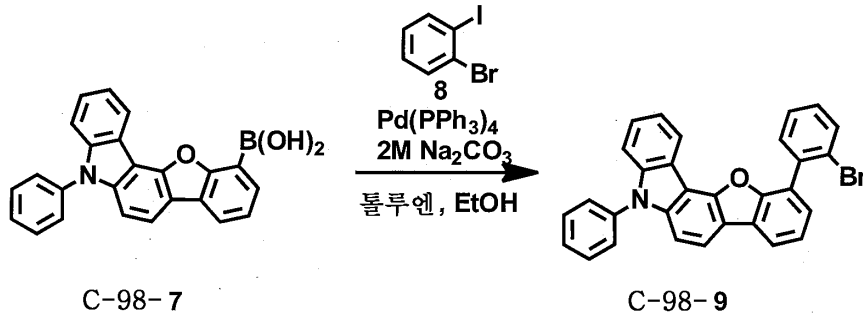


[0140]

[0141] 5-페닐-5H-벤조퓨로[3,2-c]카바졸(화합물 C-98-6) 31g(92.99mmol)을 테트라하이드로푸란(THF) 620mL에 녹인 후

노르말 부틸리튬(헥산 중 2.5M) 75mL(185.97mmol)를 -78℃에서 첨가하였다. 이 혼합물을 -78℃에서 1시간 동안 교반한 후 트리메톡시보란[B(OMe)<sub>3</sub>] 31mL(278.96mmol)를 첨가하였다. 전체 반응물을 2시간 동안 교반하고 염화암모늄 200mL로 반응을 종결시킨 후 에틸 아세테이트 300mL로 추출한 후, 수득한 유기층을 증류수 100mL로 씻었다. 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조시키고, 유기 용매는 감압하에서 제거하였다. 수득한 고체는 재결정방법으로 분리하여 화합물 C-98-7 32.8g(93%)을 수득하였다.

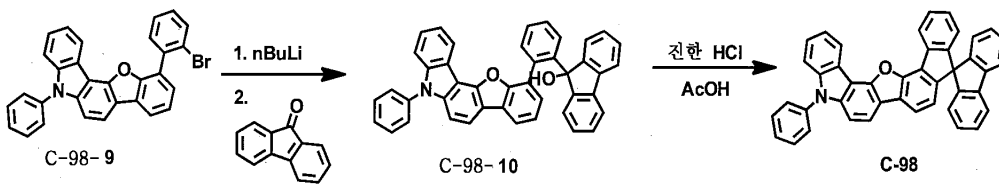
[0142] 화합물 C-98-9의 제조



[0143]

[0144] (5-페닐-5H-벤조퓨로[3,2-c]카바졸-11-일)보론산(화합물 C-98-7) 20g(53.03mmol), 2-브로모아이오도벤젠 22.5g(79.55mmol), 탄산나트륨 16.9g(159.09mmol) 및 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐[Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>] 3.1g(2.65mmol)을 톨루엔 260mL, 에탄올 65mL 및 정제수 65mL에 투입한 후 6시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻고, 에틸 아세테이트로 추출한 뒤, 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼로 정제하여 화합물 C-98-9 13g(51%)을 수득하였다.

[0145] 화합물 C-98의 제조



[0146]

[0147] 반응 용기에 11-(2-브로모페닐)-5-페닐-5H-벤조퓨로[3,2-c]카바졸(화합물 C-98-9) 13g(26.62 mmol)과 테트라하이드로퓨란 300mL을 넣고, 질소 조건을 만든 뒤 -78℃로 온도를 내렸다. 여기에 노르말 부틸 리튬 14mL(2.5M, 34.60mmol)를 천천히 적가하였다. 2시간 동안 -78℃에서 교반 후, 400mL의 테트라하드로퓨란에 녹아 있는 플루오렌온 6.2g(34.60mmol)을 천천히 적가하였다. 적가가 끝나면 반응온도를 상온으로 서서히 올려주고 30분 동안 추가로 교반하였다. 반응 용액에 염화암모늄 수용액을 넣어 반응을 종료하고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후, 회전 증발기로 용매를 제거한 후 얻은 화합물 C-98-3에 아세트산 266mL 및 HCl 26mL를 넣고 120℃에서 밤새 교반하였다. 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 C-98 6g(40%)을 수득하였다.

[0148] [소자 실시예1] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0149] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 OLED 소자를 다음과 같이 제작하였다. 우선, OLED용 글래스(삼성코닝사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막(15Ω/□)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기관 홀더에 ITO 기관을 장착한 후, 진공 증착장비 내의 셀에 N<sup>1</sup>,N<sup>1'</sup>-([1,1'-바이페닐]-4,4'-디일)비스(N<sup>1</sup>-(나프탈렌-1-일)-N<sup>4</sup>,N<sup>4'</sup>-다이페닐벤젠-1,4-다이아민)을 넣고 챔버 내의 진공도가 10<sup>-6</sup> torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기관 위에 60nm 두께의 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 본 발명의 화합물 C-98을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 정공주입층 위에 20nm 두께의 정공 수송층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 9-(4-([1,1':4',1''-테페닐]-3-일)피리딘-2-일)-9'-페닐-9H,9'H-3,3'-바이카바졸을 넣고, 또 다른 셀에는 도펀트로서 D-1을 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도펀트 전체에 대해 도펀트를 15중량%의 양으

로 도핑함으로써 상기 정공 수송층위에 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 한쪽 셀에 2-(4-(9,10-다이(나프탈렌-2-일)안트라센-2-일)페닐)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸을 넣고, 또다른 셀에는 리튬 퀴놀레이트(Lithium quinolate)를 넣은 후, 두 물질을 같은 속도로 증발시켜 각각 50중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 발광층 위에 30nm의 전자 수송층을 증착하였다. 이어서 전자 주입층으로 리튬 퀴놀레이트를 2nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착장비를 이용하여 Al 음극을 150nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제작하였다. 재료별로 각 화합물은  $10^{-6}$  torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0150] 그 결과,  $5.3\text{mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $2450\text{cd}/\text{m}^2$ 의 녹색발광이 확인되었다.

[0151] **[비교예 1] 종래의 재료를 이용한 OLED 소자 제작**

[0152] 정공 수송층으로서 N,N'-다이(4-바이페닐)-N,N'-다이(4-바이페닐)-4,4'-다이아미노다이페닐을 20nm 두께로 증착하였고 발광재료로서 호스트로는 4,4'-N,N'-다이카바졸-바이페닐을, 도펀트로는 화합물 **D-15**를 사용하고, 정공 수송층 위에 30nm 두께의 발광층을 증착하고, 정공차단층으로 알루미늄(III)비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)4-페닐페놀레이트를 10nm 두께로 증착한 것 외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0153] 그 결과,  $11.2\text{mA}/\text{cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $3650\text{cd}/\text{m}^2$ 의 녹색발광이 확인되었다.

[0154] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물들의 발광 특성이 종래의 재료 대비 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다. 또한 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 사용한 소자는 발광 특성이 뛰어나다.



专利名称(译)	标题：有机电致发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020140125576A</a>	公开(公告)日	2014-10-29
申请号	KR1020130043531	申请日	2013-04-19
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
当前申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	MOON DOO HYEON 문두현 AHN HEE CHOON 안희춘 LEE TAE JIN 이태진 KIM CHI SIK 김치식 CHO YOUNG JUN 조영준 LEE KYUNG JOO 이경주		
发明人	문두현 안희춘 이태진 김치식 조영준 이경주		
IPC分类号	C09K11/06 C07D491/04 C07D495/04 H01L51/50		
CPC分类号	C07D487/10 C07D209/94 C07D209/96 C07D405/12 C09K11/06 C07D491/107 H01L27/32 C07D495/10 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1088 C09K2211/1092 H01L51/0071 H01L51/5012 H01L51/0059 C07D491/04 C07D495/04 H01L51/0065 H01L51/0067 H01L51/0068		
代理人(译)	李昌勋		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

#### 摘要(译)

本发明涉及一种新型有机电致发光化合物和包含该化合物的有机电致发光器件，本发明的有机电致发光化合物可用于发光层或空穴传输层，可以制造电致发光器件。

