(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0110374
(43) 공개일자 2019년09월30일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
H01L 51/52 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/5024 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2018-0032263
(22) 출원일자 2018년03월20일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
덕산네오룩스 주식회사
충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32
경희대학교 산학협력단
경기도 용인시 기흥구 덕영대로 1732 (서천동, 경희대학교 국제캠퍼스내)
(72) 발명자
권장혁
경기도 성남시 수정구 창곡동 위례순환로 위례자이아파트 3306동 203호
이주영
경기도 수원시 팔달구 일월로 18번길 4-26 꽃뫼버들마을 코오롱아파트 172-1604
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인(유한)유일하이스트

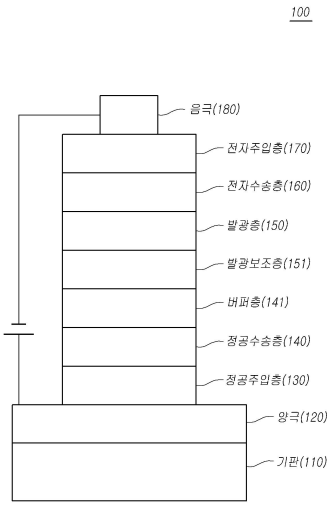
전체 청구항 수 : 총 11 항

(54) 발명의 명칭 **지연 형광용 호스트 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치**

(57) 요 약

본 발명은 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압 및 수명을 향상시킬 수 있는 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공한다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류
H01L 51/52 (2013.01)
C09K 2211/1044 (2013.01)
(72) 발명자
안대현
서울시 동대문구 회기로23길 67 리더벨리 101호
김시우
서울시 동대문구 회기로29길 11 402호
이범성
경기도 화성시 탄요 1길 98 내뜰애 타운하우스29동 2호
조민지
충청남도 천안시 동남구 만남로 9 1944호 (신부동, 포스코더샵)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 10048317
부처명 산업통상자원부
연구관리전문기관 한국산업기술평가관리원
연구사업명 전자정보디바이스산업원천기술개발
연구과제명 지연형광 방식을 이용한 양자효율 20% 이상의 적색 및 청색 형광 소재 및 소자 개발
기 여 율 1/1
주관기관 서울대학교산학협력단
연구기간 2017.06.01 ~ 2018.03.31

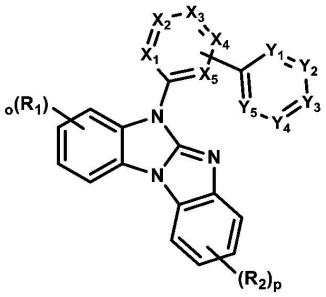
명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 지연 형광용 호스트 화합물.

화학식 1



상기 화학식 1에서,

1) X_1 내지 X_5는 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, CH; CR'; 및 N으로 이루어진 군에서 각각 어느 하나로 선택되되, X_1 내지 X_5 중 적어도 하나는 N이고, X_1 내지 X_5 중 어느 하나는 Y_1 내지 Y_5로 구성된 환과 연결되며,

2) Y_1 내지 Y_5는 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, CH; CR" ; 및 N으로 이루어진 군에서 각각 어느 하나로 선택되되, Y_1 내지 Y_5는 중 적어도 하나는 N이고,

3) R_1, R_2, R' 및 R" 는 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소; 중수소; 할로겐; C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; C_1~C_{50} 의 알킬기; 실란기; 시아노기; O, N, S, Si, P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의 방향족고리의 융합고리기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_2~C_{20}의 알킨일기; C_2~C_{20}의 알콕실기; C_6~C_{30}의 아릴옥시기; 카르보사이클릭 방향족 고리; 헤테로사이클릭 방향족 고리로 이루어진 군에서 선택되고,

4) o 및 p는 0 내지 4의 정수 중 어느 하나이고,

5) 상기 R_1, R_2, R' 및 R" 가 2개 이상 일 때, 복수의 R_1, R_2, R' 및 R" 는 서로 동일하거나 상이하다.

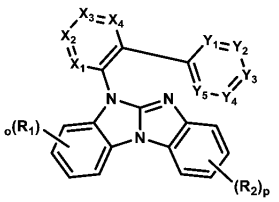
여기서, 상기 아릴기, 플루오렌닐기, 알킬기, 실란기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알켄일기, 알킨일기, 알콕실기, 아릴옥시기, 방향족 고리는 각각 중수소; 할로겐; C_1~C_{20}의 알킬기 또는 C_6~C_{20}의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실란기; 실록산기; C_1~C_{20}의 알킬싸이오기; C_1~C_{20}의 알콕실기; C_1~C_{20}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_2~C_{20}의 알킨일기; C_6~C_{20}의 아릴기; 중수소로 치환된 C_6~C_{20}의 아릴기; 플루오렌일기; C_2~C_{20}의 헤테로고리기; C_3~C_{20}의 시클로알킬기; C_7~C_{20}의 아릴알킬기 및 C_8~C_{20}의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 수 있으며, 또한 이들 치환기들은 서로 결합하여 고리를 형성할 수도 있으며, 여기서 '고리'란 C_3~C_{60}의 지방족고리 또는 C_6~C_{60}의 방향족고리 또는 C_2~C_{60}의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화 고리를 포함한다.

청구항 2

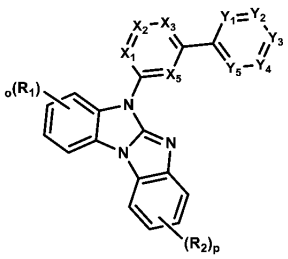
제1 항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 4로 표시되는 지연 형광용 호스트 화합물.

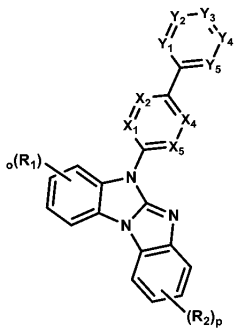
<화학식2>



<화학식3>



<화학식4>



상기 화학식 2 내지 4에 기재된 X_1 내지 X_5, Y_1 내지 Y_5, R_1, R_2, o 및 p는 화학식 1에서 정의된 X_1 내지 X_5, Y_1 내지 Y_5, R_1, R_2, o 및 p와 동일하다.

청구항 3

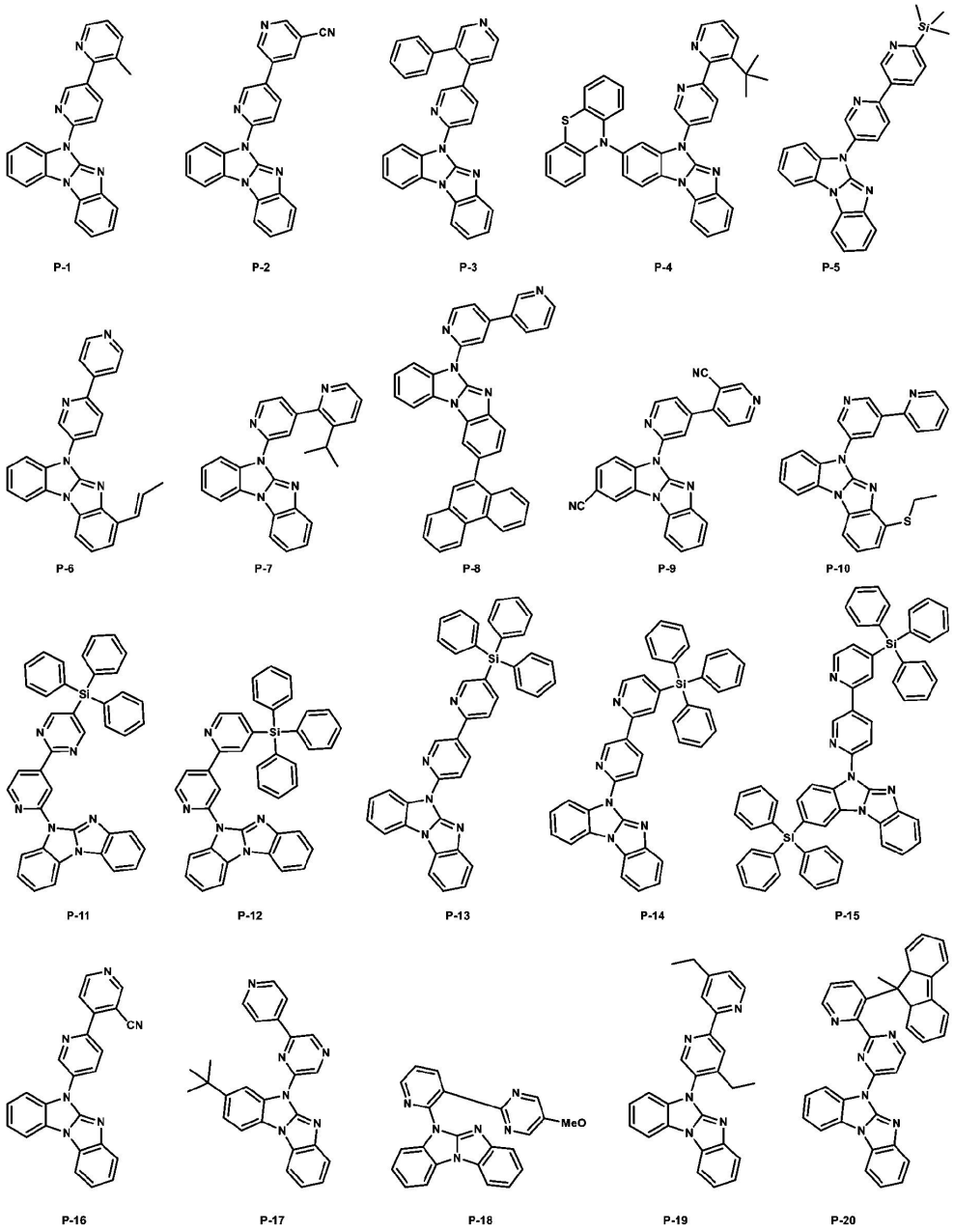
제1 항에 있어서,

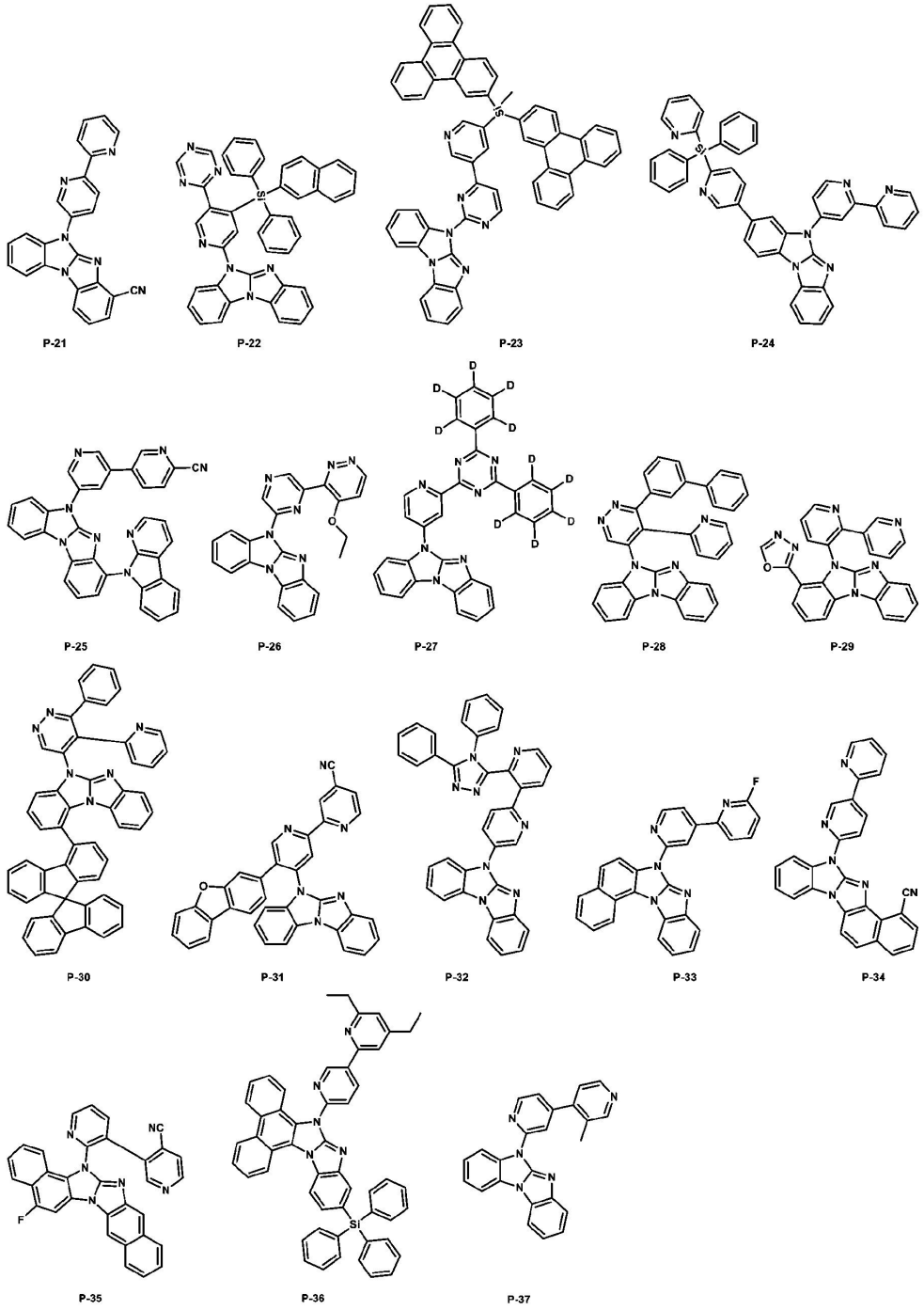
상기 R_1, R_2, R' 및 R" 는 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소; C_1~C_{50} 의 알킬기; 실란기; 및 시아노기로 이루어진 군으로부터 선택되는 지연 형광용 호스트 화합물.

청구항 4

제1 항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 지연 형광용 호스트 화합물.





청구항 5

양극;

음극; 및

상기 양극과 상기 음극 사이에 발광층을 포함하는 적어도 1층의 유기물층을 갖는 유기전기소자로서,

상기 유기물층은 제1 항 내지 제4 항 중 어느 한 항에 기재된 지연 형광용 호스트 화합물을 상기 유기물층에 함유하는 유기전기소자.

청구항 6

제5 항에 있어서,

상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이

루어진 군에서 선택되고, 상기 유기물층에 1종 또는 2종 이상의 상기 지연 형광용 호스트 화합물을 포함하는 유기전기소자.

청구항 7

제6 항에 있어서,

상기 지연 형광용 호스트 화합물은 상기 발광층에 포함되는 유기전기소자.

청구항 8

제5 항에 있어서,

상기 양극과 상기 음극의 일면 중 유기물층과 반대되는 적어도 일면에 형성되는 광효율 개선층을 더 포함하는 유기전기소자.

청구항 9

제5 항에 있어서,

상기 유기물층은 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 또는 롤투롤 공정에 의해 형성되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 10

제5 항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및

상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부를 포함하는 전자장치.

청구항 11

제10 항에 있어서,

상기 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 적어도 하나인 전자장치.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 지연 형광용 호스트 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기물질을 이용하여 전기 에너지를 빛 에너지로 전환시켜 주는 현상을 말한다. 유기 발광현상을 이용하는 유기전기소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기전기소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

[0003] 유기전기소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광재료와 전하수송재료, 예컨대 정공주입재료, 정공수송재료, 전자수송재료, 전자주입재료 등으로 분류될 수 있다.

[0004] 그리고, 상기 발광재료는 분자량에 따라 고분자형과 저분자형으로 분류될 수 있고, 발광 메커니즘에 따라 전자의 일중항 여기 상태로부터 유래 되는 형광재료와 전자의 삼중항 여기 상태로부터 유래 되는 인광재료로 분류될 수 있다. 또한, 발광재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광재료로 구분될 수 있다.

[0005] 한편, 발광재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호작용에 의하여 최대 발광파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광효율을 증가시키기 위하여 발광재료로서 호스트/도판트계를 사용할 수 있다. 그 원리는 발광층을 형성하는 호스트보다 에너지 대역간극이 작은 도판트를 발광층에 소량 혼합하면, 발광층에서 발생한 엑

시톤이 도판트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는것이다. 이때 호스트의 파장이 도판트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도판트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.

[0006] 현재 휴대용 디스플레이시장은 대면적 디스플레이로 그 크기가 증가하고 있는 추세이며, 이로 인해 기존 휴대용 디스플레이에서 요구하던 소비전력보다 더 큰 소비전력이 요구되고 있다. 따라서, 배터리라는 제한적인 전력 공급원을 가지고 있는 휴대용 디스플레이 입장에서는 소비전력이 매우 중요한 요소가 되었고, 효율과 수명 문제 또한 반드시 해결해야 하는 상황이다.

[0007] 효율과 수명, 구동전압 등은 서로 연관이 있으며, 효율이 증가되면 상대적으로 구동전압이 떨어지고, 구동전압이 떨어지면서 구동시 발생하는 주울열(Joule heating)에 의한 유기물질의 결정화가 적어져 결과적으로 수명이 늘어나는 경향을 나타낸다. 하지만, 상기 유기물층을 단순히 개선한다고 하여 효율을 극대화 시킬 수는 없다. 왜냐하면 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있기 때문이다. 따라서 높은 열적 안정성을 가지며 발광층 내에서 효율적으로 전하균형(charge balance)을 이룰 수 있는 발광재료의 개발이 필요한 실정이다.

[0008] 즉, 유기전기소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입물질, 정공수송물질, 발광물질, 전자수송물질, 전자주입물질, 발광보조층 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정되고 효율적인 유기전기소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서, 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있으며, 특히 발광층의 호스트 물질에 대한 개발이 절실히 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

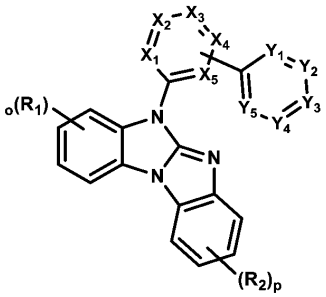
[0009] 본 발명은 소자의 구동전압을 유지시키거나 소폭 낮추면서, 발광효율 개선 및 장수명의 효과를 극대화 시킬 수 있는 지연 형광용 호스트 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

[0010] 더욱이, 본 발명은 소자의 발광 색순도를 향상시킬 수 있는 지연 형광용 호스트 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0011] 일 측면에서, 본 발명은 아래 화학식으로 표시되는 화합물을 제공한다.

화학식 1



[0012]

[0013] 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식으로 표시되는 화합물을 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공한다.

발명의 효과

[0014] 본 발명에 따른 화합물을 이용함으로써 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 고내열성을 달성할 수 있고, 소자의 색순도 및 수명을 크게 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0015] 도 1은 본 발명의 일실시예에 따른 유기발광소자의 단면도이다.

도 2는 비교예 2와 본 발명의 실시예 1, 16, 37 소자의 발광피크를 나타내는 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0016] 이하, 본 발명의 실시예를 첨부된 도면을 참조하여 상세하게 설명한다.

[0017] 각 도면의 구성요소들에 참조부호를 부가함에 있어서, 동일한 구성요소들에 대해서는 비록 다른 도면상에 표시되더라도 가능한 한 동일한 부호를 가지도록 하고 있음에 유의해야 한다. 또한, 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.

[0018] 또한, 본 발명의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제 1, 제 2, A, B, (a), (b) 등의 용어를 사용할 수 있다. 이러한 용어는 그 구성 요소를 다른 구성 요소와 구별하기 위한 것일 뿐, 그 용어에 의해 해당 구성 요소의 본질이나 차례 또는 순서 등이 한정되지 않는다. 어떤 구성 요소가 다른 구성요소에 "연결", "결합" 또는 "접속"된다고 기재된 경우, 그 구성 요소는 그 다른 구성요소에 직접적으로 연결되거나 또는 접속될 수 있지만, 각 구성 요소 사이에 또 다른 구성 요소가 "연결", "결합" 또는 "접속"될 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.

[0019] 본 명세서 및 첨부된 청구의 범위에서 사용된 바와 같이, 달리 언급하지 않는 한, 하기 용어의 의미는 하기와 같다.

[0020] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로겐"은 다른 설명이 없는 한 불소(F), 브롬(Br), 염소(Cl) 또는 요오드(I)이다.

[0021] 본 발명에 사용된 용어 "알킬" 또는 "알킬기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수의 단일결합을 가지며, 직쇄 알킬기, 분지쇄 알킬기, 사이클로알킬(지환족)기, 알킬-치환된 사이클로알킬기, 시클로알킬-치환된 알킬기를 비롯한 포화 지방족 작용기의 라디칼을 의미한다.

[0022] 본 발명에 사용된 용어 "할로알킬기" 또는 "할로겐알킬기"는 다른 설명이 없는 한 할로겐으로 치환된 알킬기를 의미한다.

[0023] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로알킬기"는 알킬기를 구성하는 탄소 원자 중 하나 이상이 헤테로원자로 대체된 것을 의미한다.

[0024] 본 발명에 사용된 용어 "알켄일기" 또는 "알킨일기"는 다른 설명이 없는 한 각각 2 내지 60의 탄소수의 이중결합 또는 삼중결합을 가지며, 직쇄형 또는 측쇄형 사슬기를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0025] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0026] 본 발명에 사용된 용어 "알콕실기", "알콕시기", 또는 "알킬옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알킬기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0027] 본 발명에 사용된 용어 "알켄옥실기", "알켄옥시기", "알켄일옥실기", 또는 "알켄일옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알켄일기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0028] 본 발명에 사용된 용어 "아릴옥실기" 또는 "아릴옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 아릴기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0029] 본 발명에 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다. 본 발명에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일 고리 또는 다중 고리의 방향족을 의미하며, 이웃한 치환기가 결합 또는 반응에 참여하여 형성된 방향족 고리를 포함한다. 예컨대, 아릴기는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 안트라센일기, 플루오렌기, 스파이로플루오렌기, 스파이로바이플루오렌기일 수 있다.

[0030] 접두사 "아릴" 또는 "아르"는 아릴기로 치환된 라디칼을 의미한다. 예를 들어 아릴알킬기는 아릴기로 치환된 알킬기이며, 아릴알켄일기는 아릴기로 치환된 알켄일기이며, 아릴기로 치환된 라디칼은 본 명세서에서 설명한 탄소수를 가진다.

[0031] 또한 접두사가 연속으로 명명되는 경우 먼저 기재된 순서대로 치환기가 나열되는 것을 의미한다. 예를 들어, 아릴알콕시기의 경우 아릴기로 치환된 알콕시기를 의미하며, 알콕실카르보닐기의 경우 알콕실기로 치환된 카르보

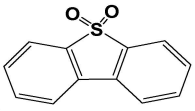
닐기를 의미하며, 또한 아릴카르보닐알켄일기의 경우 아릴카르보닐기로 치환된 알켄일기를 의미하며 여기서 아릴카르보닐기는 아릴기로 치환된 카르보닐기이다.

[0032] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로알킬"은 다른 설명이 없는 한 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 알킬을 의미한다. 본 발명에 사용된 용어 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 2 내지 60의 아릴기 또는 아릴렌기를 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 이웃한 작용기기가 결합하여 형성될 수도 있다.

[0033] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로고리기"는 다른 설명이 없는 한 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고, 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 헤테로지방족 고리 및 헤테로방향족 고리를 포함한다. 이웃한 작용기가 결합하여 형성될 수도 있다.

[0034] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 또는 Si를 나타낸다.

[0035] 또한 "헤테로고리기"는, 고리를 형성하는 탄소 대신 SO2를 포함하는 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, "헤테로고리기"는 다음 화합물을 포함한다.

[0036] 

[0037] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "지방족"은 탄소수 1 내지 60의 지방족 탄화수소를 의미하며, "지방족고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족 탄화수소 고리를 의미한다.

[0038] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화 고리를 포함한다.

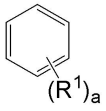
[0039] 전술한 헤테로화합물 이외의 그 밖의 다른 헤테로화합물 또는 헤테로라디칼은 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0040] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "카르보닐"이란 -COR'로 표시되는 것이며, 여기서 R'은 수소, 탄소수 1 내지 20 의 알킬기, 탄소수 6 내지 30 의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.

[0041] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "에테르"란 -R-O-R'로 표시되는 것이며, 여기서 R 또는 R'은 각각 서로 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.

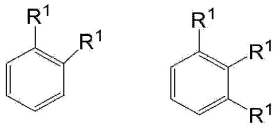
[0042] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로겐, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C_1~C_{20}의 알킬기, C_1~C_{20}의 알콕실기, C_1~C_{20}의 알킬아민기, C_1~C_{20}의 알킬티오펜기, C_6~C_{20}의 아릴티오펜기, C_2~C_{20}의 알켄일기, C_2~C_{20}의 알킨일기, C_3~C_{20}의 시클로알킬기, C_6~C_{20}의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6~C_{20}의 아릴기, C_8~C_{20}의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 및 C_2~C_{20}의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.

[0043] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용되는 화학식은 하기 화학식의 지수 정의에 의한 치환기 정의와 동일하게 적용된다.

[0044] 

[0045] 여기서, a가 0의 정수인 경우 치환기 R^1은 부존재하는 것을 의미하는데, 즉 a가 0인 경우는 벤젠 고리를 형성하는 탄소에 모두 수소가 결합된 것을 의미하며, 이때 탄소에 결합된 수소의 표시를 생략하고 화학식이나 화합물을 기재할 수 있다. 또한, a가 1의 정수인 경우 하나의 치환기 R1은 벤젠 고리를 형성하는 탄소 중 어느 하나의 탄소에 결합하며, a가 2 또는 3의 정수인 경우 예컨대 아래와 같이 결합할 수 있고, a가 4 내지 6의 정수인 경

우에도 이와 유사한 방식으로 벤젠 고리의 탄소에 결합하며, a가 2 이상의 정수인 경우 R^1은 서로 같거나 상이할 수 있다.

[0046] 

(a=2) (a=3)

[0047] 도 1은 본 발명에 일 실시예에 따른 유기전기소자에 대한 예시도이다.

[0048] 도 1을 참조하면, 본 발명에 따른 유기전기소자(100)는 기판(110) 상에 형성된 제 1전극(120), 제 2전극(180) 및 제 1전극(110)과 제 2전극(180) 사이에 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기물층을 구비한다. 이때, 제 1전극(120)은 애노드(양극)이고, 제 2전극(180)은 캐소드(음극)일 수 있으며, 인버트형의 경우에는 제 1전극이 캐소드이고 제 2전극이 애노드일 수 있다.

[0049] 유기물층은 제 1전극(120) 상에 순차적으로 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함할 수 있다. 이때, 발광층(150)을 제외한 나머지 층들이 형성되지 않을 수 있다. 정공저지층, 전자저지층, 발광보조층(151), 버퍼층(141) 등을 더 포함할 수도 있고, 전자수송층(160) 등이 정공저지층의 역할을 할 수도 있을 것이다.

[0050] 또한, 미도시하였지만, 본 발명에 따른 유기전기소자는 제 1전극과 제 2전극 중 적어도 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 일면에 형성된 보호층 또는 광효율 개선층(Capping layer)을 더 포함할 수 있다.

[0051] 상기 유기물층에 적용되는 본 발명에 따른 화합물은 정공주입층(130), 정공수송층(140), 전자수송층(160), 전자주입층(170), 발광층(150)의 호스트 또는 도펀트 또는 광효율 개선층의 재료로 사용될 수 있을 것이다. 바람직하게는, 본 발명의 화합물은 발광층(150)으로 사용될 수 있을 것이다.

[0052] 한편, 동일한 코어일지라도 어느 위치에 어느 치환기를 결합시키냐에 따라 밴드갭(band gap), 전기적 특성, 계면 특성 등이 달라질 수 있으므로, 코어의 선택 및 이에 결합된 서브(sub)-치환체의 조합도 아주 중요하며, 특히 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T_1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 장수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.

[0053] 따라서, 본 발명에서는 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하여 발광층을 형성함으로써 각 유기물층 간의 에너지 레벨(level) 및 T_1 값, 물질의 고유특성(mobility, 계면특성 등) 등을 최적화하여 유기전기소자의 수명 및 효율을 동시에 향상시킬 수 있다.

[0054] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자는 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여 제조될 수 있다. 예컨대, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극(120)을 형성하고, 그 위에 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극(180)으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 또한, 정공수송층(140)과 발광층(150) 사이에 발광보조층(151)을, 발광층(150)과 전자수송층(160) 사이에 전자수송보조층을 추가로 더 형성할 수 있다.

[0055] 또한, 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정, 롤투롤 공정, 닥터 블레이딩 공정, 스크린 프린팅 공정, 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다. 본 발명에 따른 유기물층은 다양한 방법으로 형성될 수 있으므로, 그 형성방법에 의해 본 발명의 권리범위가 제한되는 것은 아니다.

[0056] 본 발명에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0057] WOLED(White Organic Light Emitting Device)는 고해상도 실현이 용이하고 공정성이 우수한 한편, 기존의 LCD의 칼라필터 기술을 이용하여 제조될 수 있는 이점이 있다. 주로 백라이트 장치로 사용되는 백색 유기전기소자에 대한 다양한 구조들이 제안되고 특허화되고 있다. 대표적으로, R(Red), G(Green), B(Blue) 발광부들을 상호 평면적으로 병렬배치(side-by-side) 방식, R, G, B 발광층이 상하로 적층되는 적층(stacking) 방식이 있고, 청색(B) 유기발광층에 의한 전계발광과 이로부터의 광을 이용하여 무기형광체의 자발광(photo-luminescence)을 이

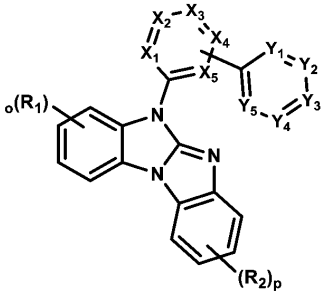
용하는 색변환물질(color conversion material, CCM) 방식 등이 있는데, 본 발명은 이러한 WOLED에도 적용될 수 있을 것이다.

[0058] 또한, 본 발명에 따른 유기전기소자는 유기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나일 수 있다.

[0059] 본 발명의 다른 실시예는 상술한 본 발명의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 이 디스플레이장치를 제어하는 제어부를 포함하는 전자장치를 포함할 수 있다. 이때, 전자장치는 현재 또는 장래의 유무선 통신단말일 수 있으며, 휴대폰 등의 이동 통신 단말기, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 전자장치를 포함한다.

[0060] 이하, 본 발명의 일 측면에 따른 화합물에 대하여 설명한다. 본 발명의 일 측면에 따른 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

화학식 1

[0061] 

[0062] 상기 화학식 1에서,

[0063] 1) X_1 내지 X_5는 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, CH; CR'; 및 N으로 이루어진 군에서 각각 어느 하나로 선택되되, X_1 내지 X_5 중 적어도 하나는 N이고, X_1 내지 X_5 중 어느 하나는 Y_1 내지 Y_5로 구성된 환과 연결되며,

[0064] 2) Y_1 내지 Y_5는 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, CH; CR"; 및 N으로 이루어진 군에서 각각 어느 하나로 선택되되, Y_1 내지 Y_5는 중 적어도 하나는 N이고,

[0065] 3) R_1, R_2, R' 및 R"는 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소; 중수소; 할로겐; C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; C_1~C_{50} 의 알킬기; 실란기; 시아노기; O, N, S, Si, P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의 방향족고리의 융합고리기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_2~C_{20}의 알킨일기; C_2~C_{20}의 알콕실기; C_6~C_{30}의 아릴옥시기; 카르보사이클릭 방향족 고리; 헤테로사이클릭 방향족 고리;로 이루어진 군에서 선택되고,

[0066] 4) o 및 p는 0 내지 4의 정수 중 어느 하나이고,

[0067] 5) 상기 R_1, R_2, R' 및 R"가 2개 이상 일 때, 복수의 R_1, R_2, R' 및 R"는 서로 동일하거나 상이하다.

[0068] 여기서, 상기 아릴기, 플루오렌닐기, 알킬기, 실란기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알켄일기, 알킨일기, 알콕실기, 아릴옥시기, 방향족 고리는 각각 중수소; 할로겐; C_1~C_{20}의 알킬기 또는 C_6~C_{20}의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실란기; 실록산기; C_1~C_{20}의 알킬싸이오기; C_1~C_{20}의 알콕실기; C_1~C_{20}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_2~C_{20}의 알킨일기; C_6~C_{20}의 아릴기; 중수소로 치환된 C_6~C_{20}의 아릴기; 플루오렌일기; C_2~C_{20}의 헤테로고리기; C_3~C_{20}의 시클로알킬기; C_7~C_{20}의 아릴알킬기 및 C_8~C_{20}의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 수 있으며, 또한 이들 치환기들은 서로 결합하여 고리를 형성할 수도 있으며, 여기서 '고리'란 C_3~C_{60}의 지방족고리 또는 C_6~C_{60}의 방향족고리 또는 C_2~C_{60}의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화 고리를 포함한다.

[0069] 여기서, 상기 아릴기인 경우 탄소수는 6~60, 바람직하게는 탄소수 6~40, 보다 바람직하게는 탄소수 6~30의 아릴

기일 수 있으며, 상기 헤테로고리기인 경우 탄소수는 2~60, 바람직하게는 탄소수 2~30, 보다 바람직하게는 탄소수 2~20의 헤테로고리일 수 있으며, 상기 알킬기인 경우 탄소수는 1~50, 바람직하게는 탄소수 1~30, 보다 바람직하게는 탄소수 1~20, 특히 바람직하게는 탄소수 1~10의 알킬기일 수 있다.

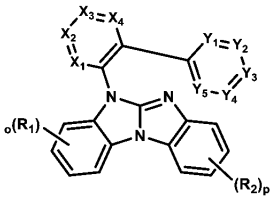
[0070] 상기 전술한 아릴기 또는 아릴렌기일 경우, 구체적으로 아릴기 또는 아릴렌기는 서로 독립적으로 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 페난트릴기 또는 페닐렌기, 비페닐렌기, 터페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트릴렌기, 파이렌 또는 트리페닐렌 등일 수 있다.

[0071] 한편, 상기 화학식 1의 R_1, R_2, R' 및 R" 는 바람직하게, 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소; C_1~C_{50} 의 알킬기; 실란기; 시아노기;로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

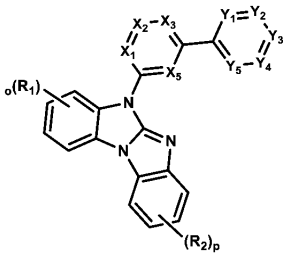
[0072] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물들 중 어느 하나일 수 있으며, 하기 화합물에만 한정하는 것은 아니다.

[0073] 구체적으로, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 4 중 하나로 표시될 수 있다.

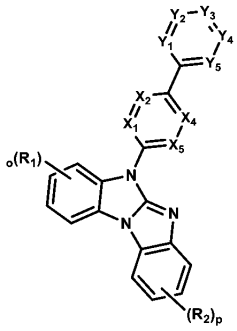
<화학식2>



<화학식3>



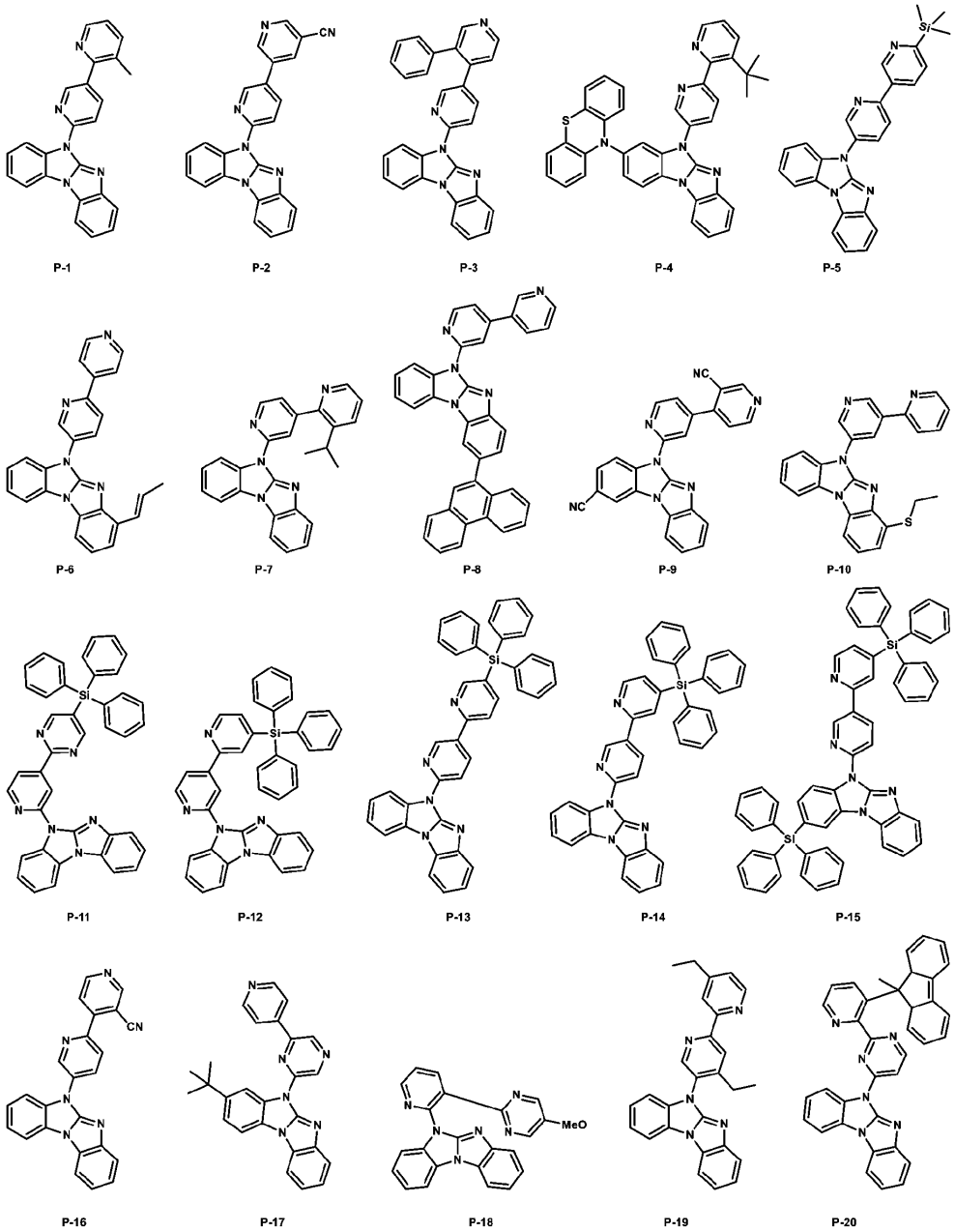
<화학식4>



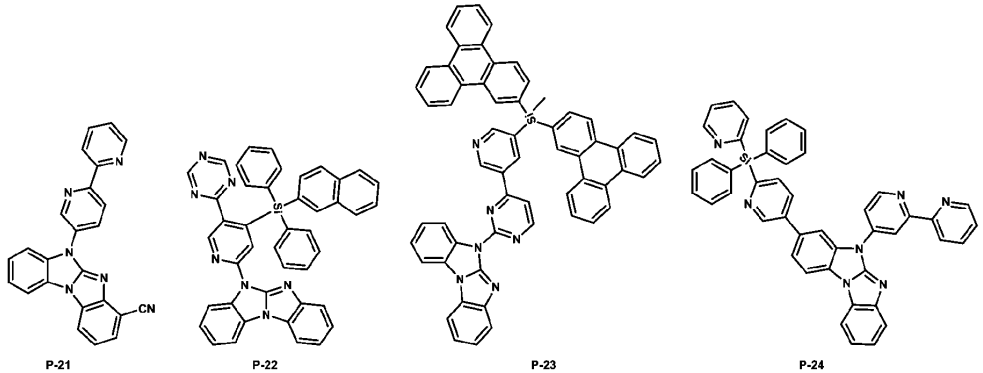
[0074]

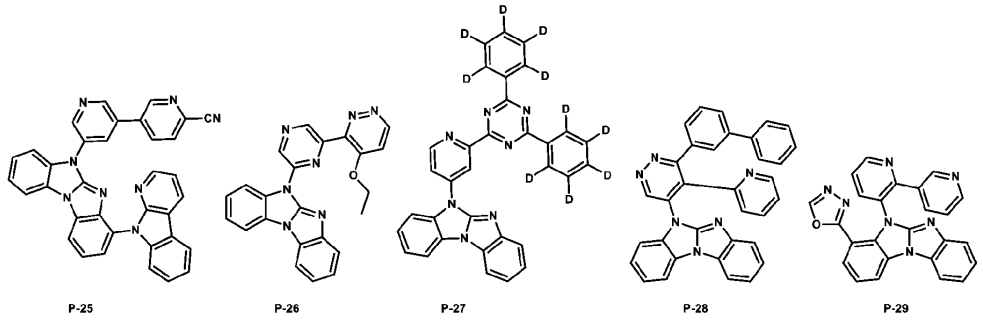
[0075] 상기 화학식 2 내지 4에 기재된 X_1 내지 X_5, Y_1 내지 Y_5, R_1, R_2, o 및 p는 화학식 1에서 정의된 X_1 내지 X_5, Y_1 내지 Y_5, R_1, R_2, o 및 p와 동일하다.

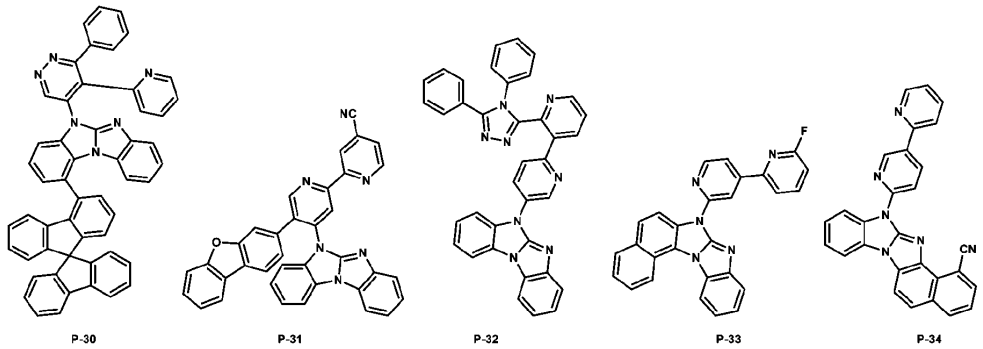
[0076] 보다 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물들 중 어느 하나일 수 있다. 다만, 상기 화학식 1이 하기 화합물들로만 한정되는 것은 아니다.

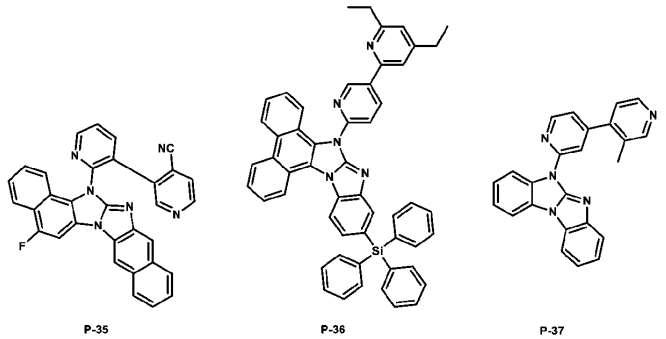

P-1
P-2
P-3
P-4
P-5
P-6
P-7
P-8
P-9
P-10
P-11
P-12
P-13
P-14
P-15
P-16
P-17
P-18
P-19
P-20

[0077]









[0078]

[0079] 다른 실시예로서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유기전기소자용 화합물을 제공한다.

[0080] 또 다른 실시예에서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 함유하는 유기전기소자를 제공한다.

[0081] 이때, 유기전기소자는 제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제2전극 사이에 위치하는 유기물층;을 포함할 수 있으며, 유기물층은 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있으며, 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기물층의 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 하나의 층에 함유될 수 있을 것이다. 특히 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층에 포함될 수 있다.

[0082] 즉, 화학식 1로 표시되는 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 또는 전자주입층의 재료로 사용될 수 있다. 특히 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 지연 형광 재료로 사용될 수 있다. 구체적으로, 상기 유기물층에 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 중 하나를 포함하는 유기전기소자를 제공하고, 보다 구체적으로, 상기 유기물층에 상기 개별 화학식(P-1 내지 P-37)로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[0083] 또 다른 실시예에서, 상기 유기물층의 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 하나의 층에, 상기 화합물이 단독으로 함유되거나, 상기 화합물이 서로 다른 2종 이상의 조합으로 함유되거나, 상기 화합물이 다른 화합물과 2종 이상의 조합으로 함유된 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다. 다시 말해서, 각각의 층들에는 화학식 1에 해당하는 화합물이 단독으로 포함될 수 있고, 2종 이상의 화학식 1의 화합물들의 혼합물이 포함될 수 있으며, 청구항 1항 내지 4항의 화합물과, 본 발명에 해당하지 않는 화합물과의 혼합물이 포함될 수 있다. 여기서 본 발명에 해당하지 않는 화합물은 단일의 화합물일 수 있고, 2종 이상의 화합물들일 수도 있다. 이때 상기 화합물이 다른 화합물과 2종 이상의 조합으로 함유될 경우 다른 화합물은 각 유기물층의 이미 알려진 화합물일 수도 있고, 앞으로 개발될 화합물 등일 수 있다. 이때 상기 유기물층에 함유된 화합물은 동종의 화합물로만 이루어질 수도 있지만, 화학식 1로 표시되는 이종의 화합물이 2이상 혼합된 혼합물일 수도 있다.

[0084] 예를 들어 상기 유기물층은 상기 화합물 중 서로 구조가 상이한 2종의 화합물들이 99:1 내지 1:99의 몰비율로 혼합될 수 있다.

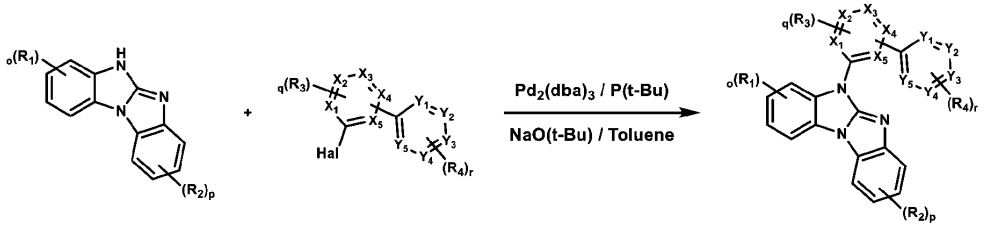
[0085] 본 발명의 또 다른 실시예에서, 본 발명은 상기 제 1전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 또는 상기 제 2전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 중 적어도 하나에 형성되는 광효율 개선층을 더 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[0086] 이하에서, 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 합성예 및 유기전기소자의 제조예에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0088] **합성예**

[0089] 본 발명에 따른 화합물(final products)은 하기 반응식 1과 같이 Core와 Sub를 반응시켜 합성되며, 이에 한정되는 것은 아니다.

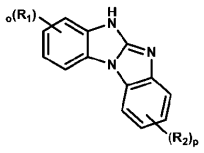
<반응식1>

[0090] 

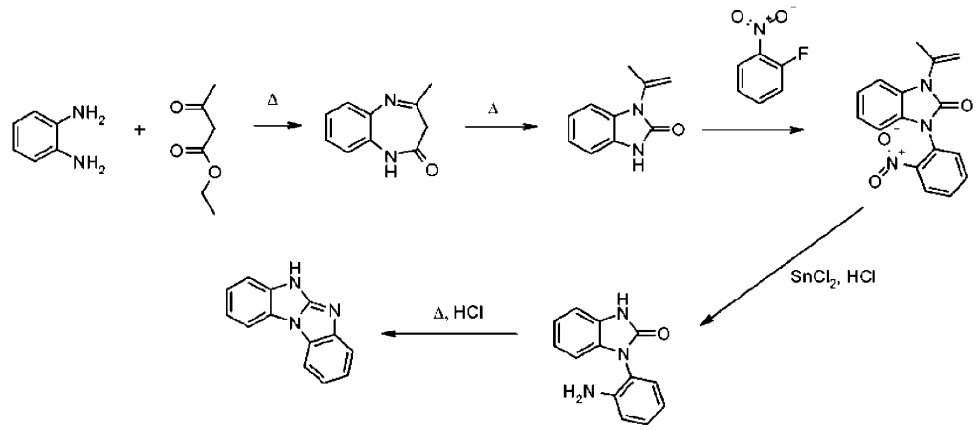
Core Sub Final Products

[0091] 상기 반응식 1에서 Hal은 Br 및 Cl 중 어느 하나이다.

[0093] **I. Core의 합성**

[0094]  의 합성은, 문헌 [Achour, Reddouane; Zniber, Rachid, Bulletin des Societes Chimiques Belges 96 (1987) 787-92]에 기재되어 있으며, 하기 반응식 2와 같다.

<반응식2>



[0095]

[0096] 한편, Core에 속하는 화합물은 하기와 같은 화합물들일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 표 1은 Core에 속하는 화합물들의 FD-MS 값을 나타낸 것이다.

[0097]

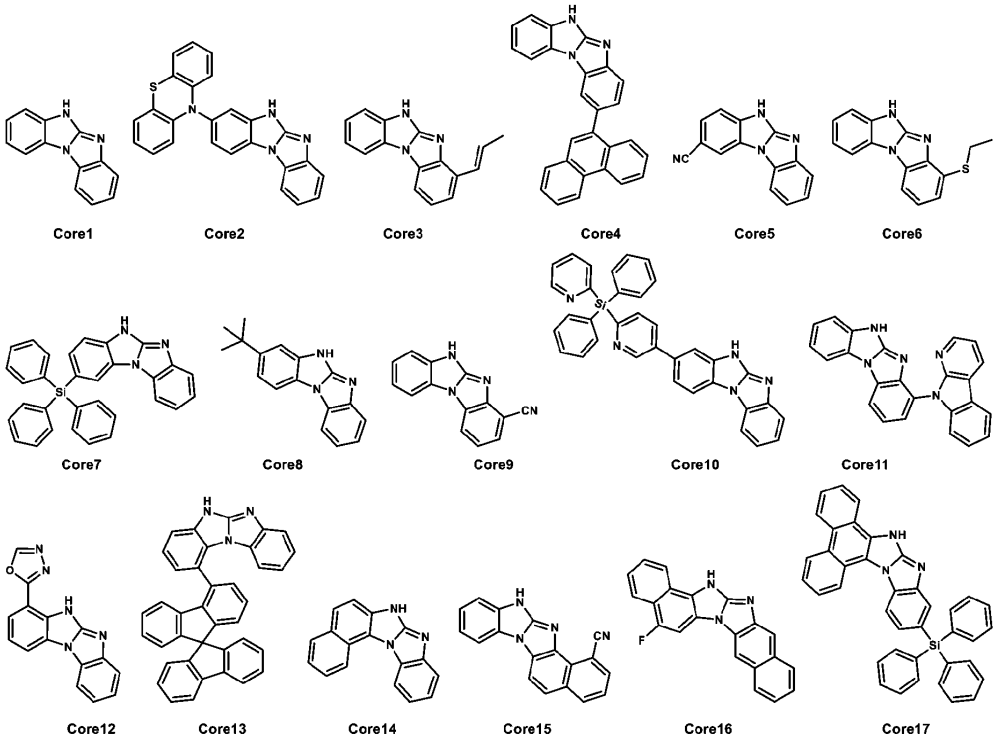


표 1

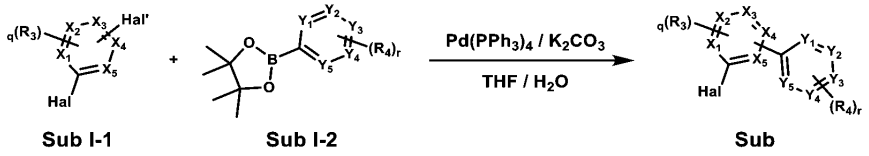
[0098]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Core 1	Cas=28890-99-5	Core 2	m/z=404.11 ($C_{25}H_{16}N_4S$=404.49)
Core 3	m/z=247.11 ($C_{16}H_{13}N_3$=247.30)	Core 4	m/z=383.14 ($C_{27}H_{17}N_3$=383.45)
Core 5	m/z=232.07 ($C_{14}H_8N_4$=232.25)	Core 6	m/z=267.08 ($C_{15}H_{13}N_3S$=267.35)
Core 7	m/z=465.17 ($C_{31}H_{23}N_3Si$=465.63)	Core 8	m/z=263.14 ($C_{17}H_{17}N_3$=263.34)
Core 9	m/z=232.07 ($C_{14}H_8N_4$=232.25)	Core 10	m/z=543.19 ($C_{35}H_{25}N_5Si$=543.71)
Core 11	m/z=373.13 ($C_{24}H_{15}N_5$=373.42)	Core 12	m/z=275.08 ($C_{15}H_9N_5O$=275.27)
Core 13	m/z=521.19 ($C_{38}H_{23}N_3$=521.62)	Core 14	Cas=2172959-78-1
Core 15	m/z=282.09 ($C_{18}H_{10}N_4$=282.31)	Core 16	m/z=325.10 ($C_{21}H_{12}FN_3$=325.35)
Core 17	m/z=565.20 ($C_{39}H_{27}N_3Si$=565.75)		

[0100] II. Sub의 합성

[0101] 상기 반응식 1의 Sub에 속하는 화합물은 하기 반응식 3에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정된 것은 아니다.

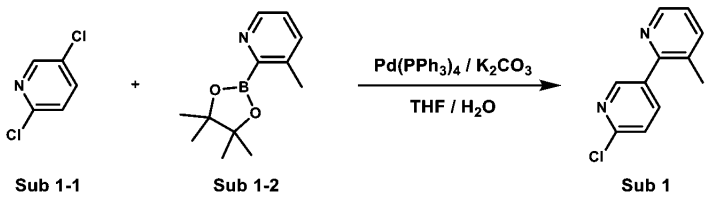
<반응식 3>



[0102]

[0103] 상기 반응식 3에서 Hal은 I, Br 및 Cl 중 어느 하나이고, Hal'은 Br 및 Cl 중 어느 하나이다.

[0105] Sub 1의 합성예

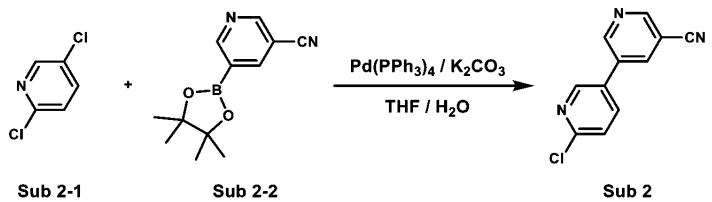


[0106]

[0107] 둥근 바닥플라스크에 Sub1-1 (1.0당량), Sub1-2 (1.3당량), $Pd(PPh_3)_4$ (0.03당량), K_2CO_3 (3당량)을 넣고, THF/H_2O 를 2:1의 비율로 넣고 70℃에서 환류 반응 진행시킨다.

[0108] 반응이 완료 되면 상온으로 온도를 낮추고, CH_2Cl_2 와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 유기물을 Silicagel column 및 재결정하여 Sub1 27.66g(수율: 80%)을 얻었다.

[0109] Sub 2의 합성예

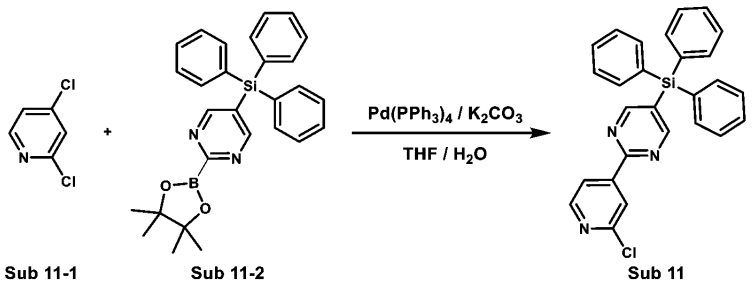


[0110]

[0111] 둥근 바닥플라스크에 Sub2-1 (1.0당량), Sub2-2 (1.3당량), $Pd(PPh_3)_4$ (0.03당량), K_2CO_3 (3당량)을 넣고, THF/H_2O 를 2:1의 비율로 넣고 70℃에서 환류 반응 진행시킨다.

[0112] 반응이 완료 되면 상온으로 온도를 낮추고, CH_2Cl_2 와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 유기물을 Silicagel column 및 재결정하여 Sub29 41.97g(수율: 72%)을 얻었다.

[0113] <u>Sub 11의 합성예</u>



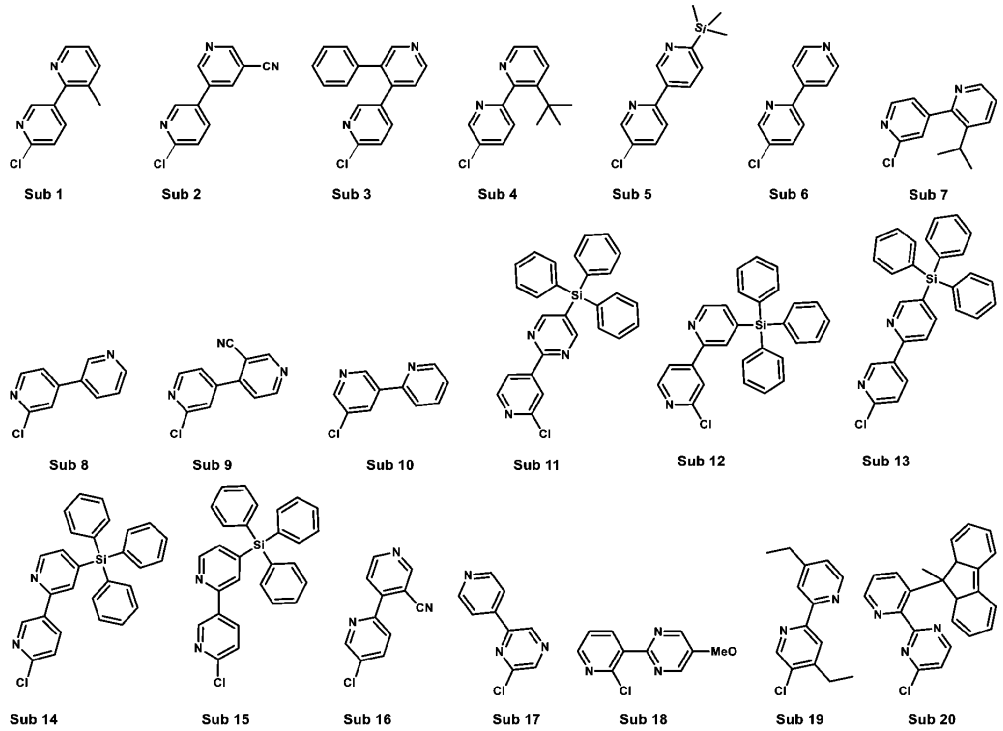
Sub 11-1 Sub 11-2 Sub 11

[0114]

[0115] 둥근 바닥플라스크에 Sub11-1 (1.0당량), Sub11-2 (1.3당량), $Pd(PPh_3)_4$ (0.03당량), K_2CO_3 (3당량)을 넣고, THF/H_2O 를 2:1의 비율로 넣고 70℃에서 환류 반응 진행시킨다.

[0116] 반응이 완료되면 상온으로 온도를 낮추고, CH_2Cl_2 와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 유기물을 Silicagel column 및 재결정하여 Sub11 97.31g(수율: 64%)을 얻었다.

[0118] Sub 에 속하는 화합물은 아래와 같은 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 표 2는 Sub 에 속하는 일부 화합물의 FD-MS(Field Desorption-Mass Spectrometry) 값을 나타낸 것이다.

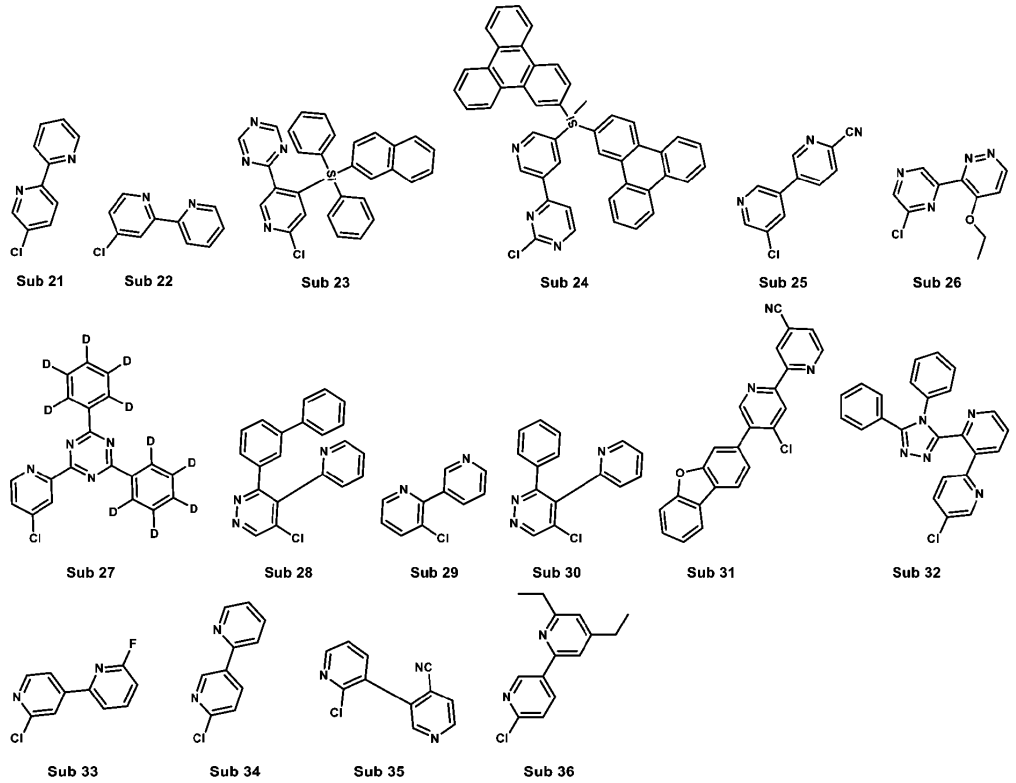


Sub 1 Sub 2 Sub 3 Sub 4 Sub 5 Sub 6 Sub 7

Sub 8 Sub 9 Sub 10 Sub 11 Sub 12 Sub 13

Sub 14 Sub 15 Sub 16 Sub 17 Sub 18 Sub 19 Sub 20

[0119]



[0120]

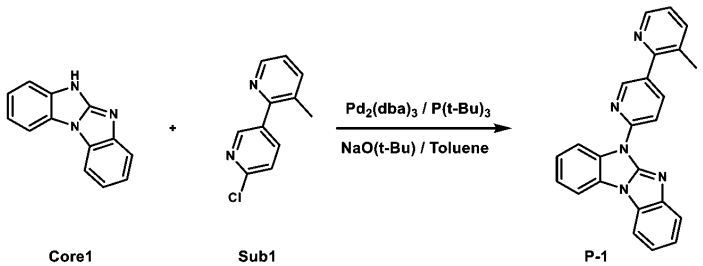
표 2

[0121]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1	m/z=204.05 ($C_{11}H_9ClN_2$=204.66)	Sub 2	m/z=215.03 ($C_{11}H_6ClN_3$=215.64)
Sub 3	m/z=266.06 ($C_{16}H_{11}ClN_2$=266.73)	Sub 4	m/z=246.09 ($C_{14}H_{15}ClN_2$=246.74)
Sub 5	m/z=262.07 ($C_{13}H_{15}ClN_2Si$=262.81)	Sub 6	m/z=190.03 ($C_{10}H_7ClN_2$=190.63)
Sub 11	m/z=449.11 ($C_{27}H_{20}ClN_3Si$=450.01)	Sub 12	m/z=448.12 ($C_{28}H_{21}ClN_2Si$=449.03)
Sub 18	m/z=221.04 ($C_{10}H_8ClN_3O$=221.64)	Sub 20	m/z=371.12 ($C_{23}H_{18}ClN_3$=371.87)
Sub 23	m/z=500.12 ($C_{30}H_{21}ClN_4Si$=501.06)	Sub 24	m/z=687.19 ($C_{46}H_{30}ClN_3Si$=688.30)
Sub 26	m/z=236.05 ($C_{10}H_9ClN_4O$=236.66)	Sub 27	m/z=354.15 ($C_{20}H_3D_{10}ClN_4$=354.86)
Sub 28	m/z=343.09 ($C_{21}H_{14}ClN_3$=343.81)	Sub 31	m/z=381.07 ($C_{23}H_{12}ClN_3O$=381.82)
Sub 32	m/z=409.11 ($C_{24}H_{16}ClN_5$=409.88)	Sub 33	m/z=208.02 ($C_{10}H_6ClFN_2$=208.62)

[0123] III. 최종 생성물(Final Product)의 합성

[0124] P-1 합성예시

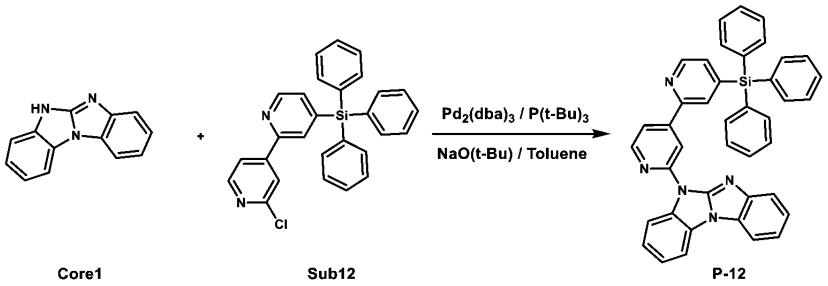


[0125]

[0126] Core 1 (20.0 g, 96.51 mmol)을 둥근바닥플라스크에 넣고 toluene (965 mL)으로 녹인 후에, Sub 1 (19.7 g,

96.51 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.65 g, 2.90 mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (1.17 g, 5.79 mmol), NaO*t*-Bu (27.83 g, 289.52 mmol)을 첨가하고 100° C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축 한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 30.44 g (수율: 84 %)를 얻었다.

[0128] **P-12 합성예시**

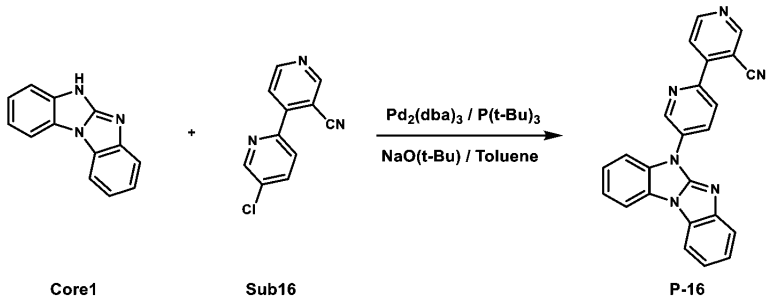


Core1 Sub12 P-12

[0129]

[0130] Core 1 (20.0 g, 96.51 mmol)과 Sub 12 (43.33 g, 96.51 mmol)을 상기 P-1의 합성법을 이용하여 생성물 45.46 g (수율: 76 %)를 얻었다.

[0132] **P-16 합성예시**



Core1 Sub16 P-16

[0133]

[0134] Core 1 (20.0 g, 96.51 mmol)과 Sub 16 (20.81 g, 96.51 mmol)을 상기 P-1의 합성법을 이용하여 생성물 29.83 g (수율: 80 %)를 얻었다.

[0136] 한편, 상기와 같은 합성예에 따라 제조된 본 발명의 화합물 P-1 내지 P-36의 FD-MS 값은 하기 표 5와 같다.

표 3

[0137]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
P-1	m/z=430.18 ($C_{26}H_{21}N_5$=403.49)	P-2	m/z=386.13 ($C_{24}H_{14}N_6$=386.42)
P-3	m/z=437.16 ($C_{29}H_{19}N_5$=437.51)	P-4	m/z=614.23 ($C_{39}H_{30}N_6S$=614.77)
P-5	m/z=433.17 ($C_{26}H_{23}N_5Si$=433.59)	P-6	m/z=401.16 ($C_{26}H_{19}N_5$=401.47)
P-8	m/z=537.20 ($C_{37}H_{23}N_5$=537.63)	P-9	m/z=411.12 ($C_{25}H_{13}N_7$=411.43)
P-10	m/z=421.14 ($C_{25}H_{19}N_5S$=421.52)	P-11	m/z=620.21 ($C_{40}H_{28}N_6Si$=620.79)
P-12	m/z=619.22 ($C_{41}H_{29}N_5Si$=619.80)	P-13	m/z=619.22 ($C_{41}H_{29}N_5Si$=619.80)
P-14	m/z=619.22 ($C_{41}H_{29}N_5Si$=619.80)	P-15	m/z=877.31 ($C_{59}H_{43}N_5Si_2$=878.20)
P-17	m/z=418.19 ($C_{26}H_{22}N_6$=418.50)	P-18	m/z=392.14 ($C_{23}H_{16}N_6O$=392.42)
P-19	m/z=417.20 ($C_{27}H_{23}N_5$=417.52)	P-20	m/z=542.22 ($C_{36}H_{26}N_6$=542.65)
P-22	m/z=671.23 ($C_{43}H_{29}N_7Si$=671.84)	P-23	m/z=858.29 ($C_{59}H_{38}N_6Si$=859.08)
P-24	m/z=697.24 ($C_{45}H_{31}N_7Si$=697.88)	P-25	m/z=552.18 ($C_{35}H_{20}N_8$=552.60)
P-26	m/z=407.15 ($C_{23}H_{17}N_7O$=407.44)	P-27	m/z=525.25 ($C_{33}H_{11}D_{10}N_7$=525.64)
P-28	m/z=514.19 ($C_{34}H_{22}N_6$=514.59)	P-29	m/z=429.13 ($C_{25}H_{15}N_7O$=429.44)
P-30	m/z=752.27 ($C_{53}H_{32}N_6$=752.88)	P-31	m/z=552.17 ($C_{36}H_{20}N_6O$=552.60)
P-32	m/z=580.21 ($C_{37}H_{24}N_8$=580.66)	P-33	m/z=429.14 ($C_{27}H_{16}FN_5$=429.46)
P-34	m/z=436.14 ($C_{28}H_{16}N_6$=436.48)	P-35	m/z=504.15 ($C_{32}H_{17}FN_6$=504.53)
P-36	m/z=775.31 ($C_{53}H_{41}N_5Si$=776.03)		

[0139] 한편, 상기에서는 화학식 1로 표시되는 본 발명의 예시적 합성예를 설명하였지만, 이들은 모두 Buchwald-Hartwig cross coupling 반응, Suzuki cross-coupling 반응, Intramolecular acid-induced cyclization 반응 (J. mater. Chem. 1999, 9, 2095.), Pd(II)-catalyzed oxidative cyclization 반응 (Org. Lett. 2011, 13, 5504), Grignard 반응, Cyclic Dehydration 반응 및 PPh3-mediated reductive cyclization 반응 (J. Org. Chem. 2005, 70, 5014.)등에 기초한 것으로 구체적 합성예에 명시된 치환기 이외에 화학식 1에 정의된 다른 치환기가 결합되더라도 상기 반응이 진행된다는 것을 당업자라면 쉽게 이해할 수 있을 것이다.

[0141] **유기전기소자의 제조평가**

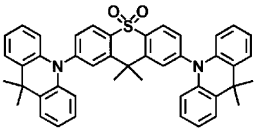
[0142] **[실시예 1] 유기발광소자의 제작 및 시험 (지연형광)**

[0143] 합성을 통해 얻은 화합물을 발광층의 호스트 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기발광소자를 제작하였다.

[0144] 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층 층(양극) 위에 우선 정공주입층으로서 1,1-비스[4-[N,N-다이(p-톨릴)아미노페닐]사이클로헥산 (이하 TAPC로 약기함) 막을 진공증착하여 30 nm 두께로 형성하였다. 이어서, 이 막 상에 정공수송 화합물로서 4,4',4"-트리(N-카바졸릴)트리페닐 아민 (이하 TCTA로 약기함)을 20 nm 두께로 진공 증착하고 이어서 3,5-다이(9H-카바졸-9-릴)-N,N-다이페닐아닐린 (이하 DCDPA로 약기함) 을 10 nm 두께로 진공 증착하여 정공수송층을 형성하였다. 정공수송층 상부에 호스트로 본 발명에 따른 화합물 P-1과 도펀트로 20 중량%의 DMTDAc를 공증착함으로써 상기 정공수송층 상에 20nm 두께의 발광층을 형성하였다. 정공저지층으로 4-(트리페닐실릴)페닐다이페닐포스핀옥사이드 (이하 TSPO1로 약기함)을 10 nm 두께로 진공증착하고, 전자수송층으로 1,3,5-트리스(1-페닐-1H-벤즈이미다졸-2-릴)벤젠 (이하 TPBi로 약칭함)을 30 nm 두께로 성막하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 2.5 nm두께로 증착하고, 이어서 Al을 100 nm의 두께로 증착하여 이 Al/LiF를 음극으로 사

용함으로써 유기 전계 발광소자를 제조하였다.

[DMTDAc]

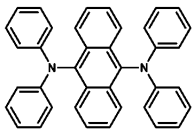


[0145]

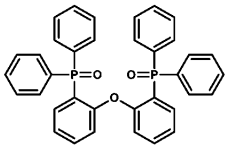
[0147] **[비교예 1] 및 [비교예 2]**

[0148] 본 발명의 화합물 P-1 대신에 하기 비교화합물 1 및 비교화합물 2를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

<비교화합물 1>



<비교화합물 2>



[0149]

[0151] **[실시예 2] 내지 [실시예 37]**

[0152] 본 발명의 화합물 P-1 대신에 본 발명의 화합물 P-2 내지 P-37을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0154] 이와 같이 제조된 실시예 및 비교예 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정 결과 500cd/m^2 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T50 수명을 측정하였다. 하기 표 4는 소자제작 및 평가한 결과를 나타낸다.

표 4

	화합물	구동 전압	전류 (mA/cm2)	휘도 (cd/m2)	효율 (cd/A)	T (50)	CIE	
							X	Y
비교예 1	비교화합물 1	5.8	10	500	15	2	0.15	0.12
비교예 2	비교화합물 2	5.2	7.9	500	18.8	0.5	0.14	0.16
실시예(1)	화합물 P-1	5.0	6.6	500	19.1	15.5	0.16	0.10
실시예(2)	화합물 P-2	5.0	7.4	500	16.6	10.5	0.16	0.10
실시예(3)	화합물 P-3	5.1	7.9	500	17.5	9.2	0.15	0.11
실시예(4)	화합물 P-4	5.2	7.7	500	17.0	4.7	0.15	0.10
실시예(5)	화합물 P-5	5.2	8.3	500	16.1	5.8	0.16	0.10
실시예(6)	화합물 P-6	5.1	7.0	500	15.1	8.7	0.16	0.10
실시예(7)	화합물 P-7	5.2	6.8	500	17.3	7.5	0.16	0.10
실시예(8)	화합물 P-8	5.1	8.3	500	15.0	8.2	0.15	0.11
실시예(9)	화합물 P-9	5.2	7.0	500	17.9	12.7	0.16	0.10
실시예(10)	화합물 P-10	5.2	7.8	500	17.8	9.6	0.15	0.11
실시예(11)	화합물 P-11	5.1	7.8	500	17.8	6.6	0.15	0.11
실시예(12)	화합물 P-12	5.2	7.0	500	18.2	4.5	0.15	0.11
실시예(13)	화합물 P-13	5.1	7.5	500	15.3	5.6	0.15	0.11
실시예(14)	화합물 P-14	5.1	6.9	500	17.5	5.5	0.16	0.10
실시예(15)	화합물 P-15	5.2	6.9	500	17.7	4.9	0.15	0.11
실시예(16)	화합물 P-16	5.1	7.4	500	17.2	13.1	0.16	0.10
실시예(17)	화합물 P-17	5.2	7.7	500	16.9	7.0	0.15	0.10
실시예(18)	화합물 P-18	5.2	7.8	500	16.6	2.3	0.16	0.10
실시예(19)	화합물 P-19	5.2	6.8	500	16.5	8.8	0.15	0.10
실시예(20)	화합물 P-20	5.2	8.2	500	15.1	6.6	0.15	0.11
실시예(21)	화합물 P-21	5.1	7.6	500	14.2	9.1	0.15	0.11
실시예(22)	화합물 P-22	5.1	7.7	500	14.8	5.9	0.15	0.10
실시예(23)	화합물 P-23	5.1	8.0	500	15.4	4.1	0.16	0.11
실시예(24)	화합물 P-24	5.1	8.2	500	15.1	7.2	0.15	0.11
실시예(25)	화합물 P-25	5.1	7.9	500	16.5	3.8	0.16	0.11
실시예(26)	화합물 P-26	5.2	7.7	500	16.2	7.1	0.16	0.10
실시예(27)	화합물 P-27	5.2	8.3	500	16.0	10.2	0.15	0.11
실시예(28)	화합물 P-28	5.2	7.9	500	16.9	2.5	0.16	0.11
실시예(29)	화합물 P-29	5.2	7.9	500	17.3	3.2	0.16	0.10
실시예(30)	화합물 P-30	5.2	8.0	500	17.5	3.3	0.16	0.10
실시예(31)	화합물 P-31	5.1	8.2	500	17.1	9.5	0.15	0.10
실시예(32)	화합물 P-32	5.1	8.0	500	16.8	8.4	0.15	0.10
실시예(33)	화합물 P-33	5.1	8.1	500	13.7	6.4	0.15	0.11
실시예(34)	화합물 P-34	5.1	7.9	500	15.1	11.3	0.16	0.11
실시예(35)	화합물 P-35	5.1	7.9	500	13.2	6.0	0.15	0.10
실시예(36)	화합물 P-36	5.1	7.8	500	12.3	7.8	0.15	0.11
실시예(37)	화합물 P-37	5.1	8.3	500	18.2	14.2	0.16	0.10

[0155]

[0156] 표 4를 참조하면, 본 발명의 화합물은 낮은 구동전압과, 높은 발광효율 및 진한 청색을 나타내는 것을 확인할 수 있다. 더욱 자세하게, 비교화합물 1에 비해 비교화합물 2를 사용하여 제작된 소자의 전기적 특성이 현저하게 개선된 값을 나타내고, 비교화합물 2를 사용하여 제작된 소자의 전기적 특성 및 발광색보다 본 발명 실시예 화합물로 제작된 소자의 전기적 특성 및 발광색이 현저하게 개선된 것을 확인할 수 있다.

[0157] 일반적으로, 비교화합물 2는 전자 이동도 특성이 높고 정공 이동도 특성이 낮은 물질로, 포스핀 옥사이드를 포함하는 특성상 해리 에너지가 낮아 불안한 물질 특성을 가지며, 분자의 극성이 높아 발광색을 장파장 쪽으로 이동시키는 문제가 있다. 이때, 본 발명에 따른 화합물은 포스핀 옥사이드 물질을 포함하지 않는 새로운 구조를 가짐으로써, 비교화합물2에 비해 정공이동도 특성이 개선되어 발광효율이 개선됨과 동시에 비교화합물 2와 유사한 T_1값을 가짐으로써 지연 형광에 용이한 특성을 나타낸다(하기 표 5 참조).

표 5

구분	T_1(eV)
비교화합물2	3.3
화합물 P-1	3.37
화합물 P-16	3.34
화합물 P-37	3.21

[0158]

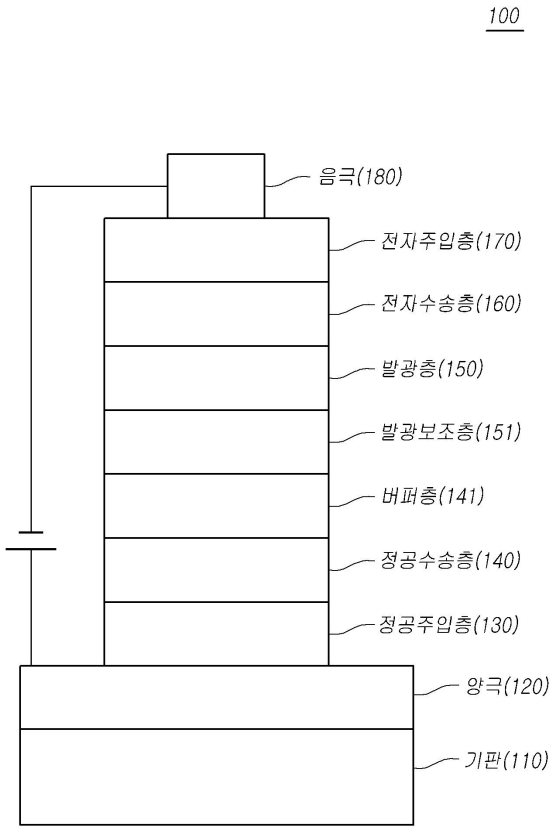
[0159] 한편, 도 2는 비교예 2와 본 발명 실시예 1, 16, 37 소자의 발광피트를 나타내는데, 도 2에 도시된 바와 같이, 이는 본 발명에 따른 화합물들이 상기 서술한 개선된 특성을 나타냄으로써 비교예 2에 비해 본 발명 실시예 1, 16, 37의 소자가 보다 진한 청색에 가까운 피크 값을 갖는 것을 확인할 수 있다.

[0160] 한편, 도 2에는 본 발명의 실시예 1, 16, 37에 대해서만 설명하였으나, 동일한 골격을 갖는 본 발명의 화합물을 사용한 다른 실시예들도 상기와 동일한 효과를 얻을 수 있음은 자명하다.

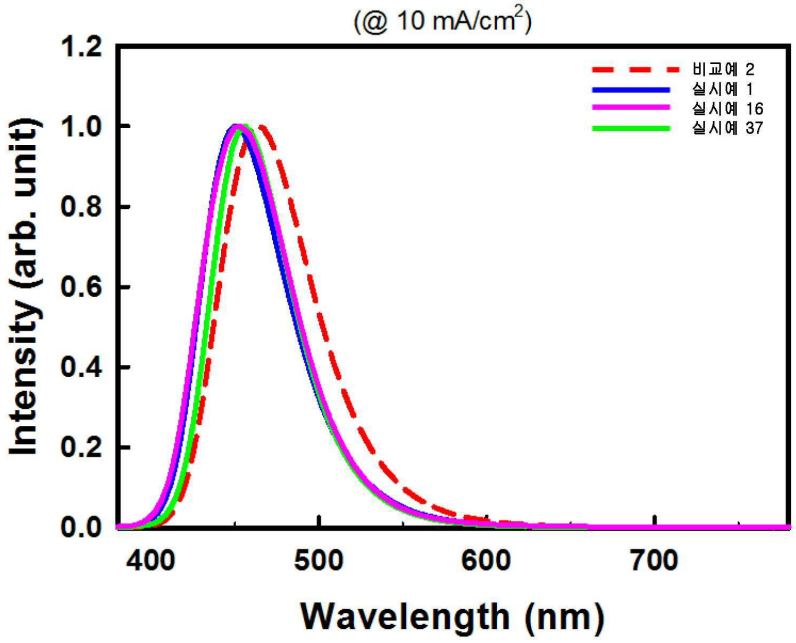
[0162] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서 본 명세서에 개시된 실시예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다.

도면

도면1



도면2


(@ 10 mA/cm2)
비교예 2
실시예 1
실시예 16
실시예 37
Intensity (arb. unit)
1.2
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
400
500
600
700
Wavelength (nm)