



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 등록특허공보(B1)**

(45) 공고일자 2014년11월19일  
 (11) 등록번호 10-1463705  
 (24) 등록일자 2014년11월13일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
 C07D 407/10 (2006.01) C07D 311/86 (2006.01)  
 C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2013-7013480  
 (22) 출원일자(국제) 2011년10월17일  
 심사청구일자 2013년05월27일  
 (85) 번역문제출일자 2013년05월27일  
 (65) 공개번호 10-2013-0089261  
 (43) 공개일자 2013년08월09일  
 (86) 국제출원번호 PCT/JP2011/074371  
 (87) 국제공개번호 WO 2012/060234  
 국제공개일자 2012년05월10일  
 (30) 우선권주장  
 JP-P-2010-247857 2010년11월04일 일본(JP)  
 (56) 선행기술조사문헌  
 WO2009024087 A1  
 WO2006114966 A1  
 Organic letters, 2001, Vol.3, No.15,  
 2337-2340

(73) 특허권자  
 캐논 가부시끼가이샤  
 일본 도쿄도 오오따꾸 시모마루쵸 3쵸메 30방 2고  
 (72) 발명자  
 호리우치 다카유키  
 일본 1468501 도쿄도 오오따꾸 시모마루쵸 3쵸메  
 30방 2고 캐논 가부시끼가이샤 내  
 가마다니 준  
 일본 1468501 도쿄도 오오따꾸 시모마루쵸 3쵸메  
 30방 2고 캐논 가부시끼가이샤 내  
 (뒷면에 계속)  
 (74) 대리인  
 장수길, 박충범

전체 청구항 수 : 총 9 항

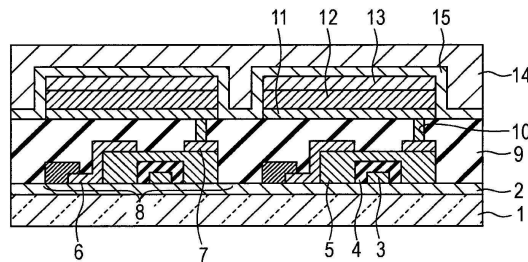
심사관 : 강신건

(54) 발명의 명칭 **크산톤 화합물, 이를 포함하는 유기 발광 디바이스, 디스플레이 장치, 화상 입력 장치 및 조명 장치**

**(57) 요약**

본 발명은 높은 발광 효율 및 낮은 구동 전압을 구현하는 유기 발광 디바이스에 관한 것이다. 본 발명의 유기 발광 디바이스는 화학식 [1]로 표시되는 크산톤 화합물을 함유한다.

**대표도** - 도1



(72) 발명자

**야마다 나오키**

일본 1468501 도쿄도 오오따꾸 시모마루쵸 3쵸메  
30방 2고 캐논 가부시끼가이샤 내

**기시노 겐고**

일본 1468501 도쿄도 오오따꾸 시모마루쵸 3쵸메  
30방 2고 캐논 가부시끼가이샤 내

**이카리 겐이치**

일본 1468501 도쿄도 오오따꾸 시모마루쵸 3쵸메  
30방 2고 캐논 가부시끼가이샤 내

**사이토오 아키히토**

일본 1468501 도쿄도 오오따꾸 시모마루쵸 3쵸메  
30방 2고 캐논 가부시끼가이샤 내

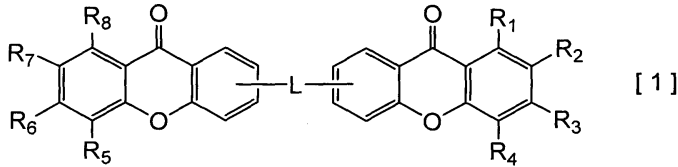
---

**특허청구의 범위**

**청구항 1**

하기 화학식 [1]로 표시되는 크산톤 화합물.

[화학식 1]



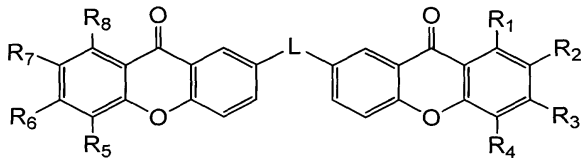
상기 식에서 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 탄소 원자 수 1 내지 4개인 알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 및 치환 또는 비치환된 디벤조티에닐기로부터 선택되고;

L은 치환 또는 비치환된 2가 벤젠, 치환 또는 비치환된 2가 비페닐, 치환 또는 비치환된 2가 터페닐, 치환 또는 비치환된 2가 나프탈렌, 치환 또는 비치환된 2가 페난트렌, 치환 또는 비치환된 2가 플루오렌, 치환 또는 비치환된 2가 트리페닐렌, 치환 또는 비치환된 2가 크리센, 치환 또는 비치환된 2가 디벤조푸란, 또는 치환 또는 비치환된 2가 디벤조티오펜을 나타내며, 여기서 벤젠, 비페닐, 터페닐, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오렌, 트리페닐렌, 크리센, 디벤조푸란, 및 디벤조티오펜은 탄소 원자 수가 1 내지 4개인 알킬기를 치환기로 가질 수 있다.

**청구항 2**

제1항에 있어서, 하기 화학식 [2]로 표시되는 크산톤 화합물.

[화학식 2]

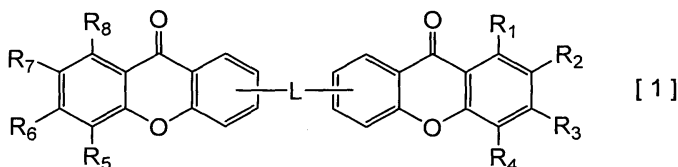


**청구항 3**

한 쌍의 전극; 및

상기 한 쌍의 전극 사이에 배치된 유기 화합물 층을 포함하고, 상기 유기 화합물 층은 하기 화학식 [1]로 표시되는 크산톤 화합물을 함유하는 유기 발광 디바이스.

[화학식 1]



상기 식에서 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 탄소 원자 수 1 내지 4개인 알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 및 치환 또는 비치환된 디벤조티에닐기로부터 선택되고;

L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 2가 벤젠, 치환 또는 비치환된 2가 비페닐, 치환 또는 비치환된 2가 터페닐, 치환 또는 비치환된 2가 나프탈렌, 치환 또는 비치환된 2가 페난트렌, 치환 또는 비치환된 2가 플루오렌, 치환 또는 비치환된 2가 트리페닐렌, 치환 또는 비치환된 2가 크리센, 치환 또는 비치환된 2가 디벤조푸란, 또는 치환 또는 비치환된 2가 디벤조티오펜을 나타내며, 여기서 벤젠, 비페닐, 터페닐, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오렌, 트리페닐렌, 크리센, 디벤조푸란, 및 디벤조티오펜은 탄소 원자 수가 1 내지 4개인 알킬기를 치환기로 가질 수 있다.

**청구항 4**

제3항에 있어서,

상기 유기 화합물 층은 발광층을 가지며, 상기 발광층은 상기 크산톤 화합물을 함유하는 것인 유기 발광 디바이스.

**청구항 5**

제3항에 있어서, 상기 유기 화합물 층이 발광층, 상기 발광층과 접촉하는 전자 수송층, 및 상기 전극들 중 하나로부터 공급된 전자를 상기 전자 수송층에 수송하는 전자 주입층을 포함하고, 상기 전자 수송층 및 전자 주입층 중 하나 이상이 상기 크산톤 화합물을 함유하는 것인 유기 발광 디바이스.

**청구항 6**

제4항에 있어서, 상기 발광층이 호스트 물질 및 게스트 물질을 함유하고, 상기 호스트 물질은 상기 크산톤 화합물이며, 상기 게스트 물질은 이리듐 착체인 유기 발광 디바이스.

**청구항 7**

각각 제3항 내지 제6항 중 어느 한 항에 따른 유기 발광 디바이스 및 상기 유기 발광 디바이스에 결합된 스위칭 소자를 포함하는 복수의 화소를 포함하는 디스플레이 장치.

**청구항 8**

화상을 출력하도록 구성된 디스플레이 유닛; 및

화상 데이터를 입력하도록 구성된 입력 유닛을 포함하며, 상기 디스플레이 유닛은 복수의 화소를 포함하고, 각각의 화소는 제3항 내지 제6항 중 어느 한 항에 따른 유기 발광 디바이스 및 상기 유기 발광 디바이스에 결합된 스위칭 소자를 포함하는 것인 화상 입력 장치.

**청구항 9**

제3항 내지 제6항 중 어느 한 항에 따른 유기 발광 디바이스를 포함하는 조명 장치.

**명세서**

**기술분야**

[0001] 본 발명은 크산톤 화합물 및 상기 크산톤 화합물을 포함하는 유기 발광 디바이스에 관한 것이다.

**배경기술**

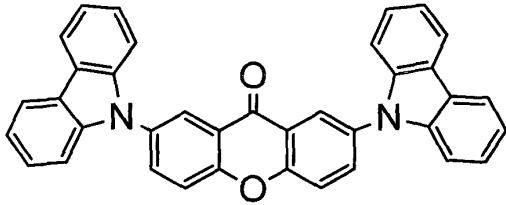
[0002] 유기 발광 디바이스는 애노드, 캐소드, 및 상기 애노드와 캐소드 사이에 개재된 유기 화합물 층을 포함하는 디바이스이다. 유기 발광 디바이스의 각 전극으로부터 주입된 정공 및 전자가 유기 화합물 층에서 재조합되어 엑시톤을 발생하고 엑시톤이 그 기저 상태로 돌아갈때 빛을 방출한다. 또한, 유기 발광 디바이스는 유기 전계발광 디바이스 또는 유기 EL 디바이스로도 명명된다. 최근에 유기 발광 디바이스 분야에서는 현저한 진보가 있었다. 현재 유기 발광 디바이스는 낮은 구동 전압, 다양한 발광 파장, 신속한 응답, 작은 두께, 및 경량성을 특징으로 한다.

[0003] 인광 발광 디바이스는 삼중항 엑시톤이 발광에 기여하는 인광 물질을 함유하는 유기 화합물 층을 포함하는 유형의 디바이스이다. 고성능 인광 발광 디바이스를 제공하기 위해서 신규 유기 화합물의 형성이 활발하게 추구되

고 있다.

[0004] 예를 들면, 특허 문헌 1은 카르바조일기를 갖는 크산톤 유도체인 화합물 1을 개시하고 있다. 화합물 1은 인광 발광 디바이스의 청색 또는 녹색 발광층의 호스트 물질로서 사용된다.

[0005] [화합물 1]



[0006]

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0007] (특허문헌 0001) 국제 특허 공개 공보 제2006/114966호

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

[0008] 특허 문헌 1에 개시된 화합물의 최저 여기 삼중항(T<sub>1</sub>) 에너지가 낮기 때문에, 이 물질은 청색 또는 녹색 인광 발광 디바이스의 발광층의 호스트 물질에, 또는 발광층에 인접한 캐리어 수송층을 형성하기 위한 물질로서 충분하지 못하다.

[0009] 발광층의 호스트 물질의 T<sub>1</sub> 에너지가 낮을 때, 그 에너지는 발광층의 게스트 물질로 충분히 이동하지 않으므로 충분히 높은 발광을 달성하는 일이 드물다.

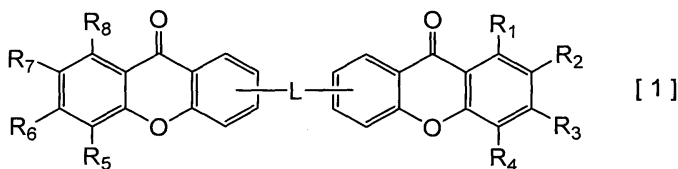
[0010] 발광층에 인접한 캐리어 수송층의 T<sub>1</sub> 에너지가 낮을 때, 발광층으로부터 인접한 층으로의 에너지 이동이 억제되는 일이 드물다.

[0011] 따라서, 높은 T<sub>1</sub> 에너지 및 우수한 전자 주입성을 갖는 크산톤 화합물을 제공하는 것이 유리하다. 크산톤 화합물을 함유하고 높은 발광 효율 및 낮은 구동 전압을 갖는 유기 발광 디바이스도 제공된다.

**과제의 해결 수단**

[0012] 본 발명은 하기 화학식 [1]로 표시되는 크산톤 화합물을 제공한다:

[0013] [화학식 1]



[0014]

[0015] 상기 식에서 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 탄소 원자 수 1 내지 4개인 알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 및 치환 또는 비치환된 디벤조티에닐기로부터 선택되고;

[0016] L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 2가 벤젠, 치환 또는 비치환된 2가 비페닐, 치환 또는 비치환된 2가 터페닐, 치환 또는 비치환된 2가 나프탈렌, 치환 또는 비치환된 2가 페난트렌, 치환 또는 비치환된 2가 플루오

렌, 치환 또는 비치환된 2가 트리페닐렌, 치환 또는 비치환된 2가 크리스렌, 치환 또는 비치환된 2가 디벤조푸란, 또는 치환 또는 비치환된 2가 디벤조티오펜을 나타내며, 여기서 벤젠, 비페닐, 터페닐, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오렌, 트리페닐렌, 크리스렌, 디벤조푸란, 및 디벤조티오펜은 탄소 원자 수가 1 내지 4개인 알킬기를 치환기로 가질 수 있다.

**발명의 효과**

[0017] 본 발명에 의하면, 높은 T<sub>1</sub> 에너지 및 우수한 전자 주입성을 갖는 크산톤 화합물이 제공될 수 있다. 또한, 상기 크산톤 화합물을 함유하고 높은 발광 효율 및 낮은 구동 전압을 갖는 유기 발광 디바이스가 제공될 수 있다.

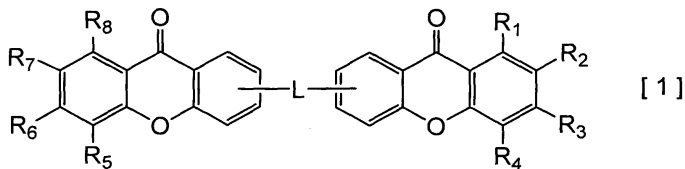
**도면의 간단한 설명**

[0018] 도 1은 유기 발광 디바이스 및 상기 유기 발광 디바이스에 결합된 스위칭 소자의 횡단면 개요도이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0019] 본 발명의 한 실시양태는 하기 화학식 [1]로 표시되는 크산톤 화합물을 제공한다:

[0020] [화학식 1]



[0021]

[0022] 상기 식에서 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 탄소 원자 수 1 내지 4개인 알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 크리스레닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 및 치환 또는 비치환된 디벤조티에닐기로부터 선택된다.

[0023] 상기 벤젠, 비페닐, 터페닐, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오렌, 트리페닐렌, 크리스렌, 디벤조푸란, 및 디벤조티오펜은 탄소 원자 수가 1 내지 4개인 알킬기를 치환기로 가질 수 있다.

[0024] 탄소 원자 수가 1 내지 4개인 알킬기의 예로서는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, sec-부틸기, 이소부틸기, 및 tert-부틸기를 들 수 있다.

[0025] 상기 페닐기, 나프틸기, 페난트릴기, 플루오레닐기, 트리페닐레닐기, 크리스레닐기, 디벤조푸라닐기, 및 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub>로 표시되는 디벤조티에닐기는 각각 치환기를 더 포함할 수 있다.

[0026] 이와 같은 치환기의 예로서는, 탄소 원자 수가 1 내지 4개인 알킬기, 아릴기, 예컨대 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 페난트릴기, 플루오레닐기, 크리스레닐기, 및 트리페닐레닐기, 디벤조푸라닐기, 및 디벤조티에닐기를 들 수 있다.

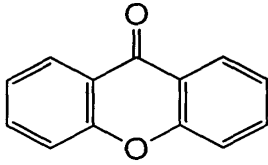
[0027] L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 2가 벤젠, 치환 또는 비치환된 2가 비페닐, 치환 또는 비치환된 2가 터페닐, 치환 또는 비치환된 2가 나프탈렌, 치환 또는 비치환된 2가 페난트렌, 치환 또는 비치환된 2가 플루오렌, 치환 또는 비치환된 2가 트리페닐렌, 치환 또는 비치환된 2가 크리스렌, 치환 또는 비치환된 2가 디벤조푸란, 또는 치환 또는 비치환된 2가 디벤조티오펜을 나타낸다.

[0028] L이 단일 결합을 나타낼 경우에, 화학식 [1]로 표시되는 크산톤 화합물은 두 크산톤 골격이 서로 직접 결합된 구조를 갖는다. L이 2가 연결기를 나타낼 경우에, 화학식 [1]로 표시되는 크산톤 화합물은 두 크산톤 골격이 연결기를 통해서 서로 결합된 구조를 갖는다. L은 탄소 원자 수가 1 내지 4개인 알킬기를 치환기로 포함할 수 있다.

**[0029] 크산톤 화합물의 성질**

[0030] 이와 같은 실시양태의 크산톤 화합물은 하기 구조식 A로 표시되는 2개의 크산톤 골격을 가진 화합물이다. 여기서, 구조식 A로 표시되는 구조를 "크산톤 골격"으로 언급한다.

[0031] [구조식 A]



[0032]

[0033] 크산톤 골격은 카르보닐기를 갖기 때문에, 크산톤 골격은 높은 전자 친화성을 가지므로 상기 화합물은 높은 전자 주입성을 갖는다.

[0034] 분자 적층이 일어날 가능성이 있기 때문에, 전자는 고체 상태에서 분자들 사이를 쉽게 이동한다. 다시 말해서, 전자 이동성이 높다.

[0035] 크산톤 화합물은 2개의 크산톤 골격을 갖기 때문에, 크산톤 화합물은 단 하나의 크산톤 골격만이 포함되는 경우보다 더 높은 비정질성을 갖는다. 비정질성이란 고체 상태에서 화합물이 그 화합물이 고온 조건하에 있는 경우조차도 결정화없이 비정질 상태를 유지하는 특성을 말한다.

[0036] 높은 비정질성을 갖는 화합물을 유기 발광 디바이스의 유기 화합물층에 사용할 수 있다.

[0037] 이러한 실시양태의 크산톤 화합물은 높은 최저 여기 삼중항( $T_1$ ) 에너지를 갖는다. 구조식 A로 표시되는 크산톤 골격 자체의  $T_1$  에너지를 측정하여 이에 대한 설명을 제공하였다.

[0038] 크산톤 골격의 묽은 톨루엔 용액에 대해 77K의 조건하에 인광 스펙트럼 측정을 실시하고  $T_1$  에너지를 스펙트럼의 0-0 밴드로부터 추정하였다.

[0039] 그 결과는 구조식 A로 표시되는 크산톤 골격의  $T_1$  에너지가 3.02 eV 또는 파장 기준으로 410 nm라는 것을 보여 주었다. 이와 같은  $T_1$  에너지는 청색 파장 영역(440 nm 이상 480 nm 이하)보다 더 높은 것이다.

[0040] 크산톤 화합물은 치환기를 가짐으로써 개선된 비정질성을 가질 수 있다. 치환기를 화학식 [1]에서  $R_1$  내지  $R_6$  위치에 도입할 수 있다.

[0041] 이러한 실시양태의 크산톤 화합물은 치환기를 도입할 경우 다른 용매중에서 개선된 용해도를 나타낸다. 또한, 치환기의 도입은 진공 증착 수행시 화합물의 열분해를 억제한다.

[0042] 치환기는 화합물의  $T_1$  에너지를 전체적으로 저하시키지 않는 치환기일 수 있다.

[0043] 치환기는 높은 비정질성, 용해도, 및  $T_1$  저하없는 증착 용이성을 제공한다.

[0044] 알킬기를 크산톤 화합물에 대한 치환기로서 도입할 경우에, 알킬기는 1 내지 4개의 탄소 원자를 가질 수 있다. 그 이유는 5개 이상의 탄소 원자를 갖는 화합물은  $T_1$  에너지에 미치는 영향이 작다 하더라도 화합물을 진공 증착에 부적합하게 만들기 때문이다.

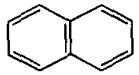
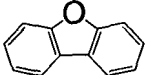
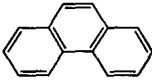
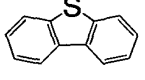
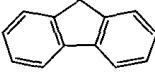
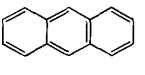
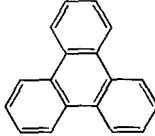
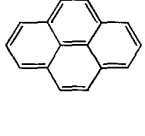
[0045] 아릴기를 크산톤 화합물에 대한 치환기로서 도입할 경우에, 아릴기는 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오렌, 트리페닐렌, 크리센, 피렌, 디벤조푸란, 및 디벤조티오펜으로부터 선택될 수 있다. 특히, 아릴기는 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오렌, 트리페닐렌 및 크리센으로부터 선택되는 것이 바람직하다.

[0046] 이러한 아릴기들은 높은  $T_1$  에너지를 가지므로, 크산톤 화합물의  $T_1$  에너지를 저하시키지 않는다. 이러한 치환기 및 대조군, 즉, 안트라센 및 피렌의  $T_1$  에너지를 파장 기준으로 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0047]

	구조식	파장 기준 $T_1$ 에너지		구조식	파장 기준 $T_1$ 에너지
벤젠		339 nm	크리센		500 nm

나프탈렌		472 nm	디벤조푸란		417 nm
페난트렌		459 nm	디벤조티오펜		415 nm
플루오렌		422 nm	안트라센		672 nm
트리페닐렌		427 nm	피렌		589 nm

[0048]

[0049] 크산톤 화합물은 화학식 [1]에서 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub> 중에서 R<sub>2</sub> 내지 R<sub>7</sub> 중의 하나 이상에 도입된 치환기를 가질 수 있다. 치환기는 R<sub>2</sub> 와 R<sub>7</sub>에 도입되는 것이 바람직하다.

[0050] 화학식 [1]에서 R<sub>2</sub> 및 R<sub>7</sub>에 결합된 탄소 원자는 친전자 반응하기가 쉬우므로 치환기가 R<sub>2</sub> 및 R<sub>7</sub>에 도입될 경우 상기 분자의 전체로서의 안정성이 개선된다.

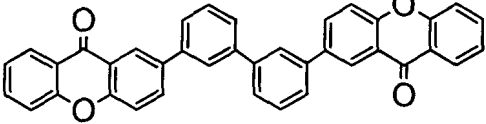
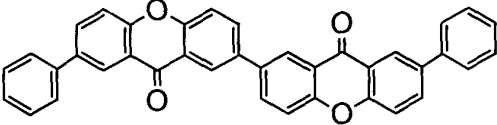
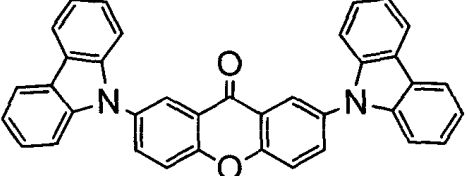
[0051] 화학식 [1]에서 R<sub>2</sub> 및 R<sub>7</sub>에 결합된 탄소 원자가 친전자 반응하기 쉬운 이유는 이 탄소 원자들이 크산톤 골격에서 에테르 결합을 형성하는 산소 원자들에 결합된 탄소 원자에 대하여 파라 위치에 존재하기 때문이다.

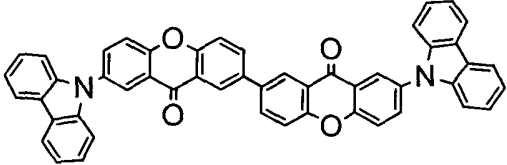
[0052] B3LYP/6-31G\* 레벨의 분자 궤도 계산을 밀도 범함수 이론에 근거해서 수행함으로써 특히 문헌 1에 개시된 화합물 1 및 카르바졸릴기를 갖는 크산톤의 이합체인 화합물 2의 T<sub>1</sub> 에너지를 측정하였다.

[0053] 또한, 이러한 실시양태의 크산톤 화합물의 T<sub>1</sub> 에너지를 계산하고 묽은 톨루엔 용액중에서 인광 스펙트럼으로 측정함으로써 얻은 결과와 비교하였다. 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

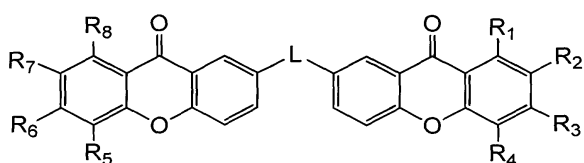
표 2

[0054]

	구조식	과장 기준 T <sub>1</sub> 에너지 (계산값)	과장 기준 T <sub>1</sub> 에너지 (실측값)
실시예 화합물 A-7		411 nm	443 nm
실시예 화합물 C-1		427 nm	446 nm
화합물 1		486 nm	-

<p>화합물 2</p>		<p>470 nm</p>	<p>-</p>
--------------	---	---------------	----------

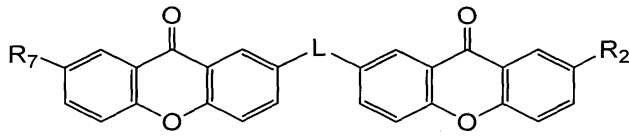
- [0055] 본 발명의 2가지 유형의 크산톤 화합물의 T<sub>1</sub> 에너지의 계산값과 관찰값 사이의 차이는 32 nm 및 19 nm였다.
- [0056] 화합물 1 및 화합물 2에 대한 계산값과 관찰값 사이의 차이는 상기 결과에 근거하여 약 20 내지 30 nm인 것으로 추정할 수도 있다. 따라서, 추정된 관찰값은 약 506 nm 내지 516 nm이다. 이 값은 크산톤 골격 자체의 T<sub>1</sub> 에너지보다 작다.
- [0057] 이는 화합물 1 및 화합물 2에 함유된 카르바졸릴기가 크산톤 골격의 T<sub>1</sub> 에너지에 영향을 미치지 때문에 상기 화합물들의 전체로서의 분자의 T<sub>1</sub> 에너지가 작다는 것을 보여준다.
- [0058] 이에 대한 이유를 조사하기 위해서, 분자 궤도 계산에 의해 전자 분포를 연구하였다. 화합물 1 및 화합물 2에 의하면, 최고 점유 분자 궤도(HOMO)는 N-카르바졸릴기상에 편재화되고, 최저 비점유 분자 궤도(LUMO)는 크산톤 골격상에 편재화된다.
- [0059] 결과적으로, 화합물 1 및 화합물 2가 전자 이동(CT) 여기 상태로 들어가므로, 여기된 단일항(S<sub>1</sub>) 및 T<sub>1</sub> 에너지가 현저하게 감소한다.
- [0060] 이것은 크산톤 골격의 높은 T<sub>1</sub> 에너지를 유지하기 위해서, 카르바졸릴기와 같이 높은 HOMO 준위 에너지를 갖는 치환기의 도입을 피해야 한다는 것을 보여준다.
- [0061] 또한, 전자 공여 치환기, 예컨대 N-카르바졸릴기 또는 아미노기의 도입은 크산톤 골격의 전자 수용성 감소의 관점에서 바람직하지 못하다.
- [0062] 이러한 실시양태의 크산톤 화합물은 연결기 L을 갖는다. 연결기 L 뿐만 아니라 그 치환기는 상기 분자 전체로서의 T<sub>1</sub> 에너지에 영향을 미친다.
- [0063] 따라서, 화학식 [1]에서 L은 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌, 플루오렌, 트리페닐렌, 크리센, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 비페닐, 또는 터페닐일 수 있다.
- [0064] 치환기로서 사용된 아릴기의 예로 언급한 치환기 외에도, 비페닐 또는 터페닐을 연결기로서 사용할 수 있다. 그 이유는 비페닐의 T<sub>1</sub>이 445 nm이고, o-터페닐의 T<sub>1</sub>이 464 nm이며, m-터페닐의 T<sub>1</sub>이 445 nm이고, p-터페닐의 T<sub>1</sub>이 491 nm로서 충분히 높기 때문이다.
- [0065] 화학식 [1]에서 L은 탄소 원자 수가 1 내지 4개인 알킬기를 치환기로 가질 수 있다. L이 알킬기를 치환기로 가질 경우에, 분자 전체로서의 열안정성 및 비정질성이 개선된다.
- [0066] 화학식 [1]에서 L에는 아릴기와 같이 T<sub>1</sub> 에너지에 영향을 미치는 치환기가 존재하지 않을 수 있다.
- [0067] 화합물의 안정성은 화학식 [1]에서 L이 연결되는 위치에 따라 개선될 수 있다.
- [0068] 구체적으로, 화학식 [1]에서 L은 하기 화학식 [2]에 나타난 위치에 연결될 수 있다.
- [0069] [화학식 2]



- [0070]
- [0071] 화학식 [2]에서 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub> 및 L은 화학식 [1]에서 정의한 것과 동일하다. 화합물에서 안정성을 개선하기 위해,

치환기를 R<sub>2</sub> 및 R<sub>7</sub>에 도입할 수 있다. 따라서, 화학식 [3]으로 표시되는 크산톤 화합물이 특히 바람직하다.

[0072] [화학식 3]



[0073]

[0074] 화학식 [3]에서 R<sub>2</sub> 및 R<sub>7</sub>은, 이들이 수소 원자가 아니라는 것을 제외하고는, 화학식 [1]에서 정의한 것과 동일하다. 화학식 [3]에서 L은 화학식 [1]에서 정의한 것과 동일하다.

[0075] 크산톤 화합물은 높은 T<sub>1</sub> 및 전자 이동성을 가지므로, 유기 발광 디바이스의 유기 화합물 층에 사용될 수 있다.

[0076] 구체적으로, 크산톤 화합물은 발광층의 호스트 물질로서, 또는 발광층의 캐소드측에 인접한 층에 대한 물질로서 사용될 수 있다.

[0077] 호스트 물질은 발광층을 구성하는 물질들 중에서 가장 큰 중량비를 갖는 물질이다. 게스트 물질은 발광층을 구성하는 물질 중에서 호스트 물질보다 작은 중량비를 갖고 주요 발광에 대한 책임이 있는 물질이다. 보조 물질은 발광층을 구성하는 물질 중에서 호스트 물질보다 작은 중량비를 갖는 물질이며 게스트 물질의 발광을 돕는다. 보조 물질은 호스트 물질 2로도 언급된다.

[0078] 크산톤 화합물은 청색 또는 녹색 인광 발광 디바이스의 발광층의 호스트 물질로서 사용될 수 있다.

[0079] 여기서, 청색은 발광 파장이 440 nm 이상 480 nm 이하의 범위에 존재함을 의미하고, 녹색은 발광 파장이 500 nm 이상 530 nm 이하의 범위에 존재함을 의미한다.

[0080] 크산톤 화합물은 높은 전자 이동성을 갖기 때문에, 크산톤 화합물은 청색 또는 녹색 인광 발광 디바이스의 전자 수송층 또는 전자 주입층에 사용될 수 있다.

[0081] 전자 수송층은 발광층에 인접한 층이며 유기 발광 디바이스의 유기 화합물 층들 사이에서 전자를 수송한다. 또한, 전자 수송층은 유기 발광 디바이스의 유기 화합물 층들 사이에서 발광층의 캐소드 측에 인접한 층으로 언급된다.

[0082] 상기 층은 발광층로부터 인접한 층으로의 에너지 이동을 방지하기 위해 발광 물질보다 높은 T<sub>1</sub> 에너지를 가질 수 있다.

[0083] 전자 주입층은 전극으로부터 전자를 수용하여 그 전자를 전자 수송층으로 수송하는 층이다.

[0084] 또한 전자 주입층은 캐소드와 접촉하고 전자 수송층과 캐소드 사이에 배치된 층으로 언급될 수도 있다.

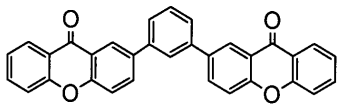
[0085] 상기 층은 높은 전자 주입능을 가지므로, 깊은 LUMO 준위를 갖는 화합물이 상기 층에 사용될 수 있다.

[0086] "깊은 LUMO 또는 HOMO 준위"라는 표현은 당해 준위가 진공도로부터 멀리 존재함을 의미한다. LUMO 준위가 낮다고 함은 당해 준위가 진공 준위에 가깝다는 것을 의미한다.

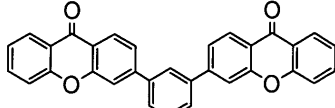
[0087] 본 발명의 크산톤 화합물은 낮은 LUMO 준위를 갖기 때문에, 상기 크산톤 화합물은 전자 주입 물질, 전자 수송 물질, 또는 정공 블로킹층 또는 발광층의 호스트 물질로서 사용될 수 있으며, 이로써 디바이스의 구동 전압을 저하시킬 수 있다.

[0088] 그 이유는 LUMO 준위가 낮을 때 발광층의 캐소드측에 인접한 전자 수송층 또는 정공 블로킹층으로부터의 전자 주입 배리어가 낮아지기 때문이다.

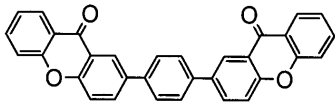
[0089] 본 발명의 크산톤 화합물의 구조식의 구체적인 예들을 이하에 제시하였다. 본 발명이 이러한 실시예 화합물들에 제한되는 것은 아니다.



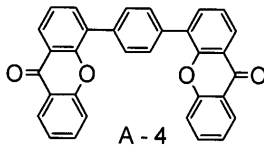
A - 1



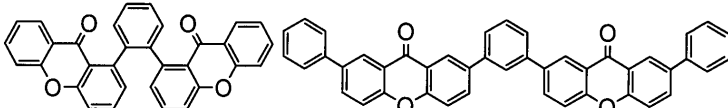
A - 2



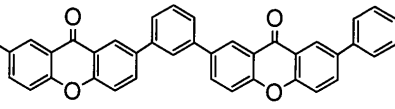
A - 3



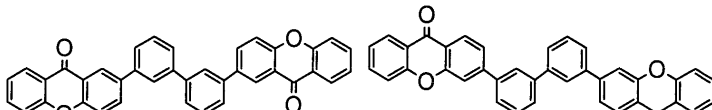
A - 4



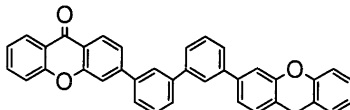
A - 5



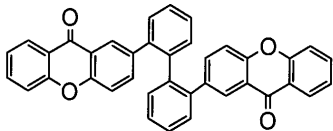
A - 6



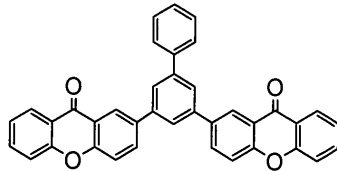
A - 7



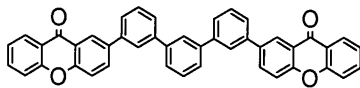
A - 8



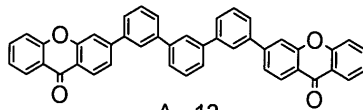
A - 9



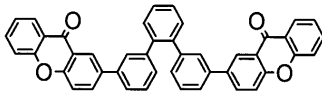
A - 10



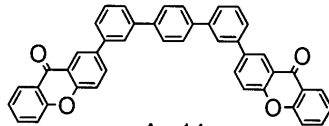
A - 11



A - 12

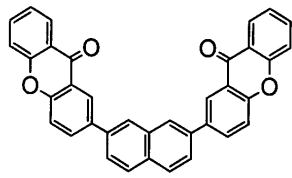


A - 13

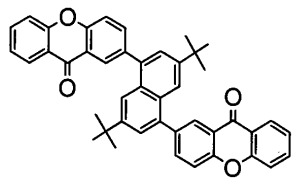


A - 14

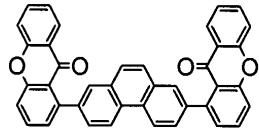
[0090]



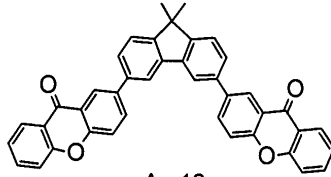
A - 15



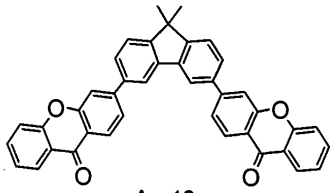
A - 16



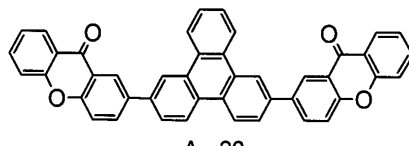
A - 17



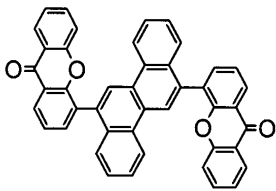
A - 18



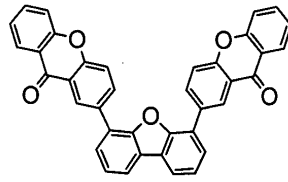
A - 19



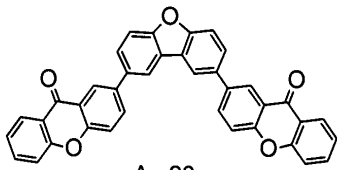
A - 20



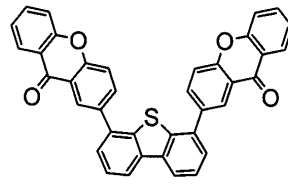
A - 21



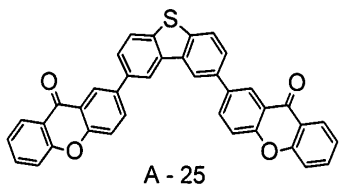
A - 22



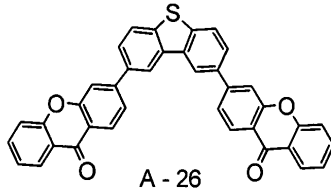
A - 23



A - 24

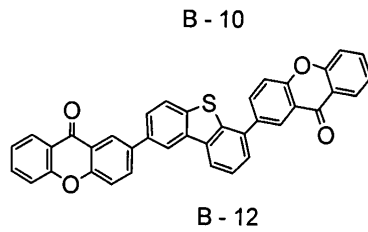
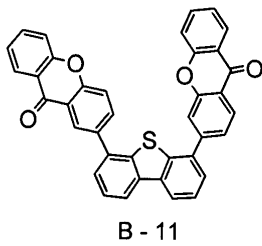
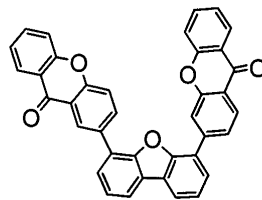
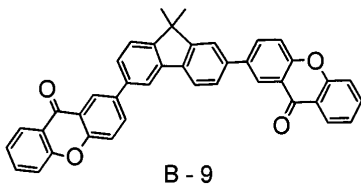
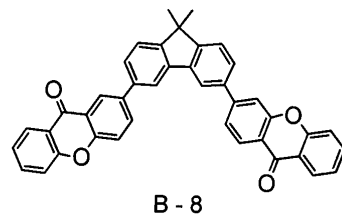
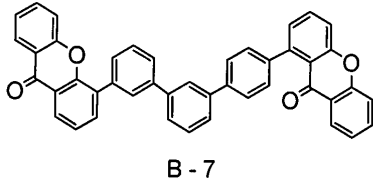
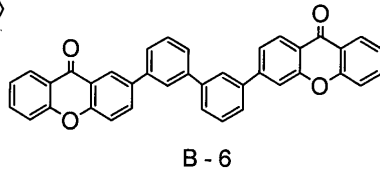
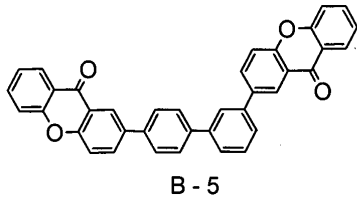
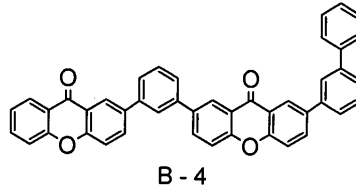
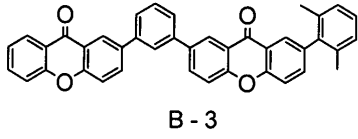
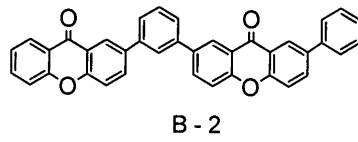
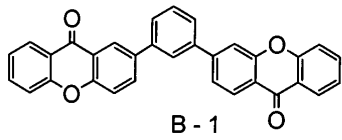


A - 25

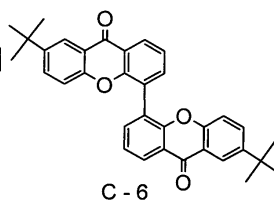
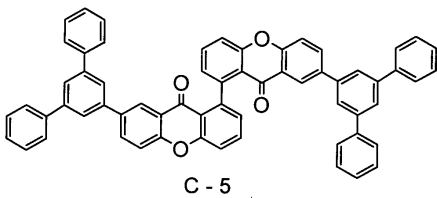
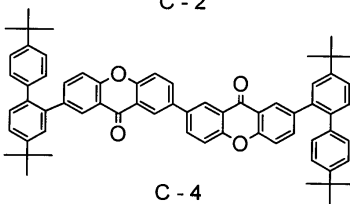
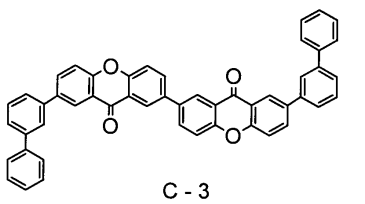
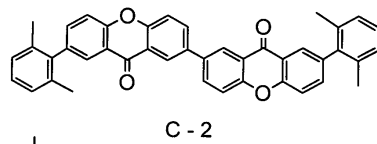
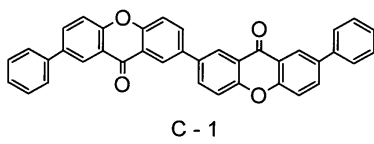


A - 26

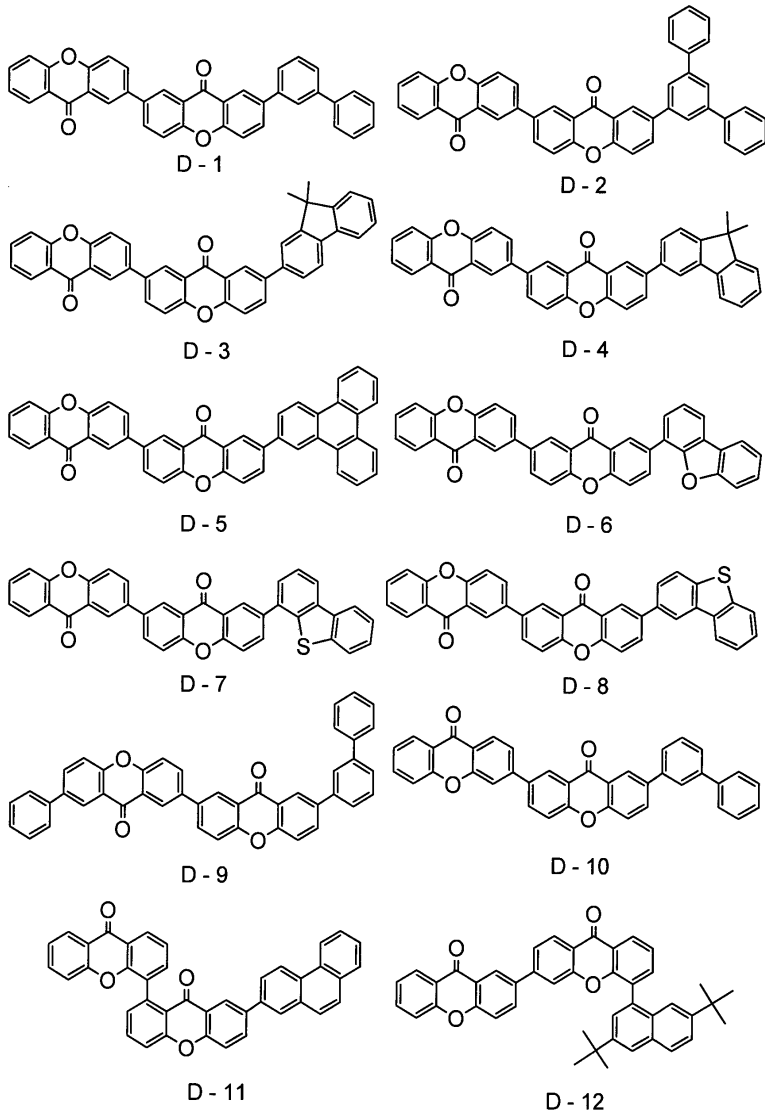
[0091]



[0092]



[0093]



[0094]

[0095]

**실시에 화합물의 특성**

[0096]

그룹 A의 실시예 화합물들은 방향족 고리 치환기를 나타내는 L을 가지며 분자내에 대칭 평면 또는 축을 갖는다. 2개의 크산톤 골격은 유사한 전자 상태를 가지며, 전자 분포에 편향이 없으므로, 안정하다.

[0097]

그룹 B의 실시예 화합물들은 방향족 고리 치환기를 나타내는 L을 가지며 분자내에 대칭 평면 또는 축을 갖지 않는다. 따라서, 비정질 상태에서 높은 안정성이 달성된다. 또한, 치환기의 위치와 유형을 변화시킴으로써 물리적 특성값을 미세하게 조정할 수 있다.

[0098]

그룹 C의 실시예 화합물들은 단일 결합을 나타내는 L을 가지며 분자내에 대칭 평면 또는 축을 갖는다. 전자 분포는 편향되지 않으므로 화합물들은 안정하다. 2개의 크산톤 골격이 서로 직접 결합되어 있으므로, 전자 수용성이 더욱 증진되고, 이는 유기 발광 디바이스의 전압 저하에 효과적으로 기여한다.

[0099]

그룹 D의 실시예 화합물들은 단일 결합을 나타내는 L을 가지며 분자내에 대칭 평면 또는 축을 갖지 않는다. 따라서, 이 화합물들은 전압을 저하시키고 비정질성을 개선하는데 효과적이다. 치환기의 위치 및 유형을 변화시킴으로써 물리적 특성값을 미세하게 조정할 수 있다.

[0100]

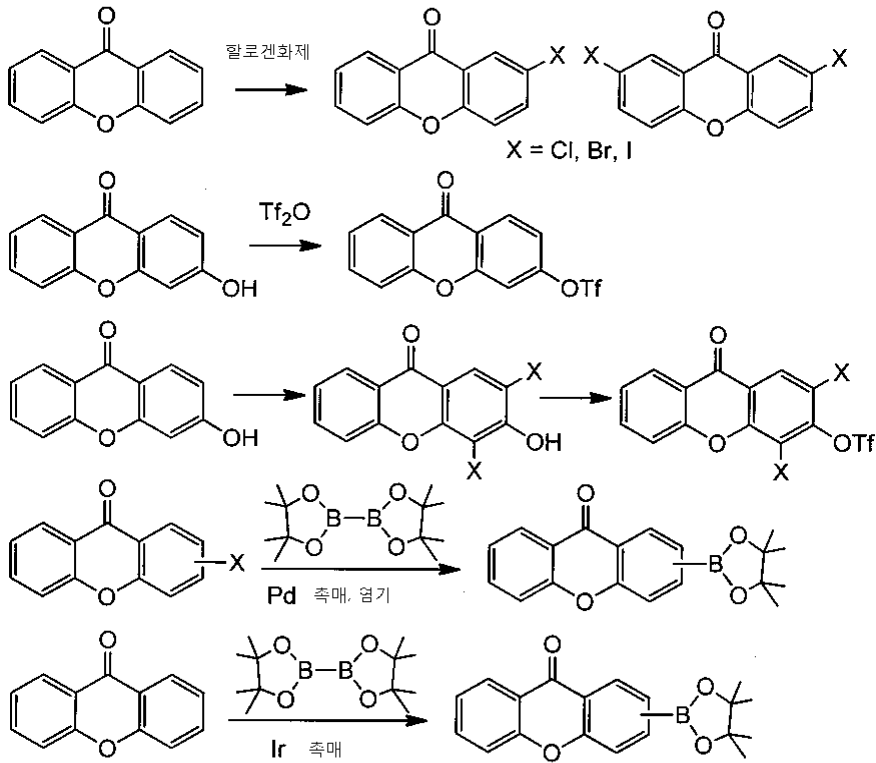
**합성 경로의 설명**

[0101]

본 발명의 유기 화합물에 대한 합성 경로의 일례를 이하에 설명한다. 반응식은 다음과 같다.

[0102]

크산톤 및 그 유도체는 널리 시판되고 있다. 그의 할라이드, 트리플레이트, 또는 보론산 에스테르를 시판 제품으로부터 용이하게 합성할 수 있다.

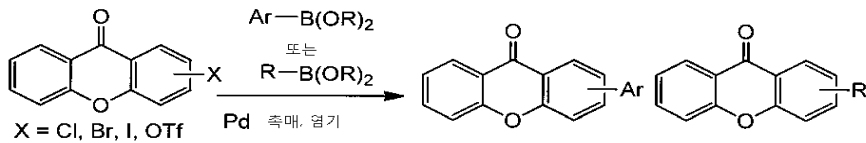


[0103]

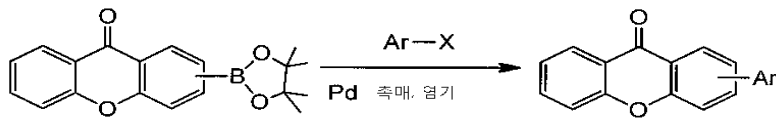
[0104]

이어서, 할라이드, 트리플레이트 및 보론산 에스테르를 스즈키(Suzuki) 커플링 반응에 사용하여 알킬기 및 방향족 고리 기를 크산톤 골격내로 도입한다.

[0105]



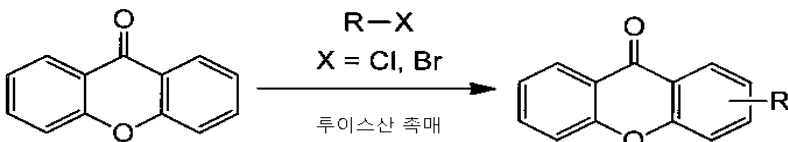
[0106]



[0107]

다른 예로서, 프리델-크라프트(Friedel-Crafts) 반응을 사용해서 크산톤 골격내로 알킬기를 도입할 수 있다.

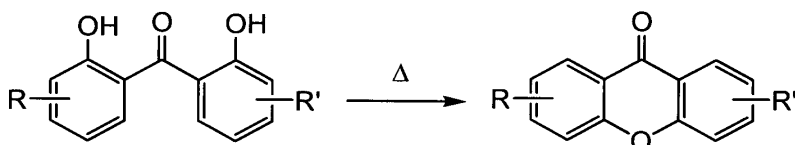
[0108]



[0109]

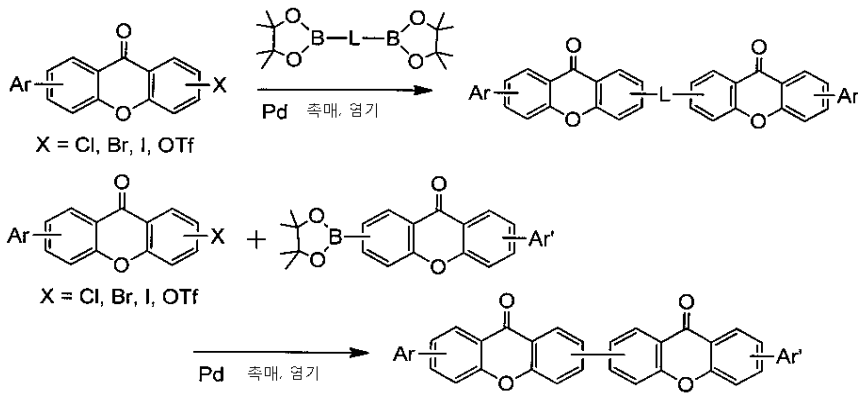
그러나, 다른 예로서 반응성 작용기 또는 방향족 고리 기를 이미 갖고 있는 디히드록시벤조페논 유도체를 사용해서 탈수 축합 반응을 수행함으로써 크산톤 골격을 차후에 구성할 수도 있다.

[0110]



[0111]

전술한 바와 같은 기본적인 반응들을 다양한 방식으로 서로 조합하여 화학식 [1]에서 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub> 중 소정의 위치 내로 도입된 소정의 치환기들을 갖는 크산톤 화합물을 합성한다.



[0112]

[0113]

**본 발명의 실시양태에 의한 유기 발광 디바이스의 특성**

[0114]

본 발명의 한 실시양태에 의한 유기 발광 디바이스는 한 쌍의 전극인 애노드 및 캐소드, 및 상기 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기 화합물 층들을 포함한다. 유기 화합물 층들 중에서, 인광 물질을 함유하는 층이 발광층이다.

[0115]

이러한 실시양태의 유기 발광 디바이스에 의하면, 화학식 [1]로 표시되는 크산톤 화합물이 유기 화합물 층에 함유된다.

[0116]

이러한 실시양태의 유기 발광 디바이스는 하나 이상의 유기 화합물 층들을 포함할 수 있다.

[0117]

단 하나의 유기 화합물 층이 포함될 경우에, 유기 층은 발광층이다.

[0118]

2 이상의 유기 화합물 층들이 포함될 경우에, 그 층들은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 정공 블로킹층, 전자 수송층, 전자 주입층, 엑시톤 블로킹층 등으로부터 선택된다. 2 이상의 층들이 상기 층들로부터 선택되어 함께 사용될 수 있다.

[0119]

이러한 실시양태에 의한 유기 발광 디바이스의 형태가 여기에 제한되는 것은 아니다. 예를 들면, 다양한 다른 층 형태를 사용할 수 있으며, 예를 들면 전극과 유기 화합물 층 사이의 계면에 절연층이 제공될 수 있고, 접촉층 또는 계면층이 제공될 수 있으며, 전자 수송층 또는 정공 수송층이 이온화 퍼텐셜이 상이한 두 층으로 구성될 수도 있다.

[0120]

상기 디바이스는 기재측 전극으로부터 빛을 방출하는 상부 방출형 또는 기재 반대 측으로부터 빛을 방출하는 하부 방출형일 수 있다. 상기 디바이스는 양측으로부터 빛을 방출하는 유형일 수도 있다.

[0121]

이러한 실시양태에 의한 유기 발광 디바이스는 화학식 [1]로 표시되는 크산톤 화합물을 발광층의 호스트 물질로서 또는 전자 수송층용 물질로서 함유할 수 있다.

[0122]

크산톤 화합물을 전자 수송층에 사용할 경우, 크산톤 화합물은 단독으로 또는 다른 화합물과 함께 사용될 수 있다.

[0123]

발광층내 호스트 물질의 농도는 발광층의 총 중량에 대하여 50 중량% 이상 99.9 중량% 이하, 바람직하게는 80 중량% 이상 99.9 중량% 이하이다. 농도 소멸을 방지하기 위해서, 게스트 물질의 농도는 0.01 중량% 이상 10 중량% 이하인 것이 바람직하다.

[0124]

게스트 물질은 호스트 물질로 이루어진 전체 층에 균일하게 분포되거나, 농도 기울기에 의해서 상기 층에 함유되거나, 또는 상기 층의 특정 부분에 함유됨으로써 호스트 물질만이 함유되는 부분을 생성할 수 있다.

[0125]

이러한 실시양태의 유기 발광 디바이스에서, 화학식 [1]로 표시되는 크산톤 화합물은 발광층의 보조 물질로서 함유될 수 있다. 이러한 경우에 발광층의 호스트 물질은 높은 정공 수송성을 갖는 화합물일 수 있다.

[0126]

그 이유는 본 발명의 크산톤 화합물이 높은 전자 수송성을 갖는 화합물이기 때문이다.

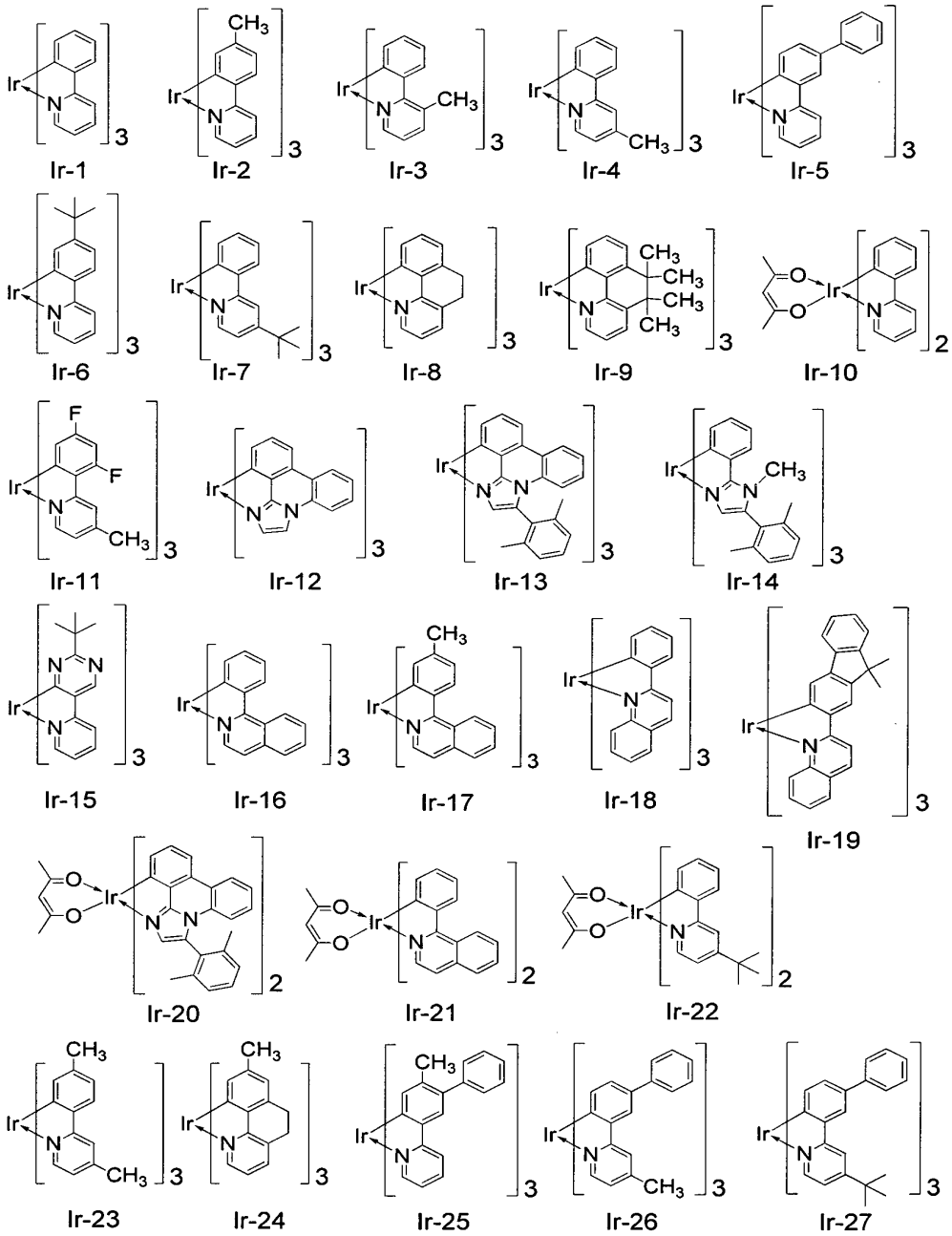
[0127]

높은 정공 수송성을 갖는 화합물 및 높은 전자 수송성을 갖는 화합물을 병용할 경우에, 발광층은 양극성 발광을 달성한다.

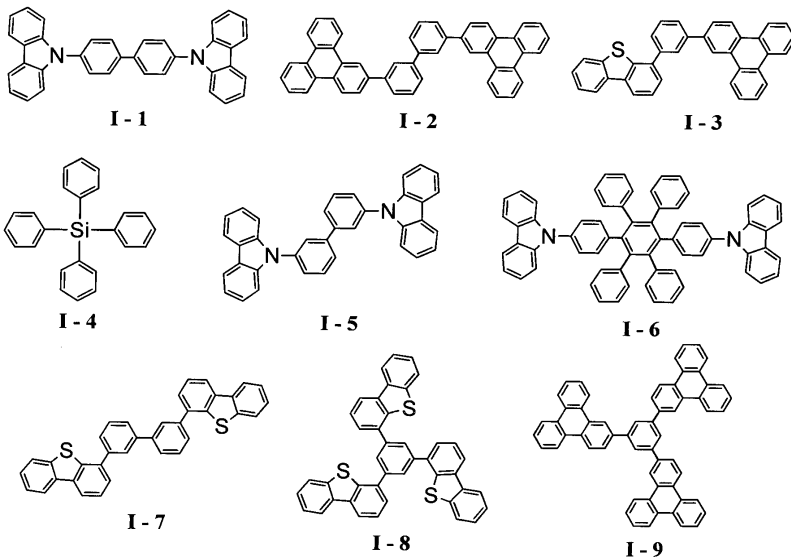
[0128]

혼합된 두 화합물의 수송 특성은 발광층에서 캐리어 평형을 조정할 수 있다.

- [0129] 이동성이  $10^{-4}$  cm<sup>2</sup>/(V.s) 이상일 때 정공 수송성 및 전자 수송성이 "높다"는 것을 유의하여야 한다. 이 값은 비행시간(time-of-flight: TOF) 기법에 의해 측정할 수 있다.
- [0130] 인광 물질의 발광색은 특별히 제한되지 않지만, 440 nm 이상 530 nm 이하의 범위내의 최대 발광 피크 파장을 갖는 청색 내지 녹색일 수 있다.
- [0131] 인광 발광 디바이스의 호스트 물질의 T<sub>1</sub>으로부터 무복사 불활성화에 의해 유발되는 발광 효율 감소를 방지하기 위해서, 호스트 물질의 T<sub>1</sub> 에너지가 게스트 물질인 인광 물질의 T<sub>1</sub> 에너지보다 더 높을 수 있다.
- [0132] 크산톤 화합물의 중심으로서 작용하는 크산톤 골격의 T<sub>1</sub> 에너지가 410 nm이기 때문에, 크산톤 화합물의 T<sub>1</sub> 에너지는 청색 인광 물질의 T<sub>1</sub> 에너지보다 더 높다.
- [0133] 따라서, 크산톤 화합물을 청색 내지 녹색 인광 발광 디바이스의 발광층 또는 인접층에 사용할 경우, 높은 발광 효율을 달성할 수 있다.
- [0134] 크산톤 화합물을 전자 수송 물질로서 사용할 경우에, 보조 물질, 또는 인광층내 호스트 물질, 게스트 물질로서 사용된 인광 물질은 금속 착체, 예컨대 이리듐 착체, 백금 착체, 레늄 착체, 구리 착체, 유로퓸 착체, 또는 루테튬 착체이다. 이들 중에서, 높은 인광 특성을 갖는 이리듐 착체가 바람직하다. 2종 이상의 인광 물질이 발광층에 함유되어 엑시톤과 캐리어의 전달을 도울 수 있다.
- [0135] 인광 물질로서 사용되는 이리듐 착체의 예 및 호스트 물질의 예를 이하에 제시하였다. 이러한 예들이 본 발명의 범위를 제한하는 것은 아니다.



[0136]



[0137]

- [0138] 필요에 따라서, 크산톤 화합물 이외에 통상적인 저분자량 또는 고분자량 화합물을 사용할 수 있다. 예를 들면, 정공 주입 또는 수송 화합물, 호스트 물질, 발광 화합물, 또는 전자 주입 또는 수송 화합물을 함께 사용할 수 있다.
- [0139] 이러한 화합물들의 예를 이하에 제시하였다.
- [0140] 정공 주입/수송 물질은 높은 정공 이동성을 가진 물질일 수 있으므로, 정공이 애노드로부터 용이하게 주입되고 주입된 정공이 발광층으로 용이하게 수송될 수 있다. 정공 주입/수송 특성을 갖는 저분자량 및 고분자량 물질의 예로서는 트리아릴아민 유도체, 페닐렌디아민 유도체, 스틸벤 유도체, 프탈로시아닌 유도체, 포르피린 유도체, 폴리(비닐 카르바졸), 폴리(티오펜), 및 기타 전도성 중합체를 들 수 있다.
- [0141] 발광 작용에 주로 기여하는 발광 물질의 예로서는, 전술한 인광 게스트 물질, 그의 유도체, 융합형 화합물(예: 플루오렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 피렌 유도체, 페릴렌 유도체, 테트라센 유도체, 안트라센 유도체 및 루벤), 퀴나크리돈 유도체, 쿠마린 유도체, 스틸벤 유도체, 유기 알루미늄 착체, 예컨대 트리스(8-퀴놀리놀레이토)알루미늄, 유기 베릴륨 착체, 및 중합체 유도체, 예컨대 폴리(페닐렌비닐렌) 유도체, 폴리(플루오렌 유도체), 및 폴리(페닐렌) 유도체를 들 수 있다.
- [0142] 전자 주입/수송 물질은 캐소드로부터 전자가 용이하게 주입될 수 있고 주입된 전자를 발광층으로 수송할 수 있는 물질들로부터 선택될 수 있다. 그 선택은 정공 주입/수송 물질의 정공 이동성과의 평형을 고려해서 이루어질 수 있다. 전자 주입/수송 물질의 예로서는, 옥사디아졸 유도체, 옥사졸 유도체, 피라진 유도체, 트리아졸 유도체, 트리아진 유도체, 퀴놀린 유도체, 퀴놀살린 유도체, 페난트롤린 유도체, 및 유기 알루미늄 착체를 들 수 있다.
- [0143] 애노드 물질은 큰 일함수를 가질 수 있다. 애노드 물질의 예로서는 단일 금속, 예컨대 금, 백금, 은, 구리, 니켈, 팔라듐, 코발트, 셀레늄, 바나듐, 및 텅스텐 또는 이들의 합금, 및 금속 산화물, 예컨대 산화주석, 산화아연, 산화인듐, 산화인듐주석(ITO), 및 산화인듐아연을 들 수 있다. 전도성 중합체, 예컨대 폴리아닐린, 폴리피롤, 및 폴리티오펜을 사용할 수도 있다. 이러한 애노드 물질들을 단독으로 또는 함께 사용할 수 있다. 애노드는 하나의 층 또는 2 이상의 층으로 구성될 수 있다.
- [0144] 캐소드 물질은 작은 일함수를 가질 수 있다. 캐소드 물질의 예로서는 알칼리 금속, 예컨대 리튬, 알칼리토금속, 예컨대 칼슘, 및 단일 금속, 예컨대 알루미늄, 티타늄, 망간, 은, 납 및 크롬을 들 수 있다. 단일 금속을 화합하여 합금으로서 사용할 수도 있다. 예를 들면, 마그네슘-은, 알루미늄-리튬, 및 알루미늄-마그네슘 합금 등을 사용할 수 있다. 금속 산화물, 예컨대 산화인듐주석(ITO)을 사용할 수도 있다. 이러한 캐소드 물질을 단독으로 또는 함께 사용할 수 있다. 캐소드는 하나의 층 또는 2 이상의 층으로 이루어질 수 있다.
- [0145] 유기 발광 디바이스에서 크산톤 화합물 및 기타 유기 화합물을 함유하는 층들은 다음과 같은 방법에 의해서 형성된다. 일반적으로, 진공 증착, 이온화 증착, 스퍼터링, 플라즈마, 및 적절한 용제를 사용한 코팅(스핀 코팅, 침지, 캐스팅, 랑뮤-블로젯(Langmuir-Blodgett) 방법, 및 잉크젯 방법)에 의해서 박막이 형성된다. 진공 증착 또는 용액 코팅법에 의해서 층을 형성할 경우에는, 결정화가 억제되고 경시 안정성이 개선될 수 있다. 코팅 방법을 사용할 경우, 적절한 결착 수지를 추가로 사용해서 필름을 형성할 수 있다.
- [0146] 결착 수지의 예로서는, 폴리비닐카르바졸 수지, 폴리카보네이트 수지, 폴리에스테르 수지, ABS 수지, 아크릴 수지, 폴리이미드 수지, 페놀 수지, 에폭시 수지, 실리콘 수지, 및 우레아 수지를 들 수 있으나, 이들에 제한되는 것은 아니다. 이러한 결착 수지를 단독 중합체로서 단독으로 사용하거나 공중합체로서 2종 이상을 함께 사용할 수 있다. 필요에 따라, 공지의 첨가제, 예컨대 가소제, 항산화제, 및 자외선 흡수제를 병용할 수 있다.
- [0147] **유기 발광 디바이스의 사용**
- [0148] 이러한 실시양태의 유기 발광 디바이스를 디스플레이 장치 또는 조명 장치에 사용할 수 있다. 또한, 유기 발광 디바이스를 전자사진 화상 형성 장치의 노출 광원 및 액정 디스플레이 장치의 백라이트로서 사용할 수 있다.
- [0149] 디스플레이 장치는 상기 실시양태의 유기 발광 디바이스를 포함하는 디스플레이 유닛을 포함한다. 상기 디스플레이 유닛은 화소를 갖는다. 각 화소는 상기 실시양태의 유기 발광 디바이스 및 발광 휘도 조절용 스위칭 소자의 일레인 박막 트랜지스터(TFT) 소자를 갖는다. TFT 소자의 드레인 전극 또는 소스 전극이 유기 발광 디바이스의 애노드 또는 캐소드에 결합된다. 디스플레이 장치는 개인 컴퓨터 등의 화상 디스플레이 장치로서 사용될 수 있다.
- [0150] 디스플레이 장치는 그것을 통해 면적 CCD, 선형 CCD, 메모리 카드 등으로부터 화상 데이터가 입력되고 입력 화

상이 디스플레이 유닛에서 출력되는 입력 유닛을 갖는다. 상기 디스플레이 장치는 화상형성 장치 또는 잉크젯 프린터의 디스플레이 유닛으로서 작용하며, 외부로부터 입력된 화상 데이터를 표시하는 화상 출력 기능 및 화상 처리 데이터가 입력되는 조작 패널의 입력 기능을 둘 다 가질 수 있다. 이러한 디스플레이 장치는 다기능 프린터의 디스플레이 유닛으로서 사용될 수 있다.

[0151] 이하에서는, 상기 실시양태에 의한 유기 발광 디바이스를 사용하는 디스플레이 장치를 도 1을 참조해서 설명하고자 한다.

[0152] 도 1은 상기 실시양태의 유기 발광 디바이스 및 유기 발광 디바이스에 결합된 스위칭 소자의 일례인 TFT 소자를 포함하는 디스플레이 장치의 횡단면 개요도이다. 도면에, 두 쌍의 유기 발광 디바이스 및 TFT 소자가 도시되어 있다. 상세한 구조는 다음과 같다.

[0153] 상기 디스플레이는 기관(1), 예컨대 유리 및 TFT 소자 및 유기 화합물 층들을 보호하기 위한 방습 필름(2)를 포함하고, 방습 필름(2)는 기관(1)상에 배치된다. 또한, 디스플레이는 금속 게이트 전극(3), 게이트 절연막(4), 및 반도체층(5)을 포함한다.

[0154] TFT 소자(8)은 반도체 층(5), 드레인 전극(6), 및 소스 전극(7)을 포함한다. 절연 필름(9)이 TFT 소자(8)상에 배치된다. 유기 발광 디바이스의 애노드(11)가 접촉홀(10)을 통해서 소스 전극(7)에 결합된다. 애노드와 캐소드가 TFT 소자의 소스 전극과 드레인 전극중 하나에 결합되는 한, 디스플레이 장치의 형태가 이에 제한되는 것은 아니다.

[0155] 도면에서, 유기 화합물 층(12)는 하나의 층으로 도시되어 있지만, 다수의 층들로 이루어진다. 유기 발광 디바이스의 열화를 억제하기 위한 제1 보호층(14) 및 제2 보호층(15)이 캐소드(13)상에 제공된다.

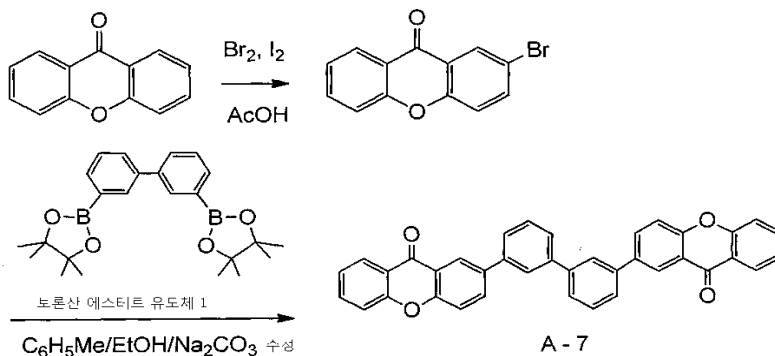
[0156] 이러한 실시양태의 디스플레이 장치에서, 스위칭 소자는 특별히 제한되지 않는다. 예를 들면, 단결정 실리콘 기관, 금속-절연체-금속(MIM) 소자, 또는 a-Si 소자를 사용할 수 있다.

[0157] **실시예**

[0158] 이하에서는 실시예를 설명한다. 본 발명이 후술하는 실시예에 제한되는 것은 아니다.

[0159] **실시예 1**

[0160] **화합물 A-7의 합성**



[0161] 100 mL 둥근 바닥 플라스크에, 다음과 같은 시약과 용제를 넣었다.

[0163] 크산톤: 5.0 g(26 mmol)

[0164] 브로민: 16 g(102 mmol)

[0165] 이오딘: 50mg(0.20 mmol)

[0166] 아세트산: 20 mL

[0167] 수득한 반응 용액을 질소 중에서 가열 및 교반하에 100°C에서 5 시간 동안 환류시켰다. 반응 완료시에, 클로로포름과 포화 아황산나트륨 수용액을 반응 용액에 첨가하고 브롬색이 사라질 때까지 교반을 계속하였다. 유기층을 분리시키고 포화 탄산나트륨 수용액으로 세척하고 황산마그네슘으로 건조시킨 후에 여과하였다. 여과액에서 용제를 감압하에 증발 제거하였다. 침전된 고형물을 실리카겔 컬럼으로 정제하였다(톨루엔: 100%). 그 결과,

2-브로모크산톤 2.9 g(수율: 41%) 및 2,7-디브로모크산톤 2.2 g(수율: 25%)을 수득하였다.

[0168] 다음과 같은 시약 및 용제를 50 mL 둥근 바닥 플라스크에 넣었다.

[0169] 2-브로모크산톤: 1.5 g(5.4 mmol)

[0170] 보론산 에스테르 유도체 1: 1.0 g(2.5 mmol)

[0171] 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0): 0.29 g(0.25 mmol)

[0172] 톨루엔: 10 mL

[0173] 에탄올: 2 mL

[0174] 2M 탄산나트륨 수용액: 6 mL

[0175] 반응 용액을 질소중에서 가열 및 교반하에 12 시간 동안 환류시켰다. 반응 완료시에, 침전된 고형물을 여과하고 물, 메탄올 및 아세톤으로 세척하였다. 수득한 고형물을 가열하에 클로로벤젠에 용해시키고, 불용성 물질을 용액의 고온 여과에 의해서 제거하였다. 여과액에서 용제를 감압하에 증류 제거하고 침전된 고형물을 클로로벤젠/헵탄 계에서 재결정화하였다. 형성된 결정을 150°C에서 진공 건조하고 10<sup>-1</sup> Pa 및 370°C에서 승화에 의해 정제하였다. 그 결과, 높은 순도를 갖는 실시예 화합물 A-7 0.44 g(수율: 33%)을 수득하였다.

[0176] 매트릭스 지원 레이저 탈착 이온화-비행시간 질량 분광분석(MALDI-TOF-MS)에 의해서 상기 화합물의 M<sup>+</sup>, 즉, 542.2를 확인하였다.

[0177] 화합물의 구조는 양성자 핵자기 공명 분광분석(<sup>1</sup>H-NMR)에 의해서 확인하였다.

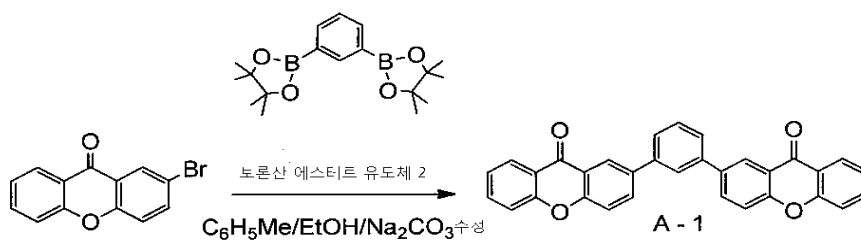
[0178] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 500 MHz) δ (ppm): 8.65 (2H, d), 8.39 (2H, dd), 8.08 (2H, dd), 7.96 (2H, bs), 7.78-7.74 (2H, m), 7.74-7.69 (4H, m), 7.65-7.58 (4H, m), 7.55 (2H, d), 7.44-7.39 (2H, m).

[0179] 실시예 화합물 A-7의 T<sub>1</sub> 에너지를 다음과 같은 방법에 의해서 측정하였다.

[0180] 실시예 화합물 A-7의 묽은 톨루엔 용액(1x10<sup>-5</sup> M)의 인광 스펙트럼을 Ar 대기중에서 77K 및 350 nm의 여기 파장하에 측정하였다. 수득한 인광 스펙트럼의 0-0 밴드(제1 발광 피크)의 피크 파장으로부터 T<sub>1</sub> 에너지를 계산하였다. 파장 기준으로 T<sub>1</sub> 에너지는 443 nm였다.

[0181] 실시예 2

[0182] 실시예 화합물 A-1의 합성



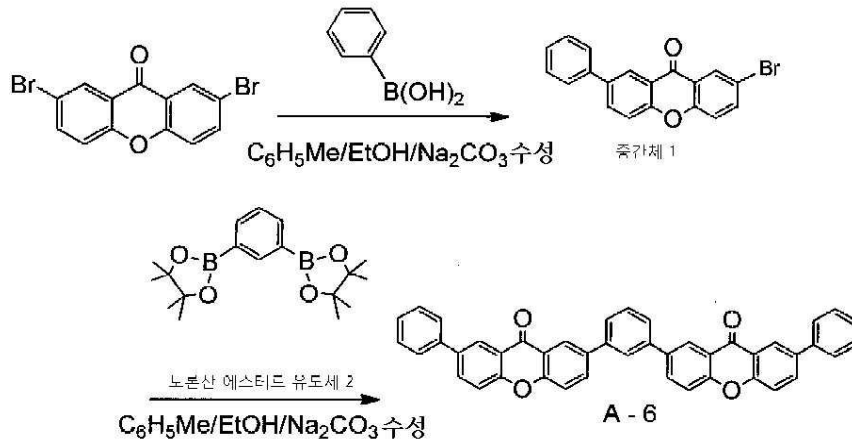
[0183]

[0184] 실시예 1에서 사용된 보론산 에스테르 유도체 1을 보론산 에스테르 유도체 2로 변경한 것을 제외하고는, 실시예 1과 같이 실시예 화합물 A-1을 수득하였다.

[0185] MALDI-TOF MS에 의해서 상기 화합물의 M<sup>+</sup>, 즉, 466.1을 확인하였다.

[0186] 실시예 3

[0187] 실시예 화합물 A-6의 합성



[0188]

[0189] 다음과 같은 시약 및 용제를 100 mL 둥근 바닥 플라스크에 넣었다.

[0190] 2,7-디브로모크산톤: 3.1 g(8.6 mmol)

[0191] 페닐보론산: 1.1 g(8.6 mmol)

[0192] 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0): 0.50 g(0.43 mmol)

[0193] 톨루엔: 20 mL

[0194] 에탄올: 2 mL

[0195] 2M 탄산나트륨 수용액: 10 mL

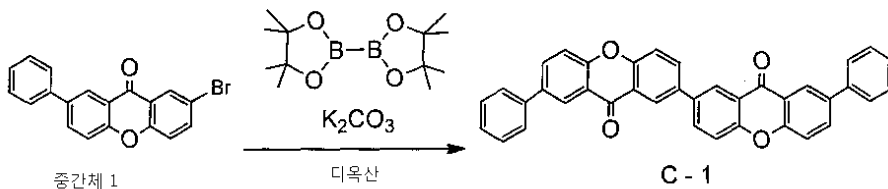
[0196] 질소중에서 교반 및 가열하에 10 시간 동안 반응 용액을 환류시켰다. 반응 완료시에, 유기 층을 분리시키고 황산마그네슘으로 건조시키고 여과시켰다. 수득한 여과액에서 용제를 감압하에 증류 제거하였다. 침전된 고형물을 실리카겔 컬럼으로 정제하였다(클로로포름:헵탄= 1:1). 그 결과, 중개체 1 1.24 g(수율: 41%)을 수득하였다.

[0197] 실시예 2에 사용된 2-브로모크산톤을 중개체 1로 변경한 것을 제외하고는, 실시예 2와 같이 실시예 화합물 A-6을 합성하였다.

[0198] MALDI-TOF MS에 의해서 상기 화합물의  $M^+$ , 즉, 618.2를 확인하였다.

[0199] 실시예 4

[0200] 실시예 화합물 C-1의 합성



[0201]

[0202] 다음과 같은 시약 및 용제를 100 mL 둥근 바닥 플라스크에 넣었다.

[0203] 중개체 1: 1.0 g(2.9 mmol)

[0204] 비스(피나콜레이트)디보론: 0.45 g(1.8 mmol)

[0205] 탄산칼륨: 2.0 g(15 mmol)

[0206] 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II) 디클로라이드: 0.20 g(0.29 mmol)

[0207] 디옥산: 15 mL

[0208] 질소 중에서 가열 및 교반하에 반응 용액을 12 시간 동안 환류시켰다. 반응 완료시에, 침전된 고형물을 여과하고 물, 메탄올 및 아세톤으로 세척하였다. 수득한 고형물을 가열하에 클로로벤젠에 용해시키고 불용성 물질을 용액의 고온 여과에 의해서 제거하였다. 여과액에서 용제를 감압하에 증류 제거하고 침전된 고형물을 클로로벤젠/헥산 계로 재결정화하였다. 수득한 결정을 150°C에서 진공 건조시키고 10<sup>-1</sup> Pa 및 380°C에서 승화에 의해 정제하였다. 그 결과, 높은 순도를 갖는 실시예 화합물 C-1 0.45 g(수율: 57%)을 수득하였다.

[0209] MALDI-TOF MS에 의해서 상기 화합물의 M<sup>+</sup>, 즉, 542.2를 확인하였다.

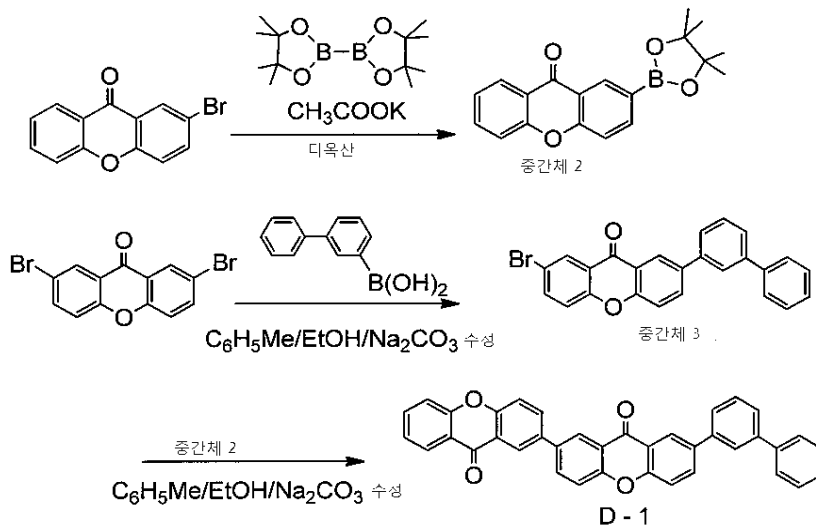
[0210] 화합물의 구조를 <sup>1</sup>H-NMR에 의해 확인하였다.

[0211] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 500 MHz) δ (ppm): 8.69 (2H, d), 8.62 (2H, d), 8.14 (2H, dd), 8.02 (2H, dd), 7.74-7.70 (4H, m), 7.68 (2H, d), 7.64 (2H, d), 7.53-7.48 (4H, m), 7.43-7.39 (2H, m)

[0212] 실시예 화합물 C-1의 T<sub>1</sub> 에너지를 실시예 1과 같이 측정하였다. 파장 기준으로 T<sub>1</sub> 에너지는 446 nm였다.

[0213] 실시예 5

[0214] 실시예 화합물 D-1의 합성



[0215]

[0216] 다음과 같은 시약 및 용제를 200 mL 둥근 바닥 플라스크에 넣었다.

[0217] 2-브로모크산톤: 5.0 g(18 mmol)

[0218] 비스(피나콜레이토)디보론: 5.5 g(22 mmol)

[0219] [1,1'-비스(디페닐포스포노)페로센]팔라듐(II) 디클로라이드 디클로로메탄 부가생성물: 0.74 g(0.91 mmol)

[0220] 아세트산칼륨: 3.2 g(33 mmol)

[0221] 디옥산: 40 mL

[0222] 질소 중에서 가열 및 교반하에 반응 용액을 3 시간 동안 환류시켰다. 반응 완료시에, 침전된 염을 여과에 의해 제거하였다. 수득한 여과액에서 용제를 감압하에 증류 제거하였다. 침전된 고형물을 실리카겔 컬럼으로 정제하였다(에틸 아세이트:헥산= 1:2). 그 결과, 중간체 2 5.1 g(수율: 87%)을 수득하였다.

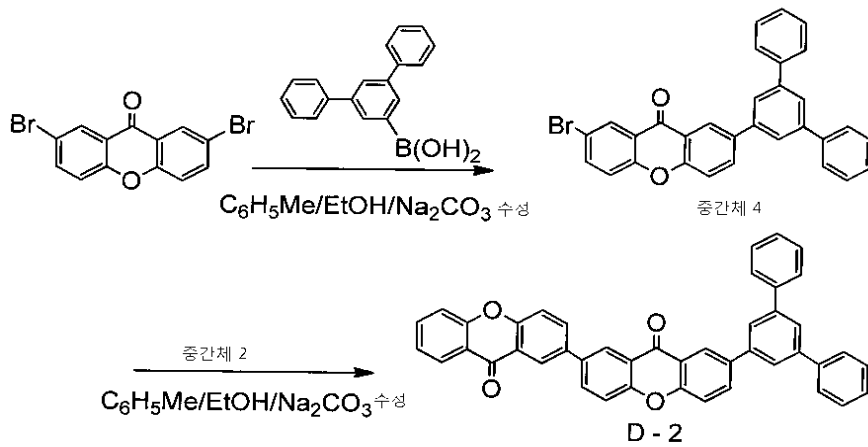
[0223] 실시예 3에서 중간체 1의 합성에 사용된 페닐 보론산을 3-비페닐보론산으로 변경한 것을 제외하고는, 실시예 3에서 중간체 1을 합성하기 위한 방법과 같은 방법에 의해서 중간체 3을 수득하였다.

[0224] 실시예 1의 실시예 화합물 A-7을 합성하는데 사용된 2-브로모크산톤을 중간체 3으로 변경하고 보론산 유도체 1을 중간체 2로 변경한 것을 제외하고는(중간체 3에 대하여 1.1 당량) 실시예 화합물 A-7을 합성하기 위한 방법과 같은 방법으로 실시예 화합물 D-1을 수득하였다.

[0225] MALDI-TOF MS에 의해서 상기 화합물의  $M^+$ , 즉, 542.2를 확인하였다.

[0226] 실시예 6

[0227] 실시예 화합물 D-2의 합성



[0228]

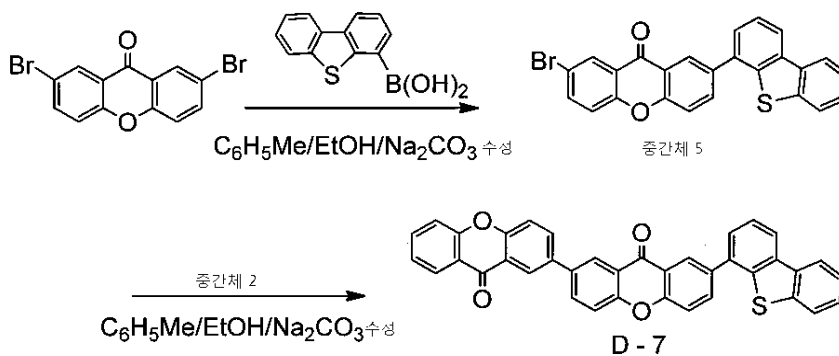
[0229] 실시예 3에서 중간체 1의 합성에 사용된 페닐보론산을 3,5-디페닐페닐보론산으로 변경한 것을 제외하고는, 실시예 3에서 중간체 1을 합성하기 위한 방법과 같은 방법에 의해 중간체 4를 수득하였다.

[0230] 실시예 5에서 실시예 화합물 D-1의 합성에 사용된 중간체 3을 중간체 4로 변경한 것을 제외하고는, 실시예 5에서 실시예 화합물 D-1을 합성하기 위한 방법과 같은 방법에 의해서 실시예 화합물 D-2를 합성하였다.

[0231] MALDI-TOF MS에 의해서 상기 화합물의  $M^+$ , 즉, 618.2를 확인하였다.

[0232] 실시예 7

[0233] 실시예 화합물 D-7의 합성



[0234]

[0235] 실시예 3에서 중간체 1의 합성에 사용된 페닐보론산을 디벤조티오펜-4-일보론산으로 변경한 것을 제외하고는, 실시예 3에서 중간체 1을 합성하기 위한 방법과 같은 방법에 의해서 중간체 5를 수득하였다.

[0236] 실시예 5에서 실시예 화합물 D-1의 합성에 사용된 중간체 3을 중간체 5로 변경한 것을 제외하고는, 실시예 5에서 실시예 화합물 D-1을 합성하기 위한 방법과 같은 방법에 의해서 실시예 화합물 D-7을 수득하였다.

[0237] MALDI-TOF MS에 의해서 상기 화합물의  $M^+$ , 즉, 572.1을 확인하였다.

[0238] 실시예 8

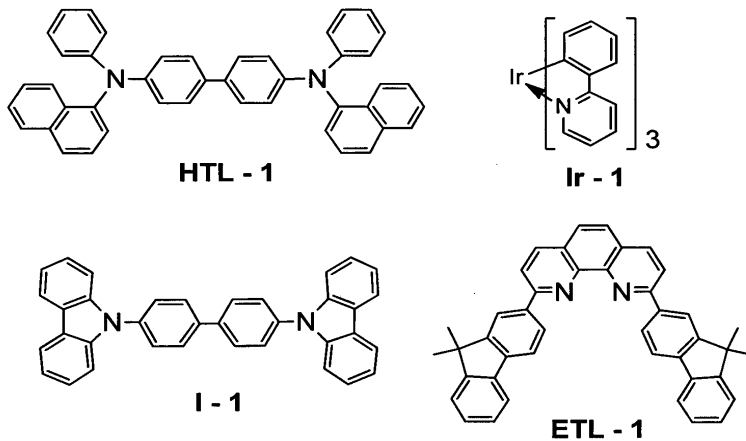
[0239] 유기 발광 디바이스의 제조

[0240] 본 실시예에서는, 기관상에 순서대로 형성된 애노드, 정공 수송층, 발광층, 정공 블로킹층, 전자 수송층, 및 캐소드를 포함하는 구조를 갖는 유기 발광 디바이스를 다음과 같은 방법에 의해서 제조하였다.

[0241] 산화인듐주석(ITO)를 유리 기관상에 스퍼터 증착하여 애노드로서 작용하는 두께 120 nm의 필름을 형성하였다.

이 기판을 투명 도전성 지지체 기판(ITO 기판)으로서 사용하였다. 하기 유기 화합물 층 및 전극층을  $10^{-5}$  Pa 진공 챔버에서 저항 가열하에 진공 증착에 의해 ITO 기판상에 연속적으로 형성하였다. 대향하는 전극들의 면적이  $3 \text{ mm}^2$ 이 되도록 방법을 수행하였다.

- [0242] 정공 수송층(40 nm) HTL-1
- [0243] 발광층(30 nm), 호스트 물질 1: I-1, 호스트 물질 2: 없음, 게스트 물질: Ir-1(10 중량%)
- [0244] 정공 블로킹(HB)층(10 nm) A-7
- [0245] 전자 수송층(30 nm) ETL-1
- [0246] 금속 전극층 1(0.5 nm) LiF
- [0247] 금속 전극층 2(100 nm) Al



- [0248]
- [0249] 건조 공기 중에서 보호 유리 기판을 유기 발광 디바이스상에 놓아서 수분 흡착에 의해 유발되는 열화를 방지하고 아크릴 수지 접착제로 밀봉하였다. 이와 같이 하여, 유기 발광 디바이스를 제조하였다.
- [0250] 상기 유기 발광 디바이스의 전류-전압 특성을 키이틀리 인스트루먼트 인코포레이티드에서 제조한 2700 시리즈 전류계로 측정하고, 탑콘 코오포레이션에서 제조한 BM7-패스트(fast)로 발광 휘도를 측정하였다. 5.0V의 전압을 양극으로 작용하는 ITO 전극 및 음극으로 작용하는 알루미늄 전극에 가하였다. 발광 효율은  $56 \text{ cd/A}$ 이었고 휘도가  $1920 \text{ cd/m}^2$ 인 녹색 발광이 관찰되었다. 상기 디바이스의 CIE 색좌표는  $(x,y)=(0.34, 0.62)$ 이었다.

[0251] 실시예 9 내지 19

[0252] 실시예 8과 같이 디바이스를 제조하되, 단, 상이한 정공 블로킹 물질(HB 물질), 발광층의 호스트 물질 1 및 호스트 물질 2(15 중량%), 및 게스트 물질(10 중량%)을 사용하였다. 디바이스를 실시예 8과 같이 평가하였다. 발광 효율, 부하 전압, 및  $2000 \text{ cd/m}^2$ 에서 발광 색상을 하기 표 3에 나타내었다.

표 3

실시예 번호	HB 물질	호스트 물질 1	호스트 물질 2	게스트 물질	발광 효율 (cd/A)	전압 (V)	발광 색상
9	A-7	I-1	A-7	Ir-1	61	5.0	녹색
10	A-7	I-5	없음	Ir-13	10	6.6	청색
11	A-6	I-1	없음	Ir-1	53	5.4	녹색
12	A-6	I-2	A-6	Ir-1	58	5.2	녹색
13	C-1	I-2	없음	Ir-1	56	5.2	녹색
14	C-1	I-1	D-1	Ir-3	63	4.9	녹색
15	D-1	I-1	없음	Ir-1	52	5.5	녹색
16	D-1	I-3	D-1	Ir-4	56	5.6	녹색
17	D-2	I-4	없음	Ir-15	12	6.5	청색-녹색
18	D-2	I-5	D-7	Ir-15	16	6.4	청색-녹색
19	A-1	I-6	A-1	Ir-13	11	6.8	녹색

- [0254] 상기 결과는 본 발명의 크산톤 화합물을 인광 발광 장치의 전자 수송 물질 또는 발광층 물질로서 사용할 경우에, 높은 발광 효율을 달성할 수 있다는 것을 보여준다.
- [0255] 이상에서는 예시적인 실시양태에 의거하여 본 발명을 설명하였지만, 본 발명이 개시된 예시적인 실시양태에 제한되지 않음을 알아야 한다. 첨부된 특허 청구의 범위는 모든 변형에 및 등가의 구조와 기능을 모두 포함하도록 가장 넓게 해석되어야 한다.
- [0256] 본 출원은 2010년 11월 4일자 일본 특허 출원 제 2010-247857호에 대한 우선권을 주장하며, 상기 특허 출원은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다.

**부호의 설명**

- [0257] 8: TFT 소자      11: 애노드
- 12: 유기 화합물 층      13: 캐소드

**도면**

**도면1**

