(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2018-0094572
(43) 공개일자 2018년08월24일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/0052 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2017-0020862
(22) 출원일자 2017년02월16일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
롬엔드하스전자재료코리아유한회사
충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)
(72) 발명자
문두현
경기도 화성시 석우동 삼성1로5길 20
조상희
경기도 화성시 석우동 삼성1로5길 20
(74) 대리인
장훈

전체 청구항 수 : 총 10 항

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

(57) 요 약

본원은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 전자 전달층 및/또는 전자 버퍼층에 포함함으로써, 발광 효율이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

(52) CPC특허분류
H01L 51/0069 (2013.01)
C09K 2211/1033 (2013.01)
C09K 2211/1037 (2013.01)

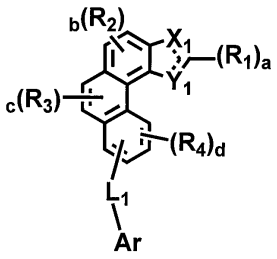
명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X_1 및 Y_1은 각각 -N=, $-NR_5$-, -O- 또는 -S-이고, 여기서, X_1이 -N= 인 경우 Y_1은 $-NR_5$-, -O- 또는 -S-이고, X_1이 $-NR_5$-인 경우 Y_1은 -N=, -O- 또는 -S-이고,

단, X_1과 Y_1이 모두 -O-인 경우, 모두 -S-인 경우, 및 X_1과 Y_1 중 어느 하나가 -O-이고, 다른 하나가 -S-인 경우는 제외하며,

Ar 은 치환 또는 비치환된 (C10-C60)아릴이고,

L_1은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고,

R_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고,

R_2 내지 R_5는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고,

a 내지 c는 각각 독립적으로 1 또는 2이고, d는 1 내지 3의 정수이고,

상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 Ar, L_1, 및 R_1 내지 R_5에서 치환된 알킬(렌), 치환된 아릴(렌), 치환된 헤테로아릴(렌), 치환된 시클로알킬, 치환된 알콕시, 치환된 트리알킬실릴, 치환된 디알킬아릴실릴, 치환된 알킬디아릴실릴, 치환된 트리아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- 알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- 아릴아미노, 치환된 알킬아릴아미노, 및 치환된 단일환 또는 다환의 지환족, 또는 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 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, (3-30원)헤테로아릴, (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 이상인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 화학식 1에서,

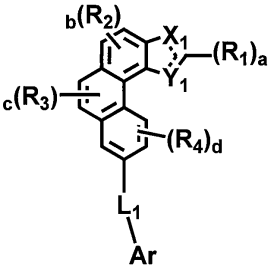
X_1 및 Y_1 중 어느 하나는 -N=이고, 다른 하나는 $-NR_5-$, -O- 또는 -S-이며,

a는 1인, 유기 전계 발광 화합물.

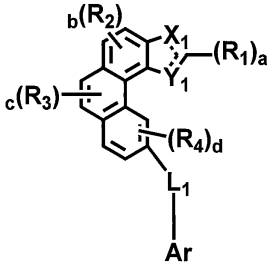
청구항 4

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 2]



[화학식 3]

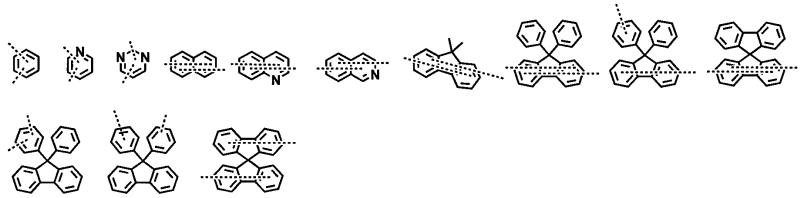


상기 화학식 2 및 3에서,

X_1, Y_1, Ar, L_1, R_1 내지 R_4, 및 a 내지 d는 제1항에서 정의한 바와 같다.

청구항 5

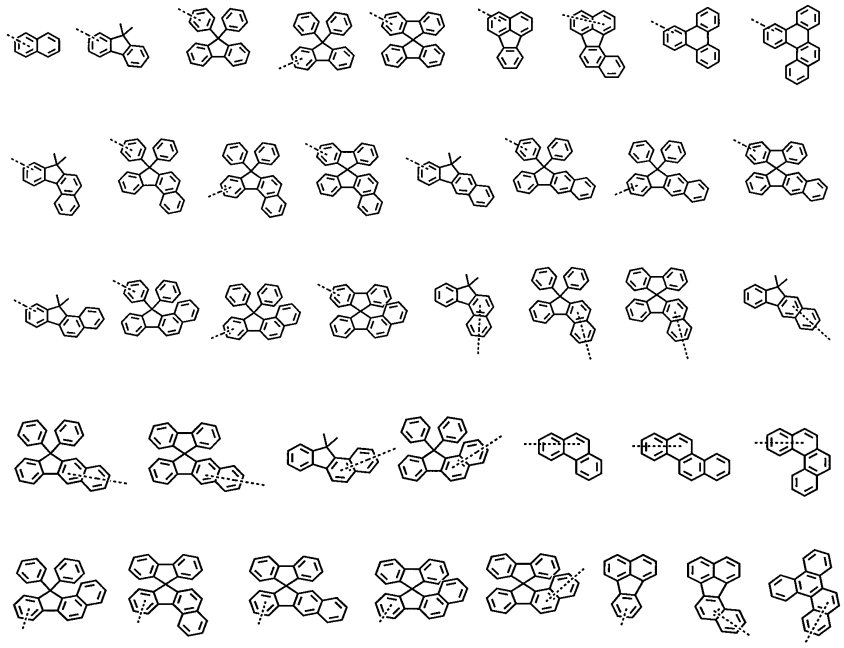
제1항에 있어서, 상기 화학식 1에서 L_1은 단일 결합이거나, 하기의 그룹으로부터 선택되는 어느 하나를 포함하고,



여기서, 점선 (---)은 기본 골격 및 Ar과의 연결 위치를 각각 나타내는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 6

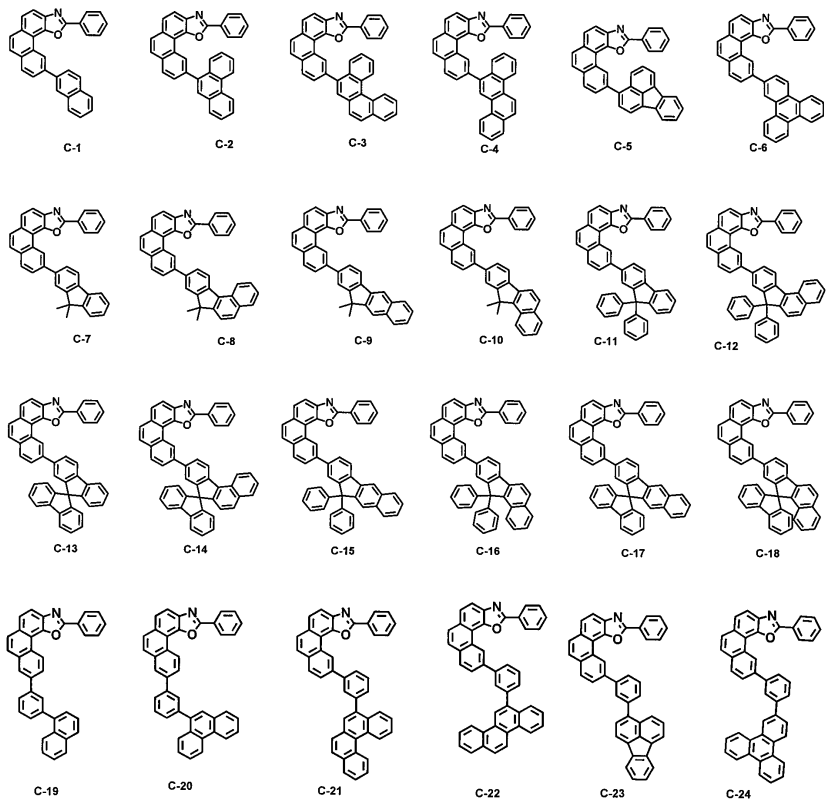
제1항에 있어서, 상기 화학식 1에서 Ar은 하기의 그룹으로부터 선택되는 어느 하나를 포함하고,

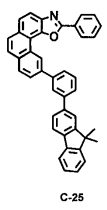


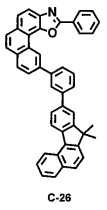
여기서, 점선(---)은 L_1과의 연결 위치를 나타내는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

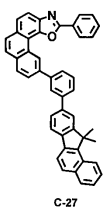
청구항 7

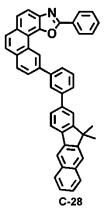
제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기에서 선택되는, 유기 전계 발광 화합물.

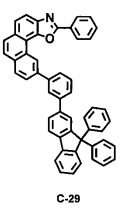


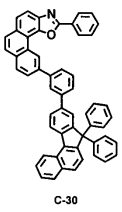

C-25

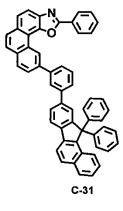

C-26

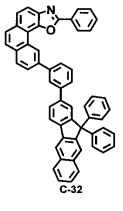

C-27

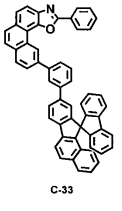

C-28

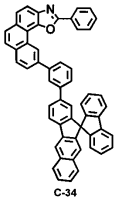

C-29

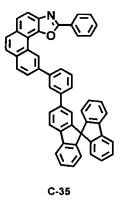

C-30

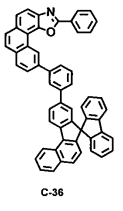

C-31

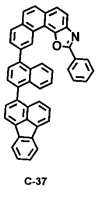

C-32

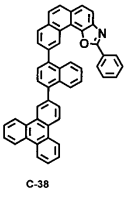

C-33

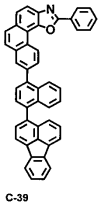

C-34

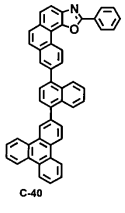

C-35

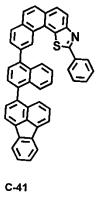

C-36

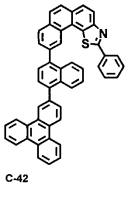

C-37

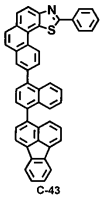

C-38

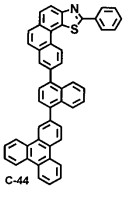

C-39

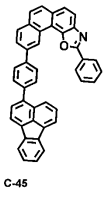

C-40

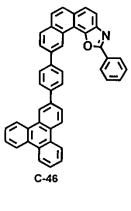

C-41

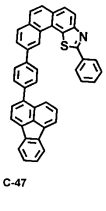

C-42

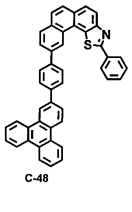

C-43

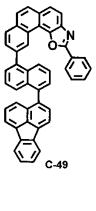

C-44

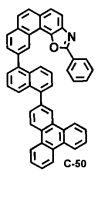

C-45

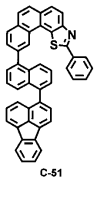

C-46

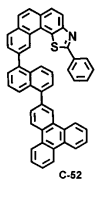

C-47

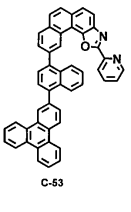

C-48

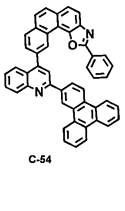

C-49

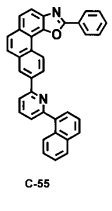

C-50

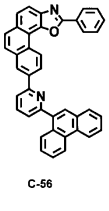

C-51

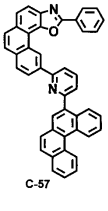

C-52

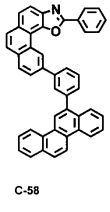

C-53

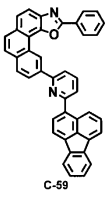

C-54

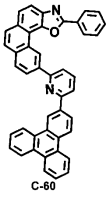

C-55

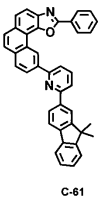

C-56

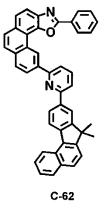

C-57

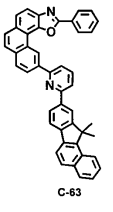

C-58

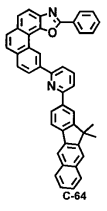

C-59


C-60


C-61


C-62


C-63


C-64

C-65

C-66

C-67

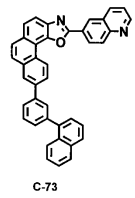
C-68

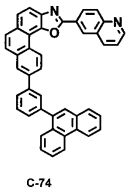
C-69

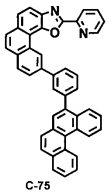
C-70

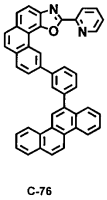
C-71

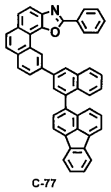
C-72

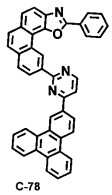

C-73

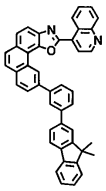

C-74

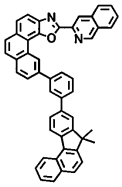

C-75

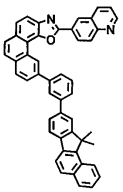

C-76

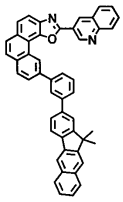

C-77

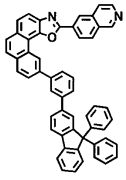

C-78

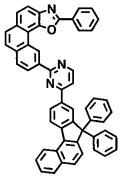

C-79

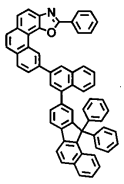

C-80

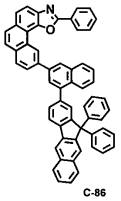

C-81

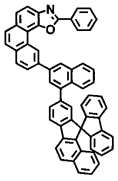

C-82

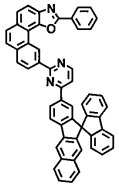

C-83

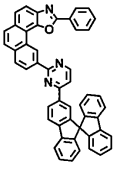

C-84

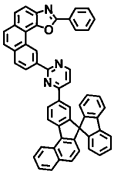

C-85

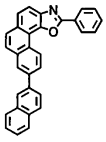

C-86

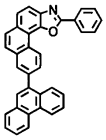

C-87

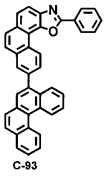

C-88

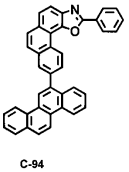

C-89

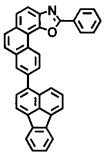

C-90

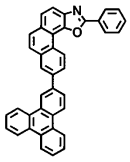

C-91

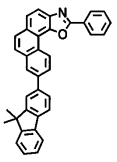

C-92

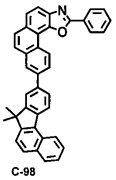

C-93

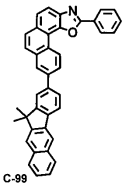

C-94

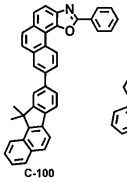

C-95

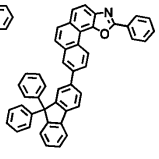

C-96

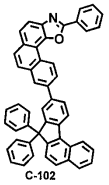

C-97

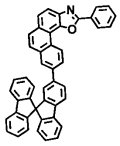

C-98

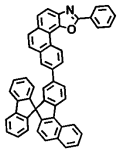

C-99

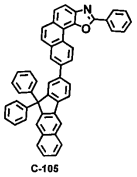

C-100

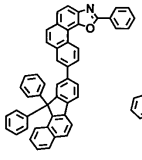

C-101

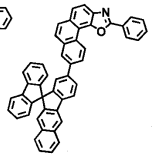

C-102

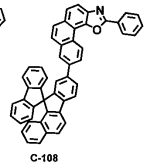

C-103

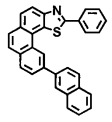

C-104

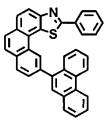

C-105

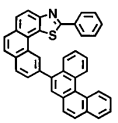

C-106

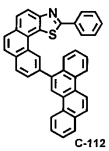

C-107


C-108


C-109


C-110


C-111


C-112

C-113

C-114

C-115

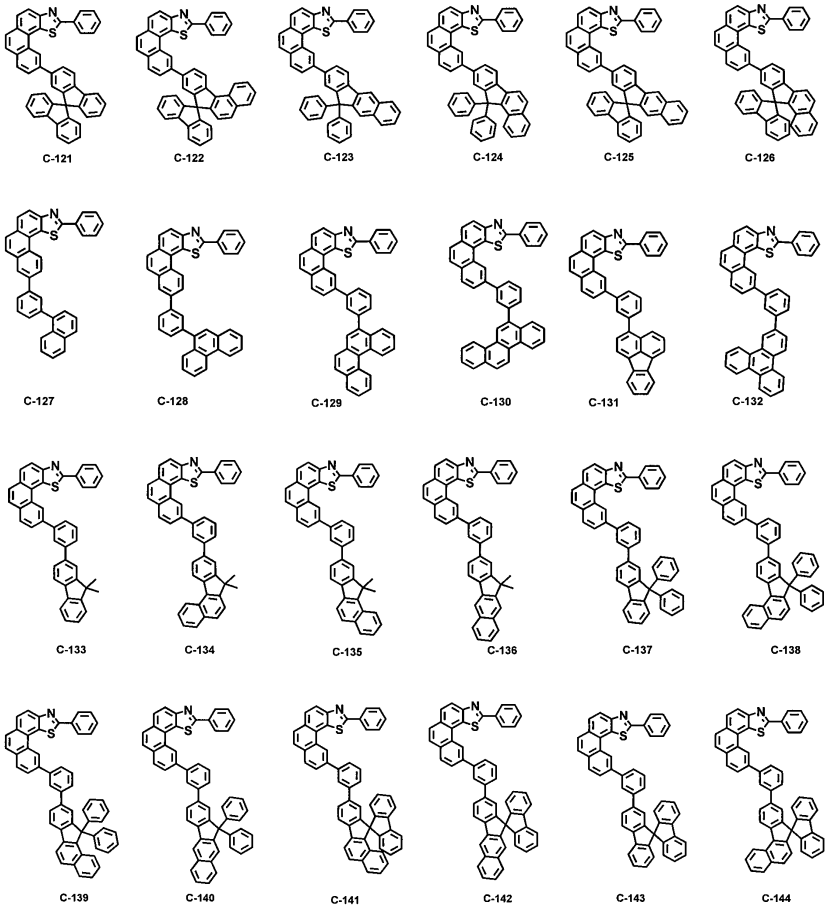
C-116

C-117

C-118

C-119

C-120



청구항 8

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 재료.

청구항 9

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

청구항 10

제9항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 화합물을 전자 전달층 및 전자 버퍼층 중 하나 이상에 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기 술 분 야

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

배 경 기 술

[0002] 전계 발광 소자(electroluminescent 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 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 전계 발광 소자(organic electroluminescent device)는 유기 발광재료에 전기를 가해 전기 에너지를 빛으로 바꾸는 소자로서, 통상 양극(애노드) 및 음극(캐소드)과 이들 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 유기 전계 발광 소자의 유기물층은 정공주입층, 정공전달층, 정공보조층, 발광보조층, 전자차단층, 발광층(호스트 및 도판트 재료 포함), 전자버퍼층, 정공차단층, 전자전달층, 전자주입층 등을 포함할 수 있다. 상기 유기물

층에 사용되는 재료는 기능에 따라 정공주입재료, 정공전달재료, 정공보조재료, 발광보조재료, 전자차단재료, 발광재료, 전자버퍼재료, 정공차단재료, 전자전달재료, 전자주입재료 등으로 나뉠 수 있다. 이러한 유기 전계 발광 소자에서는 전압 인가에 의해 양극에서 정공이, 음극에서 전자가 발광층에 주입되고, 정공과 전자의 재결합에 의해 에너지가 높은 엑시톤이 형성된다. 이 에너지에 의해 유기 발광 화합물이 여기 상태로 되며, 유기 발광 화합물의 여기 상태가 기저 상태로 돌아가면서 에너지를 빛으로 방출하여 발광하게 된다.

[0004] 유기 전계 발광 소자에서 전자 전달층은 음극으로부터 전자를 발광층으로 원활히 수송하고 발광층에서 결합하지 못한 정공의 이동을 억제하여 발광층 내의 정공과 전자의 재결합 기회를 증가시키는 역할을 하는 것으로, 전자 친화성이 우수한 재료가 사용된다. 종래에는 Alq_3와 같이 발광 기능을 가진 유기 금속 착체가 전자 전달 재료로서 사용되었으나, Alq_3는 다른 층으로의 이동이 문제가 되었고 청색 발광 소자에 사용되는 경우 색순도가 저하되는 문제점이 있었다. 따라서, 상기한 문제점이 없으면서도 전자친화도가 높아 유기 전계 발광 소자에 사용되는 경우 빠른 전자 이동 특성을 보여 발광 소자가 높은 발광 효율을 나타낼 수 있는 물질이 요구된다.

[0005] 또한, 전자 버퍼층은 패널 제작 공정에서 고온에 노출시 소자 내의 전류 특성이 변하여 발광 휘도의 저하가 발생할 수 있는 문제를 개선하기 위한 층으로써 전자 버퍼층에 포함되는 화합물의 특성이 중요하다. 뿐만 아니라 전자 버퍼층에 사용되는 화합물은 전자 끌어 당김 (electron withdrawing) 특성 및 전자 친화도 LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) 에너지 값에 의한 전자 주입 조절 역할을 하는 것이 바람직하며, 이를 통하여 유기 전계 발광 소자의 효율을 향상시키는 역할을 할 수 있다. 일본공개특허공보 제2001-23777호는 페난트렌 골격의 중간 벤젠 고리에 질소를 함유하는 5원 헤테로아릴이 축합된 형태의 화합물을 호스트 재료로 사용하는 유기 전계 발광 소자를 개시하고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0006] (특허문헌 0001) 일본 공개특허공보 제2001-23777호 (2001. 1. 26. 발행)

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 일본 공개특허공보 제2001-23777호에 개시된 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 청색의 우수한 색 순도 특성은 나타내지만, 여전히 발광 효율에 대해서는 개선될 필요성을 갖고 있다.

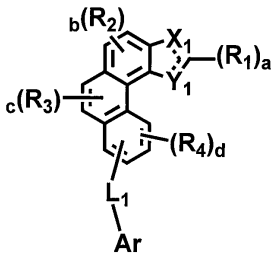
[0008] 이에, 본 발명자들은 페난트렌 골격의 사이드 벤젠 고리에 5원 헤테로아릴이 축합된 형태의 화합물을 전자전달층 및/또는 전자 버퍼층에 사용할 경우, 유기 전계 발광 소자의 발광 효율이 향상될 수 있음을 밝혀내었다.

[0009] 본원의 목적은 발광 효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조하는데 효과적인 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0010] 상기의 기술적 과제를 해결하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0011] [화학식 1]

[0012] 

[0013] 상기 화학식 1에서,

[0014] X_1 및 Y_1은 각각 -N=, $-NR_5-$, -O- 또는 -S-이고, 여기서, X_1이 -N= 인 경우 Y_1은 $-NR_5-$, -O- 또는 -S-이고, X_1이 $-NR_5-$인 경우 Y_1은 -N=, -O- 또는 -S-이고,

[0015] 단, X_1과 Y_1이 모두 -O-인 경우, 모두 -S-인 경우, 및 X_1과 Y_1 중 어느 하나가 -O-이고, 다른 하나가 -S-인 경우는 제외하며,

[0016] Ar 은 치환 또는 비치환된 (C10-C60)아릴이고,

[0017] L_1은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고,

[0018] R_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고,

[0019] R_2 내지 R_5는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고,

[0020] a 내지 c는 각각 독립적으로 1 또는 2이고, d는 1 내지 3의 정수이고,

[0021] 상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

발명의 효과

[0022] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 전자 전달층 및/또는 전자 버퍼층에 사용한 OLED 소자는 종래의 유기 전계 발광 화합물을 사용한 OLED 소자에 비해 발광 효율 면에서 상당히 개선된다. 이와 함께 또는 선택적으로 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물은 고휘도에서도 높은 효율을 유지하여 상당히 개선된 장수명을 가질 수 있으며, 이로써 고해상도에 대한 요구가 점점 높아지는 현 트렌드에 더욱 적합한 특성을 보일 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0023] 이하에서 본원을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본원의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안된다.

[0024] 본원은 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물, 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

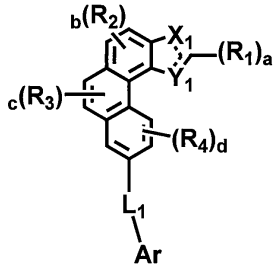
[0025] 본원에서 "유기 전계 발광 화합물"은 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 화합물을 의미하며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 재료층에 포함될 수 있다.

[0026] 본원에서 "유기 전계 발광 재료"는 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 재료를 의미하고, 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있으며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다. 예를 들면, 상기 유기 전계 발광 재료는 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료, 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료 등이 될 수 있다.

[0027] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

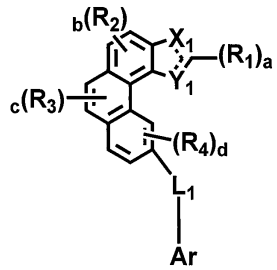
[0028] 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 하기 화학식 2 또는 3으로 표시될 수 있다.

[0029] [화학식 2]



[0030]

[0031] [화학식 3]

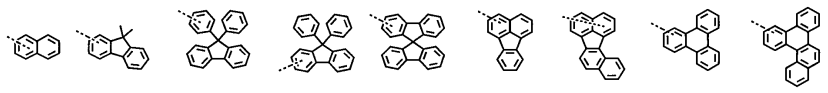


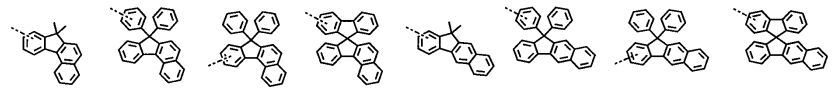
[0032]

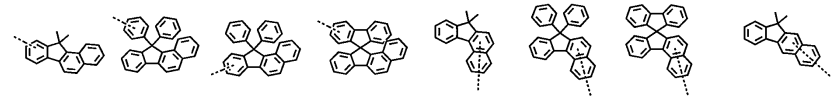
[0033] 상기 화학식 2 및 3에서, X_1, Y_1, Ar, L_1, R_1 내지 R_4, 및 a 내지 d는 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

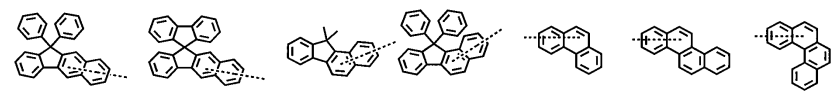
[0034] 상기 화학식 1 내지 3에서, X_1 및 Y_1은 각각 -N=, $-NR_5-$, -O- 또는 -S-이고, 여기서, X_1이 -N= 인 경우 Y_1은 $-NR_5-$, -O- 또는 -S-이고, X_1이 $-NR_5-$인 경우 Y_1은 -N=, -O- 또는 -S-이고, 단, X_1과 Y_1이 모두 -O-인 경우, 모두 -S-인 경우, 및 X_1과 Y_1 중 하나가 -O-이고, 다른 하나가 -S-인 경우는 제외한다. 본원의 일 양태에 따르면, X_1 및 Y_1 중 어느 하나는 -N=이고, 다른 하나는 $-NR_5-$, -O- 또는 -S-일 수 있으며; X_1이 -N=이고, Y_1이 $-NR_5-$, -O- 또는 -S-일 수 있다. 또한, 본원의 다른 일 양태에 따르면, X_1 및 Y_1 중 어느 하나는 -N=이고, 다른 하나는 -O- 또는 -S-일 수 있으며; X_1이 -N=이고, Y_1은 -O- 또는 -S-일 수 있다.

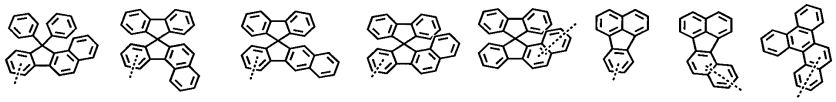
[0035] 상기 화학식 1 내지 3에서, Ar 은 치환 또는 비치환된 (C10-C60)아릴이고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C10-C30)아릴이고, 더욱 바람직하게는 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C10-C30)아릴이고, 여기서, 상기 아릴은 융합된 환일 수 있으며, 스피로 구조를 포함할 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, Ar은 하기의 그룹으로부터 선택되는 어느 하나를 포함할 수 있고, 여기서, 점선(---)은 L_1과의 연결 위치를 나타낸다.

[0036] 

[0037] 

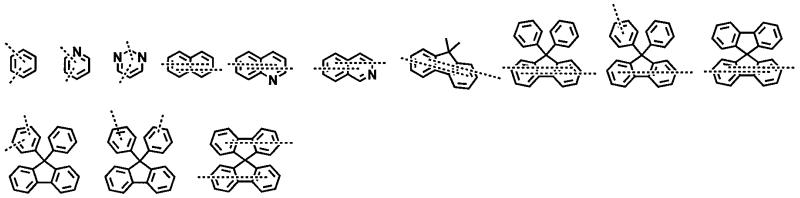
[0038] 

[0039] 

[0040] 

[0041] 또한, 본원의 다른 일 양태에 따르면, Ar은 나프틸, 페난트레닐, 벤조페난트레닐, 크라이세닐, 플루오란테닐, 트리페닐레닐, 디메틸플루오레닐, 디페닐플루오레닐, 디메틸벤조플루오레닐, 디페닐벤조플루오레닐, 스피로[플루오렌-플루오렌]일, 또는 스피로[플루오렌-벤조플루오렌]일일 수 있다.

[0042] 상기 화학식 1 내지 3에서, L_1은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고, 바람직하게는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴렌이고, 더욱 바람직하게는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴렌이고, 더더욱 바람직하게는 단일 결합, 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이다. 본원의 일 양태에 따르면, L_1은 단일 결합이거나, 하기의 그룹으로부터 선택되는 어느 하나를 포함할 수 있다.

[0043] 

[0044] 상기의 그룹에서, 점선(---)은 기본 골격 및 Ar과의 연결 위치를 각각 나타낸다. 상기 기본 골격은 본원의 화학식 1 내지 3에서 질소, 산소 및 황 중 하나 이상을 포함하는 5원 고리와 페난트렌이 융합된 구조의 17원 헤테로고리를 의미한다. 또한, 본원의 일 양태에 따르면, L_1은 화학식 1의 기본 골격의 사이드 벤젠 고리에 연결된다.

[0045] 또한, 본원의 다른 일 양태에 따르면, L_1은 단일 결합, 페닐렌, 나프틸렌, 피리디닐렌, 피리미디닐렌, 또는 퀴놀리닐렌일 수 있다.

[0046] 상기 화학식 1 내지 3에서, R_1 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴이고, 더욱 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴이고, 더더욱 바람직하게는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 비치환된 질소 함유 (5-18원)헤테로아릴이다. 본원의 일 양태에 따르면, R_1 은 비치환된 페닐, 비치환된 피리디닐, 비치환된 퀴놀리닐, 또는 비치환된 이소퀴놀리닐일 수 있다.

[0047] 상기 화학식 1 내지 3에서, R_2 내지 R_5는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C25)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C25)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C20)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C20)알킬(C6-C25)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬디(C6-C25)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C25)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C1-C20)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C25)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬(C6-C25)아릴아미노이다. 본원의 일 양태에 따르면, R_2 내지 R_4는 모두 수소일 수 있다.

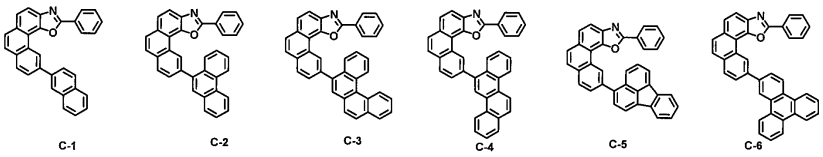
[0048] 상기 화학식 1 내지 3에서, a 내지 c는 각각 독립적으로 1 또는 2이고, d는 1 내지 3의 정수이다. 본원의 일 양태에 따르면, a는 1일 수 있다. 또한, 본원의 다른 일 양태에 따르면, b 내지 d는 모두 1일 수 있다.

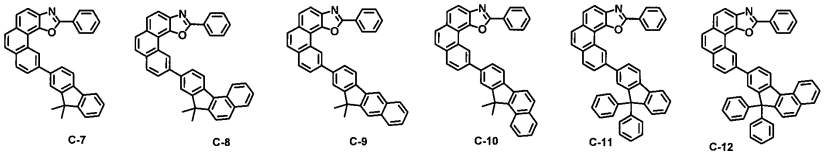
[0049] 상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다. 본원의 일 양태에 따르면 상기 헤테로아릴은 하나 이상의 질소를 포함할 수 있다.

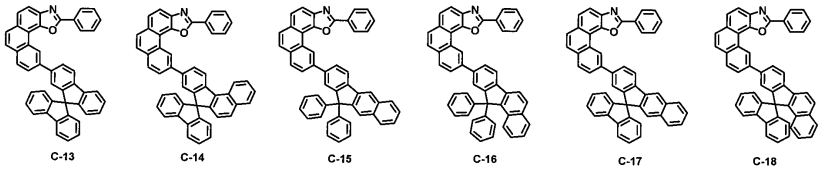
[0050] 본원에 기재되어 있는 “(C1-C30)알킬”은 쇄를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 20개인 것이 바람직하고, 1 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 3급-부틸 등이 있다. 본원에서 “(C3-C30)시클로알킬”은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 여기에서 탄소수가 3 내지 20개인 것이 바람직하고, 3 내지 7개인 것이 더 바람직하다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 “(C6-C30)아릴(렌)”은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 부분적으로 포화될 수도 있으며, 스피로 구조를 포함한다. 상기 환 골격 탄소수는 6 내지 20개인 것이 바람직하고, 6 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 디페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디페닐벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 벤조페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 스피로[플루오렌-플루오렌]일, 스피로[플루오렌-벤조플루오렌]일 등이 있다. 본원에서 “(3-30원)헤테로아릴(렌)”은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미하고, 여기에서 환 골격 원자수가 5 내지 25개인 것이 바람직하다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴기 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 벤조인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 벤조카바졸릴, 디벤조카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴 등의 융합환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 “할로겐”은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

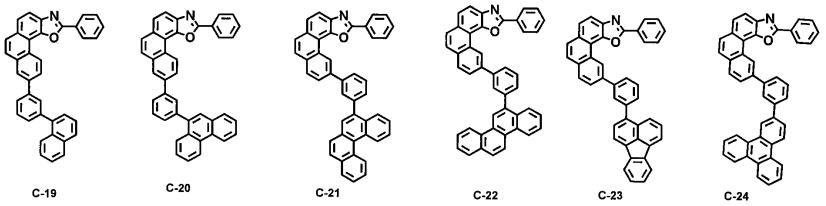
[0051] 또한 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환" 이라는 기재에서 “치환”은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 상기 화학식 1 내지 3의 Ar, L_1, 및 R_1 내지 R_5에서 치환된 알킬, 치환된 아릴(렌), 치환된 헤테로아릴(렌), 치환된 시클로알킬, 치환된 알콕시, 치환된 트리알킬실릴, 치환된 디알킬아릴실릴, 치환된 알킬디아릴실릴, 치환된 트리아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- 알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- 아릴아미노, 치환된 알킬아릴아미노, 및 치환된 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소; 할로겐; 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; (C1-C6)알킬 및/또는 (C6-C30)아릴로 치환되거나 비치환된 (3-30원)헤테로아릴; 시아노, (3-30원)헤테로아릴 및/또는 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노로 치환되거나 비치환된 (C6-C30)아릴; 트리(C1-C30)알킬실릴; 트리(C6-C30)아릴실릴; 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴; (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴; 아미노; 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노; 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬카보닐; (C1-C30)알콕시카보닐; (C6-C30)아릴카보닐; 디(C6-C30)아릴보로닐; 디(C1-C30)알킬보로닐; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐; (C6-C30)아르(C1-C30)알킬; 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상의 것을 의미하고, 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬; (C6-C30)아릴; (3-30원)헤테로아릴; 및 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 것이 바람직하며, 예를 들면, 비치환된 메틸, 또는 비치환된 페닐일 수 있다.

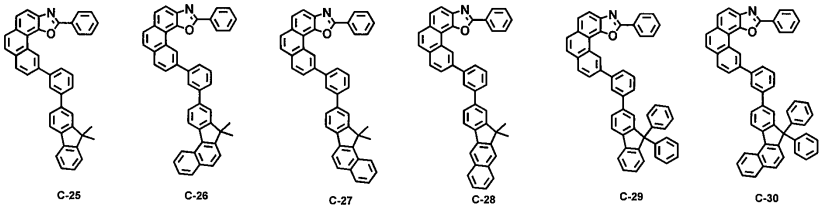
[0052] 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

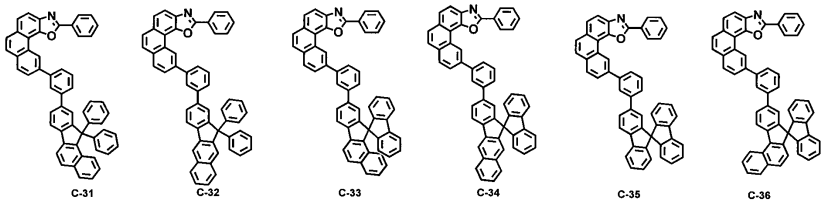
[0053] 

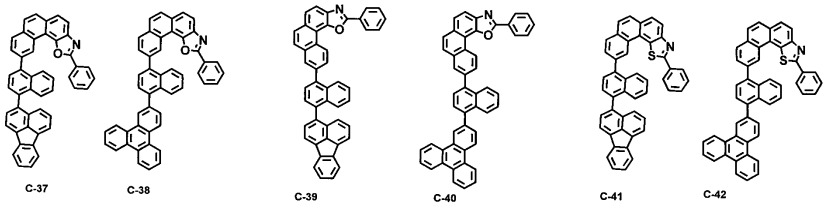
[0054] 

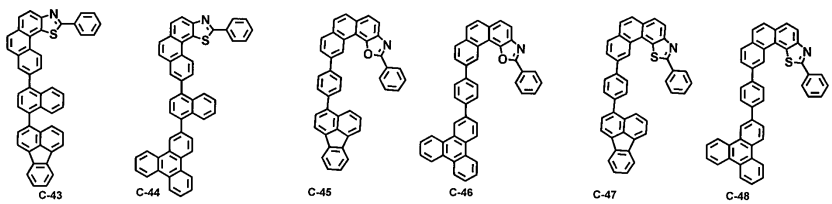
[0055] 

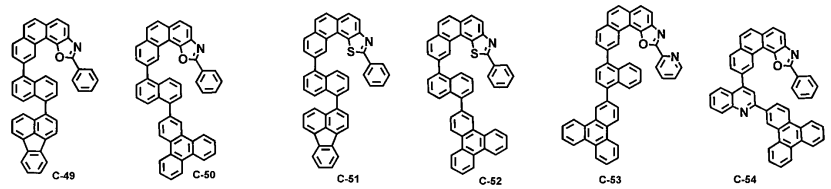
[0056] 

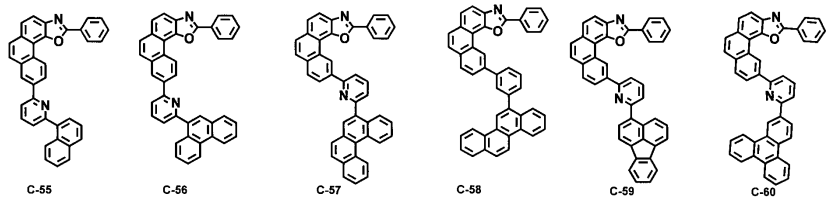
[0057] 

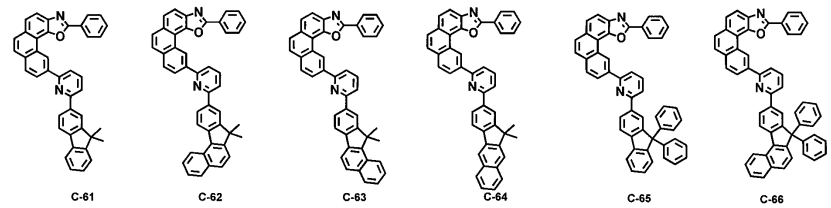
[0058] 

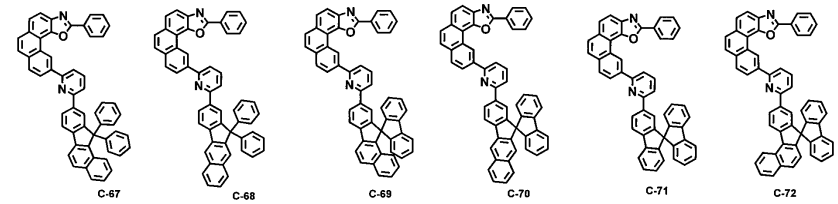
[0059] 

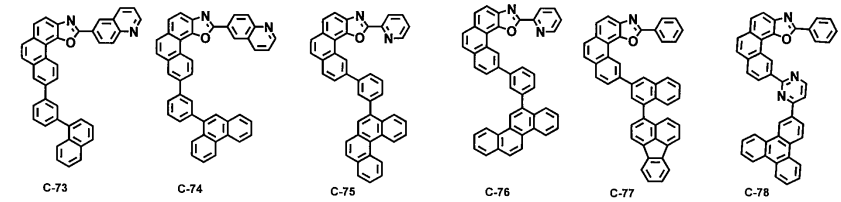
[0060] 

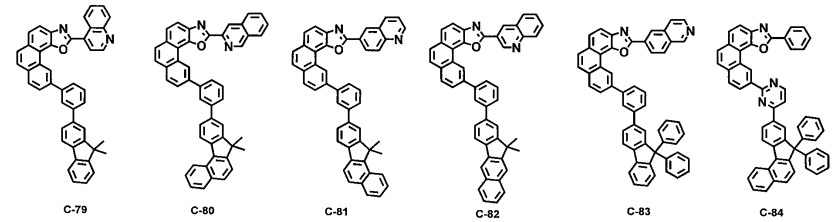
[0061] 

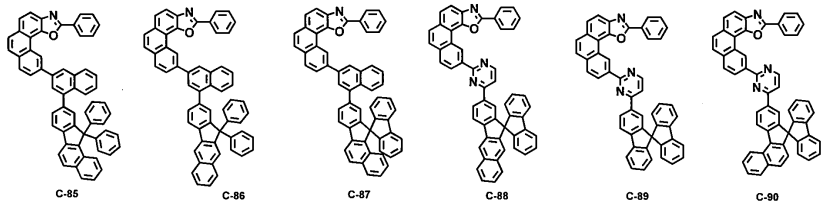
[0062] 

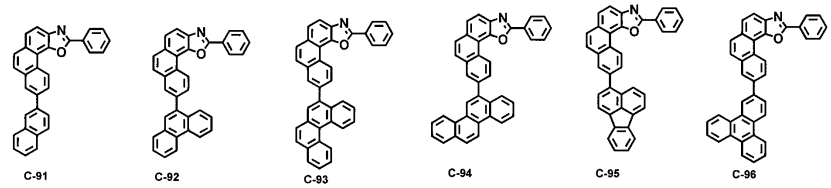
[0063] 

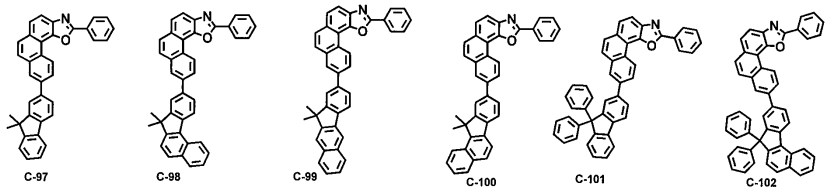
[0064] 

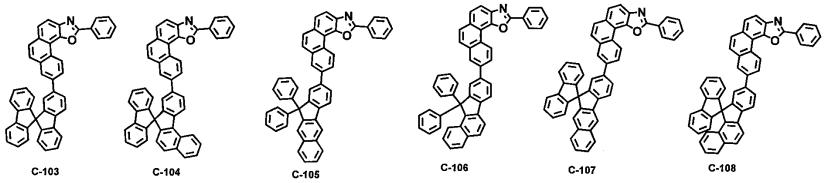
[0065] 

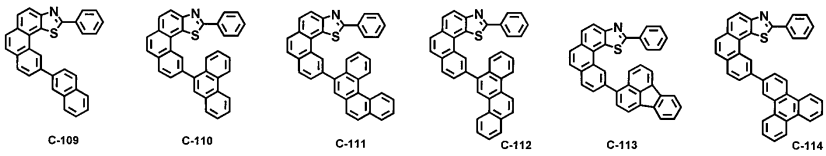
[0066] 

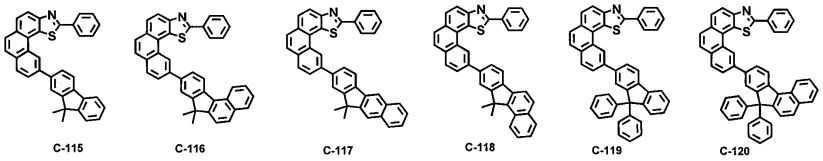
[0067] 

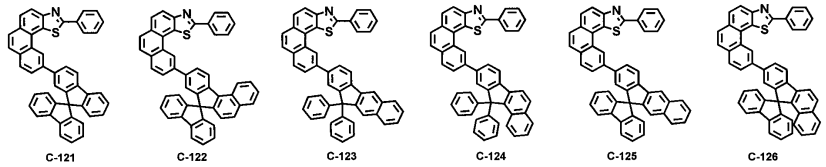
[0068] 

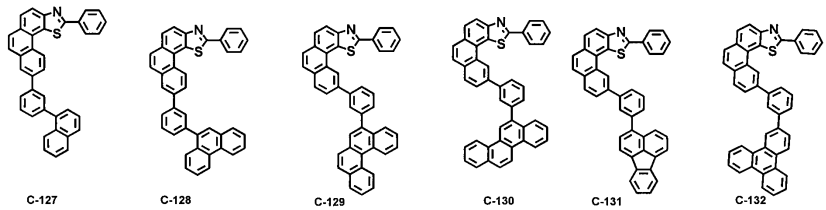
[0069] 

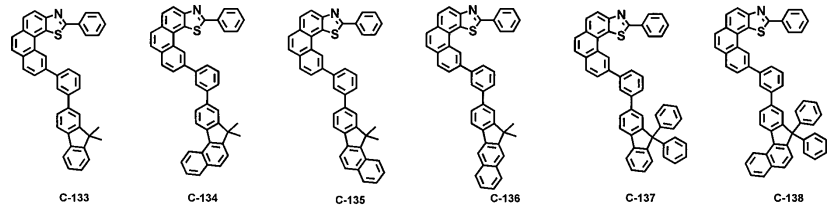
[0070] 

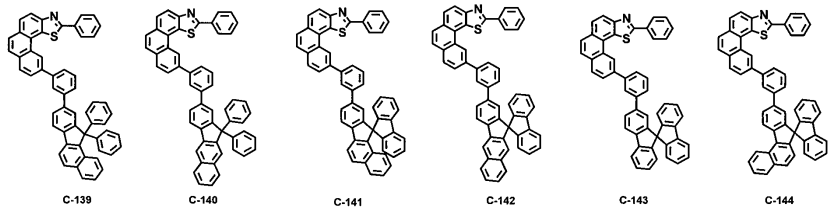
[0071] 

[0072] 

[0073] 

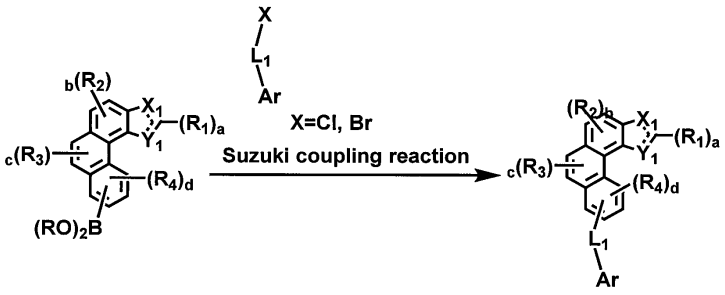
[0074] 

[0075] 

[0076] 

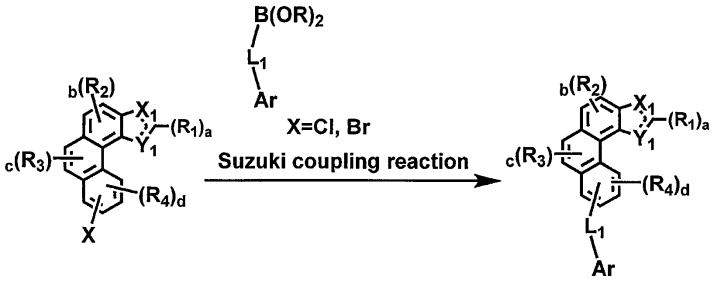
[0077] 본원에 따른 화학식 1의 화합물은 하기 반응식 1 또는 2에 나타난 바와 같이 제조될 수 있으나, 이에 한정되지 않으며, 당업자에게 공지된 합성 방법으로도 제조될 수 있다.

[0078] [반응식 1]



[0079]

[0080] [반응식 2]



[0081]

[0082] 상기 반응식 1 및 2에서, X_1, Y_1, Ar, L_1, R_1 내지 R_4, 및 a 내지 d는 화학식 1에서의 정의와 같다.

[0083] 본원은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료, 및 상기 유기 전계 발광 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0084] 상기 유기 전계 발광 재료는 본원의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0085] 본원에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 포함한다. 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 1족, 2족, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란탄계열 금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속, 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체화합물을 추가로 포함할 수도 있다.

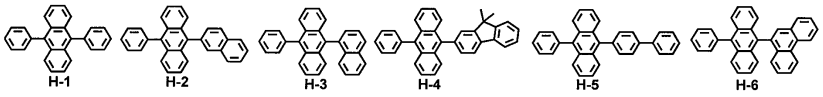
[0086] 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 양극(애노드)이고, 다른 하나는 음극(캐소드)일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 버퍼층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, 본원의 유기 전계 발광 소자는 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 상기 나열된 유기물 층 중 하나 이상에 포함할 수 있다. 또한, 본원의 다른 일 양태에 따르면, 본원의 유기 전계 발광 소자는 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 전자 전달층 및 전자 버퍼층 중 하나 이상에 포함할 수 있다.

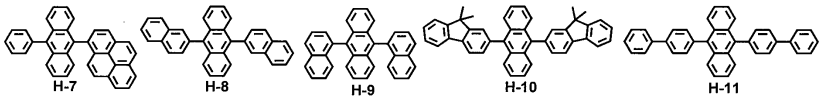
[0087] 양극과 발광층 사이에 정공 주입층, 정공 전달층 또는 전자 차단층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 정공 주입층은 양극에서 정공 전달층 또는 전자 차단층으로의 정공 주입 장벽(또는 정공 주입 전압)을 낮출 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 전자 차단층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 발광층으로부터의 전자의 오버플로우를 차단하여 엑시톤을 발광층 내에 가두어 발광 누수를 방지할 수 있다. 정공 전달층 또는 전자 차단층은 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다.

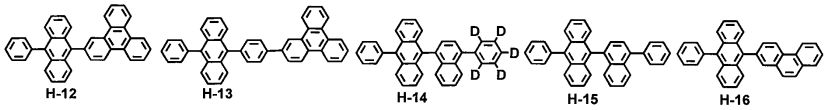
[0088] 발광층과 음극 사이에 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층 또는 전자 주입층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 전자 버퍼층은 전자주입을 조절하고 발광층과 전자 주입층 사이의 계면 특성을 향상시킬 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공 차단층 또는 전자 전달층도 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다.

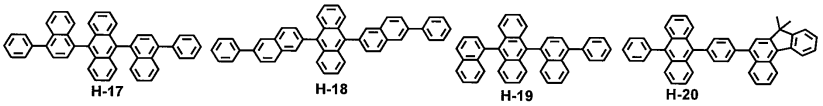
[0089] 상기 발광 보조층은 애노드와 발광층 사이에 위치하거나, 캐소드와 발광층 사이에 위치하는 층으로서, 발광 보조층이 상기 애노드와 발광층 사이에 위치할 경우, 정공의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 전자의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있고, 발광 보조층이 캐소드와 발광층 사이에 위치할 경우, 전자의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 정공의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있다. 또한, 상기 정공 보조층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도(또는 주입 속도)를 원활하게 하거나 블록킹하는 효과를 나타낼 수 있으며, 이에 따라 전하 밸런스(charge balance)를 조절할 수 있다. 유기 전계 발광 소자가 정공 전달층을 2 층 이상 포함할 경우, 추가로 포함되는 정공 전달층은 정공 보조층 또는 전자 차단층의 용도로 사용될 수 있다. 상기 발광 보조층, 상기 정공 보조층, 또는 상기 전자 차단층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및/또는 수명의 개선 효과를 가질 수 있다.

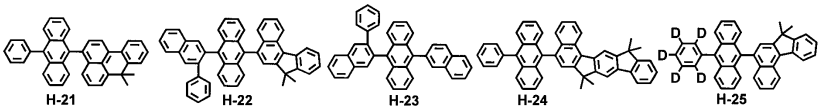
[0090] 본원의 발광층은 호스트 화합물 및 도판트 화합물을 사용하여 형성할 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, 호스트 화합물은 하기의 화합물일 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

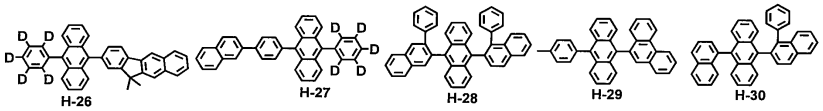
[0091] 

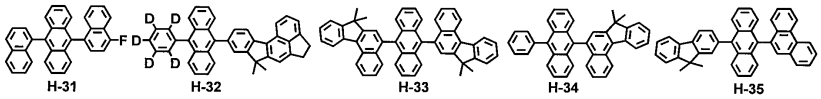
[0092] 

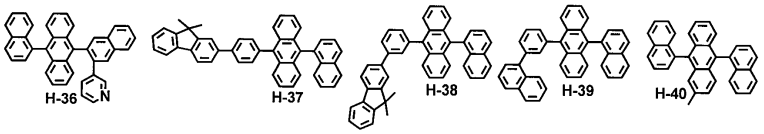
[0093] 

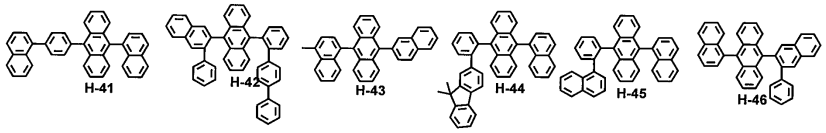
[0094] 

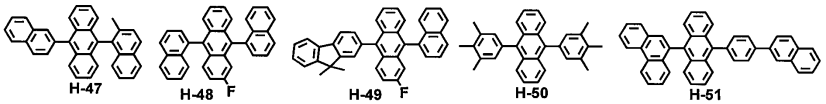
[0095] 

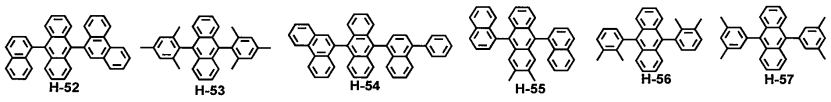
[0096] 

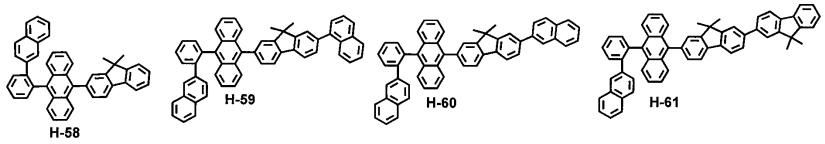
[0097] 

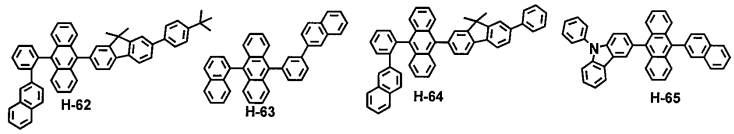
[0098] 

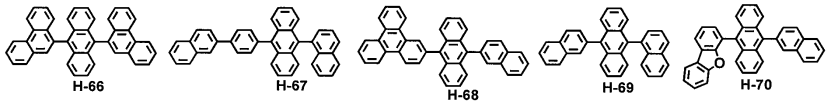
[0099] 

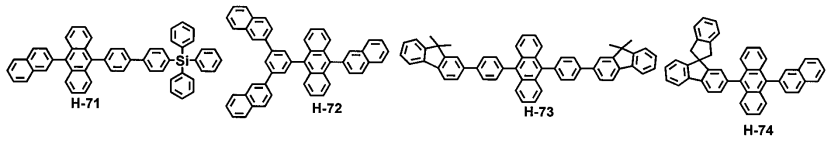
[0100] 

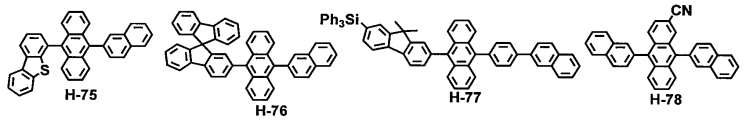
[0101] 

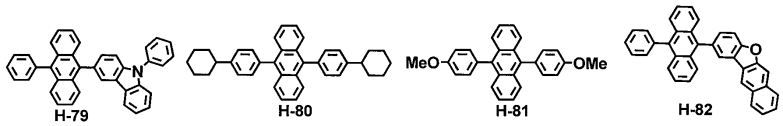
[0102] 

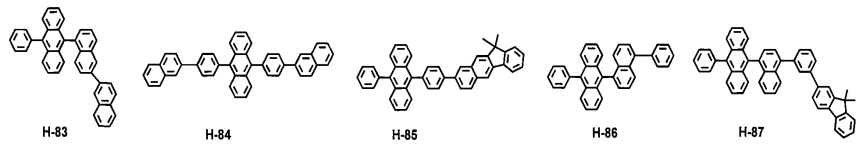
[0103] 

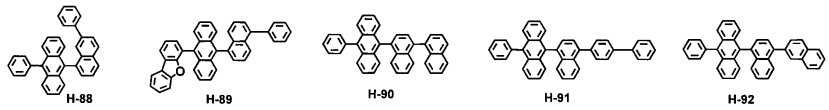
[0104] 

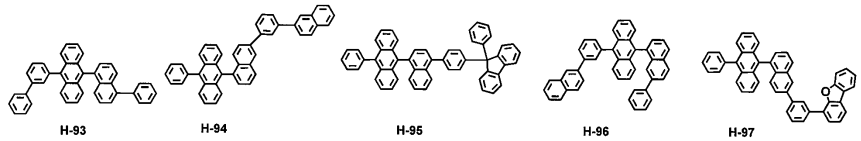
[0105] 

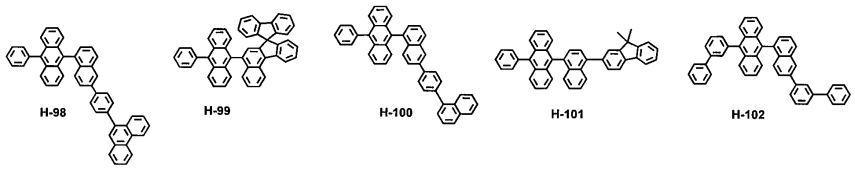
[0106] 

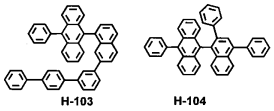
[0107] 

[0108] 

[0109] 

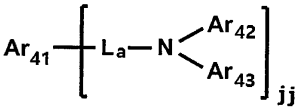
[0110] 

[0111] 

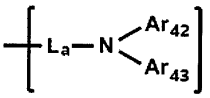
[0112] 

[0113] 본원에 사용되는 도판트는 인광성 도판트 화합물 또는 형광성 도판트 화합물일 수 있다. 구체적으로, 상기 도판트 화합물은 형광성 도판트 화합물일 수 있고, 예를 들어, 하기 화학식 40으로 표시되는 축합 다환 아민 유도체일 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[0114] [화학식 40]

[0115] 

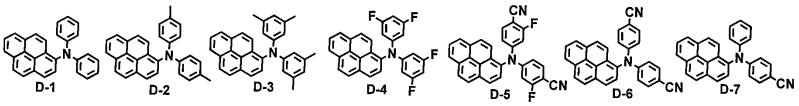
[0116] 상기 화학식 40에서,

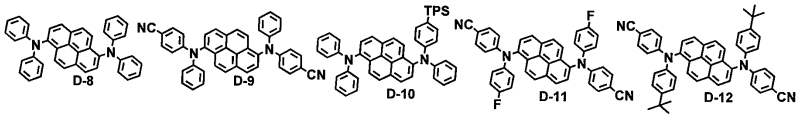
[0117] Ar_{41}은 치환 또는 비치환된 (C6-C50)아릴 또는 스티릴이고; L_a은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴렌이며; Ar_{42} 및 Ar_{43}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 결합하여 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고; jj는 1 또는 2이며, jj가 2인 경우 각각의 

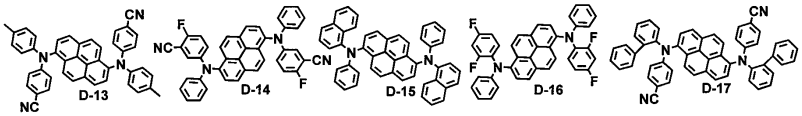
는 동일하거나 상이할 수 있다.

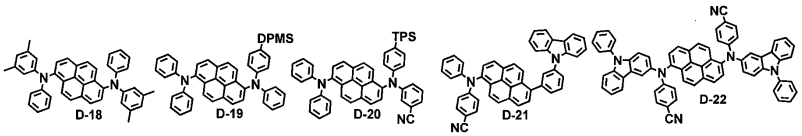
[0118] Ar_{41}에서 바람직한 아릴기로는 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 플루오레닐, 치환 또는 비치환된 안트릴, 치환 또는 비치환된 피레닐, 치환 또는 비치환된 크리세닐, 치환 또는 비치환된 벤조플루오레닐, 및 스피로[플루오렌-벤조플루오렌]일 등이 있다.

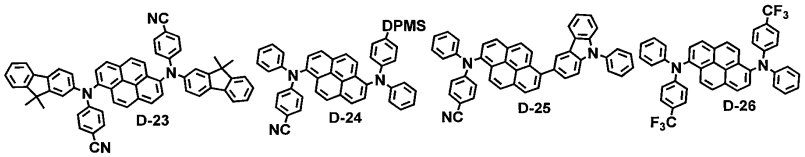
[0119] 상기 화학식 40의 화합물은 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

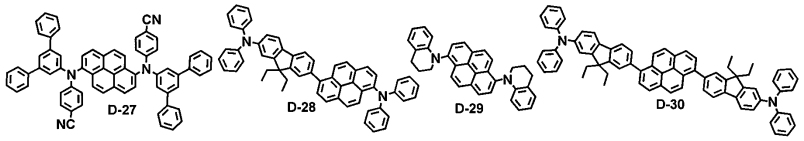
[0120] 

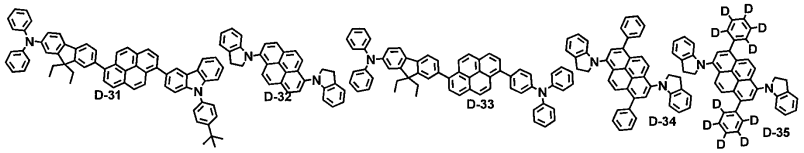
[0121] 

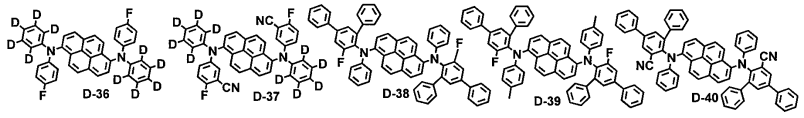
[0122] 

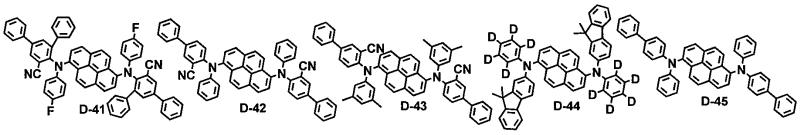
[0123] 

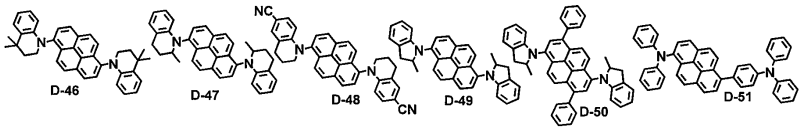
[0124] 

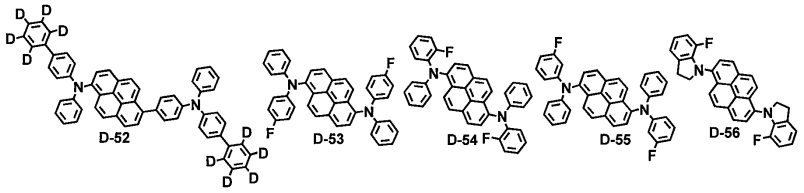
[0125] 

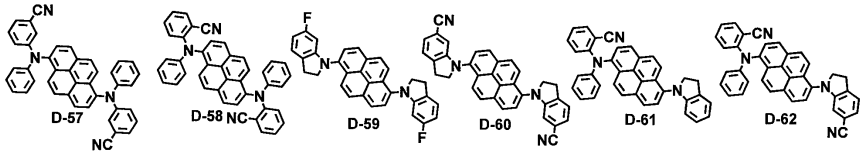
[0126] 

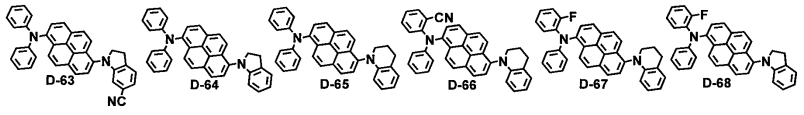
[0127] 

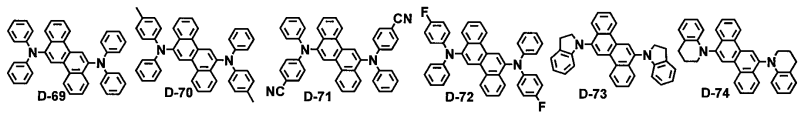
[0128] 

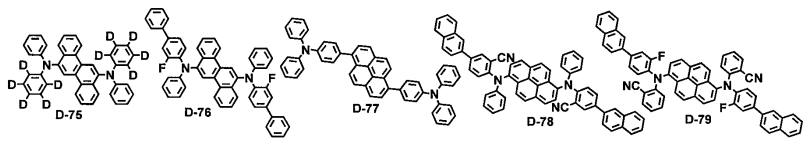
[0129] 

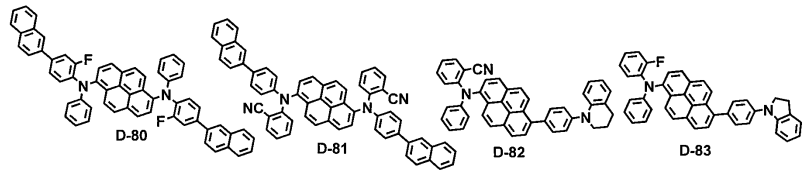
[0130] 

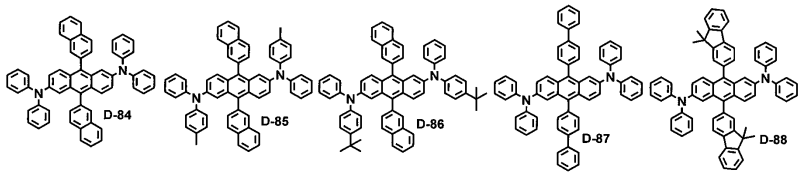
[0131] 

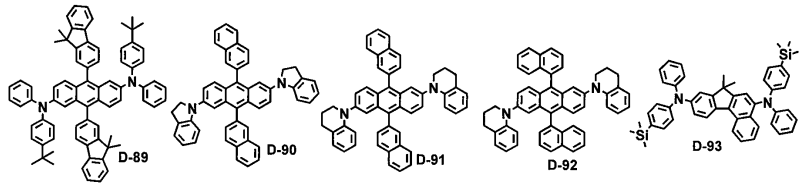
[0132] 

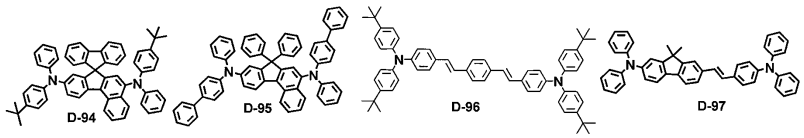
[0133] 

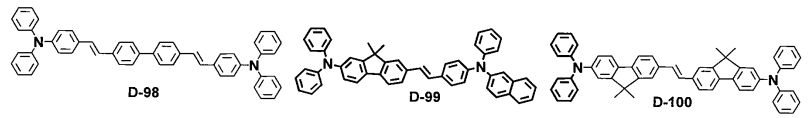
[0134] 

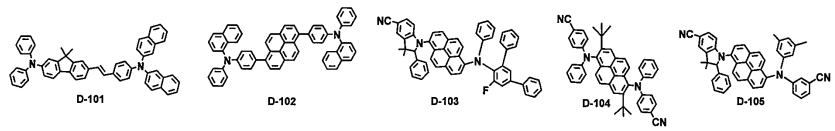
[0135] 

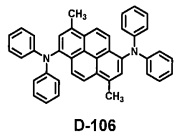
[0136] 

[0137] 

[0138] 

[0139] 

[0140] 

[0141] 

[0142] 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측 표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 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 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 음극 표면에 할로겐화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 소자의 구동 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 $SiO_X(1\leq X\leq 2)$, $AlO_X(1\leq X\leq 1.5)$, SiON, SiAlON 등이 있고, 할로겐화 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.

[0143] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 수송 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 수송 화합물과 산화성 도판트의 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 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도판트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하 생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진 백

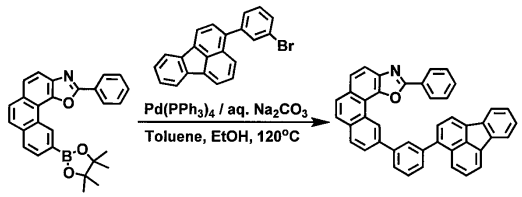
색 발광의 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

[0144] 본원의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막법이나, 잉크젯 프린팅(ink jet printing), 노즐 프린팅(nozzle printing), 슬롯 코팅(slot coating), 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

[0145] 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.

[0146] 이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 대표 화합물 또는 중간체 화합물의 합성 방법을 예로 들어 본원에 따른 화합물의 제조방법을 설명한다.

[0147] **[실시예 1] 화합물 C-23의 합성**



A C-23

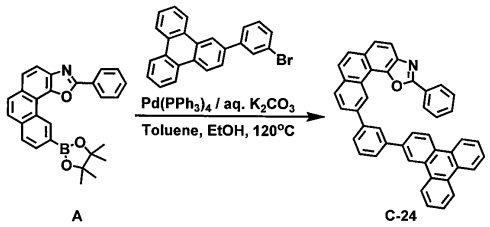
[0148]

[0149] 반응용기에 화합물 **A** (3.5g, 8 mmol), 3-(3-브로모페닐)플루오란텐 (2.5 g, 7 mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀) 팔라듐 (0.4 g, 0.4 mmol), 탄산나트륨 (2.5 g, 18 mmol), 톨루엔 36 mL, 및 에탄올 9 mL을 넣고, 증류수 9 mL를 첨가한 후 120℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 세척하고 에틸 아세테이트로 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **C-23** (3.4 g, 수율: 85%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P.
C-23	571.68	390nm	457nm	209℃

[0150]

[0151] **[실시예 2] 화합물 C-24의 합성**



A C-24

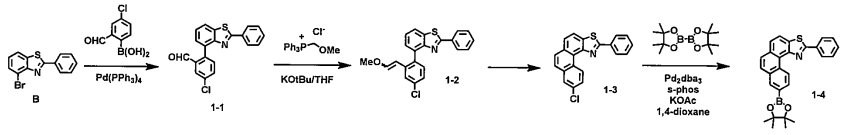
[0152]

[0153] 반응용기에 화합물 **A** (3.3g, 8 mmol), 2-(3-브로모페닐)트라이페닐렌 (3 g, 8 mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀) 팔라듐 (0.3 g, 0.3 mmol), 탄산칼륨 (2.7 g, 20 mmol), 톨루엔 40 mL 및 에탄올 10 mL를 넣고, 증류수 10 mL를 첨가한 후, 120℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 세척하고 에틸 아세테이트로 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **C-24** (2.5 g, 수율: 53%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P.
C-24	597.72	395nm	481nm	287℃

[0154]

[0155] **[실시예 3] 화합물 1-4의 합성**



[0156]

[0157] 1) 화합물 **1-1**의 제조

[0158] 반응용기에 화합물 **B** (CAS: 1044146-16-8, 36 g, 124 mmol), 4-클로로-2-포밀벤젠보론산 (25.2 g, 136 mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 (5.7 g, 5.0 mmol), 탄산나트륨 (33 g, 150 mmol), 톨루엔 600 mL, 에탄올 150 mL 및 증류수 150 mL를 첨가한 후 140℃에서 3 시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 석출된 고체를 증류수와 메탄올로 세척하였다. 얻어진 화합물 **1-1**은 추가 정제 없이 다음 반응에 사용되었다.

[0159] 2) 화합물 **1-2**의 제조

[0160] 반응용기에 화합물 **1-1** (45.6 g, 130 mmol), (메톡시메틸)트라이페닐포스포늄 클로라이드 (74.3 g, 217 mmol) 및 테트라하이드로퓨란 1500 mL을 넣고 반응 혼합물을 5분간 교반한 후 포타슘 t-부톡사이드 (1M in THF, 220 mL)를 0℃ 조건 하에서 천천히 적가하였다. 천천히 온도를 올려 3 시간 동안 상온에서 교반하였다. 반응 용액에 증류수를 넣어 반응을 종료하고, 에틸아세테이트로 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **1-2** (48 g, 수율: 97 %)를 얻었다.

[0161] 3) 화합물 **1-3**의 제조

[0162] 반응용기에 화합물 **1-2** (44.8 g, 119 mmol), Eaton's reagent (4.5 mL) 및 클로로벤젠 600 mL을 넣고 2시간 동안 환류하였다. 반응이 종료되면 상온으로 냉각한 후 메틸렌클로라이드(MC)로 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **1-3** (36.3 g, 수율: 89 %)를 얻었다.

[0163] 4) 화합물 **1-4**의 제조

[0164] 반응용기에 화합물 **1-3** (10 g, 29 mmol), 비스(피나콜레이토)다이보란 (8.8 g, 34.8 mmol), 트리스(다이벤질리딘아세톤)다이팔라듐 (1.3 g, 1.45 mmol), 2-다이사이클로헥실포스피노-2',6'-다이메톡시바이페닐(s-phos) (1.2 g, 2.9 mmol), 아세트산 칼륨 (8.5 g, 87 mmol) 및 1,4-다이옥산 150 mL를 첨가한 후 140℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 에틸 아세테이트로 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **1-4** (10.4 g, 수율: 82 %)를 얻었다.

[0165] 실시예 1 또는 2에서, 화합물 **A** 대신에 화합물 **1-4**를 이용하여 본원에 따른 화합물을 합성할 수 있다.

[0166] 이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 발광 특성을 설명한다.

[0167] **[비교예 1] 본원에 따르지 않는 청색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조**

[0168] 본원에 따르지 않는 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스 (지오마텍사 제조) 기판 상의 투명 전극 ITO 박막(10Ω/□)을 아세톤 및 이소프로필알코올을 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 **HI-1**을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-7} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 60 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HI-2**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HT-1**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 20 nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HT-2**를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착하였다. 정공 주입층과 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 화합물 **H-34**을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 **D-38**을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 2 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 20 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 상기 발광층 위에 전자 전달 재료로서 한쪽 셀에 **ETL-1**을 넣고 다른 한쪽 셀에 **EIL-1**을 각각 넣은 후, 50:50의 중량비로 증발시켜 35 nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서 전자 주입층으로 화합물 **EIL-1**을 전자 전달층 위에 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 상기 전자 주입층 위에 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다. 재료 별로 각 화합물은 10^{-6} torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0169] **[소자 제조예 1] 본원에 따르는 청색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조**

[0170] 전자 버퍼 재료로서 화합물 **C-23**을 상기 발광층 위에 5 nm 증착하여 전자 버퍼층을 증착한 후, 전자 전달층으로 화합물 **ETL-1** 및 화합물 **EIL-1**을 각각 50:50의 중량비로 상기 전자 버퍼층 위에 30 nm 증착한 것을 제외하고는, 비교예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0171] 이상과 같이 제조된 비교예 1 및 소자 제조예 1 의 유기 전계 발광 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 구동 전압, 효율 및 색좌표의 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[0172] **[표 1]**

	전자 버퍼 재료	구동 전압 (V)	효율 (cd/A)	색좌표 (x)	색좌표 (y)
비교예 1	-	3.8	5.9	0.139	0.092
소자 제조예 1	C-23	3.6	6.6	0.139	0.091

[0173]

[0174] **[비교예 2] 본원에 따르지 않는 청색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조**

[0175] 호스트로서 화합물 **H-34** 대신에 **H-15**를 사용하여 발광층을 증착하고, 상기 발광층 위에 전자 전달 재료로서 한쪽 셀에 화합물 **ETL-2**를 넣고 증발시켜 35 nm 두께의 전자전달층을 증착한 것을 제외하고는, 비교예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0176] **[비교예 3] 본원에 따르지 않는 청색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조**

[0177] 호스트로서 화합물 **H-34** 대신에 **H-15**를 사용하고, 전자 전달 재료로서 화합물 **ETL-1** 대신에 화합물 **ETL-3**을 사용한 것을 제외하고는, 비교예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0178] **[소자 제조예 2 및 3] 본원에 따르는 청색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조**

[0179] 소자 제조예 2 및 3에서는 화합물 **C-23** 및 화합물 **C-24**를 각각 화합물 **EIL-1**과 50:50 의 중량비로 30 nm 증착한 것을 제외하고는, 비교예 3과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하고 평가하였다.

[0180] 이상과 같이 제조된 비교예 2 및 3, 및 소자 제조예 2 및 3의 유기 전계 발광 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 구동 전압, 효율 및 색좌표의 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0181] **[표 2]**

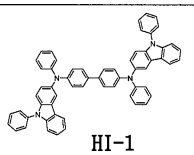
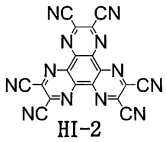
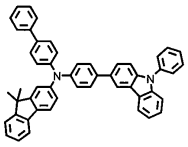
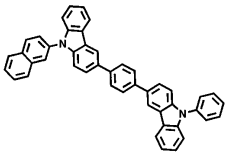
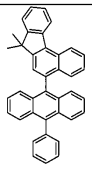
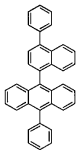
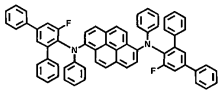
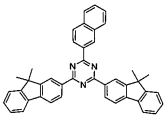
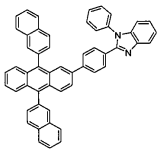
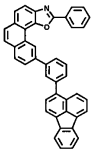
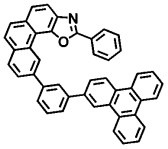
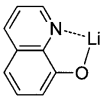
	전자 전달 재료	구동전압 (V)	발광효율 (cd/A)	색좌표 (x)	색좌표 (y)
비교예 2	ETL-2	5.2	4.0	0.146	0.105
비교예 3	ETL-3:EIL-1	4.3	5.5	0.141	0.092
소자 제조예 2	C-23:EIL-1	4.3	6.1	0.140	0.088
소자 제조예 3	C-24:EIL-1	5.4	6.4	0.140	0.090

[0182]

[0183] 상기 표 1 및 2로부터, 본원의 화합물을 전자 버퍼층 또는 전자 전달층에 사용한 소자 제조예 1 내지 3은 비교예 1 내지 3에 비해, 높은 발광 효율을 나타냄을 확인할 수 있다. 특히, 본원의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 고효율이 요구되는 플렉시블 디스플레이, 조명 및 자동차용 디스플레이 등에 적합할 수 있다.

[0185] 상기 비교예들 및 상기 소자 제조예들에 사용된 화합물을 하기 표 3에 나타내었다.

[0187] [표 3]

정공 주입층/ 정공 전달층	 HI-1  HI-2  HT-1  HT-2
발광층	 H-34  H-15  D-38
전자버퍼층/ 전자전달층/ 전자 주입층	 ETL-1  ETL-2  ETL-3  C-23  C-24  EIL-1

[0188]