

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국



(43) 국제공개일
2010년 6월 24일 (24.06.2010)

PCT

(10) 국제공개번호
WO 2010/071362 A2

- (51) 국제특허분류: C07C 13/58 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2009/007548
- (22) 국제출원일: 2009년 12월 16일 (16.12.2009)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보: 10-2008-0127849 2008년 12월 16일 (16.12.2008) KR
- (71) 출원인 (US 을(를) 제외한 모든 지정국에 대하여): 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION) [KR/KR]; 서울특별시 중구 을지로 6가 18-12번지, 100-730 Seoul (KR).
- (72) 발명자: 곽
- (75) 발명자/출원인 (US 에 한하여): 홍진석 (HONG, Jin-Seok) [KR/KR]; 경기도 수원시 장안구 연무동 61-164 302호, 440-807 Gyeonggi-do (KR). 김경수 (KIM, Ky-oung-Soo) [KR/KR]; 대전광역시 유성구 하기동 송림마을 305동 1905호, 305-759 Daejeon (KR). 김태형 (KIM, Tae-Hyung) [KR/KR]; 경기도 용인시 수지구 상현동 만현마을 현대아이파크 501동 703호, 448-526 Gyeonggi-do (KR). 김영은 (KIM, Yeong-Eun) [KR/KR]; 경기도 수원시 영통구 영통동 청명마을 3단지 대우 A 303동 1203호, 443-737 Gyeonggi-do (KR). 신창주 (SHIN, Chang Ju) [KR/KR]; 경기도 용인시 수지구 풍덕천 2동 1148-10번지 303호, 448-556 Gyeonggi-do (KR).

- (74) 대리인: 함현경 (HAM, Hyun-Kyung); 서울특별시 중구 충무로 3가 60-1번지 극동빌딩 14층, 100-705 Seoul (KR).
- (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, RO, RS, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
- (84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), 유럽 (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

- 국제조사보고서 없이 공개하며 보고서 접수 후 이를 별도 공개함 (규칙 48.2(g))



WO 2010/071362 A2

(54) Title: DEUTERATED ANTHRACENE DERIVATIVE, AND ORGANIC LIGHT-EMITTING DEVICE COMPRISING SAME

(54) 발명의 명칭 : 중수소화된 안트라센 유도체 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

(57) Abstract: The present invention relates to a deuterated anthracene derivative and to an organic light-emitting device using the same. More particularly, the present invention relates to a deuterated anthracene derivative in which an anthracene core with superior element characteristics is substituted by an aryl group, and one or more heavy hydrogen is contained in a compound. The present invention also relates to an organic light-emitting device which uses said derivative to achieve improved efficiency and improved characteristics such as driving voltage, lifespan, etc.

(57) 요약서: 본 발명은 중수소화된 안트라센 유도체 및 이를 이용한 유기 발광 소자에 관한 것으로, 보다 구체적으로 소자 특성이 우수한 안트라센 코어에 아릴기가 치환되어 있고 또한 화합물 내에 하나 이상의 중수소가 포함된 것이 특징인 중수소화된 안트라센 유도체 및 상기 유도체를 이용하여 효율, 구동 전압 및 수명 등의 특성이 향상된 유기 발광 소자에 관한 것이다.

명세서

발명의 명칭: 중수소화된 안트라센 유도체 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

기술분야

- [1] 본 발명은 중수소화된 안트라센 유도체 및 이를 이용한 유기 발광 소자에 관한 것으로, 보다 구체적으로 소자 특성이 우수한 안트라센 코어에 아릴기가 치환되어 있고 또한 화합물 내에 하나 이상의 중수소가 포함된 것이 특징인 중수소화된 안트라센 유도체 및 상기 유도체를 이용하여 효율, 구동 전압 및 수명 등의 특성이 향상된 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기 에너지를 빛 에너지로 전환시켜 주는 현상을 말한다. 이러한 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 통상 양극과 음극 및 이들 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함 할 수 있다.
- [3] 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 각각 유기물층으로 주입되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.
- [4] 유기 발광 소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료, 정공 주입 재료, 정공 수송 재료, 전자 수송 재료, 전자 주입 재료 등으로 분류될 수 있다.
- [5] 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다. 그 원리는 발광층을 주로 구성하는 호스트보다 에너지 대역 간극이 작고 발광 효율이 우수한 도판트를 발광층에 소량 혼합하면, 호스트에서 발생한 엑시톤이 도판트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이때 호스트의 파장이 도판트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도판트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.
- [6] 전술한 유기 발광 소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 즉 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 발광 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 한다. 그러나, 아직까지 안정하고 효율적인 유기 발광 소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서

새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다. 또한, 종래 발광 물질들은 재료수명과 발광효율 면에서 개선의 필요성이 크며, 장시간 사용 후 발광의 휘도 및 열화에 의한 내구성이 불충분하여 이에 대한 개선의 여지가 많이 남아 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

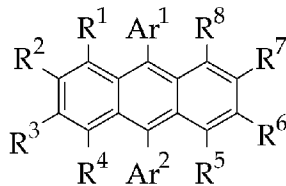
- [7] 상기 문제점을 해결 하고자, 본 발명은 발광효율, 휘도, 전력효율, 열적 안정성 및 소자 수명을 향상시킬 수 있는 신규 발광 물질 및 이를 이용한 유기 발광 소자를 제공하고자 한다.

과제 해결 수단

- [8] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 제공한다.

- [9] [화학식 1]

- [10]



- [11] 화학식 1에서, Ar¹ 및 Ar²는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 중수소, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₁~C₄₀의 알콕시기, C₁~C₄₀의 아미노기, C₅~C₄₀의 아릴기 및 C₄~C₄₀의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 1 이상의 작용기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 방향족고리기이며;

- [12] R¹ 내지 R⁸은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₅~C₄₀의 아릴기, C₄~C₄₀의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₅~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬아미노기, C₅~C₄₀의 아릴아미노기, C₆~C₄₀의 아릴알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기 및 C₂~C₄₀의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되며;

- [13] 이때, 상기 Ar¹ 및 Ar²의 방향족 고리에 치환되는 치환기 및 R¹ 내지 R⁸ 중 적어도 하나는 중수소이다.

- [14] 또한, 본 발명은 (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서,

- [15] 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나의 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 포함하는 것이 특징인 유기 발광 소자를 제공한다.

- [16] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 포함하는 유기물층은 발광층인 것이 바람직하다.

발명의 실시를 위한 형태

- [17] 본 발명에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체는 소자 특성이 우수한 안트라센 코어의 9번 및 10번 탄소에 방향족고리기가 치환되어

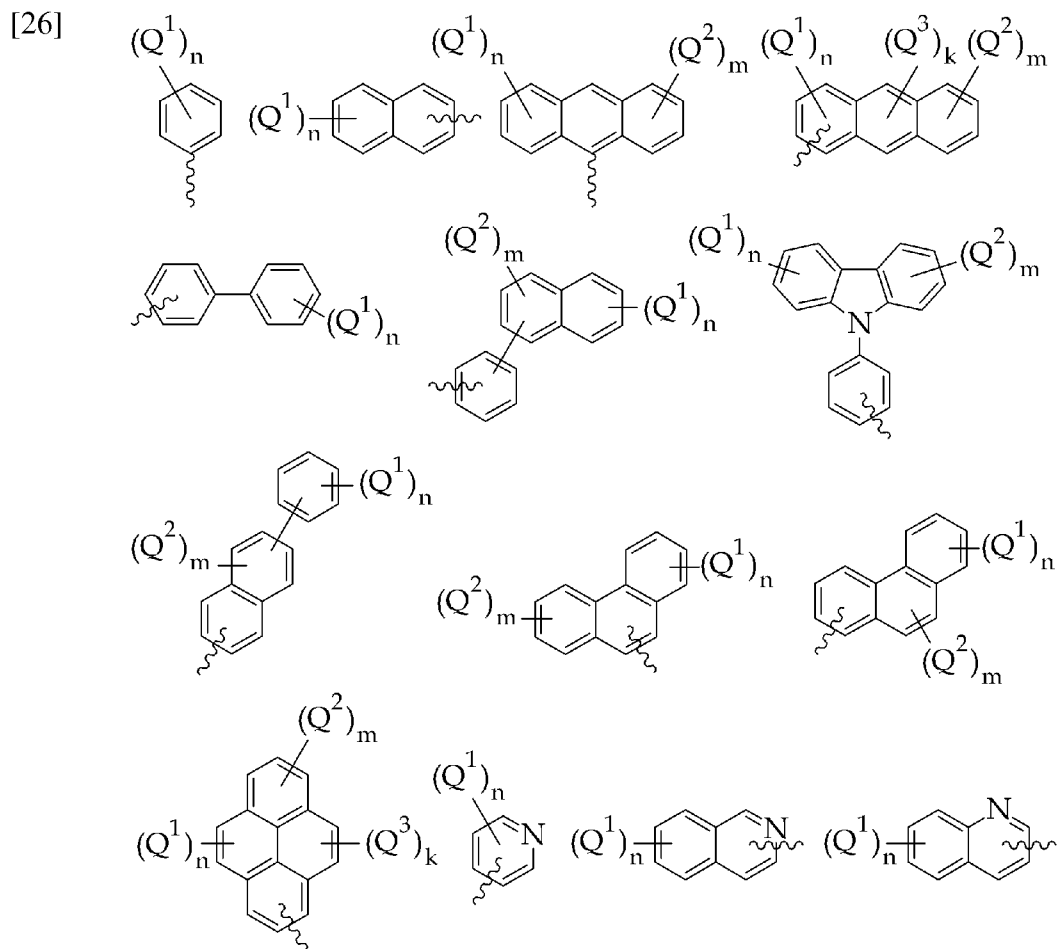
있고 안트라센 코어의 나머지 탄소에 알킬기, 아릴기 등의 작용기가 치환될 수 있으며, 또한 안트라센 유도체 내에 반드시 하나 이상의 중수소가 포함된 것이 특징이다.

- [18] 유기 발광 소자용 화합물 내의 수소를 중수소로 치환하는 경우 대부분의 화학적 성질은 거의 변화되지 않는다. 그러나 중수소는 원자량이 수소의 두 배이므로 화합물의 수소를 중수소로 치환하는 경우에 중요한 물리적 성질이 변할 수 있다. 즉, 무거운 원자는 위치에너지 준위(potential energy level)가 낮으므로, 더 낮은 바닥 상태 에너지(zero point energy)를 갖게 되고, 무거운 원자일수록 진동 모드가 작아지므로 진동 에너지 준위 역시 더 낮아진다. 따라서 화합물 중에 존재하는 수소 원자가 중수소로 치환되는 경우에 분자간 반데르발스 힘이 감소하고, 분자간 진동에 의한 충돌에 기인하는 양자 효율 감소가 방지될 수 있게 된다.
- [19] 본 발명은 위와 같은 인식에 기초하여 완성된 것으로서, 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체가 유기 발광 소자의 발광층 재료로서 사용될 때 상기 소자의 발광 효율, 휘도, 전력 효율, 구동전압, 열 안정성 및 수명 등을 향상시킬 수 있다.
- [20] 본 발명에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 상세하게 설명하면 다음과 같다.
- [21] 본 발명에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체에서, Ar^1 및 Ar^2 는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 $C_6 \sim C_{40}$ 의 방향족고리기이다. 바람직하게는, 상기 Ar^1 내지 Ar^2 의 방향족 고리기는 각각 독립적으로 페닐, 바이페닐(biphenyl), 터페닐(terphenyl), 나프틸(naphthyl), 나프탈레닐페닐, 안트라센닐(anthracenyl), 페난트릴(phenanthryl), 피레닐(pyrenyl), 플루오레닐(fluorenyl), 카바졸일(carbazolyl), N-카바졸페닐, 퀴놀리닐(quinolinyl), 및 이소퀴놀리닐(isoquinolinyl)로 이루어진 군에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [22] 또한, 상기 Ar^1 및 Ar^2 의 방향족 고리기는 각각 독립적으로 중수소, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 아미노기, $C_5 \sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4 \sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 1 이상의 작용기로 치환 또는 비치환될 수 있다. 또한, 상기 Ar^1 및 Ar^2 의 방향족 고리기에 치환되는 작용기는 인접하는 기와 지방족, 방향족, 헤테로지방족 또는 헤테로방향족의 축합 고리, 또는 스피로 결합을 형성하거나 형성하지 않을 수 있다.
- [23] 또한, 상기 Ar^1 및 Ar^2 의 방향족 고리기에 치환될 수 있는 상기 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 아미노기, $C_5 \sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4 \sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의

헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 1 이상의 치환기로 추가적으로 치환되거나 또는 비치환될 수 있다.

[24] 예를 들면, 상기 Ar^1 및 Ar^2 의 방향족 고리기는 각각 독립적으로 하기 화학식 2의 구조식으로 이루어진 군에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[25] [화학식 2]



[27] 이때, 상기 화학식 2의 $(Q^1)_n$, $(Q^2)_m$ 및 $(Q^3)_k$ 에서 n , m 및 k 의 범위는 각각 1 내지 3이다.

[28] 또한, 상기 화학식 2에서 Q^1 내지 Q^3 은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로,

[29] 수소;

[30] 중수소;

[31] 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기;

[32] 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진

- 군에서 선택되는 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기;
- [33] 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기;
- [34] 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기;
- [35] 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 아미노기;
- [36] 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기; 및
- [37] 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.
- [38] 또한, 상기 화학식 2에서 Q^1 내지 Q^3 는 각 방향족 고리기에 존재하는 수소(H)의 수만큼 1개 이상일 수 있고, 이때, 복수의 Q^1 은 서로 같거나 상이하며, 복수의 Q^2 는 서로 같거나 상이하고, 복수의 Q^3 또한 서로 같거나 상이할 수 있다. 한편, 복수의 Q^1 내지 복수의 Q^3 는 인접하는 기와 지방족, 방향족, 헤테로지방족 또는 헤테로방향족의 축합 고리, 또는 스피로 결합을 형성하거나 형성하지 않을 수 있다.
- [39] 본 발명에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체에서, R^1 내지 R^8 은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기, $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬아미노기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴아미노기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기 및 $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.
- [40] 또한, 상기 R^1 내지 R^8 은 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의

헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 1 이상의 치환기로 추가적으로 치환되거나 비치환될 수 있다.

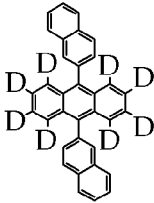
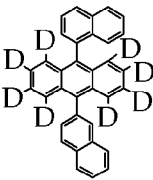
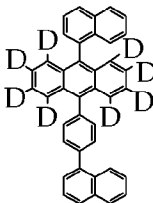
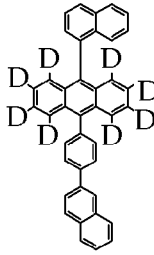
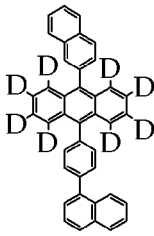
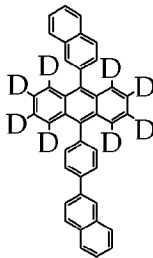
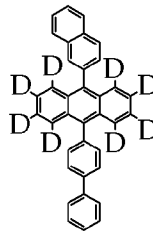
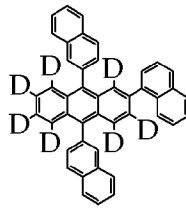
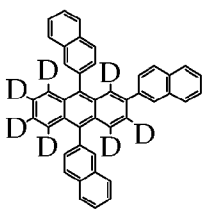
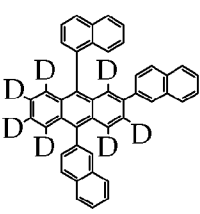
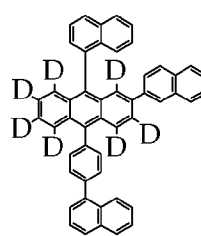
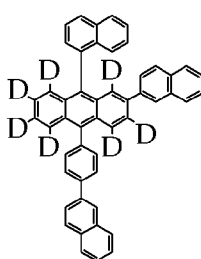
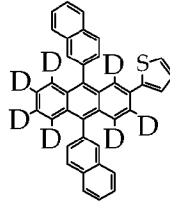
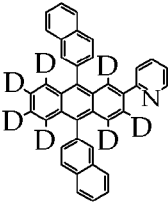
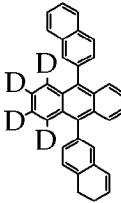
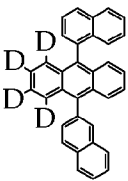
- [41] 또한, 상기 R^1 내지 R^8 은 인접하는 기와 지방족의 축합 고리, 방향족의 축합 고리, 헤테로지방족의 축합 고리, 헤테로방향족의 축합 고리, 또는 스피로 결합을 형성하거나 형성하지 않을 수 있다.

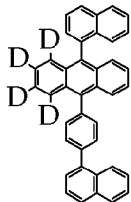
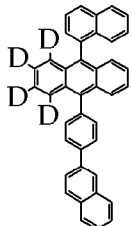
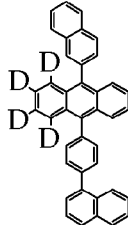
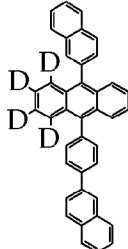
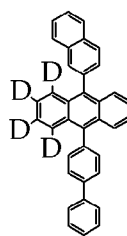
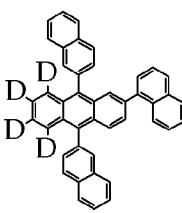
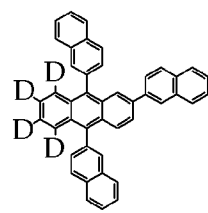
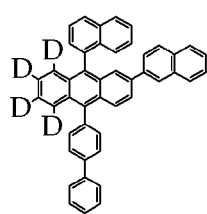
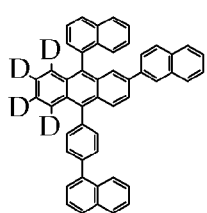
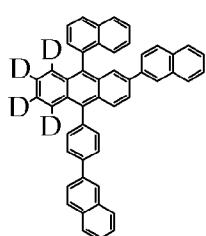
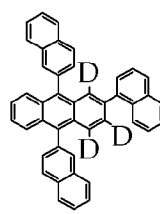
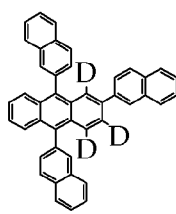
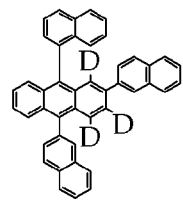
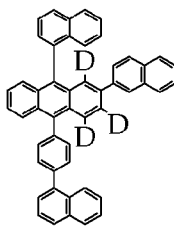
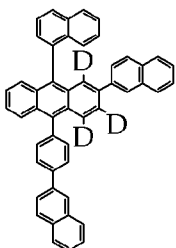
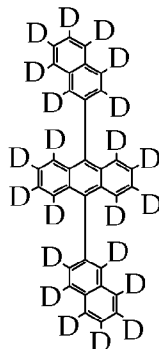
[42]

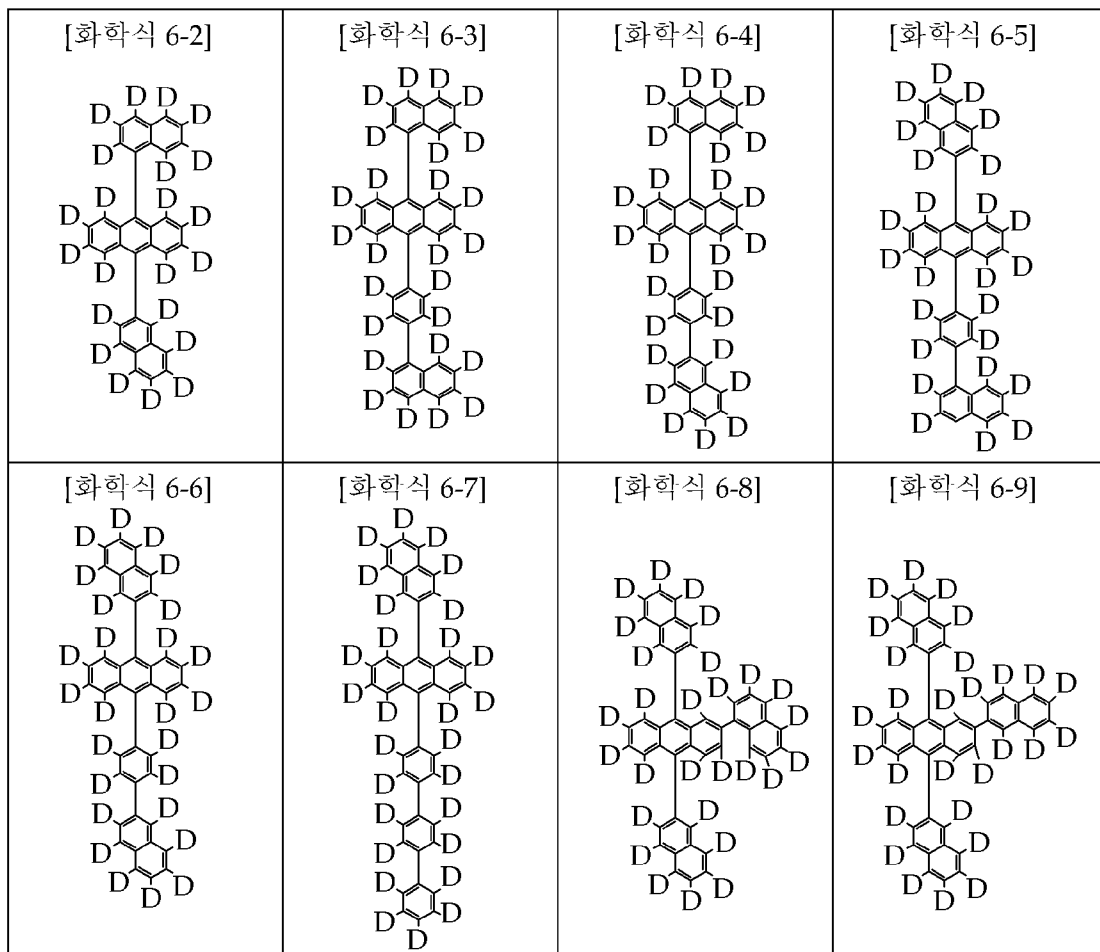
- [43] 한편, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체는 상기 R^1 내지 R^8 중 적어도 하나 이상이 중수소(그룹 I)이거나, 상기 Ar^1 및 Ar^2 의 방향족 고리에 치환되는 치환기 및 상기 R^1 내지 R^8 가 모두 중수소(그룹 II)일 수 있는데, 그에 따른 대표적인 예들은 하기와 같다.

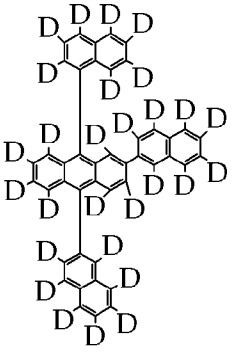
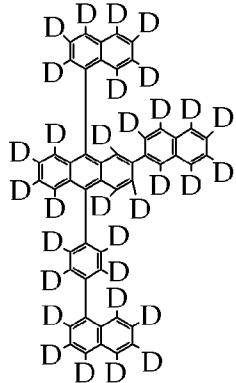
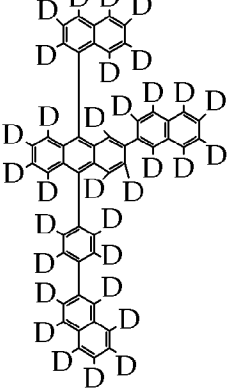
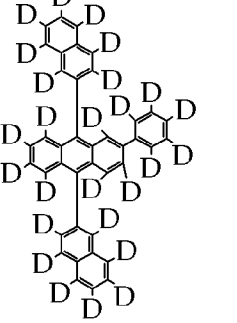
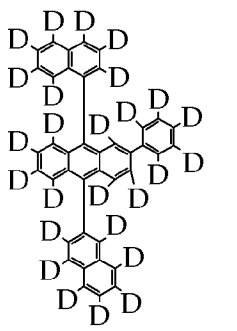
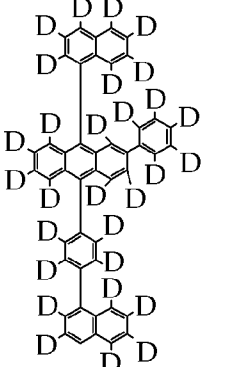
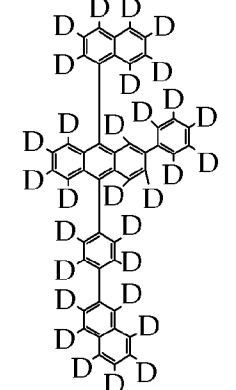
- [44] 즉, 하기 [화학식 3-1] 내지 [화학식 5-5]는 R^1 내지 R^8 중 적어도 하나 이상이 중수소인 그룹 I의 예이며, 하기 [화학식 6-1] 내지 [화학식 6-16]은 Ar^1 및 Ar^2 의 방향족 고리에 치환되는 치환기 및 R^1 내지 R^8 가 모두 중수소인 그룹 II의 예이나, 본 발명의 화합물(안트라센 유도체)이 이들에 한정되는 것은 아니다.

[45]

[화학식 3-1] 	[화학식 3-2] 	[화학식 3-3] 	[화학식 3-4] 
[화학식 3-5] 	[화학식 3-6] 	[화학식 3-7] 	[화학식 3-8] 
[화학식 3-9] 	[화학식 3-10] 	[화학식 3-11] 	[화학식 3-12] 
[화학식 3-13] 	[화학식 3-14] 	[화학식 4-1] 	[화학식 4-2] 

[화학식 4-3] 	[화학식 4-4] 	[화학식 4-5] 	[화학식 4-6] 
[화학식 4-7] 	[화학식 4-8] 	[화학식 4-9] 	[화학식 4-10] 
[화학식 4-11] 	[화학식 4-12] 	[화학식 5-1] 	[화학식 5-2] 
[화학식 5-3] 	[화학식 5-4] 	[화학식 5-5] 	[화학식 6-1] 



[화학식 6-10] 	[화학식 6-11] 	[화학식 6-12] 	[화학식 6-13] 
[화학식 6-14] 	[화학식 6-15] 	[화학식 6-16] 	

- [49] 본 발명의 다른 측면은 상기한 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 포함하는 유기 발광층에 관한 것이며, 본 발명의 또 다른 측면에 따르면 이러한 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.
- [50] 구체적으로, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나의 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 포함하는 것이 특징이다.
- [51] 바람직하게는, 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체는 발광층 물질로서 유기 발광 소자에 포함될 수 있고, 이 경우 유기 발광 소자는 발광효율, 휘도, 전력효율, 열적 안정성 및 소자 수명이 향상될 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 포함하는 유기물층은 발광층인 것이 바람직하다.
- [52] 즉, 본 발명에 따른 유기 발광 소자에 포함되는 유기물층 중 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 호스트 재료로 포함할 수 있는 것이다. 이와 같이 발광층의 호스트 재료로 안정적인 에너지레벨을 가지고 있는 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 사용할 경우

전자 수송 능력이 증가되어 전공과 전자가 발광층에서 더 좋은 결합을 이루기 때문에 발광효율이 우수할 뿐만 아니라 휘도, 전력효율, 열적 안정성 및 수명 특성 또한 향상된 유기 발광 소자를 제공할 수 있다.

[53] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자에서, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 포함하는 유기물층 이외의 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 및/또는 전자수송층일 수 있다.

[54] 본 발명에 따른 유기 발광 소자 구조의 비제한적인 예를 들면, 기판, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 것일 수 있으며, 상기 전자 수송층 위에는 전자 주입층이 위치할 수도 있다.

[55] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 전술한 바와 같이 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조뿐만 아니라, 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입될 수 있다.

[56] 본 발명에 따른 유기 발광 소자에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 포함하는 상기 유기물층은 통상의 진공증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이들에만 한정되지 않는다.

[57] 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상을 본 발명의 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법을 이용하여 유기물층 및 전극을 형성함으로써 제조될 수 있다.

[58] 예컨대, 기판으로는 실리콘 웨이퍼, 석영 또는 유리판, 금속판, 플라스틱 필름이나 시트 등이 사용될 수 있다.

[59] 양극 물질로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 또는 카본블랙 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[60] 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[61] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 수송층 및 전자 주입층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당업계에 알려진 통상의 물질이 사용될 수 있다.

[62]

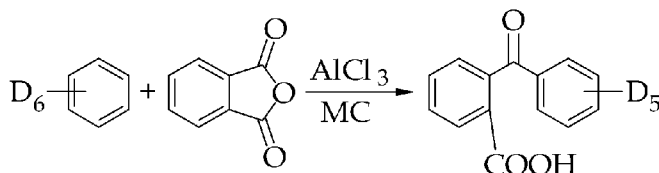
[63] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는

것은 아니다.

[64] **[합성예 1] 2-benzoylbenzoic acid (D5)**

[65] [반응식 1]

[66]



[67] Benzene(D6) 100g (1eq, 1.19mol)과 isobenzofuran-1,3-dione 212g (1.2eq 1.43mol)을 플라스크에 넣고, methylene chloride 1L를 첨가하여 녹였다. 0°C 하에서 AlCl₃ 190g (1.2eq 1.43mol)을 여러 번 나누어 첨가한 후, 반응 용액을 상온으로 올려 교반하였다. 반응 종료 후 반응 용액을 2L 증류수에 넣고 30분 가량 교반한 후 생성된 고체를 필터하였다. 나온 여액의 용매를 제거한 후, 생성된 고체를 hexane으로 씻어 주고 건조시켜 2-benzoylbenzoic acid(D5) 230g (수율=85%)를 얻었다.

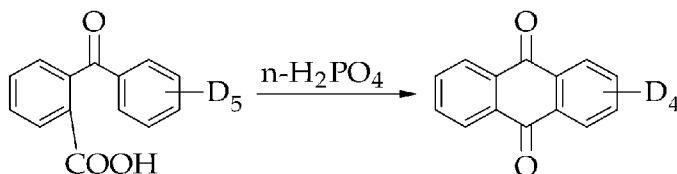
[68] ¹H-NMR: 12.55(s, 1H), 8.22(t, 1H), 8.11(t, 1H), 7.74(d, 1H), 7.52(d, 1H).

[69]

[70] **[합성예 2] anthracene-9,10-dione (D4)**

[71] [반응식 2]

[72]



[73] 합성예 1에서 얻은 2-benzoylbenzoic acid (D5) 20g(1eq, 0.09mol)을 플라스크에 넣고 polyphosphoric acid 50ml을 넣었다. 반응 용액을 2시간 동안 140°C로 가열하였고, 이어서 50°C 이하까지 식힌 후 증류수를 서서히 첨가하였다. 생성된 고체를 filter한 다음 소량의 methanol로 씻어 주고 건조시켜 anthracene-9,10-dione(D4) 16.6g (수율 = 81%)을 얻었다.

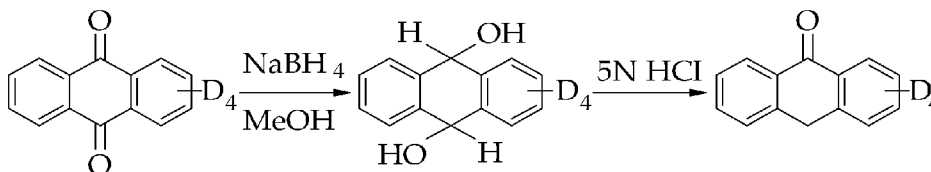
[74] ¹H-NMR: 8.16(t, 2H), 7.64(d, 2H).

[75]

[76] **[합성예 3] anthracen-9(10H)-one (D4)의 제조**

[77] [반응식 3]

[78]



[79] 합성예 2에서 얻은 anthracene-9,10-dione (D4) 4.96 g (1eq, 0.03mol)를 플라스크에 넣고 MeOH 400ml를 첨가하여 녹였다. 0°C에서 NaBH₄ 4.56g (4eq,

0.12mol)을 2회로 나누어 첨가한 후, 상온에서 17시간 교반하였다. 반응 종료 후 증류수 500ml에 반응액을 넣고, 생성된 고체를 filter한 후 증류수로 여러 번 세척해 주었다. 이 고체를 다시 플라스크에 넣고, 5N HCl 300ml를 넣은 후 12시간 동안 가열 교반하였다. 생성된 고체를 filter 한 다음 증류수로 여러 번 씻어 주고 건조하여 anthracen-9(10H)-one (D4) 11.38g (수율= 72%)을 얻었다.

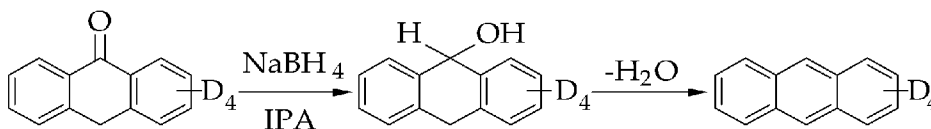
[80] GC-Mass (이론치: 196.23g/mol, 측정치: 196.2g/mol).

[81]

[82] **[합성예 4] anthracene (D4) 의 제조**

[83] [반응식 4]

[84]



[85] 합성예 3에서 얻은 anthracen-9(10H)-one (D4) 7g (1eq, 0.04mol)을 플라스크에 넣고 IPA 400ml를 첨가하여 녹였다. 0°C에서 NaBH₄ 5.92g (4eq, 0.16mol)을 여러 번에 나누어 첨가한 후, 상온에서 17시간 교반하였다. 반응 종료 후 증류수 500ml에 반응액을 넣고, 생성된 고체를 filter한 후 증류수로 여러 번 세척해 주었다. 이 고체를 컬럼크로마토 그래피를 통해 anthracene (D4) 5.46g (수율= 72%)을 얻었다.

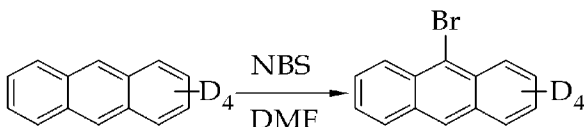
[86] ¹H-NMR: 8.43(s, 2H), 8.00(dd, 2H), 7.46(dd, 2H).

[87]

[88] **[합성예 5] 9-bromoanthracene (D4)의 제조**

[89] [반응식 5]

[90]



[91] 합성예 4에서 얻은 anthracene (D4) 10g (1eq, 0.06mol)과 NBS 11.9g (1.1eq, 0.07mol)을 플라스크에 넣고 DMF 150ml를 넣어 녹인 후, 2시간 교반 하였다. 반응 종료 후 반응액을 증류수 200ml에 넣었다. 생성된 고체를 filter한 다음, hexane으로 씻어 주고 건조하여 9-bromoanthracene (D4) 15.6g (수율=90.4%)을 얻었다.

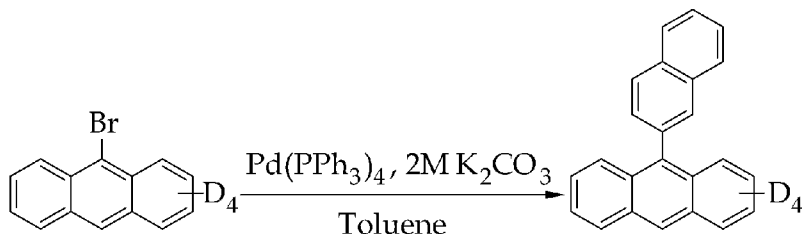
[92] GC-Mass (이론치: 261.13, 측정치: 261)

[93]

[94] **[합성예 6] 9-(naphthalen-2-yl)anthracene(D4) 의 제조**

[95] [반응식 6]

[96]



[97] 합성예 5에서 얻은 9-bromoanthracene (D4) 15g (1eq, 0.06mol)과 2-naphthalenboronic acid 13.76g (1.2eq, 0.08mol)을 플라스크에 넣고 toluene 150ml를 넣어 녹였다. 이어서 Pd(PPh₃)₄ 0.3g (0.02eq, 0.4mmol), K₂CO₃ 2M solution 60ml을 각각 첨가 후 12시간 동안 가열 교반하였다. 반응 종료 후 반응액을 celite를 통한 filter한 다음, MC로 추출하여 컬럼 크로마토그래피를 통하여 9-(naphthalen-2-yl)anthracene(D4) 15.2g (수율=82.4%)을 얻었다.

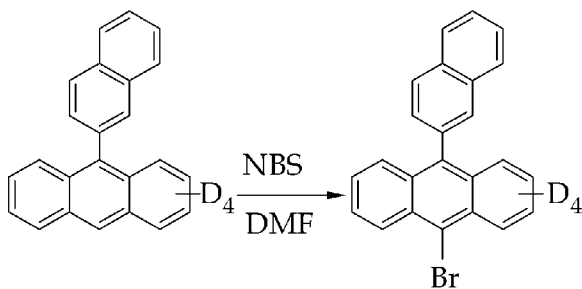
[98] ¹H-NMR: 8.59 (s, 1H), 8.06 (m, 4H), 7.68 (t, 1H), 7.38 (m, 4H), 7.16(m, 2H).

[99]

[100] **[합성예 7] 9-bromo-10-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4)의 제조**

[101] [반응식 7]

[102]



[103] 합성예 6에서 얻은 9-(naphthalen-2-yl)anthracene(D4) 15g (1eq, 0.05mol)과 NBS 10.2g (1.1eq, 0.06mol)을 플라스크에 넣고 DMF 150ml 넣어 녹인 후, 2시간 동안 교반 하였다. 반응 종료 후 반응액을 증류수 200ml에 넣고, 생성된 고체를 filter한 다음, hexane으로 씻어 주고 건조하여 9-bromoanthracene (D4) 18.92g (수율=90.4%)을 얻었다.

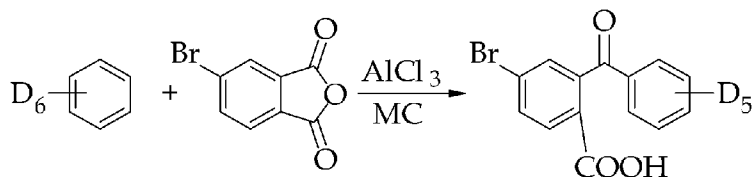
[104] GC-Mass (이론치: 387.28g/mol, 측정치: 382g/mol)

[105]

[106] **[합성예 8] 2-benzoyl-4-bromobenzoic acid (D5)**

[107] [반응식 8]

[108]



[109] 합성예 1에서 isobenzofuran-1,3-dione 대신에 5-bromoisobenzofuran-1,3-dione을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법으로 수행하여 2-benzoyl-4-bromobenzoic acid (D5) 9.12g (수율=90.4%)을 얻었다

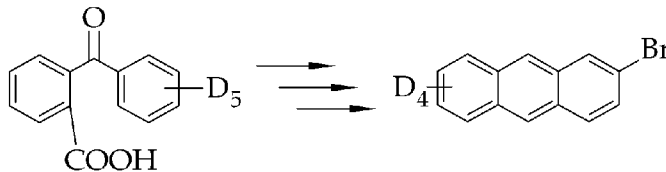
[110] $^1\text{H-NMR}$: 12.65(s, 1H), 8.26(t, 1H), 7.54(s, 1H), 7.42(d, 1H).

[111]

[112] **[합성예 9] 2-bromoanthracene (D4)**

[113] [반응식 9]

[114]



[115] 합성예 8에서 얻은 2-benzoyl-4-bromobenzoic acid (D5)를 합성예 2~4와 동일한 방법으로 수행하여 2-bromoanthracene (D4)를 합성하였다.

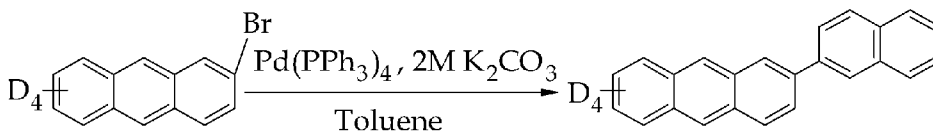
[116] $^1\text{H-NMR}$: 8.41(s, 1H), 8.32(s, 1H), 8.12(s, 1H), 7.92(d, 1H), 7.66(d, 1H).

[117]

[118] **[합성예 10] 2-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4)**

[119] [반응식 10]

[120]



[121] 합성예 9에서 얻은 2-bromoanthracene (D4) 10g (1eq, 0.04mol)과 2-naphthalenboronic acid 8.65g (1.2eq, 0.05mol)을 플라스크에 넣고 toluene 150ml를 넣어 녹였다. 여기에 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 0.3g (0.02eq, 0.4mmol), K_2CO_3 2M solution 60ml을 각각 첨가 후, 12시간 동안 가열 교반하였다. 반응 종료 후 반응액을 celite를 통한 filter한 다음, MC로 추출하고, 컬럼 크로마토그래피를 통하여 2-(naphthalen-2-yl)anthracene(D4) 12.3g (수율=82.4%)을 얻었다.

[122] $^1\text{H-NMR}$: 8.39 (s, 2H), 8.26 (s, 1H), 8.01 (m, 3H), 7.85 (dd, 3H), 7.61(m, 3H).

[123]

[124] **[합성예 11] 화학식 4-2로 표시되는 화합물의 합성**

[125] 합성예 7에서 얻은 9-bromo-10-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4) 5g (1eq, 0.0159mol)과 1-naphthylboronic acid 6.64g (1.2eq, 0.019mol)을 플라스크에 넣고 toluene 150ml를 넣어 녹였다. 여기에 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 0.3g (0.02eq, 0.4mmol), K_2CO_3 2M solution 60ml을 각각 첨가 후, 12시간 가열 교반하였다. 반응 종료 후 반응액을 celite를 통한 filter한 다음, MC로 추출하고 컬럼 크로마토그래피를 통하여 화학식 4-2로 표시되는 화합물 10.49g (수율=82.4%)을 합성하였다.

[126] GC-Mass (이론치: 434.56g/mol, 측정치: 434g/mol)

[127]

[128] **[합성예 12] 화학식 4-5로 표시되는 화합물의 합성**

[129] 합성예 11에서 1-naphthylboronic acid 대신에 4-(naphthalen-1-yl)phenylboronic acid를 사용한 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 방법으로 수행하여 화학식 4-5로 표시되는 화합물 11.2g (수율=80.4%)을 합성하였다.

[130] GC-Mass (이론치: 510.66g/mol, 측정치: 510g/mol)

[131]

[132] **[합성예 13] 화학식 4-6로 표시되는 화합물의 합성**

[133] 합성예 11에서 1-naphthylboronic acid 대신에 4-(naphthalen-2-yl)phenylboronic acid를 사용한 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 방법으로 수행하여 화학식 4-6으로 표시되는 화합물 11.78g (수율=81.6%)을 합성하였다.

[134] GC-Mass (이론치: 510.66g/mol, 측정치: 510g/mol)

[135]

[136] **[합성예 14] 화학식 4-7로 표시되는 화합물의 합성**

[137] 합성예 11에서 1-naphthylboronic acid 대신에 biphenyl-4-ylboronic acid를 사용한 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 방법으로 수행하여 화학식 4-7로 표시되는 화합물 10.49g (수율=79.8%)을 합성하였다.

[138] GC-Mass (이론치: 510.66g/mol, 측정치: 510g/mol)

[139]

[140] **[합성예 15] 화학식 4-9로 표시되는 화합물의 합성**

[141] 합성예 10에서 합성된 2-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4)을 브롬화(bromination)하여 9,10-dibromo-2-(naphthalene-2-yl)anthracene (D4)을 얻었다. 이어서, 9-bromo-10-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4)와 1-naphthylboronic acid 대신에 9,10-dibromo-2-(naphthalene-2-yl)anthracene (D4) 13.14g(1eq)과 2-naphthylboronic acid (2.4eq)를 사용한 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 방법으로 수행하여 화학식 4-9로 표시되는 화합물 13.49g (수율=87.4%)을 합성하였다.

[142] GC-Mass (이론치: 560.24g/mol, 측정치: 560g/mol)

[143]

[144] **[합성예 16] 화학식 4-10로 표시되는 화합물의 합성**

[145] 합성예 10에서 합성된 2-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4)을 브롬화(bromination)한 후, 합성예 11과 동일한 방법으로 수행하여 10-bromo-9-(naphthalen-1-yl)-2-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4)을 얻었다. 이어서, 9-bromo-10-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4)와 1-naphthylboronic acid 대신에 10-bromo-9-(naphthalen-1-yl)-2-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4) 14.48g과 2-naphthylboronic acid를 사용한 것을 제외하고는, 합성예 11과 동일한 방법으로 수행하여 화학식 4-10으로 표시되는 화합물 14.49g (수율=91.6%)을 합성하였다.

[146] GC-Mass (이론치: 560.24g/mol, 측정치: 560g/mol)

[147]

[148] **[합성예 17] 화학식 4-11로 표시되는 화합물의 합성**

[149] 합성예 10에서 합성된 2-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4)을 브롬화(bromination)한 후, 합성예 11과 동일한 방법으로 수행하여 10-bromo-9-(naphthalen-1-yl)-2-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4)을 얻었다. 이어서,

9-bromo-10-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4)와 1-naphthylboronic acid 대신에 10-bromo-9-(naphthalen-1-yl)-2-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4) 14.48g과 4-(naphthalen-1-yl)phenylboronic acid를 사용한 것을 제외하고는, 합성에 11과 동일한 방법으로 수행하여 화학식 4-11로 표시되는 화합물 15.49g (수율=92.7%)을 합성하였다.

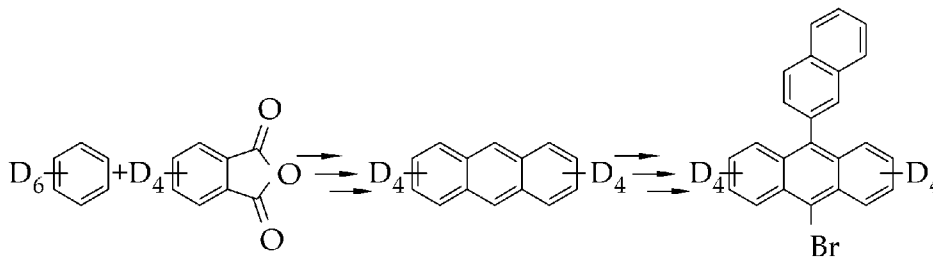
[150] GC-Mass (이론치: 636.81g/mol, 측정치: 686g/mol)

[151]

[152] **[합성예 18] anthracene (D8) 및 9-bromo-10-(naphthalen-2-yl)anthracene (D8)의 제조**

[153] [반응식 11]

[154]



[155] 합성에 1에서 isobenzofuran-1,3-dione 대신에 isobenzofuran-1,3-dione (D4)를 사용한 것을 제외하고는, 합성에 1~7과 동일한 방법으로 수행하여 anthracene (D8) 9.12g (수율=89.4%) 및 9-bromo-10-(naphthalen-2-yl)anthracene (D8)을 얻었다. anthracene (D8)의 ¹H-NMR은 아래에 기재하였다.

[156] ¹H-NMR: 8.25 (s, 2H).

[157]

[158] **[합성예 19] 화학식 3-2로 표시되는 화합물의 합성**

[159] 합성에 11에서 9-bromo-10-(naphthalen-2-yl)anthracene (D4) 대신에 합성에 18에서 얻은 9-bromo-10-(naphthalen-2-yl)anthracene (D8) 5g (1eq, 0.0155mol)을 사용한 것을 제외하고는, 합성에 11과 동일한 방법으로 수행하여 화학식 3-2로 표시되는 화합물 10.53g (수율=82.7%)을 합성하였다.

[160] GC-Mass (이론치: 438.22g/mol, 측정치: 438g/mol)

[161]

[162] **[실시예 11] 유기 발광 소자의 제조**

[163] 하기와 같은 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[164] ITO (Indium tin oxide)가 1500Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송 시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정 한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[165] 이렇게 준비한 ITO (양극) 위에 DS-HIL(두산社)를 800 Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공 주입층을 형성하였고, 상기 정공 주입층 위에 정공 이송 물질인

a-NPB (*N, N*-di(naphthalene-1-yl)-*N, N*-diphenylbenzidine)을 150 Å의 두께로 진공 증착하였다.

- [166] 그 위에 합성된 화학식 4-2로 표시되는 화합물 및 DS-501(두산社)을 300 Å의 두께로 진공 증착하여 발광층을 형성하였고, 상기 발광층 위에 전자 이송 물질인 Alq3을 250 Å의 두께로 진공 증착하였다. 그 후, 전자 주입 물질인 LiF를 10 Å의 두께로 증착하였고, 알루미늄 (음극)을 2000 Å의 두께로 진공 증착하여 하기 표 1과 같은 구조의 유기 발광 소자를 제작하였다.

[167]

[168] **[실시예 2~7] 유기 발광 소자의 제조**

- [169] 발광층 형성시 화학식 4-2로 표시되는 화합물 (실시예 1) 대신에 화학식 4-5로 표시되는 화합물 (실시예 2), 화학식 4-6로 표시되는 화합물 (실시예 3), 화학식 4-7로 표시되는 화합물 (실시예 4), 화학식 4-9로 표시되는 화합물 (실시예 5), 화학식 4-10로 표시되는 화합물 (실시예 6), 화학식 4-11로 표시되는 화합물 (실시예 7)을 각각 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[170]

[171] **[비교예 1] 유기 발광 소자의 제조**

- [172] 발광층 형성시 합성에에서 제조된 화합물 유도체 및 DS-501(두산社) 대신 Green소자로 대표되는 system인 Alq3 및 C-545T(10-(2-benzo-thiazolyl)-1,1,7,7-tetramethyl-2,3,6,7-tetrahydro-1H,5H,11H-[1]benzopyrano[6,7,8-ij]-quinolizin-11-one, TCI社)를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

- [173] 표 1

	정공주입층(HIL)	정공수송층(HTL)	유기발광층(EML)	전자수송층(ETL)	전자주입층(EIL)	음극(CATHODE)
실시예	DS-205	a-NPB	합성유도체 + DS-501	Alq3	LiF	Al
비교예 1	DS-205	a-NPB	Alq3 + C-545T	Alq3	LiF	Al

[174]

[175] **[실험예]**

- [176] 실시예 1~7 및 비교예 1에서 제작된 각각의 유기 발광 소자에 대하여 전류밀도 10mA/cm²에서의 발광 효율을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

- [177] 표 2

	Current Density(mA/cm ²)	Voltage(V)	Luminance(cd/m ²)	Efficiency(c d/A)	Efficiency(l m/W)
실시예 1(화학식 4-2)	10	6.8	2256	22.6	10.4
실시예 2(화학식 4-5)	10	6.8	2206	22.1	10.2
실시예 3(화학식 4-6)	10	6.4	2357	23.6	11.6
실시예 4(화학식 4-7)	10	6.5	2256	22.6	10.9
실시예 5(화학식 4-9)	10	6.7	2212	22.1	10.4
실시예 6(화학식 4-10)	10	6.8	2352	23.6	10.9
실시예 7(화학식 4-11)	10	6.4	2256	22.6	11.1
비교예 1	10	5.9	1125	11.3	6.0

[178] 상기 표 2의 결과로 보면 실시예 1~7은 발광층을 Alq3 및 C-545T로 구성한 비교예 1에 비해 아주 우수한 결과를 나타냄을 볼 수 있다. 이로 인해 본 발명에 해당하는 물질로 유기 발광 소자(OLED) 제작시 뛰어난 성능을 보여 줄 것을 기대할 수 있다.

[179] 이상을 통해 본 발명의 바람직한 실시예에 대하여 설명하였지만, 본 발명은 이에 한정되는 것이 아니고 특허청구범위와 발명의 상세한 설명의 범위 안에서 여러 가지로 변형하여 실시하는 것이 가능하고 이 또한 본 발명의 범위에 속하는 것은 당연하다.

산업상 이용가능성

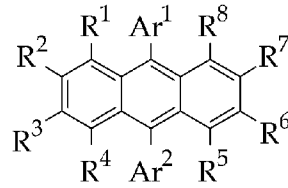
[180] 본 발명에 따라 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 유기 발광 소자의 발광 호스트 재료로 채택하는 경우, 종래의 발광물질에 비해 호스트에서 도판트로의 에너지 이동이 원활이 이루어질 수 있다. 따라서, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 발광효율, 휘도, 전력효율, 구동전압, 열 안정성 및 수명 면에서 우수한 특성을 나타내며, 이에 따라 풀 칼라 유기 EL 패널에서 성능 극대화 및 수명 향상에도 큰 효과가 있다.

청구범위

[청구항 1]

하기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체:

[화학식 1]



화학식 1에서, Ar¹ 및 Ar²는 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 중수소, C₁~C₄₀의 알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₁~C₄₀의 알콕시기, C₁~C₄₀의 아미노기, C₅~C₄₀의 아릴기 및 C₄~C₄₀의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 1 이상의 작용기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 방향족고리기이며;

R¹ 내지 R⁸은 서로 같거나 다르고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₅~C₄₀의 아릴기, C₄~C₄₀의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₅~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬아미노기, C₅~C₄₀의 아릴아미노기, C₆~C₄₀의 아릴알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기 및 C₂~C₄₀의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되며;

이때, 상기 Ar¹ 및 Ar²의 방향족 고리에 치환되는 치환기 및 R¹ 내지 R⁸ 중 적어도 하나는 중수소이다.

[청구항 2]

제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체는,

상기 R¹ 내지 R⁸ 중 적어도 하나 이상이 중수소이거나,

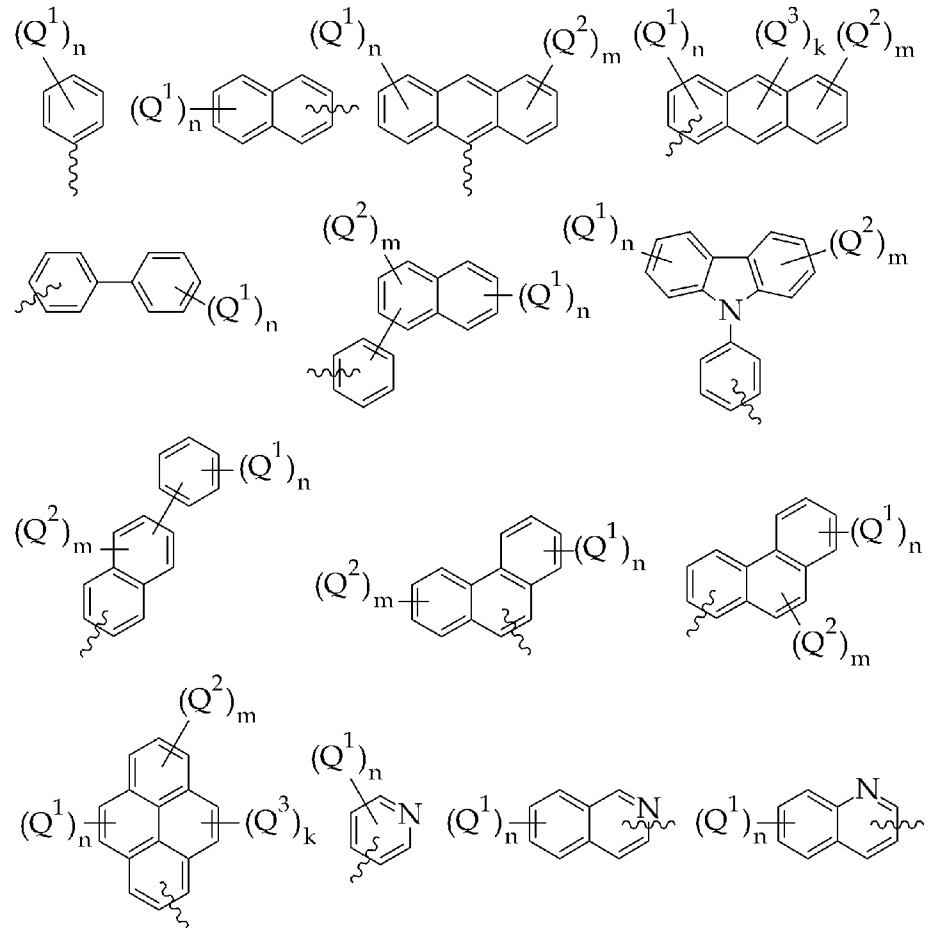
상기 Ar¹ 및 Ar²의 방향족 고리에 치환되는 치환기 및 상기 R¹ 내지 R⁸ 가 모두 중수소인 것이 특징인 중수소화된 안트라센 유도체.

[청구항 3]

제1항에 있어서,

상기 Ar¹ 및 Ar²의 C₆~C₄₀의 방향족 고리기는 각각 독립적으로 하기 화학식 2의 구조식으로 이루어진 군에서 선택되는 것이 특징인 중수소화된 안트라센 유도체.

[화학식 2]



상기 화학식 2에서, Q^1 내지 Q^3 은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로,

수소; 중수소; 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5 \sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4 \sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기; 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5 \sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4 \sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기; 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5 \sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4 \sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기; 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의

알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기; 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 아미노기; 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기; 및 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 기로 치환되거나 비치환된 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되며,

$(Q^1)_n$, $(Q^2)_m$ 및 $(Q^3)_k$ 에서 n , m 및 k 의 범위는 각각 1 내지 3이다.

[청구항 4]

제1항에 있어서,

상기 Ar^1 및 Ar^2 의 $C_6\sim C_{40}$ 의 방향족 고리기는 각각 독립적으로 페닐, 바이페닐(biphenyl), 터페닐(terphenyl), 나프틸(naphthyl), 나프탈레닐페닐, 안트라센닐(anthracenyl), 페난트릴(phenanthryl), 피레닐(pyrenyl), 플루오레닐(fluorenyl), 카바졸일(carbazolyl), N-카바졸페닐, 퀴놀리닐(quinoliny) 및

이소퀴놀리닐(isoquinoliny)로 이루어진 군에서 선택되는 것이 특징인 중수소화된 안트라센 유도체.

[청구항 5]

제1항에 있어서,

상기 Ar^1 및 Ar^2 의 $C_6\sim C_{40}$ 의 방향족 고리기에 치환되는 상기 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 아미노기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 1 이상의 치환기로 추가적으로 치환 또는 비치환된 것이

특징인 중수소화된 안트라센 유도체.

[청구항 6]

제1항에 있어서,

상기 R^1 내지 R^8 은 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 $C_4\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 1 이상의 치환기로 추가적으로 치환 또는 비치환된 것이 특징인 중수소화된 안트라센 유도체.

[청구항 7]

(i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서,

상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나의 유기물층은 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 따른 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 포함하는 것이 특징인 유기 발광 소자.

[청구항 8]

제7항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 중수소화된 안트라센 유도체를 포함하는 유기물층은 발광층인 것이 특징인 유기 발광 소자.