



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2023년06월26일
(11) 등록번호 10-2547298
(24) 등록일자 2023년06월20일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H10K 99/00 (2023.01) H10K 50/00 (2023.01)
(52) CPC특허분류
H10K 85/656 (2023.02)
H10K 50/12 (2023.02)
(21) 출원번호 10-2018-0020359
(22) 출원일자 2018년02월21일
심사청구일자 2021년02월05일
(65) 공개번호 10-2018-0099487
(43) 공개일자 2018년09월05일
(30) 우선권주장
1020170025749 2017년02월27일 대한민국(KR)
(56) 선행기술조사문헌
W02017030283 A1*
(뒷면에 계속)

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

전체 청구항 수 : 총 7 항

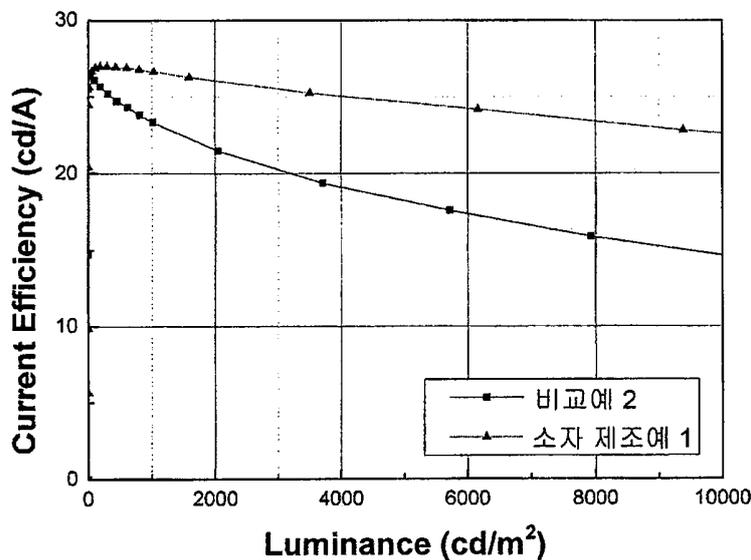
심사관 : 김효욱

(54) 발명의 명칭 복수 종의 호스트 재료 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

(57) 요약

본 발명은 복수 종의 호스트 재료 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 특정 조합의 복수 종의 호스트 화합물을 포함함으로써 높은 발광 효율을 유지하면서 우수한 수명 특성을 나타낼 수 있다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

H10K 85/631 (2023.02)

H10K 85/654 (2023.02)

(56) 선행기술조사문헌

US095559312 A

US20110240978 A1

KR1020150136033 A

WO2008031743 A1

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

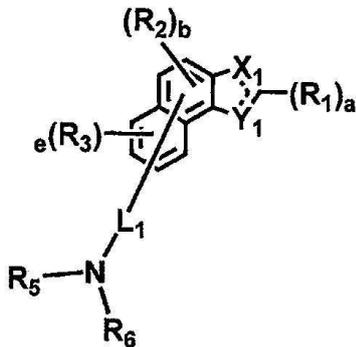
명세서

청구범위

청구항 1

1종 이상의 제1 호스트 화합물 및 1종 이상의 제2 호스트 화합물을 포함하는 복수 종의 호스트 재료로서, 상기 제1 호스트 화합물은 하기 화학식 2로 표시되고, 상기 제2 호스트 화합물은 하기 화학식 3으로 표시되는 것인, 호스트 재료.

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X₁은 -N=, -NR₇-, -O- 또는 -S-이고,

Y₁은 -N=, -NR₈-, -O- 또는 -S-이되, X₁이 -N= 인 경우 Y₁은 -NR₈-, -O- 또는 -S-이고, X₁이 -NR₇-인 경우 Y₁은 -N=, -O- 또는 -S-이고,

R₁은 치환 또는 비치환된 (C₆-C₃₀)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고,

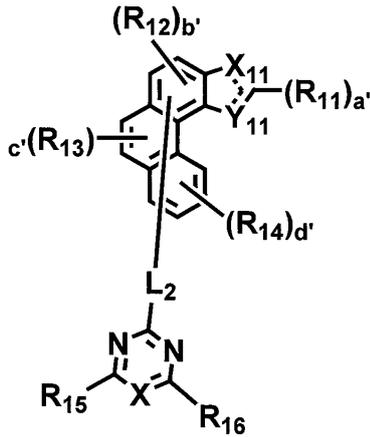
R₂, R₃, R₅ 내지 R₈은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C₁-C₃₀)알킬, 치환 또는 비치환된 (C₆-C₃₀)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C₃-C₃₀)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C₁-C₃₀)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C₁-C₃₀)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C₁-C₃₀)알킬(C₆-C₃₀)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C₁-C₃₀)알킬디(C₆-C₃₀)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C₆-C₃₀)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 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) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고,

L₁은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C₆-C₃₀)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고,

a는 1이고, b는 1 또는 2이고, e는 1 내지 4 의 정수이고,

상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며;

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

X_{11} 은 $-N=$, $-NR_{17}-$, $-O-$ 또는 $-S-$ 이고,

Y_{11} 은 $-N=$, $-NR_{18}-$, $-O-$ 또는 $-S-$ 이되, X_{11} 이 $-N=$ 인 경우 Y_{11} 은 $-NR_{18}-$, $-O-$ 또는 $-S-$ 이고, X_{11} 이 $-NR_{17}-$ 인 경우 Y_{11} 은 $-N=$, $-O-$ 또는 $-S-$ 이고,

X 는 N 또는 CH 이고,

R_{11} 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고,

R_{12} 내지 R_{18} 은 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) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고,

L_2 는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고,

a' 는 1이고, b' 및 c' 는 각각 독립적으로 1 또는 2이고, d' 는 1 내지 4의 정수이고,

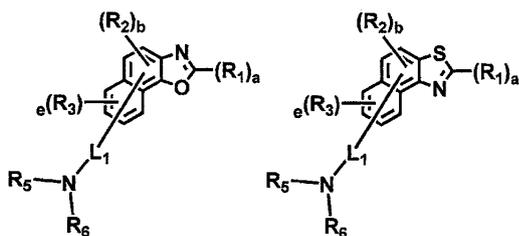
상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 화학식 2가 하기 화학식 1-4 또는 1-5로 표시되는 것인, 호스트 재료.

[화학식 1-4]

[화학식 1-5]



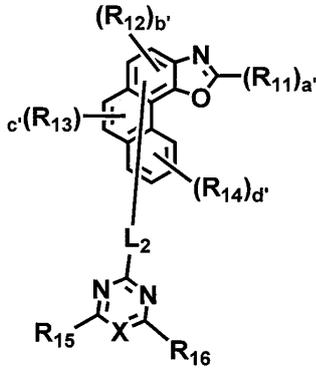
상기 화학식 1-4 및 1-5에서,

R₁, R₃, R₅, R₆, L₁, a, b, 및 e는 제1항에서 정의된 것과 같다.

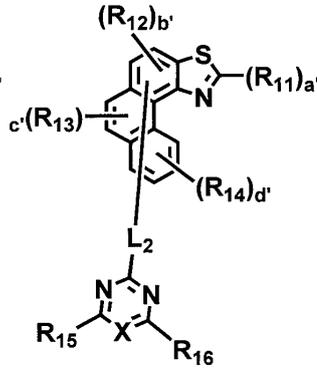
청구항 3

제1항에 있어서, 상기 화학식 3이 하기 화학식 3-1 내지 3-6 중 어느 하나로 표시되는 것인, 호스트 재료.

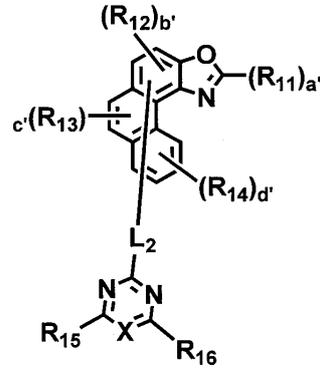
[화학식 3-1]



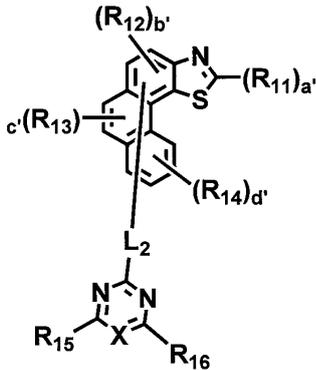
[화학식 3-2]



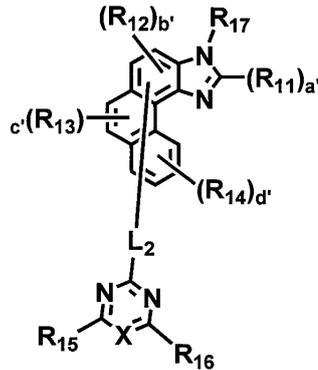
[화학식 3-3]



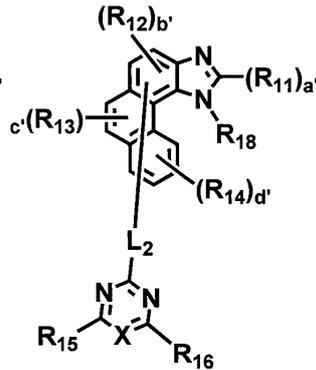
[화학식 3-4]



[화학식 3-5]



[화학식 3-6]



상기 화학식 3-1 내지 3-6에서,

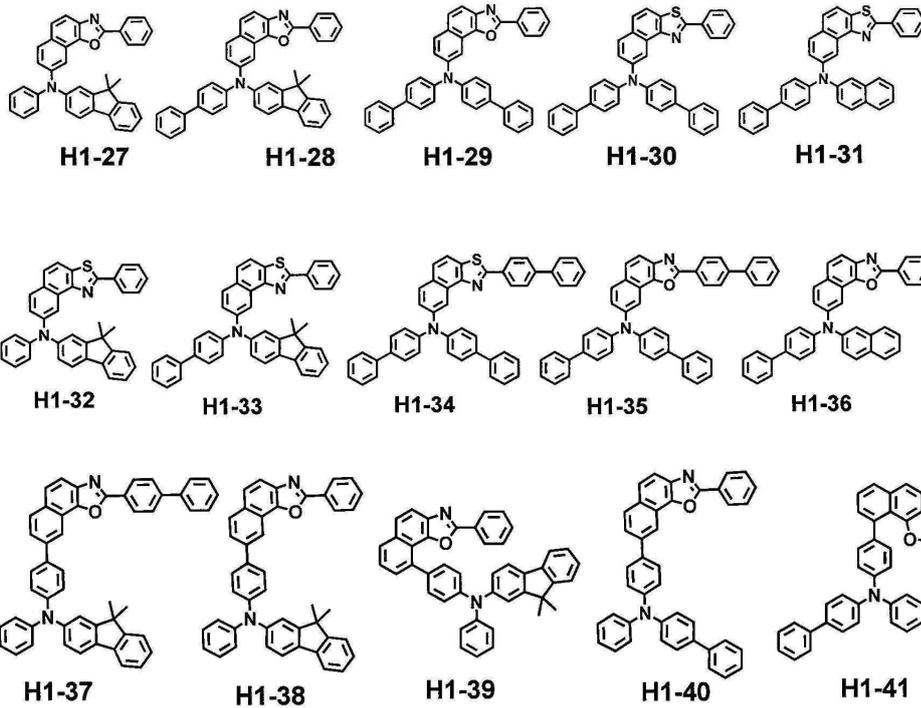
R₁₁ 내지 R₁₈, L₂, X 및 a' 내지 d'는 제1항에서 정의된 것과 같다.

청구항 4

제1항에 있어서, 상기 R₁ 내지 R₃, R₅ 내지 R₈, R₁₁ 내지 R₁₈, L₁ 및 L₂ 에서 치환된 알킬, 치환된 알콕시, 치환된 시클로알킬, 치환된 아릴(렌), 치환된 헤테로아릴(렌), 치환된 트리알킬실릴, 치환된 트리아릴실릴, 치환된 디알킬아릴실릴, 치환된 알킬디아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- 알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- 아릴아미노, 치환된 알킬아릴아미노, 및 치환된 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 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; (3-7원)헤테로시클로알킬; (C6-C30)아릴옥시; (C6-C30)아릴티오; (C6-C30)아릴이나 디(C6-C30)아릴아미노로 치환되거나 비치환된 (3-30원)헤테로아릴; 시아노, (3-30원)헤테로아릴 또는 트리(C6-C30)아릴실릴로 치환되거나 비치환된 (C6-C30)아릴; 트리(C1-C30)알킬실릴; 트리(C6-C30)아릴실릴; 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴; (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴; 아미노; 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노; 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬카보닐; (C1-C30)알콕시카보닐; (C6-C30)아릴카보닐; 디(C6-C30)아릴보로닐; 디(C1-C30)알킬보로닐; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐; (C6-C30)아르(C1-C30)알킬; 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 것인, 호스트 재료.

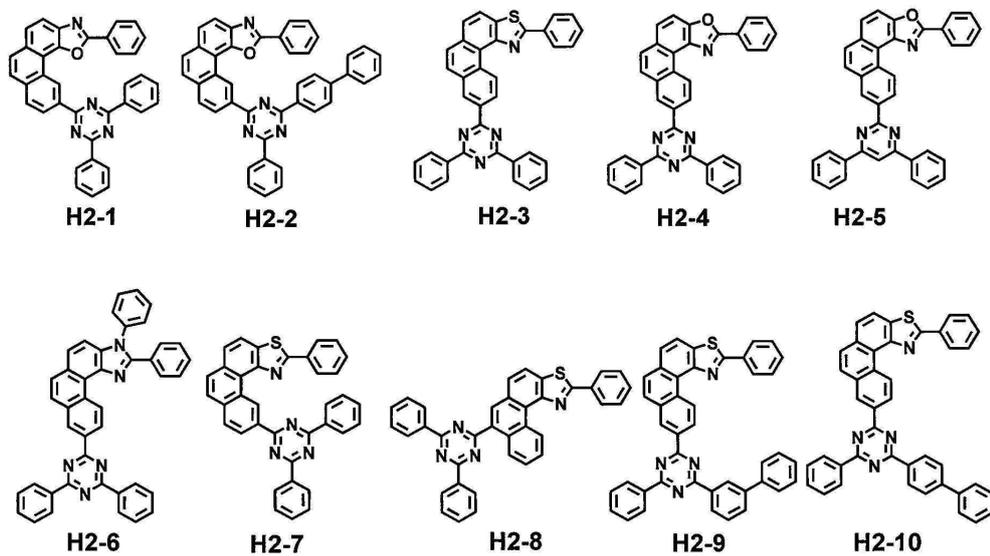
청구항 5

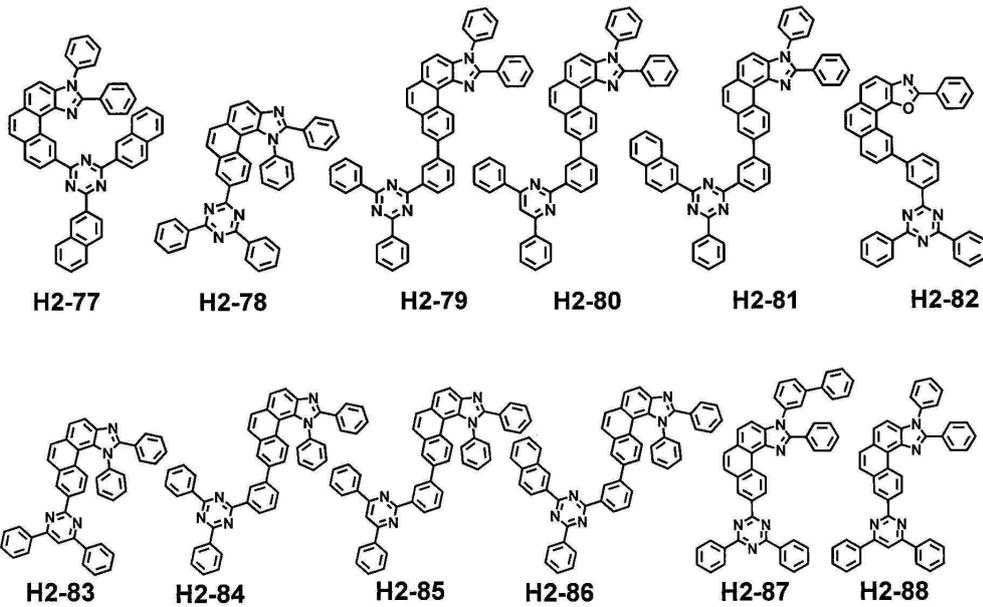
제1항에 있어서, 상기 화학식 2로 표시되는 화합물은 하기 화합물로부터 선택되는 것인, 호스트 재료.



청구항 6

제1항에 있어서, 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물은 하기 화합물로부터 선택되는 것인, 호스트 재료.





청구항 7

양극, 음극, 및 양극과 음극 사이에 적어도 1층의 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트와 인광 도판트를 포함하고, 상기 호스트는 제1항에 기재된 호스트 재료를 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술분야

[0001] 본 발명은 복수종의 호스트 재료 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

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

[0003] 유기 전계 발광 소자(organic electroluminescent device: OLED)는 유기 발광 재료에 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, 전자차단층, 발광층(호스트 및 도판트 재료 포함), 전자버퍼층, 정공차단층, 전자전달층, 전자주입층 등을 포함할 수 있다. 상기 유기물층에 사용되는 재료는 기능에 따라 정공주입 재료, 정공전달 재료, 전자차단 재료, 발광 재료, 전자버퍼 재료, 정공차단 재료, 전자전달 재료, 전자주입 재료 등으로 나뉜다. 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 소자의 발광 재료는 소자의 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인으로서, 발광 재료는 양자 효율이 높고 전자와 정공의 이동도가 커야 하고, 형성된 발광 재료층은 균일하고 안정해야 한다. 이러한 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색 또는 적색 발광 재료로 나뉘고, 추가로 황색 또는 주황색 발광 재료도 있다. 또한, 발광 재료는 기능적인 측면에서 호스트 재료와 도판트 재료로 구분될 수 있다. 최근에 고효율 및 장수명의 유기 전계 발광 소자의 개발이 시급한 과제로 대두되고 있는데, 특히 중대형 OLED 패널에서 요구하고 있는 EL 특성 수준을 고려해 볼 때 기존의 발광 재료에 비해 매우 우수한 재료의 개발이 시급한 실정이다. 이를 위하여 고체 상태의 용매 및 에너지 전달자 역할을 하는 호스트 물질의 바람직한 특성은 순도가 높아야 하며, 진공 증착이 가능하도록 적당한 분자량을 가져야 한다. 또한 유리 전이온도와 열분해온도가 높아 열적 안정성을 확보해야 하며, 장수명화를 위해 높은 전기화학적 안정성이 요구되며, 무정형 박막을 형성하기 용이해야 하며, 인접

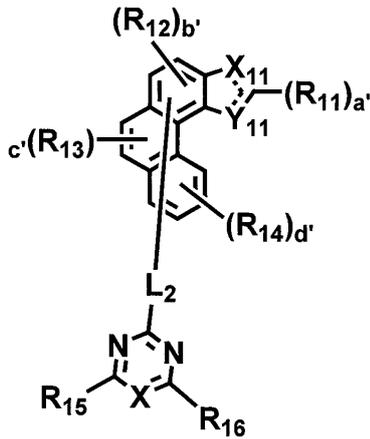
아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고,

[0017] L₁ 은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고,

[0018] a는 1이고, b 및 c는 각각 독립적으로 1 또는 2이고, d 및 e는 각각 독립적으로 1 내지 4 의 정수이고,

[0019] 상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며;

[0020] [화학식 3]



[0021] 상기 화학식 3에서,

[0022] X₁₁ 은 -N=, -NR₁₇⁻, -O- 또는 -S-이고,

[0023] Y₁₁ 은 -N=, -NR₁₈⁻, -O- 또는 -S-이되, X₁₁이 -N= 인 경우 Y₁₁ 은 -NR₁₈⁻, -O- 또는 -S-이고, X₁₁이 -NR₁₇⁻ 인 경우 Y₁₁은 -N=, -O- 또는 -S-이고,

[0024] X는 N 또는 CH이고,

[0025] R₁₁ 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고,

[0026] R₁₂ 내지 R₁₈ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 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) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고,

[0027] L₂ 는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고,

[0028] a'는 1이고, b' 및 c'는 각각 독립적으로 1 또는 2이고, d'는 1 내지 4 의 정수이고,

[0029] 상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

발명의 효과

[0030] 본 발명에 따른 페난트로옥사졸계 및 페난트로티아졸계 화합물은 본래 전기음성도가 크며 전자가 풍부한 그룹을 가지고 있을 뿐만 아니라 페난트렌과 옥사졸, 또는 페난트렌과 티아졸 등의 그룹이 융합된 구조로서 휘지 않는 (rigid) 특성을 가져 상호 분자간 전하 전달(inter-molecular transition)이 용이해진다. 또한, 이러한 분자간 스택킹(stack)이 강화되면 수평방향 분자배열(horizontal molecular orientation)의 구현이 쉬워지며, 이를

통해 빠른 전자 전류 특성 구현이 가능하다. 따라서 발광층의 재료로서 트리아진 및 피리미딘 유도체 등의 한정된 구조로 이용하여 전자 전달층과의 분자간 스택킹 효과를 유지함과 동시에 계면 특성 향상을 통하여 구동 전압이 비교적 낮고, 전류 효율 및 전력 효율과 같은 발광 효율이 우수하면서도, 순도 높은 색 구현이 가능한 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

[0032] 또한, 페난트로옥사졸계 및 페난트로티아졸계 화합물 재료를 정공 타입의 아민과 치환하여 제1 호스트로 이용하고, 제2 호스트로써 전자 타입의 아진 재료를 치환하여 발광층 재료로 혼합하여 사용하면, 빠른 구동전압과 함께 고효율 및 장수명의 유기 전계 인광 발광 소자를 구현하는 것이 가능하다. 본래, 인광 발광층 재료를 다른 치환체와 연결시 이면각이 큰 카바졸 형태의 유도체를 사용하면 특히 전자 전류를 방해하여 구동전압 증가와 효율이 감소되는 특성을 보일 수 있으나, 본 발명에 따른 발광 화합물을 사용하면 분자간 스택킹(intermolecular stacking) 및 상호작용(interaction) 특성에 의한 빠른 전류 주입 특성 및 계면 특성 향상을 통하여 구동 전압이 비교적 낮고, 전류 효율 및 전력 효율과 같은 발광 효율이 우수하면서도, 순도 높은 색 구현이 가능한 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0033] 도 1은 비교예 2와 소자 제조예 1에서 제조된 유기 전계 발광 소자의 휘도에 따른 전류 효율을 나타낸 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0034] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.

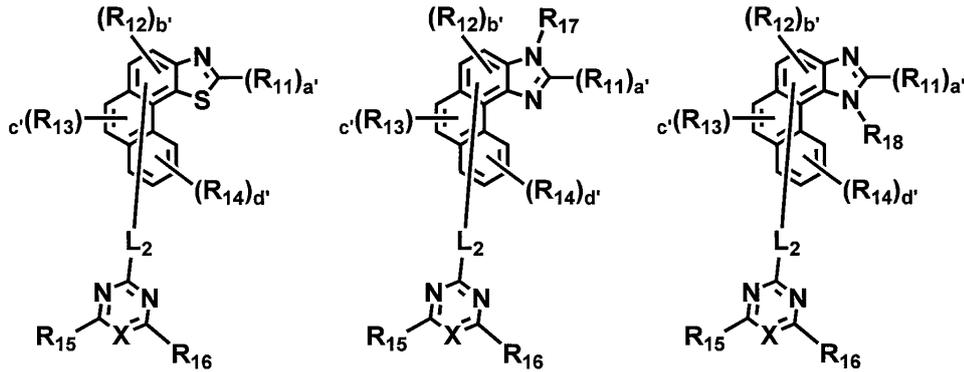
[0035] 상기 화학식 1, 2 또는 3으로 표시되는 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

[0036] 상기 화학식 1 및 2에서, X₁ 은 -N=, -NR₇-, -O- 또는 -S-이고, Y₁은 -N=, -NR₈-, -O- 또는 -S-이되, X₁이 -N=인 경우 Y₁ 은 -NR₈-, -O- 또는 -S-이고, X₁이 -NR₇-인 경우 Y₁ 은 -N=, -O- 또는 -S-이다. 본원의 일 양태에 따르면, X₁ 및 Y₁ 중 어느 하나는 -N=이고, 다른 하나는 -NR₇-, -O- 또는 -S- 일 수 있다. 또한, 본원의 다른 일 양태에 따르면, X₁ 및 Y₁ 중 어느 하나는 -N=이고, 다른 하나는 -O- 또는 -S-일 수 있다. 여기서, X₁ 과 Y₁이 모두 -O-인 경우, 모두 -S-인 경우, 및 X₁ 과 Y₁ 중 하나가 -O-이고, 다른 하나가 -S-인 경우는 제외될 수 있다. 예를 들면, X₁ 은 -N= 이고 Y₁ 은 -O-, X₁ 은 -O- 이고 Y₁ 은 -N=이거나, X₁ 은 -S- 이고 Y₁ 은 -N= 일 수 있다.

[0037] 상기 화학식 1 및 2에서, R₁ 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환된 (5-25원)헤테로아릴이며, 더욱 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환된 (5-20원)헤테로아릴이며, 예를 들면, 비치환된 페닐, 비치환된 비페닐, 비치환된 나프틸, 메틸로 치환된 플루오레닐, 메틸로 치환된 벤조플루오레닐, 비치환된 디벤조푸라닐, 비치환된 디벤조티오펜일, 스피로[플루오렌-플루오렌]일, 또는 스피로[플루오렌-벤조플루오렌]일일 수 있다.

[0038] 상기 화학식 1 및 2에서, R₂ 내지 R₆ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 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) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C25)아릴아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C25) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며, 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 치환 또는 비

[0056] [화학식 3-4] [화학식 3-5] [화학식 3-6]



[0057]

[0058] 상기 화학식 3-1 내지 3-6에서, R₁₁ 내지 R₁₈, L₂, X 및 a' 내지 d'는 화학식 3에서 정의된 것과 같다.

[0059]

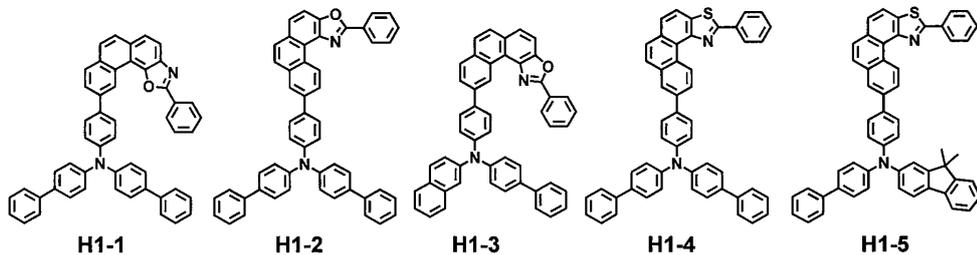
본 발명에 기재되어 있는 “(C1-C30)알킬”은쇄를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 20개인 것이 바람직하고, 1 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸 등이 있다. 본원에서 “(C2-C30)알케닐”은쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 “(C2-C30)알킬닐”은쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬닐의 예로서, 에틸닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 “(C3-C30)시클로알킬”은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환의 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 “(3-7원)헤테로시클로알킬”은 환 골격 원자수가 3 내지 7개, 바람직하게는 5 내지 7개이고, B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 O, S 및 N에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라히드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 등이 있다. 본원에서 “(C6-C60)아릴(렌)”은 환 골격 탄소수가 6 내지 60개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 여기에서 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 것이 바람직하고, 6 내지 20개인 것이 더 바람직하다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐 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 의미한다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일 환계이거나 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 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 벤조인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 나프티리딜, 카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 “질소 함유 (5-30원)헤테로아릴”은 환 골격 원자수가 5 내지 30개이고 하나 이상의 헤테로원자 N을 포함하는 아릴기를 의미한다. 여기에서 환 골격 원자수가 5 내지 20개인 것이 바람직하고, 5 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 질소 함유 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴기 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함된다. 상기 질소 함유 헤테로아릴의 예로서, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트

라졸릴, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조이미다졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 나프티리딜, 카바졸릴, 벤조카바졸릴, 디벤조카바졸릴, 페난트리딘일 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 “할로겐”은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

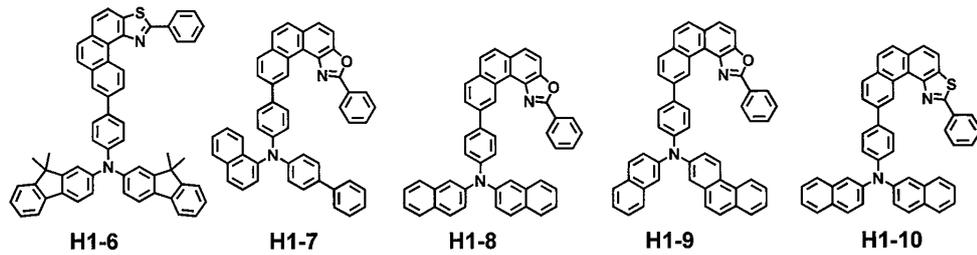
[0060] 또한 본 발명에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"에서 “치환”은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 화학식 1 내지 3의 상기 R₁ 내지 R₈, R₁₁ 내지 R₁₈, L₁ 및 L₂에서 치환된 알킬, 치환된 알콕시, 치환된 시클로알킬, 치환된 아릴(렌), 치환된 헤테로아릴(렌), 치환된 트리알킬실릴, 치환된 트리아릴실릴, 치환된 디알킬아릴실릴, 치환된 알킬디아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디-알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디-아릴아미노, 치환된 알킬아릴아미노, 및 치환된 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 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; (3-7원)헤테로시클로알킬; (C6-C30)아릴옥시; (C6-C30)아릴티오; (C6-C30)아릴이나 디(C6-C30)아릴아미노로 치환되거나 비치환된 (3-30원)헤테로아릴; 시아노, (3-30원)헤테로아릴 또는 트리(C6-C30)아릴실릴로 치환되거나 비치환된 (C6-C30)아릴; 트리(C1-C30)알킬실릴; 트리(C6-C30)아릴실릴; 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴; (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴; 아미노; 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노; 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬카보닐; (C1-C30)알콕시카보닐; (C6-C30)아릴카보닐; 디(C6-C30)아릴보로닐; 디(C1-C30)알킬보로닐; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐; (C6-C30)아르(C1-C30)알킬; 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 것을 의미하고, 바람직하게는 각각 독립적으로 (C1-C20)알킬; (C6-C18)아릴로 치환되거나 비치환된 (3-25원)헤테로아릴; 시아노, 트리(C6-C18)아릴실릴, (3-20원)헤테로아릴로 치환되거나 비치환된 (C6-C20)아릴; 트리(C6-C18)아릴실릴; 및 (C1-C20)알킬(C6-C20)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 것이 바람직하다.

[0061] 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

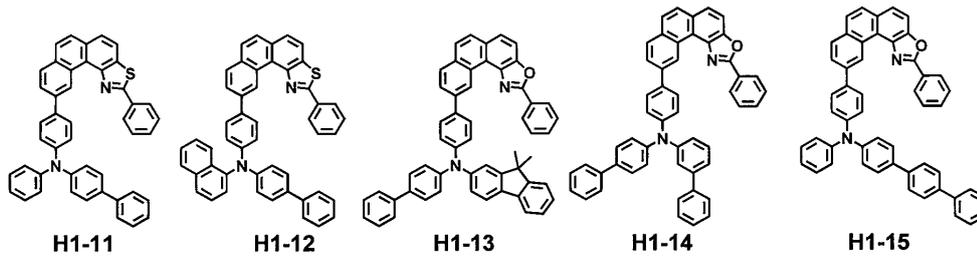
[0062]

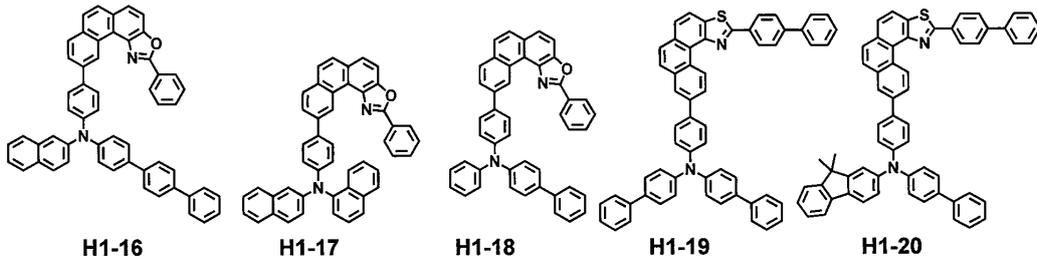


[0063]

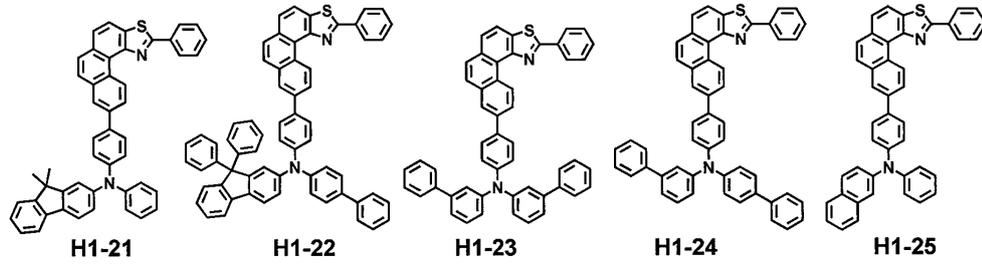


[0064]

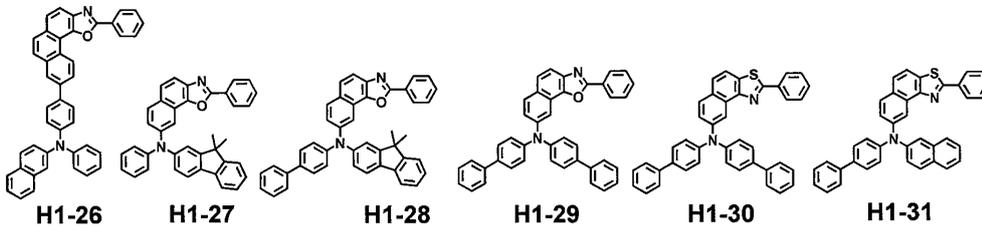




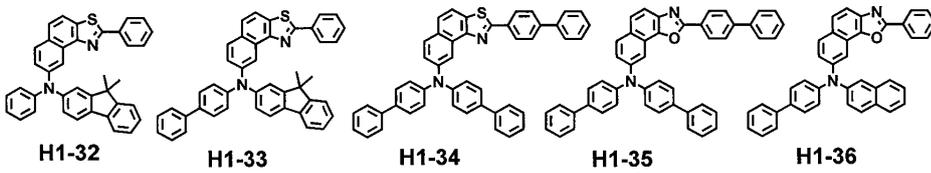
[0065]



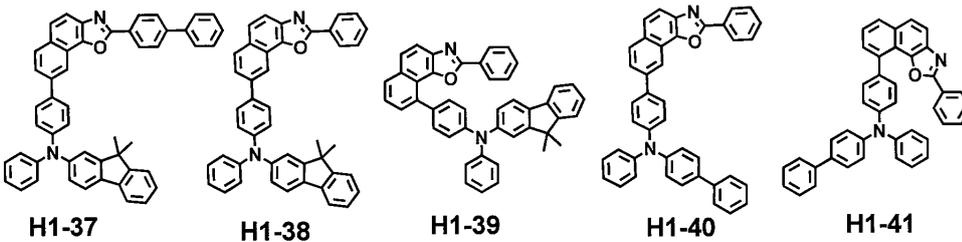
[0066]



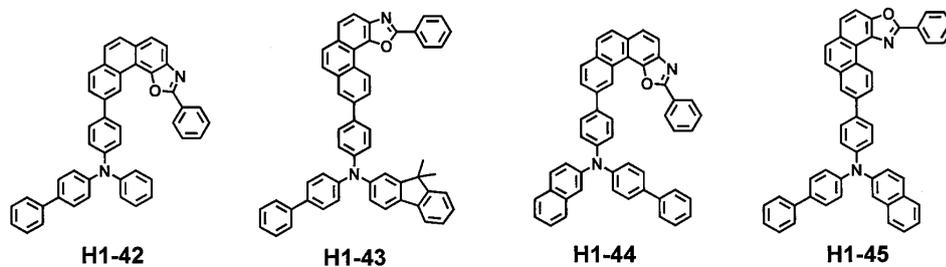
[0067]



[0068]



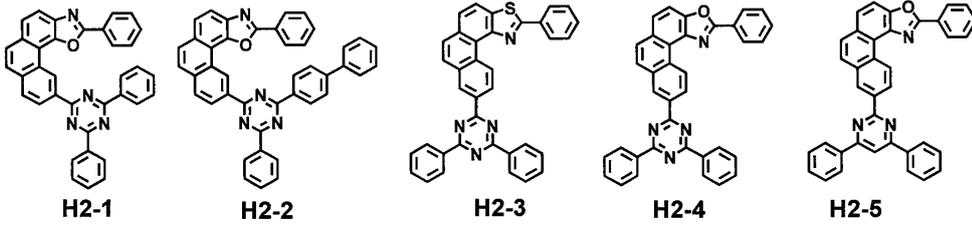
[0069]



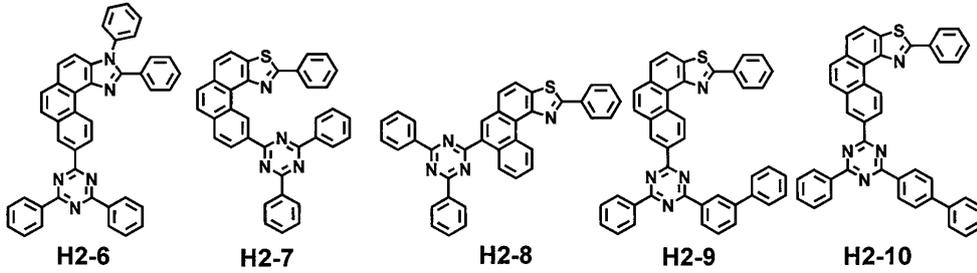
[0070]

[0071]

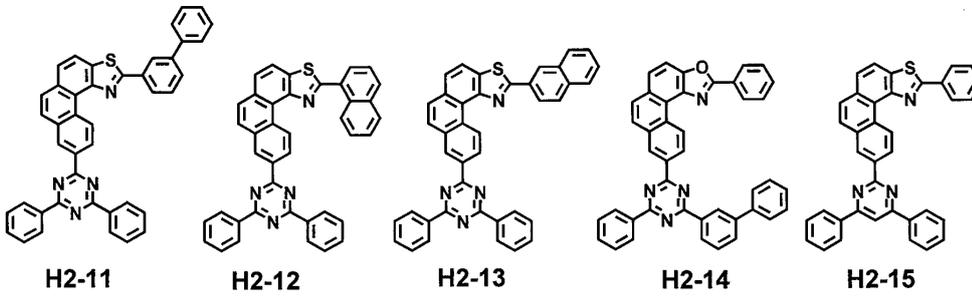
상기 화학식 3으로 표시되는 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



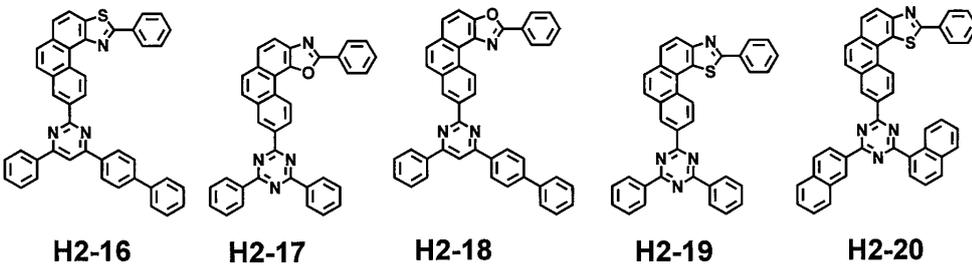
[0072]



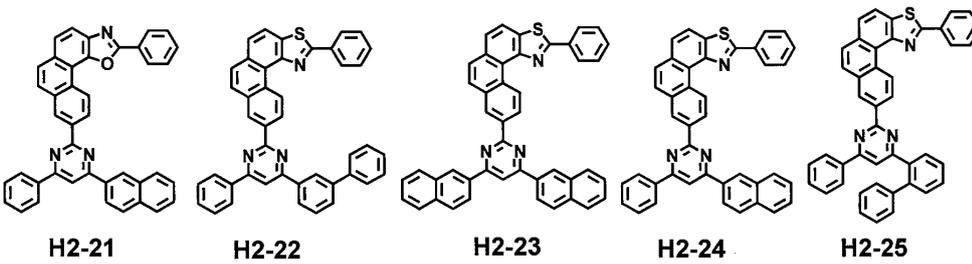
[0073]



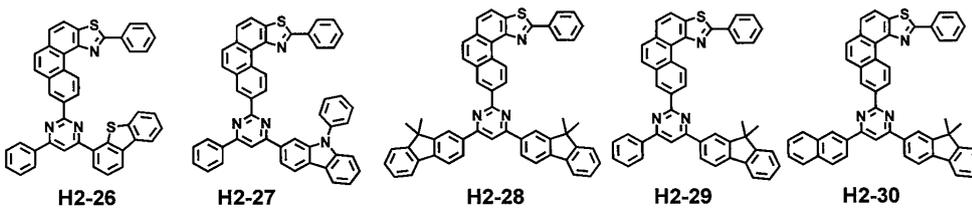
[0074]



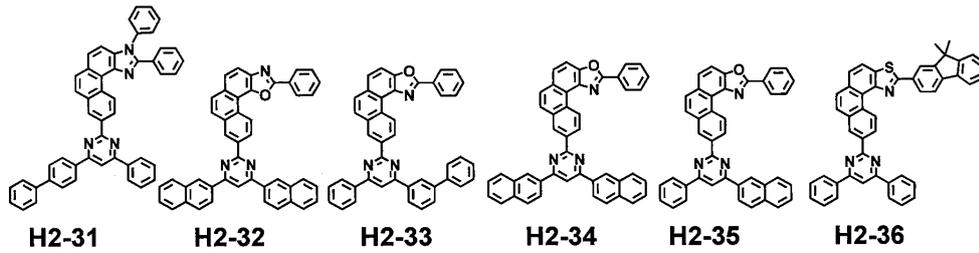
[0075]



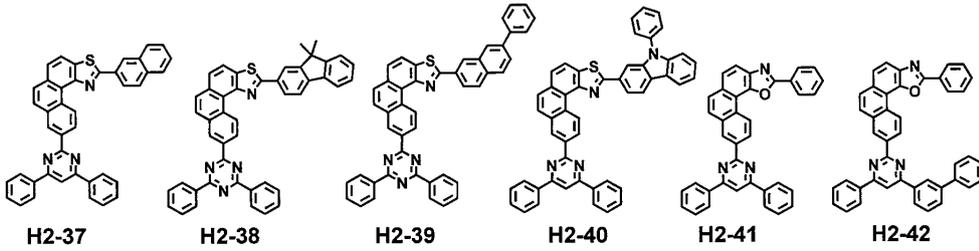
[0076]



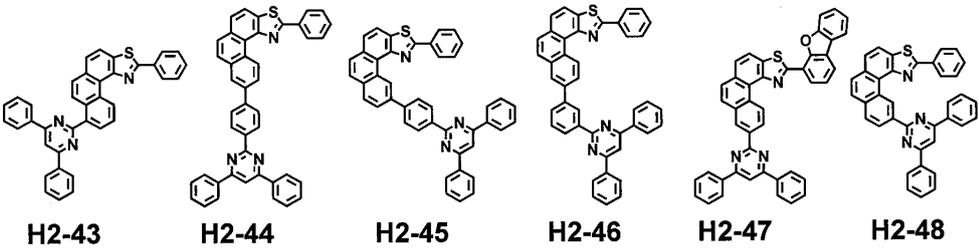
[0077]



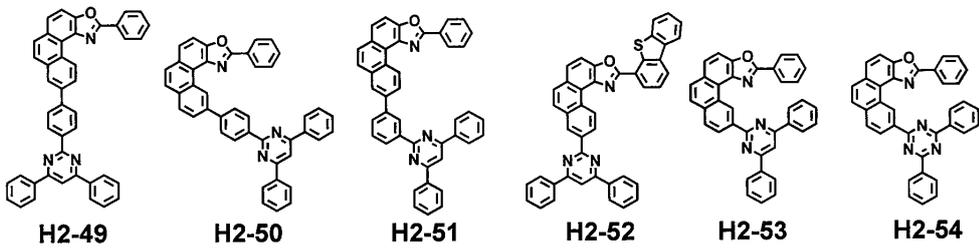
[0078]



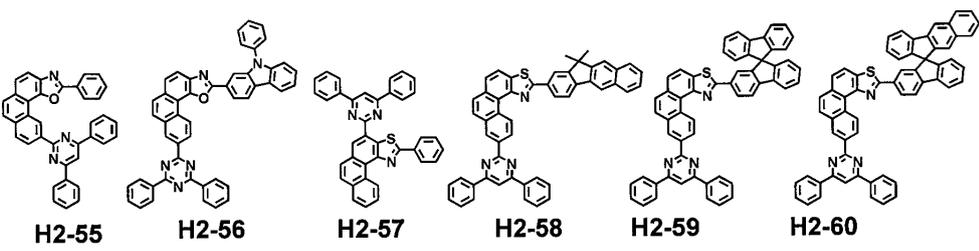
[0079]



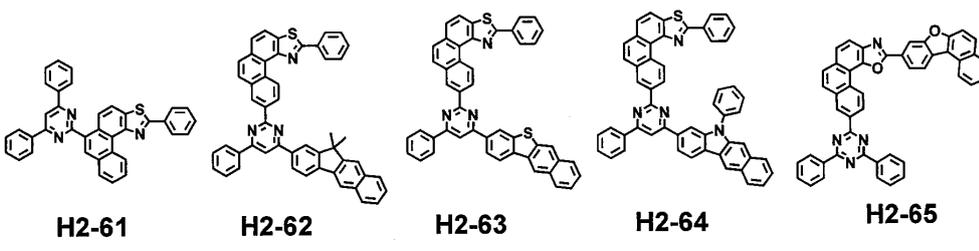
[0080]



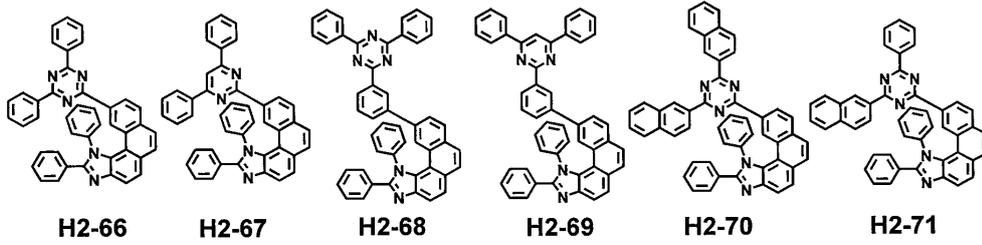
[0081]



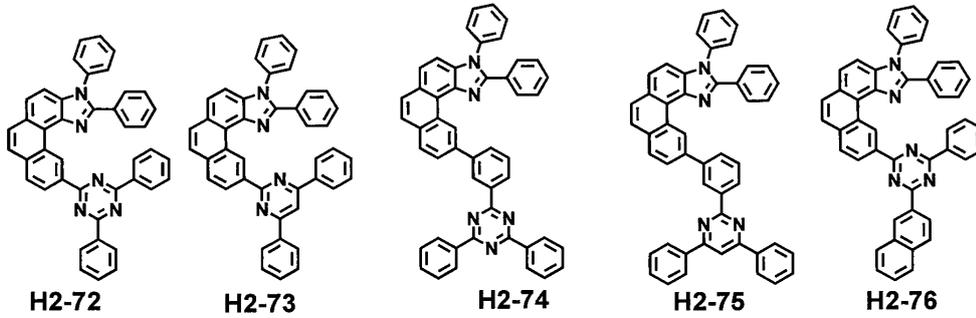
[0082]



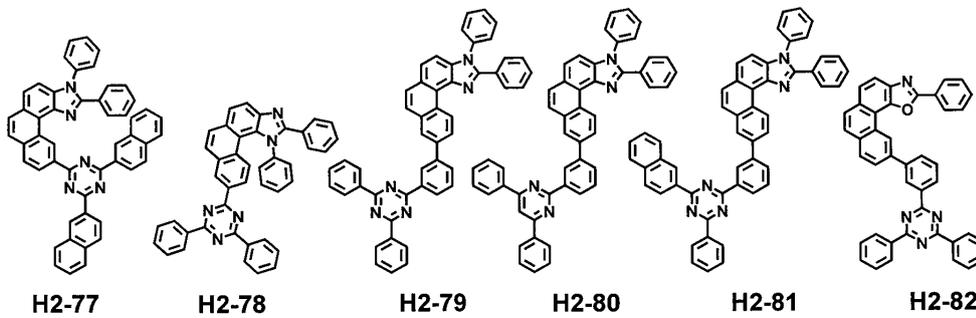
[0083]



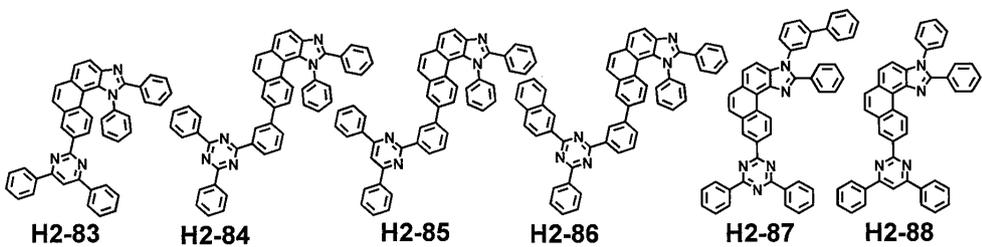
[0084]



[0085]



[0086]



[0087]

[0088]

본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 양극; 음극; 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트와 인광 도판트를 포함하고, 상기 호스트는 복수 종의 호스트 화합물로 구성되며, 상기 복수 종의 호스트 화합물 중 적어도 제1 호스트 화합물은 상기 화학식 1 또는 2로 표시되고, 제2 호스트 화합물은 상기 화학식 3으로 표시된다.

[0089]

본 발명에서 발광층은 발광이 이루어지는 층으로서 단일층일 수 있으며, 또한 2개 이상의 층이 적층된 복수의 층일 수 있다. 상기 발광층의 호스트 화합물에 대한 도판트 화합물의 도핑 농도가 20 중량% 미만인 것이 바람직하다.

[0090]

상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공주입층, 정공전달층, 전자전달층, 전자주입층, 계면층(interlayer), 정공차단층 및 전자차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

[0091]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 제1 호스트 화합물과 제2 호스트 화합물의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

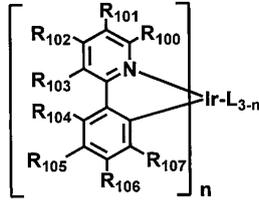
[0092]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로써는 하나 이상의 인광 도판트가 바람직하다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물이 바람직하고, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및

백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물이 더욱 바람직하며, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물이 더더욱 바람직하다.

[0093] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 101로 표시되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0094] [화학식 101]



[0095]

상기 화학식 101 에서,

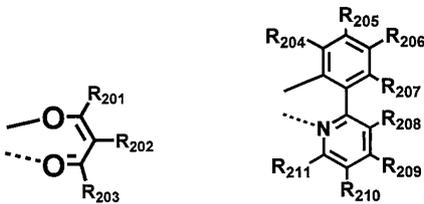
[0096]

L은 하기 구조 1 또는 2에서 선택되고;

[0097]

[구조1] [구조2]

[0098]



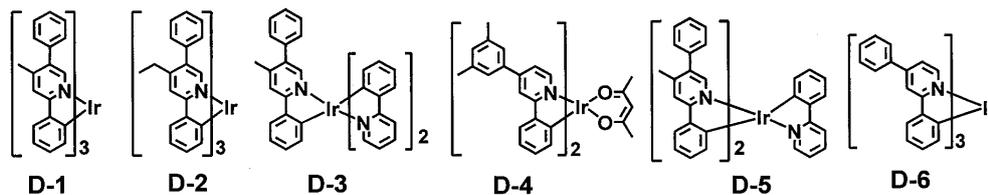
[0099]

[0100] R₁₀₀ 내지 R₁₀₃은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된 (3-30원) 헤테로아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; R₁₀₀ 내지 R₁₀₃은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조푸로피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조푸로퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조티에노퀴놀린 또는 치환 또는 비치환된 인데노퀴놀린 형성이 가능하며; R₁₀₄ 내지 R₁₀₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; R₁₀₄ 내지 R₁₀₇은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조푸로피리딘 또는 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘 형성이 가능하며; R₂₀₁ 내지 R₂₁₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고, 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있으며; n은 1 내지 3의 정수이다.

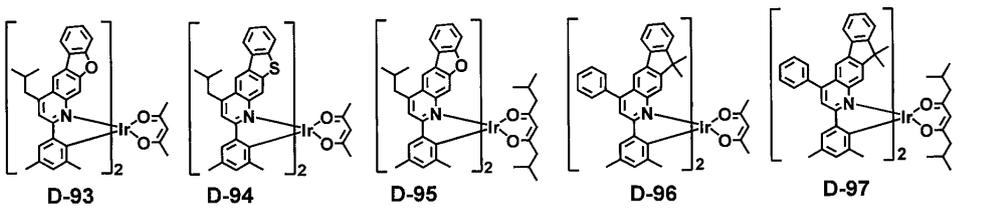
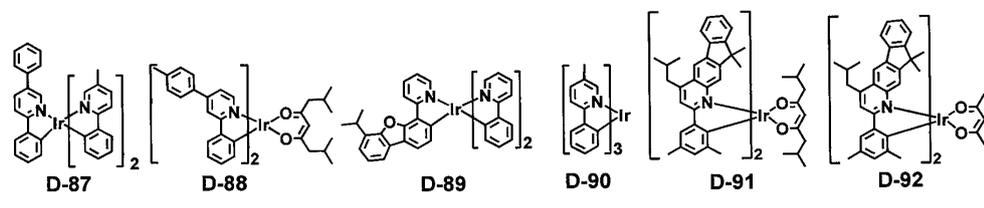
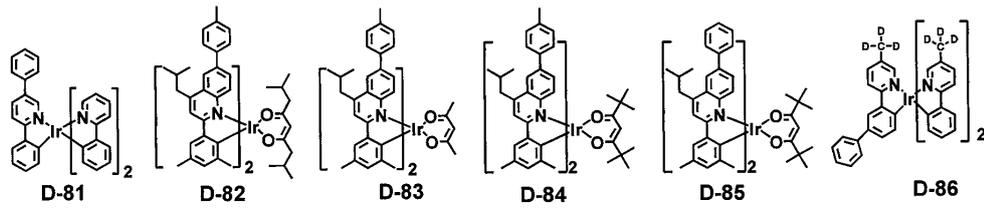
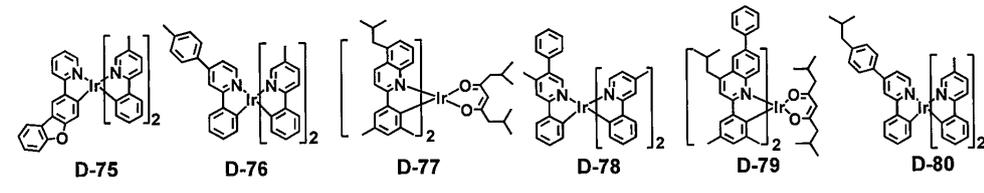
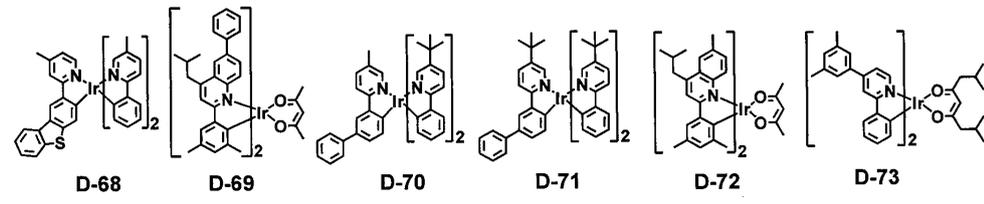
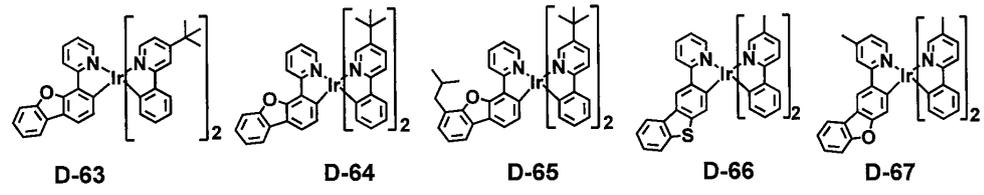
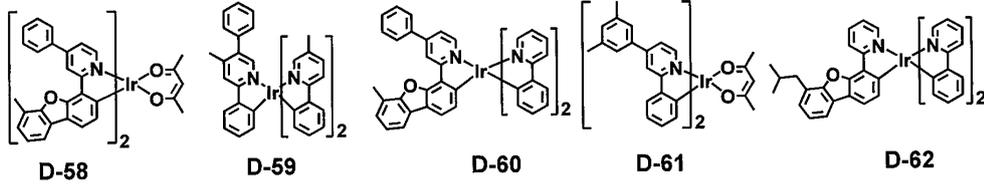
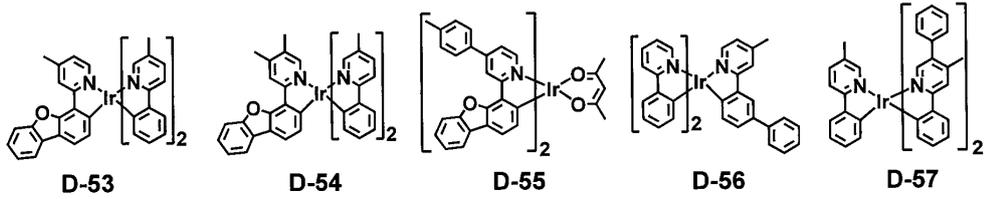
[0100]

[0101] 상기 도판트 재료의 구체적인 예는 다음과 같다.

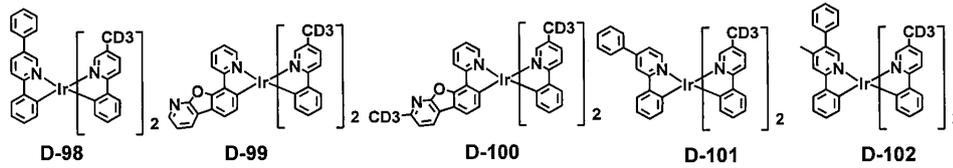
[0101]



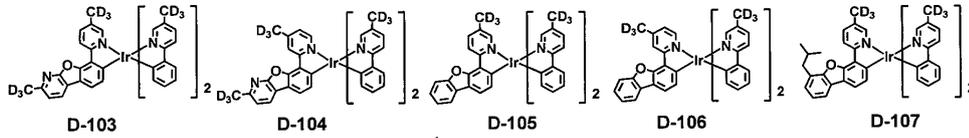
[0102]



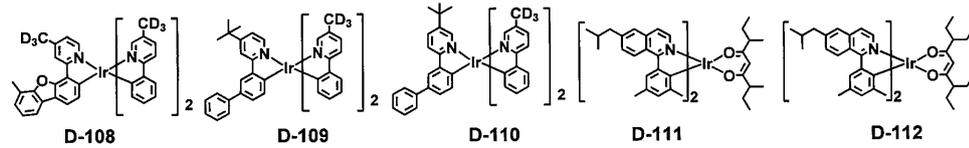
[0119]



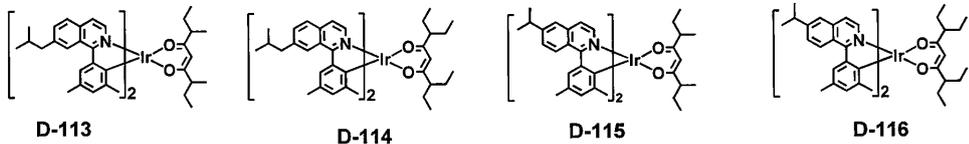
[0120]



[0121]



[0122]



[0123]

본 발명의 유기 전계 발광 소자는 유기물층에 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 추가로 포함할 수도 있다.

[0124]

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 1족, 2족, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란타네 계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속, 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체화합물을 추가로 포함할 수도 있다.

[0125]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 하나 이상의 층(이하, 이들을 “표면층”이라고 지칭함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 음극 표면에 할로젠화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 유기 전계 발광 소자의 구동 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 SiO_x ($1 \leq x \leq 2$), AlO_x ($1 \leq x \leq 1.5$), $SiON$ 또는 $SiAlON$ 등이 있고, 할로젠화 금속의 바람직한 예로는 LiF , MgF_2 , CaF_2 , 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등이 있다.

[0126]

양극과 발광층 사이에 정공 주입층, 정공 전달층, 또는 전자 차단층에서 선택되거나 이들의 조합으로 이루어진 층이 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. 정공 전달층 또는 전자 차단층도 복수의 층이 사용될 수 있다.

[0127]

발광층과 음극 사이에 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층, 또는 전자 주입층에서 선택되거나 이들의 조합으로 이루어진 층이 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.

[0128]

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 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 전하생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을

가진 백색 유기 전계 발광소자를 제조할 수 있다.

[0129] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 각 층의 형성은 진공 증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온 플레이팅 등의 건식 성막법이나 잉크젯 프린팅(ink jet printing), 노즐 프린팅(nozzle printing), 슬롯 코팅(slot coating), 스펀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

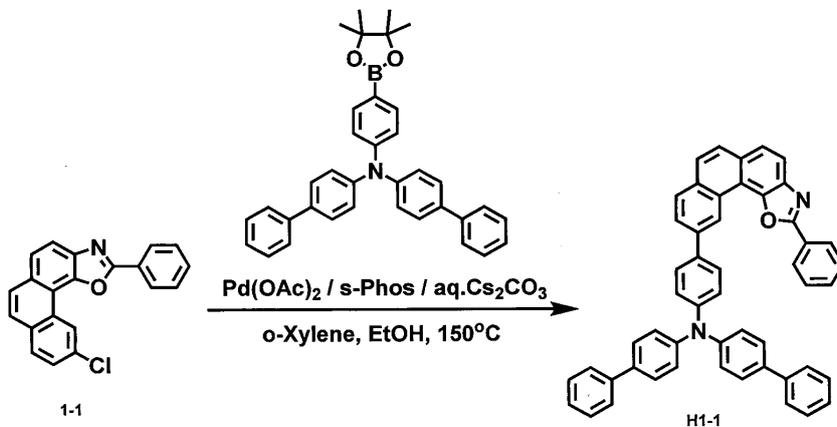
[0130] 습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로푸란, 디옥산 등의 적절한 용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 각 층을 형성하는 재료가 용해 또는 분산될 수 있고, 성막성에 문제가 없는 것이라면 어느 것이어도 된다.

[0131] 또한, 본원 발명의 제1 및 제2 호스트 화합물은 공증착 또는 혼합증착 공정에 의해 성막될 수 있다.

[0132] 또한, 본원 발명의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 표시 장치 또는 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

[0133] 이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 대표 화합물을 들어 본원에 따른 화합물, 이의 제조방법 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자의 발광특성을 설명한다.

[0134] [실시예 1] 화합물 H1-1의 제조



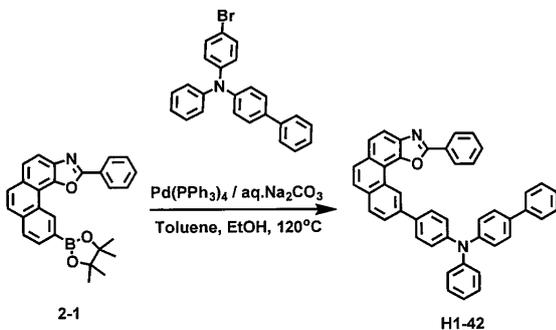
[0135]

[0136] 반응용기에 화합물 1-1 (4 g, 12 mmol), 비스(바이페닐-4-일)[4-(4,4,5,5-테트라메틸-[1,3,2]-다이옥사보로란-2-일)페닐]아민 (6.8 g, 13 mmol), 팔라듐(II) 아세테이트 (0.3 g, 1 mmol), 2-다이사이클로헥실 포스피노-2',6'-다이메톡시바이페닐 (0.9 g, 2 mmol), 탄산세슘 (11.5 g, 35 mmol), o-자일렌 60 mL, 에탄올 15 mL, 및 증류수 15 mL 를 넣고 3시간 환류교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 H1-1 (2.2g, 수율: 27%)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
H1-1	690.85	406nm	427nm	271°C

[0137]

[0138] [실시예 2] 화합물 H1-42의 제조



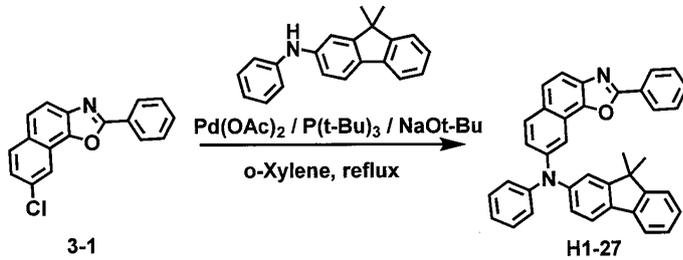
[0139]

[0140] 반응용기에 화합물 2-1 (4.8 g, 11.34 mmol), N-(4-브로모페닐)-N-페닐-[1,1'-바이페닐]-4-아민 (5 g, 12.47 mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 (0.4 g, 0.34 mmol), 탄산나트륨 (3.0 g, 28.35 mmol), 톨루엔 57 mL, 에탄올 14 mL 및 증류수 14 mL를 첨가한 후 120°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 혼합물을 메

탄올에 적가하고, 생성된 고체를 여과하였다. 생성된 고체는 컬럼 크로마토그래피로 재결정으로 정제하여 화합물 H1-42 (1.4 g, 수율: 20.0 %)를 얻었다.

	MW	M.P
H1-42	614.73	230℃

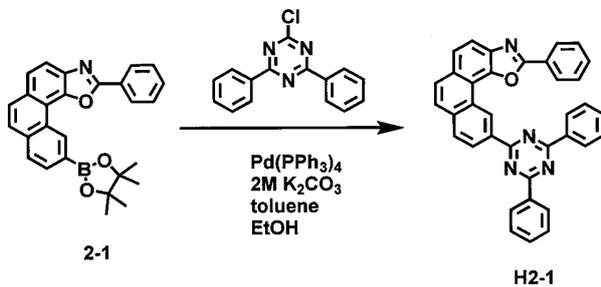
[실시예 3] 화합물 H1-27의 제조



반응용기에 화합물 3-1 (4.5 g, 16.09 mmol), 9,9-다이메틸-N-페닐-9H-플로렌-2-아민(5.5 g, 19.31 mmol), 팔라듐(II) 아세테이트 (0.2 g, 0.80 mmol), 트라이-t-부틸 포스핀 (0.8 mL, 1.60 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 (2.3 g, 24.14 mmol), 및 o-자일렌 80 mL를 넣고 120℃에서 2시간 동안 환류교반하였다. 반응이 끝나면 혼합물을 상온으로 식힌 후 생성된 고체를 여과하여 에틸아세테이트로 씻어 주었다. 여액을 감압증류하고 생성된 고체는 컬럼 크로마토그래피로 재결정으로 정제하여 화합물 H1-27 (2.4g, 수율: 28%)를 얻었다.

	MW	M.P
H1-27	528.64	209℃

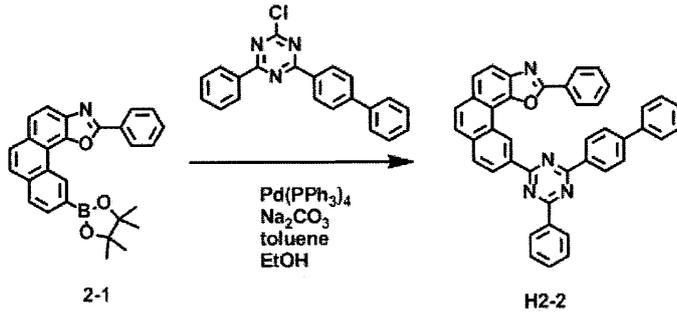
[실시예 4] 화합물 H2-1의 제조



반응용기에 화합물 2-1 (10 g, 23.7 mmol), 2-클로로-4,6-다이페닐트리아진 (CAS: 3842-55-5, 5.8 g, 21.6 mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 (1.2 g, 1.0 mmol), 탄산칼륨 (7.5 g, 59 mmol), 톨루엔 90 mL, 에탄올 30 mL 및 증류수 30 mL를 첨가한 후, 120℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 혼합물을 메탄올에 적가하고, 생성된 고체를 여과하였다. 생성된 고체는 컬럼 크로마토그래피로 재결정으로 정제하여 화합물 H2-1 (5.7 g, 수율: 50 %)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P
H2-1	526.18	290nm	427nm	291℃

[0150] [실시예 5] 화합물 H2-2의 제조



[0151]

[0152] 반응용기에 화합물 2-1 (3.48 g, 8.3 mmol), 2-([1,1'-바이페닐]-4-일)-4-클로로-6-페닐-1,3,5-트리아진 (CAS: 1472062-94-4, 3.53 g, 9.1 mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 (0.48 g, 0.41 mmol), 탄산나트륨 (2.2 g, 20.7 mmol), 톨루엔 28 mL, 에탄올 7 mL 및 증류수 7 mL를 첨가한 후, 120°C에서 5시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 혼합물을 메탄올에 적가하고, 생성된 고체를 여과하였다. 생성된 고체는 컬럼 크로마토그래피로 재결정으로 정제하여 화합물 H2-2 (3.7 g, 수율: 74 %)를 얻었다.

[0153]

	MW	UV	PL	M.P
H2-2	602.21	324nm	429nm	299°C

[0154]

상기 실시예1 및 실시예 3에서 합성된 화합물 H1-1 및 H1-27의 LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) 에너지, HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) 에너지, 및 삼중항 에너지를 B3LYP/6-31g(d) 수준에서 밀도함수이론(Density Functionaltheory, DFT) 계산을 수행하여 하기 표 1에 나타내었다.

[0155]

이렇게 측정된 LUMO 에너지 및 HOMO 에너지 값은 본래 흡수 값을 가지나, 편의상 그 절대값으로 나타낸다. 또한, LUMO/HOMO 에너지 값의 그 크기를 비교함에 있어서도 절대값을 기준으로 비교한다.

표 1

화합물	구조	계산값 B3LYP / 6-31g*		
		LUMO (eV)	HOMO (eV)	Triplet (eV)
H1-1		1.62	4.91	2.4
H1-27		1.37	4.90	2.5

[0156]

[0157]

상기 표 1을 참조하면, 일 예에 따른 본원 제1 호스트 화합물, 즉 화학식 1로 표시되는 화합물 H1-1과 화학식 2로 표시되는 화합물 H1-27의 소자 특성을 비교·예상할 수 있다. 구체적으로, 화합물 H1-27의 HOMO 에너지 값은, 화합물 H1-1의 HOMO 에너지 값과 유사하고, LUMO 에너지 값은, 화합물 H1-1의 LUMO 에너지 값 보다 더 낮은 값을 보여 충분한 전자 캐리어 숙박 효과를 보일 것으로 예상된다. 또한, 상기 H1-1 및 H1-27 호스트 화합물

을 전자 전류 특성이 강한 호스트와 함께 조합시 엑시플렉스(exciplex) 생성에 문제가 없는 에너지 값을 가짐을 확인할 수 있다. 또한 삼중항 (Triplet) 에너지 값 또한 화합물 H1-1과 화합물 H1-27 각각 2.4 eV, 및 2.5 eV로, 도판트의 삼중항 에너지를 블록킹 하기에 충분한 에너지 값을 가지고 있는 것으로 나타났다. 즉, 일 예에 따른 제1 호스트 화합물로서, 화합물 H1-1 또는 화합물 H1-27를 사용한 경우, 이들을 포함하는 소자는 비슷한 소자 특성을 나타낼 것으로 예상할 수 있다.

[0158] 이에, 하기 소자 제조예에서는 제1 호스트 화합물로서, 대표적으로 화학식 1로 표시되는 화합물인, 화합물 H1-1 및 H1-42만을 사용하여 유기 전계 발광 소자를 제조하고, 이의 소자 특성을 설명한다.

[0159] **[비교예 1] 본 발명에 따르지 않는 적색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조**

[0160] 본 발명에 따르지 않는 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스 (지오마텍사 제조) 기관 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 기관 홀더에 ITO 기관을 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 기관 위에 80 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HI-2**를 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 10 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 60 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 **H1-1**를 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 **D-39**을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 상기 발광층 위에 전자 전달 재료로서 화합물 **EIL-1:EIL-1**을 50:50 중량비로 증착하여 35 nm 두께의 전자 전달층을 형성하였다. 이어서 전자 주입층으로 화합물 **EIL-1**을 상기 전자 전달층 위에 2 nm의 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 상기 전자 주입층 위에 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다. 재료별로 각 화합물은 10⁻⁶ torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0161] **[비교예 2] 본 발명에 따르지 않는 적색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조**

[0162] 발광층 재료로서 화합물 **H1-1** 대신에 화합물 **H2-2**를 사용한 것을 제외하고는, 비교예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0163] **[비교예 3] 본 발명에 따르지 않는 적색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조**

[0164] 발광층 재료로서 화합물 **H1-1** 대신에 화합물 **H2-1**를 사용한 것을 제외하고는, 비교예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0165] **[소자 제조예 1 내지 3] 본 발명에 따른 적색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조**

[0166] 소자 제조예 1 내지 3에서는, 발광층을 진공 증착 장비 내의 셀 두 군데에 호스트로서 하기 표 2에 기재된 각각의 제1 호스트 화합물 및 제2 호스트 화합물을 넣고, 또 다른 셀에는 **D-39**을 넣은 후, 두 호스트 물질을 1:1의 속도로 증발시키고 동시에 도판트 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착한 것 외에는 비교예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0167] 이상과 같이 제조된 비교예 1 내지 3 및 소자 제조예 1 내지 3의 유기 전계 발광 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 구동 전압, 발광 효율, CIE 색좌표 및 5,000 nits 휘도 기준의 빛의 세기가 100%에서 90%로 떨어지는 데까지의 시간(수명; T90)을 하기 표 2에 나타내었다. 또한, 비교예 2 및 소자 제조예 1에서 제조된 유기 전계 발광 소자의 휘도에 따른 전류 효율을 도 1에 도시하였다.

표 2

	제 1 호스트	제 2 호스트	구동 전압 (V)	발광 효율 (cd/A)	색좌표		수명 (T90, hr)
					x	y	
비교예 1	H1-1	-	4.5	9.3	0.659	0.336	28.5
비교예 2	-	H2-2	3.1	23.4	0.670	0.330	122.0
비교예 3	-	H2-1	3.1	24.5	0.669	0.330	99.3
소자 제조예 1	H1-1	H2-2	3.2	26.6	0.671	0.329	601.1
소자 제조예 2	H1-1	H2-1	3.3	26.4	0.670	0.330	623.1
소자 제조예 3	H1-42	H2-2	3.1	28.1	0.671	0.329	683

[0168]

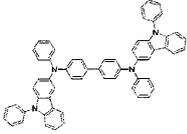
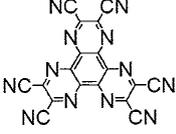
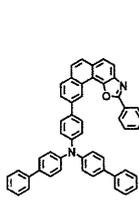
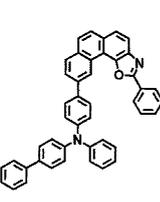
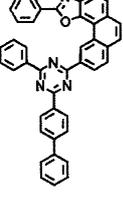
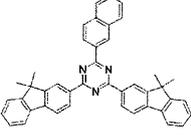
[0169]

상기 소자 제조예 1 내지 3으로부터, 본원의 화합물 조합은 비교예와 비슷한 구동전압을 유지하면서도, 효율 및 수명 특성을 크게 향상시킬 수 있음을 확인하였다. 특히 도1을 참조하면, 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자와 같은 발광층 조합은 단독 발광층 조합인 비교예 대비 롤 오프 (Roll-off) 개선에도 큰 효과가 있음을 확인할 수 있다.

[0170]

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

표 3

<p>정공 주입층/ 정공 전달층</p>	 <p>HI-1</p>	 <p>HI-2</p>	
<p>발광층</p>	 <p>H1-1</p>	 <p>H1-42</p>	 <p>H2-2</p>
<p>전자 전달층/ 전자 주입층</p>	 <p>ETL-1</p>	 <p>EIL-1</p>	

[0171]

도면

도면1

