



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2009-0008737  
(43) 공개일자 2009년01월22일

(51) Int. Cl.<sup>9</sup>

C09K 11/06 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2007-0071933

(22) 출원일자 2007년07월18일

심사청구일자 2007년07월18일

(71) 출원인

제일모직주식회사

경상북도 구미시 공단동 290

(72) 발명자

강명순

경기 수원시 영통구 매탄4동 810-4 매탄성일아파트 206-705

채미영

경기 용인시 수지읍 동천리 동천마을 현대2차홈타운 203-1803

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

팬코리아특허법인

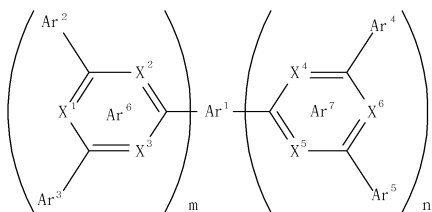
전체 청구항 수 : 총 12 항

(54) 유기광전소자용 화합물 및 이를 이용한 유기광전소자

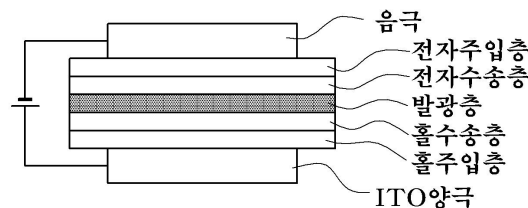
(57) 요약

본 발명은 유기광전소자의 수명, 효율, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성을 향상시킬 수 있는 유기광전소자용 신규 화합물 및 이를 이용한 유기광전소자에 관한 것이다. 본 발명에 따른 유기광전소자용 신규 화합물은 유기발광소자를 비롯한 유기광전소자에서 정공주입, 정공 수송, 전자 주입 및 수송, 또는 발광 물질 역할을 할 수 있으며, 본 발명에 따른 유기광전소자는 효율, 구동전압, 안정성 면에서 우수한 특성을 나타낸다.

[화학식1]



대표도 - 도5



(72) 발명자

**유은선**

경기 안양시 동안구 비산3동 1039-1

**김남수**

경기 부천시 오정구 오정동 565-3 오복타운 101동  
503호

**김영훈**

경기 안양시 만안구 안양5동 708-298

**이호재**

경기 용인시 기흥구 동백동 백현마을동일하이빌  
2101동 1904호

**정호국**

인천 부평구 갈산동 동남아파트 2동 401호

**박진성**

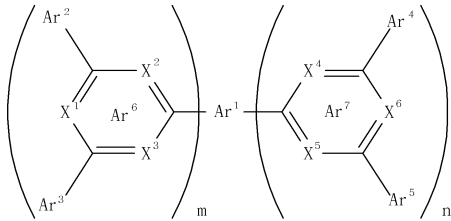
경기 안양시 동안구 관양동 1595번지 지세방글로벌  
시티 1212호

**특허청구의 범위**

**청구항 1**

하기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 화합물.

**[화학식1]**



상기 화학식 1에 있어서,

Ar6 및/또는 Ar7의 X1 내지 X6는 질소(N) 또는 탄소(C) 중에서 선택될 수 있으며, 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

Ar6 및/또는 Ar7은 X1 내지 X6가 모두 탄소인 페닐기이거나, X1 내지 X6 중 한 개 이상이 질소인 헤테로아릴기 일 수 있다.

Ar<sup>1</sup>로 표시되는 치환기는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기 또는 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 또는 헤테로아릴렌기이다.

Ar2 내지 Ar5는 각각 독립적으로 할로젠기, 알킬기, 알케닐기 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로아릴기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기로 이루어진 군에서 선택될 수 있으며, 서로 일체가 되거나 고리를 형성할 수 있다.

m과 n은 0 내지 3의 정수이며, m+n은 1 이상이다.

**청구항 2**

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1의 Ar1로 표현되는 아릴기 또는 아릴렌기는 구체적으로 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 스틸벤 등의 단환식 방향족 및 나프틸기, 안트라세닐기, 페나트렌기, 파이레닐기, 페릴레닐기등의 다환식 방향족환으로 이루어진 군에서 선택되어지는 것인 유기광전소자용 화합물.

**청구항 3**

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1의 Ar1로 표현되는 헤테로아릴기 또는 헤테로아릴렌기는 구체적으로 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸릴기, 티아졸릴기, 옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 트리아졸릴기, 피리디닐기, 피라다진기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 아크리딜기 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 벤조퀴놀리닐기, 페난스롤리디닐기로

이루어진 군에서 선택되어 지는 것인 유기광전소자용 화합물.

**청구항 4**

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1의 Ar2 내지 Ar5로 표현되는 아릴기는 구체적으로 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 스틸벤 등의 단환식 방향족 및 나프틸기, 안트라세닐기, 페나트렌기, 파이레닐기, 페릴레닐기등의 다환식 방향족환으로 이루어진 군에서 선택되어 지는 것인 유기광전소자용 화합물.

**청구항 5**

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1의 Ar2 내지 Ar5로 표현되는 헤테로아릴기는 구체적으로 티오펜기, 푸란기, 피롤기, 이미다졸릴기, 티아졸릴기, 옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 트리아졸릴기, 피리디닐기, 피라다진기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 아크리딜기 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 벤조퀴놀리닐기, 페난스롤리디닐기로 이루어진 군에서 선택되어 지는 것인 유기광전소자용 화합물.

**청구항 6**

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1의 Ar2 내지 Ar5로 표현되는 아릴 아민기는 구체적으로 디페닐 아민기, 디나프틸 아민기, 디비페닐 아민기, 페닐 나프틸 아민기, 페닐 디페닐 아민기, 디톨릴 아민기, 페닐 톨릴 아민기, 카바졸기, 트리페닐 아민기로 이루어진 군에서 선택되어 지는 것인 유기광전소자용 화합물.

**청구항 7**

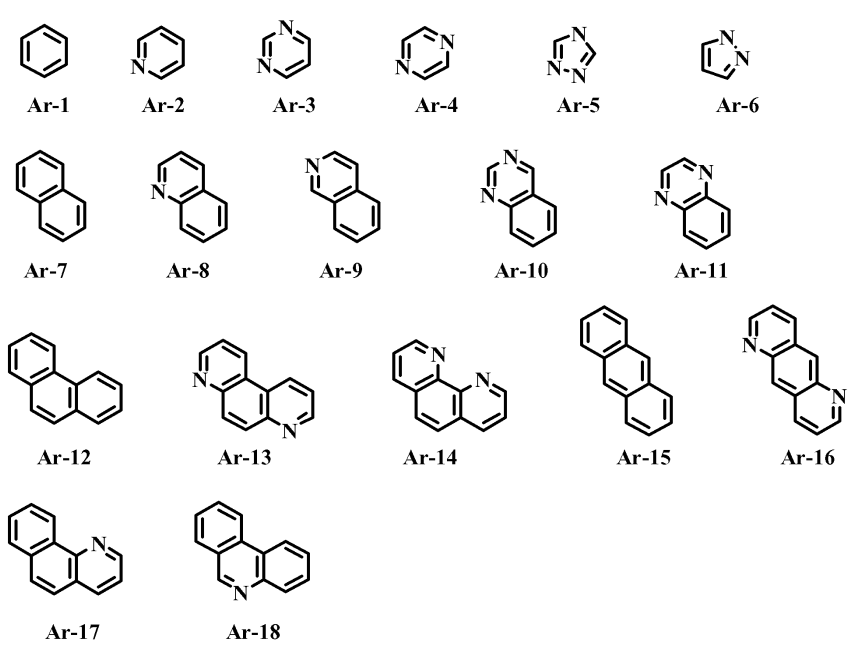
제 1항에 있어서,

상기 화학식 1의 Ar6 및/또는 Ar7은 X1 내지 X6가 모두 탄소인 페닐기이거나, X1 내지 X6 중 한 개 이상이 질소인 피리딜기, 피리미디닐기, 또는 1,3,5-트리아지닐기로 이루어진 군에서 선택되어 지는 것인 유기광전소자용 화합물.

**청구항 8**

제 1항에 있어서,

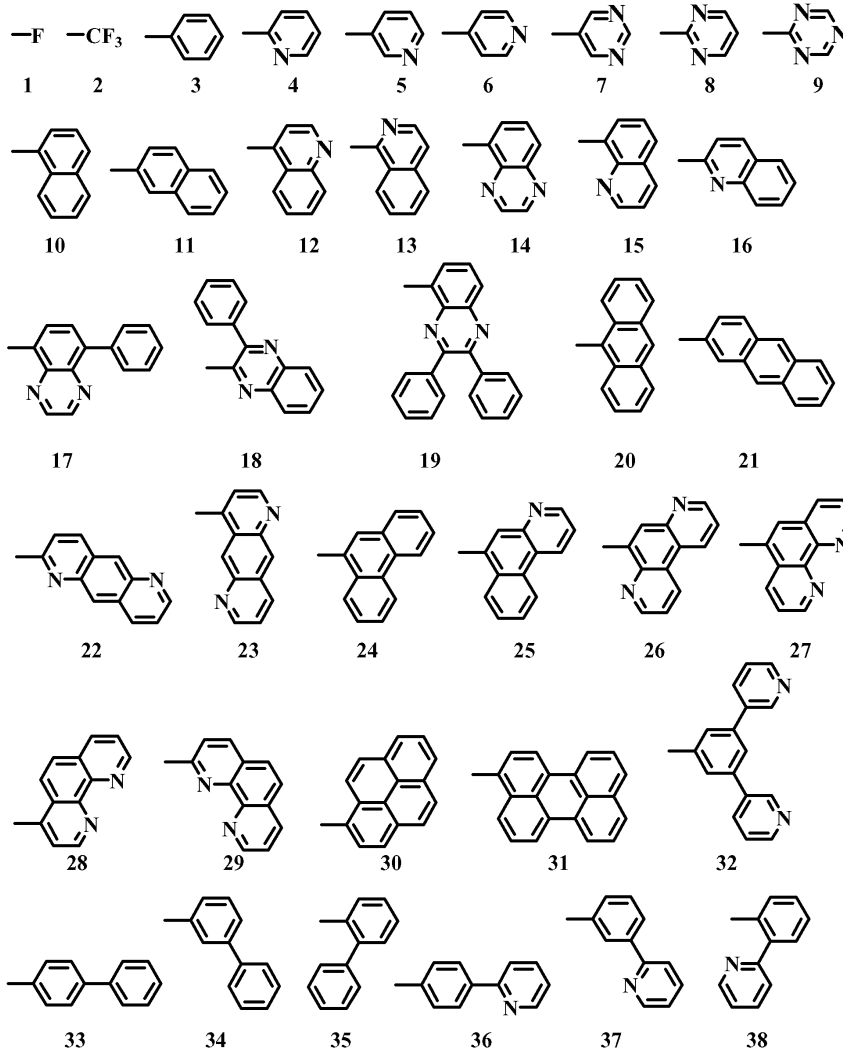
상기 화학식 1의 Ar1은 구체적으로 하기 화학식에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기광전소자용 화합물.

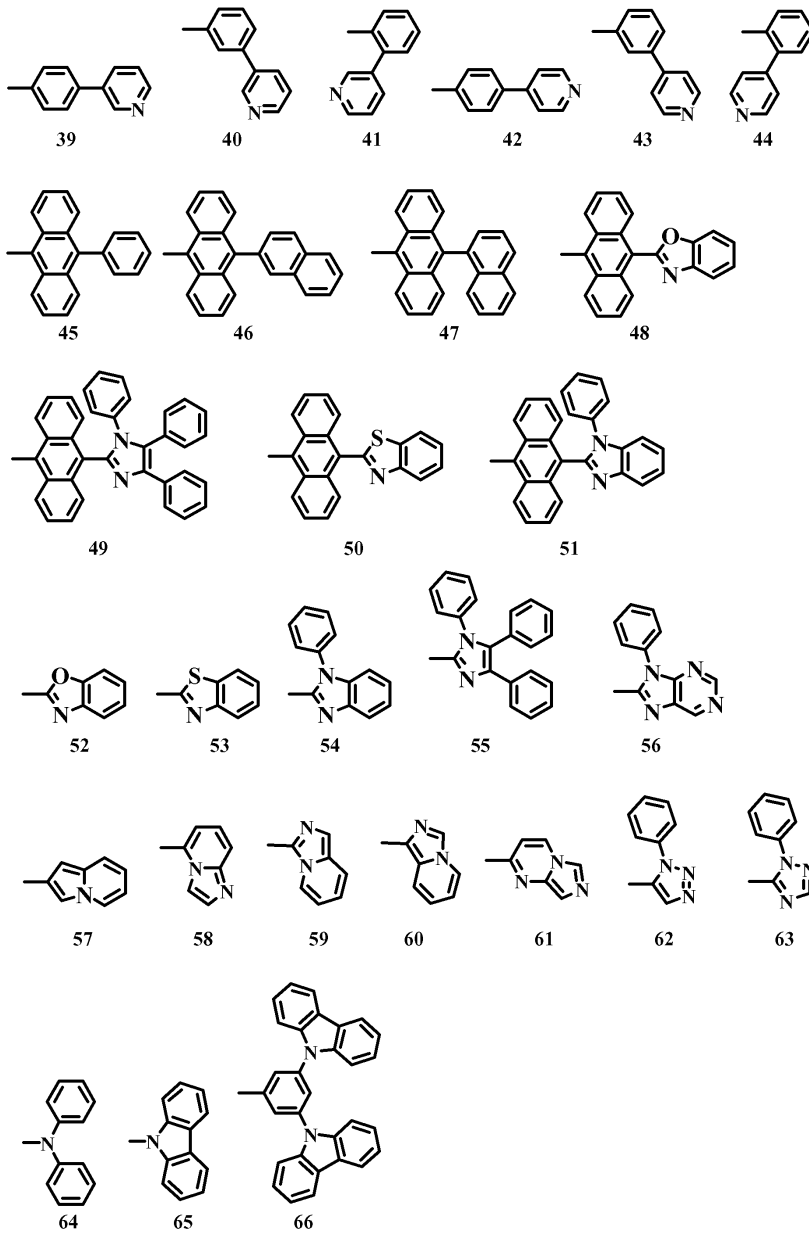


청구항 9

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1의 Ar2 내지 Ar5는 구체적으로 하기 화학식에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기광전소자용 화합물.

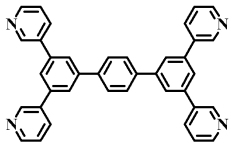




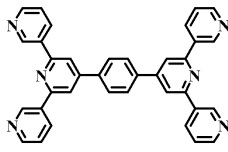
청구항 10

제 1항에 있어서,

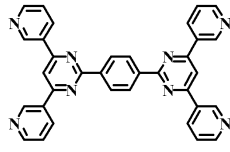
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 구체적으로 하기 화학식 2 내지 화학식 22로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기광전소자용 화합물.



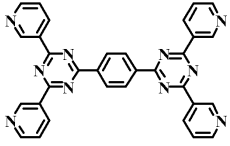
화학식 2



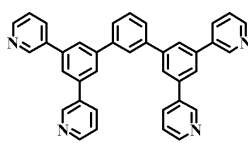
화학식 3



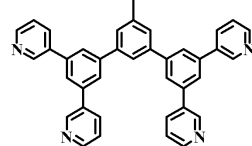
화학식 4



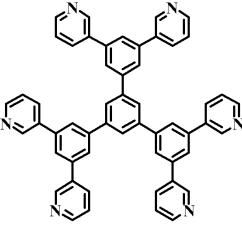
화학식 5



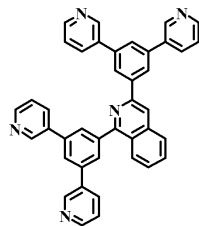
화학식 6



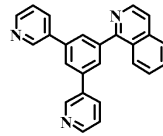
화학식 7



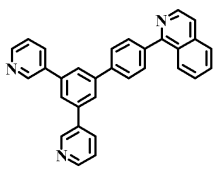
화학식 8



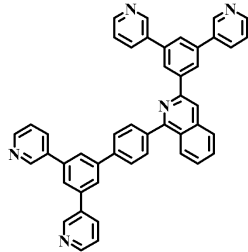
화학식 9



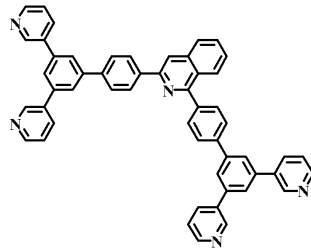
화학식 10



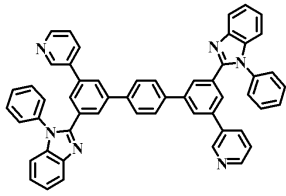
화학식 11



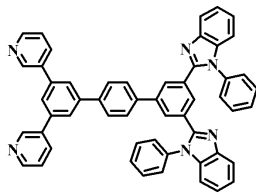
화학식 12



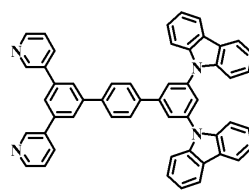
화학식 13



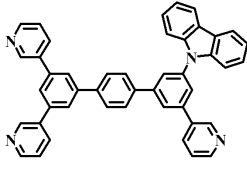
화학식 14



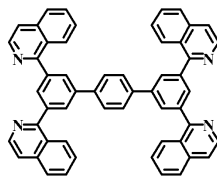
화학식 15



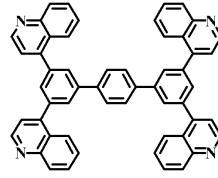
화학식 16



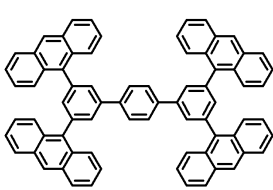
화학식 17



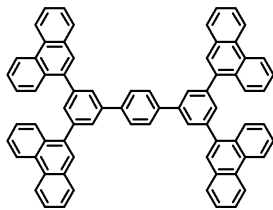
화학식 18



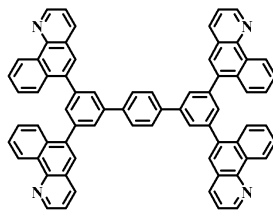
화학식 19



화학식 20



화학식 21



화학식 22

### 청구항 11

양극과 음극을 사이에 두고 게재되는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기광전소자에 있어서, 상기 유기물층 중 1층 이상이 제 1항의 화학식 1의 화합물을 포함하고 있는 것인 유기광전소자.

### 청구항 12

제 8 항에 있어서, 상기 유기물층은 발광층; 및 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층 중 하나 이상의 층을 포함하여 이루어지는 것을 특징으로 하는 유기광전소자.

## 명세서

### 발명의 상세한 설명

#### 기술분야

<1> 본 발명은 유기광전소자용 화합물 및 이를 이용한 유기광전소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 수명, 효율, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성을 향상시킬 수 있도록 새롭게 합성된 유기광전소자용 화합물 및 이를 이용한 유기광전소자에 관한 것이다.

#### 배경기술

<2> 본 명세서에서 유기광전소자(organic photoelectric device)라 함은 정공 및/또는 전자를 이용한 전극과 유기물 사이에서의 전하 교류를 필요로 하는 소자를 의미한다.

<3> 유기광전소자는 동작 원리에 따라 하기와 같이 크게 두 가지로 나눌 수 있는데, 첫째는 외부의 광원으로부터 소자로 유입된 광자에 의하여 유기물층에서 엑시톤(exiton)이 형성되고 이 엑시톤이 전자와 정공으로 분리되고, 이 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되어 전류원(전압원)으로 사용되는 형태의 전자소자이다.

<4> 둘째는, 2개 이상의 전극에 전압 또는 전류를 가하여 전극과 계면을 이루는 유기물 반도체에 정공 및/또는 전자

를 주입하고, 주입된 전자와 정공에 의하여 동작하는 형태의 전자소자이다.

- <5> 유기발광소자의 예로는 유기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체(OPC) 드럼, 유기 트랜지스터 등이 있으며, 이들은 모두 소자의 구동을 위하여 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질을 필요로 한다.
- <6> 이하에서는 주로 유기발광소자에 대하여 구체적으로 설명하지만, 상기 유기전자소자들에서는 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질이 유사한 원리로 작용한다.
- <7> 유기발광소자(OLED: Organic Light Emitting Diodes)는 최근 평판 디스플레이(flat panel display)의 수요가 증가함에 따라 주목받고 있다. 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다.
- <8> 이러한 유기발광소자는 유기발광재료에 전류를 가하여 전기에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서 통상 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 기능성 유기물 층이 삽입된 구조로 이루어져 있다.
- <9> 여기서 유기물층은 유기발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.
- <10> 이러한 유기발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공(hole)과 전자(electron)가 만났을 때 여기자(exciton)를 형성하며, 이 여기자가 다시 바닥상태(ground state)로 이동하면서 특정한 파장을 갖는 빛이 발생하게 된다.
- <11> 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사에서는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였고[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987], 유기 전계 발광소자에 대해서는 1987년에 C. W. Tang 등이 최초로 실용적인 성능을 가진 소자를 보고하였다 (Applied Physics Letters, 제51권 12호, 913-915 (1987년)).
- <12> 상기 문헌은 유기층으로서 디아민 유도체의 박막(정공 수송층)과 Alq3(tris(8-hydroxyquinolate)aluminum)의 박막(전자 수송성 발광층)을 적층한 구조를 기재하고 있다.
- <13> 최근에는, 형광 발광물질뿐 아니라 인광 발광물질도 유기전기발광소자의 발광물질로 사용될 수 있음이 알려졌다(D. F.O'Brien 등, Applied Physics Letters, 74(3), 442-444, 1999; M. A. Baldo 등, Applied Physics letters, 75(1), 4-6, 1999), 이러한 인광 발광은 바닥상태(ground state)에서 여기상태(excited state)로 전자가 전이한 후, 계간 전이 (intersystem crossing)를 통해 단일항 여기자가 삼중항 여기자로 비발광 전이된 다음, 삼중항 여기자가 바닥상태로 전이하면서 발광하는 메카니즘으로 이루어진다.
- <14> 상기한 바와 같이 유기발광소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.
- <15> 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.
- <16> 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율과 안정성을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.
- <17> 유기발광소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질, 발광 재료 중 호스트 및/또는 도판트 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하며, 아직까지 안정하고 효율적인 유기발광소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.
- <18> 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기발광소자에서도 마찬가지이다.

**발명의 내용**

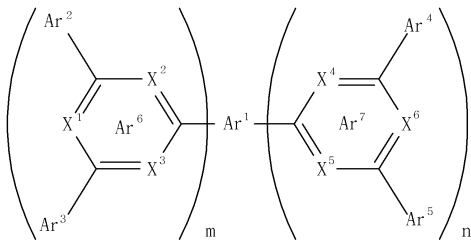
**해결 하고자하는 과제**

- <19> 본 발명이 이루고자 하는 기술적 과제는 정공수송, 전자주입 및 수송 역할 및/또는 발광 역할을 할 수 있는 유기광전소자용 화합물을 제공하는데 있다.
- <20> 본 발명이 이루고자 하는 다른 기술적 과제는 상기의 유기광전소자용 화합물을 유기발광층 중 하나 이상의 층에 사용하는 유기광전소자를 제공하는데 있다.
- <21> 본 발명이 이루고자 하는 기술적 과제들은 이상에서 언급한 기술적 과제들로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 기술적 과제들은 아래의 기재로부터 당업자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.

**과제 해결수단**

<22> 상기 기술적 과제를 해결하기 위한 본 발명에 따른 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

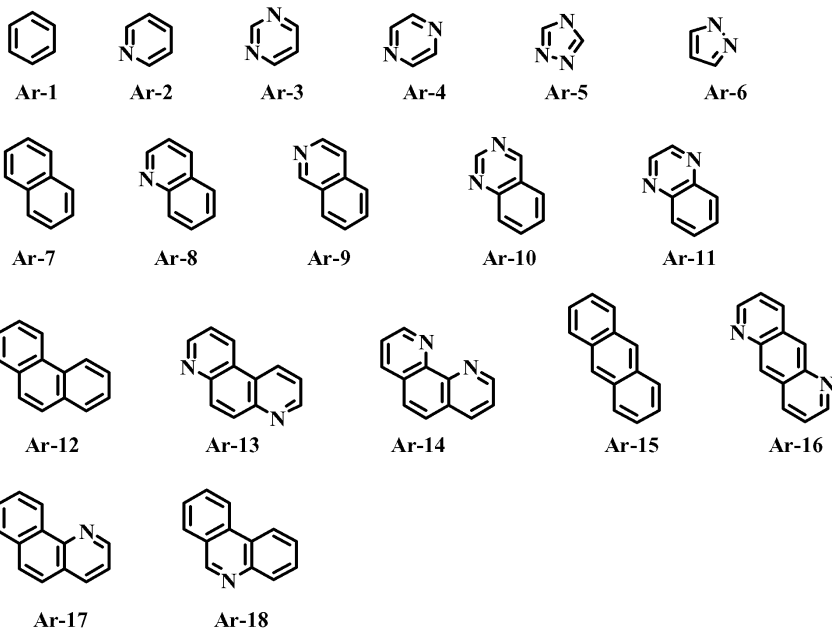
**[화학식1]**



- <24>
- <25> 상기 화학식 1에 있어서,
- <26> Ar6 및/또는 Ar7의 X1 내지 X6는 질소(N) 또는 탄소(C) 중에서 선택될 수 있으며, 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- <27> Ar6 및/또는 Ar7은 X1 내지 X6가 모두 탄소인 페닐기이거나, X1 내지 X6 중 한 개 이상이 질소인 헤테로아릴기 일 수 있다.
- <28> Ar<sup>1</sup>로 표시되는 치환기는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기 또는 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 또는 헤테로아릴렌기이다.
- <29> Ar2 내지 Ar5는 각각 독립적으로 할로젠기, 알킬기, 알케닐기 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로아릴기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기로 이루어진 군에서 선택될 수 있으며, 서로 일체가 되거나 고리를 형성할 수 있다.
- <30> m과 n은 0 내지 3의 정수이며, m+n은 1 이상이다.
- <31> 상기 다른 기술적 과제를 해결하기 위한 본 발명에 따른 유기광전소자는 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.
- <32> 이하에서는 본 발명에 제시하고자 하는 신규물질인 유기광전소자용 화합물에 대하여 상세히 설명한다.
- <33> 상기 화학식 1에 있어서 Ar1로 표현되는 아릴기 또는 아릴렌기의 예로는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 스틸벤

등의 단환식 방향족 및 나프틸기, 안트라세닐기, 페나트렌기, 파이레닐기, 페틸레닐기등의 다환식 방향족환등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

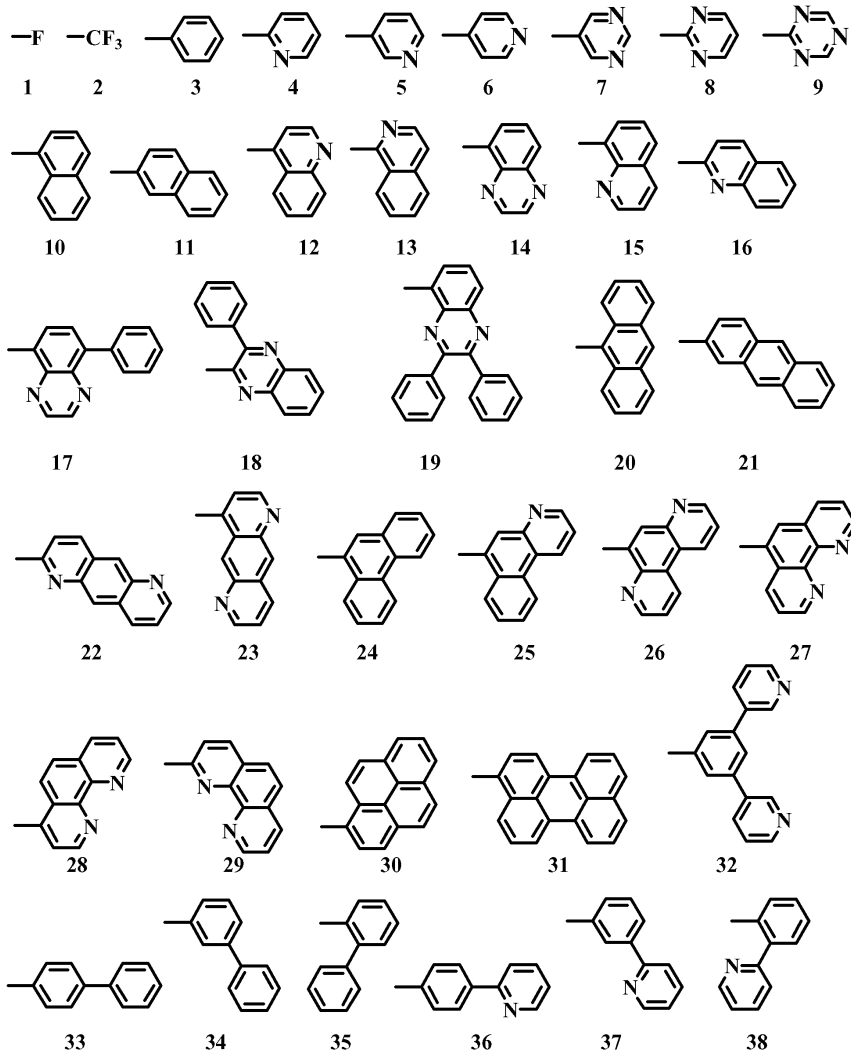
- <34> 상기 화학식 1에 있어서 Ar1로 표현되는 헤테로아릴기 또는 헤테로아릴렌기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸릴기, 티아졸릴기, 옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 트리아졸릴기, 피리디닐기, 피라다진기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 아크리딜기 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 벤조퀴놀리닐기, 페난스플리디닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는것은 아니다.
- <35> 상기 화학식 1에 있어서 Ar2 내지 Ar5로 표현되는 아릴기의 예로는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 스틸벤 등의 단환식 방향족 및 나프틸기, 안트라세닐기, 페나트렌기, 파이레닐기, 페틸레닐기등의 다환식 방향족환등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- <36> 상기 화학식 1에 있어서 Ar2 내지 Ar5로 표현되는 헤테로아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸릴기, 티아졸릴기, 옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 트리아졸릴기, 피리디닐기, 피라다진기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 아크리딜기 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 벤조퀴놀리닐기, 페난스플리디닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는것은 아니다.
- <37> 상기 화학식 1에 있어서 Ar2 내지 Ar5로 표현되는 아릴 아민기의 예로는 디페닐 아민기, 디나프틸 아민기, 디비페닐 아민기, 페닐 나프틸 아민기, 페닐 디페닐 아민기, 디톨릴 아민기, 페닐 톨릴 아민기, 카바졸기, 트리페닐 아민기 등이 있으나, 이들에만 한정되는것은 아니다.
- <38> 상기 화학식 1의 Ar6 및/또는 Ar7은 X1 내지 X6가 모두 탄소인 페닐기이거나, X1 내지 X6 중 한 개 이상이 질소인 피리딜기, 피리미디닐기, 또는 1,3,5-트리아지닐기인 것이 바람직하다.
- <39> 본 발명에 있어서, 화학식 1의 Ar2 내지 Ar5로 표현되는 치환기는 헤테로아릴기, 아릴아민기, 헤테로아릴아민기 중에서 선택되는 것이 바람직하며, 여기서 Ar2, Ar3, Ar4 및 Ar5는 서로 동일하거나 상이하고, 독립적으로 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환된 아릴아민기, 또는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기로 치환된 헤테로아릴아민기인 것이 바람직하다.
- <40> 상기 화학식 1의 Ar1 중 바람직한 예는 하기의 화학식과 같으나 이들에만 한정되는 것은 아니다.



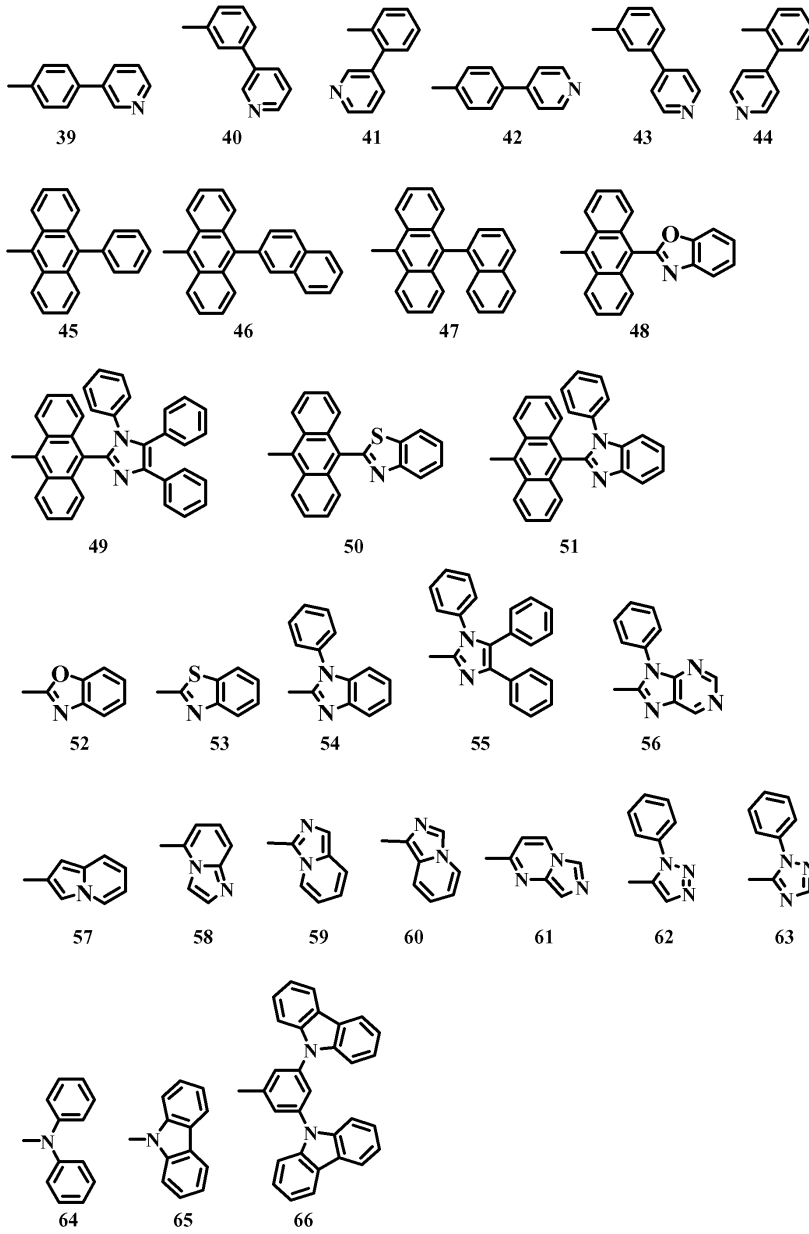
<41>

<42>

상기 화학식 1의 치환기 Ar2 내지 Ar5 중 바람직한 예는 하기와 같으나 이들에만 한정되는 것은 아니다.

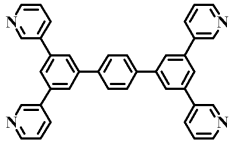


<43>

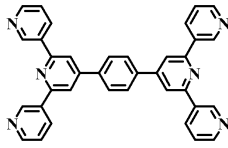


<45>

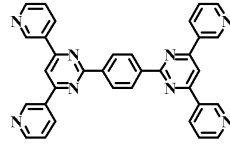
상기 화학식 1의 구체적인 예로는 하기와 같은 화학식들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.



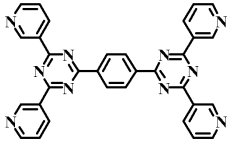
화학식 2



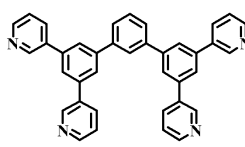
화학식 3



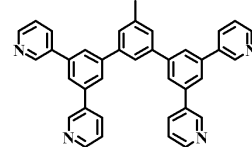
화학식 4



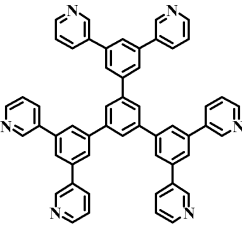
화학식 5



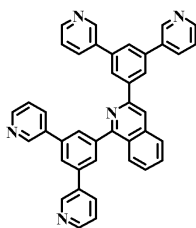
화학식 6



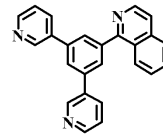
화학식 7



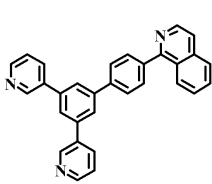
화학식 8



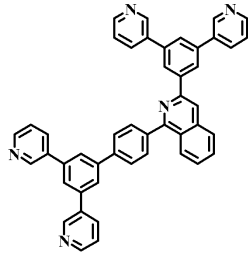
화학식 9



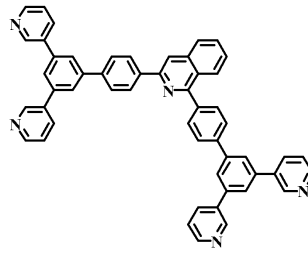
화학식 10



화학식 11

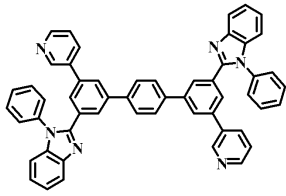


화학식 12

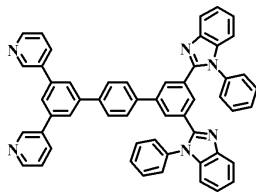


화학식 13

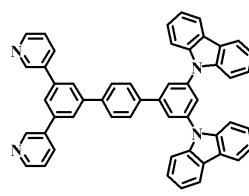
<46>



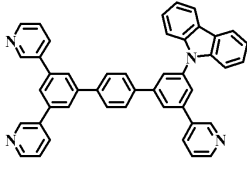
화학식 14



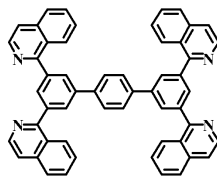
화학식 15



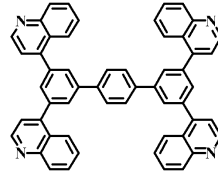
화학식 16



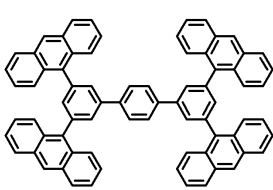
화학식 17



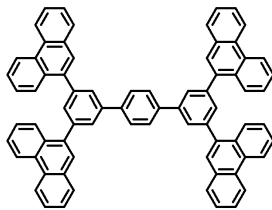
화학식 18



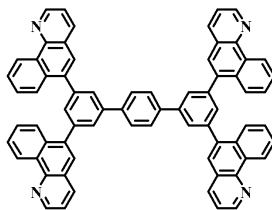
화학식 19



화학식 20



화학식 21



화학식 22

<47>

<48> 본 발명에 따른 상기 화학식 1의 화합물의 입체 구조는 Ar1로 구성된 코어 부분과 Ar6 또는 Ar7로 구성된 치환기 부분으로 나누어 생각할 수 있다.

<49> 코어 부분은 지방족 탄화수소의 구조를 이용한 평면구조를 가진다.

<50> 상기의 코어 부분에 다양한 치환기를 도입하여 발광소자에 필요한 여러 가지 특성을 가질 수 있다.

<51> 예로 피리디닐기와 같은 n-type 성질을 가지는 치환기를 포함하는 아릴기를 도입함으로써, 열적 전기적으로 안정한 n-type 물질을 합성할 수 있고, 아릴아민기와 같이 p-type 성질을 가지는 치환기를 포함하는 아릴기를 도입함으로써, p-type 물질을 합성할 수 있다.

<52> 또한 다양한 작용기를 도입할 수 있다는 장점을 이용하여 각각 n-type 성질을 가지는 치환기와 p-type 성질을 가지는 치환기를 동시에 도입함으로써 n-type 뿐만 아니라 p-type 성질도 갖는 양쪽성을 가질 수 있게 된다.

<53> n-type 성질이란 일반적으로 LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 전자 형성에 의한 음이온 특성을 갖는 성질을 의미한다. 또한, p-type 성질이란 HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 정공 형성에 의한 양이온 특성을 갖는 성질을 의미한다.

<54> 양쪽성 성질을 갖는 상기 화학식 1의 화합물은 다양한 치환기가 도입됨으로써, 전체적인 분자의 성격이 n-type 또는 p-type으로 더 강하게 될 수 있다.

<55> 예컨대, 화학식 1 중 치환기 부분에 특정 치환체가 도입되어 화학식 1의 화합물의 성질이 어느 한 쪽으로 더 강하게 되면, 화학식 1의 화합물은 정공주입, 정공수송, 발광, 전자주입 또는 전자수송 등의 물질로서의 요건을 더욱 적합하게 충족시키는 화합물이 될 수 있다.

<56> 예컨대, Ar6 내지 Ar7에 치환된 Ar2 내지 Ar5가 아민기를 함유하는 아릴기, 아민기를 함유하는 헤테로아릴기 등으로 치환될 경우, 화학식 1의 화합물은 정공 주입층 및 정공 수송층 물질로 응용 범위가 넓어진다.

<57> Ar6 내지 Ar7에 치환된 Ar2 내지 Ar5가 헤테로아릴기와 같은 전자 친화성이 우수한 물질들로 치환될 경우 화학식 1의 화합물은 전자 주입 또는 전자 수송층 물질로 응용될 수 있다.

<58> 또 다른 한편, Ar6 내지 Ar7에 치환된 Ar2 내지 Ar5가 헤테로아릴기와 같은 전자 친화성이 우수한 물질들로 치

환되고, 동시에 Ar6 내지 Ar7가 질소를 포함하는 헤테로아릴기일 경우 전자 친화능력이 배가되어 우수한 성능의 전자 주입 도는 전자 수송층 물질로 응용될 수 있다.

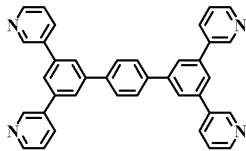
- <59> 또한 Ar5 또는 Ar6에 치환된 Ar2 내지 Ar3 또는 Ar4 내지 Ar5 중 한쪽이 아민기를 함유하는 아릴기, 아민기를 함유하는 헤테로아릴기 등으로 치환되고, 동시에 또 다른 한쪽이 헤테로아릴기와 같은 전자 친화성이 우수한 물질들로 치환될 경우 전자 수송 능력과 정공 수송 능력을 동시에 가지는 양쪽성을 가질 수 있으며, 이러한 화학식 1의 화합물은 발광층에 응용될 수 있다.
- <60> 상기 화학식 1의 Ar1 내지 Ar7의 위치에 다양한 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드 갭을 갖는 화합물을 합성할 수 있다.
- <61> 그러므로, 상기 화학식 1의 화합물은 다양한 치환기에 의하여 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 주입 및 전달층에서 요구되어지는 조건들을 충족시킬 수 있는 화합물들이 될 수 있다.
- <62> 본 발명에서는 상기 화학식 1의 화합물의 치환기에 따라 적절한 에너지 준위를 갖는 화합물을 선택하여 유기전자소자에 사용함으로써 구동 전압이 낮고 광효율이 높은 소자를 구현할 수 있다.
- <63> 도 1 내지 도 5는 상기에서 설명한 본 발명의 유기광전소자용 재료를 이용하여 제조될 수 있는 유기발광소자에 대한 다양한 실시예 들을 나타내는 단면도이다.
- <64> 도 1 내지 도 5를 참조하면, 본 발명의 실시예에 따른 유기광전소자는 양극과 음극을 사이에 두고 게재되는 한 층 이상의 유기박막층을 포함하는 구조로 되어 있다. 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다.
- <65> 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO<sub>2</sub>:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- <66> 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다.
- <67> 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- <68> 먼저, 도 1을 참조하면, 도 1은 유기박막층으로서 발광층만이 존재하는 유기광전소자를 나타내고 있다.
- <69> 도 2를 참조하면, 도 2에서는 유기박막층으로서 (발광층+전자수송층)과 홀수송층이 존재하는 2층형 유기광전소자로서 전극과의 접합성이나 홀수송성이 우수한 막을 별도로 만든 것으로서, 발광층이 전자수송층 역할을 하는 구조이다.
- <70> 도 3을 참조하면, 도 3에서는 유기박막층으로서 전자수송층, 발광층, 홀수송층이 존재하는 3층형 유기광전소자로서 발광층이 독립된 형태로 되어 있고, 전자수송성이나 홀수송성이 우수한 막을 별도의 층으로 쌓은 형태이다.
- <71> 도 4를 참조하면, 도 4에서는 유기박막층으로서 전자주입층, 발광층, 홀수송층, 홀주입층이 존재하는 4층형 유기광전소자로서 상기 도 3에 도시된 3층형 유기광전소자가 가지는 특징에 양극층과의 접합성을 생각하여 홀주입층이 추가된 형태이다.
- <72> 도 5를 참조하면, 도 5에서는 유기박막층으로서 전자주입층, 전자수송층, 발광층, 홀수송층, 홀주입층과 같은 각기 다른 기능을 하는 5개의 층이 존재하는 5층형 유기광전소자로서 전자주입층을 별도로 형성하여 저전압화에 효과적인 특징이 있다.
- <73> 상기에서 설명한 1층 내지는 5층으로 되어 있는 유기박막층을 형성하기 위해서는, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금, 및 이온도금과 같은 건식성막법과 스핀코팅(spin coating), 침지법(dipping), 유동코팅법(flow coating)과 같은 습식성막법 등과 같은 공정이 사용될 수 있다.
- <74> 본 발명의 유기광전 소자에서 발광층, 전자수송층 및/또는 전자주입층, 정공수송층 및/또는 정공주입층, 정공저지층 중 적어도 한 층은 상술된 화학식 1의 화합물을 포함하는 것이 바람직하다.

**효 과**

<75> 본 발명의 화합물들은 신규한 화합물로서, 유기 발광소자를 비롯한 유기광전소자에서 정공주입, 정공수송, 발광, 또는 전자 주입 및/또는 수송역할을 할 수 있으며, 적절한 도판트와 함께 발광 호스트로서의 역할도 할 수 있다. 본 발명의 신규한 화합물들은 유기발광소자를 비롯한 유기광전소자에 적용함으로써, 소자의 효율, 구동전압, 안정성 면에서 우수한 효과를 가지는 유기광전소자의 제조가 가능해 진다.

**발명의 실시를 위한 구체적인 내용**

<76> <실시예 1> : 화학식 2로 표현되는 화합물의 합성

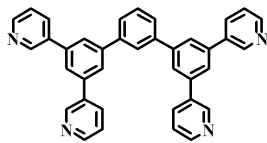


<77>

<78> 1,4-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로라-2-닐)벤젠, (1,4-bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxybororan-2-yl)benzene), (0.88g)과 1-브로모-3,5-디피리딜 벤젠(1.66g), 테트라키스(트리페닐포스피노)팔라듐(0.15g)을 테트라하이드로퓨란에 녹인 후 포타슘카모네이트(1.47g)수용액을 첨가하고 80°C에서 24시간 교반시킨 후, 생성된 흰색 고체를 감압여과하고 메탄올로 씻어주었다.

<79> 얻어진 흰색 고체를 클로로포름용액에서 활성탄소로 처리하고, 감압 여과한 후 얻어진 흰색 고체를 감압하에서 건조하여 화학식 2로 표현되는 화합물(1.43g, 74%)을 얻었다.

<80> <실시예 2> : 화학식 6로 표현되는 화합물의 합성

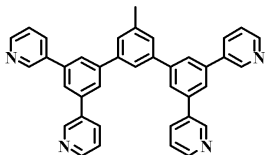


<81>

<82> 1,3-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로라-2-닐)벤젠, (1,3-bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxybororan-2-yl)benzene), (2.0g)과 1-브로모-3,5-디피리딜 벤젠(4.15g), 테트라키스(트리페닐포스피노)팔라듐(0.3g)을 테트라하이드로퓨란에 녹인 후 포타슘카모네이트(2.8g)수용액을 첨가하고 80°C에서 24시간 교반시킨 후, 생성된 흰색 고체를 감압여과하고 메탄올로 씻어주었다. =

<83> 얻어진 흰색 고체를 클로로포름용액에서 활성탄소로 처리하고, 감압 여과한 후 얻어진 흰색 고체를 감압하에서 건조하여 화학식 6로 표현되는 화합물(2.45g, 75%)을 얻었다

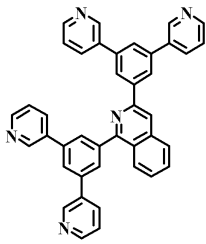
<84> <실시예 3> : 화학식 7로 표현되는 화합물의 합성



<85>

<86> 3,5-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로라-2-닐)톨루엔, (3,5-bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxybororan-2-yl)toluene), (2g)과 1-브로모-3,5-디피리딜 벤젠(4g), 테트라키스(트리페닐포스피노)팔라듐(0.3g)을 테트라하이드로퓨란에 녹인 후 포타슘카모네이트(2.8g)수용액을 첨가하고 80°C에서 24시간 교반시킨 후, 생성된 흰색 고체를 감압여과하고 메탄올로 씻어주었다. 얻어진 흰색 고체를 클로로포름용액에서 활성탄소로 처리하고, 감압 여과한 후 얻어진 흰색 고체를 감압하에서 건조하여 화학식 7로 표현되는 화합물(2.22g, 70%)을 얻었다.

<87> <실시예 4> : 화학식 9로 표현되는 화합물의 합성

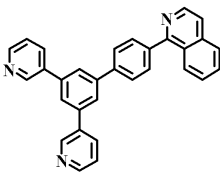


<88>

<89> 1,3-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로라-2-닐)이소퀴놀린, (1,3-bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxybororan-2-yl)isoquinoline), (3.0g)과 1-브로모-3,5-디피리딜 벤젠(5.4g), 테트라키스(트리페닐포스피노)팔라듐(0.6g)을 테트라하이드로퓨란에 녹인 후 포타슘카모네이트(3.5g)수용액을 첨가하고 80°C에서 48시간 교반시킨 후, 생성된 화합물을 클로로포름으로 추출한 후 용액을 제거하여 흰색 고체를 얻었다.

<90> 얻어진 흰색 고체를 클로로포름과 석유에테르에서 재결정하여 화학식 11로 표현되는 화합물(5.25g, 75%)을 얻었다.

<91> <실시예 5> : 화학식 11로 표현되는 화합물의 합성



<92>

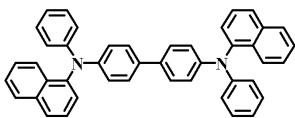
<93> 1-(4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로라-2-닐)페닐)이소퀴놀린, (1-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxybororan-2-yl)phenyl)isoquinoline), (5.85g)과 1-브로모-3,5-디피리딜 벤젠(5g), 테트라키스(트리페닐포스피노)팔라듐(0.56g)을 테트라하이드로퓨란에 녹인 후 포타슘카모네이트(3.2g)수용액을 첨가하고 90°C에서 12시간 교반시킨 후, 생성된 화합물을 클로로포름으로 추출한 후 용액을 제거하여 흰색 고체를 얻었다.

<94> 얻어진 흰색 고체를 클로로포름과 석유에테르에서 재결정하여 화학식 11로 표현되는 화합물(5.25g, 75%)을 얻었다.

<95> <실험예 1> : 유기발광 소자의 제조

<96> 코닝(Corning) 15 /cm<sup>2</sup> (1200) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수물 속에서 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV, 오존 세정하였다.

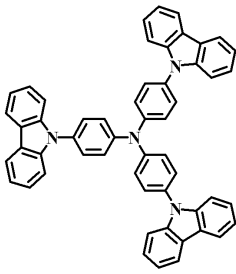
<97> 상기 기판 상부에 하기 화학식의 화합물 N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘 (NPB)을 진공 증착하여 정공 수송층을 40nm 두께로 형성하였다.



<98>

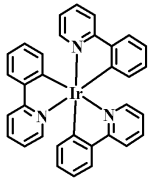
<99> 상기 정공 수송층 상부에 인광 호스트로서 하기 화합물 4를 92 중량부로, 하기 화합물 5로 표시되는 인광 도펀트인 트리스(1-페닐피리딜) 이리듐을 8 중량부로 진공 증착하여 30 nm의 두께로 발광층을 형성하였다.

<100> <화합물 4>



<101>

<102> <화합물 5>



<103>

<104> 상기 발광층 상부에 상기 화학식 2로 표시되는 본 발명의 화합물을 진공 증착하여 25nm의 전자수송층을 형성하였다.

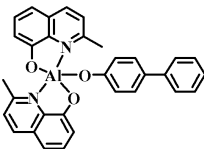
<105> 상기 전자수송층 상부에 LiF 0.5 nm 두께의 전자주입층과 Al 100 nm를 순차적으로 진공 증착하여 LiF/Al 전극을 형성하고 도 3에 도시한 바와 같은 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

<106> <실험예 2> : 유기발광 소자의 제조

<107> 상기 실시예 6에서와 같이 준비된 기판 상부에 하기 화학식의 화합물 N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘 (NPB)을 진공 증착하여 정공 수송층을 40nm 두께로 형성하였다.

<108> 상기 정공 수송층 상부에 인광 호스트로서 하기 화학식의 화합물 4를 92 중량부로, 인광 도펀트인 트리스(1-페닐피리딜) 이리듐을 8 중량부로 진공 증착하여 30 nm의 두께로 발광층을 형성하였다.

<109> 상기 발광층 상부에 하기 화학식으로 표시되는 화합물 BA1q3을 진공증착하여 5nm의 정공차단층을 형성하였다.



<110>

<111> 상기 정공차단층 상부에 본 발명의 상기 화학식 11의 화합물을 진공증착하여 20nm의 전자수송층을 형성하였다.

<112> 상기 전자수송층 상부에 LiF 0.5 nm 두께의 전자주입층과 Al 100 nm를 순차적으로 진공 증착하여 LiF/Al 전극을 형성하고 도 3에 도시한 바와 같은 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

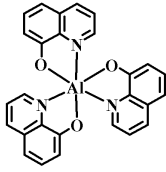
<113> <비교예 1> : 유기발광 소자의 제조

<114> 상기 실시예 6에서와 같이 준비된 기판 상부에 하기 화학식의 화합물 N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘 (NPB)을 진공 증착하여 정공 수송층을 40nm 두께로 형성하였다.

<115> 상기 정공 수송층 상부에 인광 호스트로서 하기 화학식의 화합물 4를 92 중량부로, 인광 도펀트인 트리스(1-페닐피리딜) 이리듐을 8 중량부로 진공 증착하여 30 nm의 두께로 발광층을 형성하였다.

<116> 상기 발광층 상부에 화합물 BA1q3을 진공증착하여 5nm의 정공차단층을 형성하였다.

<117> 상기 정공차단층 상부에 하기 화학식의 화합물 Alq3을 진공증착하여 20nm의 전자수송층을 형성하였다.



<118>

<119> 상기 전자수송층 상부에 LiF 5 nm 두께의 전자주입층과 Al 100 nm를 순차적으로 진공 증착하여 LiF/Al 전극을 형성하고 도 3에 도시한 바와 같은 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

**표 1**

	V <sub>on</sub>	@ 1000 cd/m <sup>2</sup>			CIE	
		V	cd/A	lm/W	x	y
실험예1	2.8	6.2	43.16	21.87	0.30	0.60
비교예1	3.2	8.6	28.96	10.58	0.33	0.67

<120>

<121> 표 1은 상기 실험예 1 및 비교예에 따라 제조된 유기 발광소자에 있어서 전압-전류와 효율 특성 및 발광 특성을 조사한 것이다.

<122> 표 1을 참조하면, 비교예 1과 같이 Alq3를 전자수송층으로 사용한 경우 보다 본 발명에서 제시하는 신규한 물질을 사용하여 전자수송층을 형성한 실험예 1의 경우가 낮은 구동 전압과 우수한 성능의 발광효율을 가짐을 알 수 있다.

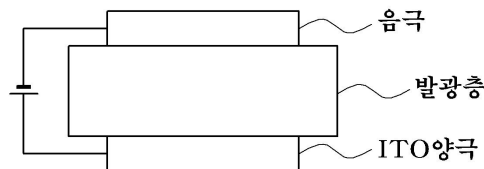
<123> 이상 첨부된 도면 및 자료를 이용하여 본 발명의 실시예 들을 설명하였으나, 본 발명은 상기 실시예 들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예 들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

**도면의 간단한 설명**

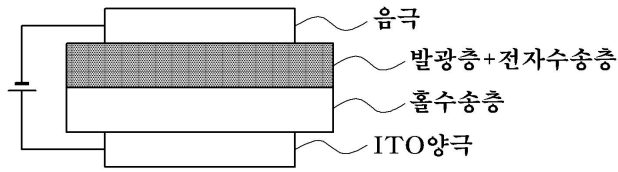
<124> 도 1 내지 도 5는 상기에서 설명한 본 발명의 유기발광소자용 재료를 이용하여 제조될 수 있는 유기발광소자에 대한 다양한 실시예들을 나타내는 단면도이다.

**도면**

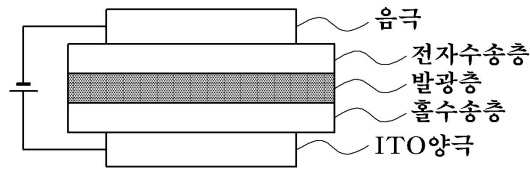
**도면1**



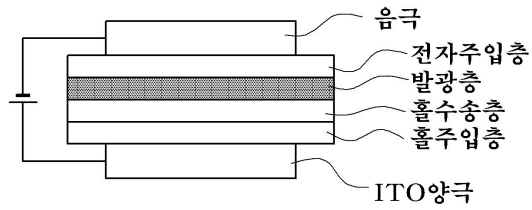
도면2



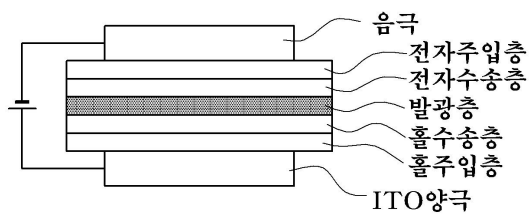
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	有机光电器件化合物和使用其的有机光电器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020090008737A</a>	公开(公告)日	2009-01-22
申请号	KR1020070071933	申请日	2007-07-18
[标]申请(专利权)人(译)	第一毛织株式会社		
申请(专利权)人(译)	第一毛织有限公司		
[标]发明人	MYEONG SOON KANG 강명순 MI YOUNG CHAE 채미영 EUN SUN YU 유은선 NAM SOO KIM 김남수 YOUNG HOON KIM 김영훈 HO JAE LEE 이호재 HO KUK JUNG 정호국 JIN SEONG PARK 박진성		
发明人	강명순 채미영 유은선 김남수 김영훈 이호재 정호국 박진성		
IPC分类号	C09K11/06		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/0067 H01L51/50 H01L51/5012 C09K2211/1011 C09K2211/1029 C09K2211/1059 C09K2211/1074		
其他公开文献	KR100904070B1		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

#### 摘要(译)

本发明涉及一种新型有机光电器件用化合物和使用该化合物的有机光电器件，它可以改善有机光电器件的寿命，效率，电化学稳定性和热稳定性。根据本发明的用于有机光电装置的新型化合物可以在包括有机发光器件的有机光电装置中用作空穴注入，空穴传输，电子注入和传输或发光材料。在驱动电压和稳定性方面表现出优异的特性。 [化学式1]

