



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2012-0029258  
(43) 공개일자 2012년03월26일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)  
(21) 출원번호 10-2010-0091239  
(22) 출원일자 2010년09월16일  
심사청구일자 2010년09월16일

(71) 출원인  
주식회사 알파켄  
경기도 수원시 영통구 신원로 261 (매탄동)  
(72) 발명자  
조규오  
경기도 용인시 기흥구 보정로 30, 동아솔레시아  
파트 120동 1101호 (보정동)  
남현국  
경기도 수원시 영통구 신원로250번길 16-1, 304호  
(매탄동)  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
천민정

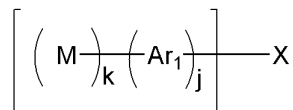
전체 청구항 수 : 총 9 항

(54) 발명의 명칭 **헤테로방향환 화합물 및 이를 사용한 유기발광소자**

(57) 요약

본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로방향환 화합물 및 이를 이용한 유기발광소자를 제공한다.

[화학식 1]



상기 화학식 1 중,

Ar1은 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴렌기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴렌기이고;

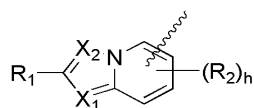
X는 수소, 중수소, 할로젠, 히드록시, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아실기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴기를 나타내고;

j는 0 내지 6 정수이고;

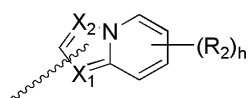
k은 1 내지 2의 정수이고

M은 하기 화학식 1a 내지 1c로 나타내어지는 기이다:

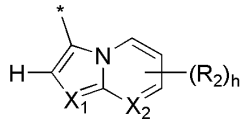
[화학식 1a]



[화학식 1b]



[화학식 1c]



대표도 - 도1



(72) 발명자

**장승희**

경기도 수원시 영통구 원천동 386-6번지 205호

**김제용**

경기도 광명시 안현로 35, 하안주공2단지아파트  
206동 1102호 (하안동)

**차효준**

경기도 안산시 단원구 와동로 94-8, 502호 (와동,  
삼성쉐르빌)

**김현돈**

경기도 안양시 동안구 평촌동 932-6 꿈마을라이프  
아파트 106-802

**박상준**

경기도 안양시 동안구 호계동 1055-1 무궁화코오롱  
아파트 711-401

**이지훈**

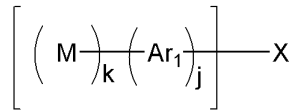
충청북도 충주시 연수동산로 26, 힐스테이트아파트  
101동 1104호 (연수동)

**특허청구의 범위**

**청구항 1**

하기 화학식 1로 표시되는 헤테로방향환 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1 중,

Ar1은 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴렌기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴렌기이고;

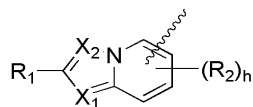
X는 수소, 중수소, 할로젠, 히드록시, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아실기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴기를 나타내고;

j는 0 내지 6 정수이고;

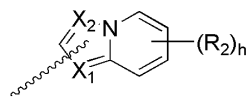
k은 1 내지 2의 정수이고

M은 하기 화학식 1a 내지 1c로 나타내어지는 기이다:

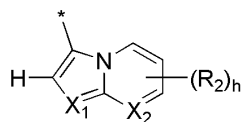
[화학식 1a]



[화학식 1b]



[화학식 1c]



R1 및 R2는, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록시, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아실기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴기를 나타내고;

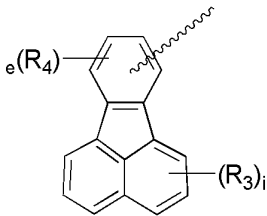
X1, X2는 CR5, N, SiR5이고,

R5는 수소, 중수소, 할로젠, 히드록시, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아실기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐기, 치환 또는 비치환된

(C2-C30)알킬닐기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴기,  
 h는 0 내지 3의 정수이다.

**청구항 2**

제1항에 있어서, 상기 X는 하기 구조를 갖는 것을 특징으로 하는 헤테로방향환 화합물.



R3 및 R4는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록시, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아실기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알킬닐기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴기이고,  
 i는 0 내지 6 정수이다.

**청구항 3**

제 1항에 있어서,

R1, R2, R5는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 히드록실기 C1-C30 알킬기, C1-C30 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 비페닐레닐기, 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 메틸안트릴기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리세닐기, 에틸-크리세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 클로로페틸레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 플루오레닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기, 카르바졸릴기, 티오펜릴기, 인돌릴기, 푸리닐기, 벤즈이미다졸릴기, 퀴놀리닐기, 벤조티오펜릴기, 파라티아지닐기, 피롤릴기, 피라졸릴기, 이미다졸릴기, 이미다졸리닐기, 옥사졸릴기, 티아졸릴기, 트리아졸릴기, 테트라졸릴기, 옥사디아졸릴기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 티안트레닐기(thianthrenyl), 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 옥시라닐기, 피롤리디닐기, 피라졸리디닐기, 이미다졸리디닐기, 피페리디닐기, 피페라지닐기, 모르폴리닐기, 디(C6-C30아릴)아미노기, 트리(C6-C30아릴)실릴기, 및 이들의 유도체로 이루어진 군 중에서 선택되며,

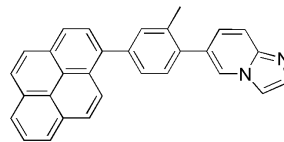
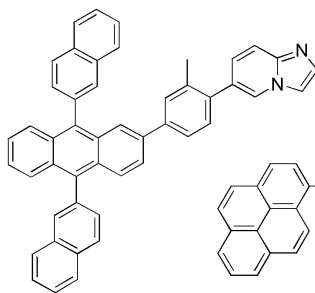
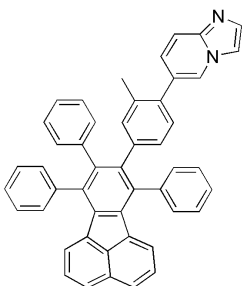
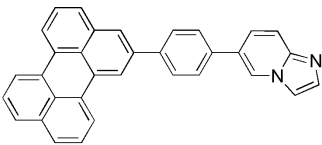
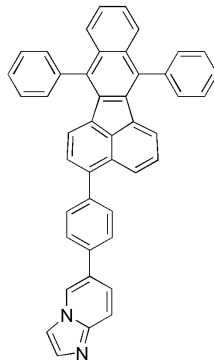
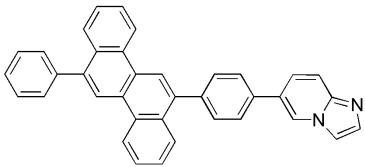
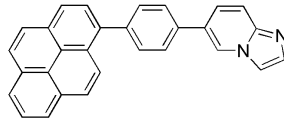
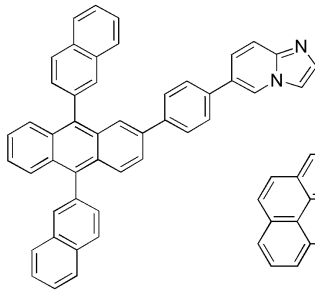
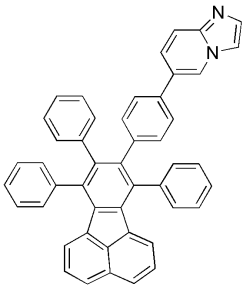
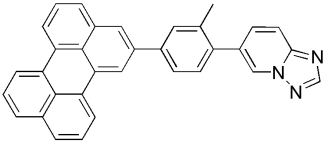
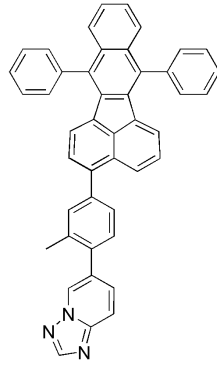
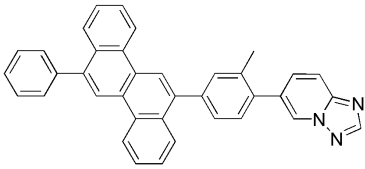
Ar1은 상기 나열된 기에서 수소 위치가 결합 사이트(site)가 될 수 있는 것 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 헤테로방향환 화합물.

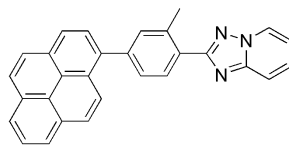
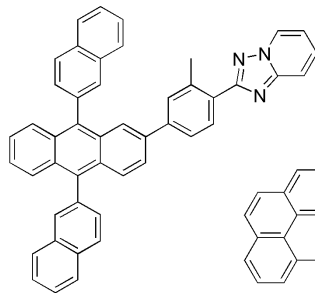
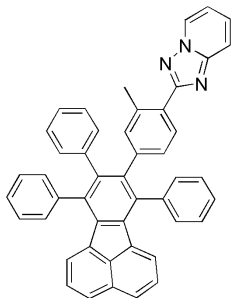
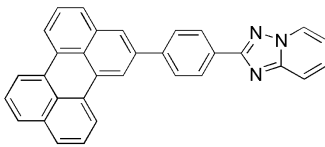
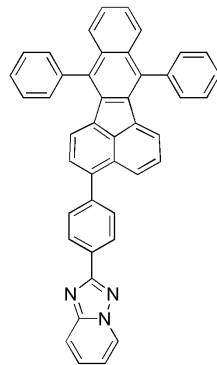
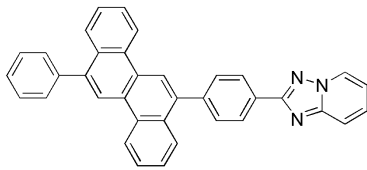
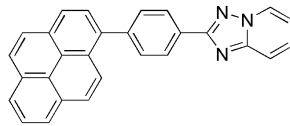
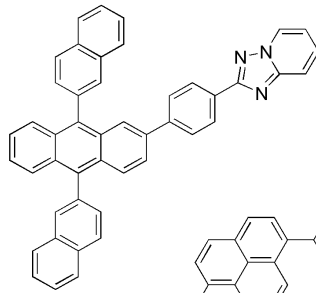
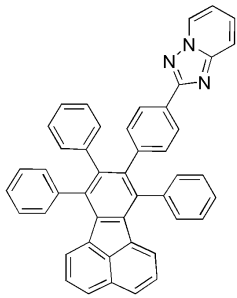
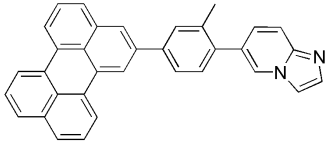
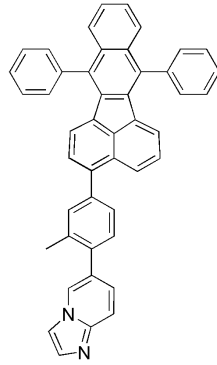
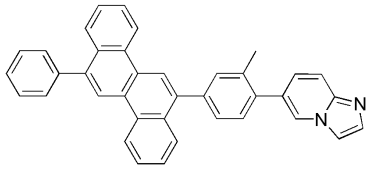
**청구항 4**

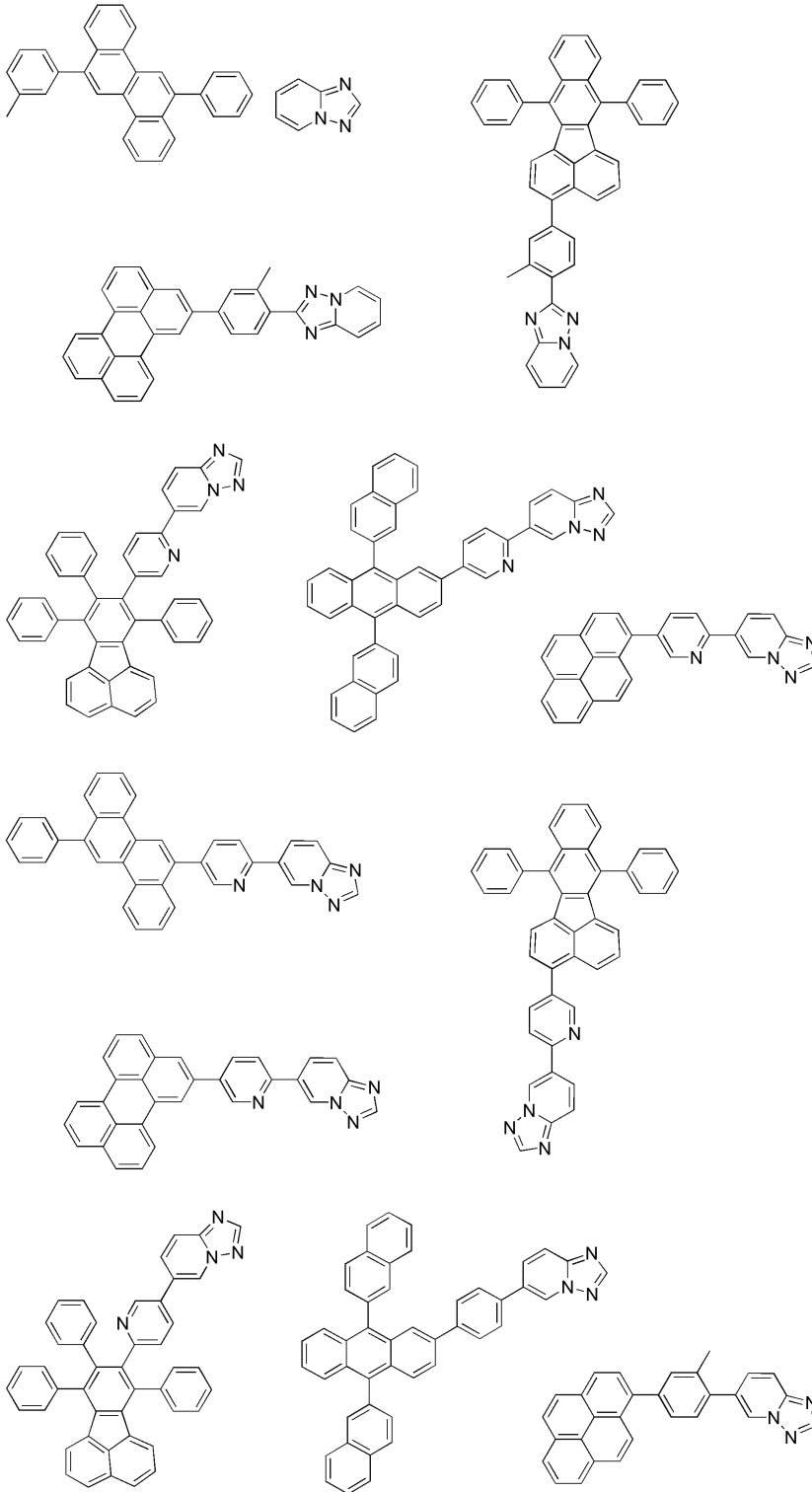
제 1항에 있어서,

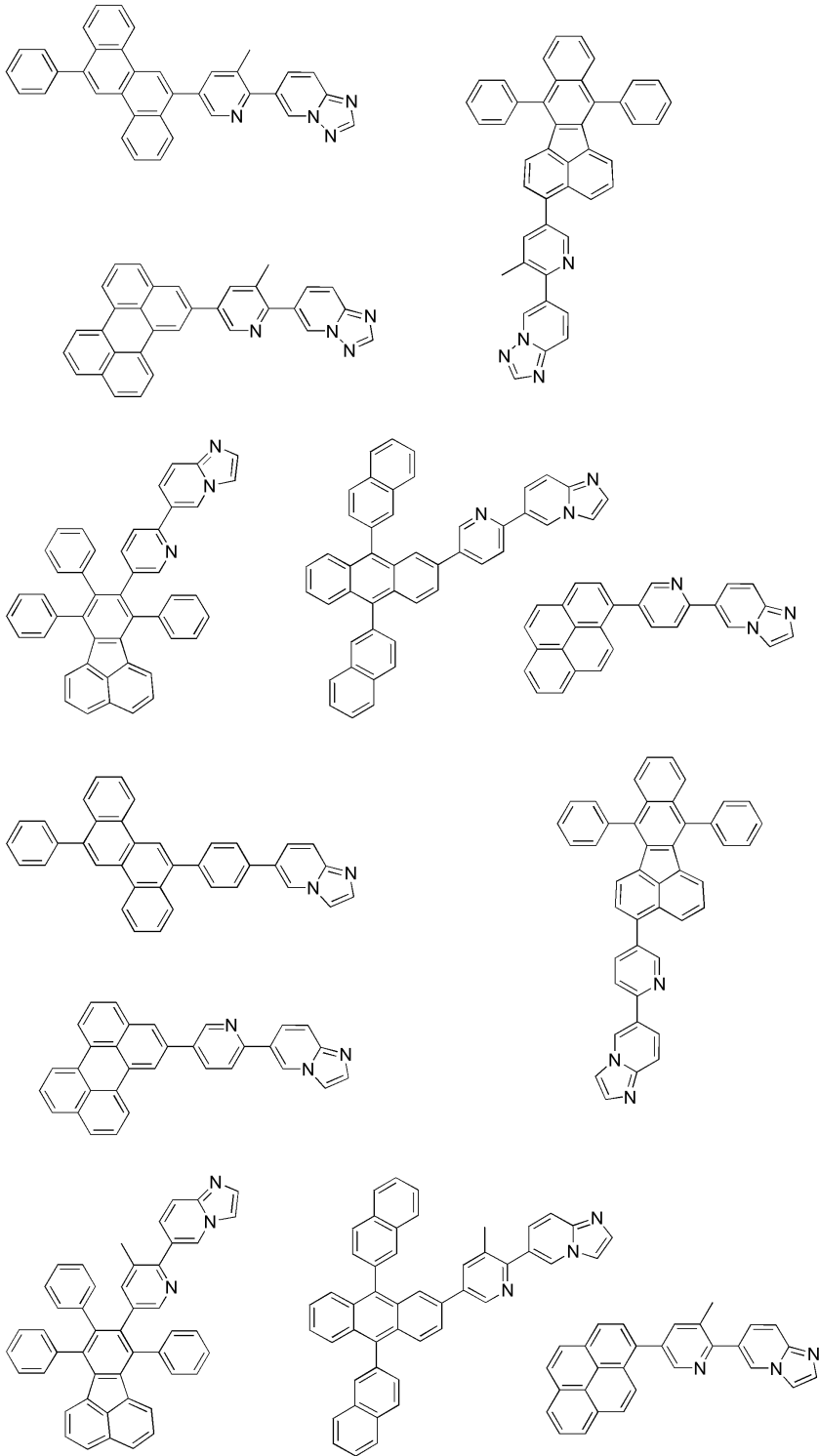
Ar1은 하기 화합물 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로방향환 화합물.

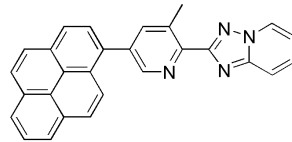
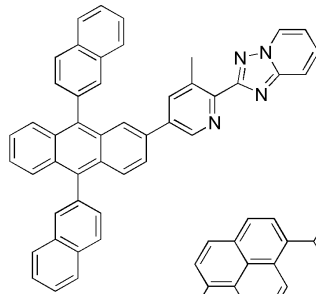
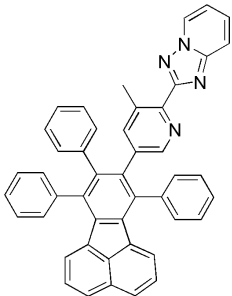
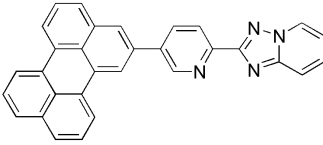
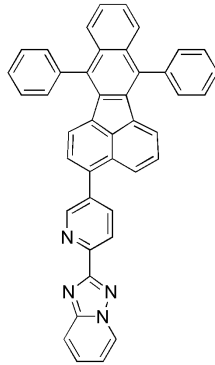
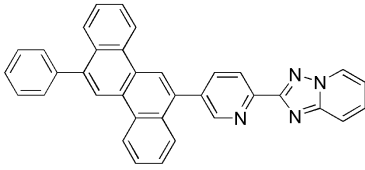
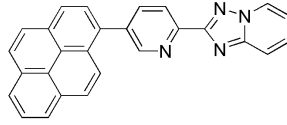
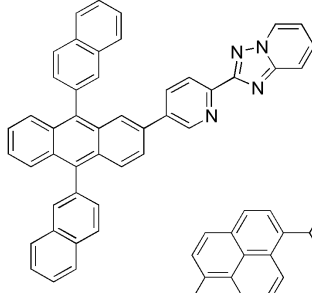
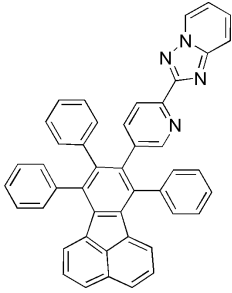
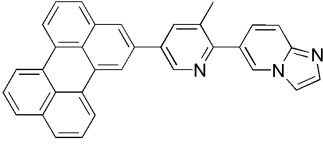
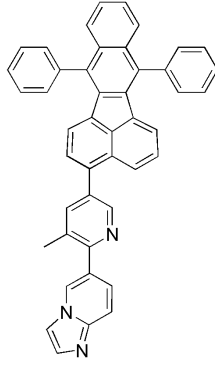
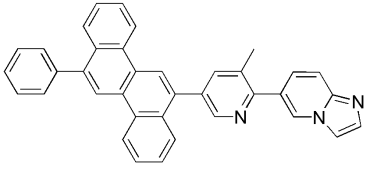


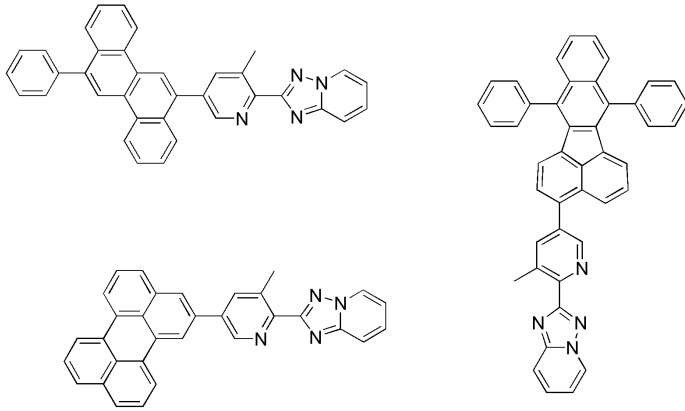












**청구항 6**

제 1항에 있어서,

화학식 1b는 R5가 Ar1 또는 X와의 결합 사이트(site)인 것을 특징으로 하는 헤테로방향환 화합물.

**청구항 7**

제 1항 내지 제 6항 중 어느 한 항의 헤테로방향환 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

**청구항 8**

제 7항에 있어서,

상기 유기발광소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어져 있으며, 상기 유기물층 중 적어도 하나 이상의 유기물층은 상기 헤테로방향환 화합물을 하나 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

**청구항 9**

제 8항에 있어서,

상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층, 전자주입층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

**명세서**

**기술분야**

[0001] 본 발명은 헤테로방향환 화합물 및 이를 사용한 유기발광소자에 관한 것이다.

**배경기술**

[0002] 유기발광소자(Organic Light Emitting Diode : OLED)는 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 점에서 많은 연구가 이루어지고 있다.

[0003] 유기발광소자는 일반적으로 애노드/유기 발광층/캐소드의 적층구조를 가지며, 애노드/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/캐소드 또는 애노드/정공주입층/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/전자주입층/캐소드 등과 같은 다양한 구조도 가질 수 있다.

- [0004] 발광층은, 일반적으로 호스트 재료라고 칭해지는 전하 수송성의 화합물에, 형광체나 인광 발광체를 도핑하여 제조할 수도 있다. 유기발광소자에 있어서의 유기 재료의 선택은, 그 소자의 효율이나 내구성 등 다양한 특성에 큰 영향을 미친다.
- [0005] 유기발광소자에 있어서는, 양 전극으로부터 주입된 전하가 발광층에서 재결합하여 발광이 얻어지는데, 전자의 이동 속도보다 정공의 이동 속도가 빠르기 때문에, 정공의 일부가 발광층을 빠져 나가버리는 것에 의한 효율 저하가 문제가 된다. 그 때문에 전자가 이동하기 쉬운 전자 수송 재료가 요구되고 있다.
- [0006] 대표적인 발광 재료인 트리스(8-히드록시퀴놀린)알루미늄(이후, Alq라고 약칭함)는 전자 수송 재료로서도 일반적으로 이용되지만, 전자의 이동 속도는 느리다고 알려져 있다. 그 때문에, 이동 속도가 빠른 재료로서, 2-(4-비페닐릴)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(이후, PBD라고 약칭함) 등이 제안되었다. 그러나, PBD는 결정화를 일으키기 쉬운 등, 박막 상태에 있어서의 안정성이 부족한 것이 지적되어, 만족스러운 소자 특성은 얻어지지 않았다.

**발명의 내용**

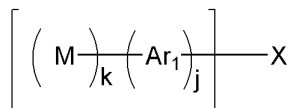
**해결하려는 과제**

- [0007] 본 발명은 상기의 문제점을 해결하기 위한 것으로서, 유기발광소자의 한 쌍의 전극 사이에 개재된 유기물층에 사용할 수 있는 우수한 특성의 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.
- [0008] 또한, 전자수송층 재료로서 특히 우수한 화합물 및 이를 이용한 유기발광소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

**과제의 해결 수단**

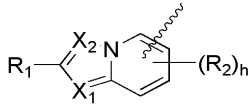
[0009] 상기의 목적을 달성하기 위한 본 발명은, 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로방향환 화합물을 제공한다.

[0010] [화학식 1]



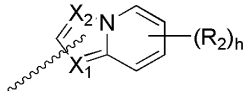
- [0011] [0010]의 화학식 1 중,
- [0012] Ar1은 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴렌기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴렌기이고;
- [0013] X는 수소, 중수소, 할로젠, 히드록시, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아실기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴기를 나타내고;
- [0014] j는 0 내지 6 정수이고;
- [0015] k은 1 내지 2의 정수이고
- [0016] M은 하기 화학식 1a 내지 1c로 나타내어지는 기이다:

[0018] [화학식 1a]



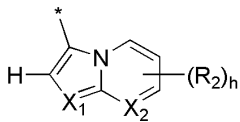
[0019]

[0020] [화학식 1b]



[0021]

[0022] [화학식 1c]



[0023]

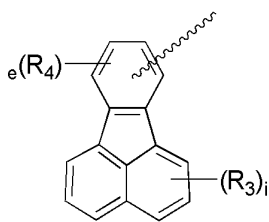
[0024] R1 및 R2는, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록시, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아실기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴기를 나타내고;

[0025] X1, X2는 CR5, N, SiR5이고,

[0026] R5는 수소, 중수소, 할로젠, 히드록시, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아실기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴기이고,

[0027] h는 0 내지 3의 정수이다.

[0028] 또한, 상기 X는 하기 구조를 갖는 것을 특징으로 하는 헤테로방향환 화합물인 것을 특징으로 한다.



[0029]

[0030] 본 발명은 또한, 상기 헤테로방향환 화합물을 사용하는 유기발광소자로서, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어져 있으며, 상기 유기물층 중 적어도 하나 이상의 유기물층은 상기 헤테로방향환 화합물을 하나 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기발광소자를 제공한다. 특히 전자수송층에 상기 헤테로방향환 화합물이 포함될 수 있다.

**발명의 효과**

[0031] 본 발명에 따라 제조된 헤테로방향환 화합물을 포함하는 유기발광소자는 휘도가 우수할 뿐만 아니라, 구동 전압, 발광 효율이 매우 우수한 효과가 있다.

**도면의 간단한 설명**

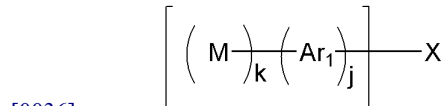
- [0032] 도 1은 본 발명의 일실시예에 따른 유기발광소자의 적층 구조를 나타낸 단면도,
- 도 2는 각각 비교예 1 및 본 발명의 실시예 1 내지 실시예 4에 대한 유기발광소자의 휘도-전압 그래프,
- 도 3는 각각 비교예 1 및 본 발명의 실시예 1 내지 실시예 4에 대한 유기발광소자의 전류밀도-전압 그래프,
- 도 4는 각각 비교예 1 및 본 발명의 실시예 1 내지 실시예 4에 대한 유기발광소자의 효율(Cd/A)-전압 그래프,
- 도 5는 각각 비교예 1 및 본 발명의 실시예 1 내지 실시예 4에 대한 유기발광소자의 발광 스펙트럼 그래프이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0033] 이하에서는 본 발명을 보다 상세히 설명하기로 한다. 하기의 설명은 본 발명의 구체적 일례에 대한 것이므로, 비록 단정적, 한정적 표현이 있더라도 특허청구범위로부터 정해지는 권리범위를 제한하는 것은 아니다.

[0034] 본 발명의 일실시예에 따른 헤테로방향환 화합물은 하기 화학식 1로 표현되는 것이 특징이다.

[0035] [화학식 1]



[0037] 상기 화학식 1 중,

[0038] Ar1은 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴렌기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴렌기이고;

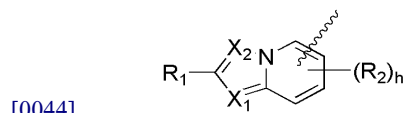
[0039] X는 수소, 중수소, 할로젠, 히드록시, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아실기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴기를 나타내고;

[0040] j는 0 내지 6 정수이고;

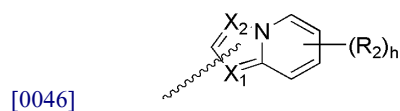
[0041] k은 1 내지 2의 정수이다.

[0042] 또한, M은 하기 화학식 1a 내지 1c로 나타내어지는 기이다:

[0043] [화학식 1a]

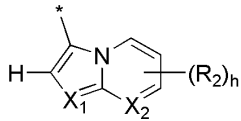


[0045] [화학식 1b]



[0047] [화학식 1c]

[0048]



[0049] 여기서, R1 및 R2는, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록시, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아실기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴기를 나타내고;

[0050] X1, X2는 CR5, N, SiR5이고,

[0051] R5는 수소, 중수소, 할로젠, 히드록시, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아실기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴기이고,

[0052] h는 0 내지 3의 정수이다.

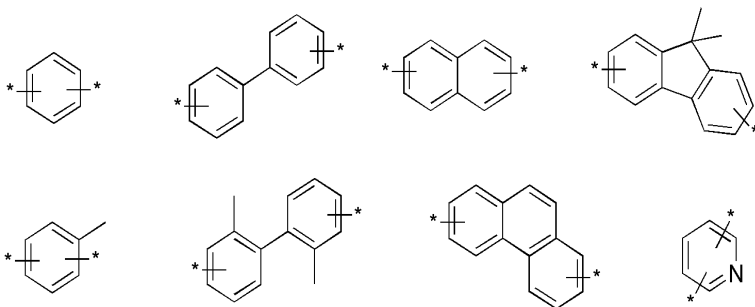
[0053] 상기 화학식 1b는 R5가 Ar1 또는 X와의 결합 사이트(site)일 수 있다.

[0054] R1, R2, 및 R5의 구체적인 예는 제한되지 않으나, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 히드록실기, C1-C30 알킬기, C1-C30 알콕시기, 페닐기, 비페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 비페닐레닐기, 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 메틸안트릴기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리세닐기, 에틸-크리세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 클로로페틸레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 플루오레닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기, 카르바졸릴기, 티오펜릴기, 인돌릴기, 푸리닐기, 벤즈이미다졸릴기, 퀴놀리닐기, 벤조티오펜릴기, 파라티아지닐기, 피롤릴기, 피라졸릴기, 이미다졸릴기, 이미다졸리닐기, 옥사졸릴기, 티아졸릴기, 트리아졸릴기, 테트라졸릴기, 옥사디아졸릴기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 티안트레닐기(thianthrenyl), 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 옥시라닐기, 피롤리디닐기, 피라졸리디닐기, 이미다졸리디닐기, 피페리디닐기, 피페라지닐기, 모르폴리닐기, 디(C6-C30아릴)아미노기, 트리(C6-C30아릴)실릴기, 및 이들의 유도체로 이루어진 군 중에서 선택될 수 있다.

[0055] Ar1은 상기 나열된 기에서 수소 위치가 결합 사이트(site)가 될 수 있는 것 중에서 선택되는 것이 좋다.

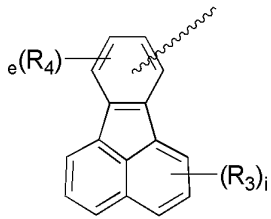
[0056] 특히, Ar1은 하기 화합물 중 어느 하나일 수 있다.

[0057]



[0058] 한편, 화학식 1에서, 상기 X는 하기 화학식 2의 구조를 갖는 것을 특징으로 한다.

[0059] [화학식 2]

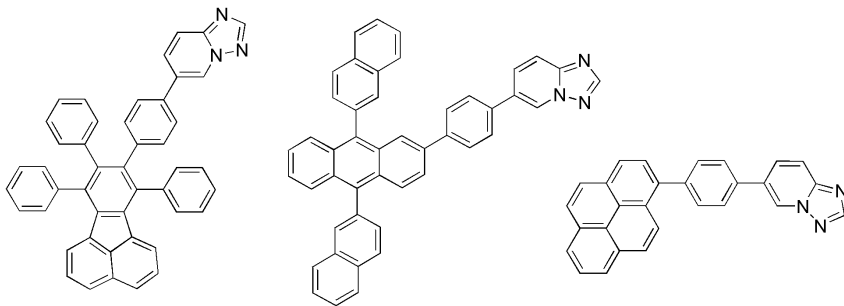


[0060]

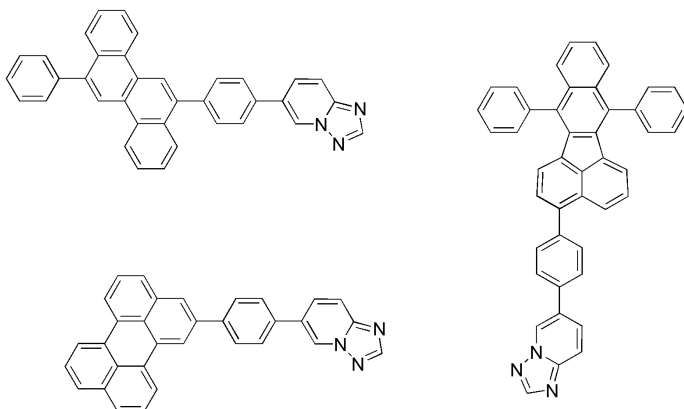
[0061] 여기서, R3 및 R4는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록시, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시기, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)아실기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐기, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴기, 치환 또는 비치환된 (C3-C60)헤테로아릴기이고,

[0062] i+e는 0 내지 6 정수이다.

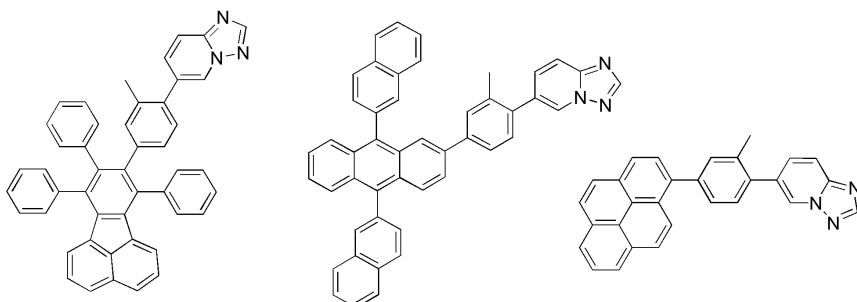
[0063] 보다 구체적으로는 하기 화합물을 예시할 수 있다.



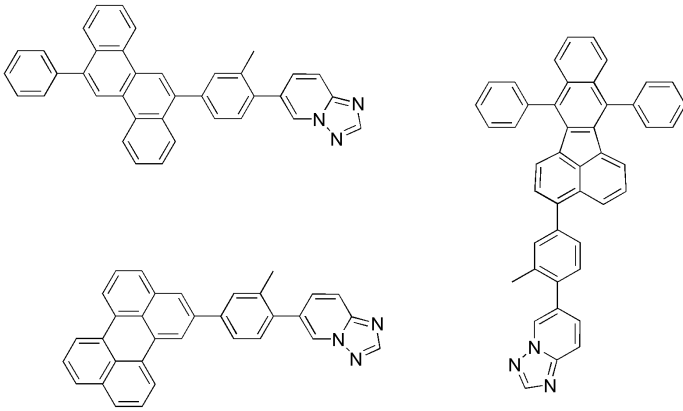
[0064]



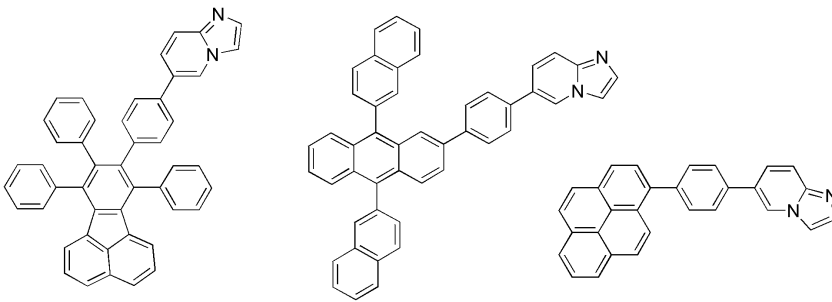
[0065]



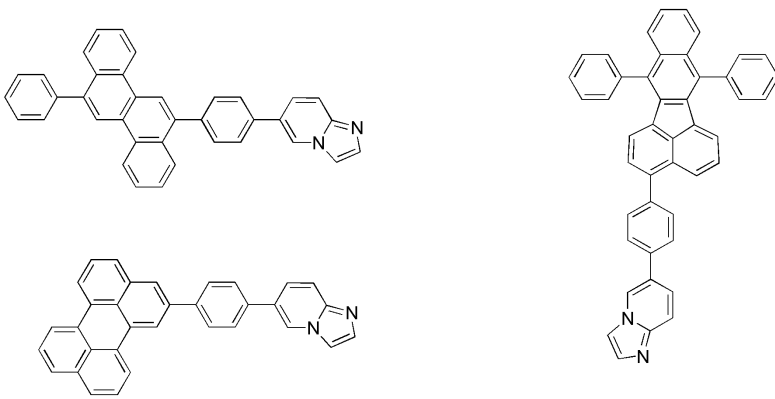
[0066]



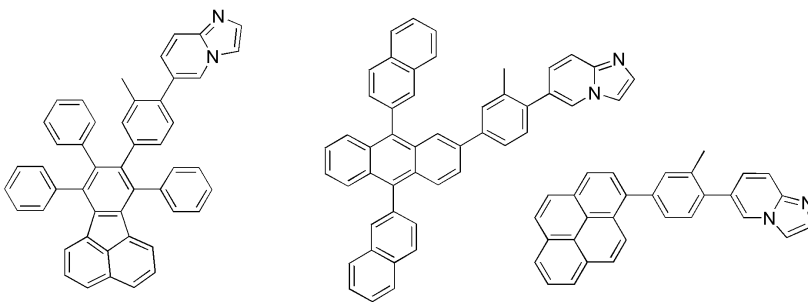
[0067]



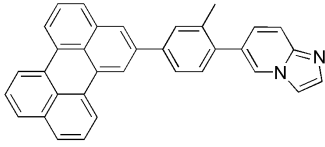
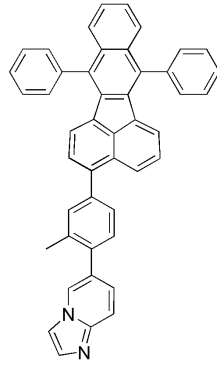
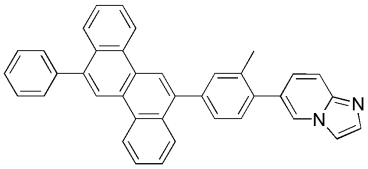
[0068]



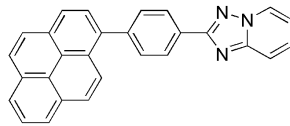
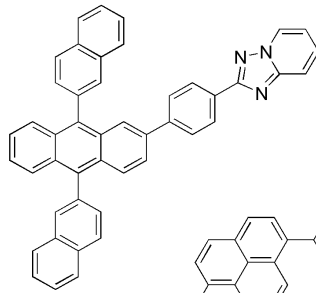
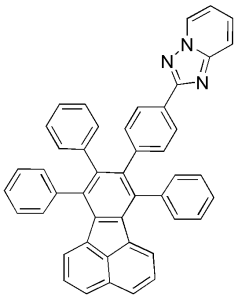
[0069]



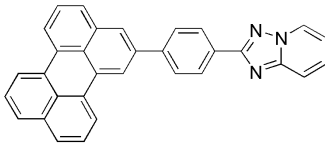
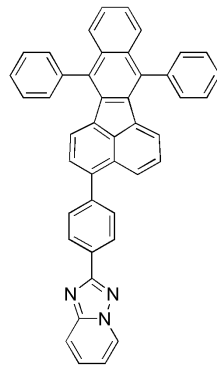
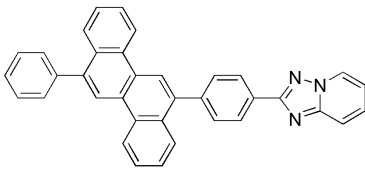
[0070]



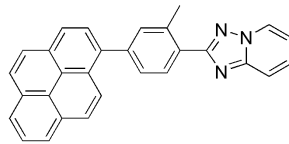
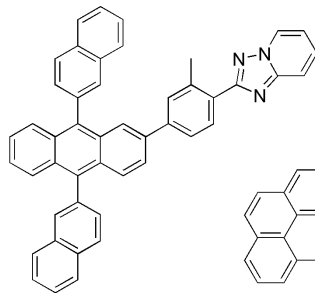
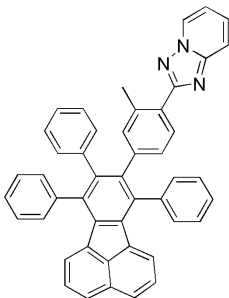
[0071]



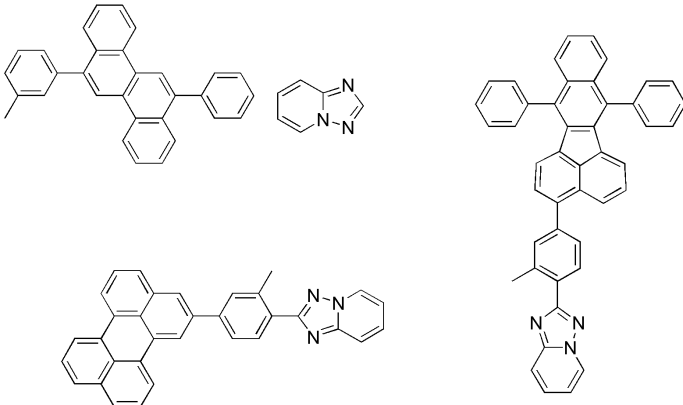
[0072]



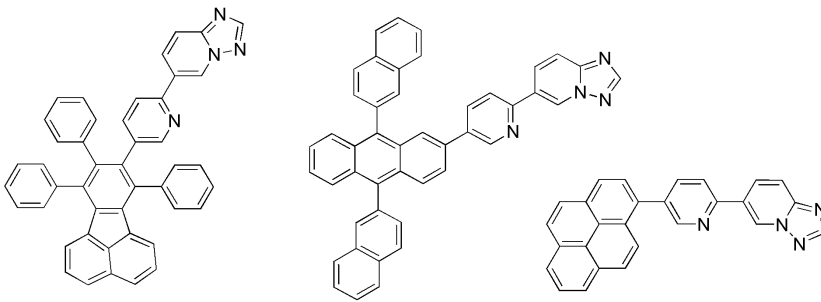
[0073]



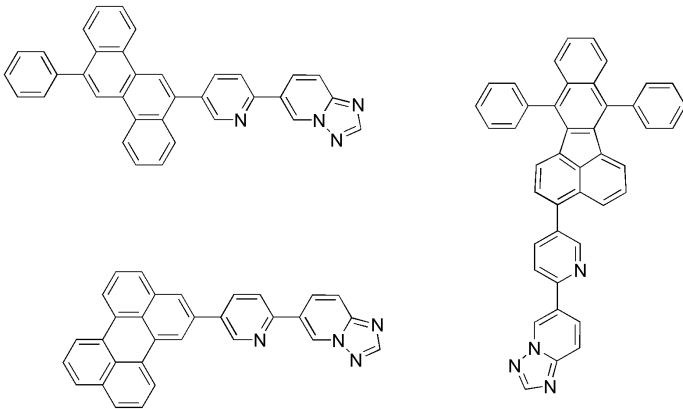
[0074]



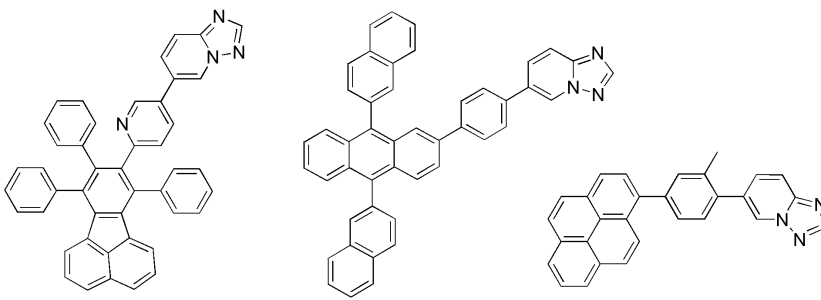
[0075]



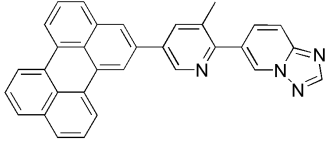
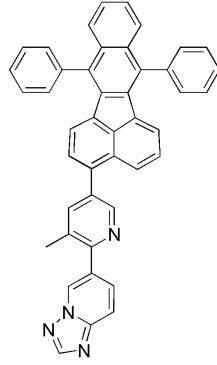
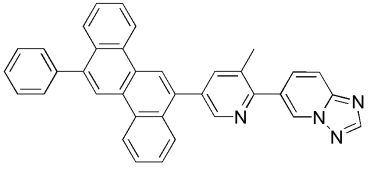
[0076]



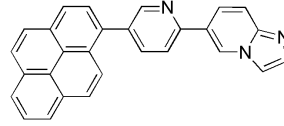
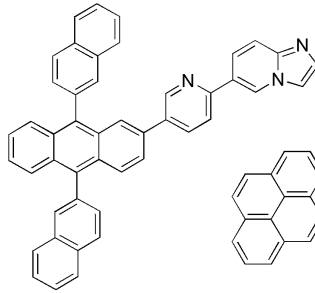
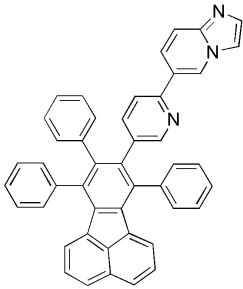
[0077]



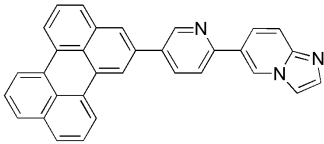
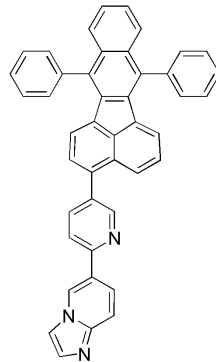
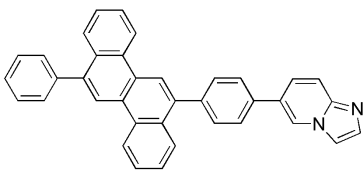
[0078]



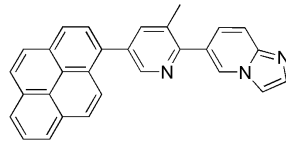
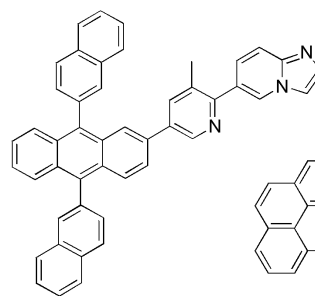
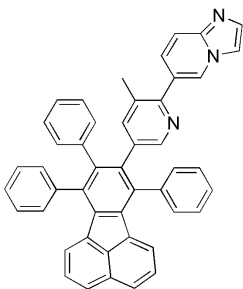
[0079]



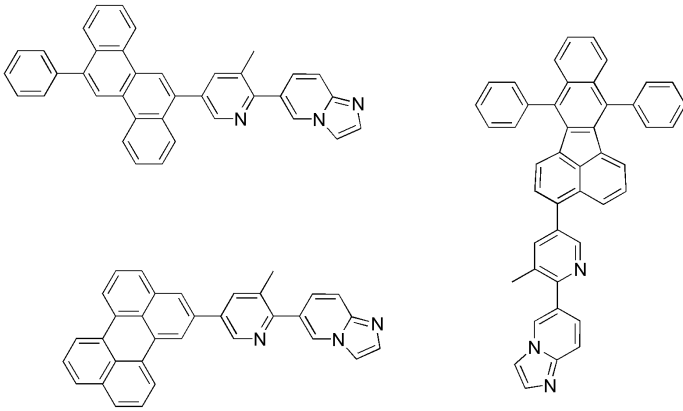
[0080]



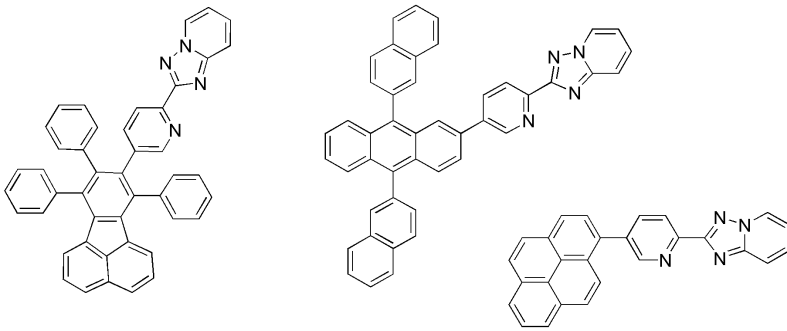
[0081]



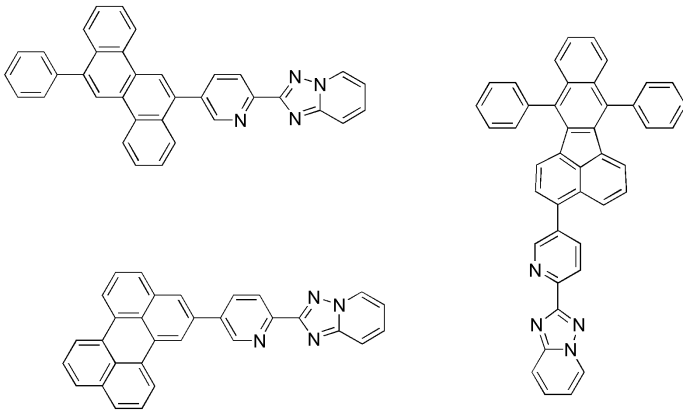
[0082]



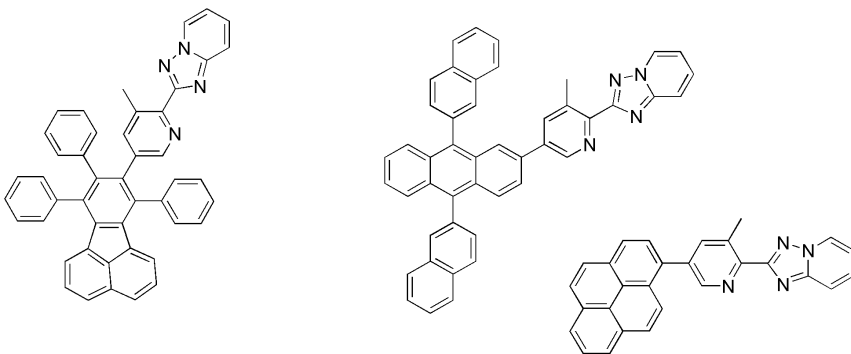
[0083]



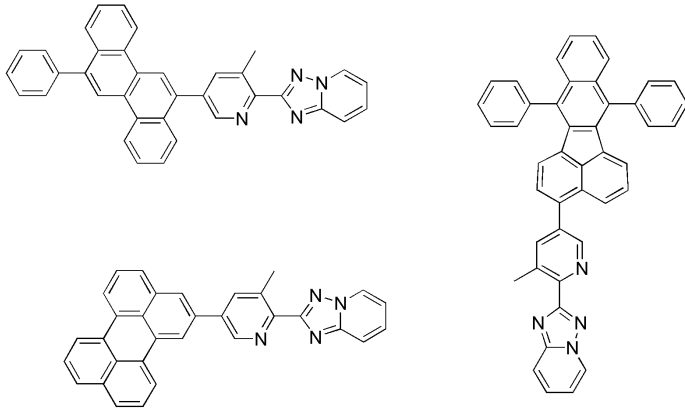
[0084]



[0085]



[0086]



[0087]

[0088]

다음, 본 발명의 또 다른 일실시예로서 상기 헤테로방향환 화합물을 포함하는 유기발광소자에 대하여 보다 상세하게 설명한다.

[0089]

상기 유기발광소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어져 있으며, 상기 유기물층 중 적어도 하나 이상의 유기물층은 상기 헤테로방향환 화합물을 하나 이상을 포함하는 것이 좋다. 상기 유기물층의 예로는 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층, 전자주입층 등을 들 수 있으며, 하나 이상의 층을 포함할 수 있다.

[0090]

상기 정공주입층, 정공수송층, 전자수송층 및 전자주입층은 정공 또는 전자들을 발광층으로 효율적으로 전달시켜 줌으로써 발광층 내에서 발광 결합의 확률을 높이는 역할을 한다. 정공주입층 및 정공수송층 재료는 당업계에서 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있다. 상기 정공 주입층 물질로는 예를 들어, CuPc, 미국특허 제4,356,429호에 개시된 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물 또는 Advanced Material, 6, p.677(1994)에 기재되어 있는 스타버스트형 아민 유도체류인 TCTA, m-MTDATA, m-MTDAPB, 용해성이 있는 전도성 고분자인 Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠술포산) 또는 PEDOT/PSS (Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid:폴리아닐린/캄페솔폰산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly (4-styrene- sulfonate):폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트)), 등을 사용할 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

[0091]

상기 정공수송층 물질은 예를 들면, 1,3,5-트리카바졸릴벤젠, 4,4'-비스카바졸릴비페닐, 폴리비닐카바졸, m-비스카바졸릴페닐, 4,4'-비스카바졸릴-2,2'-디메틸비페닐, 4,4',4"-트리(N-카바졸릴)트리페닐아민, 1,3,5-트리(2-카바졸릴페닐)벤젠, 1,3,5-트리스(2-카바졸릴-5-메톡시페닐)벤젠, 비스(4-카바졸릴페닐)실란, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1-비페닐]-4,4'디아민(TPD), N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐 벤지딘(a-NPD), N,N'-디페닐-N,N'-비스(1-나프틸)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민(NPB), 폴리(9,9-디옥틸플루오렌-co-N-(4-부틸페닐)디페닐아민)(poly(9,9-dioctylfluorene-co-N-(4-butylphenyl)diphenylamine) (TFB) 또는 폴리(9,9-디옥틸플루오렌-co-비스-N,N-페닐-1,4-페닐렌디아민)(poly(9,9-dioctylfluorene-co-bis-(4-butylphenyl-bis-N,N-phenyl-1,4-phenylenediamin) (PFB) 등을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0092]

상기 발광층은 정공수송층의 상부에 적층된다. 이러한 발광층은 단일물질로 이루어지거나, 또는 호스트(host)/도판트(dopant)로 이루어질 수 있으며, 본 발명의 유기발광소자에 적용되는 호스트 및 도판트는 당업계에서 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있다.

[0093]

발광층 재료는 특별히 제한되지 않고 4,4'-비스카바졸릴비페닐(CBP),TCB, TCTA, SDI-BH-18, SDI-BH-19, SDI-BH-22, SDI-BH-23, dmCBP, Liq, TPBI, Balq, BCP 등을 호스트로 사용할 수 있으며, 도판트의 경우 형광 도판트로서는 이데미츠 (Idemitsu)사에서 구입 가능한 IDE102, IDE105나 인광 도판트로서는 잘 알려진 녹색 인광 도판트인 Ir(ppy)<sub>3</sub>, 청색 인광 도판트인 (4,6-F2ppy)<sub>2</sub>Irpic 등이 공동 진공열증착될 수 있다.

[0094]

한편, 발광층에 인광 도판트를 함께 사용할 경우, 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여 추가로 정공 저지 물질을 진공열 증착하여 정공 저지층을 형성할 수 있다. 이때 사용할 수 있는 정공 저지층 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 전자 수송 능력을 가지면서 발광화합물보다 높은 이온화 퍼텐셜을 가져야 하며 대표적으로 Balq, BCP등이 있다.

[0095] 정공 저지층 위에 전자수송층이 진공 증착 방법 또는 스핀 코팅 방법으로서 박막을 형성할 수 있다. 본 발명에 따른 헤테로방향환 화합물은 전자수송층 재료로서 특히 바람직하게 사용될 수 있으며, 공지의 재료인 Alq3 등과 함께 이용될 수 있다.

[0096] 또한 전자 수송층 위에 전자 주입층이 적층될 수 있다. 상기 전자 주입층의 재료는 예를 들어, LiF, NaCl, CsF, Li2O, BaO 등을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

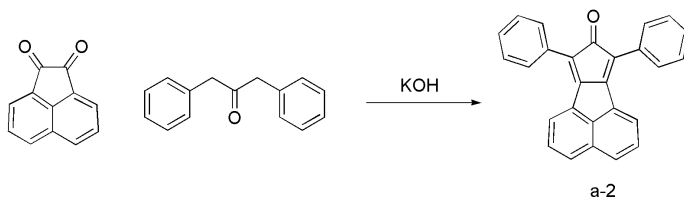
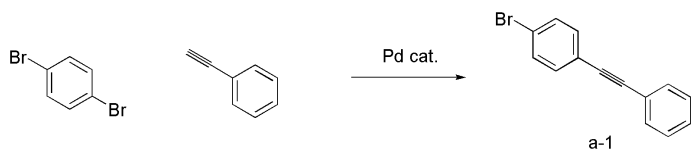
[0097] 이하, 본 발명의 실시예에 따른 유기발광소자의 제조 방법을 도 1을 참조하여 설명한다. 먼저, 기판 상부에 애노드용 물질을 코팅한다. 기판으로는 통상적인 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용하는데, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다.

[0098] 또한, 애노드 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석 (ITO), 산화인듐아연 (IZO), 산화주석 (SnO2) 또는 산화아연 (ZnO) 등의 당업계에서 통상적으로 사용되고 있는 물질들이 사용될 수 있다. 상기 애노드 상부에는 정공주입층이 진공 열증착 또는 스핀코팅 등의 방법에 의해서 선택적으로 적층되며, 그 다음으로 상기 정공주입층 상부에 정공수송층을 진공 열증착 또는 스핀코팅 등의 방법에 의해서 형성된다. 다음으로는, 상기 정공수송층 상부에 발광층을 적층한 후, 그 위에 선택적으로 정공저지층을 진공 열증착 또는 스핀코팅 방법에 의해서 형성하고, 마지막으로 이러한 정공저지층 위에 전자수송층을 진공 열증착 또는 스핀코팅 방법을 통해 증착한 후 전자주입층을 선택적으로 형성하고, 상기 전자주입층 상부에 캐소드 형성용 금속을 진공 열증착함으로써 본 발명에 따른 유기발광소자를 제조할 수 있게 된다. 한편, 캐소드 형성용 금속으로는, 리튬 (Li), 마그네슘 (Mg), 알루미늄 (Al), 알루미늄-리튬 (Al-Li), 칼슘 (Ca), 마그네슘-인듐 (Mg-In), 마그네슘-은 (Mg-Ag) 등을 사용할 수 있다.

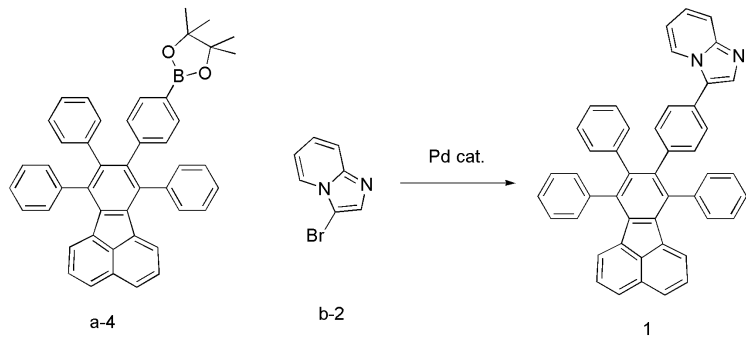
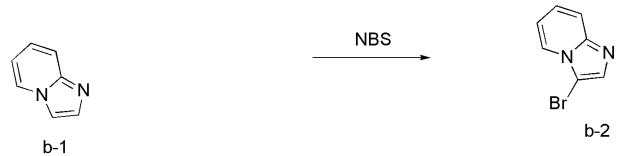
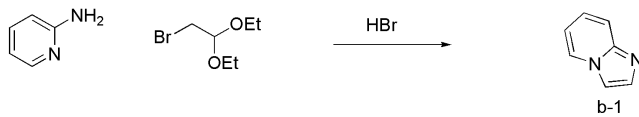
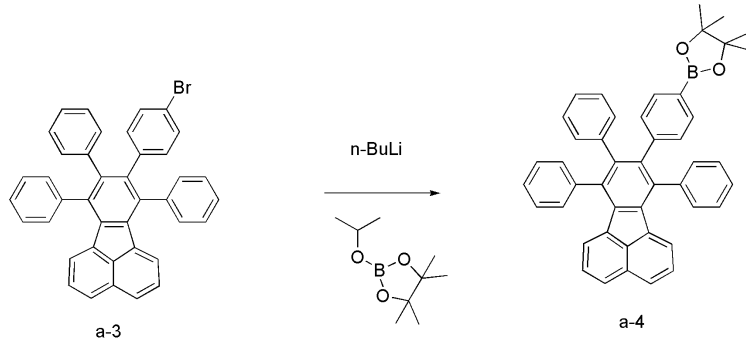
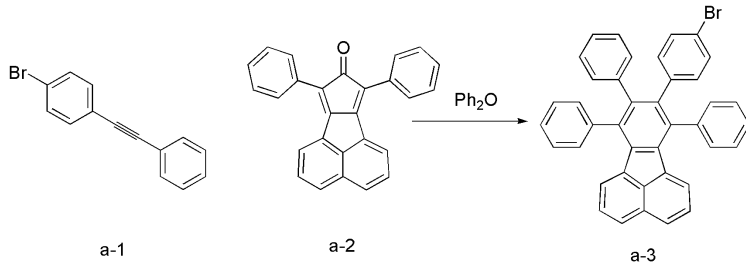
[0099] 본 발명에 따른 헤테로방향환 화합물은 여러 유기물층에 사용될 수 있으며, 특히 전자수송층으로 우수하다.

[0100] 이하, 본 발명은 하기의 실시예에 의하여 보다 더 잘 이해될 수 있으며, 하기의 실시예는 본 발명의 예시 목적을 위한 것으로서 본 발명의 보호 범위를 제한하고자 하는 것은 아니다.

[0101] **[제조예 1] 화합물 1의 제조**



[0102]



**화합물 a-1의 제조**

2000 mL-3구 둥근바닥플라스크에 1000 mL 테트라하이드로퓨란(THF)와 페닐아세틸렌 21.4g(0.209 mol), 1,4-디브로모벤젠 99.0g(0.419 mol), 비스트리페닐포스핀노팔라듐클로라이드(PdCl<sub>2</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>) 4.0g(0.003 mol), 요오드화구리 1.25g(0.006 mol), 트리에틸아민 71.4g(0.39 mol)을 넣고 4시간 동안 80 에서 교반하고, 상온으로 식힌 후 THF를 최대한 농축한다. 반응 혼합물에 물을 넣고 메틸렌클로라이드(MC)로 추출 한다. 메틸렌클로라이드(MC)층을 분리, 황산마그네슘으로 주입하고 여과 후 농축한다. 생성된 고체 크루드를 실리카 컬럼(Hexane)을 통해 분리하여 25g(수율 47%)을 얻었다.

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>): d 7.76(d, 2H), 7.66-7.31(m, 7H)

**화합물 a-2의 제조**

1000 mL-3구 둥근바닥플라스크에 질소 분위기 하에서 1,3-디페닐프로판-2-온(1,3-Diphenyl-propan-2-one) 62

g(0.168 mol), 시그마 알드리치의 아세나프렌퀴논 30.6 g(0.168 mol) 및 에탄올 300 mL를 넣고, 10분간 교반한 후, 에탄올 40 mL에 용해된 4.70 g(0.084 mol)의 KOH를 20분간 적가한 다음 30분간 상온에서 교반하고 여과하였다. 여과물을 수회 증류수로 세척한 후 건조하여 화합물 1a 50 g(수율 88%)을 얻었다.

[0111] <sup>1</sup>H NMR (DMSO-d<sub>6</sub>): δ 8.08(d, 2H), 7.79(d, 2H), 7.73(t, 2H), 7.59(d, 4H), 7.43(d, 4H)

[0112] **화합물 a-3의 제조**

[0113] 1000 mL-3구 둥근바닥플라스크에 300 mL 페닐에테르(Ph<sub>2</sub>O)와 화합물 a-1 24.0g(0.097mol), a-2 34.9g(0.097mol)을 넣고 3시간 동안 230 에서 교반하고, 상온으로 식힌 후 에탄올을 주입한다. 생성된 침전물을 여과하여 분리하고 EA로 재결정하여 50g(수율 88%)을 얻었다.

[0114] <sup>1</sup>H NMR(CDC13) δ[ppm]: 7.75(d, 2H), 7.39-7.28(m, 13H), 7.05(d, 2H), 6.95-6.89(m, 4H), 6.83(d, 2H), 6.63(dd, 2H)

[0115] **화합물 a-4의 제조**

[0116] 질소 분위기 하에서 000 mL-3구 둥근바닥플라스크에 건조된 테트라하이드로퓨란(THF) 500ml에 상기 중간체 a-3 40.0g(0.068 mol)를 녹이고, -78에서 2.5M 부틸리튬 29.76ml(0.074 mol)을 적가 하였다. 동일 온도에서 한 시간 동안 교반한 후 아이소프로필보레이트 18ml(0.084 mol)를 첨가하였다. 상온으로 온도를 올리고 1시간 후 물을 첨가하고 메틸렌클로라이드(MC)로 추출하였다. 생성된 고체 화합물을 디에틸에테르(diethyl ether)으로 씻어 주면서 여과하여 연한 노란색의 중간체 32.6G(76%수율)을 얻었다.

[0117] <sup>1</sup>H NMR(CDC13) δ[ppm]: 7.73(d, 2H), 7.37-7.24(m, 13H), 6.98-6.85(m, 8H), 6.63(dd, 2H), 1.29(s, 12H)

[0118] **화합물 b-1의 제조**

[0119] 100 mL-3구 둥근바닥플라스크에 40 mL 에탄올와 아미노피리딘(amino-pyridine) 6.0g(0.034mol), 브로모 아세트 알데하이드 디에틸아세탈 10.4 ml(0.069 mol), 48% 브롬산(HBr) 4ml을 넣고 12시간 동안 환류 하였다. 상온으로 식힌 후 중탄산나트륨(NaHCO<sub>3</sub>) 수용액을 주입한다. 디메틸에테르로 추출하고 농축하여 오일 형태의 생성물 3.90g(48%)을 얻었다.

[0120] <sup>1</sup>H NMR(CDC13) δ[ppm]: 8.06(d, 1H), 7.57-7.51(m, 3H), 7.10(t, 1H), 6.69(s, 1H)

[0121] **화합물 b-2의 제조**

[0122] 500 mL-3구 둥근바닥플라스크에 250 mL 클로로포름(CHCl<sub>3</sub>)와 화합물 b-1 2.0g(0.017mol), NBS(N-bromosuccinimide) 3.0g(0.017mol)을 넣고 1시간 동안 상온에서 교반한다. 반응물을 농축하여 얻어진 크루드를 실리카 컬럼(MC:MeOH 30:1)을 이용하여 분리하였다. 헥산으로 재결정하여 결정 형태의 화합물을 2.8g(수율 85%)을 얻었다.

[0123] <sup>1</sup>H NMR(CDC13) δ[ppm]: 8.13(d, 1H), 7.62-7.61(m, 2H), 7.25-7.22(m, 1H), 6.69(m, 1H)

[0124] MALDI-TOF MS: m/z 623.24, cal. 622.75.

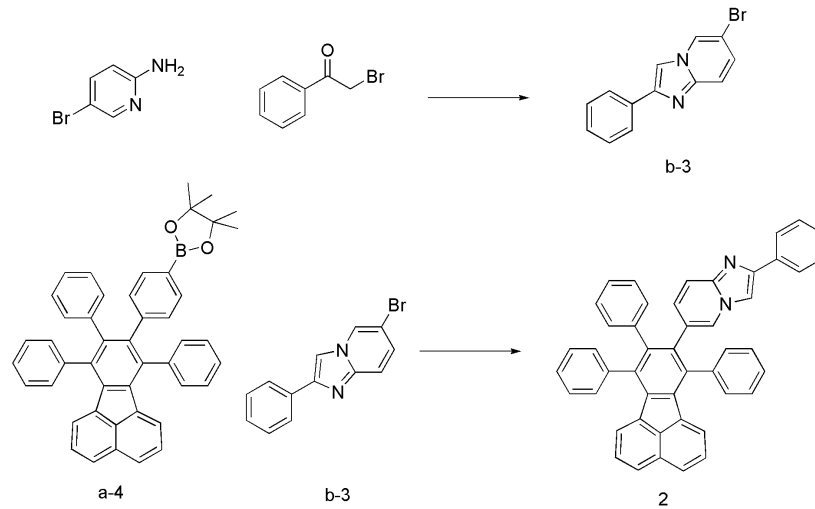
[0125] **화합물 1의 제조**

[0126] 500 mL-3구 둥근바닥플라스크를 완전히 건조시킨 후 질소분위기 하에서 화합물 a-4 6.3g(0.01 mol), 화합물 b-2 2.0g(0.01 mol) 을 첨가하고, THF(150 mL)/H<sub>2</sub>O(50 mL)로 용해시켰다. 이 용액에 PPh<sub>3</sub> 262 mg, Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> 228 mg 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 2.7 g(0.02 mol)을 첨가하고, 이 혼합액을 3시간 동안 환류 교반시켰다. 이 후 실온으로 냉각한 다음 농축하여 디클로로메탄으로 추출하고 황산마그네슘으로 건조 한다. 유기층을 농축하여 생성된 고체를 디메틸 에테르로 세척하여 건조 후 화합물 1을 5.3g(수율 85%)을 얻었다.

[0127] <sup>1</sup>H-NMR(CDC13) δ[ppm]: 8.02(d, 1H), 7.77(d, 2H), 7.63(d, 1H), 7.57(s, 1H) 7.40-7.31(m, 12H), 7.16-

7.06(m, 5H), 6.99-6.90(m, 5H), 6.75(td, 1H), 6.69(dd, 2H)

[0128] **[제조예 2] 화합물 2의 제조**



[0129]

[0130] **화합물 b-3의 제조**

[0131] 100 mL-3구 둥근바닥플라스크에 40 mL 에탄올와 5-브로모2-아미노피리딘(5-Bromo2-aminopyridine) 17.3g(0.1 mol), 2-브로모 아세트펜논 20.0 g(0.1 mol)을 넣고 3시간 동안 환류 하였다. 상온으로 식힌 후 생성된 침전물을 여과한다. 침전물을 메탄올로 씻고 건조한다. 흰색의 고체 26.0g(수율95%)을 얻었다.

[0132] <sup>1</sup>H NMR(CDC13) d[ppm]: 8.58(s, 1H), 8.49(d, 1H) 8.08-8.06(m, 2H), 8.00(s, 1H), 7.79(d, 1H), 7.58-7.49(m, 3H)

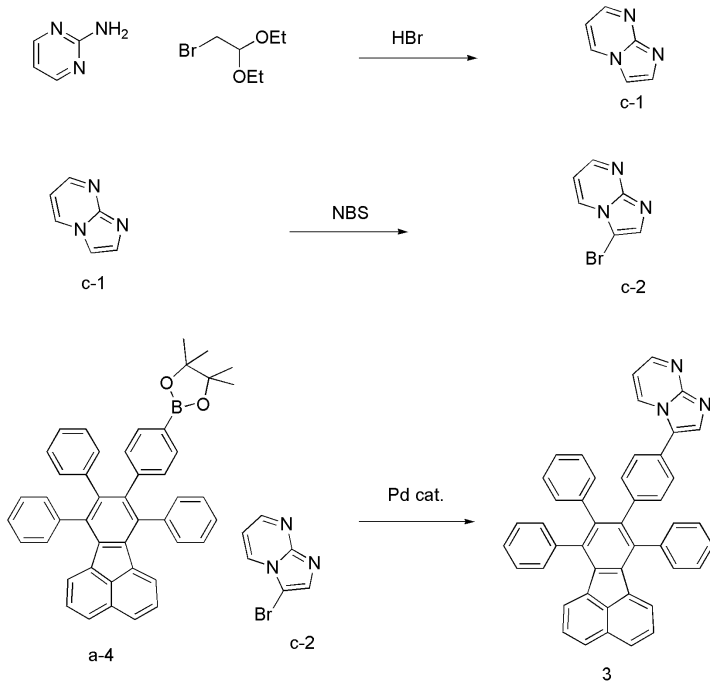
[0133] **화합물 2의 제조**

[0134] 500 mL-3구 둥근바닥플라스크를 완전히 건조시킨 후 질소분위기 하에서 화합물 a-4 6.3g(0.01 mol), 화합물 b-3 2.7g(0.01 mol) 을 첨가하고, THF(150 mL)/H<sub>2</sub>O(50 mL)로 용해시켰다. 이 용액에 PPh<sub>3</sub> 262 mg, Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> 228 mg 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 2.7 g(0.02 mol)을 첨가하고, 이 혼합액을 3시간 동안 환류 교반시켰다. 이 후 실온으로 냉각한 다음 농축하여 디클로로메탄으로 추출하고 황산마그네슘으로 건조 한다. 유기층을 농축하여 생성된 고체를 디메틸 에테르로 세척하여 건조 후 화합물 2를 4.6g(수율 74%)을 얻었다.

[0135] <sup>1</sup>H-NMR(DMSO-d<sub>6</sub>) d[ppm]: 8.18(d, 2H), 7.90(t, 4H), 7.48-6.86(m, 22H), 6.47(d, 2H)

[0136] MALDI-TOF MS: m/z 623.24, cal. 622.75.

[0137] **[제조예 3] 화합물 3의 제조**



[0138]

[0139] **화합물 c-1의 제조**

[0140] 100 mL-3구 둥근바닥플라스크에 40 mL 에탄올과 아미노피리미딘(amino-pyrimidine) 6.0g(0.034mol), 브로모 아세트알데하이드 디에틸아세탈 10.4 ml(0.069 mol), 48% 브롬산(HBr) 4ml을 넣고 12시간 동안 환류 하였다. 상온으로 식힌 후 생성된 침전물을 여과하여 분리한다. 흰색 파우더 5.60g(70%)을 얻었다.

[0141]  $^1\text{H NMR}$  (DMSO- $d_6$ )  $\delta$ [ppm]: 9.36(dd, 1H), 9.06(dd, 1H), 8.33-8.31(m, 2H), 7.69(dd, 1H)

[0142] **화합물 c-2의 제조**

[0143] 500 mL-3구 둥근바닥플라스크에 250 mL 클로르포름( $\text{CHCl}_3$ )와 화합물 c-1 2.0g(0.017mol), NBS(N-bromosuccinimide) 3.0g(0.017mol)을 넣고 1시간 동안 상온에서 교반한다. 반응물에 생성된 침전물을 여과하여 분리 하였다. 노란 파우더 형태의 화합물 c-2을 2.3g(수율 70%)을 얻었다.

[0144]  $^1\text{H NMR}$  (DMSO- $d_6$ )  $\delta$ [ppm]: 9.46(dd, 1H), 9.16(dd, 1H), 8.48-8.41(m, 1H), 7.80(dd, 1H)

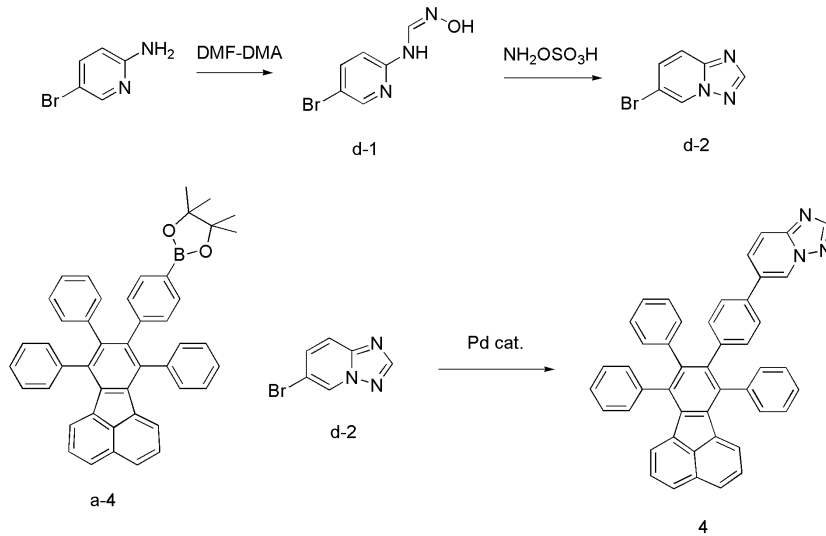
[0145] **화합물 3의 제조**

[0146] 500 mL-3구 둥근바닥플라스크를 완전히 건조시킨 후 질소분위기 하에서 화합물 a-4 6.3g(0.01 mol), 화합물 c-2 2.0g(0.01 mol) 을 첨가하고, THF(150 mL)/H<sub>2</sub>O(50 mL)로 용해시켰다. 이 용액에 PPh<sub>3</sub> 262 mg, Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> 228 mg 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 2.7 g(0.02 mol)을 첨가하고, 이 혼합액을 3시간 동안 환류 교반시켰다. 이 후 실온으로 냉각한 다음 농축하여 디클로로메탄으로 추출하고 황산마그네슘으로 건조 한다. 유기층을 농축하여 생성된 고체를 디메틸 에테르로 세척하여 건조 후 화합물 3을 4.0g(수율 64%)을 얻었다.

[0147]  $^1\text{H-NMR}$  (CDCl<sub>3</sub>)  $\delta$ [ppm]: 8.02(d, 1H), 7.77(d, 2H), 7.63(d, 1H), 7.57(s, 1H) 7.40-7.31(m, 12H), 7.16-7.06(m, 5H), 6.99-6.90(m, 5H), 6.75(td, 1H), 6.69(dd, 2H)

[0148] MALDI-TOF MS: m/z 623.24, cal. 623.74

[0149] **[제조예 4] 화합물 4의 제조**



[0150]

[0151] **화합물 d-1의 제조**

[0152] 250 mL-3구 둥근바닥플라스크에 80 mL IPA와 2-아미노-5-브로모피리딘(2-Amino-5-bromopyridine), 40.00g(0.231mol), (Dimethylformamide-dimethyl acetal) 9.93 ml(0.300 mol), 넣고 3시간동안 환류 하였다. 50로 식힌 후 (Hydroxylamine hydrochloride) 24.10g(0.346mol)을 넣고 50에서 12시간 동안 가열 교반한다. 이후 실온으로 식힌 후 여과 하고 건조 후 15.8g(수율 31.63%)을 얻었다.

[0153] <sup>1</sup>H-NMR(DMSO-d<sub>6</sub>) δ[ppm]: 10.20(s, 1H), 9.58(d, 1H), 8.23(d, 1H), 7.82-7.75(m, 2H), 7.05(d, 1H)

[0154] **화합물 d-2의 제조**

[0155] 1000 mL-3구 둥근바닥플라스크에 질소 분위기 하에서 화합물 d-1 15.00g(0.069 mol) 와 건조한 테트라하이드로퓨란(THF)150ml 넣고 교반한 후 0에서 (Trifluoroacetic anhydride) 16.41ml(0.118mol)을 넣고 12시간 동안 교반하였다. 중탄산나트륨 수용액을 넣고 1시간 동안 교반한 후 메틸렌클로라이드(MC)로 추출하였다. 생성된 고체 화합물을 디에틸에테르(Diethyl ether)로 씻어 주면서 여과하고 건조 후 6.4g(수율 46.54%)을 얻었다.

[0156] <sup>1</sup>H-NMR(DMSO-d<sub>6</sub>) δ[ppm]: 9.41(s, 1H), 8.54(s, 1H), 7.85-7.83(m, 2H)

[0157] **화합물 4의 제조**

[0158] 500 mL-3구 둥근바닥플라스크를 완전히 건조시킨 후 질소분위기 하에서 화합물 a-4 30g(0.046mol)을 넣고, THF(225 mL)/H<sub>2</sub>O(75 mL)로 용해시켰다. 이 용액에 화합물 d-2 6.41g(0.032mol), P(t-Bu)<sub>3</sub> 1.13ml, Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> 0.17g 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 12.78g(0.092mol)을 첨가하고, 이 혼합액을 3시간 동안 환류 교반시켰다. 이후 실온으로 냉각한 다음 농축하여 메틸렌클로라이드(MC)로 추출하고 황산마그네슘으로 건조 한다. 유기층을 농축하여 생성된 고체를 디에틸에테르로 세척하여 건조 후 화합물 4를 11.5g(수율 39.86%)을 얻었다.

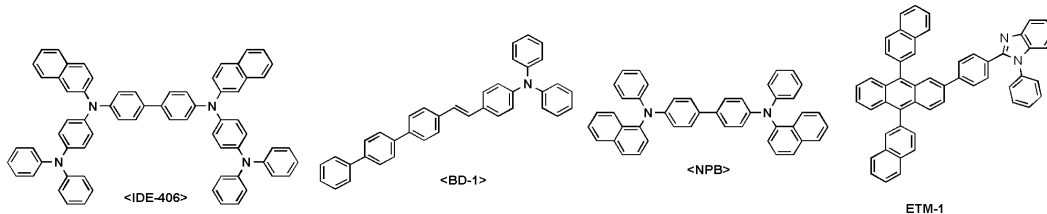
[0159] <sup>1</sup>H-NMR(CDC1<sub>3</sub>) δ[ppm]: 8.18(d, 2H), 7.90(t, 4H), 7.48-6.86(m, 22H), 6.47(d, 2H)

[0160] MALDI-TOF MS: m/z 623.20, cal. 623.74.

[0161] **[실시예 1] 화합물 1을 이용한 유기 발광 소자 제작**

[0162] 박막 두께가 150 nm인 ITO(인듐 주석 산화물) 투명 전극 라인을 갖는, 40mm×40mm×0.7mm 크기의 유리기판을 세제가 용해된 증류수 속에서 10분 동안 초음파로 세정하고, 증류수에서 10분 동안 2 회 반복 세정하였다. 증류수 세정이 끝나면 이소프로필알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제를 사용하여 기판을 순차적으로 초음파세정하고 건

조시켰다. 이어, 산소/아르곤 플라즈마를 이용하여 건식세정한 후, 투명 전극 라인을 갖는 유리 기판을 진공 증착 장치의 기판 홀더에 장착하고 투명 전극 라인이 형성되어 있는 면상에, 상기 투명 전극을 덮도록 막 두께 60 nm의 IDE-406(I사) 막을 정공주입층으로서 성막 하였다. 다음에, IDE-406 막상에 막 두께 30 nm의 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]바이페닐 막(이하, NPB 막)을 정공수송층으로서 성막 하였다. 다음에, NPB 막상에 막 두께 20 nm의 BD-1 [4-(2-(4,4'-페닐바이페닐)비닐)-N,N-디페닐벤젠아민, 하기 구조식 참조]을 발광호스트 β-ADN(9,10-다이(나프탈렌-2-일)안트라센 물질과 5%의 중량비로 증착하여 발광층으로서 성막 하였다. 상기 막상에 화합물 1을 막 두께20 nm의 전자수송층으로 성막 하였다. 이어, 그 위에 LiF를 증착시켜 전자주입층을 형성하였다. 이 LiF 막상에 금속 알루미늄을 증착시켜 금속 음극을 형성하여 유기발광소자를 제조하였다. 하기 표 1에 전기 발광 특성 및 기초 물성 측정 결과를 나타내었다.



[0163]

**[실시에 2] 화합물 2를 이용한 유기 발광 소자 제작**

[0164]

상기 실시예 1에서 전자수송층 재료로서 화합물 1 대신에 화합물 2로 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 조건 하에서 유기 발광 소자를 제작하였으며, 하기 표 1에 전기 발광 특성 및 기초 물성 측정 결과를 나타내었다.

[0165]

**[실시에 3] 화합물 3를 이용한 유기 발광 소자 제작**

[0166]

상기 실시예 1에서 전자수송층 재료로서 화합물 1 대신에 화합물 3으로 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 조건 하에서 유기 발광 소자를 제작하였으며, 하기 표 1에 전기 발광 특성 및 기초 물성 측정 결과를 나타내었다.

[0167]

**[실시에 4] 화합물 4를 이용한 유기 발광 소자 제작**

[0168]

상기 실시예 1에서 전자수송층 재료로서 화합물 1 대신에 화합물 4로 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 조건 하에서 유기 발광 다이오드를 제작하였으며, 하기 표 1에 전기 발광 특성 및 기초 물성 측정 결과를 나타내었다.

[0169]

**[비교예 1] 화합물 ETM-1를 이용한 유기 발광 소자 제작**

[0170]

상기 실시예 1에서 전자수송층 재료로서 화합물 1 대신에 화합물 ETM-1로 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 조건 하에서 유기 발광 다이오드를 제작하였으며, 하기 표 1에 전기 발광 특성 및 기초 물성 측정 결과를 나타내었다.

[0171]

**표 1**

[0172]

No.	전압(V)	전류밀도 (mA/cm <sup>2</sup> )	효율 (cd/A)	색좌표 (x,y)	휘도 (cd/m <sup>2</sup> )
비교예 1	5.6	15.82	6.32	(0.141, 0.168)	1000
실시예 1	4.4	10.62	9.41	(0.139, 0.165)	1000
실시예 2	4.5	11.1	9	(0.141, 0.156)	1000
실시예 3	6	12.46	8.02	(0.141, 0.164)	1000
실시예 4	4.72	12.5	8	(0.142, 0.142)	1000

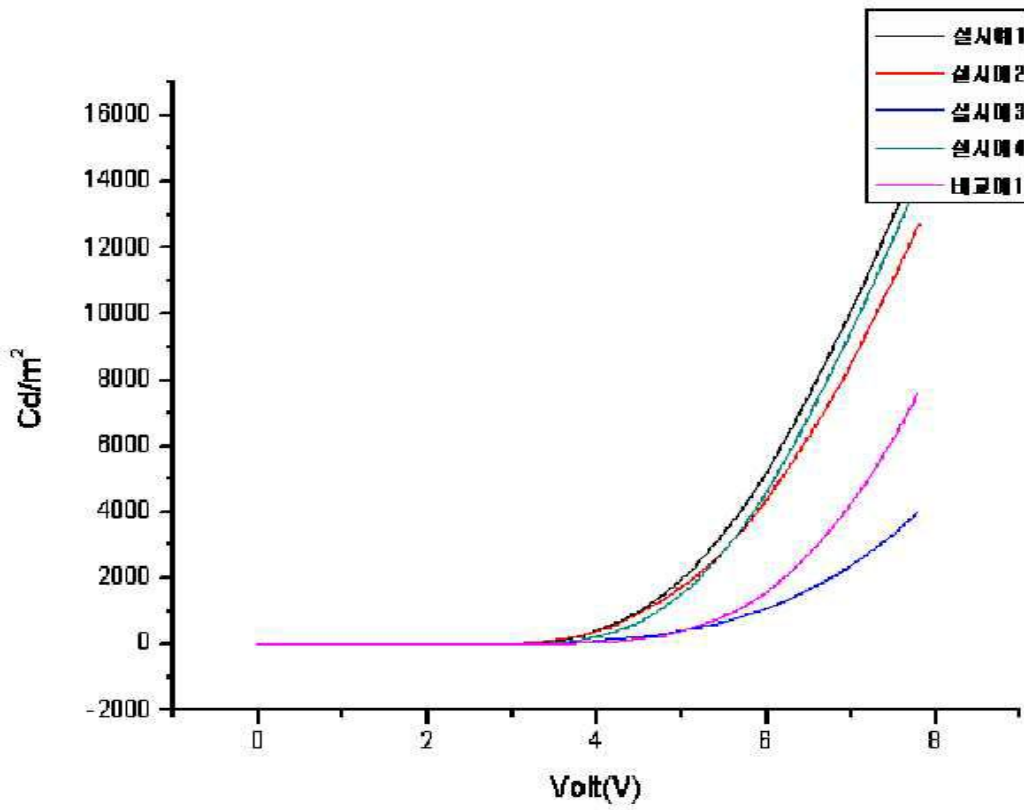
[0173] 상기 표 1에 나타난 바와 같이, 본 발명에서 개발한 재료의 발광 특성이 종래의 재료 대비 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다. 또한 본 발명에 따른 헤테로방향환 화합물을 전자수송층으로 사용한 유기발광소자는 발광특성이 뛰어날 뿐만 아니라 구동전압을 강화시켜줌으로써 전력효율의 상승을 유도하여 소비전력을 개선시킬 수 있었다.

도면

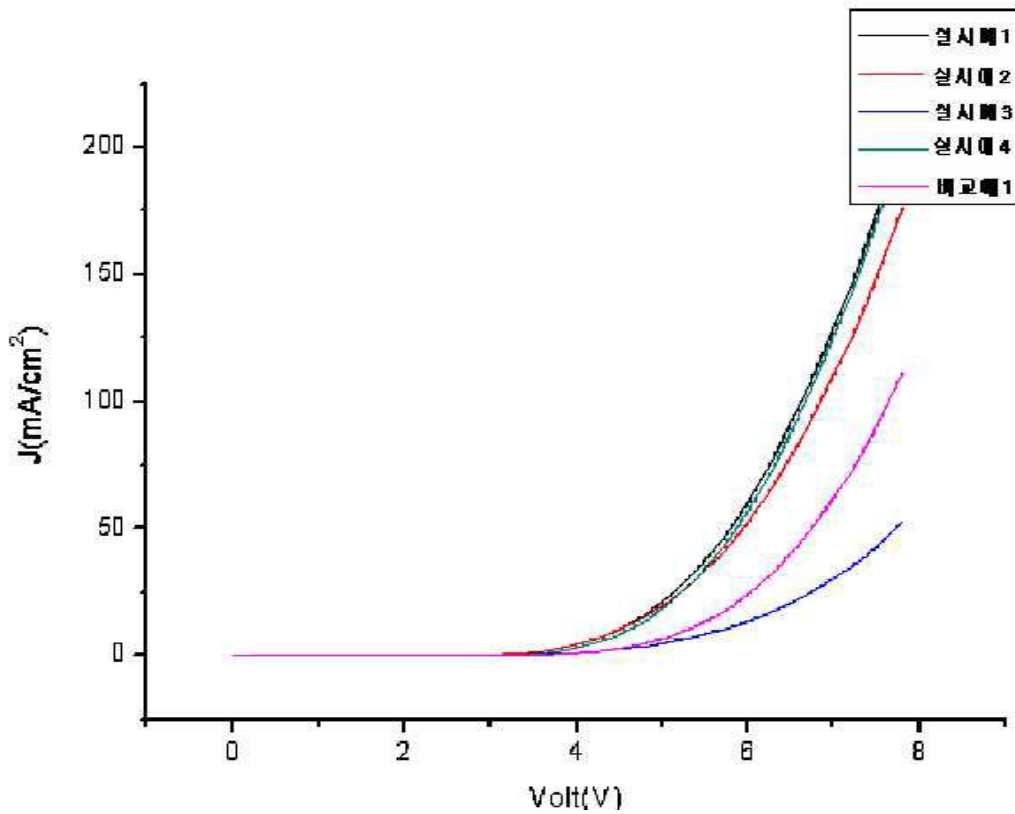
도면1



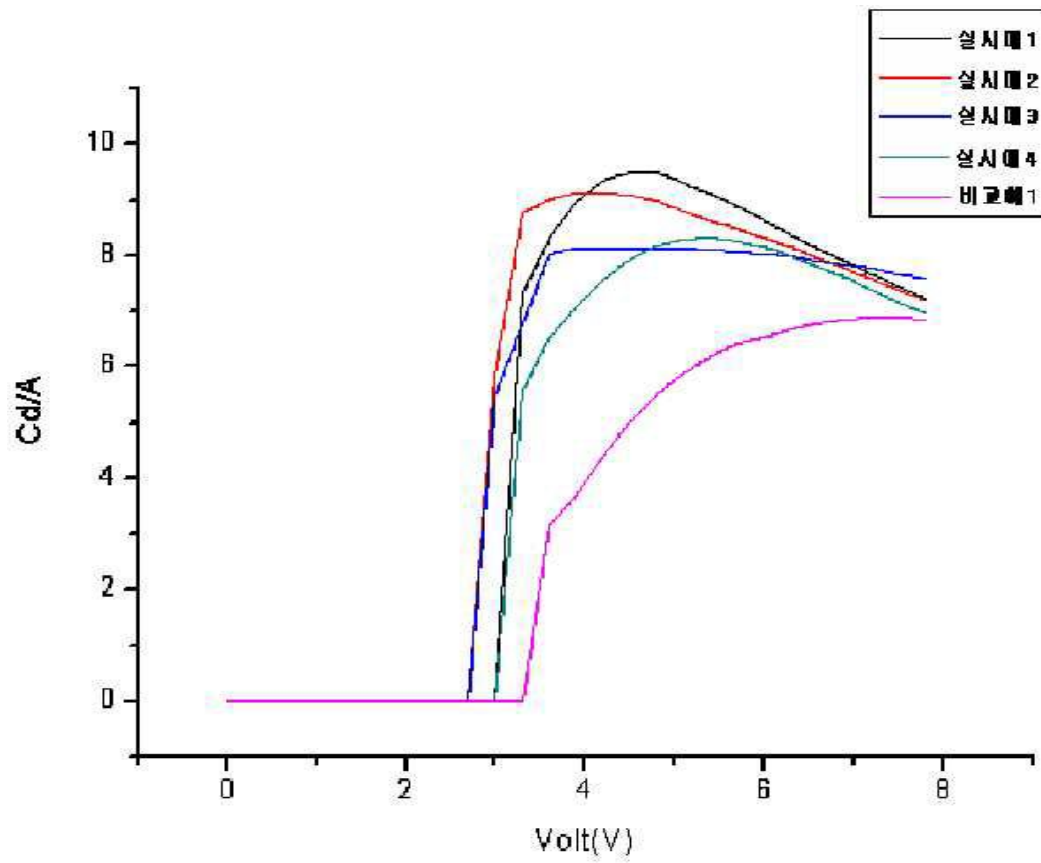
도면2



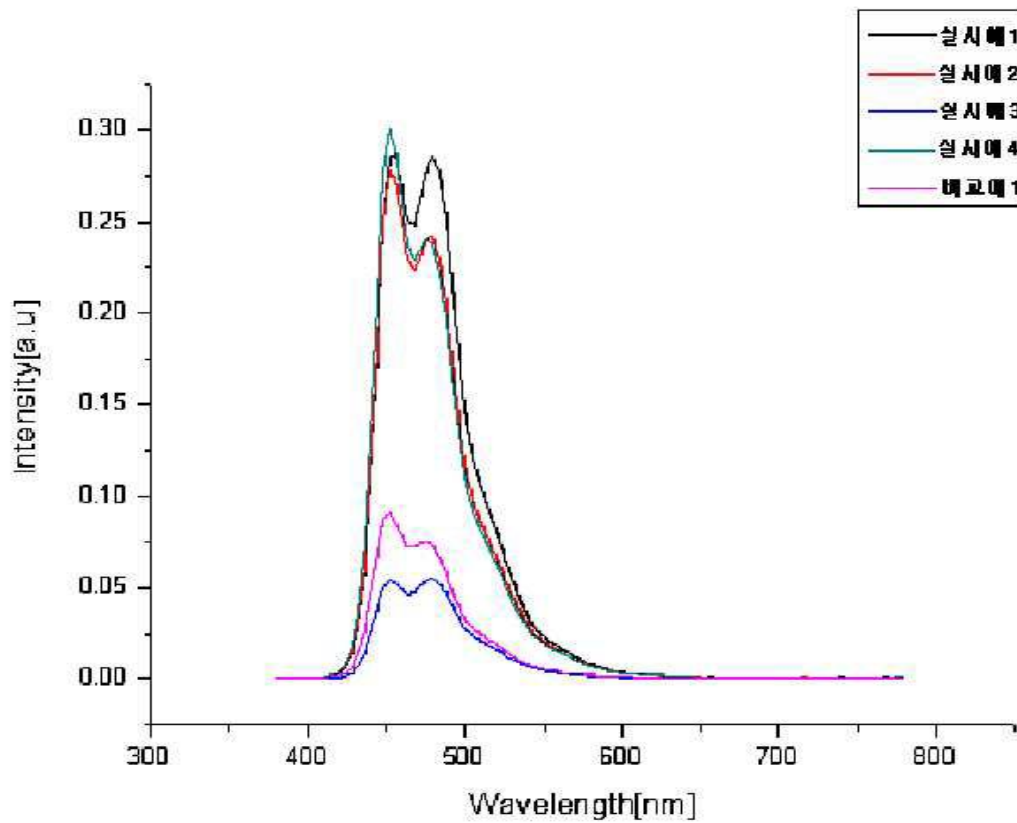
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	杂芳环化合物和使用其的有机发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020120029258A</a>	公开(公告)日	2012-03-26
申请号	KR1020100091239	申请日	2010-09-16
[标]申请(专利权)人(译)	ALPHA CHEM		
申请(专利权)人(译)	阿尔法化学有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	阿尔法化学有限公司		
[标]发明人	KYU OH CHO 조규오 HYUN GOOG NAM 남현국 SEUNG HEE JANG 장승희 JAE YONG KIM 김제용 HYO JUN CHA 차효준 HYUN DON KIM 김현돈 SANG JUN PARK 박상준 LEE JI HOON 이지훈		
发明人	조규오 남현국 장승희 김제용 차효준 김현돈 박상준 이지훈		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0072 H01L51/0067 H01L51/5072 H01L2251/30 H05B33/14		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

#### 摘要(译)

本发明提供由以下化学式1表示的杂方向环化合物和使用其的有机发光装置。[化学式1]在图像化学式1的存在下，Ar 1为取代或未取代的亚烷基，取代或未取代的亚环烷基，取代或未取代的亚杂环烷基，取代或未取代的亚芳基，和取代或未取代的亚杂芳基和：X表示氢，氘，卤素，羟基，氰基，取代或未取代的烷基，取代或未取代的烷氧基，取代或未取代的酰基，取代或未取代的链烯基，取代或未取代的炔基，取代或未取代的环烷基，取代或未取代的杂环烷基，取代或未取代的芳基，取代基或未取代的杂芳基(C3)-C60)和：j为0到6的固定数。k可以是由M表示的基团，其低于化学式1a至1c，它是1至2的固定数：[化学式1a] [化学式1b] [化学式1c]。

케소드
EIL
ETL
HBL
EML
HTL
HIL
에노드
기관