



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2011-0066766  
(43) 공개일자 2011년06월17일

(51) Int. Cl.

C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2009-0123544

(22) 출원일자 2009년12월11일

심사청구일자 2009년12월11일

(71) 출원인

덕산하이메탈(주)

울산광역시 북구 연암동 597-3

(72) 발명자

김대성

경기도 용인시 처인구 김량장동 현대아파트  
101-601

박정환

서울특별시 송파구 가락본동 80 성원상떼빌 101동  
703호

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

송해모, 김은구

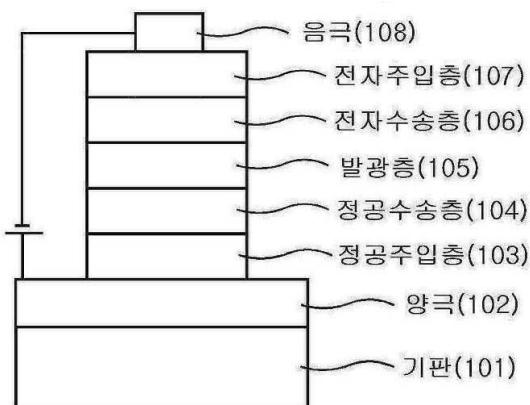
전체 청구항 수 : 총 13 항

(54) 오원자 헤테로 고리를 포함하는 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말

### (57) 요 약

본 발명은 오원자 헤테로 고리를 포함하는 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말을 제공한다.

**대 표 도** - 도1



(72) 발명자

**박용옥**

경기도 안양시 동안구 갈산동 샘마을우방아파트  
508동 202호

**김기원**

인천광역시 남동구 구월2동 롯데캐슬 1115동 701호

**정화순**

강원도 춘천시 우두동 315-6번지

**변지훈**

경기도 용인시 수지구 죽전1동 1337-8 302호

**최대혁**

경기도 수원시 영통구 매탄동 신원천주공아파트 1  
단지 102동 1501호

**김동하**

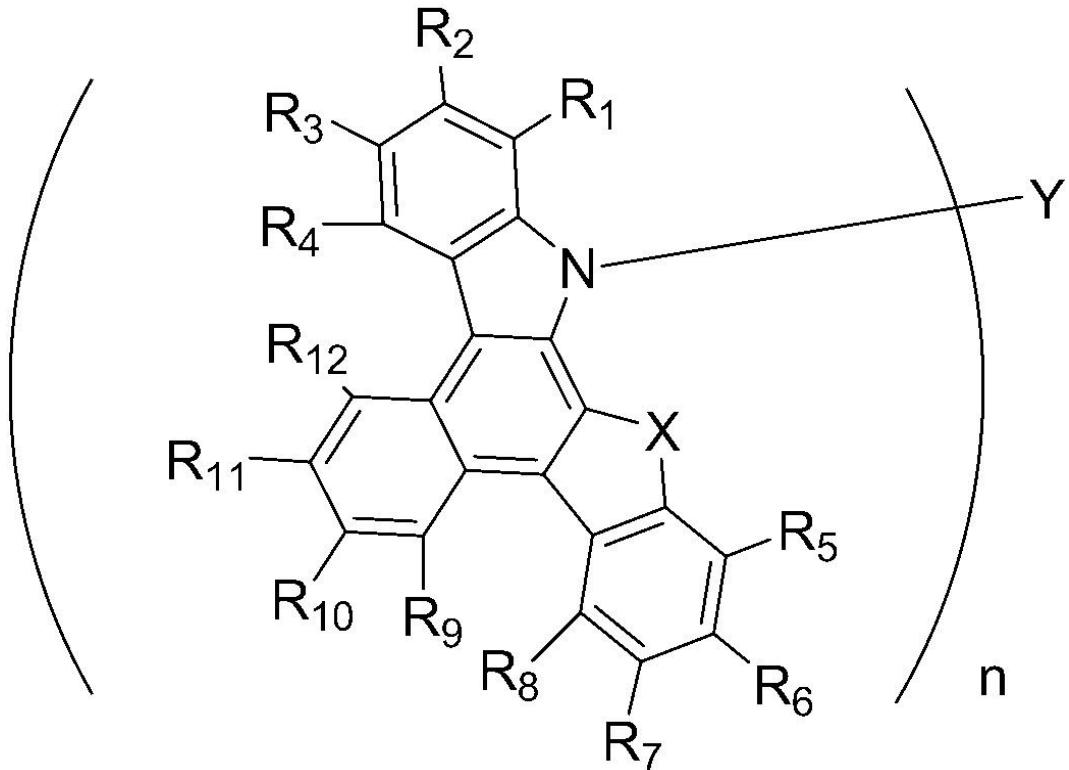
경기도 성남시 분당구 분당동 장안건영아파트 108  
동 1102호

---

## 특허청구의 범위

## 청구항 1

다음 화학식으로 표시되는 화합물.



위 화학식에 있어서,

(1)  $R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10}, R_{11}$  및  $R_{12}$ 은 각각 서로 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 알콕시기, 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알콕시기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤�테로아릴옥시기이며,

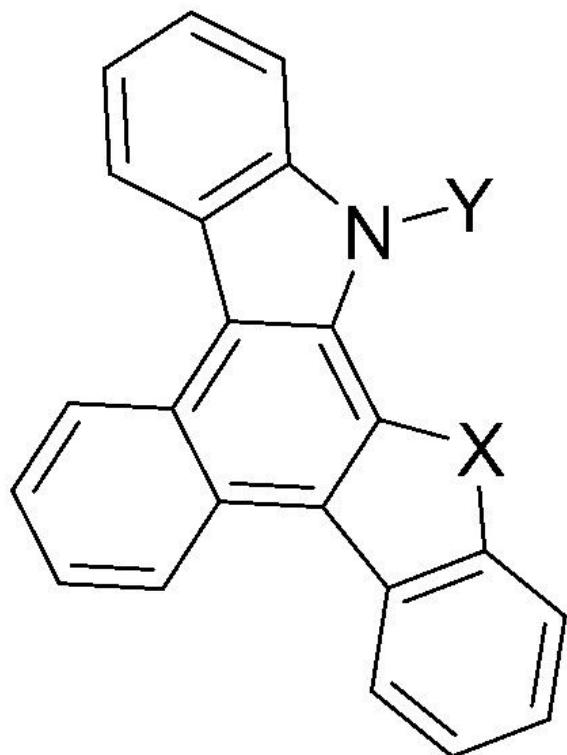
(2) X는 황(S), 산소(O) 또는 규소(Si)이다.

(3) Y는 수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 알콕시기, 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤�테로아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤�테로아릴옥시기이다.

(4) n은 1 내지 3의 정수이다.

## 청구항 2

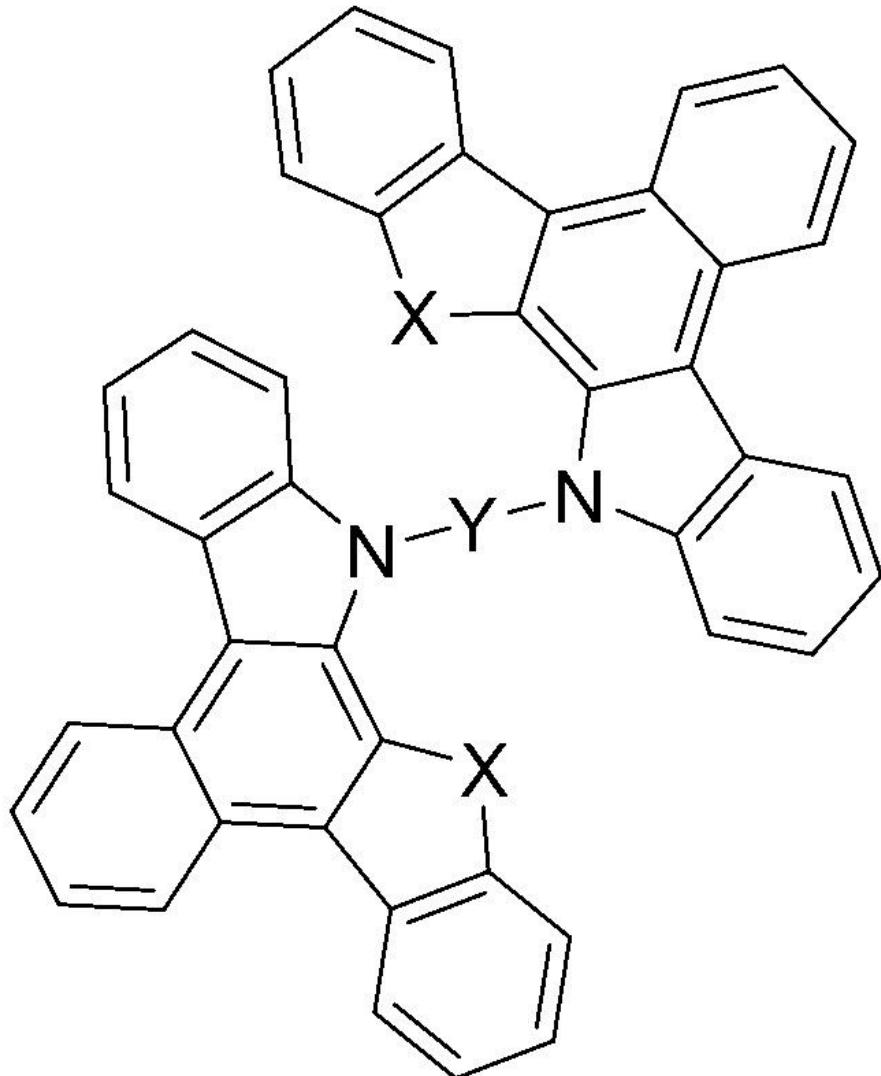
다음 화학식으로 표시되는 화합물.



위 화학식에서, X는 황(S), 산소(O) 또는 규소(Si)이며, Y는 수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 알콕시기, 티울기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴옥시기이다.

## 청구항 3

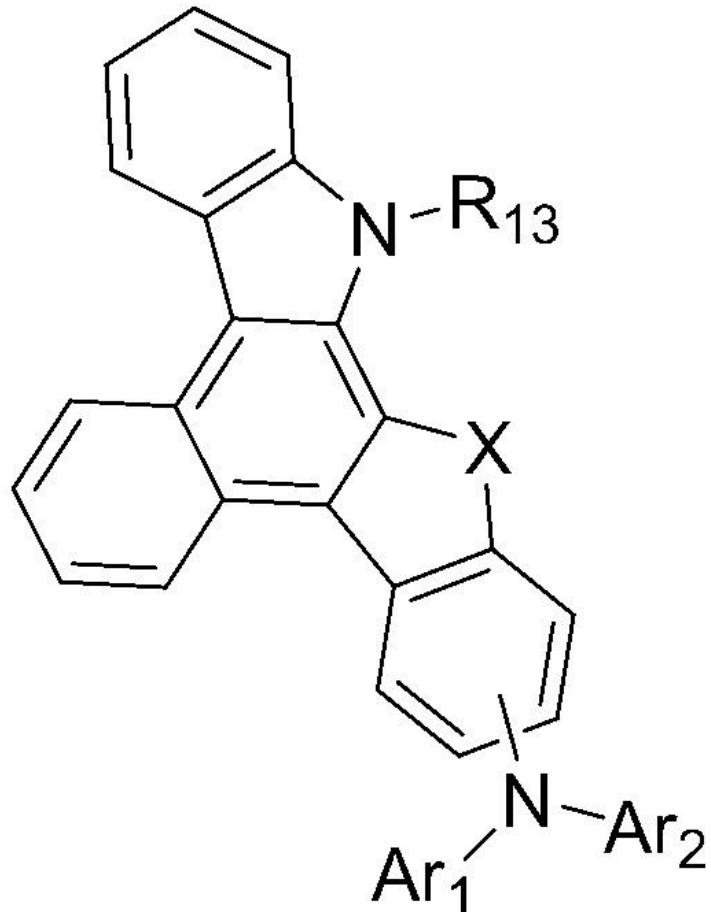
다음 화학식으로 표시되는 화합물.



위 화학식에서, X는 황(S), 산소(O) 또는 규소(Si)이며, Y는 수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 알콕시기, 티울기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴옥시기이다.

## 청구항 4

다음 화학식으로 표시되는 화합물.

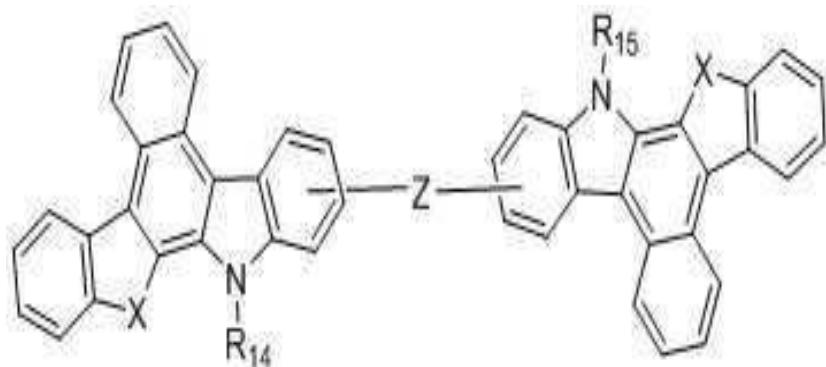


위 화학식에 있어서,

- (1) R<sub>13</sub>은 수소 원자, 할로겐 원자 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기이다.
- (2) Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 서로 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤�테로아릴기이다.
- (3) X는 황(S), 산소(O) 또는 규소(Si)이다.

청구항 5

다음 화학식으로 표시되는 화합물.



위 화학식에서,

- (1)  $R_{14}$  및  $R_{15}$ 은 각각 서로 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기이며,
  - (2) Z는 독립적으로 단일결합을 의미하거나,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-CO-$ ,  $-SO_2-$ ,  $-NR_{16}-$ ,  $-PR_{17}-$ ,  $-SiR_{18}R_{19}-$ , 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기이며,
  - (3) X는 황(S), 산소(O) 또는 규소(Si)이다.

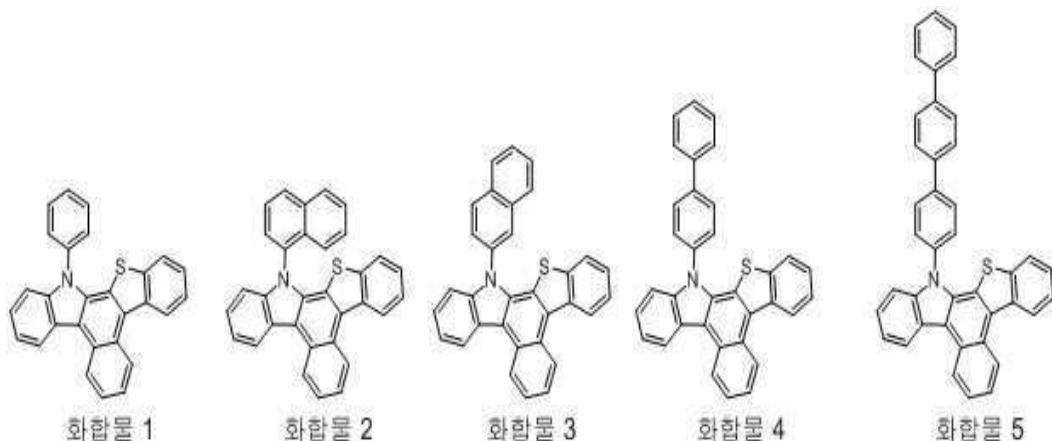
청구함 6

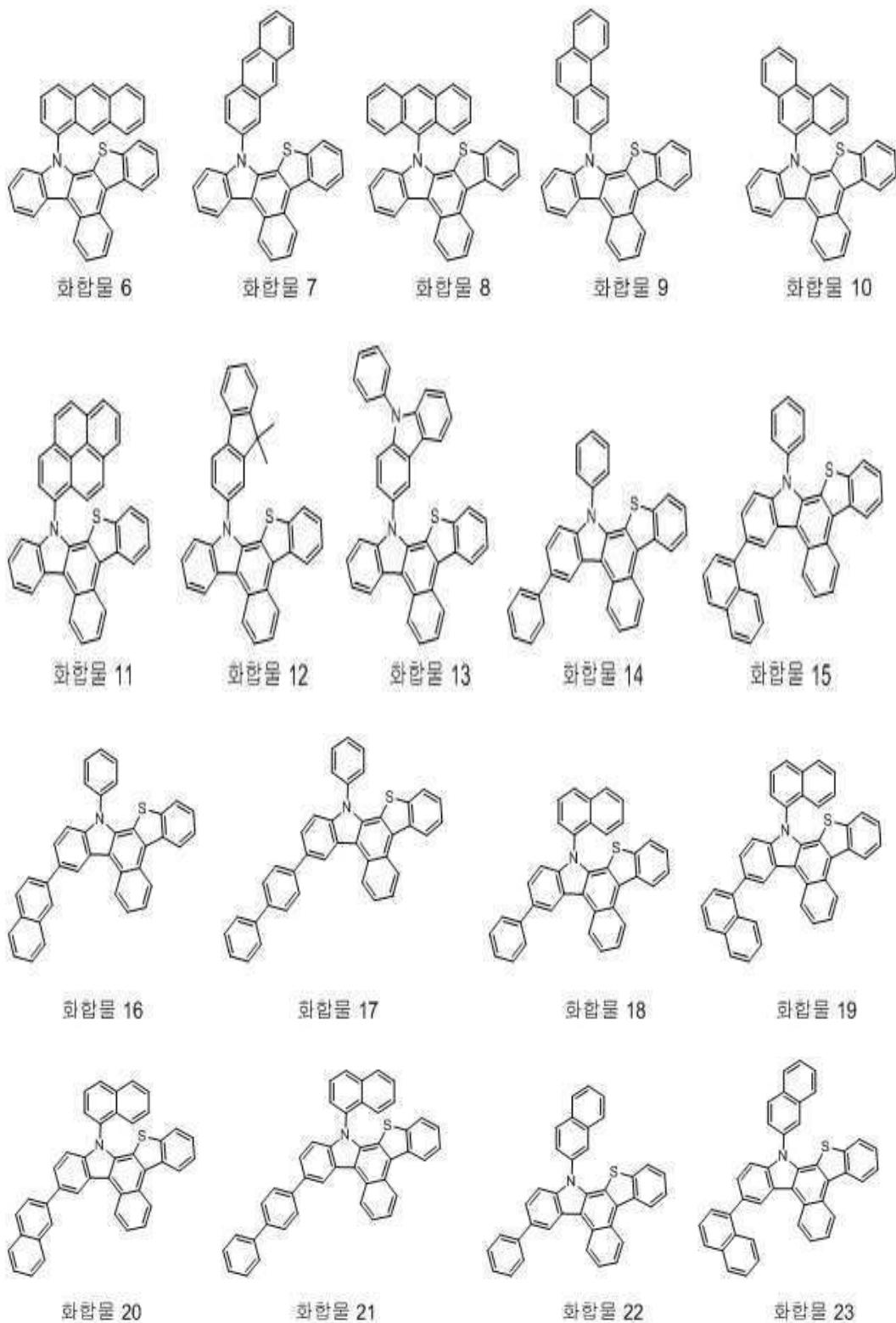
제1항에 있어서.

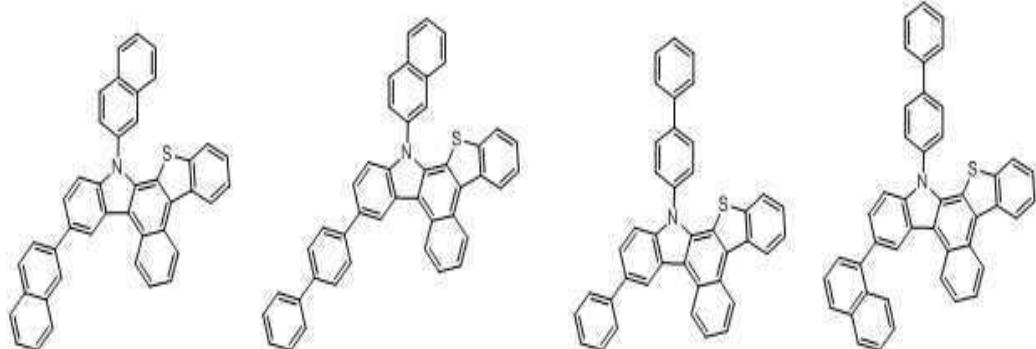
$R_1$ 과  $R_2$ ,  $R_2$ 와  $R_3$ ,  $R_3$ 와  $R_4$ ,  $R_5$ 와  $R_6$ ,  $R_6$ 와  $R_7$ ,  $R_7$ 과  $R_8$  및  $R_9$ ,  $R_{10}$ ,  $R_{11}$ 과  $R_{12}$ 은 인접한 기와 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성하는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 7

제1항 내지 5항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 화합물은,





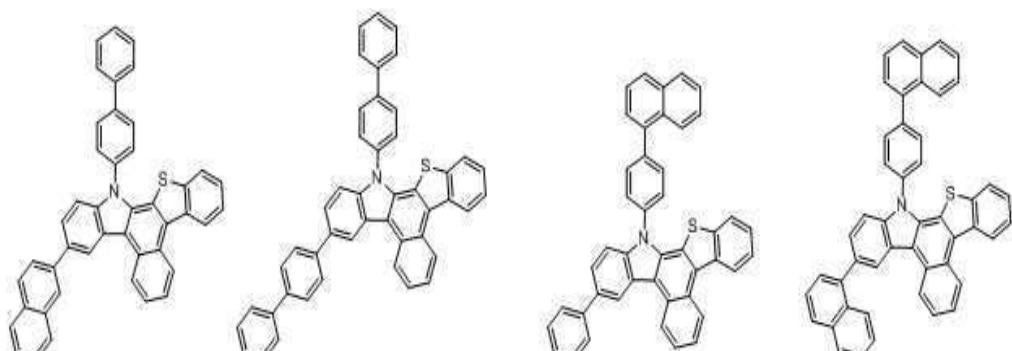


화합물 24

화합물 25

화합물 26

화합물 27

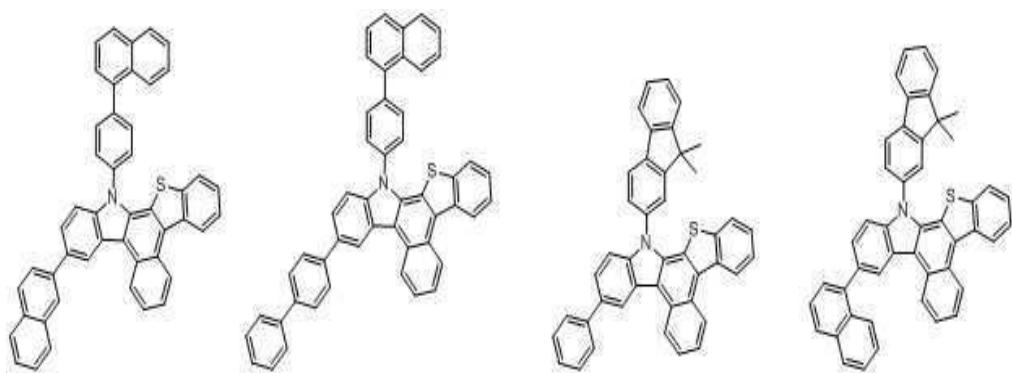


화합물 28

화합물 29

화합물 30

화합물 31

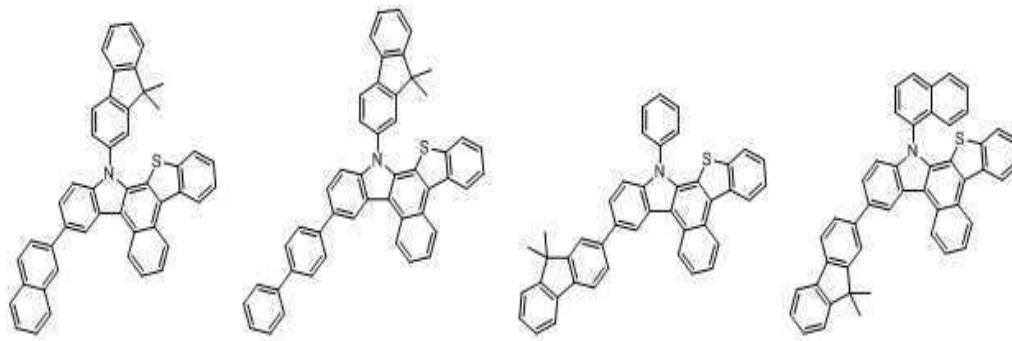


화합물 32

화합물 33

화합물 34

화합물 35

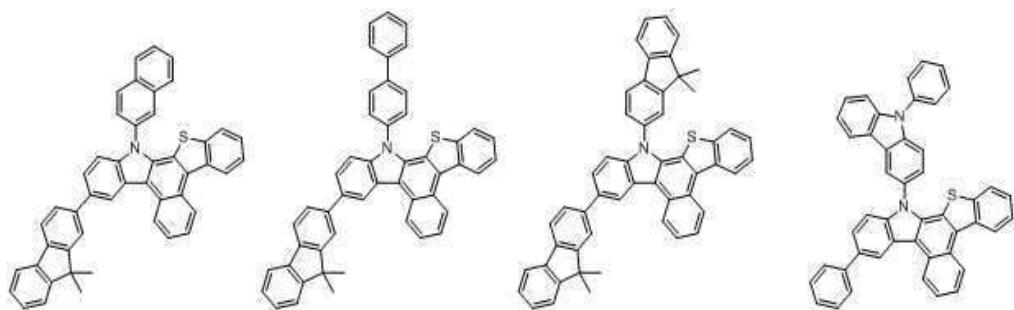


화합물 36

화합물 37

화합물 38

화합물 39

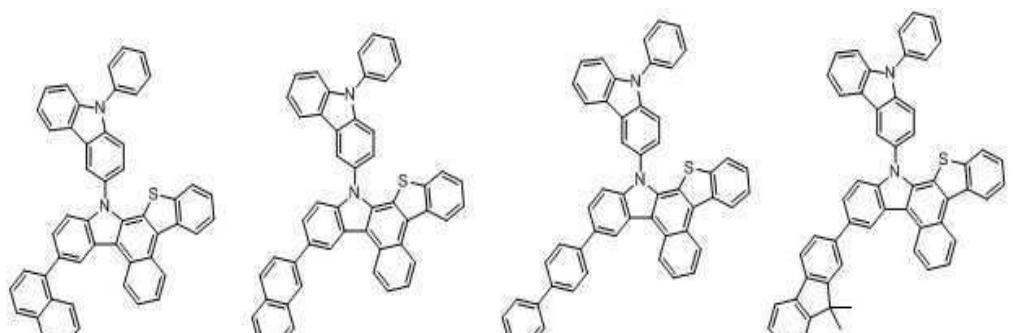


화합물 40

화합물 41

화합물 42

화합물 43

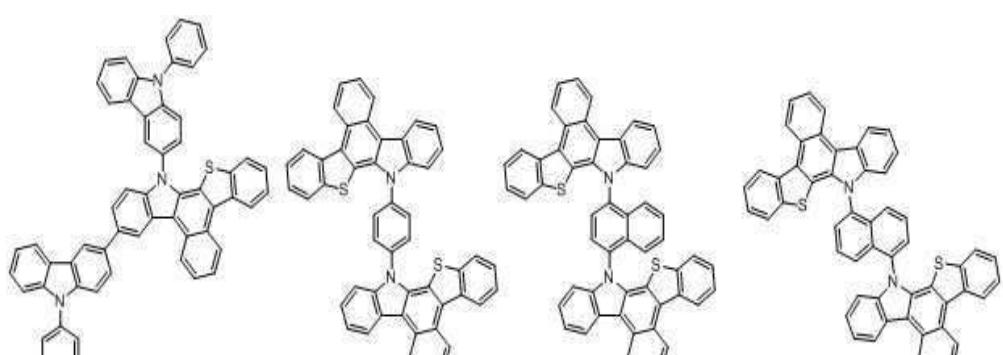


화합물 44

화합물 45

화합물 46

화합물 47

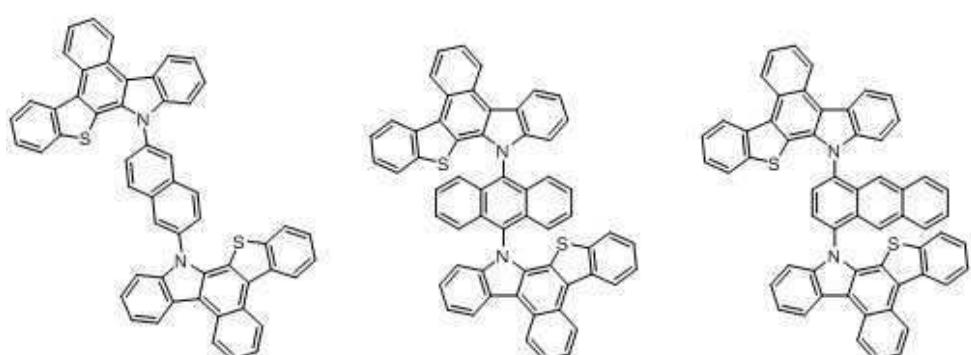


화합물 48

화합물 49

화합물 50

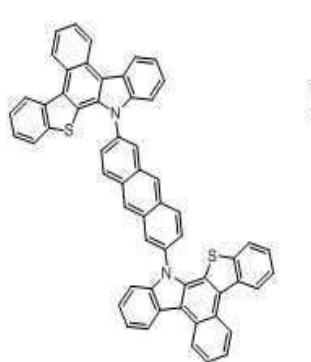
화합물 51



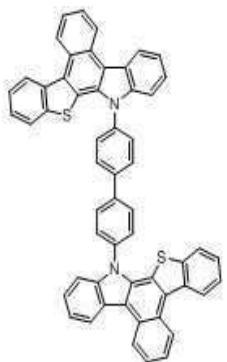
화합물 52

화합물 53

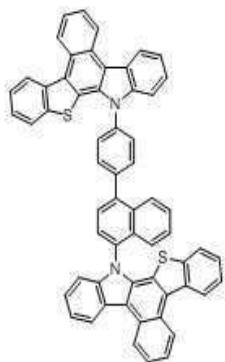
화합물 54



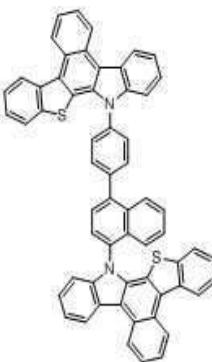
한글 55



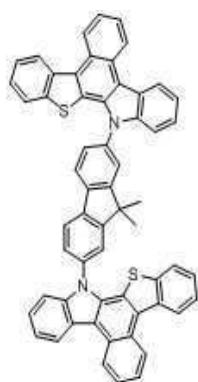
화학물 56



화합물 57



화면 58



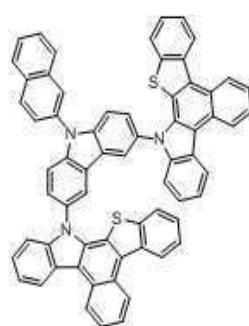
59



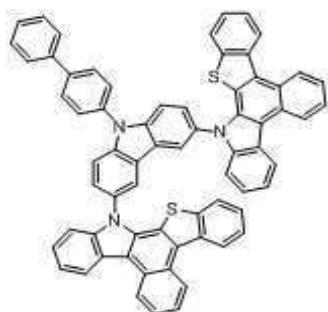
60



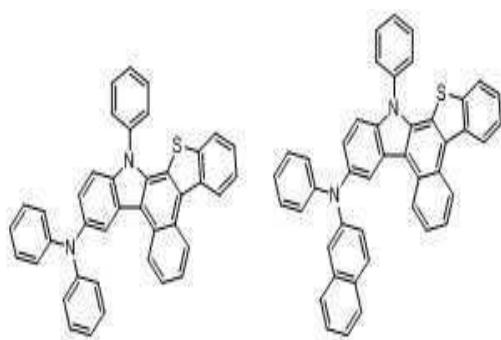
61



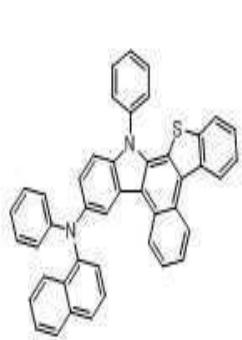
화합물 62



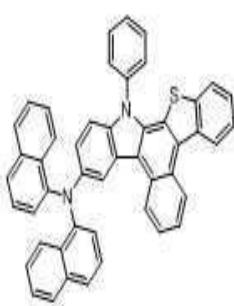
화합물 63



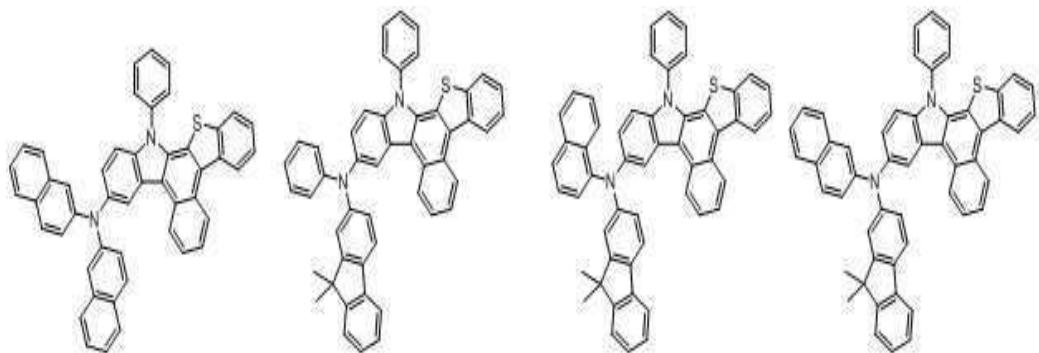
한국 64



65



화합물 67

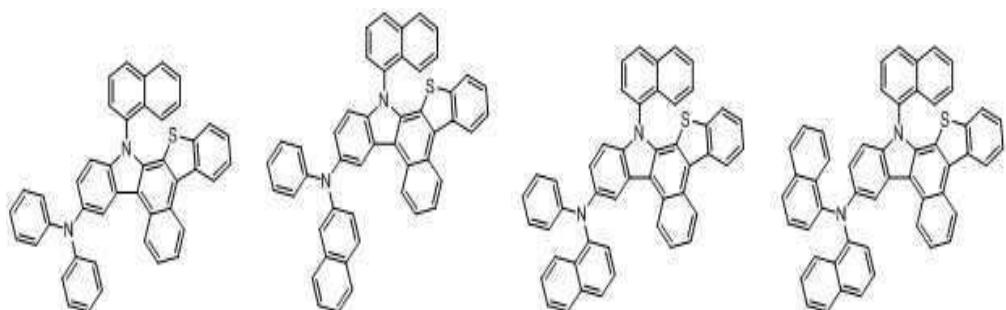


화합물 68

화합물 69

화합물 70

화합물 71

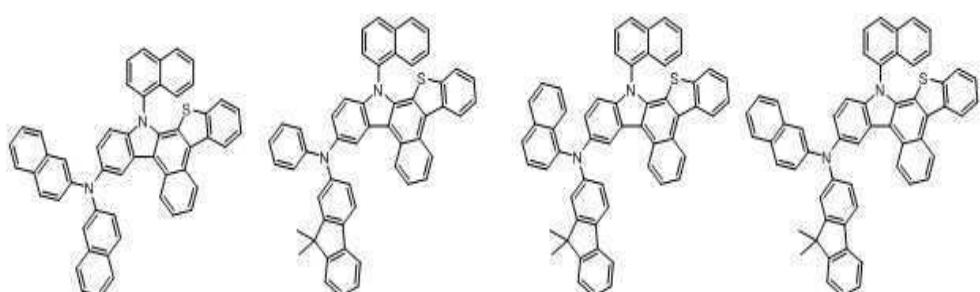


화합물 74

화합물 75

화합물 76

화합물 77

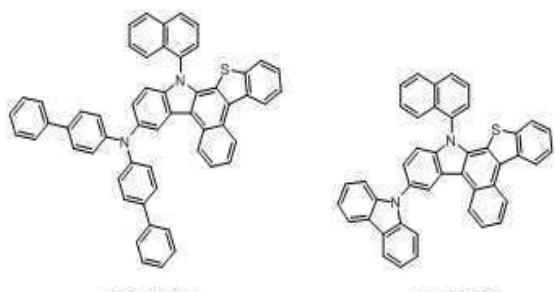


화합물 78

화합물 79

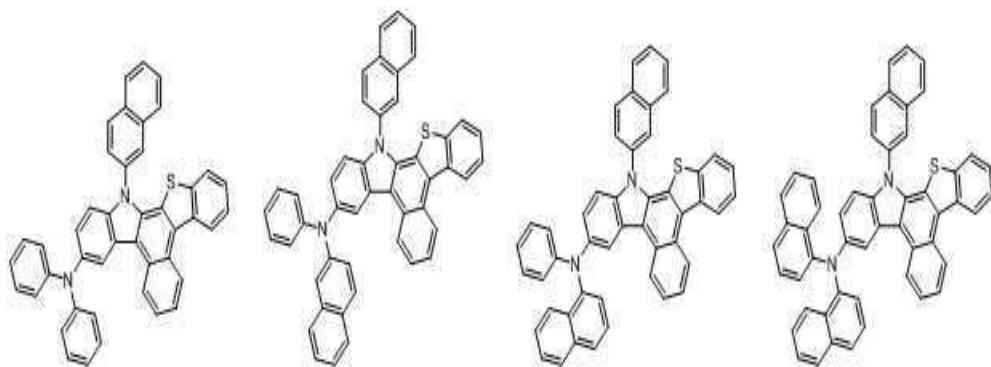
화합물 80

화합물 81



화합물 82

화합물 83

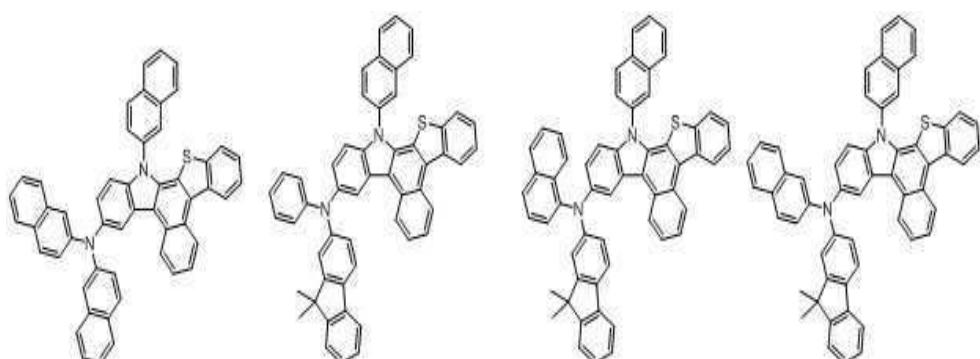


화합물 84

화합물 85

화합물 86

화합물 87

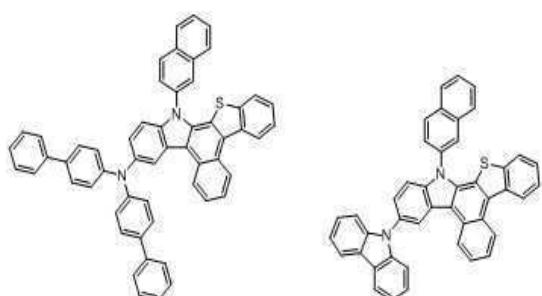


화합물 88

화합물 89

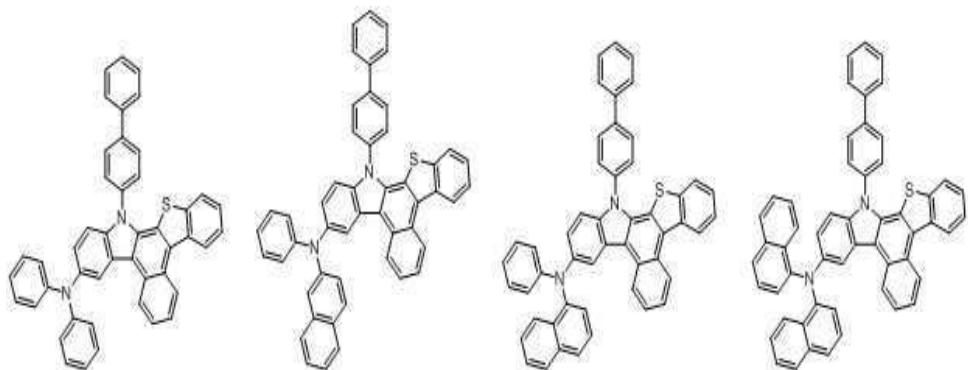
화합물 90

화합물 91



화합물 92

화합물 93

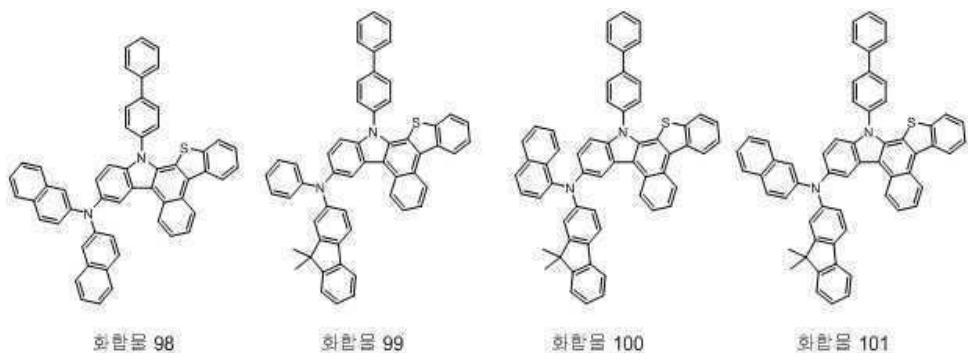


화합물 94

화합물 95

화합물 96

화합물 97

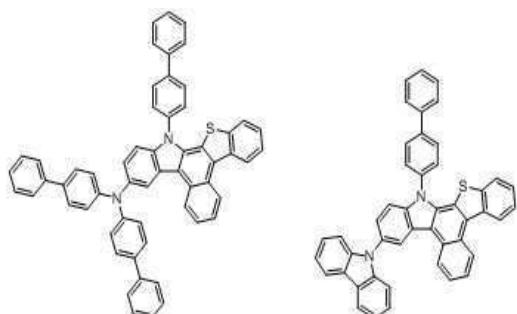


화합물 98

화합물 99

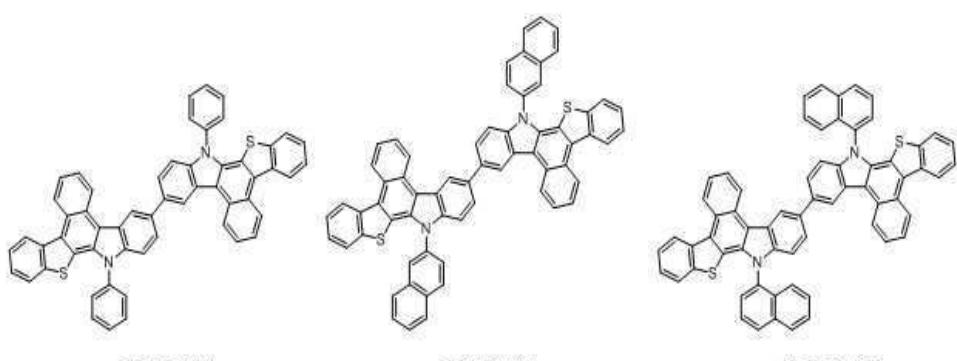
화합물 100

화합물 101



화합물 102

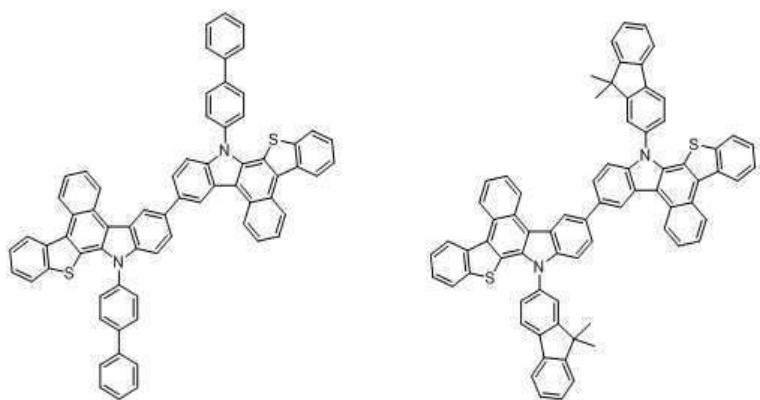
화합물 103



화합물 104

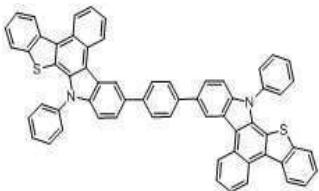
화합물 105

화합물 106

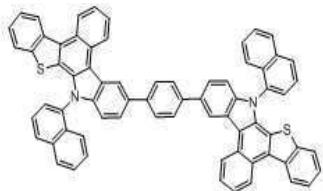


화합물 107

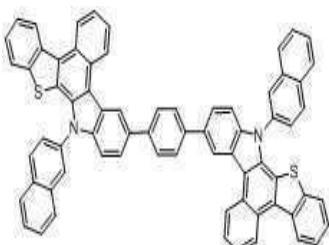
화합물 108



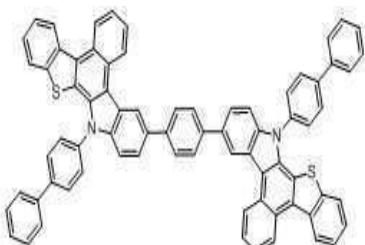
화합물 109



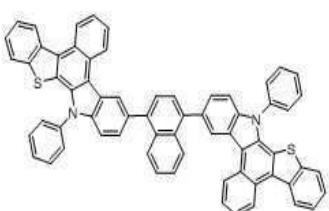
화합물 110



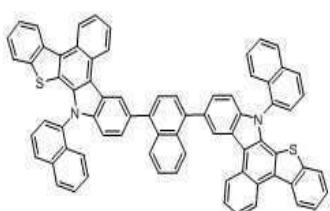
Digitized by srujanika@gmail.com



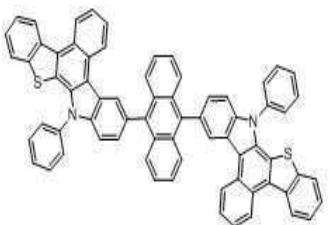
112



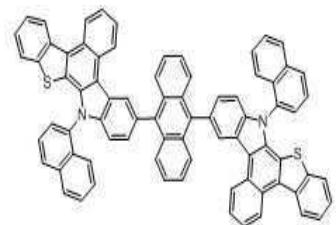
화면 113



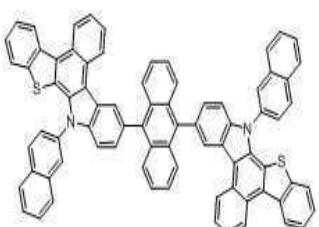
ખાત્રી 114



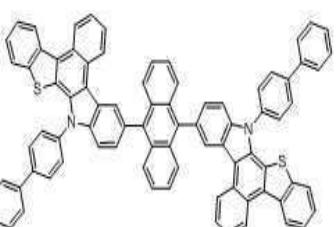
화면 매 117



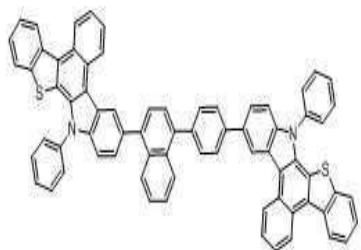
THE 118



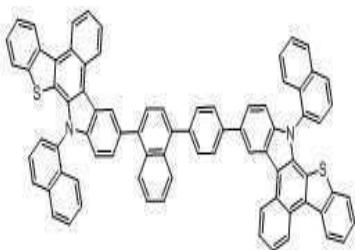
119



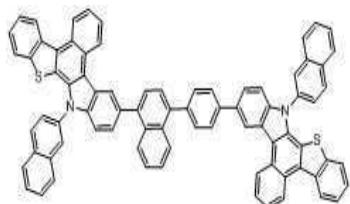
화합물 120



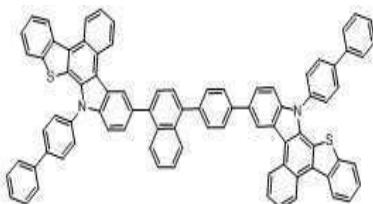
화합물 121



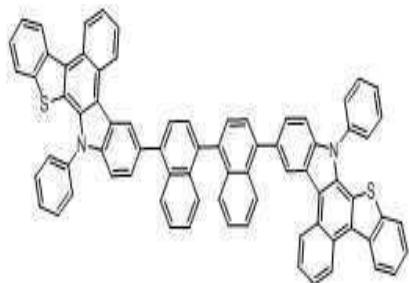
화합물 122



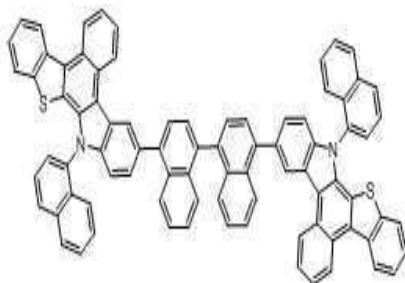
화합물 123



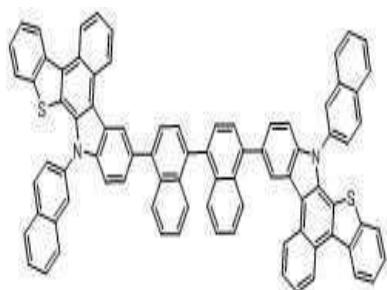
화합물 124



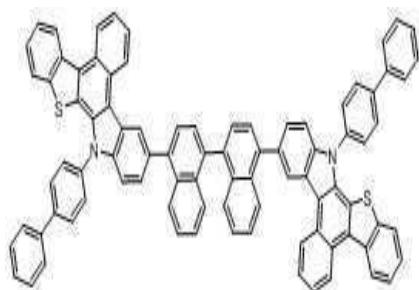
화합물 125



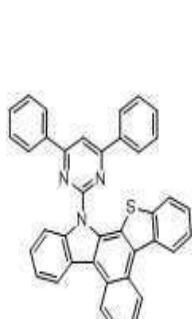
화합물 126



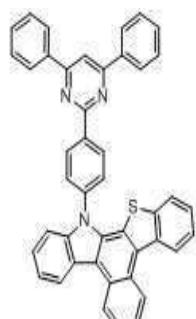
화합물 127



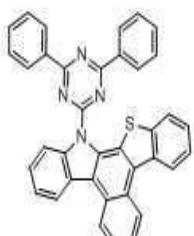
화합물 128



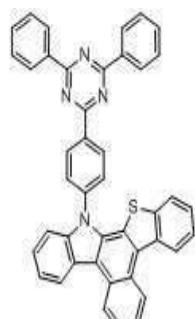
화합물 129



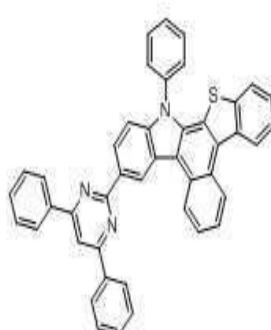
화합물 130



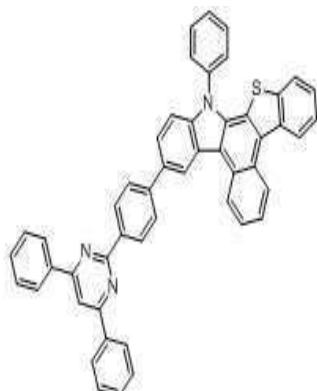
화합물 131



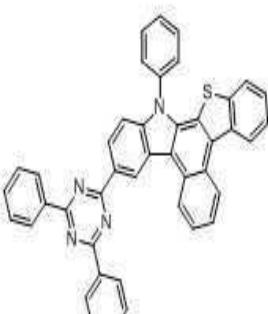
화합물 132



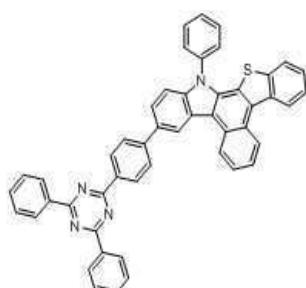
화합물 133



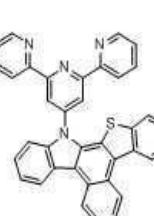
화합물 134



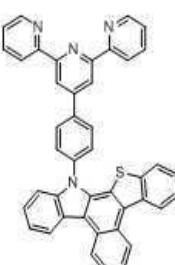
화합물 135



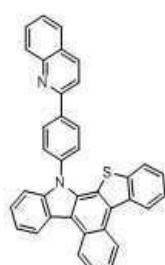
화합물 136



화합물 137



화합물 138



화합물 139

으로 구성된 그룹에서 선택된 하나인 것을 특징으로 하는 화합물.

#### 청구항 8

제1항 내지 제5항 중 하나의 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전기소자.

#### 청구항 9

제8항에 있어서,

상기 화합물을 용액 공정(soluble process)에 의해 상기 유기물층을 형성하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

#### 청구항 10

제8항에 있어서,

상기 유기전기소자는 제1 전극, 상기 1층 이상의 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층된 형태로 포함하는 유기전계발광소자인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

**청구항 11**

제10항에 있어서,

상기 유기물층은 발광층을 포함하며,

상기 발광층에서 상기 화합물이 호스트 물질로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

**청구항 12**

제98의 유기전기소자를 포함하는 전자장치와;

상기 전자장치를 구동하는 제어부를 포함하는 단말.

**청구항 13**

제12항에 있어서,

상기 유기전기소자는 유기전계발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC) 드럼, 유기트랜지스터(유기 TFT), 포토다이오드(photodiode), 유기레이저(organic laser), 레이저 다이오드(laser diode) 중 하나인 것을 특징으로 하는 단말.

**명세서****발명의 상세한 설명****기술 분야**

[0001] 본 발명은 오원자 헤테로 고리를 포함하는 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기전기소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기전기소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

[0003] 유기전기소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다. 그리고, 상기 발광 재료는 분자량에 따라 고분자형과 저분자형으로 분류될 수 있고, 발광 메커니즘에 따라 전자의 일중항 여기상태로부터 유래되는 형광 재료와 전자의 삼중항 여기상태로부터 유래되는 인광 재료로 분류될 수 있다. 또한, 발광 재료는 발광 색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.

[0004] 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 효율을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다. 그 원리는 발광층을 형성하는 호스트 보다 에너지 대역 간극이 작은 도판트를 발광층에 소량 혼합하면, 발광층에서 발생한 엑시톤이 도판트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이 때 호스트의 파장이 도판트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도판트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.

[0005] 전술한 유기전기소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하며, 아직까지 안정하고 효율적인 유기전기소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

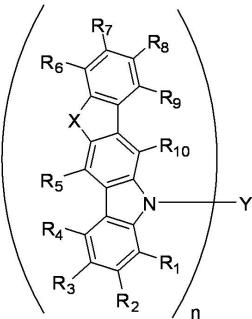
**발명의 내용**

### 해결 하고자하는 과제

- [0006] 본 발명자들은 신규한 구조를 갖는 2개 이상의 오원자 헤테로 고리를 포함하는 화합물을 밝혀내었으며, 또한 이 화합물을 유기전기소자에 적용시 소자의 발광효율, 안정성 및 수명을 크게 향상시킬 수 있다는 사실을 밝혀내었다.
- [0007] 이에 본 발명은 신규한 오원자 헤테로 고리를 포함하는 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말을 제공하는 것을 목적으로 한다.

### 과제 해결수단

- [0008] 일측면에서, 본 발명은 아래 화학식의 화합물을 제공한다.



- [0009]
- [0010] 본 발명은 2개 이상의 오원자 헤테로 고리를 포함하는 화합물에 따라서 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 모든 칼라의 형광과 인광소자에 적합한 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료 및/또는 전자수송 재료로 유용하며, 다양한 색의 인광 도판트의 호스트 물질로 유용하다.
- [0011] 또한, 본 발명은 상기의 화학식을 가지는 화합물을 이용한 유기 전자 소자 및 이 유기 전자 소자를 포함하는 단말을 제공한다.

### 효과

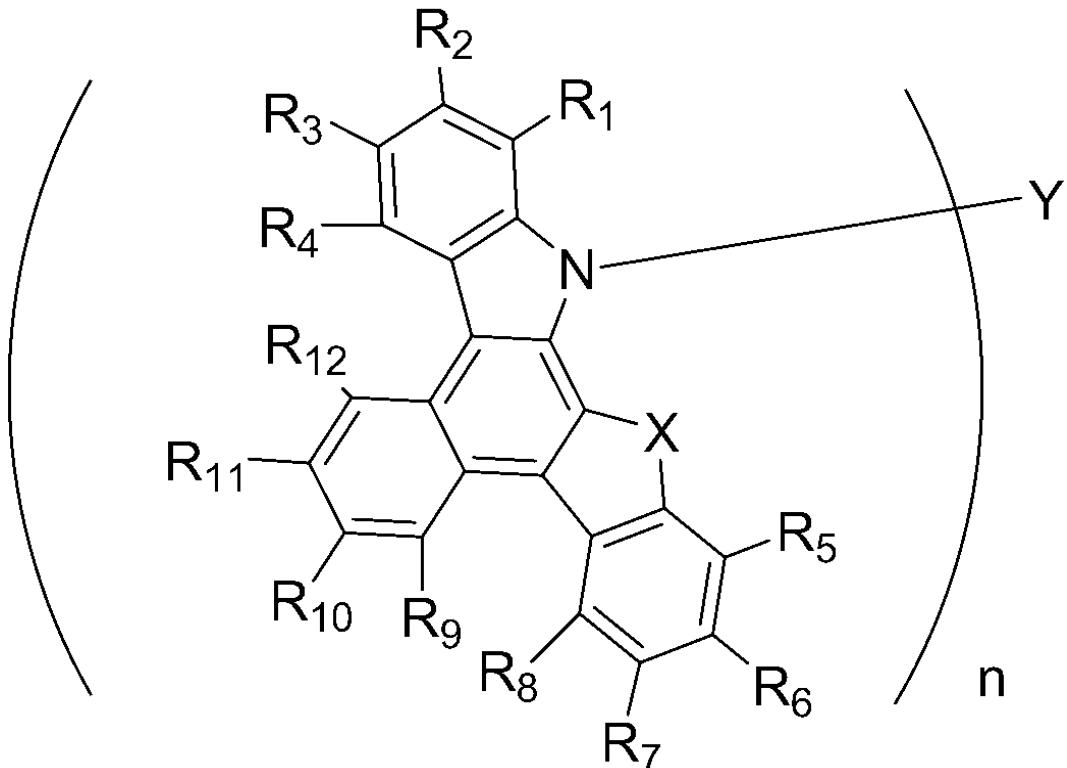
- [0012] 2개 이상의 오원자 헤테로 고리를 포함하는 화합물은 유기전기소자 및 단말에서 다양한 역할을 할 수 있으며, 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 모든 칼라의 형광과 인광소자에 적합한 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료 및/또는 전자수송 재료로 유용하며, 다양한 색의 인광 도판트의 호스트 물질로 유용하다.

### 발명의 실시를 위한 구체적인 내용

- [0013] 이하, 본 발명의 일부 실시예들을 예시적인 도면을 통해 상세하게 설명한다. 각 도면의 구성요소들에 참조부호를 부가함에 있어서, 동일한 구성요소들에 대해서는 비록 다른 도면상에 표시되더라도 가능한 한 동일한 부호를 가지도록 하고 있음에 유의해야 한다. 또한, 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.
- [0014] 또한, 본 발명의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제 1, 제 2, A, B, (a), (b) 등의 용어를 사용할 수 있다. 이러한 용어는 그 구성 요소를 다른 구성 요소와 구별하기 위한 것일 뿐, 그 용어에 의해 해당 구성 요소의 본질이나 차례 또는 순서 등이 한정되지 않는다. 어떤 구성 요소가 다른 구성요소에 "연결", "결합" 또는 "접속" 된다고 기재된 경우, 그 구성 요소는 그 다른 구성요소에 직접적으로 연결되거나 또는 접속될 수 있지만, 각 구성 요소 사이에 또 다른 구성 요소가 "연결", "결합" 또는 "접속"될 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.

- [0015] 일측면에서, 본 발명은 아래 화학식 1의 화합물을 제공한다.

## 화학식 1



[0016]

[0017] 위 화학식 1에 있어서,

[0018] (1) R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>8</sub>, R<sub>9</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>은 각각 서로 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 알콕시기, 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알콕시기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤�테로아릴옥시기이다.

[0019]

(2) R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>, R<sub>2</sub>와 R<sub>3</sub>, R<sub>3</sub>와 R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>와 R<sub>6</sub>, R<sub>6</sub>와 R<sub>7</sub>, R<sub>7</sub>과 R<sub>8</sub> 및 R<sub>9</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>11</sub>과 R<sub>12</sub>은 인접한 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[0020]

(3) X는 황(S), 산소(O) 또는 규소(Si)이다.

[0021]

(4) Y는 수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 알콕시기, 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤�테로아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤�테로아릴옥시기이다.

[0022]

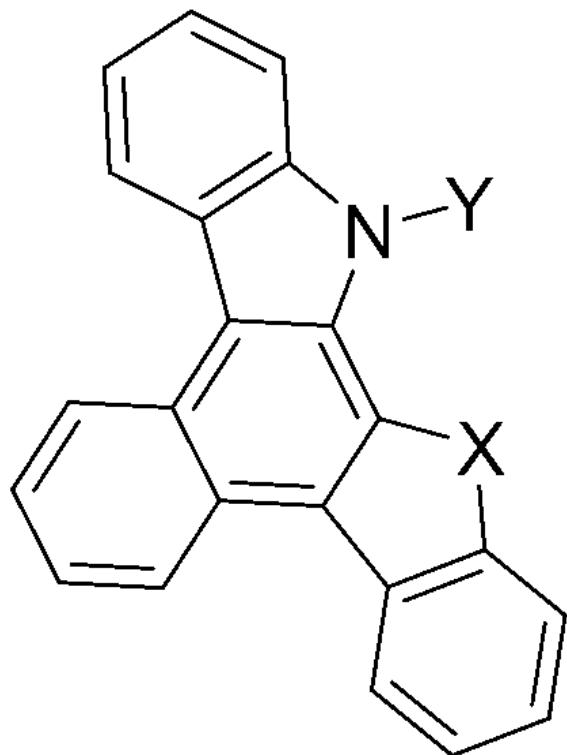
(5) n은 1 내지 3의 정수이다.

[0023]

(6) 화학식 1을 가지는 화합물은 용액 공정(soluble process)에 사용될 수 있다.

[0024] 다른 측면에서, 본 발명은 아래 화학식 2의 화합물을 제공한다.

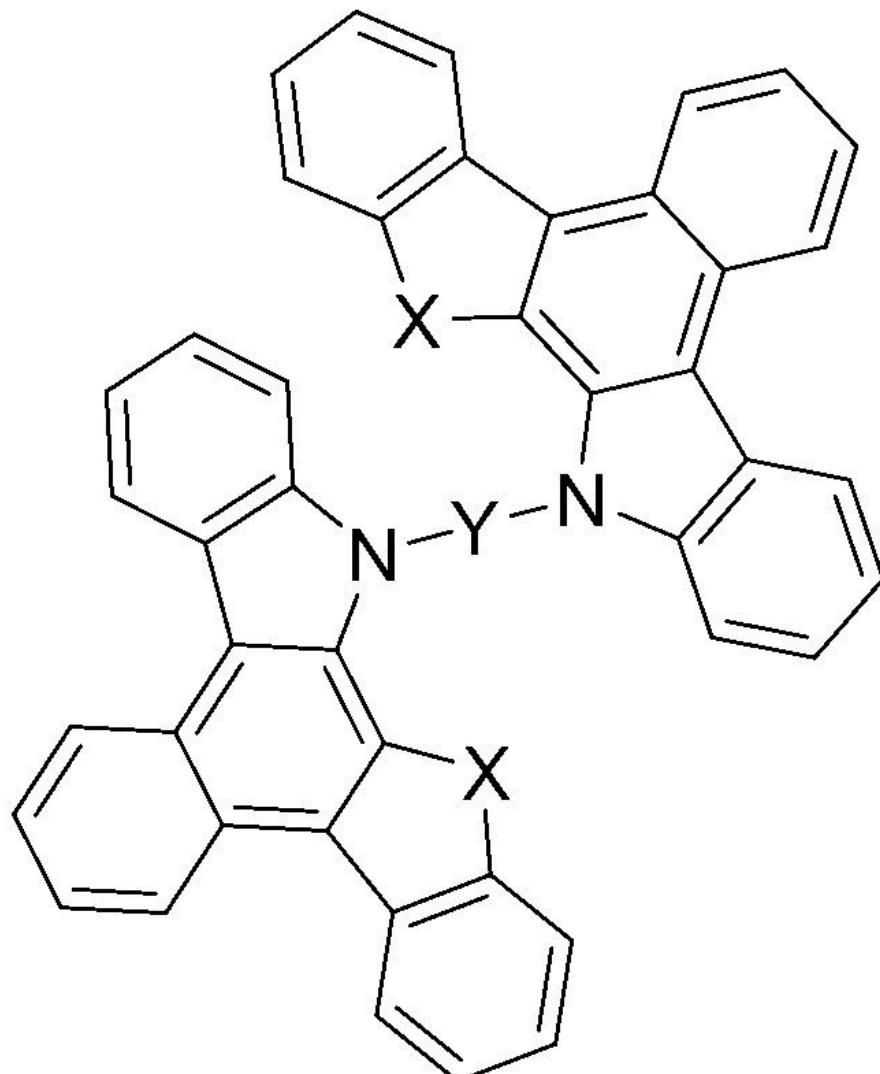
화학식 2



[0025]

[0026] 또다른 측면에서, 본 발명은 아래 화학식 3의 화합물을 제공한다.

화학식 3

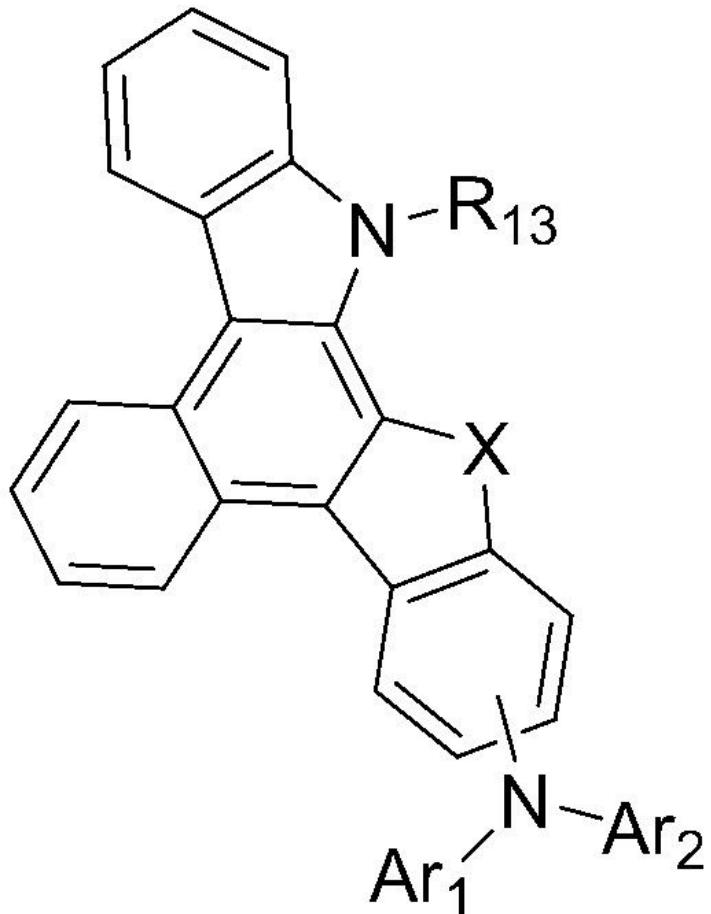


[0027]

[0028] 위 화학식 2 및 3에서 X 및 Y는 화학식 1과 동일할 수 있다.

[0029] 또 다른 측면에서, 본 발명은 아래 화학식 4의 화합물을 제공한다.

## 화학식 4



[0030]

[0031] 위 화학식 4에 있어서,

[0032]

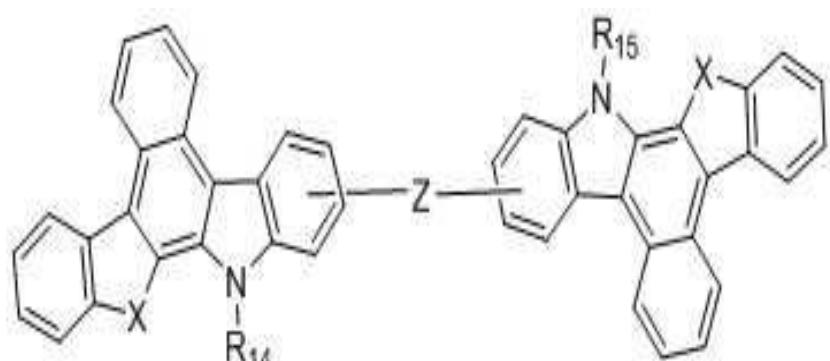
(7) R<sub>13</sub>은 수소 원자, 할로겐 원자 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기이다.

[0033]

(8) Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 서로 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기이다.

[0034] 또 다른 측면에서, 본 발명은 아래 화학식 5의 화합물을 제공한다.

화학식 5



[0035]

위 화학식 5에 있어서,

[0037]

(9)  $R_{14}$  및  $R_{15}$ 은 각각 서로 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기 또는 흥(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기이다.

[0038]

(10) Z는 독립적으로 단일결합을 의미하거나, - O -, - S -, - CO -, - SO<sub>2</sub> -, - NR<sub>16</sub> -, - PR<sub>17</sub> -, - SiR<sub>18</sub>R<sub>19</sub> -, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기이다.

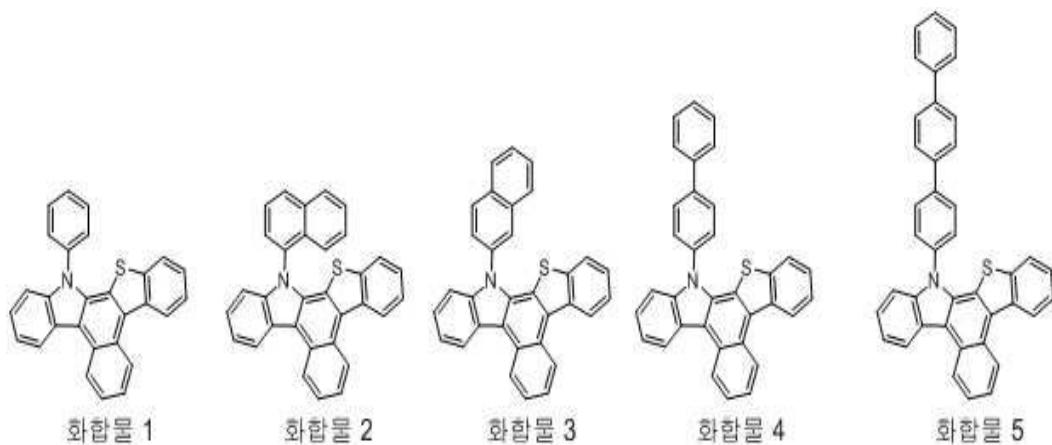
[0039]

이때 화학식 2 내지 5로 표시되는 화합물들을 용액 공정(soluble process)에 사용될 수 있다.

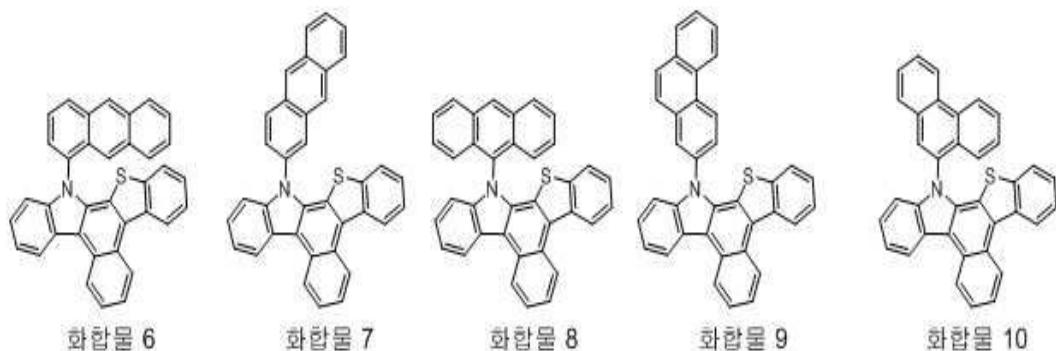
[0040]

본 발명의 일실시예에 따른 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물인 화학식 1 내지 5에 속하는 화합물의 구체적 예로서 아래 화학식 6의 화합물들이 있으나, 본 발명이 이들에만 한정되는 것은 아니다.

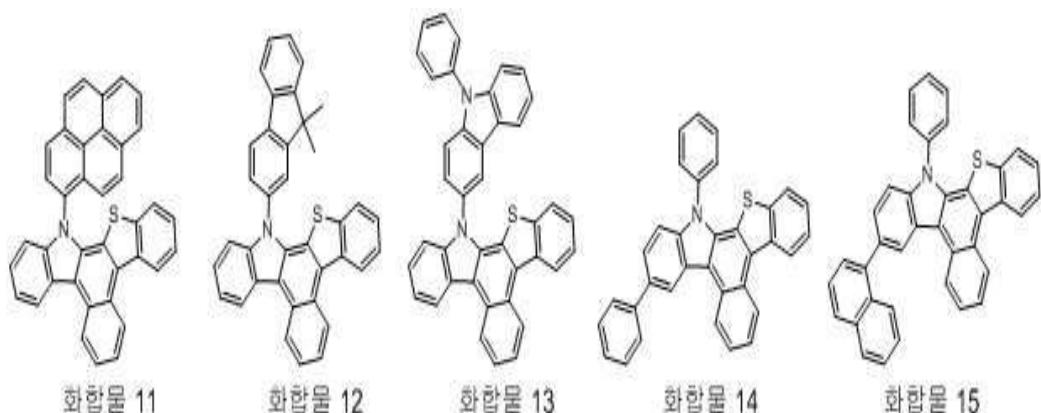
화학식 6



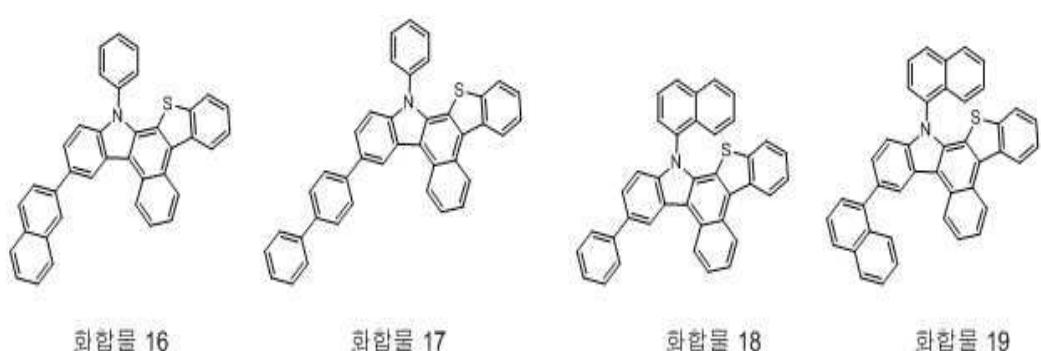
[0041]



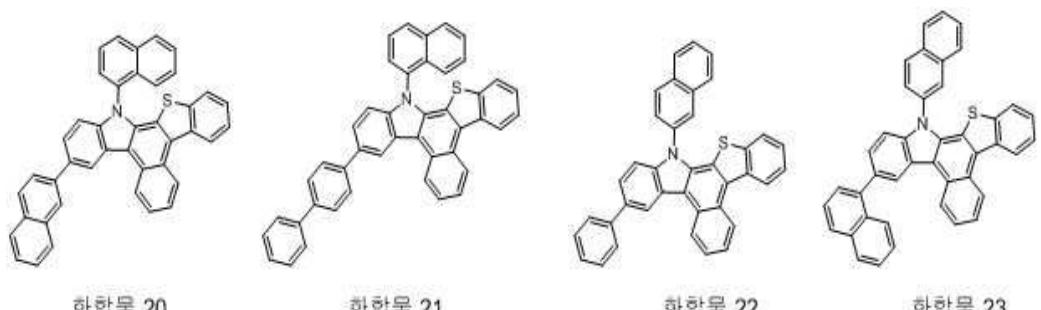
[0042]



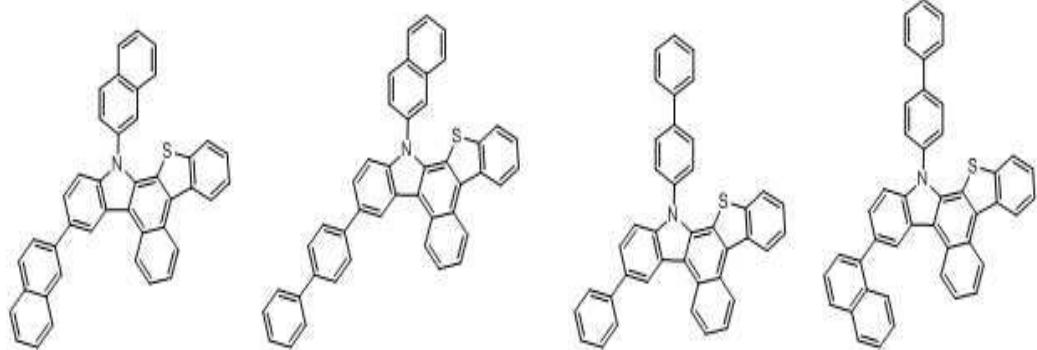
[0043]



[0044]



[0045]

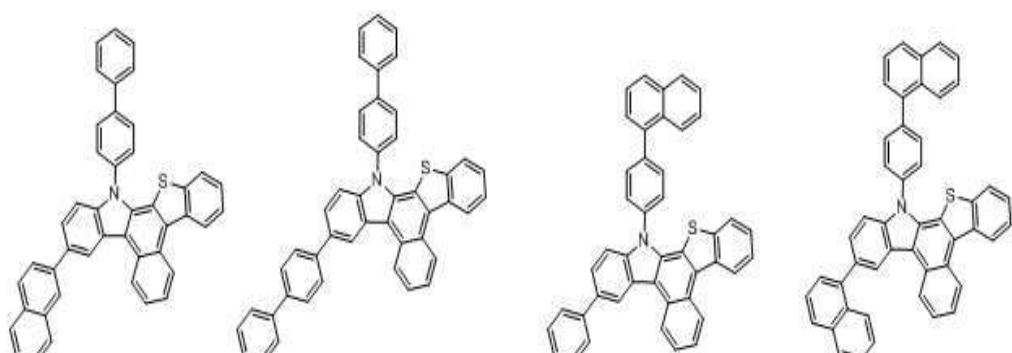


화합물 24

화합물 25

화합물 26

화합물 27

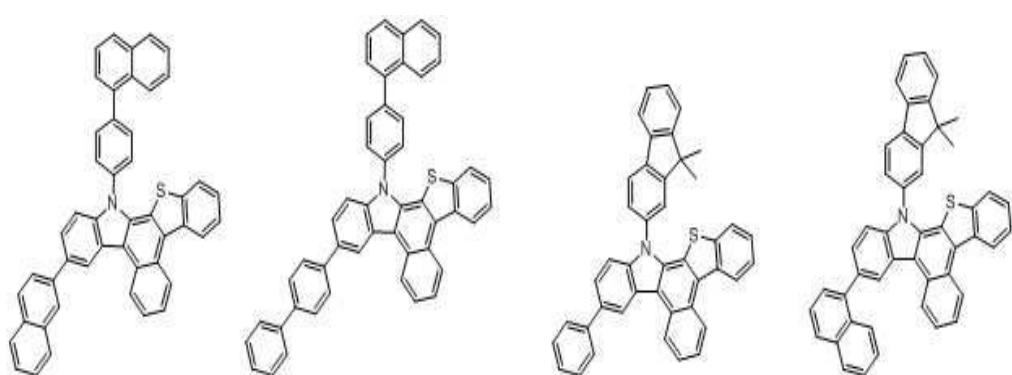


화합물 28

화합물 29

화합물 30

화합물 31

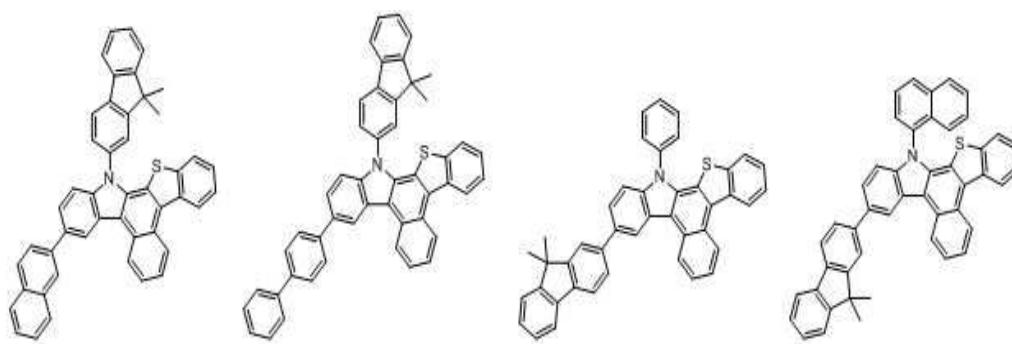


화합물 32

화합물 33

화합물 34

화합물 35

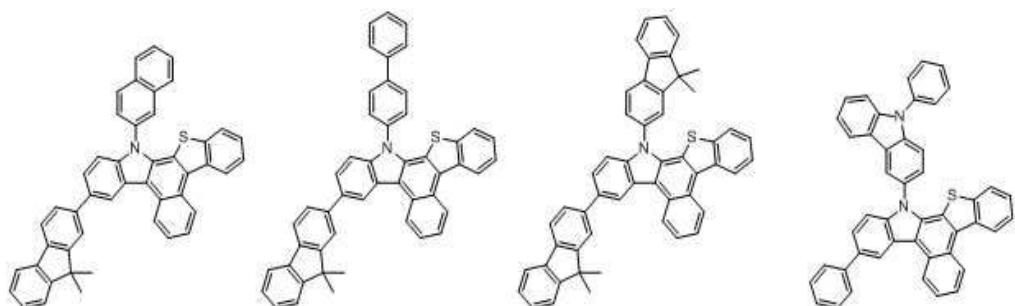


화합물 36

화합물 37

화합물 38

화합물 39



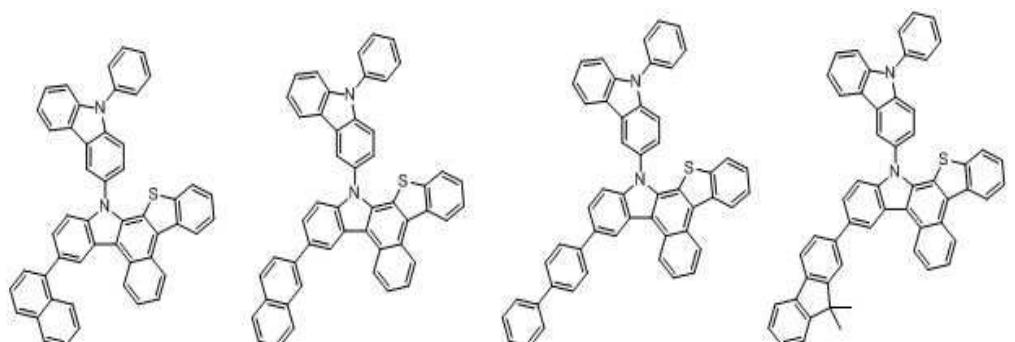
[0050]

화합물 40

화합물 41

화합물 42

화합물 43



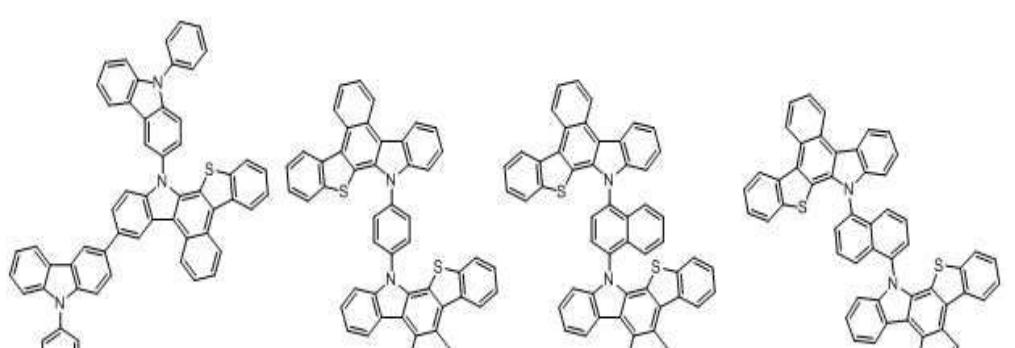
[0051]

화합물 44

화합물 45

화합물 46

화합물 47



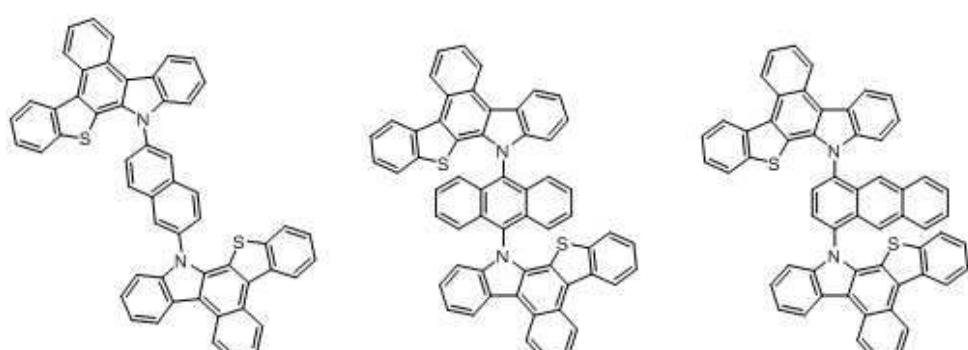
[0052]

화합물 48

화합물 49

화합물 50

화합물 51

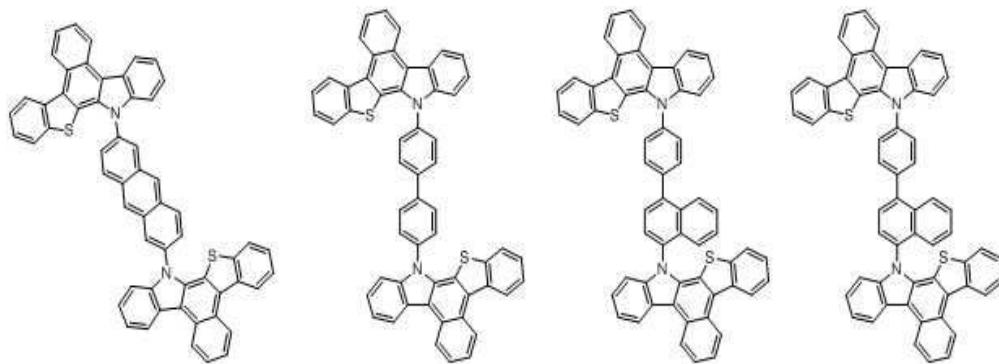


[0053]

화합물 52

화합물 53

화합물 54



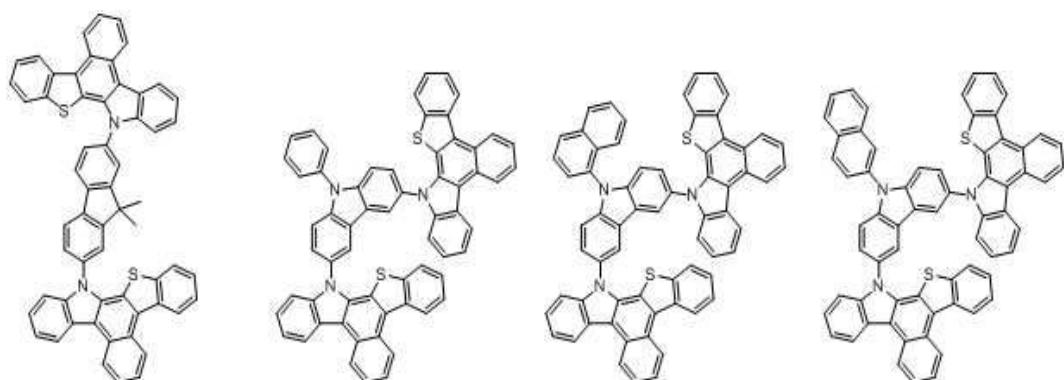
[0054]

화합물 55

화합물 56

화합물 57

화합물 58



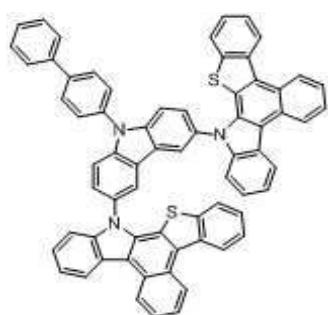
[0055]

화합물 59

화합물 60

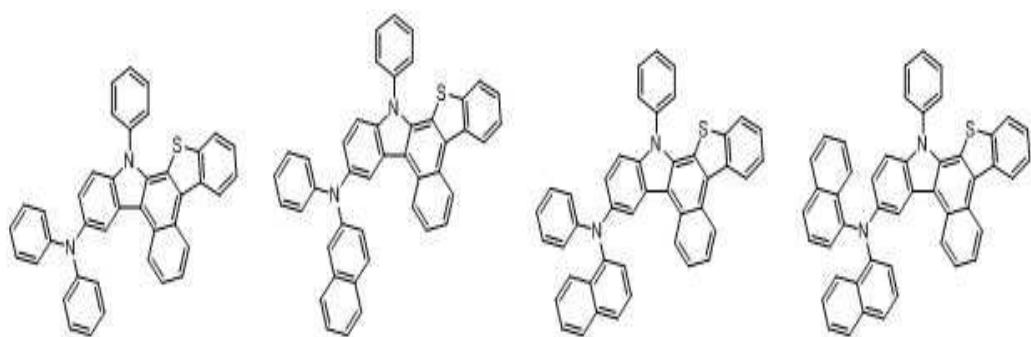
화합물 61

화합물 62



[0056]

화합물 63



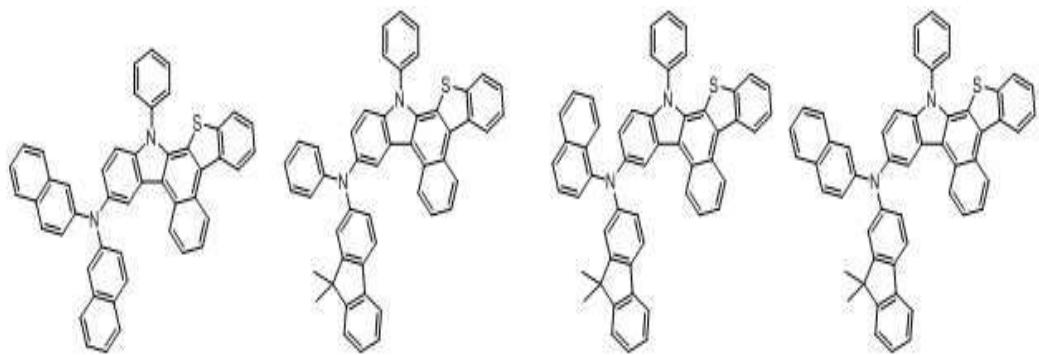
[0057]

화합물 64

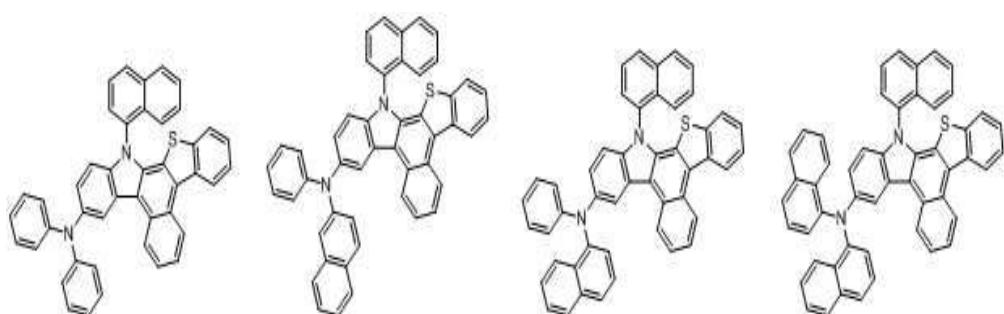
화합물 65

화합물 66

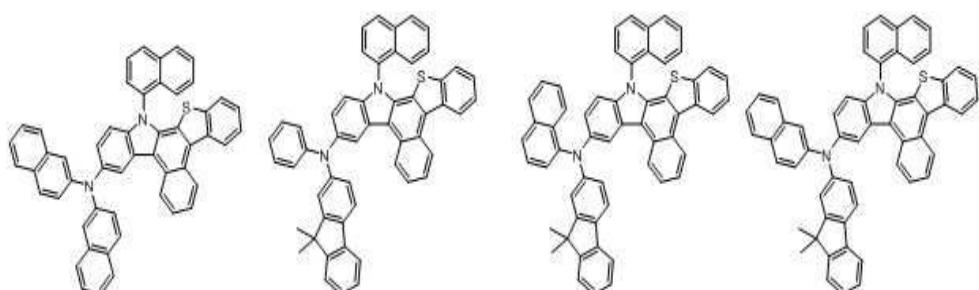
화합물 67



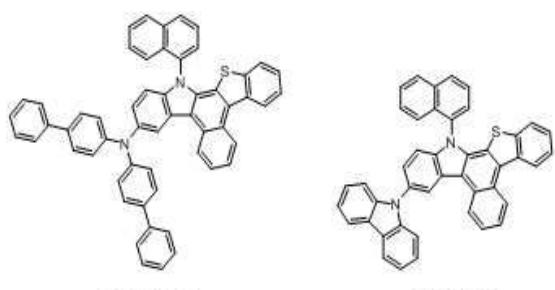
[0058]



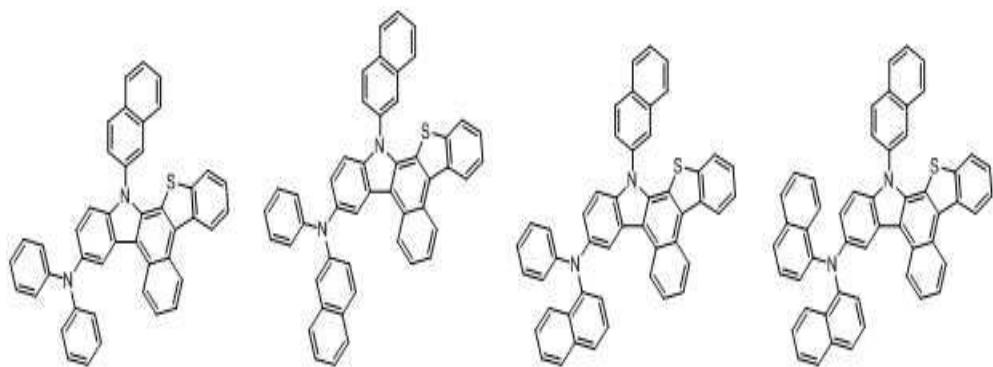
[0059]



[0060]



[0061]



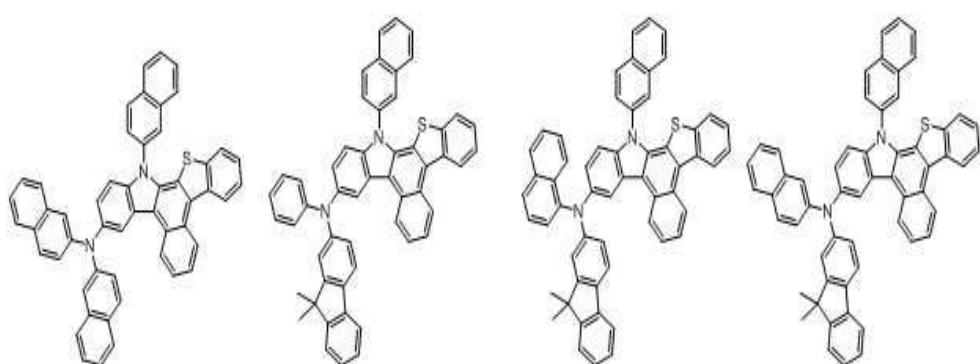
[0062]

화합물 84

화합물 85

화합물 86

화합물 87



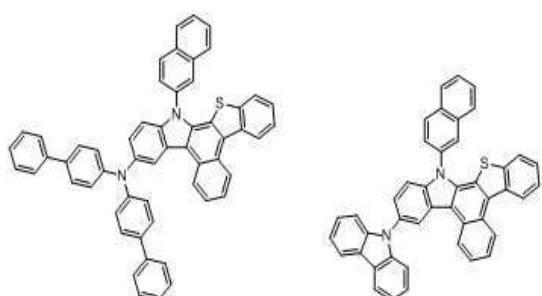
[0063]

화합물 88

화합물 89

화합물 90

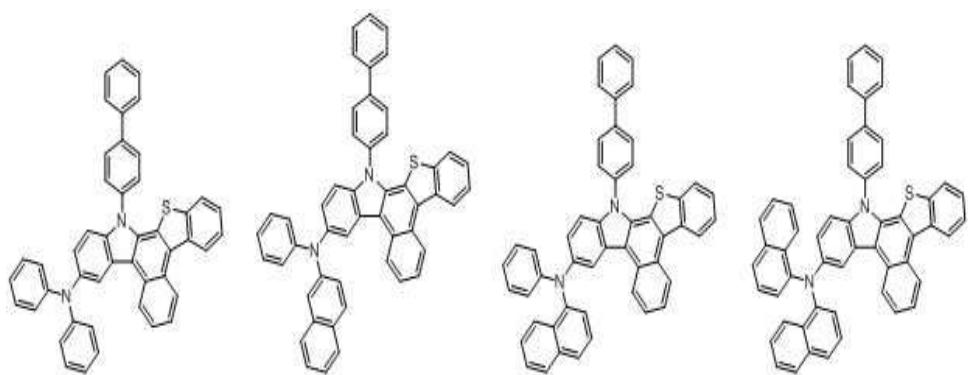
화합물 91



[0064]

화합물 92

화합물 93



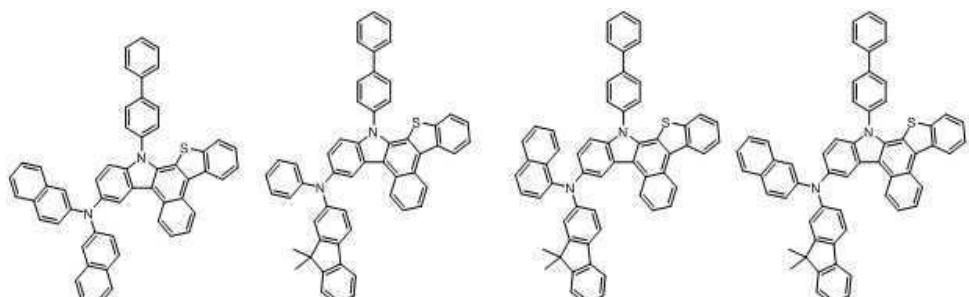
[0065]

화합물 94

화합물 95

화합물 96

화합물 97



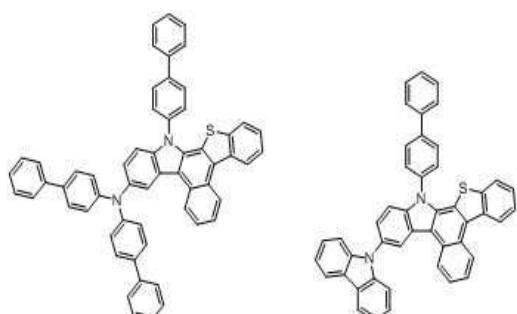
[0066]

화합물 98

화합물 99

화합물 100

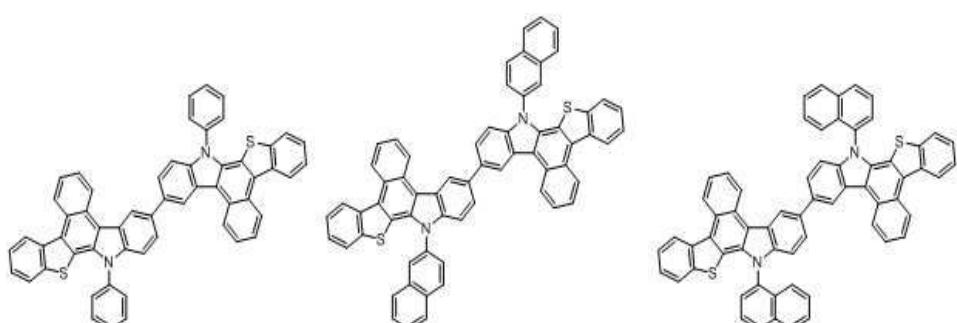
화합물 101



[0067]

화합물 102

화합물 103

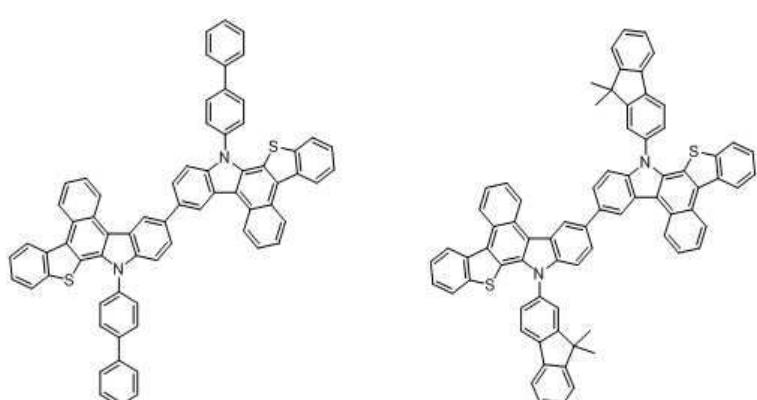


[0068]

화합물 104

화합물 105

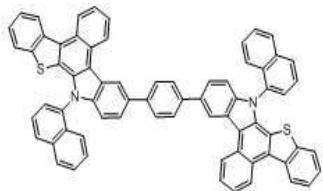
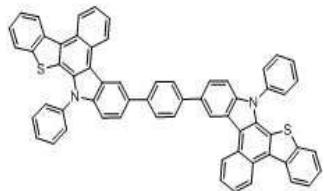
화합물 106



[0069]

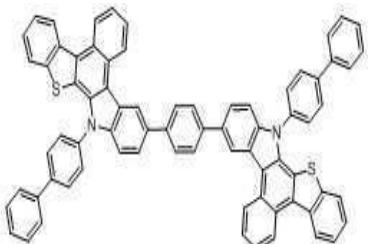
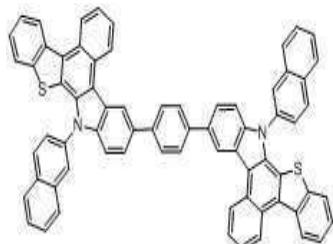
화합물 107

화합물 108



[0070]

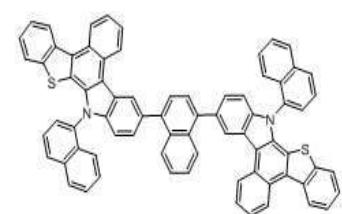
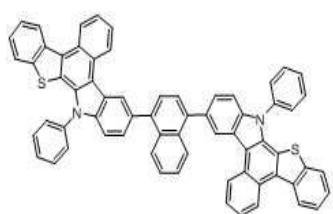
화합물 109



[0071]

화합물 111

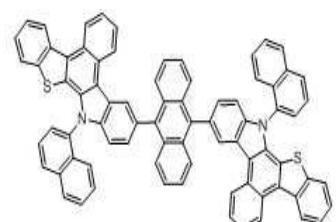
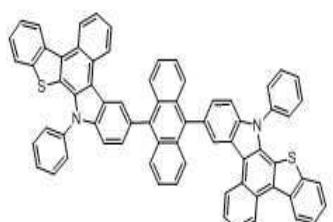
화합물 112



[0072]

화합물 113

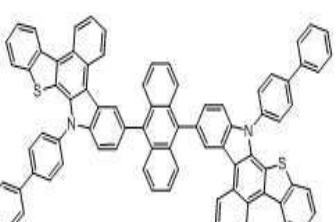
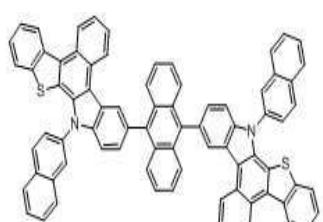
화합물 114



[0073]

화합물 117

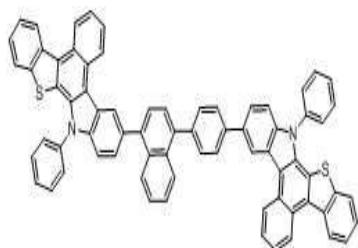
화합물 118



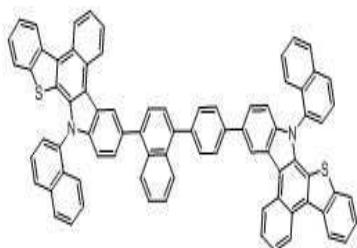
[0074]

화합물 119

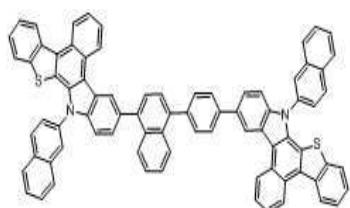
화합물 120



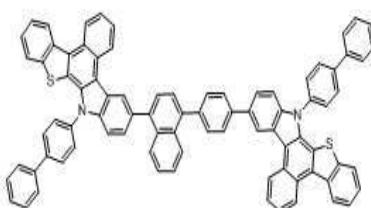
[0075] 화합물 121



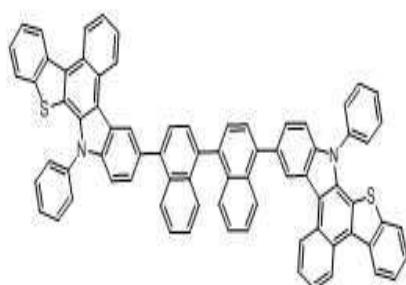
화합물 122



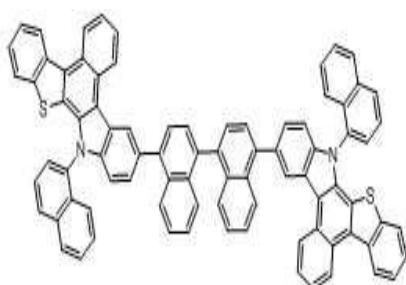
[0076] 화합물 123



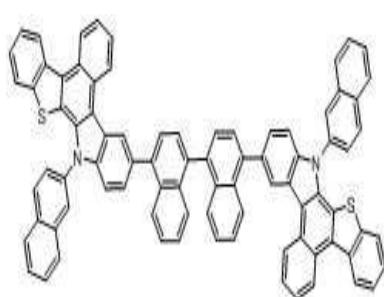
화합물 124



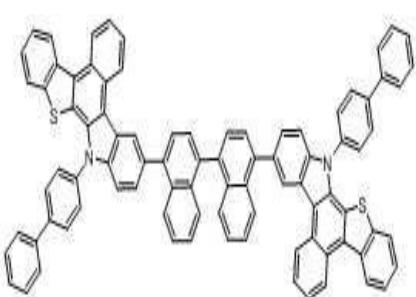
화합물 125



화합물 126

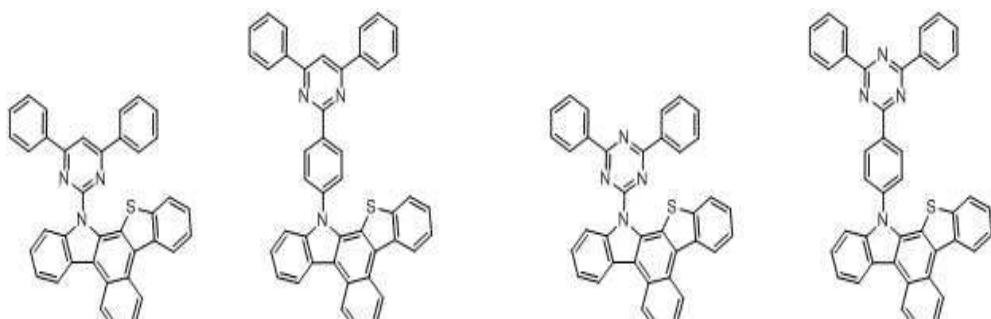


[0077]



화합물 128

화합물 127



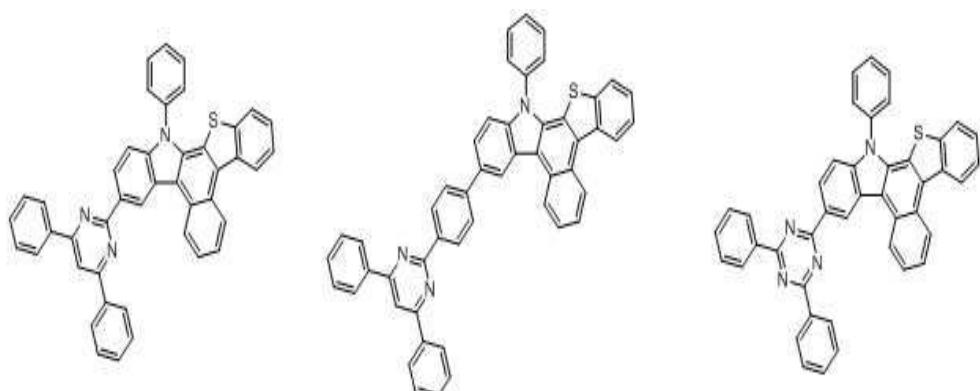
[0079]

화합물 129

화합물 130

화합물 131

화합물 132

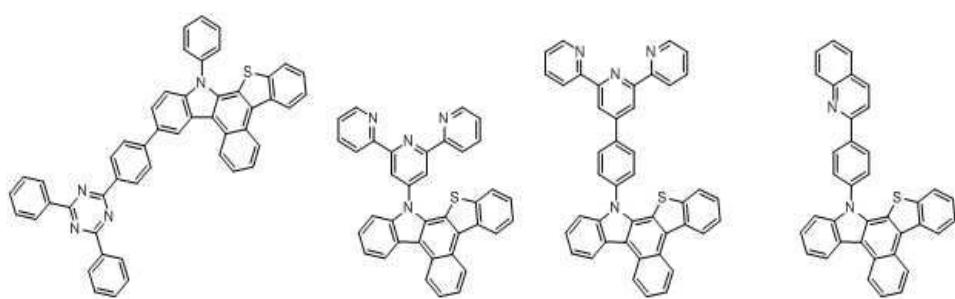


[0080]

화합물 133

화합물 134

화합물 135



[0081]

화합물 136

화합물 137

화합물 138

화합물 139

[0082]

화학식 1 내지 6을 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물들이 유기물층으로 사용되는 다양한 유기전기소자들이 존재한다. 화학식 1 내지 6을 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물들이 사용될 수 있는 유기전기소자는 예를 들어, 유기전계발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC) 드럼, 유기트랜지스터(유기 TFT), 포토다이오드(photodiode), 유기레이저(organic laser), 레이저다이오드(laser diode) 등이 있다.

[0083]

화학식 1 내지 6을 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물들이 적용될 수 있는 유기전기소자 중 일예로 유기전계발광소자(OLED)에 대하여 아래 설명하나, 본 발명은 이에 제한되지 않고 다양한 유기전기소자에 위에서 설명한 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물이 적용될 수 있다.

[0084]

본 발명의 다른 실시예는 제1 전극, 제2 전극 및 이를 전극 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 유기전기소자에 있어서, 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1 내지 6의 화합물들을 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.

[0085]

도 1 내지 도 6은 본 발명의 화합물을 적용할 수 있는 유기전계발광소자의 예를 도시한 것이다.

- [0086] 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자는, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함하는 유기물층 중 1층 이상을 상기 화학식 1 내지 6의 화합물을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 통상의 제조 방법 및 재료를 이용하여 당 기술 분야에 알려져 있는 구조로 제조될 수 있다.
- [0087] 본 발명에 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자의 구조는 도 1 내지 6에 예시되어 있으나, 이들 구조에만 한정된 것은 아니다. 이때, 도면번호 101은 기판, 102는 양극, 103는 정공주입층(HIL), 104는 정공수송층(HTL), 105는 발광층(EML), 106은 전자주입층(EIL), 107은 전자수송층(ETL), 108은 음극을 나타낸다. 미도시하였지만, 이러한 유기전계발광소자는 정공의 이동을 저지하는 정공저지층(HBL), 전자의 이동을 저지하는 전자저지층(EBL) 및 보호층이 더 위치할 수도 있다. 보호층의 경우 최상위층에서 유기물층을 보호하거나 음극을 보호하도록 형성될 수 있다.
- [0088] 이때, 화학식 1 내지 12를 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층을 포함하는 유기물층 중 하나 이상에 포함될 수 있다. 구체적으로, 화학식 1 내지 12를 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층, 정공저지층, 전자저지층, 보호층 중 하나 이상을 대신하여 사용되거나 이들과 함께 층을 형성하여 사용될 수도 있다. 물론 유기물층 중 한층에만 사용되는 것이 아니라 두층 이상에 사용될 수 있다.
- [0089] 화학식 1 내지 6을 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물은 유기전기소자 및 단말에서 다양한 역할을 할 수 있으며, 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 모든 칼라의 형광과 인광소자에 적합한 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료 및/또는 전자수송 재료로 유용하며, 다양한 색의 인광 도판트의 호스트 물질로 사용될 수 있다.
- [0090] 예컨대, 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다.
- [0091] 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기전기소자를 만들 수도 있다. 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등을 포함하는 단층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닉터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.
- [0092] 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자는 위에서 설명한 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물을 용액 공정(soluble process)에 의해 유기물층, 예를 들어 발광층을 형성할 수도 있다.
- [0093] 기판은 유기전계발광소자의 지지체이며, 실리콘 웨이퍼, 석영 또는 유리판, 금속판, 플라스틱 필름이나 시트 등이 사용될 수 있다.
- [0094] 기판 위에는 양극이 위치된다. 이러한 양극은 그 위에 위치되는 정공주입층으로 정공을 주입한다. 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 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:A1 또는 SnO<sub>2</sub>:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리페롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0095] 양극 위에는 정공주입층이 위치된다. 이러한 정공주입층의 물질로 요구되는 조건은 양극으로부터의 정공주입 효율이 높으며, 주입된 정공을 효율적으로 수송할 수 있어야 한다. 이를 위해서는 이온화 포텐셜이 작고 가시광선에 대한 투명성이 높으며, 정공에 대한 안정성이 우수해야 한다.
- [0096] 정공주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입받을 수 있는 물질로서, 정공주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylen) 계열의 유기물, 안

트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0097] 상기 정공주입층 위에는 정공수송층이 위치된다. 이러한 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 전달받아 그 위에 위치되는 유기발광층으로 수송하는 역할을 하며, 높은 정공 이동도와 정공에 대한 안정성 및 전자를 막아 주는 역할을 한다. 이러한 일반적 요구 이외에 차체 표시용으로 응용할 경우 소자에 대한 내열성이 요구되며, 유리 전이 온도( $T_g$ )가 70 °C 이상의 값을 갖는 재료가 바람직하다. 이와 같은 조건을 만족하는 물질들로는 NPD(혹은 NPB라 함), 스피로-아릴아민계화합물, 페릴렌-아릴아민계화합물, 아자시클로헵타트리엔화합물, 비스(디페닐비닐페닐)안트라센, 실리콘계르마늄옥사이드화합물, 실리콘계아릴아민화합물 등이 될 수 있다.

[0098] 정공수송층 위에는 유기발광층이 위치된다. 이러한 유기발광층은 양극과 음극으로부터 각각 주입된 정공과 전자가 재결합하여 발광을 하는 층이며, 양자효율이 높은 물질로 이루어져 있다. 발광 물질로는 정공수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자효율이 좋은 물질이 바람직하다.

[0099] 이와 같은 조건을 만족하는 물질 또는 화합물로는 녹색의 경우 Alq<sub>3</sub>가, 청색의 경우 Balq(8-hydroxyquinoline beryllium salt), DPVBi(4,4'-bis(2,2-diphenylethenyl)-1,1'-biphenyl) 계열, 스피로(Spiro) 물질, 스피로-DPVBi(Spiro-4,4'-bis(2,2-diphenylethenyl)-1,1'-biphenyl), LiPBO(2-(2-benzoxazoyl)-phenol lithium salt), 비스(디페닐비닐페닐비닐)벤젠, 알루미늄-퀴놀린 금속착체, 이미다졸, 티아졸 및 옥사졸의 금속착체 등이 있으며, 청색 발광 효율을 높이기 위해 페릴렌, 및 BczVBi(3,3'[(1,1'-biphenyl)-4,4'-diyldi-2,1-ethenediyil]bis(9-ethyl)-9H-carbazole; DSA(distrylamine)류)를 소량 도핑하여 사용할 수 있다. 적색의 경우는 녹색 발광 물질에 DCJTB([2-(1,1-dimethylethyl)-6-[2-(2,3,6,7-tetrahydro-1,1,7,7-tetramethyl-1H,5H-benzo(ij)quinolizin-9-yl)ethenyl]-4H-pyran-4-ylidene]-propanedinitrile)와 같은 물질을 소량 도핑하여 사용할 수 있다. 잉크젯프린팅, 롤코팅, 스판코팅 등의 공정을 사용하여 발광층을 형성할 경우에, 폴리페닐렌비닐렌(PPV) 계통의 고분자나 폴리 플로렌(poly 플루오レン(fluorene)) 등의 고분자를 유기발광층에 사용할 수 있다.

[0100] 유기발광층 위에는 전자수송층이 위치된다. 이러한 전자수송층은 그 위에 위치되는 음극으로부터 전자주입 효율이 높고 주입된 전자를 효율적으로 수송할 수 있는 물질이 필요하다. 이를 위해서는 전자 친화력과 전자 이동속도가 크고 전자에 대한 안정성이 우수한 물질로 이루어져야 한다. 이와 같은 조건을 충족시키는 전자수송 물질로는 구체적인 예로 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq<sub>3</sub>를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0101] 전자수송층 위에는 전자주입층이 적층된다. 전자주입층은 Balq, Alq<sub>3</sub>, Be(bq)<sub>2</sub>, Zn(BTZ)<sub>2</sub>, Zn(phq)<sub>2</sub>, PBD, spiro-PBD, TPBI, Tf-6P 등과 같은 금속착체 화합물, imidazole ring을 갖는 aromatic화합물이나 boron화합물 등을 포함하는 저분자 물질을 이용하여 제작할 수 있다. 이때, 전자주입층은 100Å ~ 300Å의 두께 범위에서 형성될 수 있다.

[0102] 전자주입층 위에는 음극이 위치된다. 이러한 음극은 전자를 주입하는 역할을 한다. 음극으로 사용하는 재료는 양극에 사용된 재료를 이용하는 것이 가능하며, 효율적인 전자주입을 위해서는 일 함수가 낮은 금속이 보다 바람직하다. 특히 주석, 마그네슘, 인듐, 칼슘, 나트륨, 리튬, 알루미늄, 은 등의 적당한 금속, 또는 그들의 적절한 합금이 사용될 수 있다. 또한 100 μm 이하 두께의 리튬플루오라이드와 알루미늄, 산화리튬과 알루미늄, 스트론튬산화물과 알루미늄 등의 2 층 구조의 전극도 사용될 수 있다.

[0103] 전술하였듯이, 화학식 1 내지 12를 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물에 따라서 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 모든 칼라의 형광과 인광소자에 적합한 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료, 전자수송 재료 및 전자주입 재료로 사용할 수 있으며, 다양한 색의 인광 도판트의 호스트 물질로 사용될 수 있다.

[0104] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0105] 한편 본 발명은, 위에서 설명한 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 이 디스플레이장치를 구동하는 제어부를 포함하는 단말을 포함한다. 이 단말은 현재 또는 장래의 유무선 통신단말을 의미한다. 이상에서 전술한 본 발명에 따른 단말은 휴대폰 등의 이동 통신 단말기일 수 있으며, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 단말을 포함한다.

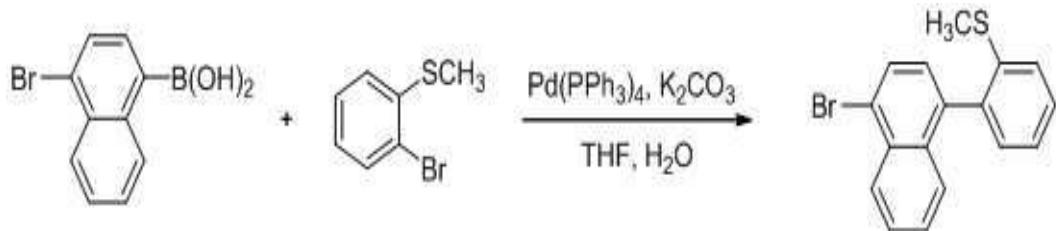
[0106] 실시예

[0107] 이하, 제조예 및 실험예를 통하여 본 발명을 보다 상세하게 설명한다. 그러나, 이하의 제조예 및 실험예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0108] 제조예

[0109] 이하, 화학식 6에 속하는 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물들에 대한 제조예 또는 합성예를 설명한다. 다만, 화학식 6에 속하는 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물들의 수가 많기 때문에 화학식 6에 속하는 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물들 중 하나 또는 둘을 예시적으로 설명한다. 본 발명이 속하는 기술분야의 통상의 지식을 가진 자, 즉 당업자라면 아래에서 설명한 제조예들을 통해, 예시하지 않은 본 발명에 속하는 2개 이상의 오원자 혼테로 고리를 포함하는 화합물을 제조할 수 있다.

[0110] 단계 1) 중간체 A의 합성

**반응식 1**

[0111]

[0112]

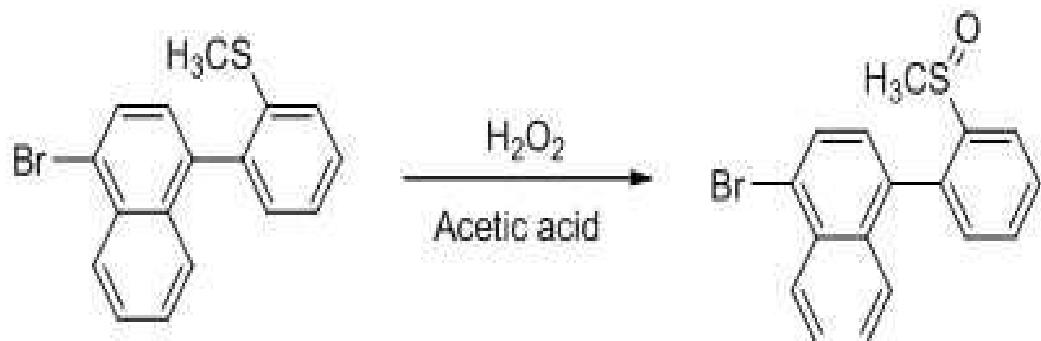
4-bromonaphthalen-1-ylboronic acid와 (2-bromophenyl)(methyl)sulfane와

[0113]

tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)와 탄산칼륨(potassium carbonate)를 넣고 THF(tetrahydrofuran)과 물(3:1)을 넣고 70 °C에서 교반한다. 반응이 종결되면 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 추출하고 물로 닦아주고 소량의 물을 무수 MgSO<sub>4</sub>로 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>와 헥산 용매를 사용하여 재결정화하여 원하는 중간체 A를 얻었다 (수율: 70%).

[0114]

단계 2) 중간체 B의 합성

**반응식 2**

[0115]

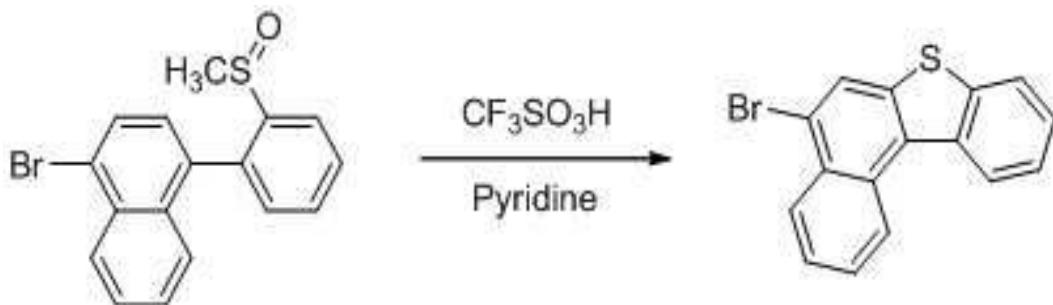
[0116]

단계 1)에서 얻은 중간체 A를 아세트산(acetic acid)에 녹이고 과산화수소(hydrogen peroxide)를 아세트산(acetic acid)에 용해시킨 것을 한방울씩 떨어뜨리며(dropwise) 상온에서 6시간 교반한다. 반응이 종결되면 감압 장치를 이용하여 아세트산(acetic acid)를 제거하고 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 B를 얻었다(수율: 92%).

[0117]

단계 3) 중간체 C의 합성

## 반응식 3



[0118]

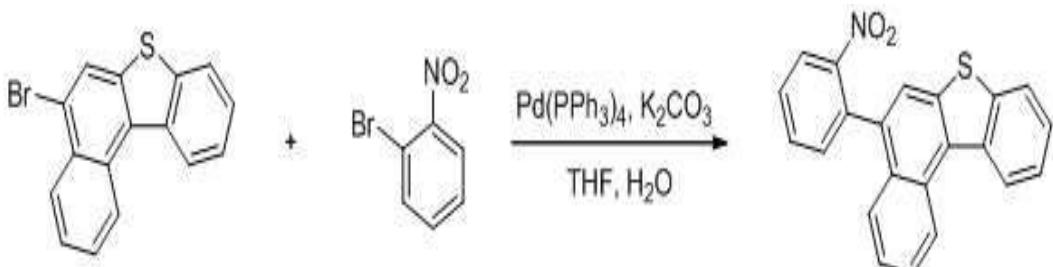
[0119]

단계 2)에서 얻은 중간체 B와 트리플루오로메탄술폰산(trifluoromethanesulfonic acid)를 넣고 상온에서 24시간 교반한 다음 물과 피리딘(8:1)(pyridine(8:1))을 천천히 넣고 30분 환류한다. 온도를 내리고 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 추출하고 물로 닦아준다. 소량의 물을 무수 MgSO<sub>4</sub>로 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 C를 얻었다 (수율: 80%).

[0120]

단계 4) 중간체 D의 합성

## 반응식 4



[0121]

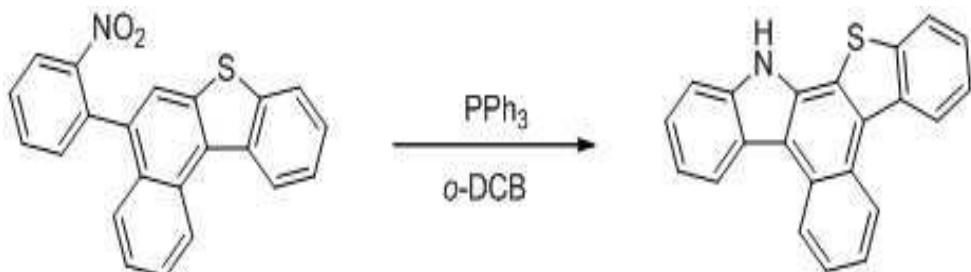
[0122]

단계 3)에서 얻은 중간체 C와 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>를 무수 THF와 소량의 물에 녹이고 난 후, 24시간동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 추출하고 물로 닦아주었다. 소량의 물을 무수 MgSO<sub>4</sub>로 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 D를 얻었다(수율: 70%).

[0123]

단계 5) 중간체 E의 합성

## 반응식 5



[0124]

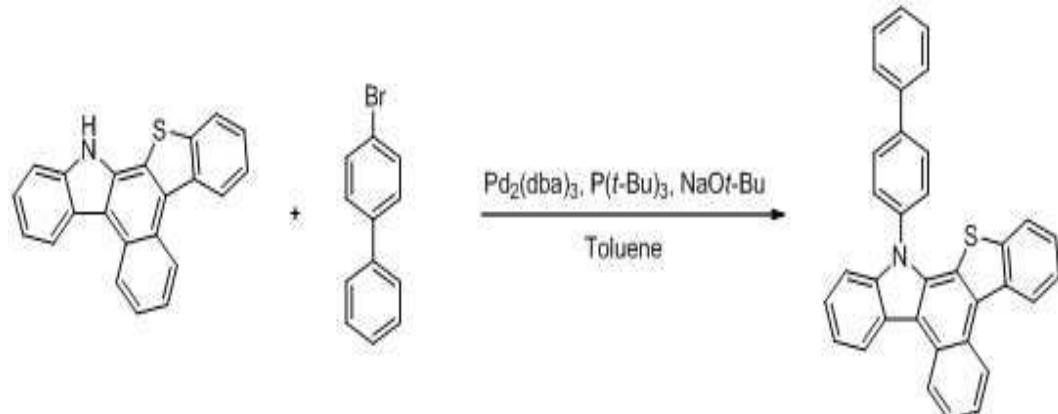
[0125]

단계 4)에서 얻은 중간체 D와 트리페닐포스핀(triphenylphosphine)을 *o*-디클로로벤젠(dichlorobenzene)에 녹이고, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 감압 증류를 이용하여 용매를 제거한 후, 농축된 생성물을 컬럼 그로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 E를 얻었다 (수율: 61%).

[0126]

합성예1: 화합물 4의 합성

**반응식 6**



[0127]

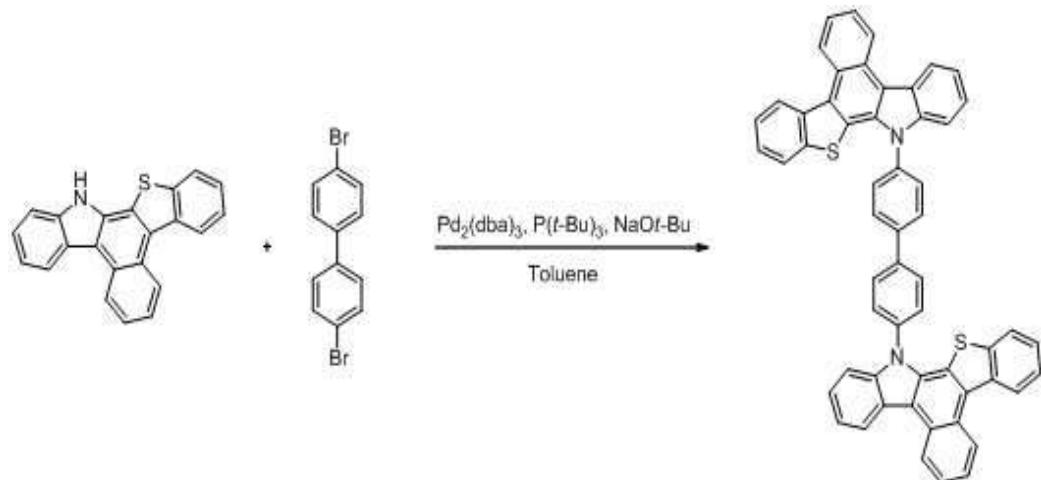
[0128]

단계 5)에서 합성한 중간체 E와 브로모바이페닐(bromobiphenyl),  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ ,  $\text{P}(^t\text{Bu})_3$  그리고  $\text{NaO}^t\text{Bu}$ 를 틀루엔(toluene) 용매에 녹인 후, 110 °C에서 6시간동안 교반시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식힌 다음  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 로 추출하고 물로 닦아주었다. 무수  $\text{MgSO}_4$ 로 소량의 물을 제거하고 감압여과 후, 유기 용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 원하는 화합물 4를 얻어내었다 (수율: 65%).

[0129]

합성예 2: 화합물 56의 합성

**반응식 7**



[0130]

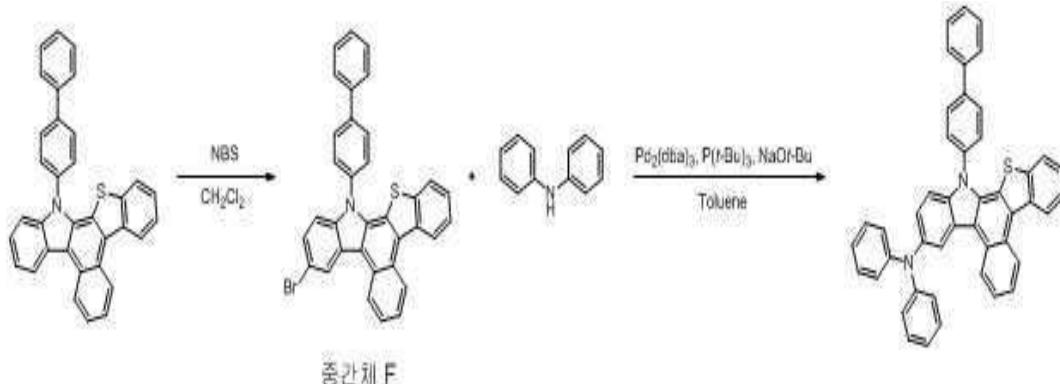
[0131]

단계 5)에서 합성한 중간체 E와 4,4'-디브로모바이페닐(4,4'-dibromobiphenyl),  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ ,  $\text{P}(^t\text{Bu})_3$  그리고  $\text{NaO}^t\text{Bu}$ 를 틀루엔 용매에 녹인 후, 110 °C에서 6시간동안 교반시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식힌 다음  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 로 추출하고 물로 닦아주었다. 무수  $\text{MgSO}_4$ 로 소량의 물을 제거하고 감압여과 후, 유기 용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 원하는 화합물 56를 얻어내었다 (수율: 52%).

[0132]

## 합성예 3: 화합물 94의 합성

## 반응식 8



[0133]

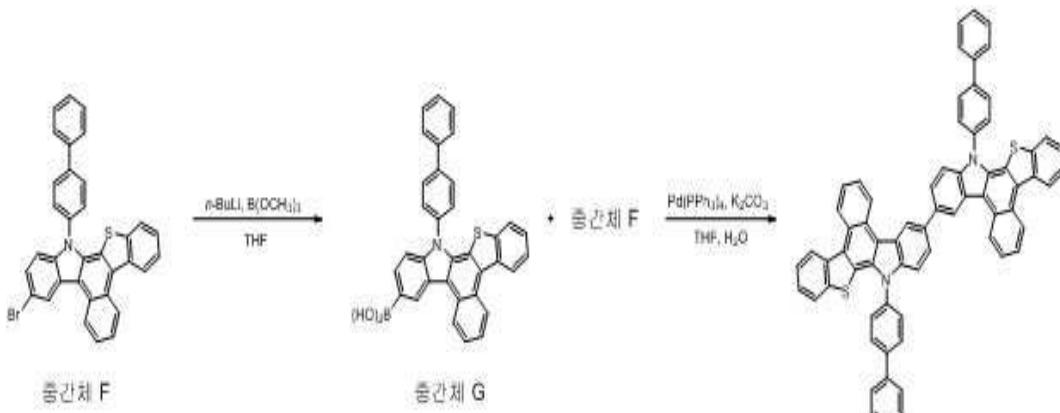
[0134]

합성예1에서 얻은 화합물 4와 NBS(N-bromosuccinimide)를  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 에 녹이고, 상온에서 3시간 동안 교반시켰다. 반응이 종결되면 중탄산나트륨(sodium bicarbonate) 수용액을 넣고, 30분간(확인 요망, 직발서에는 "0"분으로 되어 있음) 교반시킨 후,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 로 추출하였다. 무수  $\text{MgSO}_4$ 로 반응물 내의 물을 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 F를 얻었다 (수율: 75%). 이후, 중간체 F와 디페닐아민(diphenylamine),  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ ,  $\text{P}(\text{t-Bu})_3$  그리고  $\text{NaO}^+\text{Bu}$ 를 톨루엔 용매에 녹인 후, 110 °C에서 6시간동안 교반시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식힌 다음  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 로 추출하고 물로 닦아주었다. 무수  $\text{MgSO}_4$ 로 소량의 물을 제거하고 감압여과 후, 유기 용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 원하는 화합물 94를 얻어내었다 (수율: 69%).

[0135]

## 합성예 4: 화합물 107의 합성

## 반응식 9



[0136]

[0137]

합성예3에서 중간체 F를 무수 THF에 녹이고, 반응물의 온도를 8 °C로 낮추고, n-BuLi (2.5 M in hexane)을 천천히 적가하고 난 후, 반응물을 0 °C에서 1시간동안 교반시켰다. 이후, 반응물의 온도를 78 °C로 낮추고, trimethyl borate를 적가하고 난 후, 상온에서 12시간동안 교반시켰다. 반응이 종결되면 2N-HCl 수용액을 넣고, 30분간 교반시킨 후, ether로 추출하였다. 무수  $\text{MgSO}_4$ 로 반응물 내의 물을 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 G를 얻었다 (수율: 68%).

[0138]

이후, 중간체 F와 디페닐아민(diphenylamine),  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ ,  $\text{P}(\text{t-Bu})_3$  그리고  $\text{NaO}^+\text{Bu}$ 를 톨루엔 용매에 녹인 후, 110 °C에서 6시간동안 교반시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식힌 다음  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 로 추출하고 물로 닦

아주었다. 무수  $MgSO_4$ 로 소량의 물을 제거하고 감압여과 후, 유기 용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 원하는 화합물 107를 얻어내었다 (수율: 38%).

#### [0139] 유기 전계 소자의 제조 평가

[0140] 합성을 통해 얻은 화합물 4, 56, 94, 107 각각을 발광층의 발광 호스트 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전계 발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 우선 훌 주입층으로서 구리프탈로사이아닌(이하 CuPc로 약기함)막을 진공증착하여 10 nm 두께로 형성하였다.

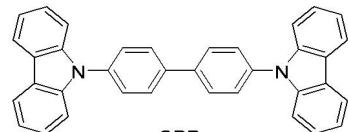
[0141] 이어서, 이 막 상에 전공수송 화합물로서 4,4-비스[*N*-(1-나프틸)-*N*-페닐아미노]비페닐(이하 a-NPD로 약기함)을 30 nm의 두께로 진공증착하여 훌 수송층을 형성하였다. 훌 수송층을 형성한 후, 이 훌 수송층 상부에 화합물 4, 56, 94 또는 107 각각을 인광 호스트 재료로서 증착하여 발광층을 성막하였다.

[0142] 동시에 인광 발광성의 Ir 금속 칙체 도편트로서 트리스(2-페닐파리딘)이리듐 (이하 Ir(ppy)<sub>3</sub>로 약기함)을 첨가하였다. 이때 발광층 중에 있어서의 Ir(ppy)<sub>3</sub>의 농도는 5중량%로 하였다. 훌 저지층으로 (1,1'-비스페닐)-4-올레이토)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이토)알루미늄 (이하 BA1q로 약기함)을 10 nm의 두께로 진공증착하고, 이어서 전자주입층으로 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄 (이하 Alq<sub>3</sub>로 약칭함)을 40 nm의 두께로 성막하였다. 이 후, 할로젠헤 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm의 두께로 증착하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 이 Al/LiF를 음극으로 사용함으로서 유기전계 발광소자를 제조하였다.

#### [0143] 비교실험예1

[0144] 비교를 위해, 본 발명의 화합물 대신에 화학식 7로 표시되는 화합물(이하 CBP로 약기함)을 발광 호스트 물질로 사용하여 시험예와 동일한 구조의 유기전계발광소자를 제작하였다.

#### 화학식 7



[0145]

**표 1**

|       | 발광층의<br>호스트 재료 | 전압<br>( V ) | 전류밀도<br>( mA/cm <sup>2</sup> ) | 회도<br>( cd/m <sup>2</sup> ) | 발광효율<br>( cd/A ) | 색도좌표<br>( x, y ) |
|-------|----------------|-------------|--------------------------------|-----------------------------|------------------|------------------|
| 실시예 1 | 화합물 4          | 5.8         | 0.31                           | 107                         | 48.3             | (0.30, 0.60)     |
| 실시예 2 | 화합물 56         | 5.9         | 0.33                           | 105                         | 45.2             | (0.32, 0.61)     |
| 실시예 3 | 화합물 94         | 5.8         | 0.31                           | 107                         | 48.3             | (0.30, 0.60)     |
| 실시예 4 | 화합물 107        | 5.8         | 0.31                           | 107                         | 48.3             | (0.30, 0.60)     |
| 비교예 1 | CBP            | 6.1         | 0.31                           | 101                         | 32.6             | (0.33, 0.61)     |

[0147] 표 1의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 유기전계발광소자용 재료를 이용한 유기전계발광소자는 발광효율이 비교예로 사용된 CBP에 비해 월등히 우수할 뿐만 아니라 색순도가 현저히 개선된 녹색 발광이 얻어지므로 유기전계발광 소자의 인광 호스트 물질로 사용되어 발광효율 및 색순도를 현저히 개선시킬 수 있다.

[0148] 본 발명의 화합물들을 유기전계발광소자의 다른 유기물층들, 예를 들어 발광층의 호스트 재료 뿐만 아니라, 전

자주입층, 전자수송층, 정공주입층 및 정공수송층에 사용되더라도 동일한 효과를 얻을 수 있는 것은 자명하다.

[0149] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본 명세서에 개시된 실시예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다.

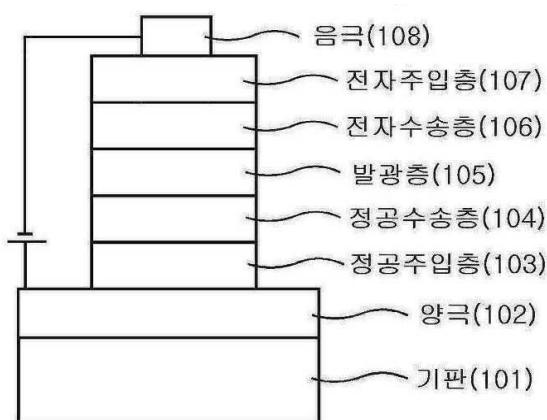
[0150] 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함되는 것으로 해석되어야 할 것이다.

### 도면의 간단한 설명

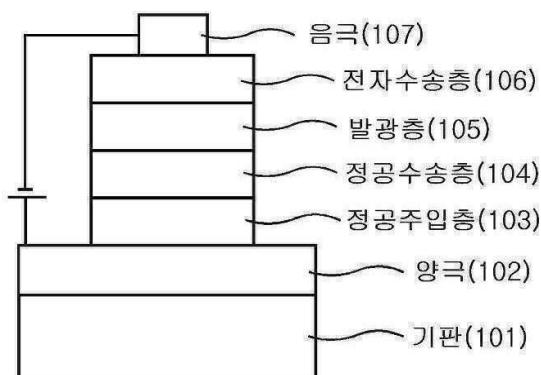
도 1 내지 도 6은 본 발명의 화합물을 적용할 수 있는 유기전계발광소자의 예를 도시한 것이다.

### 도면

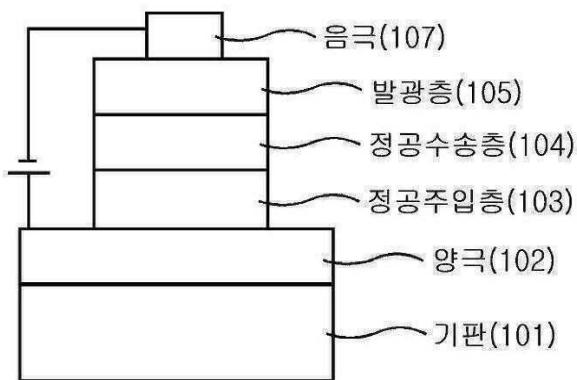
#### 도면1



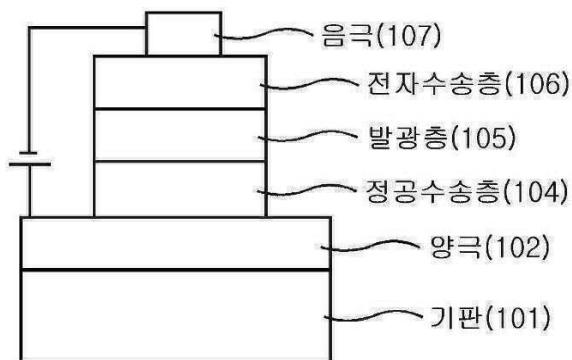
#### 도면2



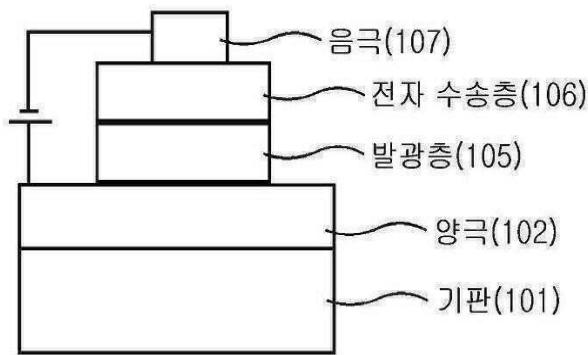
도면3



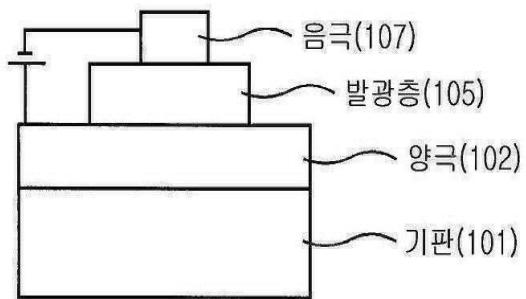
도면4



도면5



도면6



|                |  |         |            |
|----------------|--|---------|------------|
| 专利名称(译)        | 含有杂原子杂环的化合物和使用它的有机电子器件   |         |            |
| 公开(公告)号        | <a href="#">KR1020110066766A</a>   | 公开(公告)日 | 2011-06-17 |
| 申请号            | KR1020090123544  | 申请日     | 2009-12-11 |
| [标]申请(专利权)人(译) | 三星显示有限公司   |         |            |
| 申请(专利权)人(译)    | 德山高新金属制品有限公司<br>三星显示器有限公司  |         |            |
| 当前申请(专利权)人(译)  | 德山高新金属制品有限公司<br>三星显示器有限公司  |         |            |
| [标]发明人         | KIM DAE SUNG<br>김대성<br>PARK JUNG HWAN<br>박정환<br>PARK YONG WOOK<br>박용욱<br>KIM KI WON<br>김기원<br>JUNG HWA SOON<br>정화순<br>BYUN JI HUN<br>변지훈<br>CHOI DAE HYUK<br>최대혁<br>KIM DONG HA<br>김동하 |         |            |
| 发明人            | 김대성<br>박정환<br>박용욱<br>김기원<br>정화순<br>변지훈<br>최대혁<br>김동하   |         |            |
| IPC分类号         | C09K11/06 H01L51/50  |         |            |
| CPC分类号         | C07C309/36 H01L51/0059 H01L51/0062 H01L51/5024   |         |            |
| 代理人(译)         | KIM , EUN GU   |         |            |
| 其他公开文献         | KR101219492B1  |         |            |
| 外部链接           | <a href="#">Espacenet</a>  |         |            |

## 摘要(译)

本发明提供含有杂芳族杂环的化合物和使用其的有机电子器件及其末端。

