



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2014-0087647
(43) 공개일자 2014년07월09일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
(21) 출원번호 10-2012-0158170
(22) 출원일자 2012년12월31일
심사청구일자 2014년01월27일

(71) 출원인
제일모직주식회사
경상북도 구미시 구미대로 58 (공단동)
(72) 발명자
김현정
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)
신창주
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
팬코리아특허법인

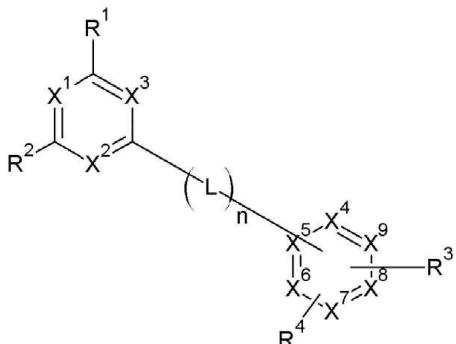
전체 청구항 수 : 총 18 항

(54) 발명의 명칭 유기광전자소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치

(57) 요약

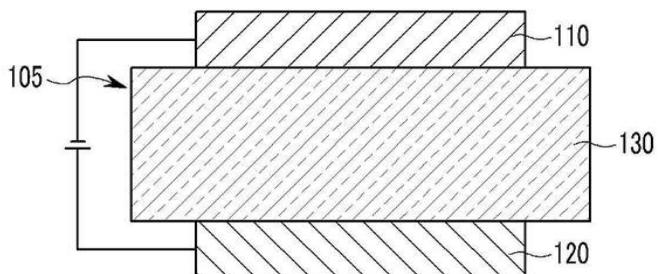
유기광전자소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것으로, 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공하여, 우수한 전기화학적 및 열적 안정성으로 수명 특성이 우수하고, 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가지는 유기발광소자를 제조할 수 있다.

[화학식 1]



대표도 - 도1

100



(72) 발명자
정수영
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)
강동민
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)
강의수
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)
원종우
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)
이남현
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

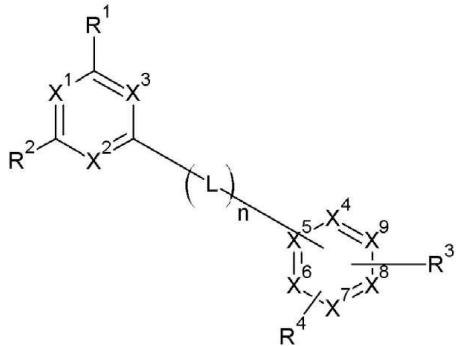
이현규
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)
정우석
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)
정호국
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)
채미영
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기광전자소자용 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X^1 내지 X^9 는 서로 독립적으로, CR' 또는 N이며, 상기 X^1 내지 X^3 중 적어도 어느 두 개는 N이며, 상기 X^4 내지 X^9 중 적어도 어느 하나는 N이고,

R^1 내지 R^4 및 R' 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이고,

R^3 및 R^4 는 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고,

L은 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

n은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 L은 하나 또는 두 개의 질소를 포함하는, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

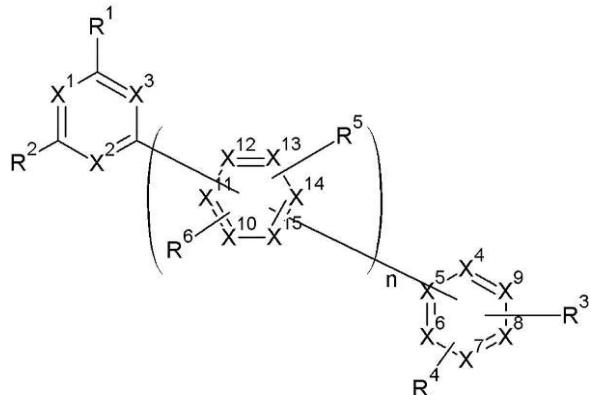
상기 R^1 및 R^2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 2로 표시되는 것인 유기광전자소자용 화합물:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X^1 내지 X^{15} 는 서로 독립적으로, CR' 또는 N이며, 상기 X^1 내지 X^3 중 적어도 어느 두 개는 N이며, 상기 X^4 내지 X^9 중 적어도 어느 하나는 N이며, 상기 X^{10} 내지 X^{15} 중 적어도 어느 하나는 N이고,

R^1 내지 R^6 및 R' 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이고,

R^3 및 R^4 는 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고,

R^5 및 R^6 은 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고,

n은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이다.

청구항 5

제4항에 있어서,

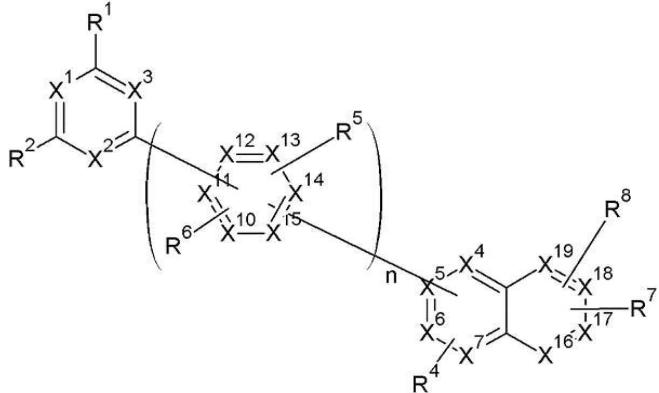
상기 X^{10} 내지 X^{15} 중 어느 하나는 N인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 3으로 표시되는 것인 유기광전자소자용 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

X^1 내지 X^7 , X^{10} 내지 X^{15} 및 X^{16} 내지 X^{19} 는 서로 독립적으로, CR' 또는 N 이며, 상기 X^1 내지 X^3 중 적어도 어느 두 개는 N 이며, 상기 X^4 내지 X^7 및 X^{16} 내지 X^{19} 중 적어도 어느 하나는 N 이며, 상기 X^{10} 내지 X^{15} 중 적어도 어느 하나는 N 이고,

R^1 , R^4 내지 R^8 및 R' 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이고,

R^7 및 R^8 는 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고,

R^5 및 R^6 은 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고,

n은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이다.

청구항 7

제6항에 있어서,

상기 X^4 내지 X^7 중 적어도 어느 하나는 N 이고, 상기 X^{16} 내지 X^{19} 은 CR' 인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 8

제6항에 있어서,

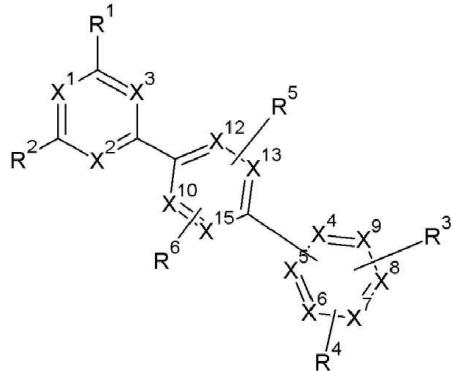
상기 X^4 내지 X^7 는 CR' 이고, 상기 X^{16} 내지 X^{19} 중 적어도 어느 하나는 N인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 4로 표시되는 것인 유기광전자소자용 화합물:

[화학식 4]



상기 화학식 4에서,

X^1 내지 X^9 , X^{10} , X^{12} , X^{13} 및 X^{15} 는 서로 독립적으로, CR' 또는 N이며, 상기 X^1 내지 X^3 중 적어도 어느 두 개는 N이며, 상기 X^4 내지 X^9 중 적어도 어느 하나는 N이며, 상기 X^{10} , X^{12} , X^{13} 및 X^{15} 중 적어도 어느 하나는 N이고,

R^1 내지 R^6 및 R' 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 슬파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티울기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이고,

R^3 및 R^4 는 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고,

R^5 및 R^6 은 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있다.

청구항 10

제9항에 있어서,

상기 R^1 및 R^2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 11

제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 3중항 여기에너지(T1) 2.0eV 이상인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 12

제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자는, 유기발광소자, 유기발광소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드립 및 유기메모리소자로 이루어진 군에서 선택되는 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 13

양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서,

상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 제1항에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자.

청구항 14

제13항에 있어서,

상기 유기박막층은 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 것인 유기발광소자.

청구항 15

제14항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 전자수송층, 전자주입층 또는 정공차단층 내에 포함되는 것인 유기발광소자.

청구항 16

제14항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 발광층 내에 포함되는 것인 유기발광소자.

청구항 17

제14항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 발광층 내에 인광 또는 형광 호스트 재료로서 사용되는 것인 유기발광소자.

청구항 18

제13항의 유기발광소자를 포함하는 표시장치.

명세서

기술분야

[0001] 수명, 효율, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성이 우수한 유기광전자소자를 제공할 수 있는 유기광전자소자용

화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것이다.

배경 기술

- [0002] 유기광전자소자(organic optoelectric device)라 함은 정공 또는 전자를 이용한 전극과 유기물 사이에서의 전하교류를 필요로 하는 소자를 의미한다.
- [0003] 유기광전자소자는 동작 원리에 따라 하기와 같이 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 첫째는 외부의 광원으로부터 소자로 유입된 광자에 의하여 유기물층에서 엑시톤(exciton)이 형성되고 이 엑시톤이 전자와 정공으로 분리되고, 이 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되어 전류원(전압원)으로 사용되는 형태의 전자소자이다.
- [0004] 둘째는 2 개 이상의 전극에 전압 또는 전류를 가하여 전극과 계면을 이루는 유기물 반도체에 정공 또는 전자를 주입하고, 주입된 전자와 정공에 의하여 동작하는 형태의 전자소자이다.
- [0005] 유기광전자소자의 예로는 유기광전소자, 유기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체 드럼(organic photo conductor drum), 유기트랜지스터 등이 있으며, 이들은 모두 소자의 구동을 위하여 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질을 필요로 한다.
- [0006] 특히, 유기발광소자(organic light emitting diode, OLED)는 최근 평판 디스플레이(flat panel display)의 수요가 증가함에 따라 주목받고 있다. 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다.
- [0007] 이러한 유기발광소자는 유기발광재료에 전류를 가하여 전기에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서 통상 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 기능성 유기물 층이 삽입된 구조로 이루어져 있다. 여기서 유기물층은 유기발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.
- [0008] 이러한 유기발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공(hole)이, 음극에서는 전자(electron)가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만나 재결합(recombination)에 의해 에너지가 높은 여기자를 형성하게 된다. 이때 형성된 여기자가 다시 바닥상태(ground state)로 이동하면서 특정한 파장을 갖는 빛이 발생하게 된다.
- [0009] 최근에는, 형광 발광물질뿐 아니라 인광 발광물질도 유기발광소자의 발광물질로 사용될 수 있음이 알려졌으며, 이러한 인광 발광은 바닥상태(ground state)에서 여기상태(excited state)로 전자가 전이한 후, 계간 전이(intersystem crossing)를 통해 단일향 여기자가 삼중향 여기자로 비발광 전이된 다음, 삼중향 여기자가 바닥상태로 전이하면서 발광하는 메카니즘으로 이루어진다.
- [0010] 상기한 바와 같이 유기발광소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.
- [0011] 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.
- [0012] 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 문자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율과 안정성을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.
- [0013] 유기발광소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질, 발광 재료 중 호스트 및/또는 도판트 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하며, 아직까지 안정하고 효율적인 유기발광소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다. 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기광전자소자에서도 마찬가지이다.
- [0014] 또한, 저분자 유기발광소자는 진공 증착법에 의해 박막의 형태로 소자를 제조하므로 효율 및 수명성능이 좋으며, 고분자 유기 발광 소자는 잉크젯(Inkjet) 또는 스핀코팅(spin coating)법을 사용하여 초기 투자비가 적고 대면적화가 유리한 장점이 있다.
- [0015] 저분자 유기발광소자 및 고분자 유기발광소자는 모두 자체발광, 고속응답, 광시야각, 초박형, 고화질, 내구성,

넓은 구동온도범위 등의 장점을 가지고 있어 차세대 디스플레이로 주목을 받고 있다. 특히 기존의 LCD(liquid crystal display)와 비교하여 자체발광형으로서 어두운 곳이나 외부의 빛이 들어와도 시안성이 좋으며, 백라이트가 필요 없어 LCD의 1/3수준으로 두께 및 무게를 줄일 수 있다.

[0016] 또한, 응답속도가 LCD에 비해 1000배 이상 빠른 마이크로 초 단위여서 잔상이 없는 완벽한 동영상을 구현할 수 있다. 따라서, 최근 본격적인 멀티미디어 시대에 맞춰 최적의 디스플레이로 각광받을 것으로 기대되며, 이러한 장점을 바탕으로 1980년대 후반 최초 개발 이후 효율 80배, 수명 100배 이상에 이르는 급격한 기술발전을 이루어 왔고, 최근에는 40인치 유기발광소자 패널이 발표되는 등 대형화가 급속히 진행되고 있다.

[0017] 대형화를 위해서는 발광 효율의 증대 및 소자의 수명 향상이 수반되어야 한다. 이때, 소자의 발광 효율은 발광층 내의 정공과 전자의 결합이 원활히 이루어져야 한다. 그러나, 일반적으로 유기물의 전자 이동도는 정공 이동도에 비해 느리므로, 발광층 내의 정공과 전자의 결합이 효율적으로 이루어지기 위해서는, 효율적인 전자 수송층을 사용하여 음극으로부터의 전자 주입 및 이동도를 높이는 동시에, 정공의 이동을 차단할 수 있어야 한다.

[0018] 또한, 수명 향상을 위해서는 소자의 구동시 발생하는 줄열(Joule heat)로 인해 재료가 결정화되는 것을 방지하여야 한다. 따라서, 전자의 주입 및 이동성이 우수하며, 전기화학적 안정성이 높은 유기 화합물을 대한 개발이 필요하다.

발명의 내용

해결하려는 과제

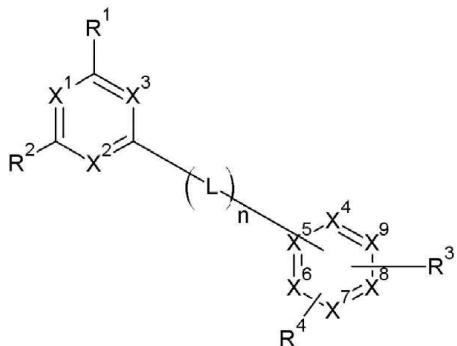
[0019] 정공 주입 및 수송 역할 또는 전자 주입 및 수송역할을 할 수 있고, 적절한 도편트와 함께 발광 호스트로서의 역할을 할 수 있는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[0020] 수명, 효율, 구동전압, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성이 우수한 유기발광소자 및 이를 포함하는 표시장치를 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0021] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[0022] [화학식 1]



[0023]

[0024] 상기 화학식 1에서, X¹ 내지 X⁹는 서로 독립적으로, CR' 또는 N이며, 상기 X¹ 내지 X³ 중 적어도 어느 두 개는 N이며, 상기 X⁴ 내지 X⁹ 중 적어도 어느 하나는 N이고, R¹ 내지 R⁴ 및 R'은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 헤드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지

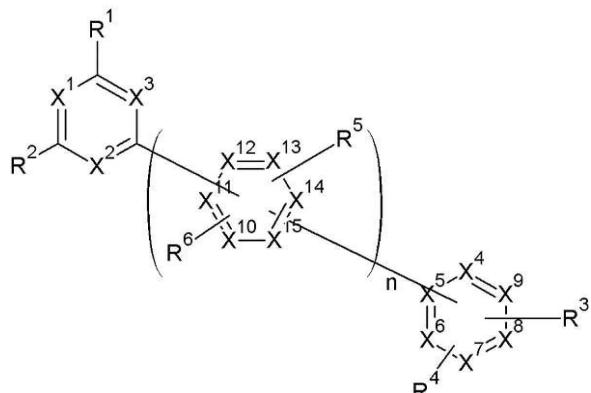
C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이고, R³ 및 R⁴는 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고, L은 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴렌기이고, n은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이다.

[0025] 상기 L은 하나 또는 두 개의 질소를 포함하는, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴렌기일 수 있다.

[0026] 상기 R¹ 및 R²는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기일 수 있다.

[0027] 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[0028] [화학식 2]



[0029]

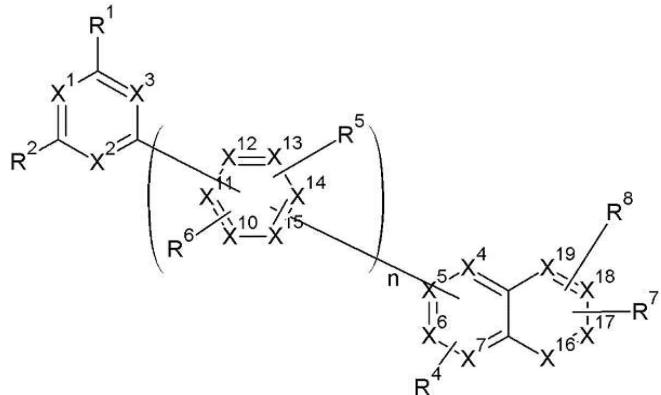
[0030] 상기 화학식 2에서, X¹ 내지 X¹⁵는 서로 독립적으로, CR' 또는 N이며, 상기 X¹ 내지 X³ 중 적어도 어느 두 개는 N이며, 상기 X⁴ 내지 X⁹ 중 적어도 어느 하나는 N이며, 상기 X¹⁰ 내지 X¹⁵ 중 적어도 어느 하나는 N이고, R¹ 내지 R⁶ 및 R'은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤�테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이고, R³ 및 R⁴는 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고, R⁵ 및 R⁶은 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고, n은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이다.

[0031] 상기 X¹⁰ 내지 X¹⁵ 중 어느 하나는 N일 수 있다.

[0032] 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 3으로 표시될 수 있다.

[0033]

[화학식 3]



[0034]

상기 화학식 3에서, X¹ 내지 X⁷, X¹⁰ 내지 X¹⁵ 및 X¹⁶ 내지 X¹⁹는 서로 독립적으로, CR' 또는 N이며, 상기 X¹ 내지 X³ 중 적어도 어느 두 개는 N이며, 상기 X⁴ 내지 X⁷ 및 X¹⁶ 내지 X¹⁹ 중 적어도 어느 하나는 N이며, 상기 X¹⁰ 내지 X¹⁵ 중 적어도 어느 하나는 N이고, R¹, R⁴ 내지 R⁸ 및 R'은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 헤드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이고, R⁷ 및 R⁸는 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고, R⁵ 및 R⁶은 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고, n은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이다.

[0036]

상기 X⁴ 내지 X⁷ 중 적어도 어느 하나는 N이고, 상기 X¹⁶ 내지 X¹⁹은 CR'일 수 있다.

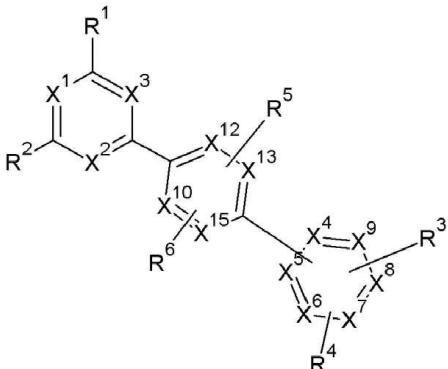
[0037]

상기 X⁴ 내지 X⁷는 CR'이고, 상기 X¹⁶ 내지 X¹⁹ 중 적어도 어느 하나는 N일 수 있다.

[0038]

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 4로 표시될 수 있다.

[0039]



[0040]

상기 화학식 4에서, X¹ 내지 X⁹, X¹⁰, X¹², X¹³ 및 X¹⁵는 서로 독립적으로, CR' 또는 N이며, 상기 X¹ 내지 X³ 중 적어도 어느 두 개는 N이며, 상기 X⁴ 내지 X⁹ 중 적어도 어느 하나는 N이며, 상기 X¹⁰, X¹², X¹³ 및 X¹⁵ 중 적어도 어느 하나는 N이고, R¹ 내지 R⁶ 및 R'은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 헤드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내

지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티울기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이고, R³ 및 R⁴는 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고, R⁵ 및 R⁶은 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있다.

[0042] 상기 R¹ 및 R²는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기일 수 있다.

[0043] 상기 유기광전자소자용 화합물은 3중향 여기에너지(T1) 2.0eV 이상일 수 있다.

[0044] 상기 유기광전자소자는, 유기광전소자, 유기발광소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 및 유기메모리소자로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0045] 본 발명의 다른 일 구현예에서는, 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기 박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자를 제공한다.

[0046] 상기 유기박막층은 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0047] 상기 유기광전자소자용 화합물은 전자수송층, 전자주입층 또는 정공차단층 내에 포함될 수 있다.

[0048] 상기 유기광전자소자용 화합물은 발광층 내에 포함될 수 있다.

[0049] 상기 유기광전자소자용 화합물은 발광층 내에 인광 또는 형광 호스트 재료로서 사용될 수 있다.

[0050] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

발명의 효과

[0051] 높은 정공 또는 전자 수송성, 막 안정성 열적 안정성 및 높은 3중향 여기에너지를 가지는 화합물을 제공할 수 있다.

[0052] 이러한 화합물은 발광층의 정공 주입/수송 재료, 호스트 재료, 또는 전자 주입/수송 재료로 이용될 수 있다. 이를 이용한 유기광전자소자는 우수한 전기화학적 및 열적 안정성을 가지게 되어 수명 특성이 우수하고, 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가질 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0053] 도 1 내지 도 5는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물을 이용하여 제조될 수 있는 유기발광소자에 대한 다양한 구현예들을 나타내는 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0054] 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

[0055] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로겐기, 헤드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시

아노기로 치환된 것을 의미한다.

[0056] 또한 상기 치환된 할로겐기, 헤드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 고리를 형성할 수도 있다.

[0057] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

[0058] 본 명세서에서 "이들의 조합"이란 별도의 정의가 없는 한, 둘 이상의 치환기가 연결기로 결합되어 있거나, 둘 이상의 치환기가 축합하여 결합되어 있는 것을 의미한다.

[0059] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"이란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다. 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.

[0060] 상기 알킬기는 분지형, 직쇄형 또는 환형일 수 있다.

[0061] "알케닐(alkenyl)기"는 적어도 두 개의 탄소원자가 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합으로 이루어진 작용기를 의미하며, "알키닐(alkynyl)기"는 적어도 두 개의 탄소원자가 적어도 하나의 탄소-탄소 삼중 결합으로 이루어진 작용기를 의미한다.

[0062] 알킬기는 C1 내지 C20인 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다.

[0063] 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자, 즉, 알킬쇄는 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.

[0064] 구체적인 예를 들어 상기 알킬기는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 웬틸기, 헥실기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로웬틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.

[0065] "방향족기"는 고리 형태인 작용기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이를 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 작용기를 의미한다. 구체적인 예로 아릴기와 헤테로아릴기가 있다.

[0066] "아릴(aryl)기"는 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

[0067] "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤�테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤�테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.

[0068] 본 명세서에서, 정공 특성이란, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

[0069] 또한 전자 특성이란, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

[0070] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물은 적어도 세 개의 헤테로아릴기를 연속적으로 결합한 코어에 다양한 치환기를 선택적으로 포함한 구조일 수 있다.

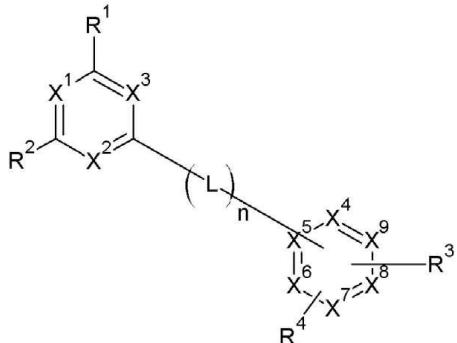
[0071] 상기 코어 구조는 유기광전자소자의 발광 재료, 정공주입재료 또는 정공수송재료로 이용될 수 있다. 특히 전자 주입재료 또는 전자수송재료에 적합할 수 있다.

[0072] 또한, 상기 유기광전자소자용 화합물은 코어 부분과 코어 부분에 치환된 치환기에 다양한 또 다른 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드 캡을 갖는 화합물이 될 수 있다.

[0073] 상기 화합물의 치환기에 따라 적절한 에너지 준위를 가지는 화합물을 유기광전자소자에 사용함으로써, 정공전달 능력 또는 전자전달 능력이 강화되어 효율 및 구동전압 면에서 우수한 효과를 가지고, 전기화학적 및 열적 안정성이 뛰어나 유기광전자소자 구동시 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

[0074] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 1로 표시될 수 있다.

[0075] [화학식 1]



[0076]

[0077] 상기 화학식 1에서, X^1 내지 X^9 는 서로 독립적으로, CR' 또는 N이며, 상기 X^1 내지 X^3 중 적어도 어느 두 개는 N이며, 상기 X^4 내지 X^9 중 적어도 어느 하나는 N이고, R^1 내지 R^4 및 R'은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티울기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이고, R^3 및 R^4 는 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고, L은 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, n은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이다.

[0078] 상기 세 개의 헤테로아릴리가 연결된 코어 구조는 그 치환기에 따라 적절한 에너지 준위를 갖는 화합물을 유기광전자소자에 사용함으로써, 전자전달 능력이 강화될 수 있다. 이에 상기 화합물이 유기광전자소자에 적용되는 경우, 소자의 효율 및 구동전압이 개선될 수 있다. 또한, 상기 화합물은 전기화학적 및 열적 안정성이 뛰어나 유기광전자소자에 적용 시 소자의 수명 특성을 개선시킬 수 있다.

[0079] 보다 구체적으로, 상기 R^1 내지 R^4 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 폐닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 폐난트릴기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐일기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 폐릴레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸일기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 폐나진일기, 치환 또는 비치환된 폐노티아진일기, 치환 또는 비치환된 폐녹사진일기 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

[0080] 상기 R^1 및 R^2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기일 수 있다. 보다 구체적으로, 상기 R^1 및 R^2 는 융합된, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기일 수 있다.

[0081] 상기 R¹ 및 R²의 구체적인 예로는 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 폐릴닐기 등이다.

[0082] 상기 L은 하나 또는 두 개의 질소를 포함하는, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기일 수 있다. 상기 L은 전자의 수송을 원활하게 할 수 있다. 즉, 전자를 당기는 작용기의 역할을 할 수 있기 때문에 전자의 이동 속도를 정공과 유사하게 맞추어 줄 수 있다.

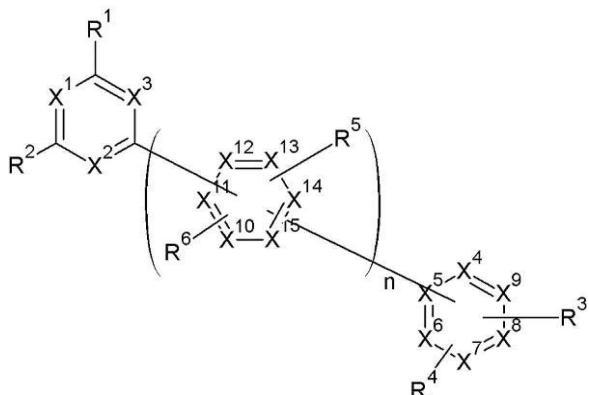
[0083] 또한, 별크한 아릴기를 도입함으로써 화합물의 열적 안정성을 증가시킬 수 있다. 보다 구체적으로, 요구되는 소자의 특성에 따라 적절하게 상기 치환기를 선택 또는 변형하게 사용할 수 있다.

[0084] 상기 L을 선택적으로 조절하여 화합물 전체의 공액(conjugation) 길이를 결정할 수 있으며, 이로부터 삼중한(triplet) 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다. 이를 통해 유기광전소자에서 필요로 하는 재료의 특성을 구현해 낼 수 있다. 또한, 올소, 파라, 메타의 결합위치 변경을 통해서도 삼중한 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다.

[0085] 구체적인 상기 L의 예로는, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 나프피리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기 또는 이들의 조합인 것일 수 있다.

[0086] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[화학식 2]



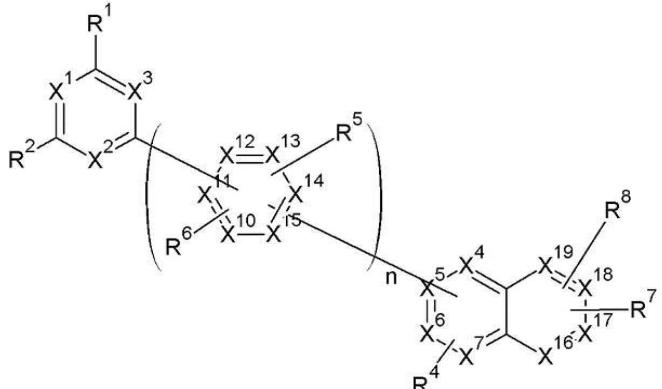
[0088]

[0089] 상기 화학식 2에서, X¹ 내지 X¹⁵는 서로 독립적으로, CR' 또는 N이며, 상기 X¹ 내지 X³ 중 적어도 어느 두 개는 N이며, 상기 X⁴ 내지 X⁹ 중 적어도 어느 하나는 N이며, 상기 X¹⁰ 내지 X¹⁵ 중 적어도 어느 하나는 N이고, R¹ 내지 R⁶ 및 R'은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 페로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 내지 C20 아실카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이고, R³ 및 R⁴는 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고, R⁵ 및 R⁶은 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고, n은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이다.

[0090] 상기 X^1 내지 X^{15} 중 어느 하나는 N일 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0091] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 3으로 표시될 수 있다.

[0092] [화학식 3]



[0093]

[0094] 상기 화학식 3에서, X^1 내지 X^7 , X^{10} 내지 X^{15} 및 X^{16} 내지 X^{19} 는 서로 독립적으로, CR' 또는 N이며, 상기 X^1 내지 X^3 중 적어도 어느 두 개는 N이며, 상기 X^4 내지 X^7 및 X^{16} 내지 X^{19} 중 적어도 어느 하나는 N이며, 상기 X^{10} 내지 X^{15} 중 적어도 어느 하나는 N이고, R^1 , R^4 내지 R^8 및 R' 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이고, R^7 및 R^8 는 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고, R^5 및 R^6 은 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고, n은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이다.

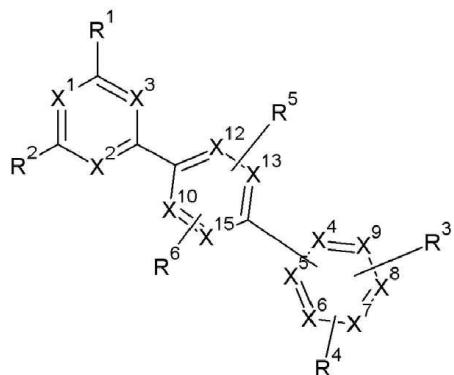
[0095] 상기 화학식 3과 같은 구조의 경우, 융합된 헤테로아릴기가 치환기로 결합된 구조로, 화합물의 전자전달 능력이 강화될 수 있다. 이에 이를 이용한 소자의 효율 및 구동전압이 개선될 수 있다. 또한, 상기 화합물의 전기화학적 및 열적 안정성이 뛰어나 이를 적용한 유기광전 소자의 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

[0096] 상기 화학식 3에서, 상기 X^4 내지 X^7 중 적어도 어느 하나는 N이고, 상기 X^{16} 내지 X^{19} 은 CR'일 수 있다. 또는, 상기 X^4 내지 X^7 는 CR'이고, 상기 X^{16} 내지 X^{19} 중 적어도 어느 하나는 N일 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0097] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 4로 표시될 수 있다.

[0098]

[화학식 4]



[0099]

[0100]

상기 화학식 4에서, X^1 내지 X^9 , X^{10} , X^{12} , X^{13} 및 X^{15} 는 서로 독립적으로, CR' 또는 N이며, 상기 X^1 내지 X^3 중 적어도 어느 두 개는 N이며, 상기 X^4 내지 X^9 중 적어도 어느 하나는 N이며, 상기 X^{10} , X^{12} , X^{13} 및 X^{15} 중 적어도 어느 하나는 N이고, R^1 내지 R^6 및 R' 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이고, R^3 및 R^4 는 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있고, R^5 및 R^6 은 서로 융합되어 융합고리를 형성할 수 있다.

[0101]

또한, 상기 R^1 및 R^2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기일 수 있다. 상기 R^1 및 R^2 의 파이공액길이(π -conjugation length)를 조절하여 가시영역에서 발광 조절을 가능하게 할 수 있다.

[0102]

이로 인해, 상기 화합물이 유기광전자소자용 화합물의 구체적인 예로는 하기와 같은 화합물이 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0103]

보다 구체적으로, 상기 R^1 및 R^2 는 융합된, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기일 수 있다.

[0104]

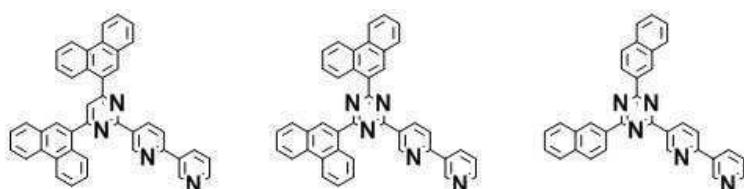
상기 유기광전자소자용 화합물의 구체적인 예로는 하기와 같은 화합물이 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0105]

[화학식 1]

[화학식 2]

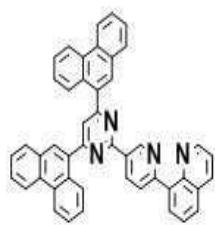
[화학식 3]



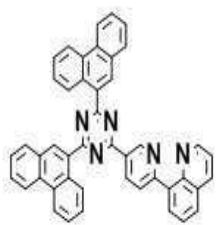
[0106]

[0107]

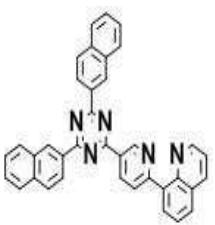
[화학식 4]



[화학식 5]



[화학식 6]



[0108]

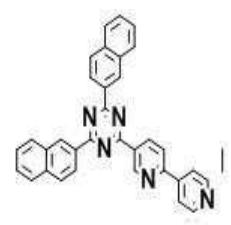
[화학식 7]



[화학식 8]

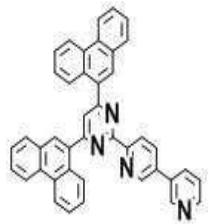


[화학식 9]



[0109]

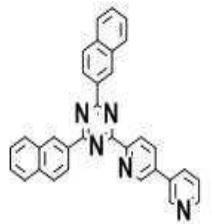
[화학식 10]



[화학식 11]

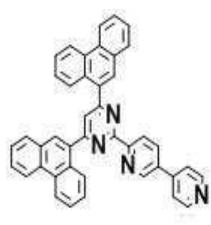


[화학식 12]



[0110]

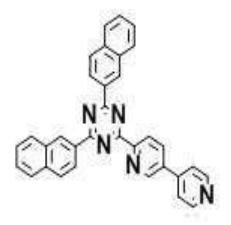
[화학식 13]



[화학식 14]

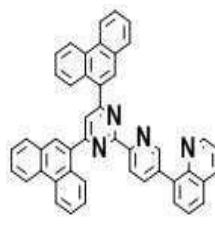


[화학식 15]



[0111]

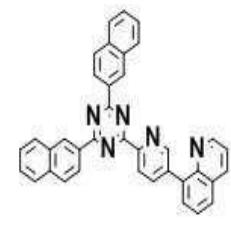
[화학식 16]



[화학식 17]

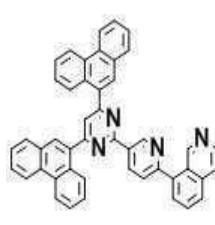


[화학식 18]



[0112]

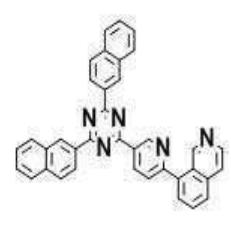
[화학식 19]



[화학식 20]



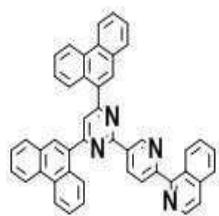
[화학식 21]



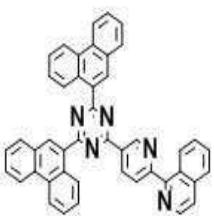
[0113]

[0119]

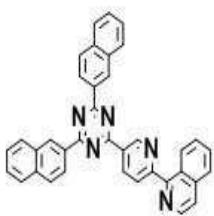
[화학식 22]



[화학식 23]

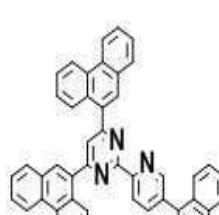


[화학식 24]

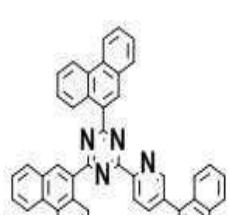


[0120]

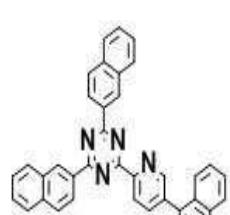
[화학식 25]



[화학식 26]

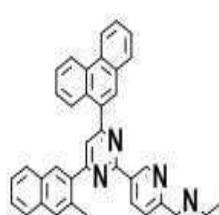


[화학식 27]

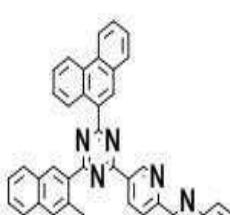


[0121]

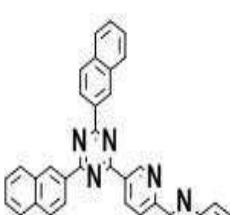
[화학식 28]



[화학식 29]

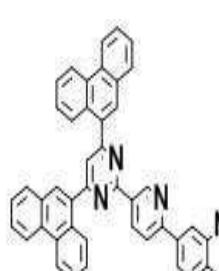


[화학식 30]

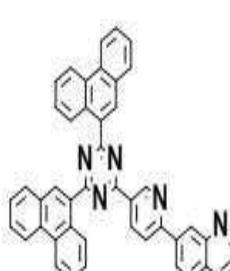


[0122]

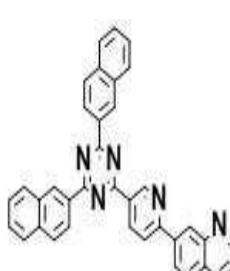
[화학식 31]



[화학식 32]

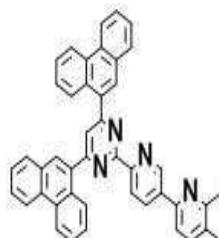


[화학식 33]

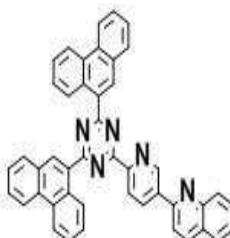


[0123]

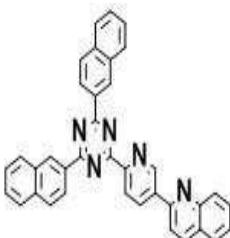
[화학식 34]



[화학식 35]



[화학식 36]



[0124]

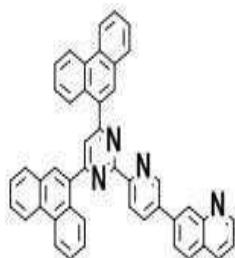
[화학식 37]

[화학식 38]

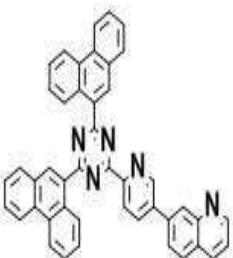
[화학식 39]

[0129]

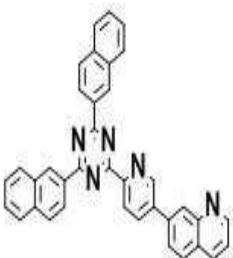
[화학식 37]



[화학식 38]



[화학식 39]

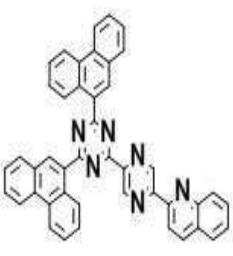


[0130]

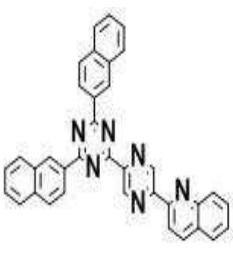
[화학식 40]



[화학식 41]

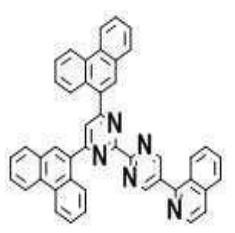


[화학식 42]

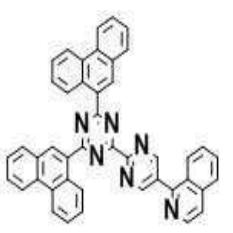


[0132]

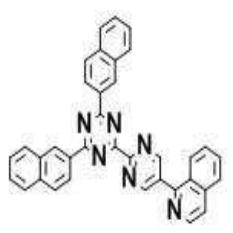
[화학식 43]



[화학식 44]

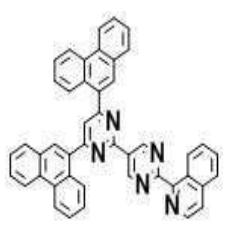


[화학식 45]

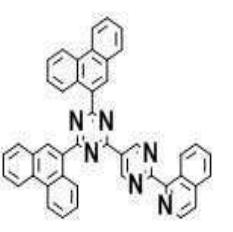


[0134]

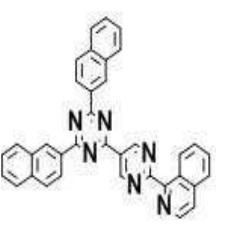
[화학식 46]



[화학식 47]

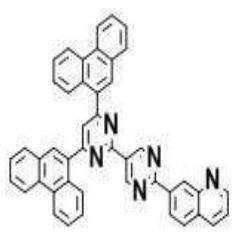


[화학식 48]

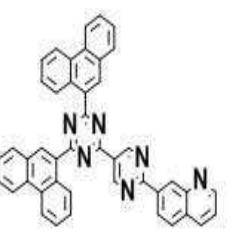


[0136]

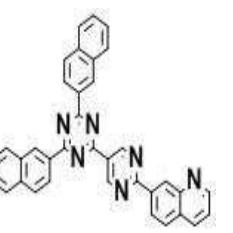
[화학식 49]



[화학식 50]

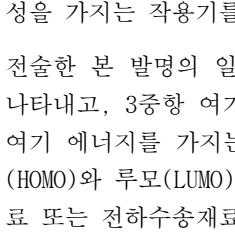


[화학식 51]

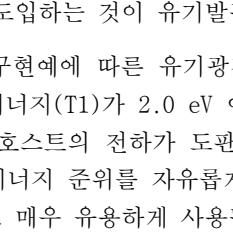


[0138]

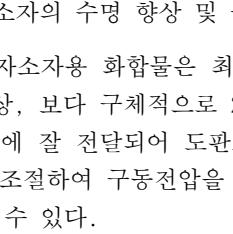
[화학식 52]



[화학식 53]



[화학식 54]



[0139]

전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물이 전자특성, 정공특성 양쪽을 모두 요구하는 경우에는 상기 전자 특성을 가지는 작용기를 도입하는 것이 유기발광소자의 수명 향상 및 구동 전압 감소에 효과적이다.

[0140]

전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물은 최대 발광 파장이 약 320 nm 내지 500 nm 범위를 나타내고, 3중항 여기에너지(T1)가 2.0 eV 이상, 보다 구체적으로 2.0 내지 4.0 eV 범위인 것으로, 높은 3중항 여기 에너지를 가지는 호스트의 전하가 도판트에 잘 전달되어 도판트의 발광효율을 높일 수 있고, 재료의 호모(HOMO)와 루모(LUMO) 에너지 준위를 자유롭게 조절하여 구동전압을 낮출 수 있는 이점이 있기 때문에 호스트 재료 또는 전하수송재료로 매우 유용하게 사용될 수 있다.

- [0141] 뿐만 아니라, 상기 유기광전자소자용 화합물은 광활성 및 전기적인 활성을 갖고 있으므로, 비선형 광학소재, 전극 재료, 변색재료, 광 스위치, 센서, 모듈, 웨이브 가이드, 유기 트랜지스터, 레이저, 광 흡수체, 유전체 및 분리막(membrane) 등의 재료로도 매우 유용하게 적용될 수 있다.
- [0142] 상기와 같은 화합물을 포함하는 유기광전자소자용 화합물은 유리전이온도가 90°C 이상이며, 열분해온도가 400°C 이상으로 열적 안정성이 우수하다. 이로 인해 고효율의 유기광전소자의 구현이 가능하다.
- [0143] 상기와 같은 화합물을 포함하는 유기광전자소자용 화합물은 발광, 또는 전자 주입 및/또는 수송역할을 할 수 있으며, 적절한 도판트와 함께 발광 호스트로서의 역할도 할 수 있다. 즉, 상기 유기광전자소자용 화합물은 인광 또는 형광의 호스트 재료, 청색의 발광도편트 재료, 또는 전자수송 재료로 사용될 수 있다.
- [0144] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물은 유기박막층에 사용되어 유기광전자소자의 수명 특성, 효율 특성, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성을 향상시키며, 구동전압을 낮출 수 있다.
- [0145] 이에 따라 본 발명의 일 구현예에는 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 유기광전자소자를 제공한다. 이 때, 상기 유기광전자소자라 함은 유기발광소자, 유기발광소자, 유기 태양 전지, 유기 트랜지스터, 유기 감광체 드럼, 유기 메모리 소자 등을 의미한다. 특히, 유기 태양 전지의 경우에는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물이 전극이나 전극 버퍼층에 포함되어 양자 효율을 증가시키며, 유기 트랜지스터의 경우에는 게이트, 소스-드레인 전극 등에서 전극 물질로 사용될 수 있다.
- [0146] 이하에서는 유기발광소자에 대하여 구체적으로 설명한다.
- [0147] 본 발명의 다른 일 구현예는 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 유기발광소자를 제공한다.
- [0148] 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함할 수 있는 유기박막층으로는 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 층을 포함할 수 있는 바, 이 중에서 적어도 어느 하나의 층은 본 발명에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함한다. 특히, 정공수송층 또는 정공주입층에 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기광전자소자용 화합물이 발광층 내에 포함되는 경우 상기 유기광전자소자용 화합물은 인광 또는 형광호스트로서 포함될 수 있고, 특히, 형광 청색 도편트 재료로서 포함될 수 있다.
- [0149] 도 1 내지 도 5는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 유기발광소자의 단면도이다.
- [0150] 도 1 내지 도 5를 참조하면, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기발광소자(100, 200, 300, 400 및 500)는 양극(120), 음극(110) 및 이 양극과 음극 사이에 개재된 적어도 1층의 유기박막층(105)을 포함하는 구조를 갖는다.
- [0151] 상기 양극(120)은 양극 물질을 포함하며, 이 양극 물질로는 통상 유기박막층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 상기 양극 물질의 구체적인 예로는 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금을 들 수 있고, 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물을 들 수 있고, ZnO와 Al 또는 SnO₂와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합을 들 수 있고, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](polyehtylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 바람직하게는 상기 양극으로 ITO(indium tin oxide)를 포함하는 투명전극을 사용할 수 있다.
- [0152] 상기 음극(110)은 음극 물질을 포함하여, 이 음극 물질로는 통상 유기박막층으로 전자주입이 용이하도록 일 함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금을 들 수 있고, LiF/Al, LiO₂/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF₂/Ca과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 바람직하게는 상기 음극으로 알루미늄 등과 같은 금속전극을 사용할 수 있다.
- [0153] 먼저 도 1을 참조하면, 도 1은 유기박막층(105)으로서 발광층(130)만이 존재하는 유기발광소자(100)를 나타낸 것으로, 상기 유기박막층(105)은 발광층(130)만으로 존재할 수 있다.
- [0154] 도 2를 참조하면, 도 2는 유기박막층(105)으로서 전자수송층을 포함하는 발광층(230)과 정공수송층(140)이 존재하는 2층형 유기발광소자(200)를 나타낸 것으로, 도 2에 나타난 바와 같이, 유기박막층(105)은 발광층(230) 및

정공 수송층(140)을 포함하는 2층형일 수 있다. 이 경우 발광층(130)은 전자 수송층의 기능을 하며, 정공 수송층(140)은 ITO와 같은 투명전극과의 접합성 및 정공수송성을 향상시키는 기능을 한다.

도 3을 참조하면, 도 3은 유기박막층(105)으로서 전자수송층(150), 발광층(130) 및 정공수송층(140)이 존재하는 3층형 유기발광소자(300)로서, 상기 유기박막층(105)에서 발광층(130)은 독립된 형태로 되어 있고, 전자수송성이나 정공수송성이 우수한 막(전자수송층(150) 및 정공수송층(140))을 별도의 층으로 쌓은 형태를 나타내고 있다.

도 4를 참조하면, 도 4는 유기박막층(105)으로서 전자주입층(160), 발광층(130), 정공수송층(140) 및 정공주입층(170)이 존재하는 4층형 유기발광소자(400)로서, 상기 정공주입층(170)은 양극으로 사용되는 IT0와의 접합성을 향상시킬 수 있다.

도 5를 참조하면, 도 5는 유기박막층(105)으로서 전자주입층(160), 전자수송층(150), 발광층(130), 정공수송층(140) 및 정공주입층(170)과 같은 각기 다른 기능을 하는 5개의 층이 존재하는 5층형 유기발광소자(500)를 나타내고 있으며, 상기 유기발광소자(500)는 전자주입층(160)을 별도로 형성하여 저전압화에 효과적이다.

상기 도 1 내지 도 5에서 상기 유기박막층(105)을 이루는 전자 수송층(150), 전자 주입층(160), 발광층(130, 230), 정공 수송층(140), 정공 주입층(170) 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나는 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함한다. 이 때 상기 유기광전자소자용 화합물은 상기 전자 수송층(150) 또는 전자 주입층(160)을 포함하는 전자수송층(150)에 사용될 수 있으며, 그중에서도 전자수송층에 포함될 경우 정공 차단층(도시하지 않음)을 별도로 형성할 필요가 없어 보다 단순화된 구조의 유기발광소자를 제공할 수 있어 바람직하다.

또한, 상기 유기광전자소자용 화합물이 발광층(130, 230) 내에 포함되는 경우 상기 유기광전자소자용 화합물은
인광 또는 형광호스트로서 포함될 수 있으며, 또는 형광 청색 도편트로서 포함될 수 있다.

상기에서 설명한 유기발광소자는, 기판에 양극을 형성한 후, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금 및 이온도금과 같은 건식성막법; 또는 스핀코팅(spin coating), 침지법(dipping), 유동코팅법(flow coating)과 같은 습식성막법 등으로 유기박막층을 형성한 후, 그 위에 음극을 형성하여 제조할 수 있다.

본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유통망소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

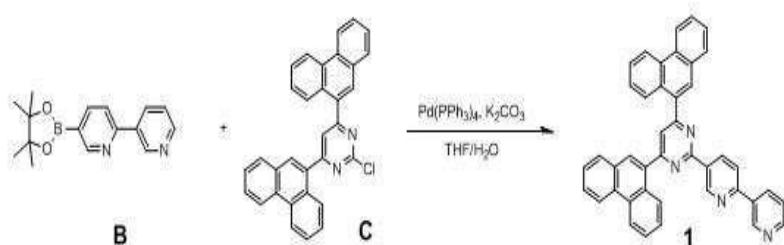
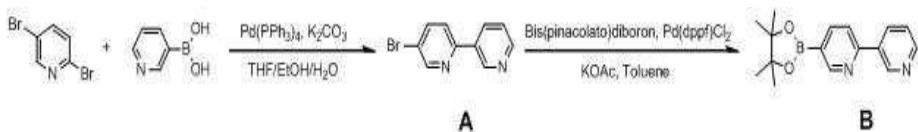
이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

(유기광전자소자용 화합물의 제조)

실시예 1: 화학식 1로 표시되는 화합물의 합성

본 발명의 유기광전소자용 화합물의 보다 구체적인 예로서 제시된 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 하기 반응식 1과 같은 경로를 통해 합성하였다.

[반응식 1]



[0168] 제 1 단계: 중간체 생성물(A)의 합성

2,5-다이브로모페리딘 160.0 g (675 mmol), 3-페리딘보로닉에시드 83.02 g (675 mmol) 및 테트라카이스(트리페닐포스핀)팔라듐 [Pd(PPh₃)₄] 23.4 g (20.2 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 3.2 L 와 에탄올 1.6 L 용매에 녹인 후, 포타슘카보네이트 (K₂CO₃) 186.68 g (1.35 mol)을 물 1.6 L에 용해한 용액을 첨가하고 90 °C에서 18시간 동안 반응시켰다. 반응종료를 TLC로 확인한 후 상온으로 냉각 시킨 후 추출한다. 추출물에 노르말 헥산을 넣고 교반 시킨 후, 생성되는 고체를 여과한다. 얻어진 고체를 건조 후 화합물 중간체 A를 136.6 g(수율: 86%) 얻었다.

[0170] 제 2 단계: 중간체 생성물(B)의 합성

중간체 생성물(A) 158.5 g (674 mmol), 비스피나콜레이토 디아보론 205.46 g (809 mmol), 포타슘아세테이트 158.8 g (1.62 mol) 및 1,1'-비스다이페닐포스피노페로센다이클로로팔라듐(II)[Pd(dppf)Cl₂] 16.52 g (20.2 mmol)을 톨루엔 1.6 L 용매에서 110°C에서 14시간 동안 반응시켰다. 반응종료를 TLC로 확인한 후 상온으로 냉각 시킨 후 추출한다. 마그네슘설페이트 (MgSO₄)를 이용하여 유기층의 수분을 제거 후, 컬럼크로마토그래피를 통해 정제한다. (Hexanes:EA=1:1 v/v) 얻어진 화합물을 메탄올로 재결정하여 화합물 중간체 B를 77 g(수율: 40.5%) 얻었다.

[0172] 제 3 단계: 화학식 1로 표시되는 화합물 1의 합성

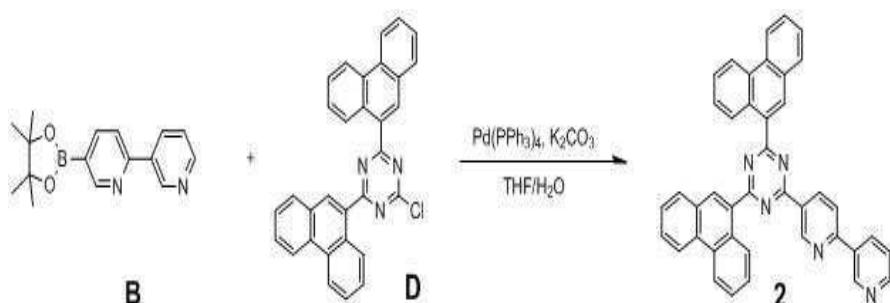
중간체 생성물 (B) 16.6 g (58.9 mmol), C 25 g (53.5 mmol) 및 테트라카이스(트리페닐포스핀)팔라듐[Pd(PPh₃)₄] 1.85 g (1.61 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 500 ml 용매에 녹인 후, 포타슘카보네이트(K₂CO₃) 16.28 g (118 mmol)을 물 250 ml에 용해한 용액을 첨가하고 90 °C에서 12시간 동안 반응시켰다. 반응종료를 TLC로 확인한 후 식힌다. 용액을 여과한 후 다량의 메탄올과 물로 씻는다. 얻어진 고체를 디이클로로벤젠으로 녹인 후, 메탄올로 재결정하여 화학식 1로 표시되는 화합물을 22.1 g(수율: 70.4%) 얻었다. (계산값: 586.68 측정값: MS[M+1] 587)

[0174]

[0175] 실시예 2: 화학식 2로 표시되는 화합물의 합성

본 발명의 유기광전소자용 화합물의 보다 구체적인 예로서 제시된 상기 화학식 2로 표시되는 화합물을 하기 반응식 2와 같은 경로를 통해 합성하였다.

[0177] [반응식 2]



[0178]

[0179] 제1 단계: 화학식 2로 표시되는 화합물의 합성

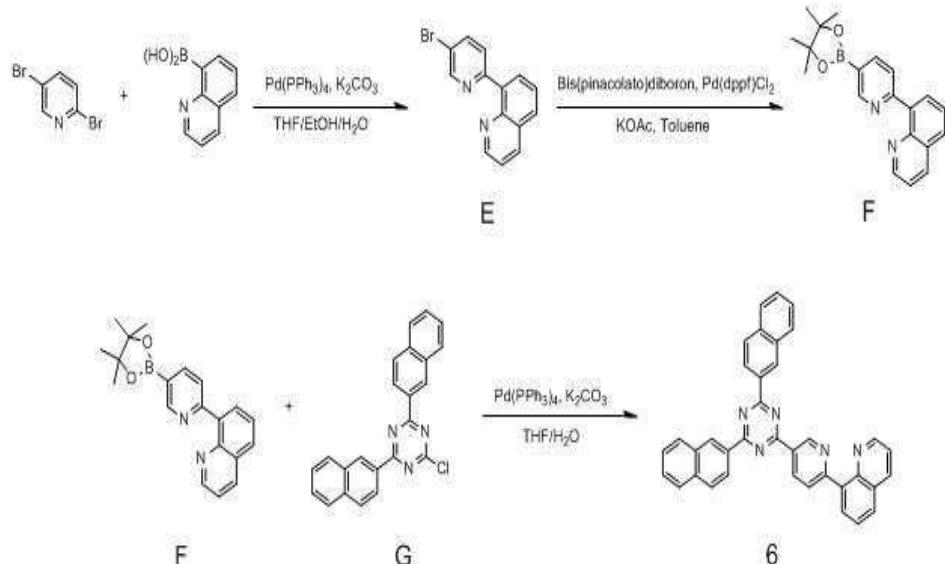
중간체 생성물 (B) 16.58 g (58.8 mmol), D 25 g (53.4 mmol) 및 테트라카이스(트리페닐포스핀)팔라듐[Pd(PPh₃)₄] 1.85 g (1.6 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 500 ml 용매에 녹인 후, 포타슘카보네이트(K₂CO₃) 16.24 g (118 mmol)을 물 250 ml에 용해한 용액을 첨가하고 90 °C에서 12시간 동안 반응시킨다. 반응종료를 TLC로 확인한 후, 메탄올과 물로 씻는다. 얻어진 고체를 디이클로로벤젠으로 녹인 후, 메탄올로 재결정하여 화학식 2로 표시되는 화합물을 22.1 g(수율: 70.4%) 얻었다. (계산값: 586.68 측정값: MS[M+1] 587)

mmol)을 물 250 ml에 용해한 용액을 첨가하고 90 °C에서 12시간 동안 반응시켰다. 반응종료를 TLC로 확인한 후 식힌다. 용액을 여과한 후 다량의 메탄올과 물로 셧는다. 얻어진 고체를 다이클로로벤젠으로 녹인 후, 메탄올로 재결정하여 화학식 2로 표시되는 화합물을 29.6 g(수율: 70.7%) 얻었다. (계산값: 587.67 측정값: MS[M+1] 588)

[0181] 실시예 3: 화학식 6으로 표시되는 화합물의 합성

본 발명의 유기광전소자용 화합물의 보다 구체적인 예로서 제시된 상기 화학식 6으로 표시되는 화합물을 하기 반응식 3과 같은 경로를 통해 합성하였다.

[반응식 3]



[0184]

제 1 단계: 중간체 생성물(E)의 합성

[0186]

2,5-다이브로모페리딘 20.0 g (84.4 mmol), 8-퀴놀린보로닉에시드 16.06 g (92.9 mmol) 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 [Pd(PPh₃)₄] 2.93 g (2.53 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 400 ml와 에탄올 140 ml 용매에 녹인 후, 포타슘카보네이트 (K₂CO₃) 22.34 g (168.89 mmol)을 물 140 ml에 용해한 용액을 첨가하고 90 °C에서 12시간 동안 반응시켰다. 반응종료를 TLC로 확인한 후 상온으로 냉각 시킨 후 추출한다. 마그네슘설페이트 (MgSO₄)를 이용하여 유기층의 수분을 제거 후, 컬럼크로마토그래피를 통해 정제한다. (Hexanes:EA=4:1 v/v) 얻어진 화합물을 노르말 헥산으로 재결정하여 화합물 중간체 E를 15.44 g(수율: 64%) 얻었다.

[0187]

제 2 단계: 중간체 생성물(F)의 합성

[0188]

중간체 생성물(E) 15.0 g (58.1 mmol), 비스피나콜레이토 디아보론 17.71 g (69.7 mmol), 포타슘아세테이트 17.11 g (174.3 mmol) 및 1,1'-비스디아이페닐포스피노페로센다이클로로팔라듐(II)[Pd(dppf)Cl₂] 1.42 g (1.74 mmol)을 툴루엔 300 ml 용매에서 110°C에서 4시간 동안 반응시켰다. 반응종료를 TLC로 확인한 후 식힌다. 수득한 반응물의 용매를 감압 하에서 제거하고 물과 메탄올로 세정하였다. 그 잔류물을 툴루엔으로 재결정하여, 석출한 결정을 여과에 의해 분리하고, 툴루엔으로 세정한 후 건조시켜 중간체 생성물 (F) 10 g (수율: 52%)의 고체를 얻었다.

[0189]

제 3 단계: 화학식 6으로 표시되는 화합물의 합성

[0191]

중간체 생성물 (F) 10.0 g (30.1 mmol), G 9.96 g (27.1 mmol) 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 [Pd(PPh₃)₄] 0.94 g (0.81 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 200 ml 용매에 녹인 후, 포타슘카보네이트(K₂CO₃)

7.5 g (54.2 mmol)을 물 100 ml에 용해한 용액을 첨가하고 90 °C에서 12시간 동안 반응시켰다. 반응종료를 TLC로 확인한 후 식한다. 용액을 여과한 후 다량의 메탄올과 물로 셧는다. 얻어진 고체를 다이클로로벤젠으로 녹인 후, 메탄올로 재결정하여 화학식 6으로 표시되는 화합물을 7.5 g(수율: 52%) 얻었다.(계산값: 537.61 측정값: MS[M+1] 538)

[0192] **(유기발광소자의 제조)**

[0193] **실시예 4**

[0194] 양극으로는 ITO를 1000 Å의 두께로 사용하였고, 음극으로는 알루미늄 (Al) 을 1000 Å의 두께로 사용하였다.

[0195] 구체적으로, 유기발광소자의 제조방법을 설명하면, 양극은 $15 \Omega/cm^2$ 의 면저항 값을 가진 ITO 유리 기판을 50 mm × 50 mm × 0.7 mm의 크기로 잘라서 아세톤과 이소프로필알코올과 순수 물 속에서 각 5 분 동안 초음파 세정한 후, 30 분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다.

[0196] 상기 유리 기판 상부에 정공주입층으로서 N1,N1'-(비페닐-4,4'-디일)비스(N1-(나프탈렌-2-일)-N4,N4-다이페닐벤젠-1,4-다이아민) 65 nm을 증착하였고, 이어서 정공수송층으로 N,N'-다이(1-나프틸)-N,N'-다이페닐벤지딘 40 nm을 증착하였다.

[0197] 발광층으로서 N,N,N',N'-테트라키스(3,4-다이메틸페닐)크라이센-6,12-다이아민 4 % 및 9-(3-(나프탈렌-1-일)페닐)-10-(나프탈렌-2-일)안트라센 96 %를 25 nm의 두께로 증착하였다.

[0198] 이어서, 전자수송층으로서 상기 실시예 1에서 제조된 화합물 30 nm을 증착하였다.

[0199] 상기 전자수송층 상부에 전자주입층으로서 Liq를 0.5 nm의 두께로 진공 증착하고, Al를 100 nm의 두께로 진공 증착하여, Liq/Al 전극을 형성하였다.

[0200]

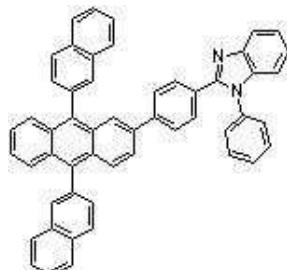
[0201] **실시예 5**

[0202] 전자수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 3에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 4와 동일하게 실시하여 유기발광소자를 제작하였다.

[0203] **비교예 1**

[0204] 전자수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 하기의 화학식 R-1의 화합물을 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 4와 동일하게 실시하여 유기발광소자를 제작하였다.

[0205] [화학식 R-1]



[0206]

[0207] **(유기발광소자의 성능 측정)**

[0208] **실험예**

[0209] 상기 실시예 4, 5 및 비교예 1에서 제조된 각각의 유기발광소자에 대하여 암에 따른 전류밀도 변화, 휘도변화 및 발광효율을 측정하였다. 구체적인 측정방법은 다음과 같고, 그 결과는 하기 표 1에 나타내었다

[0210] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[0211] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0 V 부터 10 V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[0212] (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

[0213] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0 V 부터 10 V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그 때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

[0214] (3) 발광효율 측정

[0215] 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 밝기($1000 \text{ cd}/\text{m}^2$)의 전류 효율(cd/A) 및 전력 효율(lm/W)을 계산하였다.

표 1

	휘도 $500 \text{ cd}/\text{m}^2$				
	구동전압 (V)	발광 효율(cd/A)	전력효율(lm/W)	CIE 색도도	
				x	y
실시예 4	4.7	3.9	2.6	0.14	0.05
실시예 5	5.0	3.6	2.3	0.14	0.05
비교예 1	<u>5.1</u>	<u>3.7</u>	<u>2.3</u>	<u>0.14</u>	<u>0.05</u>

[0217] 상기 표 1에서 알 수 있듯이, 본 발명의 실시예 4 및 5 의 유기발광소자의 경우가 비교예 1에 비해 구동전압은 낮으면서 발광 효율 및 전력 효율이 우수한 것을 알 수 있었다.

[0218] 본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

[0219] 100: 유기발광소자 110: 음극

120: 양극 105: 유기박막층

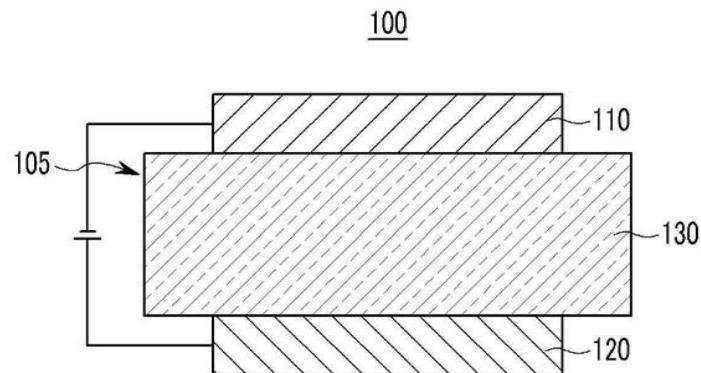
130: 발광층 140: 정공 수송층

150: 전자수송층 160: 전자주입층

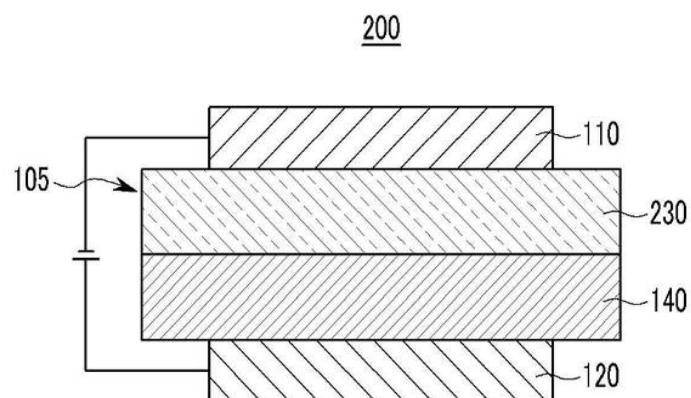
170: 정공주입층 230: 발광층 + 전자수송층

도면

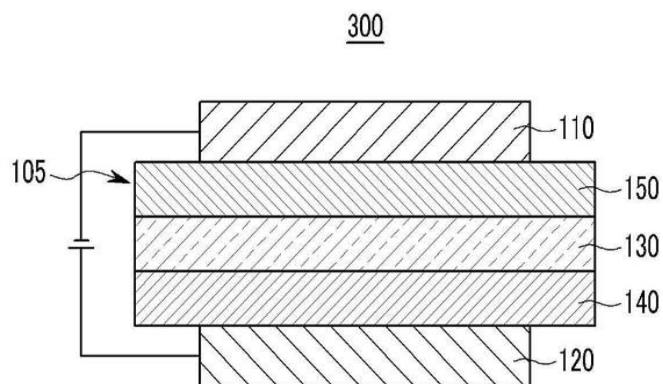
도면1



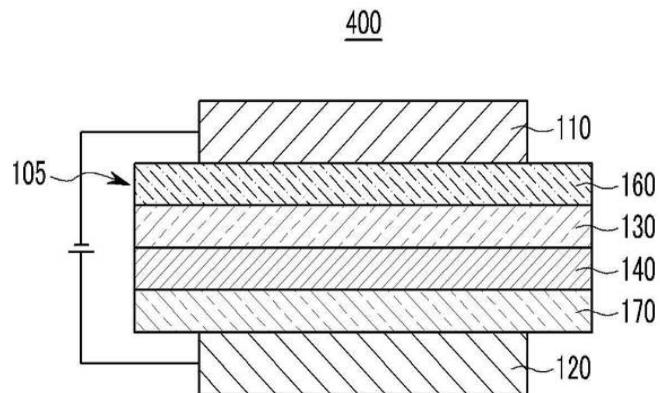
도면2



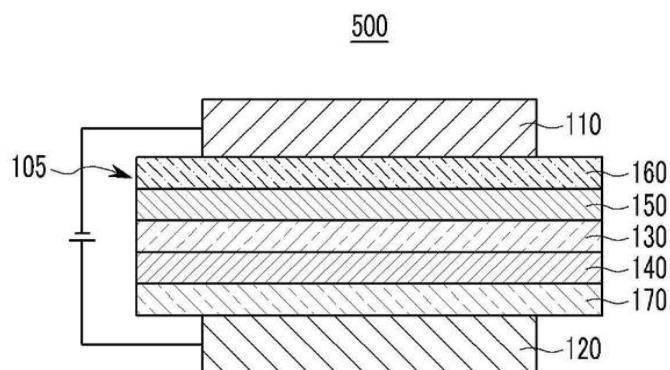
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	标题 : 用于有机光电子器件的化合物 , 包括其的有机发光器件 , 以及包含有机发光器件的表		
公开(公告)号	KR1020140087647A	公开(公告)日	2014-07-09
申请号	KR1020120158170	申请日	2012-12-31
[标]申请(专利权)人(译)	第一毛织株式会社		
申请(专利权)人(译)	第一毛织有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	第一毛织有限公司		
[标]发明人	KIM HYUN JUNG 김현정 SHIN CHANG JU 신창주 JEONG SOO YOUNG 정수영 KANG DONG MIN 강동민 KANG EUI SU 강의수 WON JONG WOO 원종우 LEE NAM HEON 이남현 LEE HYON GYU 이현규 JEONG WOOSEOK 정우석 JUNG HO KUK 정호국 CHAE MI YOUNG 채미영		
发明人	김현정 신창주 정수영 강동민 강의수 원종우 이남현 이현규 정우석 정호국 채미영		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	C09K2211/1011 C09K2211/1029 H05B33/14 H01L51/50 C09K2211/1059 H01L51/0072 C09K2211/1044 H01L51/0065 C09K11/06 H01L51/0058 H01L51/0067 C07D235/08 C07D401/14 H01L51/5012 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/5088 H01L51/5092 H01L51/5096 H01L51/5206 H01L51/5221 H01L2251/301 H01L2251/308 Y02E10/549		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及用于有机光电子器件的化合物，包括该化合物的有机发光二极管，以及包括该有机发光二极管的显示装置。本发明提供由下述化学式1表示的用于有机光电子器件的化合物，以制造具有优异的电化学和热稳定性以具有优异的寿命特性并且即使在低驱动电压下也具有优异的发光效率的有机发光二极管。

100

