



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0069992
(43) 공개일자 2017년06월21일

- | | |
|---|--|
| (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
<i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>H01L 51/00</i> (2006.01)
<i>H01L 51/50</i> (2006.01) | (71) 출원인
제일모직주식회사
경상북도 구미시 구미대로 58 (공단동) |
| (52) CPC특허분류
<i>C09K 11/06</i> (2013.01)
<i>H01L 51/0032</i> (2013.01) | (72) 발명자
이한일
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동) |
| (21) 출원번호 10-2017-0074955(분할) | 정성현
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동) |
| (22) 출원일자 2017년06월14일
심사청구일자 없음 | (뒷면에 계속) |
| (62) 원출원 특허 10-2015-0135495
원출원일자 2015년09월24일
심사청구일자 2017년01월31일 | (74) 대리인
팬코리아특허법인 |

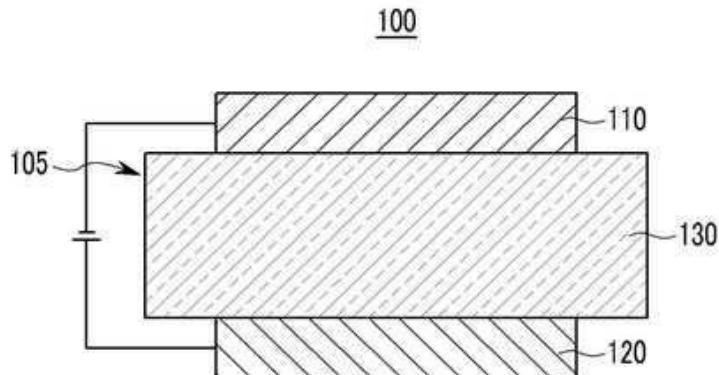
전체 청구항 수 : 총 12 항

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

(57) 요 약

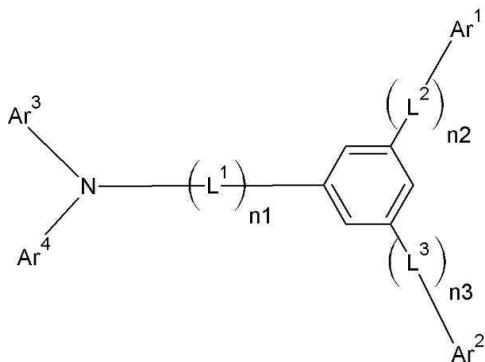
유기광전자소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것으로
(뒷면에 계속)

대 표 도 - 도1



로, 하기 화학식 3으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[화학식 3]



(52) CPC특허분류

H01L 51/50 (2013.01)

C09K 2211/1011 (2013.01)

C09K 2211/1014 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

C09K 2211/1088 (2013.01)

C09K 2211/1092 (2013.01)

(72) 발명자

채미영

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

김준석

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

류동완

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

양용탁

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

유동규

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

이남현

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

이승재

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

장유나

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

조영경

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

허달호

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

홍진석

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

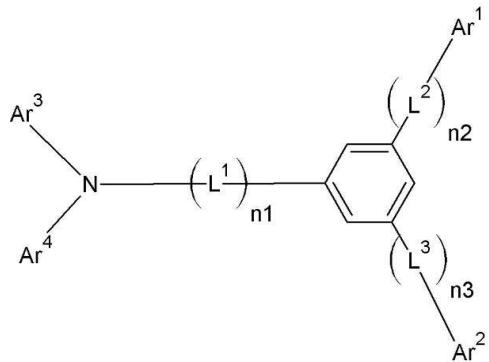
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 3으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 아릴기, 하기 화학식 S-1, 또는 하기 화학식 S-2이며,

상기 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 어느 하나는 하기 화학식 S-2이고,

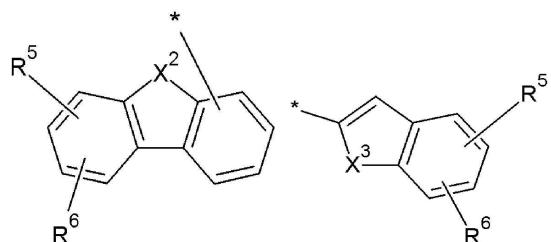
Ar^3 및 Ar^4 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고,

L^1 내지 L^3 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고,

n_1 내지 n_3 은 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이다:

[화학식 S-1]

[화학식 S-2]



상기 화학식 S-1 및 화학식 S-2에서,

X^2 는 $-0-$, $-S-$ 또는 $-\text{CR}'\text{R}''-$ 이고,

X^3 은 $-\text{NR}'-$, $-0-$, 또는 $-S-$ 이고,

R^5 , R^6 , R' 및 R'' 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 시아노기, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C30 아릴기, 또는 이들의 조합이다.

청구항 2

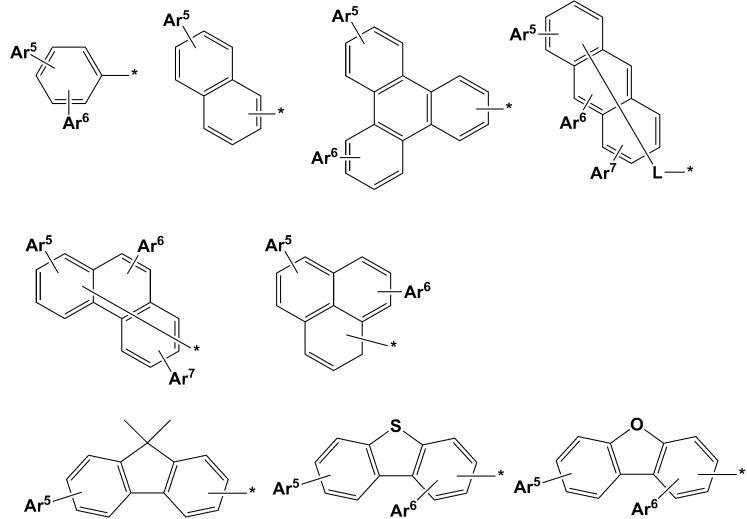
제1항에 있어서,

상기 Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로, 상기 화학식 S-2인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로, 하기 치환기 중 어느 하나인 것인 유기광전자소자용 화합물:



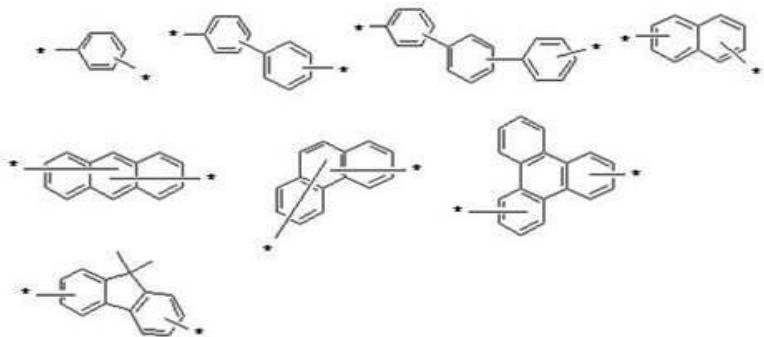
상기 치환기에서,

Ar^5 내지 Ar^7 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 시아노기, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C30 아릴기, 또는 이들의 조합이다.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 L^1 내지 L^3 은 서로 돋립적으로, 하기 치환기 중 어느 하나인 것인 유기광전자소자용 화합물:



청구항 5

제1항에 있어서,

상기 Ar^1 및 Ar^2 는 서로 돋립적으로, 고리의 수가 복수인 융합된 고리를 가지는, 치환 또는 비치환된 C14 내지 C30 아릴기인 것인 유기광전자소자용 화합물.

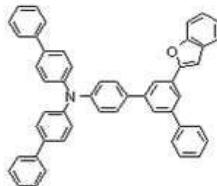
청구항 6

제1항에 있어서,

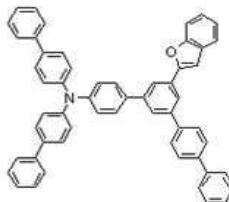
상기 Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기 또는 치환 또는 비치환된 페난트레닐기인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 7

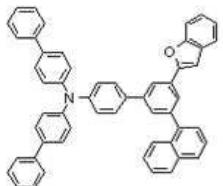
하기에 나열된 화학식 중에서 선택되는 유기광전자소자용 화합물:



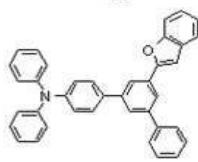
4-1



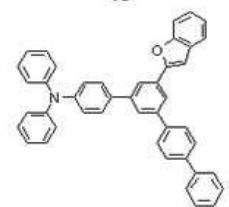
4-2



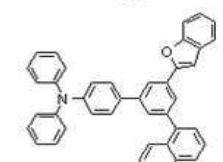
4-3



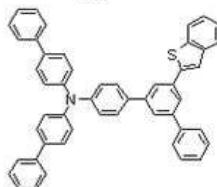
4-4



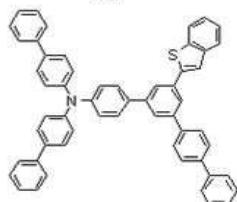
4-5



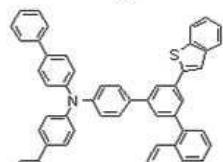
4-6



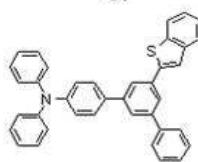
4-7



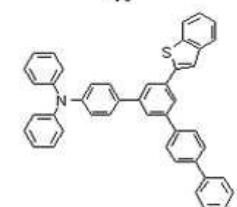
4-8



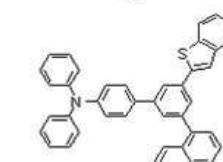
4-9



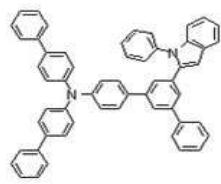
4-10



4-11

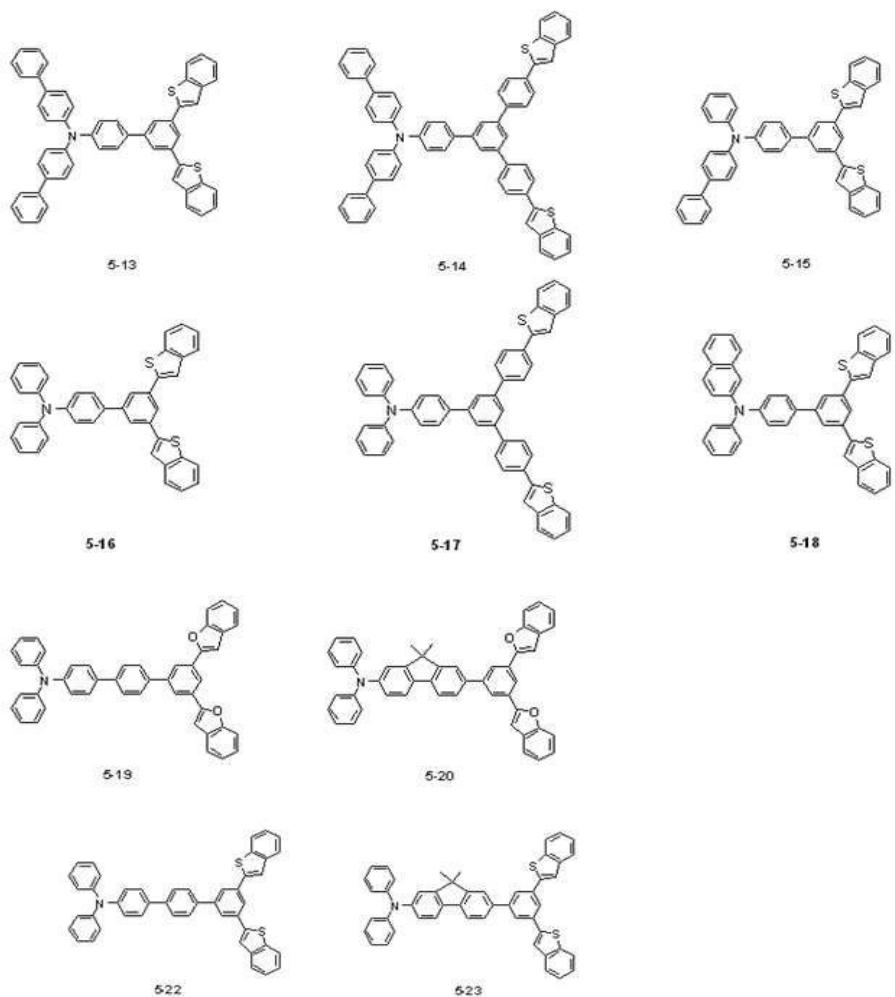


4-12



4-13



**청구항 8**

제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자는, 유기광전소자, 유기발광소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 및 유기메모리소자로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 9

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

상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자.

청구항 10

제9항에 있어서,

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

청구항 11

제10항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 정공주입층 또는 정공수송층 내에 포함되는 것인 유기발광소자.

청구항 12

제9항의 유기발광소자를 포함하는 표시장치.

발명의 설명

기술 분야

- [0001] 유기광전자소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것이다.
- [0002] 유기광전자소자(organic optoelectric device)라 함은 정공 또는 전자를 이용한 전극과 유기물 사이에서의 전하 교류를 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 바닥상태에서 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 친연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.
- [0012] 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율과 안정성을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.
- [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 유기발

광소자용 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 유기발광소자는 잉크젯(inkjet) 또는 스플레이팅(spin coating)법을 사용하여 초기 투자비가 적고 대면적화가 유리한 장점을 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. 이를 위해 안정하고 효율적인 유기발광소자용 유기물층 재료의 개발이 필요하다.

발명의 내용

해결하려는 과제

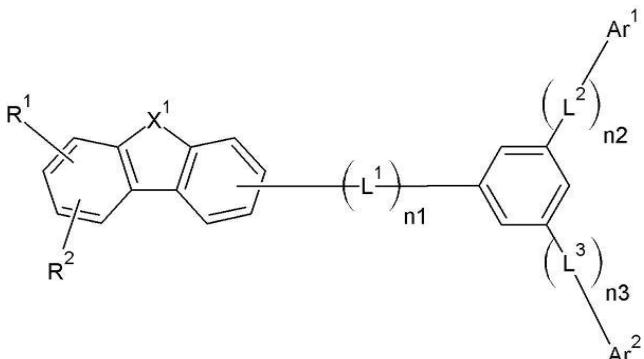
[0018] 고효율, 장수명 등의 특성을 가지는 유기광전자소자를 제공할 수 있는 유기광전자소자용 화합물을 제공하는 것이다.

[0019] 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0020] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[0021] [화학식 1]



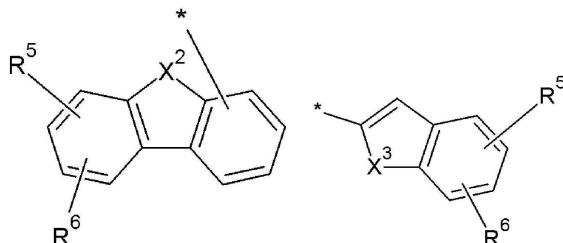
[0022] [0023] 상기 화학식 1에서, Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L¹ 내지 L³은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고, n1 내지 n3는 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이고, X¹은 -NR'-, -O-, -S- 또는 -CR'R"-이고, R¹, R², R' 및 R"는 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 비

치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 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 C20 알킬티울기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이다.

[0024] 상기 X^1 은 $-NR'$ -일 수 있다.

[0025] 상기 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 어느 하나는 하기 화학식 S-1 또는 S-2일 수 있다.

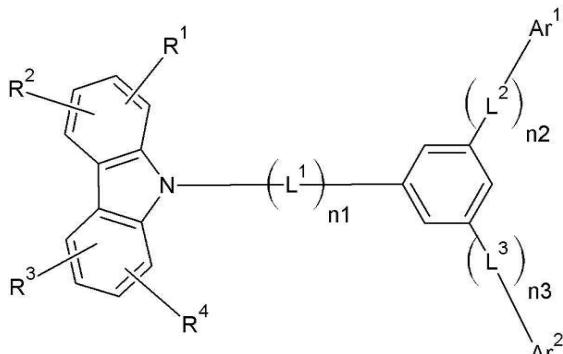
[0026] [화학식 S-1] [화학식 S-2]



[0027] [0028] 상기 화학식 S-1 및 S-2에서, X^2 는 $-NR'^-$, $-O^-$, $-S^-$ 또는 $-CR'R''-$ 이고, X^3 은 $-NR'^-$, $-O^-$ 또는 $-S^-$ 이고, R^5 , R^6 , R' 및 R'' 는 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 아실옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬티울기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤�테로시클로티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이다.

[0029] 본 발명의 다른 일 구현예에서는, 하기 화학식 2로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[0030] [화학식 2]



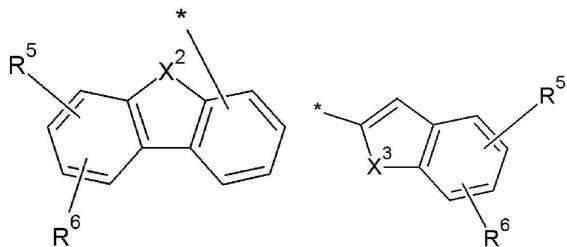
[0031]

[0032] 상기 화학식 2에서, Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 아릴기, 하기 화학식 S-1 또는 S-2이며, 상기 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 어느 하나는 하기 화학식 S-1 또는 S-2이고, L^1 내지 L^3 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고, $n1$ 내지 $n3$ 은 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이고, R^1 내지 R^4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로

겐기, 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 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 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 C20 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이다.

[0033] [화학식 S-1]

[화학식 S-2]



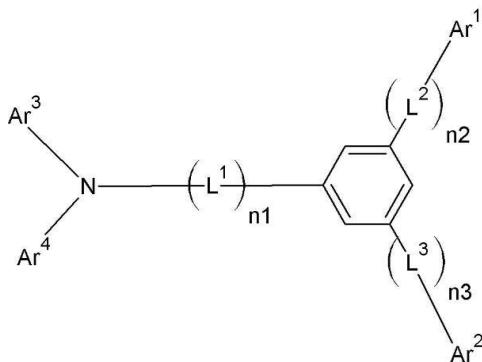
[0034]

상기 화학식 S-1 및 S-2에서, X^2 는 $-NR'-$, $-O-$, $-S-$ 또는 $-CR'R''-$ 이고, X^3 은 $-NR'-$, $-O-$ 또는 $-S-$ 이고, R^5 , R^6 , R' 및 R'' 는 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 헤�테로아릴기, 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 C20 카르보닐아미노기, 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 C20 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤�테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이다.

[0036]

본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 하기 화학식 3으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[0037] [화학식 3]



[0038]

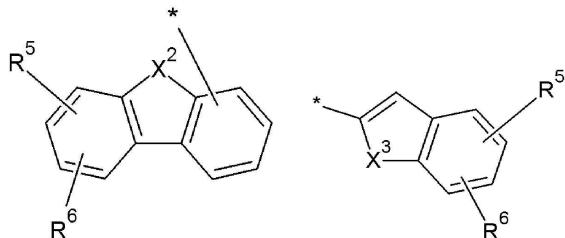
상기 화학식 3에서, Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 아릴기, 하기 화학식 S-1 또는 S-2이며, 상기 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 어느 하나는 하기 화학식 S-1 또는 S-2이고, Ar^3 및 Ar^4 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴기이고, L^1 내지 L^3 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알키

닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고, n1 내지 n3는 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이다.

[0040]

[화학식 S-1]

[화학식 S-2]



[0041]

[0042]

상기 화학식 S-1 및 S-2에서, X²는 -NR'-, -O-, -S- 또는 -CR'R"-이고, X³은 -NR'-, -O- 또는 -S-이고, R⁵, R⁶, R' 및 R"는 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 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 카르보닐아미노기, 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 C20 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이다.

[0043]

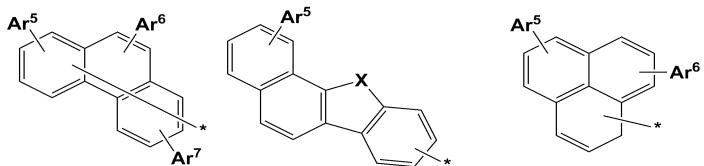
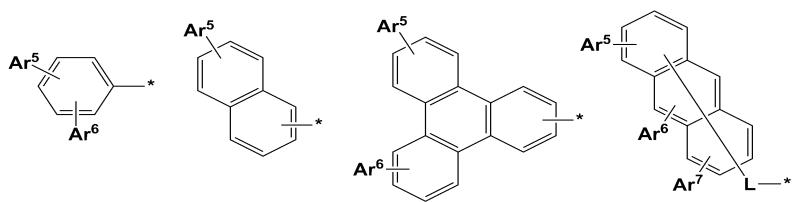
상기 Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로, 상기 화학식 S-1일 수 있다.

[0044]

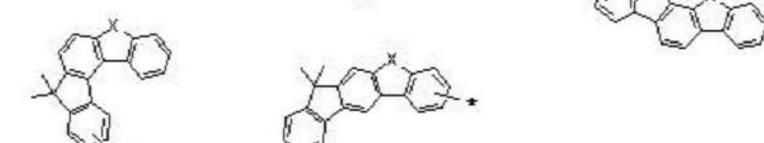
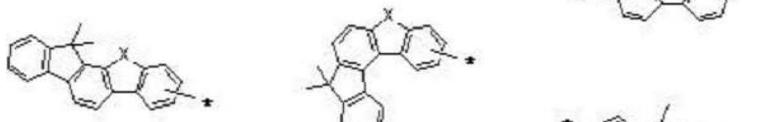
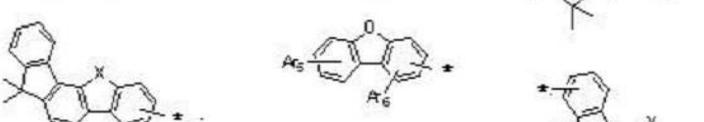
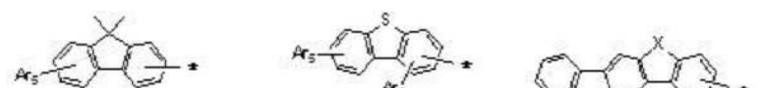
상기 Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로, 상기 화학식 S-2일 수 있다.

[0045]

상기 Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로, 하기 치환기 중 어느 하나일 수 있다.



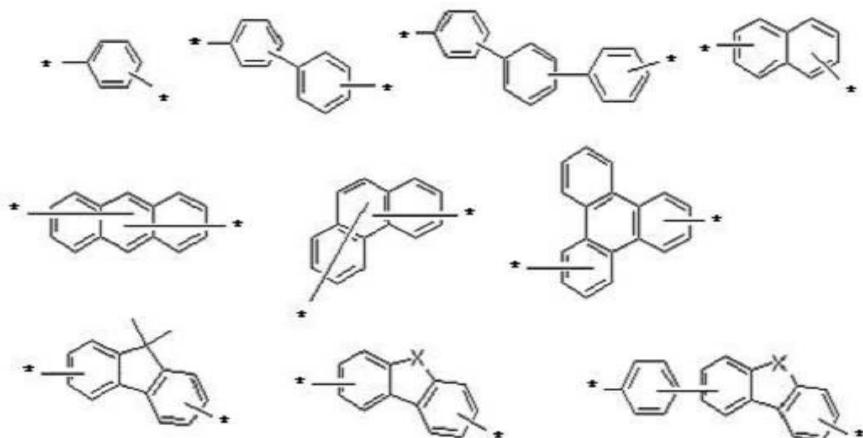
[0046]



[0047]

[0048] 상기 치환기에서, X는 $-O-$ 또는 $-S-$ 이고, Ar^5 내지 Ar^7 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 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 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 C20 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, 또는 이들의 조합이다.

[0049] 상기 L¹ 내지 L³은 서로 독립적으로, 하기 치환기 중 어느 하나일 수 있다.



[0050]

[0051] 상기 치환기에서, X는 -O- 또는 -S-이다.

[0052]

상기 Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로, 고리의 수가 복수인 융합된 고리를 가지는, 치환 또는 비치환된 C14 내지 C30 아릴기일 수 있다.

[0053]

상기 Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기 또는 치환 또는 비치환된 폐난트레닐기일 수 있다.

[0054]

상기 유기광전자소자는, 유기광전소자, 유기발광소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 및 유기메모리소자로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0055]

본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자를 제공한다.

[0056]

상기 유기박막층은 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나일 수 있다.

[0057]

상기 유기광전자소자용 화합물은 정공주입층 또는 정공수송층 내에 포함될 수 있다.

[0058]

본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

발명의 효과

[0059]

상기 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 유기광전자소자는 우수한 전기화학적 및 열적 안정성을 가지고 수명 특성이 우수하며, 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가질 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0060]

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

[0061]

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.

[0062]

본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 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.

[0063] 또한 상기 치환된 할로겐기, 히드록시기, 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.

[0064] 본 명세서에서 "헵테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헵테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

[0065] 본 명세서에서 "이들의 조합"이란 별도의 정의가 없는 한, 둘 이상의 치환기가 연결기로 결합되어 있거나, 둘 이상의 치환기가 축합하여 결합되어 있는 것을 의미한다.

[0066] 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.

[0067] 알킬기는 C1 내지 C20인 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다. 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자가 포함되는 것을 의미하며, 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.

[0068] 상기 알킬기는 구체적인 예를 들어 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 웬틸기, 헥실기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로웬틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.

[0069] "아릴(aryl)기"는 환형인 치환기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 치환기를 의미한하고, 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

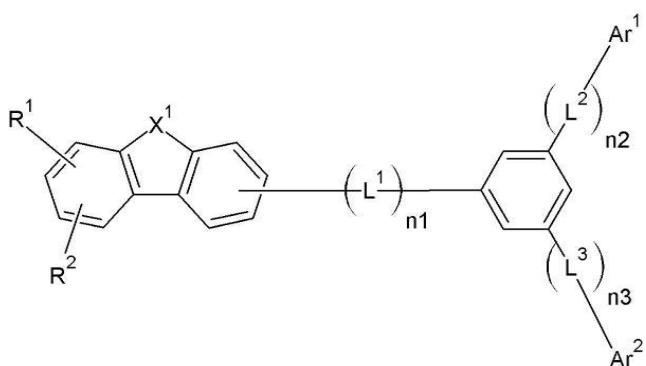
[0070] "헵테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헵테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헵테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헵테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.

[0071] 본 명세서에서, 정공 특성이란, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다. 보다 구체적으로, 전자를 밀어내는 특성과도 유사할 수 있다.

[0072] 또한 전자 특성이란, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다. 보다 구체적으로 전자를 당기는 특성과도 유사할 수 있다.

[0074] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공할 수 있다.

[화학식 1]



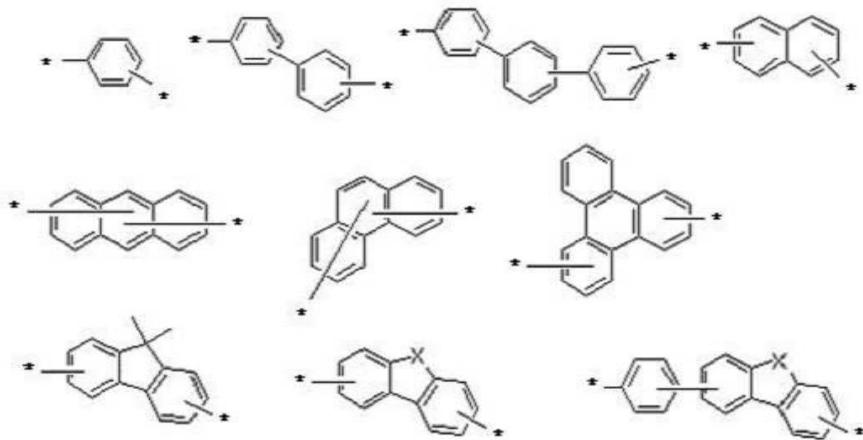
[0076] [0077] 상기 화학식 1에서, Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헵테로아릴기이고, L¹ 내지 L³은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환

된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고, n1 내지 n3는 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이고, X¹은 -NR'-, -O-, -S- 또는 -CR'R"-이고, R¹, R², R' 및 R"는 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 헤�테로아릴기, 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 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬티울기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤�테로시클로티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이다.

- [0078] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 카바졸계 치환기에 결합된 치환된 페닐기를 포함하는 코어 구조를 가질 수 있다.
- [0079] 보다 구체적으로, 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물과 같이 카바졸계 치환기와 페닐기가 연결될 경우, 낮은 HOMO준위를 가지는 화합물을 얻을 수 있다. 이렇게 낮은 HOMO준위를 가지는 화합물은 인광블루 유기광전자소자 구현에 요구되고 있다.
- [0080] 또한 카바졸계 치환기와 페닐기가 파이결합의 끊어지지 않고 연결되어, 정공 또는 전자의 흐름이 더 유기적으로 일어날 수 있다. 또한, 상기 화합물은 전기화학적 및 열적 안정성이 향상될 수 있다.
- [0081] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 유기광전자소자용 화합물은 코어 부분과 코어 부분에 치환된 치환기에 다양한 또 다른 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드 갭을 갖는 화합물이 될 수 있다.
- [0082] 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.
- [0083] 보다 구체적으로, 본 발명의 일 구현예에서, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및/또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴기는, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 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 페릴레닐기, 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 옥사졸일기, 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 벤조 티오페닐기, 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.
- [0084] 또한, 상기 L¹ 및 L²를 선택적으로 조절하여 화합물 전체의 공액(conjugation) 길이를 결정할 수 있으며, 이로부터 삼중항(triplet) 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다. 이를 통해 유기광전자소자에서 필요로 하는 재료의 특성을 구현해 낼 수 있다. 또한, 올소, 파라, 메타의 결합위치 변경을 통해서도 삼중항 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다.
- [0085] 상기 L¹ 내지 L³의 구체적인 예로는 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트릴렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 p-

터페닐기, 치환 또는 비치환된 m -터페닐기, 치환 또는 비치환된 페닐렌닐기 등이다.

[0086] 보다 구체적으로, 상기 L^1 내지 L^3 은 서로 독립적으로, 하기 치환기 중 어느 하나일 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

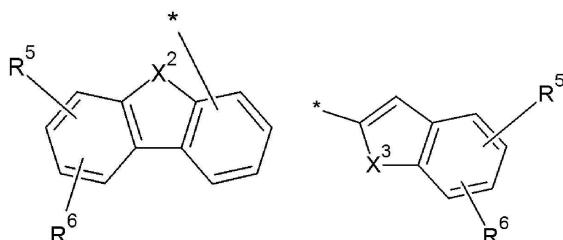


[0087] [0088] 상기 치환기에서, X는 $-O-$ 또는 $-S-$ 이다.

[0089] 보다 구체적으로, 상기 L^1 내지 L^3 은 서로 독립적으로, 페닐렌기일 수 있다. 상기 L^1 내지 L^3 가 페닐렌기인 경우, 상기 페닐렌기를 기준으로 양측 코어 부분은 오쏘, 메타 또는 파라로 결합될 수 있다.

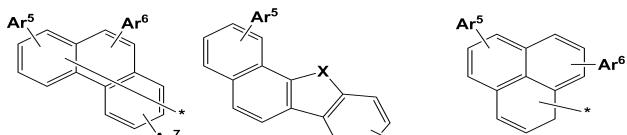
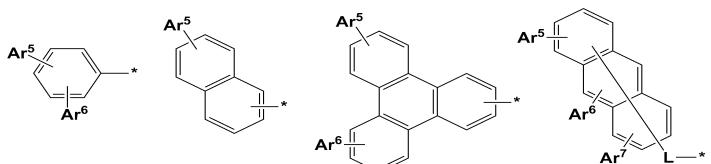
[0090] 상기 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 어느 하나는 하기 화학식 S-1 또는 S-2일 수 있다. 상기 화학식 S-1 및 S-2는 공통적으로 비공유전자쌍을 가지는 화합물로 일반적인 고리화합물에 비해 높은 전공 또는 전자 이동도를 가진다. 이를 통해 고효율 및 저전압 유기광전자소자를 구현할 수 있다.

[0091] [화학식 S-1] [화학식 S-2]

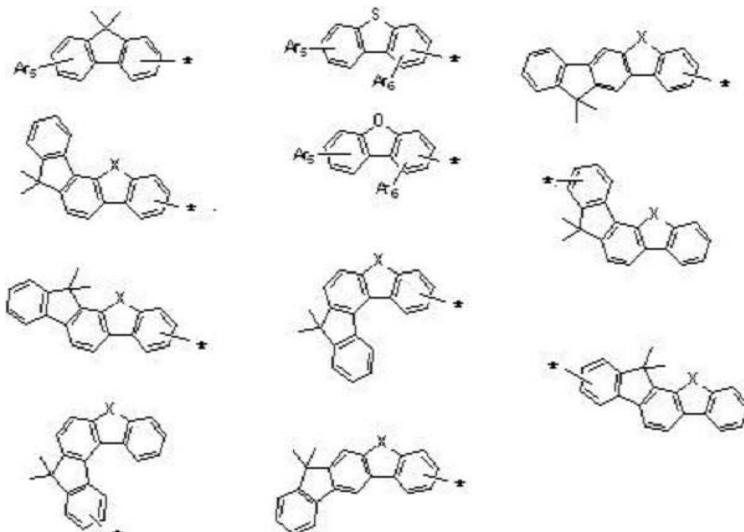


[0092] [0093] 상기 화학식 S-1 및 S-2에서, X^2 는 $-NR'-'$, $-O-$, $-S-$ 또는 $-CR'R''-$ 이고, X^3 은 $-NR'-'$, $-O-$ 또는 $-S-$ 이고, R^5 , R^6 , R' 및 R'' 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 페로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 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 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실옥시기, 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 C20 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이다.

[0094] 보다 구체적으로, 상기 Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로, 하기 치환기 중 어느 하나일 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.



[0095]



[0096]

[0097] 상기 치환기에서, X 는 $-0-$ 또는 $-S-$ 이고, Ar^5 내지 Ar^7 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 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 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 C20 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, 또는 이들의 조합이다.

[0098] 보다 구체적으로, Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C14 내지 C30 아릴기일 수 있다.

[0099] 보다 구체적으로, Ar^1 및 Ar^2 에 치환기가 없거나 너무 작은 치환기가 붙을 경우 카바졸계 치환기에 정공 또는 전자의 이동이 몰려 화합물이 불안정하게 된다.

[0100] 이는 이 화합물을 이용한 유기광전자소자의 수명에도 좋지 않은 영향을 미칠 수 있다.

[0101] 또한 상기 Ar^1 및 Ar^2 에 분자량이 너무 크거나 덩치가 큰 치환기가 치환될 경우 증착 소재로서 열안정성 문제가 발생한다. 일반적으로 분자량이 큰 화합물의 경우 높은 녹는점을 가지게 되는데 이때문에 증착온도 또한 함께 상승하여 화합물 증착시 높은 열에 장시간 노출될 수 밖에 없어 안정성에 문제가 생길 수 있다.

[0102] 상기 치환 또는 비치환된 C14 내지 C30 아릴기는 적당한 치환기의 크기이며 이 치환기는 화합물 내에서 전자의 분포를 고르게 분포할 수 있게 해주며, 낮은 분자량으로 유기광전자소자 수명을 개선시킬 수 있다.

[0103] 보다 구체적으로, 상기 Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로, 고리의 수가 복수인 융합된 고리를 가지는, 치환 또는 비

치환된 C14 내지 C30 아릴기일 수 있다.

[0104] 상기 복수의 융합된 고리는 공명구조로 인해 전자를 끌어오는 특징(withdraw group)을 가지는데 이러한 점이 화합물 내 카바졸에 너무 많은 전자 또는 정공의 흐름이 집중되는 점을 막아줄 수 있다.

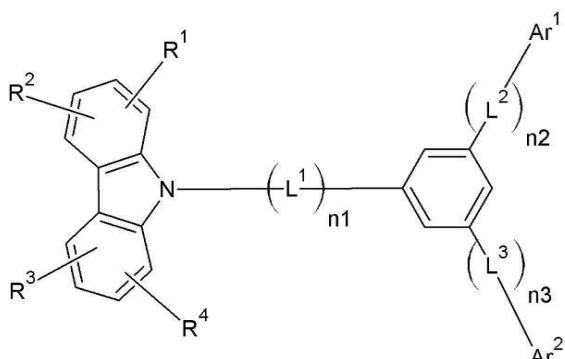
[0105] 일반적으로, 카바졸계 치환기가 정공 또는 전자의 흐름이 좋은 치환기로 알려져 있으나 이 부분에만 한정되어 정공 또는 전자의 흐름이 흐르게 되면 과부하가 걸려 화합물이 깨질 수 있다. 이에 복수의 융합된 고리가 Ar¹ 및 Ar²에 치환되어 이를 보완해 주게되면 융합된 고리 또한 정공 또는 전자수송을 하게 되면서 고효율, 저전압 고수명 소자를 기대할 수 있다.

[0106] 보다 구체적인 예를 들어, 상기 Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기 또는 치환 또는 비치환된 페난트레닐기일 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0107] 상기 X¹은 -NR'-일 수 있다. 상기 X¹가 -NR'-이면 인광블루소자의 경우 보다 낮은 HOMO준위를 가지는 화합물을 제조할 수 있다.

[0109] 본 발명의 다른 일 구현예에서는, 하기 화학식 2로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다. 하기 화학식 2와 같이 카바졸 N방향으로 페닐기를 결합할 경우 낮은 HOMO준위를 가지는 화합물을 만들 수 있다. 또한, 하기 화학식 2로 표시되는 화합물은 낮은 분자량을 가지기 때문에 다른 치환기에 정공 또는 전자 수송 능력이 뛰어난 치환기를 도입하기가 용이하다.

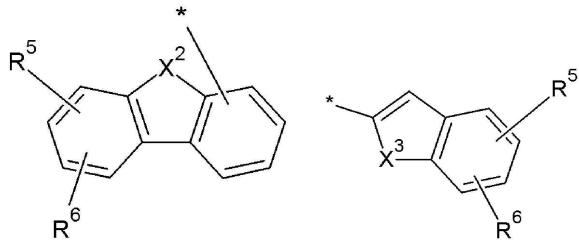
[화학식 2]



[0111] [0112] 상기 화학식 2에서, Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 아릴기, 하기 화학식 S-1 또는 S-2이며, 상기 Ar¹ 및 Ar² 중 적어도 어느 하나는 하기 화학식 S-1 또는 S-2이고, L¹ 내지 L³은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고, n1 내지 n3은 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이고, R¹ 내지 R⁴는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 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 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬티울기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로로티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이다.

[화학식 S-1]

[화학식 S-2]



[0114]

[0115]

상기 화학식 S-1 및 S-2에서, X^2 는 $-NR'-$, $-O-$, $-S-$ 또는 $-CR'R''-$ 이고, X^3 은 $-NR'-$, $-O-$ 또는 $-S-$ 이고, R^5 , R^6 , R' 및 R'' 는 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 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이다.

[0116]

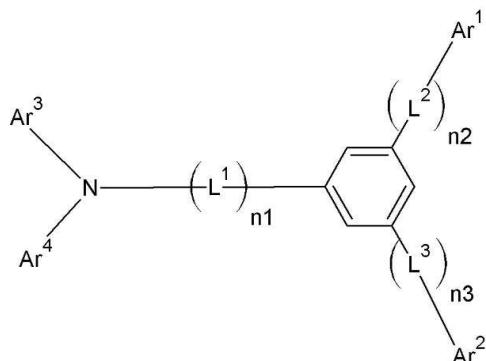
상기 화학식 2에서, Ar^1 , Ar^2 및 L^1 내지 L^3 에 대한 설명은 모순되지 않는 범위에서 상기 화학식 1에서와 동일하기 때문에 이를 생략하도록 한다.

[0118]

본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 하기 화학식 3으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다. 하기 화학식 3과 같은 구조의 화합물은 소자에 적용 시 소자의 구동 전압의 상승을 막아줄 수 있다.

[0119]

[화학식 3]



[0120]

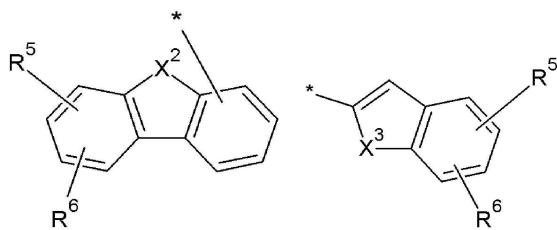
[0121]

상기 화학식 3에서, Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 아릴기, 하기 화학식 S-1 또는 S-2이며, 상기 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 어느 하나는 하기 화학식 S-1 또는 S-2이고, Ar^3 및 Ar^4 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L^1 내지 L^3 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알카닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고, $n1$ 내지 $n3$ 는 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이다.

[0122]

[화학식 S-1]

[화학식 S-2]

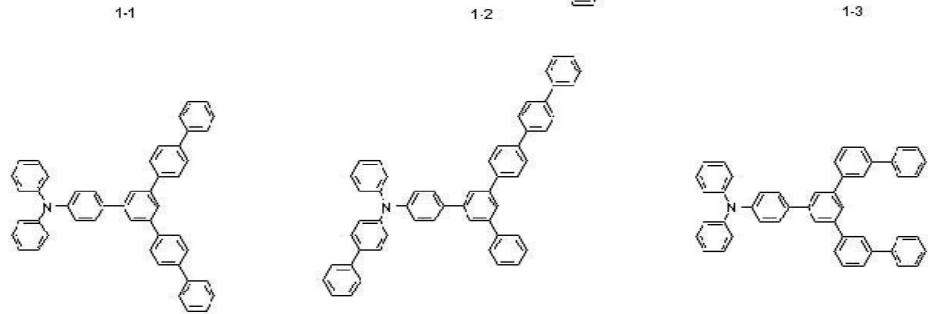
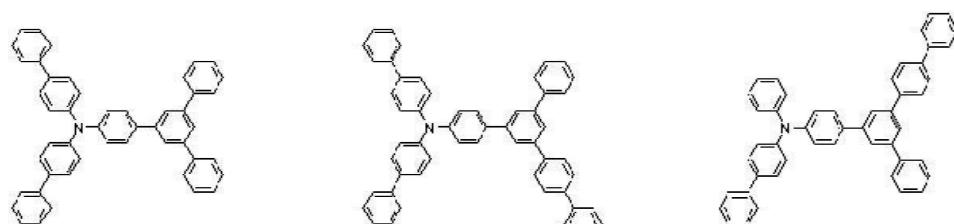


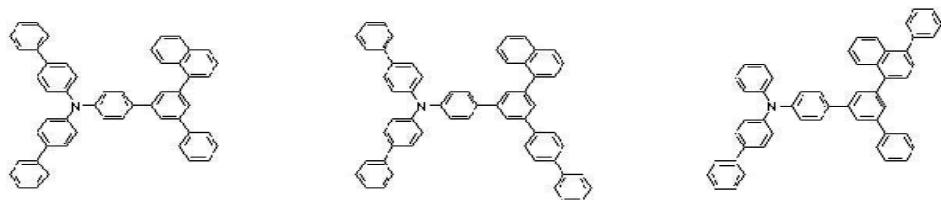
[0124] 상기 화학식 S-1 및 S-2에서, X^2 는 $-NR'-$, $-O-$, $-S-$ 또는 $-CR'R''-$ 이고, X^3 은 $-NR'-$, $-O-$ 또는 $-S-$ 이고, R^5 , R^6 , R' 및 R'' 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 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 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 카르보닐아미노기, 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 C20 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이다.

[0125] 상기 화학식 3에서, Ar^1 , Ar^2 및 L^1 내지 L^3 에 대한 설명은 모순되지 않는 범위에서 상기 화학식 1에서와 동일하기 때문에 이를 생략하도록 한다.

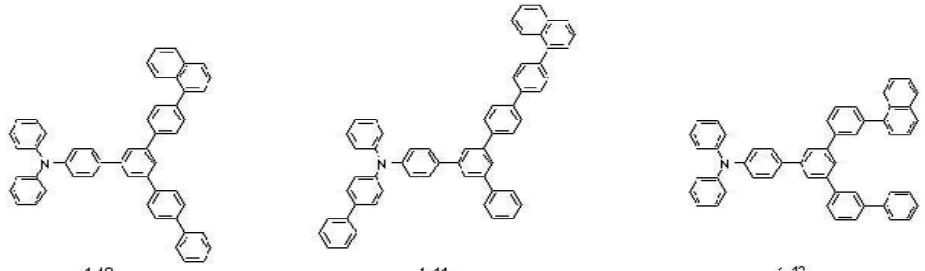
[0126] 상기 화학식 3에서, 상기 Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로, 상기 화학식 S-1일 수 있거나, 상기 Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로, 상기 화학식 S-2일 수 있다. 각각의 경우, S-1과 S-2는 공통적으로 비공유전자쌍을 가지는 화합물로 일반적인 고리화합물에 비해 높은 전공 또는 전자 이동도를 가진다. 이를 통해 고효율 및 저전압 유기광전자소자를 구현할 수 있다.

[0127] 보다 구체적인 예를 들어, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물은 하기와 같다. 다만, 이는 예시일 뿐이다.

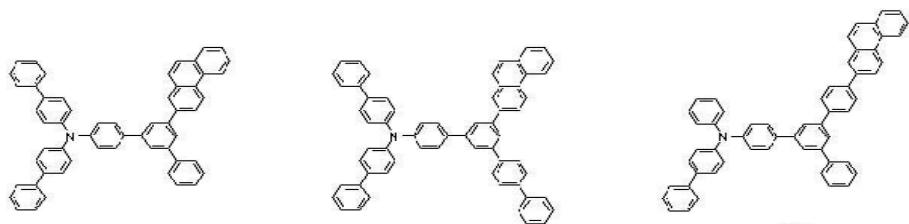




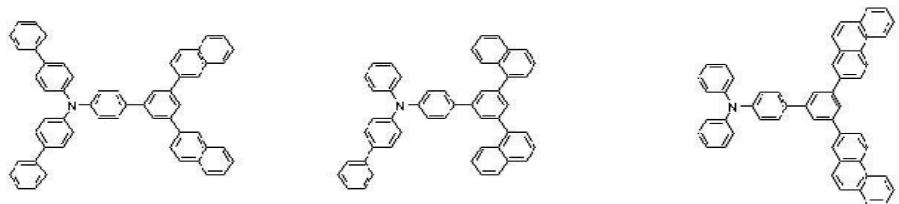
[0130]



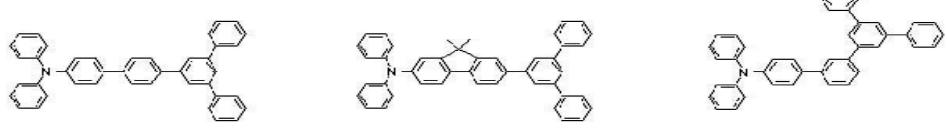
[0131]



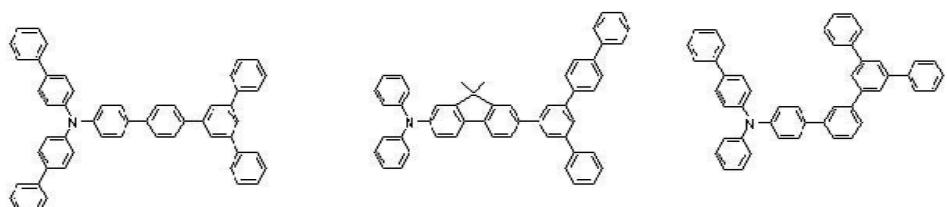
[0132]



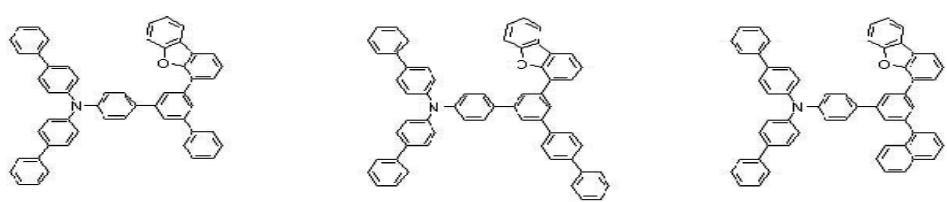
[0133]



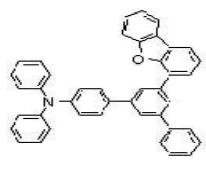
[0134]



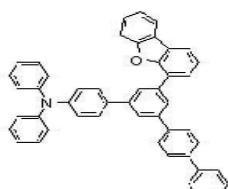
[0135]



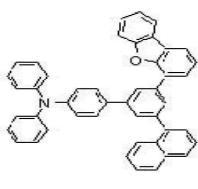
[0136]



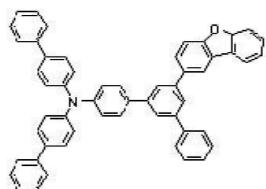
[0137]



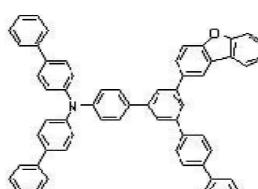
2-5



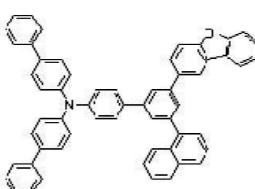
2-6



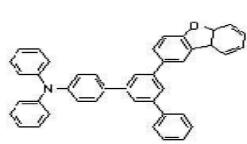
[0138]



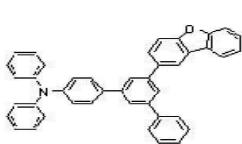
2-8



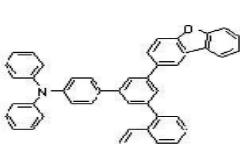
2-9



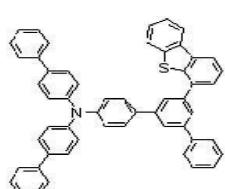
[0139]



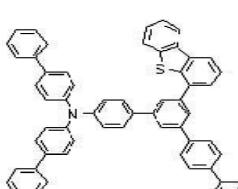
2-11



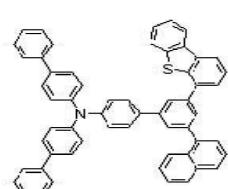
2-12



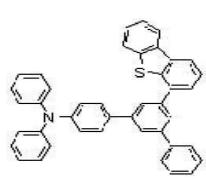
[0140]



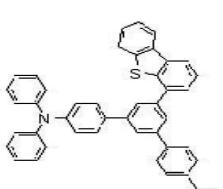
2-14



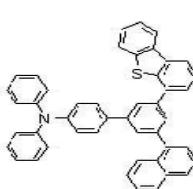
2-15



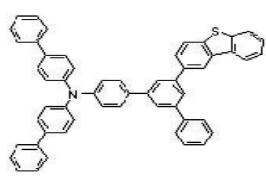
[0141]



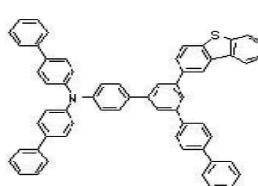
2-17



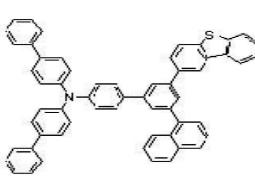
2-18



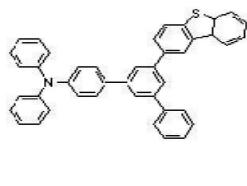
[0142]



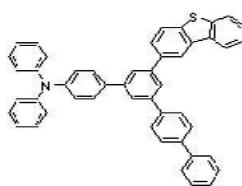
2-20



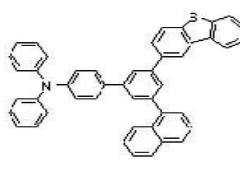
2-21



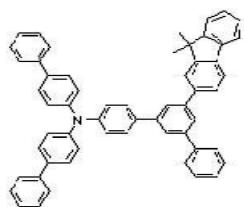
[0143]



2-23

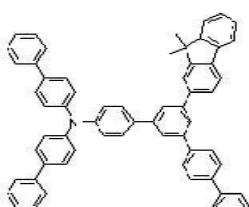


2-24

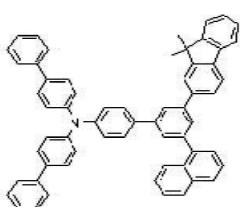


[0144]

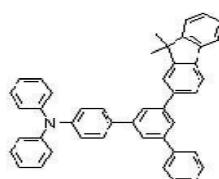
2-25



2-26

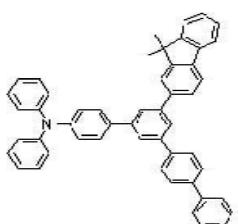


2-27

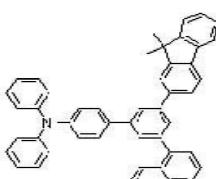


[0145]

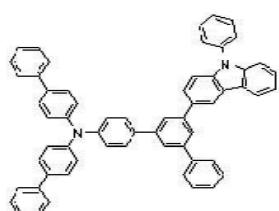
2-28



2-29

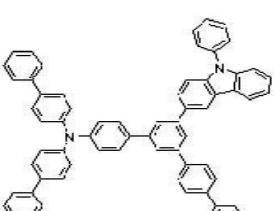


2-30

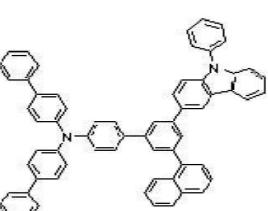


[0146]

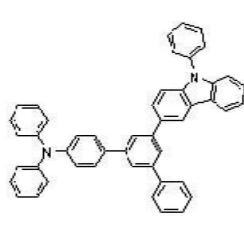
2-31



2-32

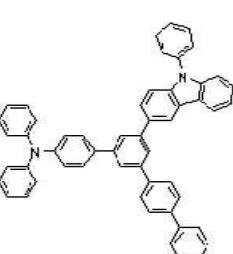


2-33

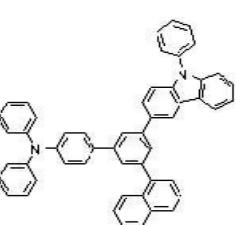


[0147]

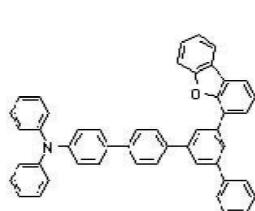
2-34



2-35

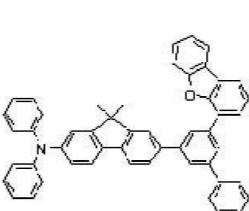


2-36

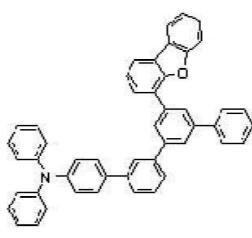


[0148]

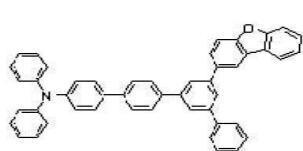
2-37



2-38

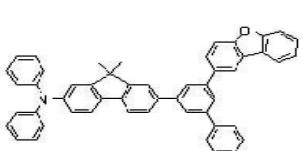


2-39

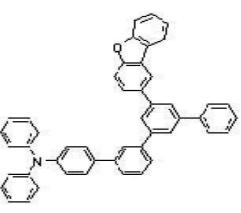


[0149]

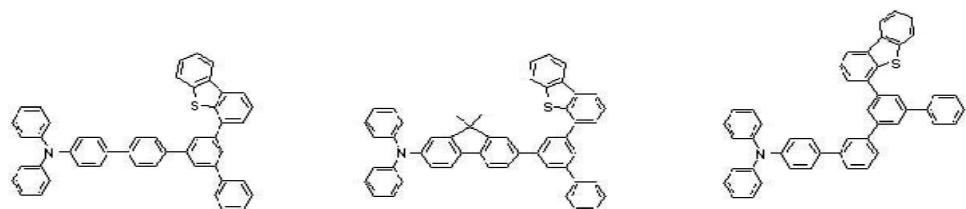
2-40



2-41



2-42

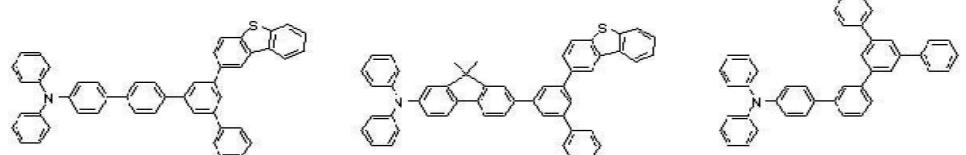


[0150]

2-43

2-44

2-45

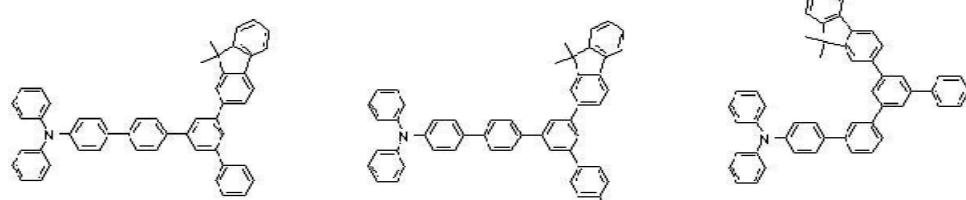


[0151]

2-46

2-47

2-48

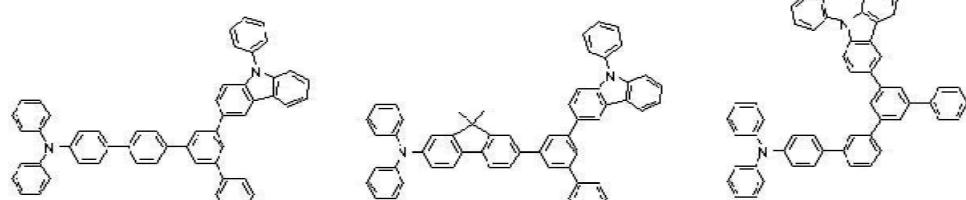


[0152]

2-49

2-50

2-51

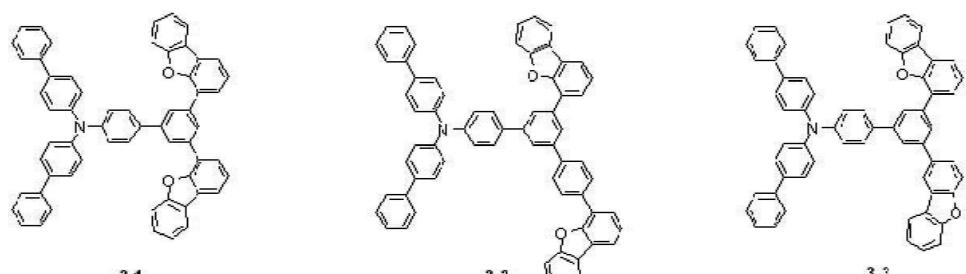


[0153]

2-52

2-53

2-54

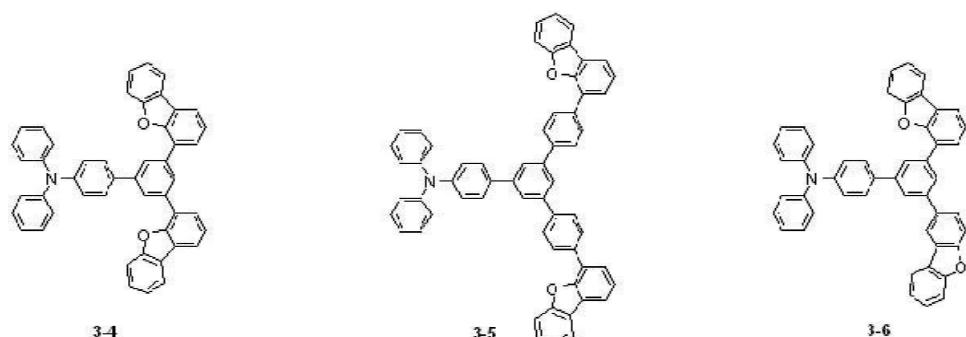


[0154]

3-1

3-2

3-3

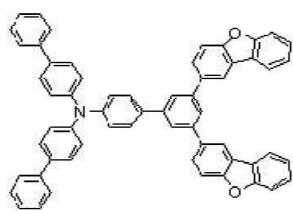


[0155]

3-4

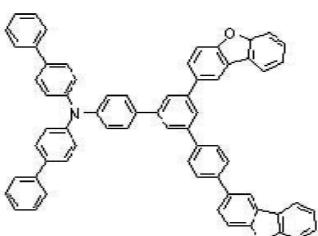
3-5

3-6

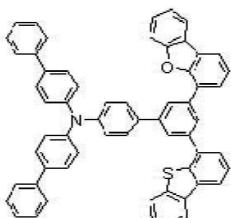


[0156]

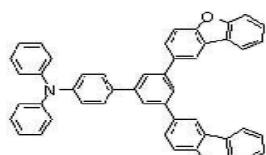
3-7



3-8

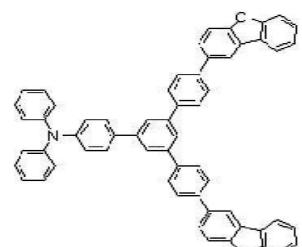


3-9

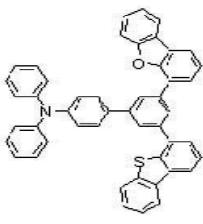


[0157]

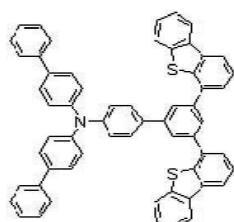
3-10



3-11

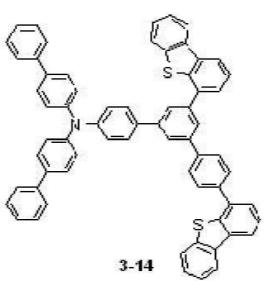


3-12

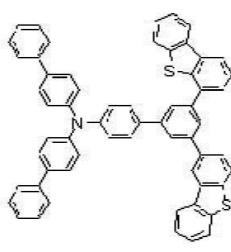


[0158]

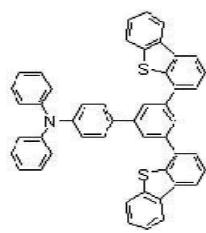
3-13



3-14

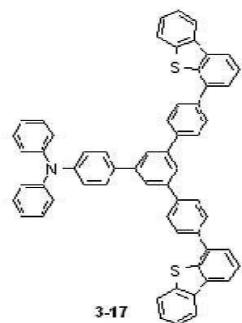


3-15

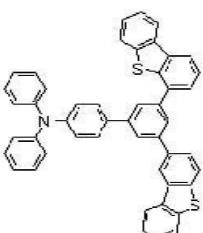


[0159]

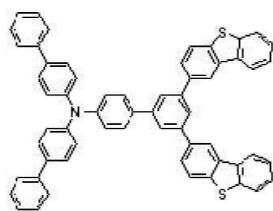
3-16



3-17

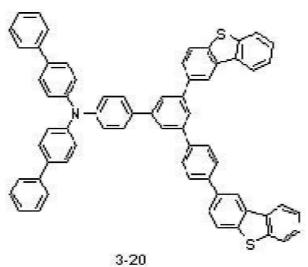


3-18

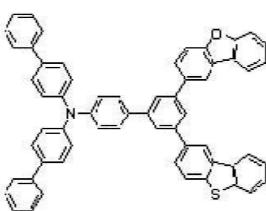


[0160]

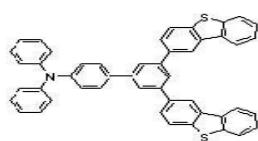
3-19



3-20

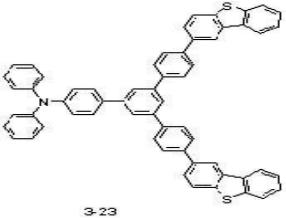


3-21

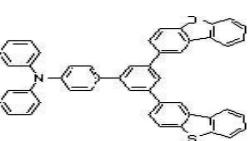


[0161]

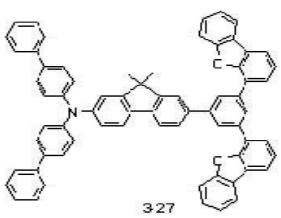
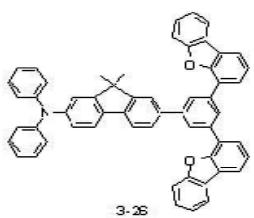
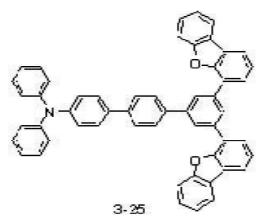
3-22



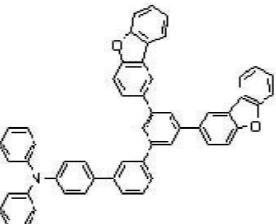
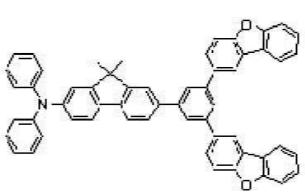
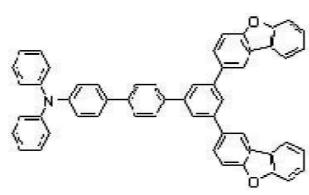
3-23



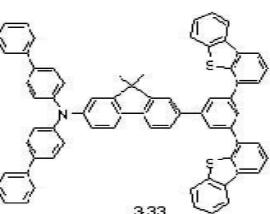
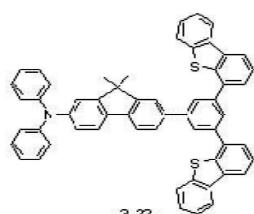
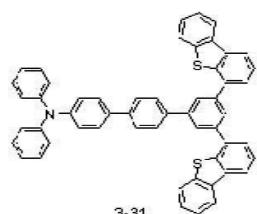
3-24



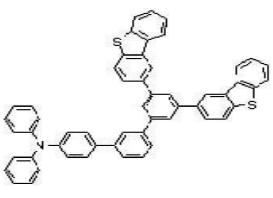
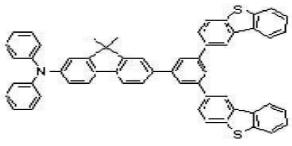
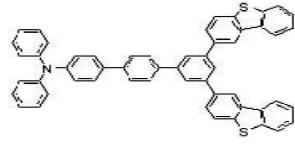
[0162]



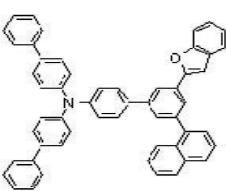
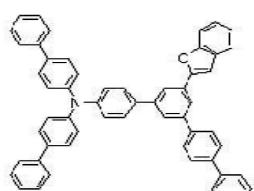
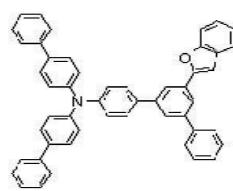
[0163]



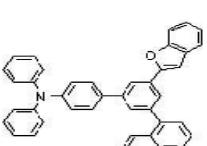
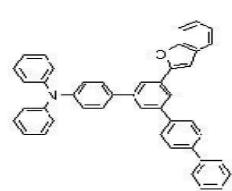
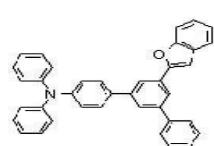
[0164]



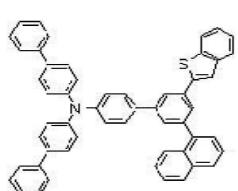
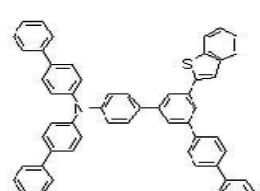
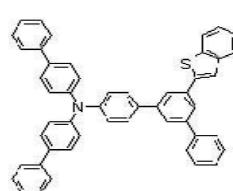
[0165]



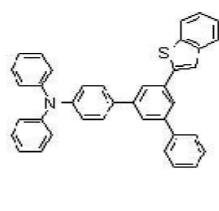
[0166]



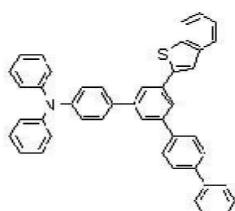
[0167]



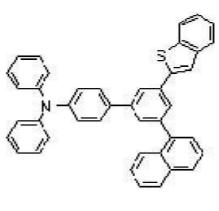
[0168]



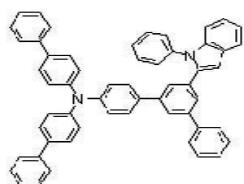
[0169]



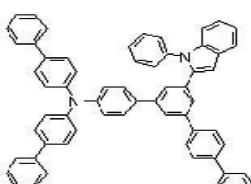
4-11



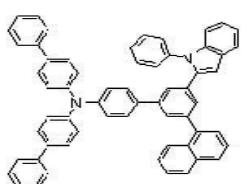
4-12



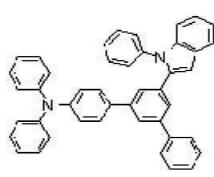
[0170]



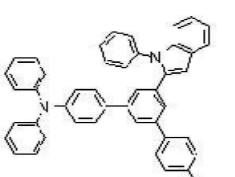
4-14



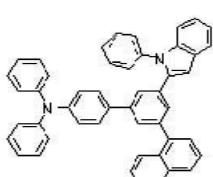
4-15



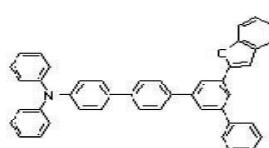
[0171]



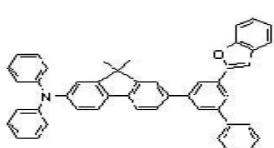
4-17



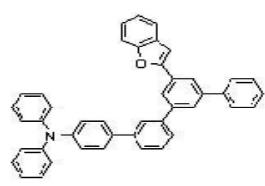
4-18



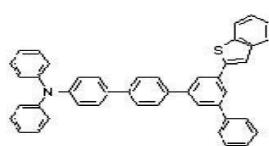
[0172]



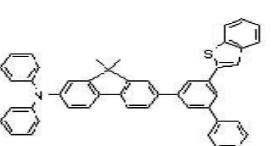
4-20



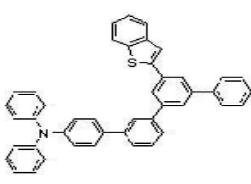
4-21



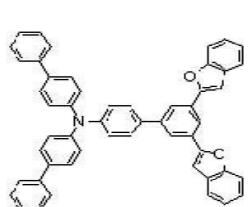
[0173]



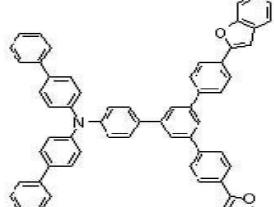
4-23



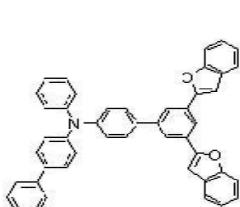
4-24



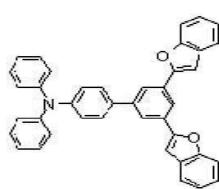
[0174]



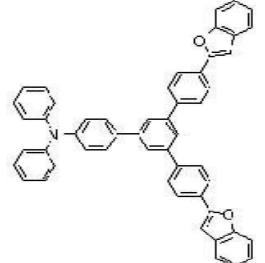
5-2



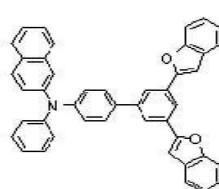
5-3



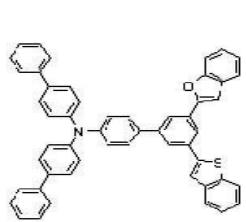
[0175]



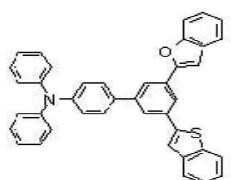
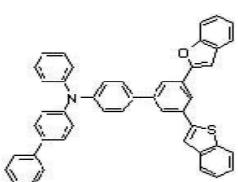
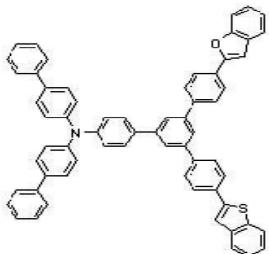
5-5



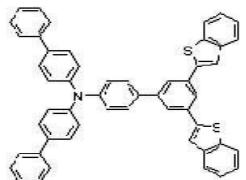
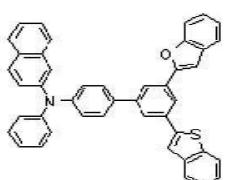
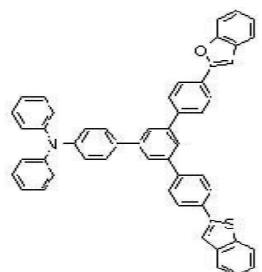
5-6



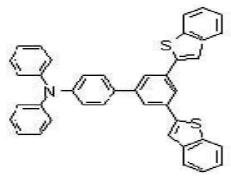
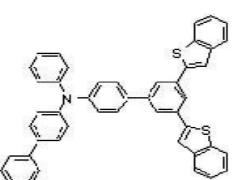
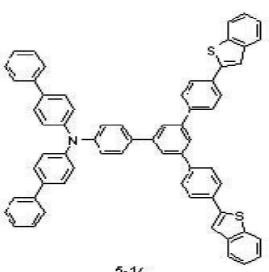
[0176]



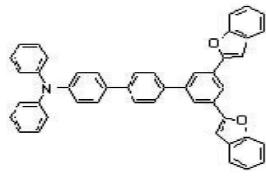
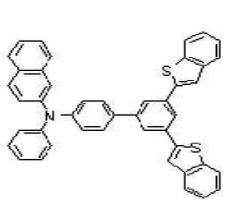
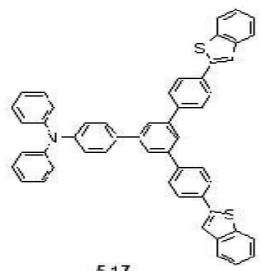
[0177]



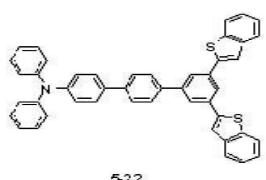
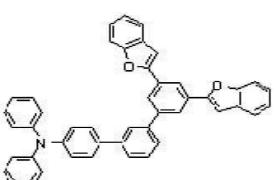
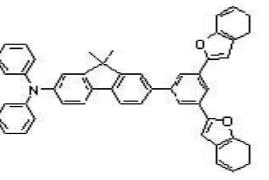
[0178]



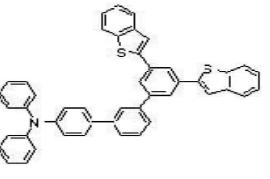
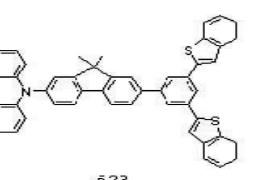
[0179]

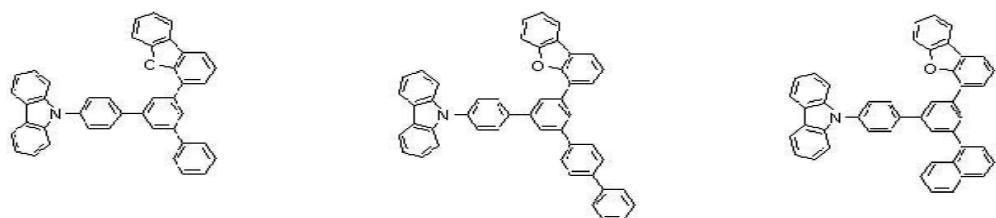


[0180]

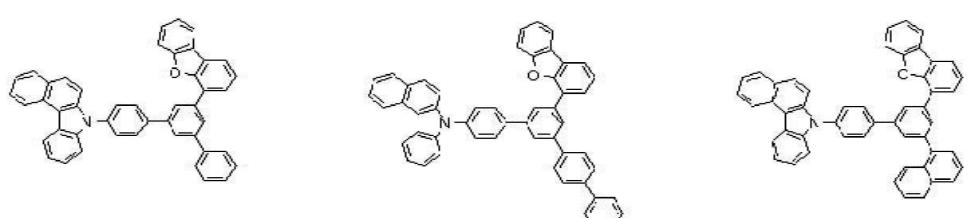


[0181]

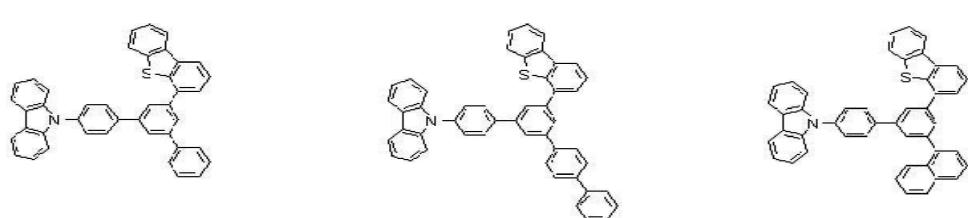




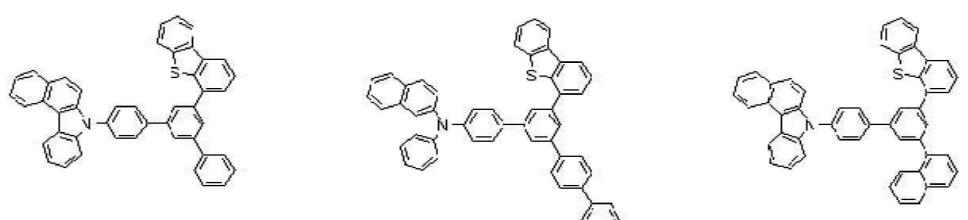
[0182]



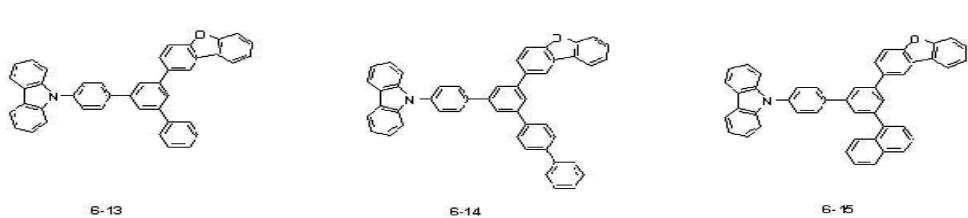
[0183]



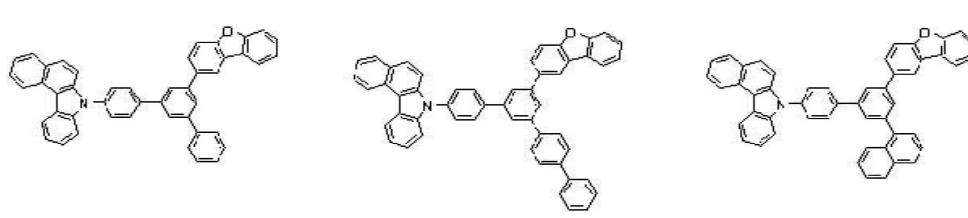
[0184]



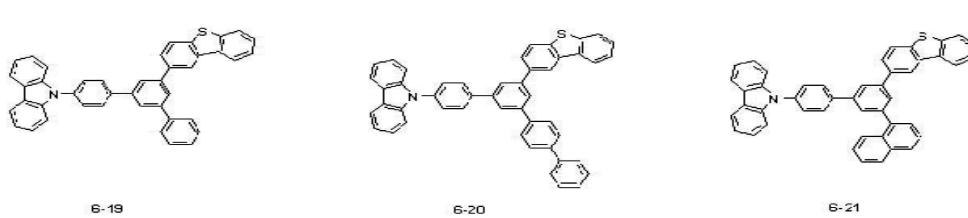
[0185]



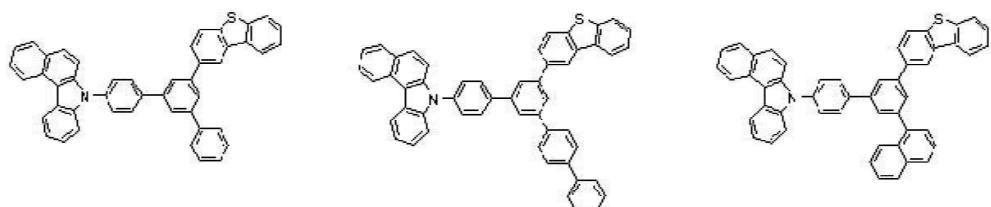
[0186]



[0187]



[0188]

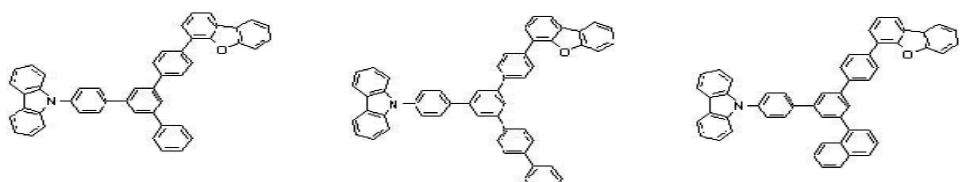


[0189]

6-22

6-23

6-24

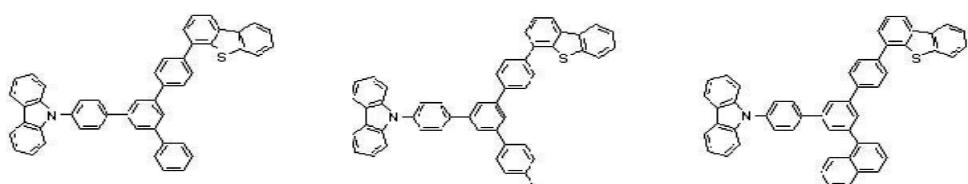


[0190]

6-25

6-26

6-27

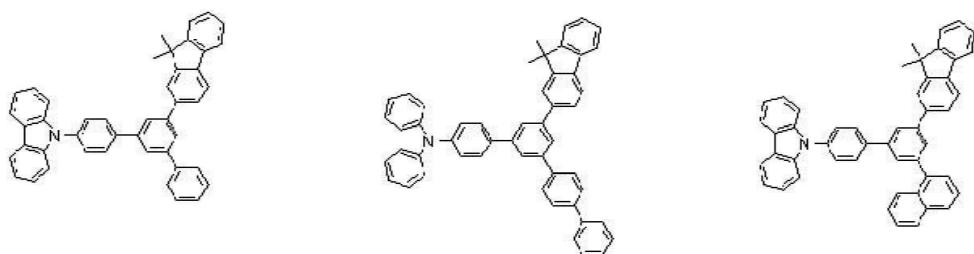


[0191]

6-28

6-29

6-30

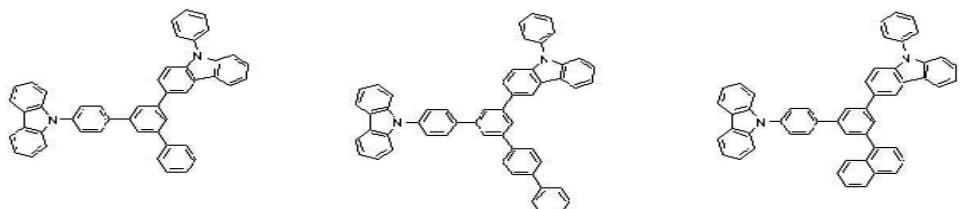


[0192]

6-31

6-32

6-33

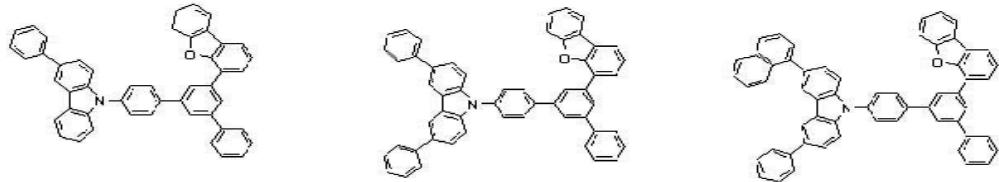


[0193]

6-34

6-35

6-36

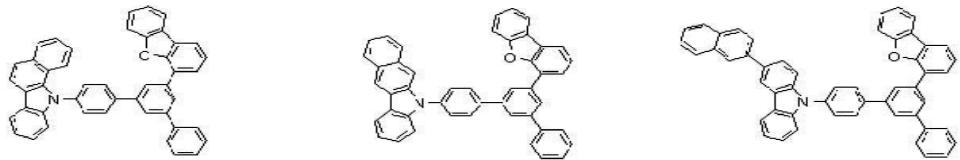


[0194]

6-37

6-38

6-39

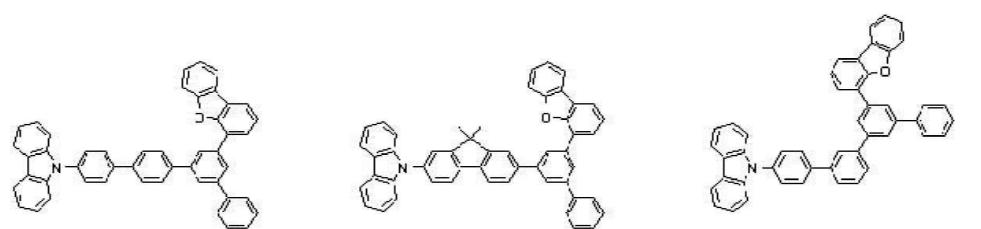


[0195]

6-40

6-41

6-42

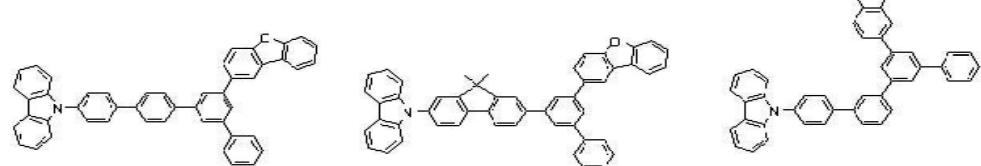


[0196]

6-43

6-44

6-45

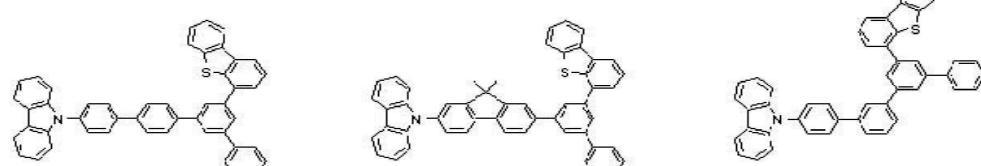


[0197]

6-46

6-47

6-48

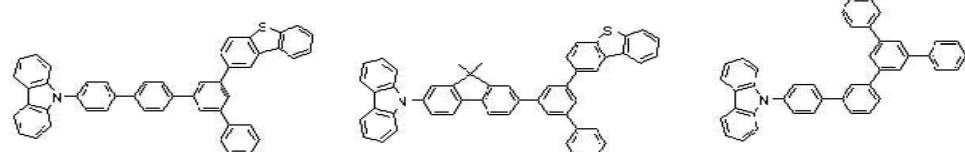


[0198]

6-49

6-50

6-51

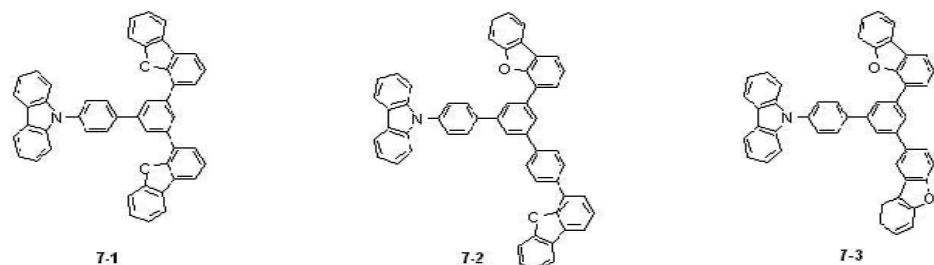


[0199]

6-52

6-53

6-54

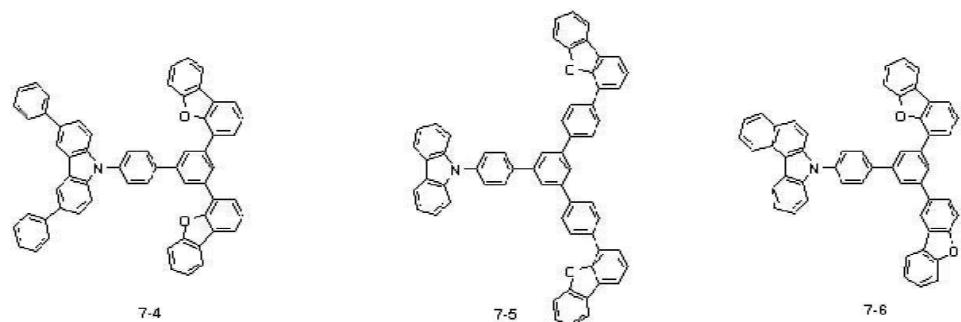


[0200]

7-1

7-2

7-3

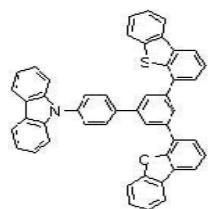


[0201]

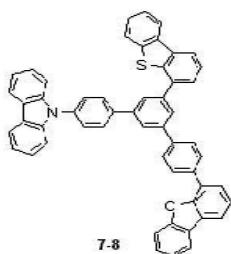
7-4

7-5

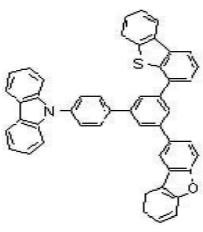
7-6



7-7

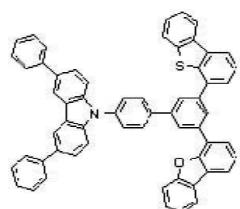


7-8

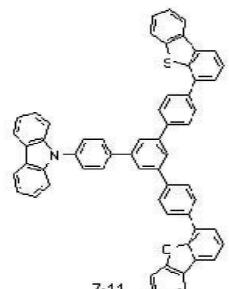


7-9

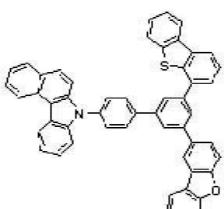
[0202]



7-10

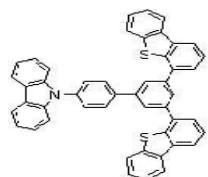


7-11

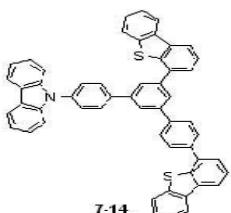


7-12

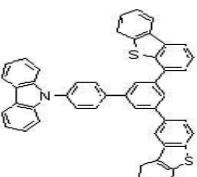
[0203]



7-13

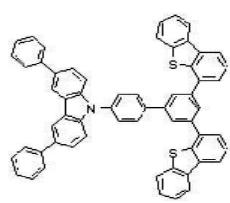


7-14

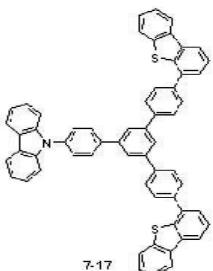


7-15

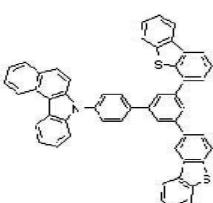
[0204]



7-16

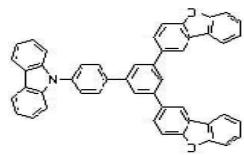


7-17

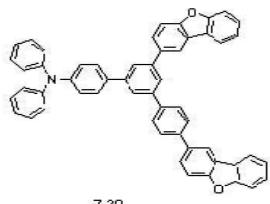


7-18

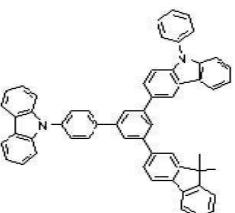
[0205]



7-19

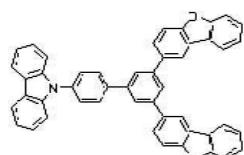


7-20

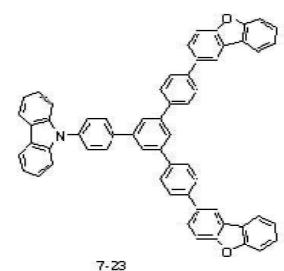


7-21

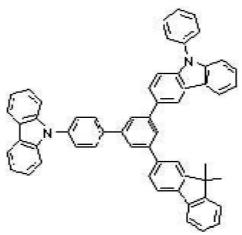
[0206]



7-22

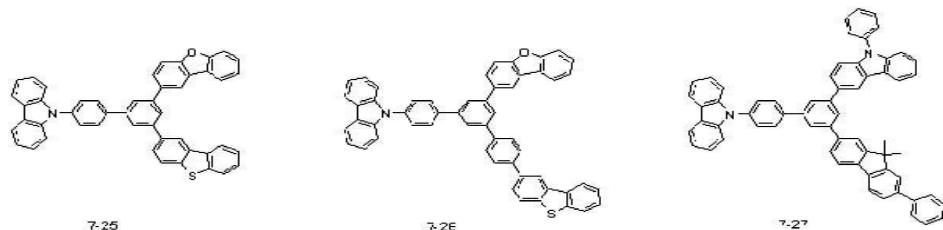


7-23

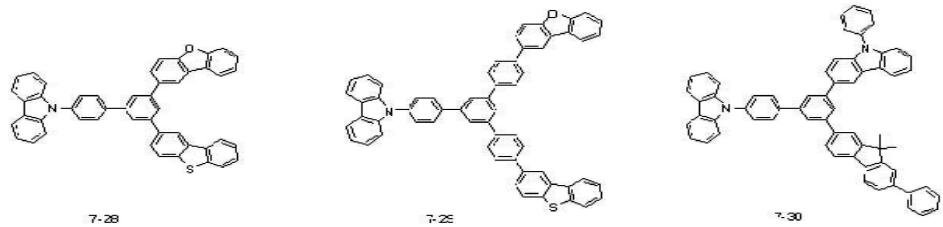


7-24

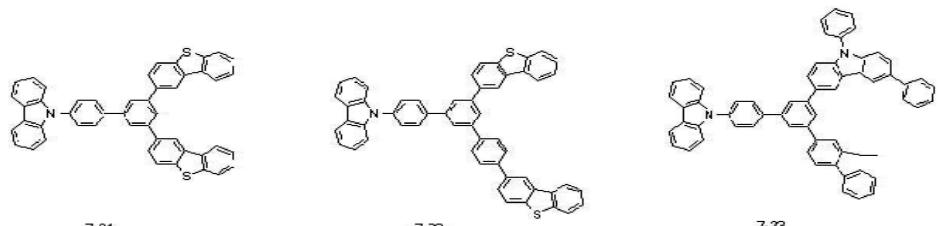
[0207]



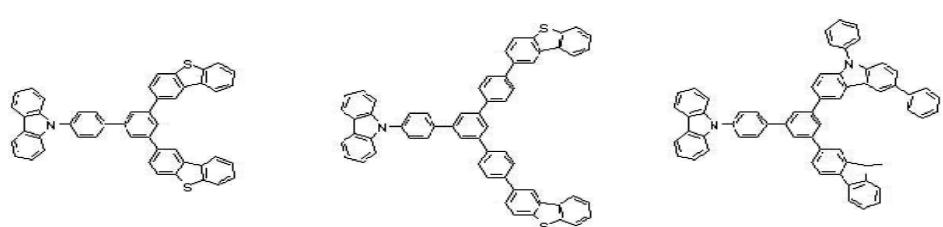
[0208]



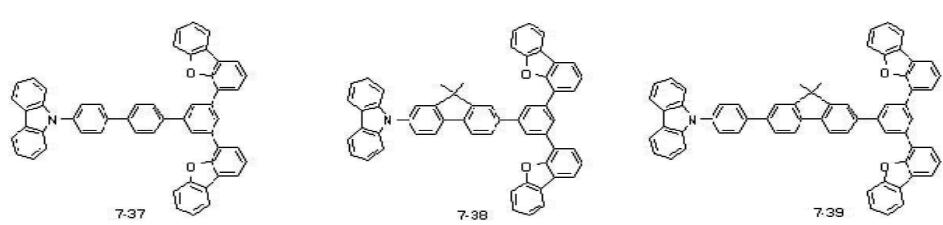
[0209]



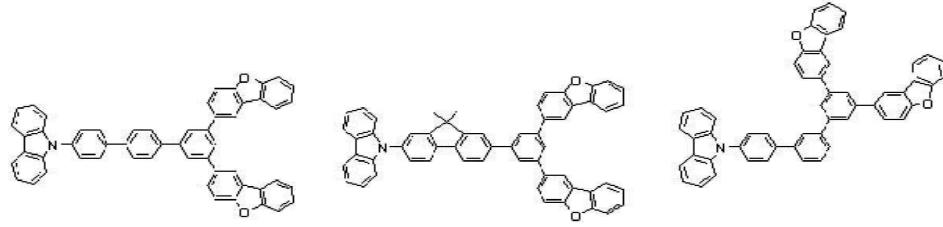
[0210]



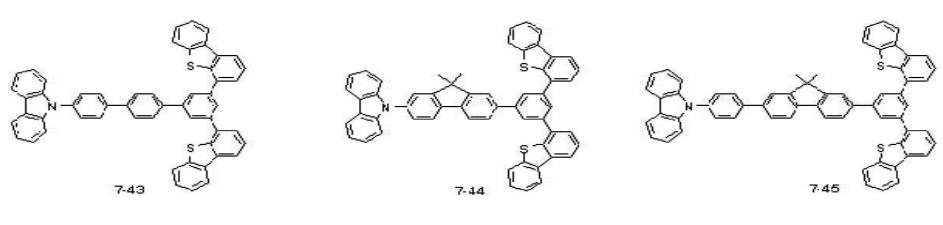
[0211]



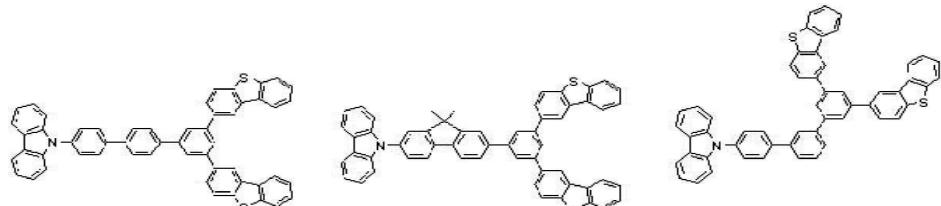
[0212]



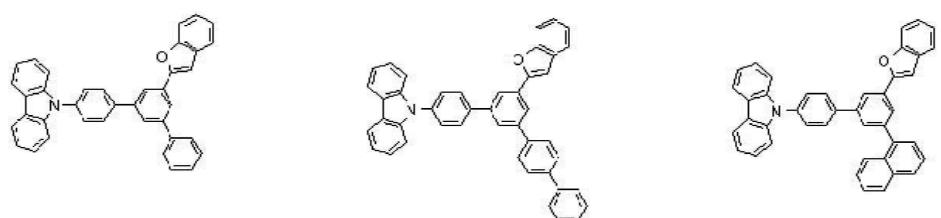
[0213]



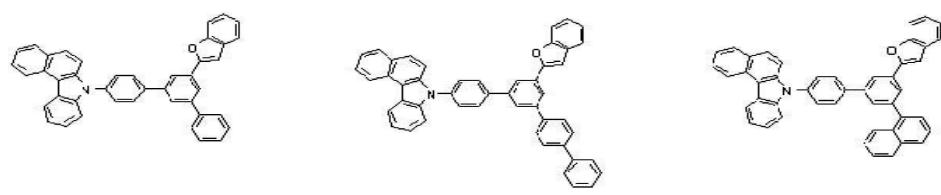
[0214]



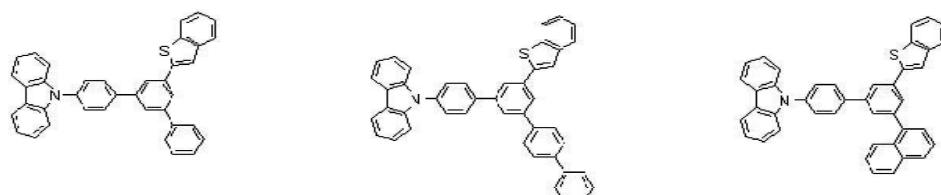
[0215]



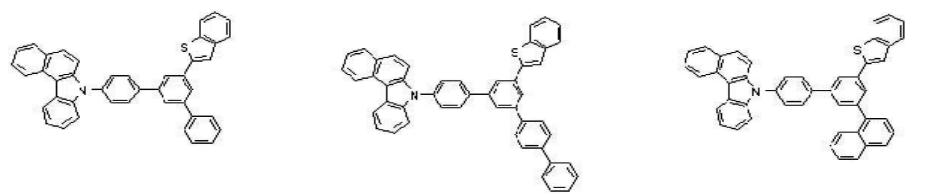
[0216]



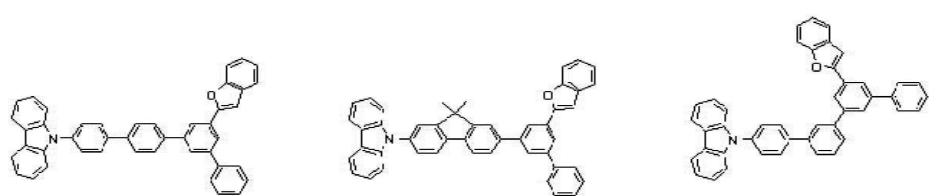
[0217]



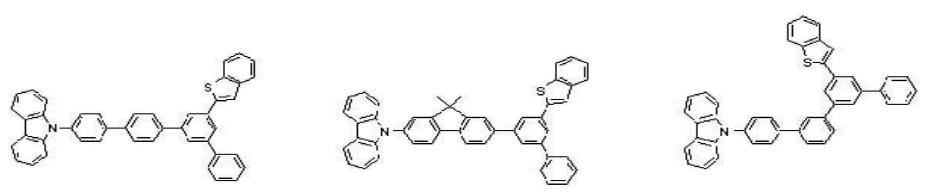
[0218]



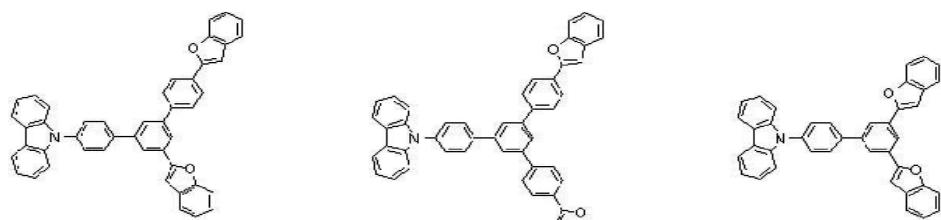
[0219]



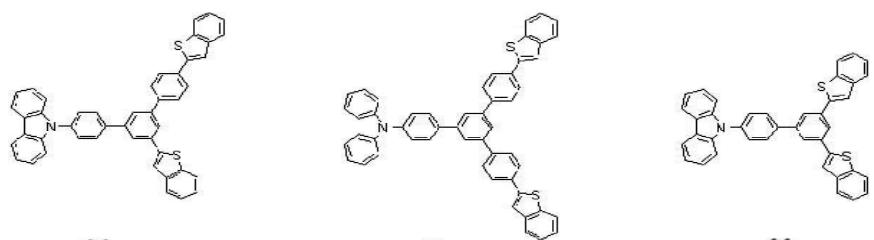
[0220]



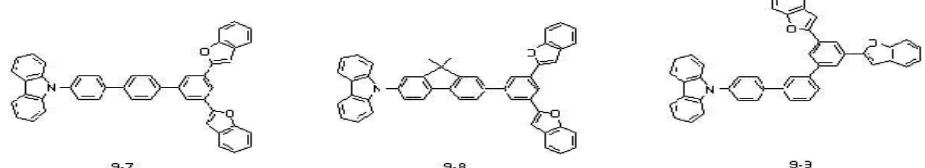
[0221]



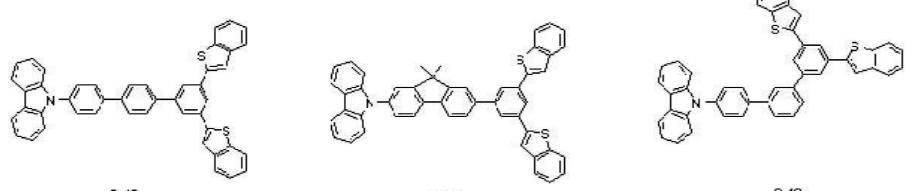
[0222]



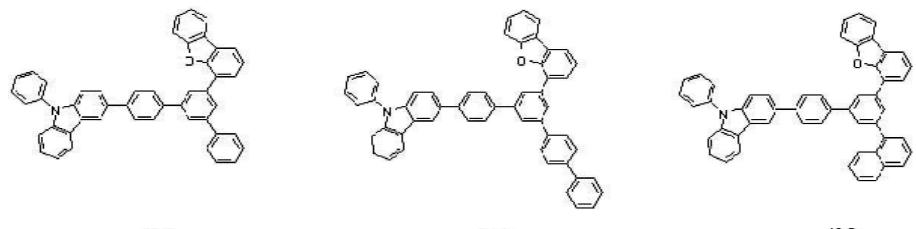
[0223]



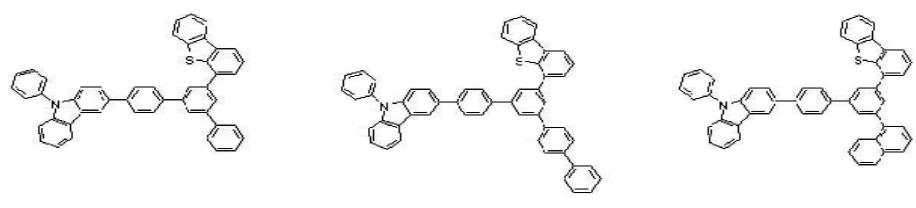
[0224]



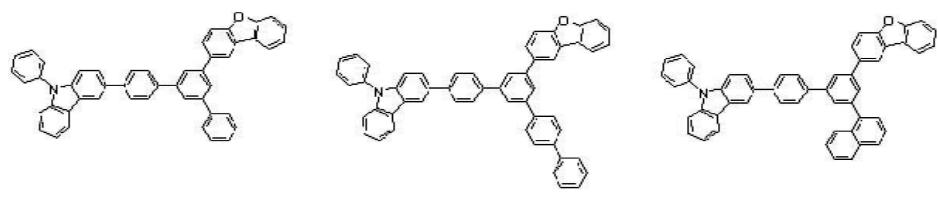
[0225]



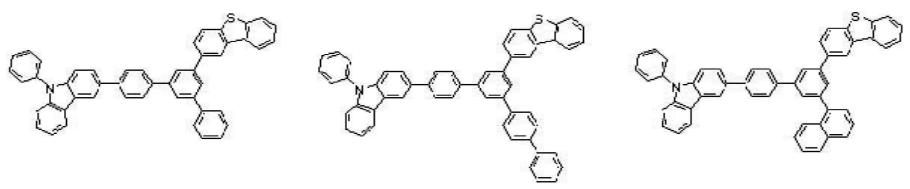
[0226]



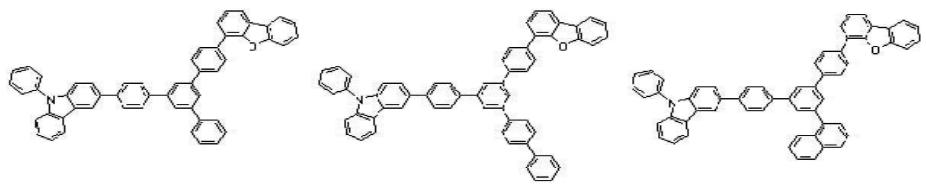
[0227]



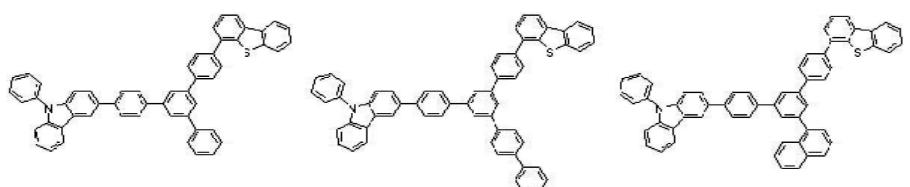
[0228]



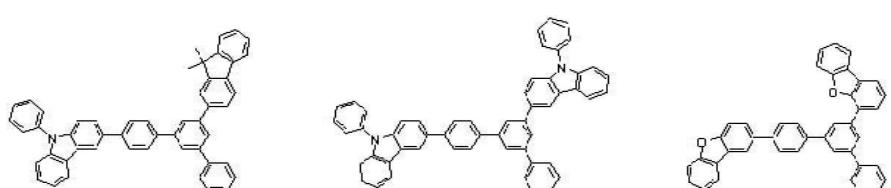
[0229]



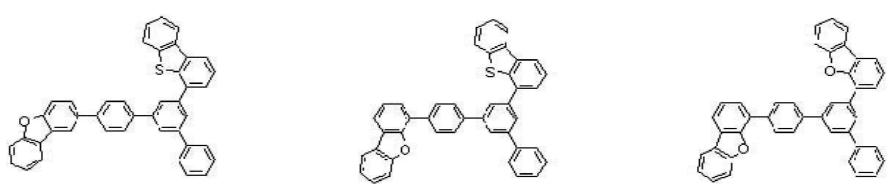
[0230]



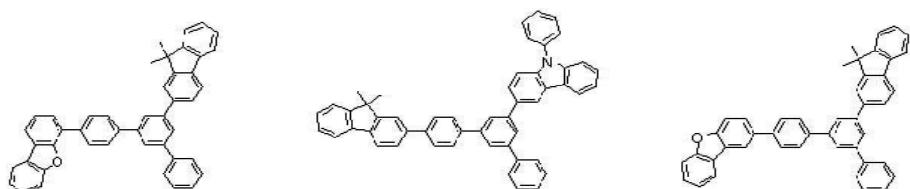
[0231]



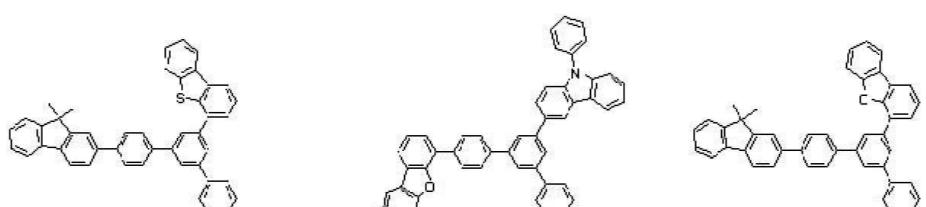
[0232]



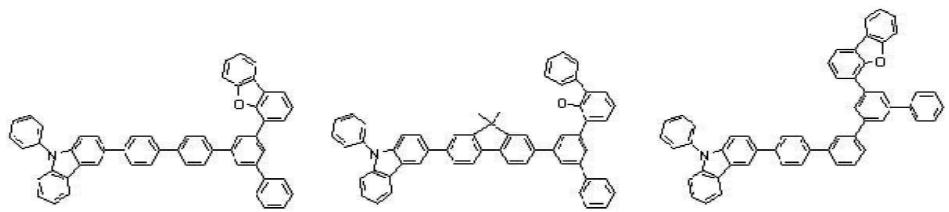
[0233]



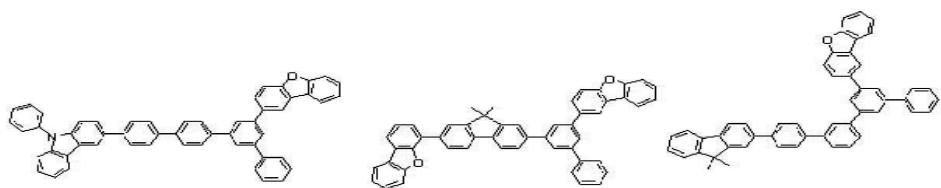
[0234]



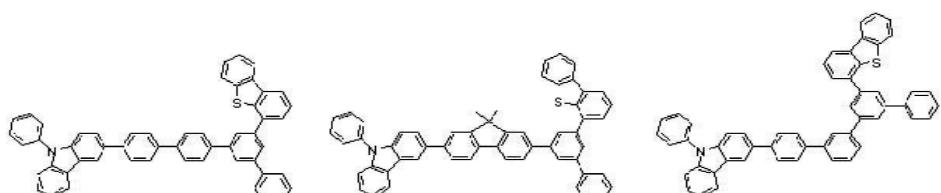
[0235]



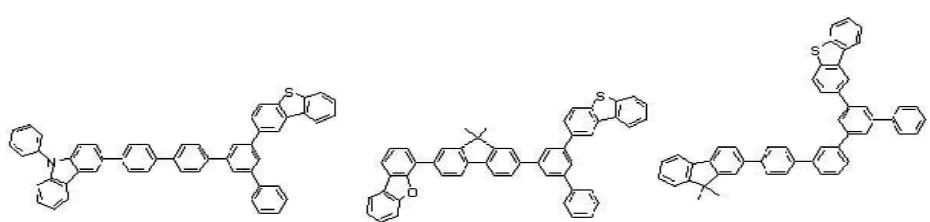
[0236]



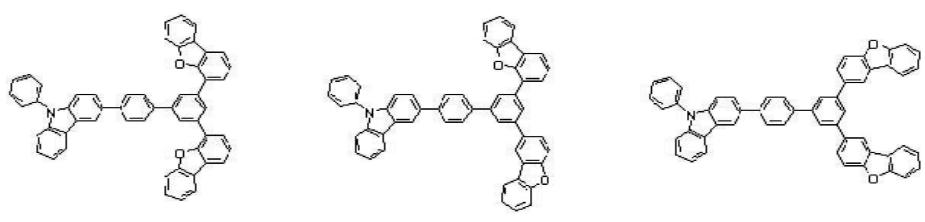
[0237]



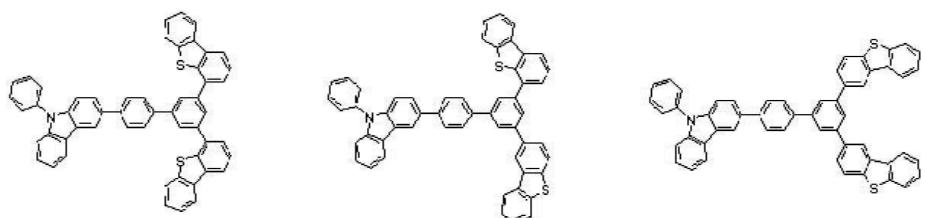
[0238]



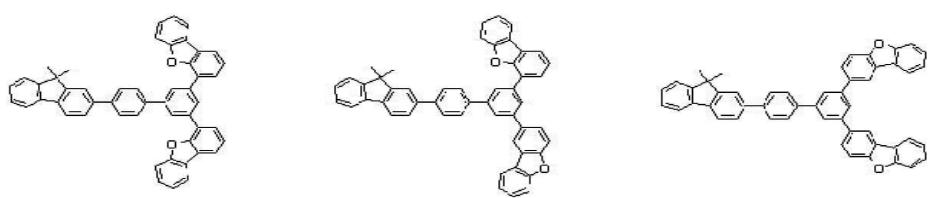
[0239]



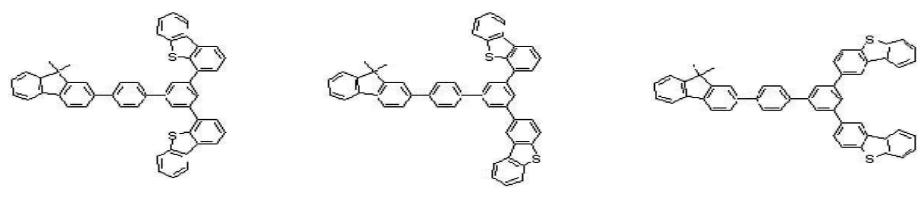
[0240]



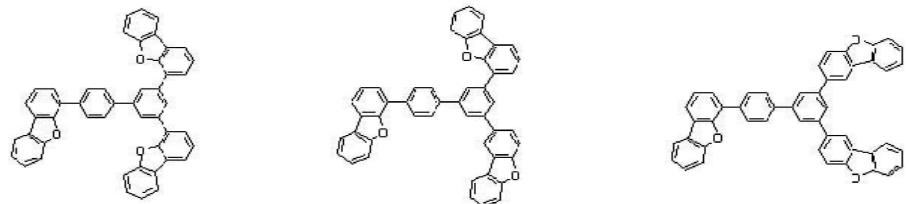
[0241]



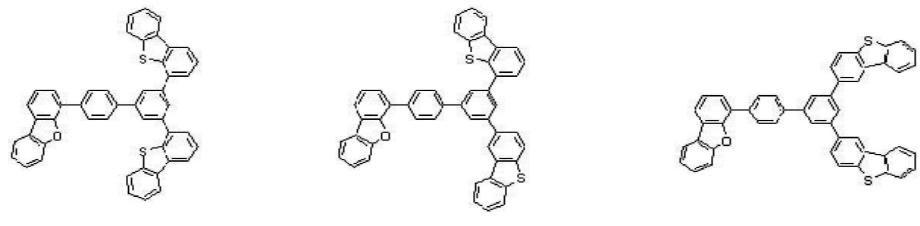
[0242]



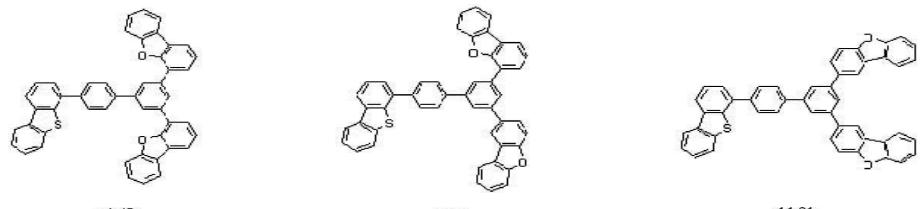
[0243]



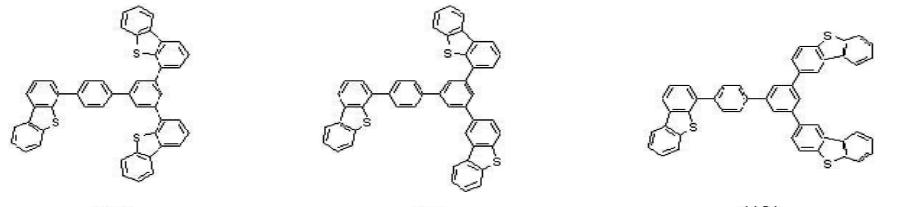
[0244]



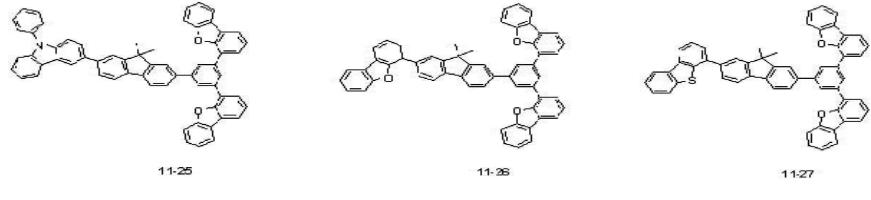
[0245]



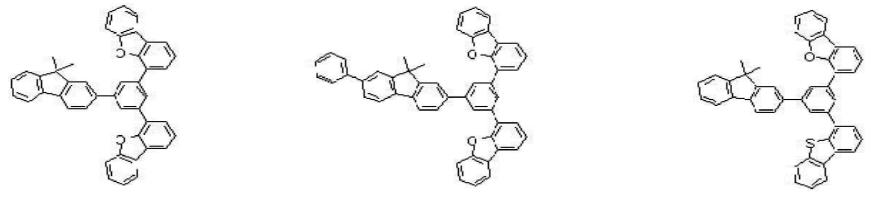
[0246]



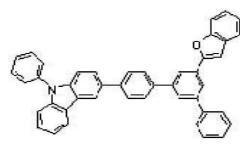
[0247]



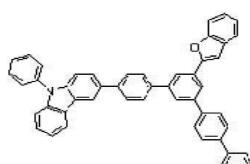
[0248]



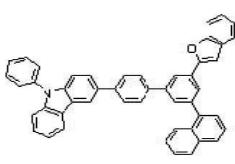
[0249]



12-1

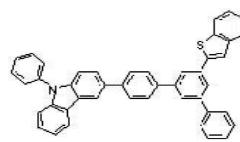


12-2

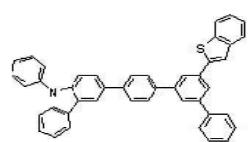


12-3

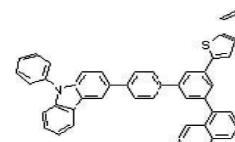
[0250]



12-4

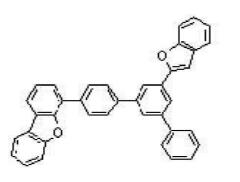


12-5

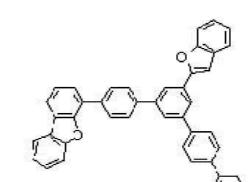


12-6

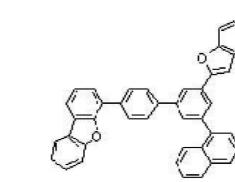
[0251]



12-7

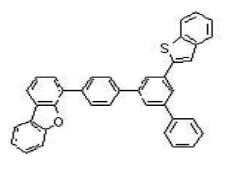


12-8

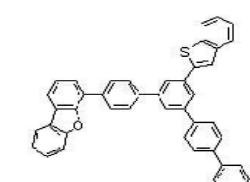


12-9

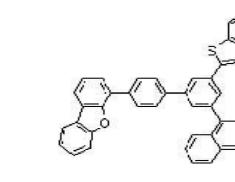
[0252]



12-10

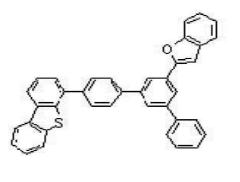


12-11

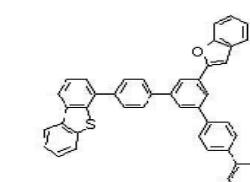


12-12

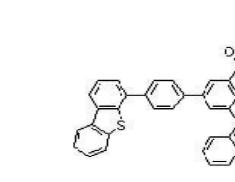
[0253]



12-13

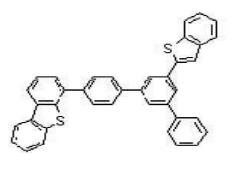


12-14

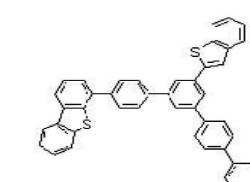


12-15

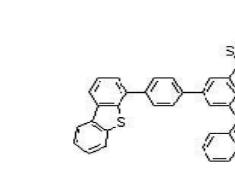
[0254]



12-16

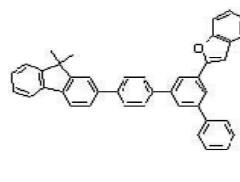


12-17

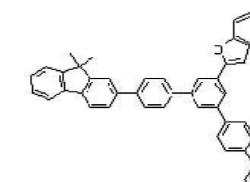


12-18

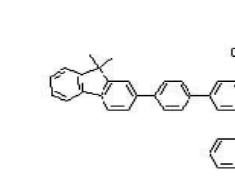
[0255]



12-19

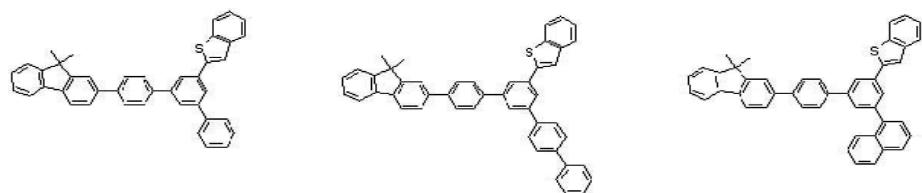


12-20

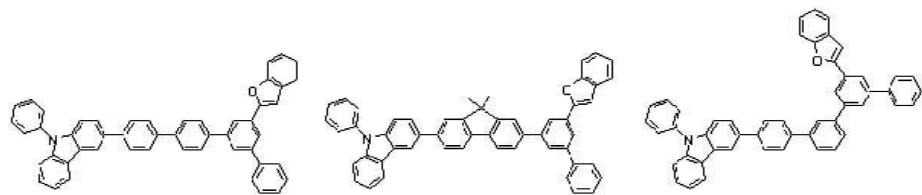


12-21

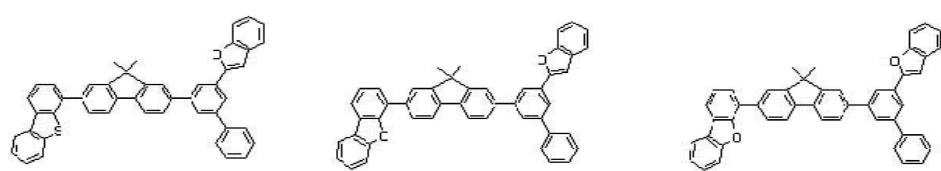
[0256]



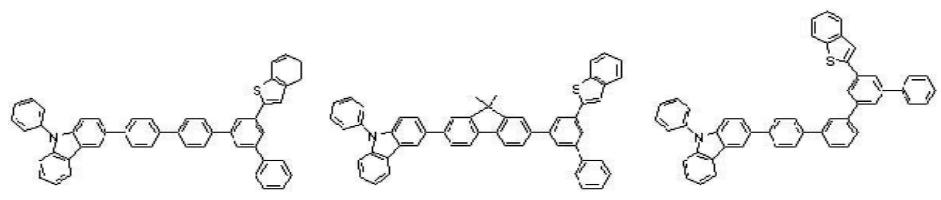
[0257]



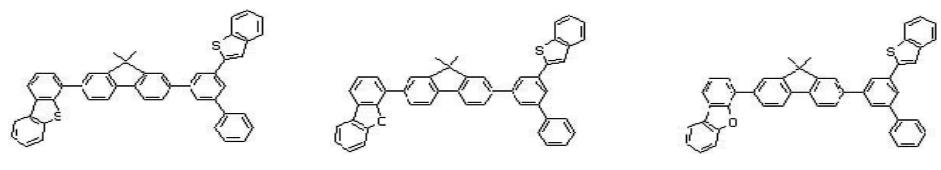
[0258]



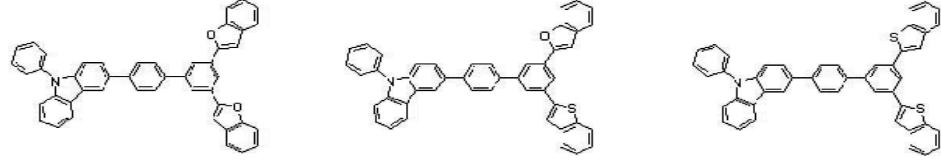
[0259]



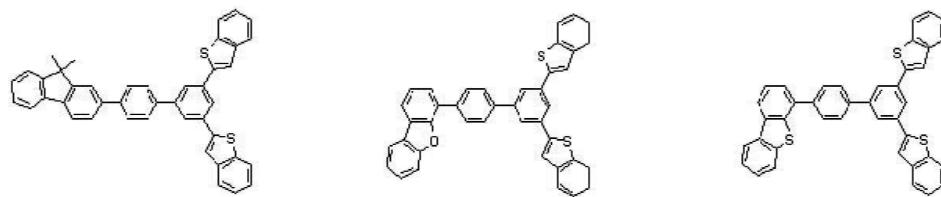
[0260]



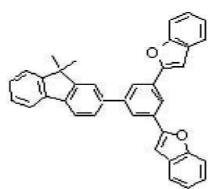
[0261]



[0262]

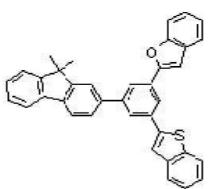


[0263]

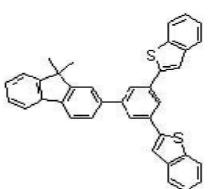


[0264]

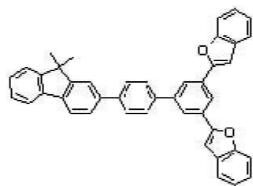
13-7



13-8

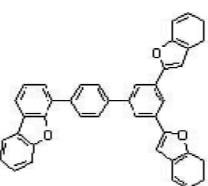


13-9

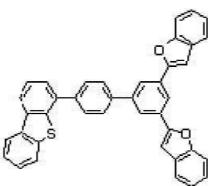


[0265]

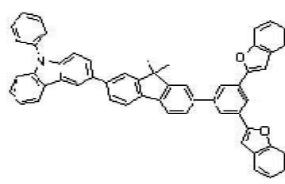
13-10



13-11

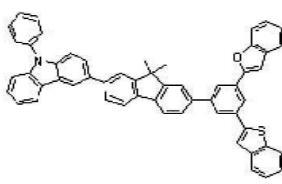


13-12

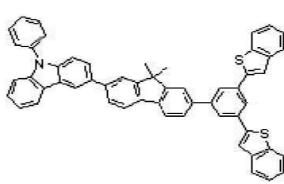


[0266]

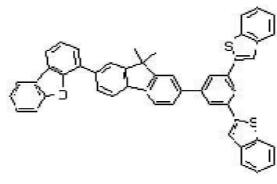
13-13



13-14

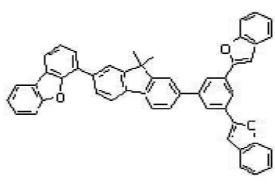


13-15

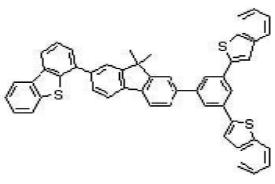


[0267]

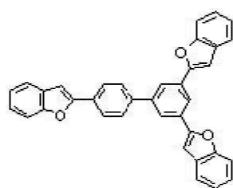
13-16



13-17

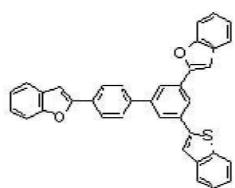


13-18

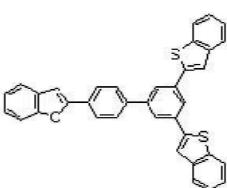


[0268]

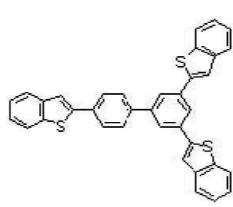
14-1



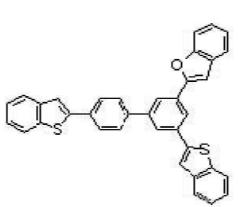
14-2



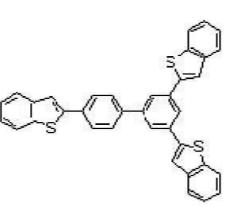
14-3



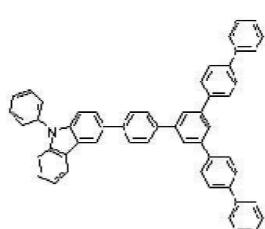
14-4



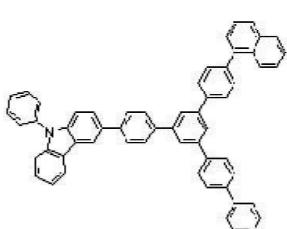
14-5



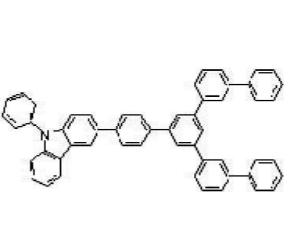
14-6



15-1

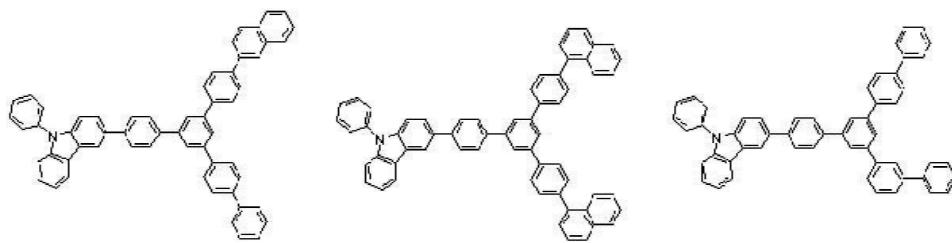


15-2



15-3

[0270]

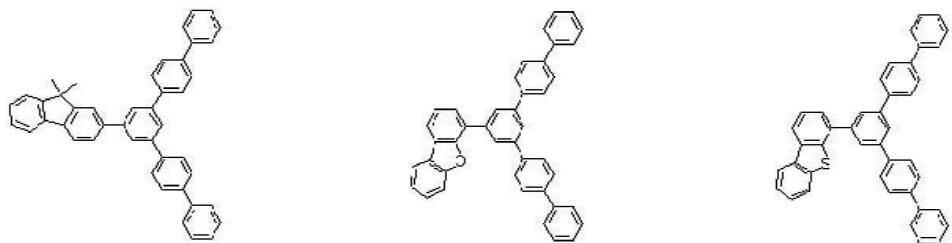


[0271]

15-4

15-5

15-6

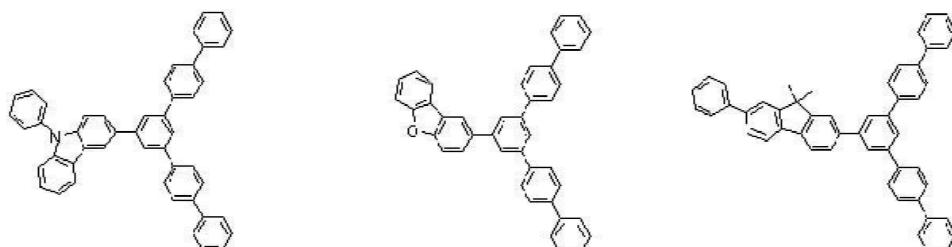


[0272]

15-7

15-8

15-9



[0273]

15-10

15-11

15-12

[0274] 본 발명의 다른 일 구현예에서는, 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 한 층 이상의 유기박막층을 포함하고, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 것인 유기광전자소자를 제공한다.

[0275] 상기 유기광전자소자용 화합물은 유기박막층에 사용되어 유기광전자소자의 수명 특성, 효율 특성, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성을 향상시키며, 구동전압을 낮출 수 있다.

[0276] 상기 유기박막층은 구체적으로, 전자주입층 또는 전자수송층일 수 있다.

[0277] 상기 유기광전자소자는 유기발광소자, 유기광전소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 또는 유기메모리소자일 수 있다.

[0278] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자는 유기발광소자일 수 있다. 도 1 내지 도 5는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 유기발광소자의 단면도이다.

[0279] 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.

[0280] 상기 양극(120)은 양극 물질을 포함하며, 이 양극 물질로는 통상 유기박막층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일 함수가 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-메틸이오펜), 폴리(3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜)(polyehtylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 보다 구체적으로, 상기 양극으로 ITO(indium tin oxide)를 포함하는 투명전극을 사용할 수 있다.

[0281] 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. 보다 구체적으로, 상기 음극으로 알루미늄 등과 같은 금속전극을 사용할 수 있다.

[0282] 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.

[0283] 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.

[0284] 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.

[0285] 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 ITO와의 접합성을 향상시킬 수 있다.

[0286] 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.

[0287] 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 재료를 포함한다.

[0288] 상기에서 설명한 유기발광소자는, 기판에 양극을 형성한 후, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금 및 이온도금과 같은 전식성막법; 또는 스핀코팅(spin coating), 침지법(dipping), 유동코팅법(flow coating)과 같은 습식성막법 등으로 유기박막층을 형성한 후, 그 위에 음극을 형성하여 제조할 수 있다.

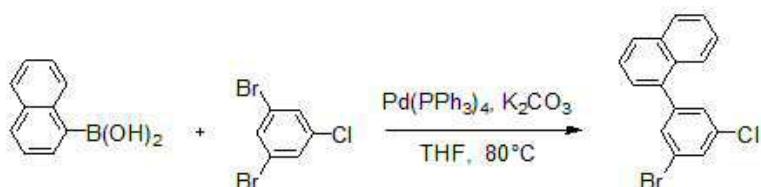
[0289] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 상기 유기광전자소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

0291] 실시예

[0292] 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)

합성예 1: 중간체 I-1의 제조



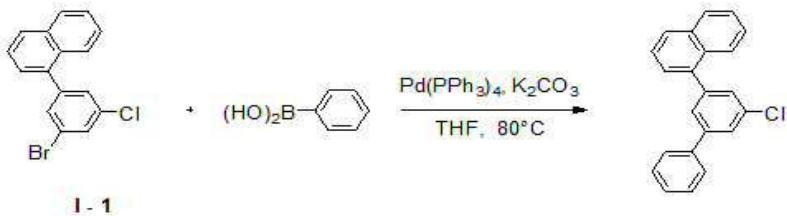
I - 1

[0296]

[0297] 질소 환경에서 naphthalen-1-ylboronic acid(50 g, 290.7 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.8 L에 녹인 후, 여기에 1,3-dibromo-5-chlorobenzene(117.9 g, 436.1 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(3.36 g, 2.91 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(85.6 g, 581.4 mmol)을 넣고 80 °C에서 9시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로

분리 정제하여 화합물 I-1(42.5 g, 46 %)을 얻었다.

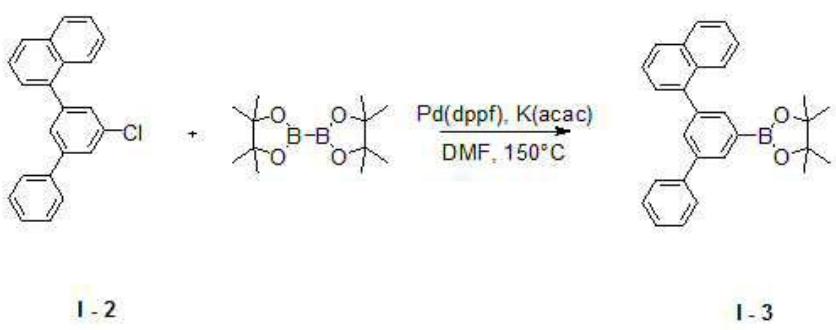
합성예 2: 중간체 I-2의 제조



1-2

질소 환경에서 중간체 I-1(30 g, 94.5 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 phenylboronic acid(12.7 g, 103.9 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(3.28 g, 2.84 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(27.8 g, 189 mmol)을 넣고 80 °C에서 16시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-2(29.7 g, 53 %)을 얻었다.

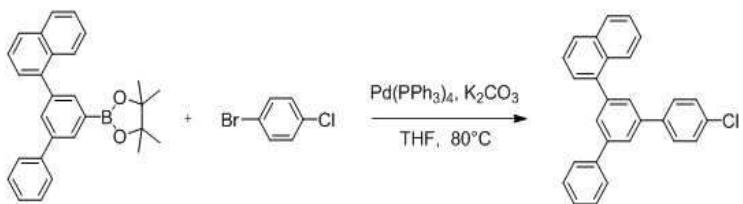
합성예 3: 중간체 I-3의 제조



1-3

질소 환경에서 중간체 I-2(20 g, 63.5 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron(24.2 g, 95.3 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.52 g, 0.64 mmol) 그리고 potassium acetate(12.5 g, 127 mmol)을 넣고 150 °C에서 21시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-3(25.8 g, 55 %)을 얻었다.

합성예 4: 중간체 I-4의 제조

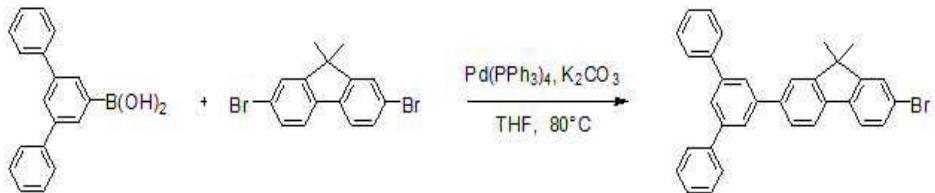


| - 3 | - 4

질소 환경에서 촉매 I-3(20 g, 49.2 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.15 L에 넣어 후, 여기에 1-bromo-4-

chlorobenzene(9.42 g, 49.2 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(1.71 g, 1.48 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(14.5 g, 98.4 mmol)을 넣고 80 °C에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-4(16.5 g, 86 %)을 얻었다.

[0311] 합성 예 5: 중간체 I-5의 제조

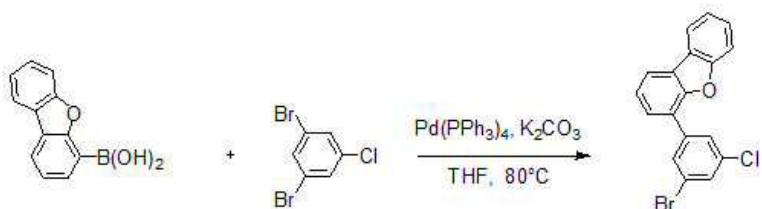


I - 5

[0312]

[0313] 질소 환경에서 중간체 3,5-phenylbenzyl-1-boronic acid(50 g, 182.4 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.8 L에 녹인 후, 여기에 2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene(95.8 g, 273.6 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(2.11 g, 1.82 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(53.7 g, 364.8 mmol)을 넣고 80 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-5(17.8 g, 25 %)을 얻었다.

[0315] 합성 예 6: 중간체 I-6의 제조

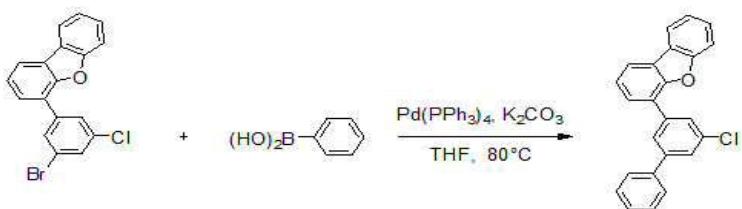


I - 6

[0316]

[0317] 질소 환경에서 dibenzofuran-4ylboronic acid(26.1 g, 123.3 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.4 L에 녹인 후, 여기에 1,3-dibromo-5-chlorobenzene(50 g, 185 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(1.42 g, 1.23 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(36.3 g, 246.6 mmol)을 넣고 80 °C에서 10시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-6(19.3 g, 44 %)을 얻었다.

[0319]

합성예 7: 중간체 I-7의 제조

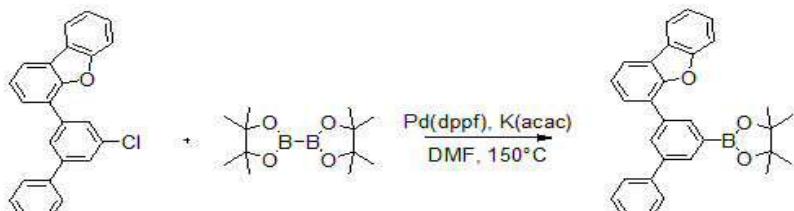
I - 6

I - 7

[0320]

[0321] 질소 환경에서 중간체 I-6(19.3 g, 54.0 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.15 L에 녹인 후, 여기에 phenylboronic acid(7.24 g, 59.4 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(1.87 g, 1.62 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(15.9 g, 108 mmol)을 넣고 80 °C에서 17시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-7(19.1 g, 56 %)을 얻었다.

[0323]

합성예 8: 중간체 I-8의 제조

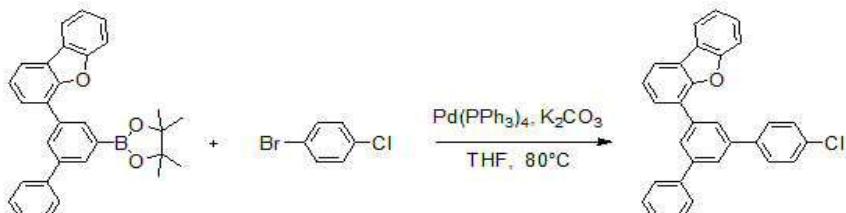
I - 7

I - 8

[0324]

[0325] 질소 환경에서 중간체 I-7(19 g, 53.5 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron(20.4 g, 80.3 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.44 g, 0.54 mmol) 그리고 potassium acetate(10.5 g, 107 mmol)을 넣고 150 °C에서 18시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-8(12.2 g, 51 %)을 얻었다.

[0327]

합성예 9: 중간체 I-9의 제조

I - 8

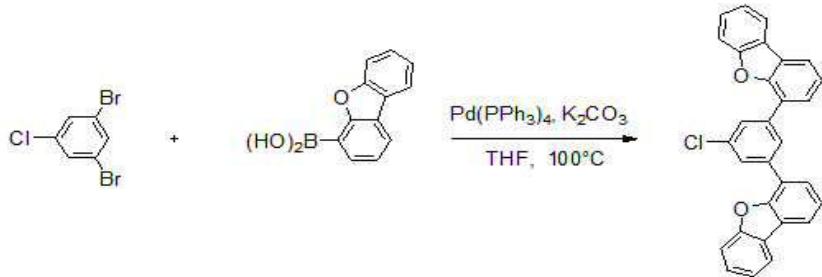
I - 9

[0328]

[0329] 질소 환경에서 중간체 I-8(12 g, 26.9 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.1 L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-4-chlorobenzene(5.15 g, 26.9 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.93 g, 0.81 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(7.92 g, 53.8 mmol)을 넣고 80 °C에서 18시간 동안 가열하여 환류

시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 $MgSO_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-9(9.73 g, 84 %)을 얻었다.

[0331] 합성예 10: 중간체 I-10의 제조

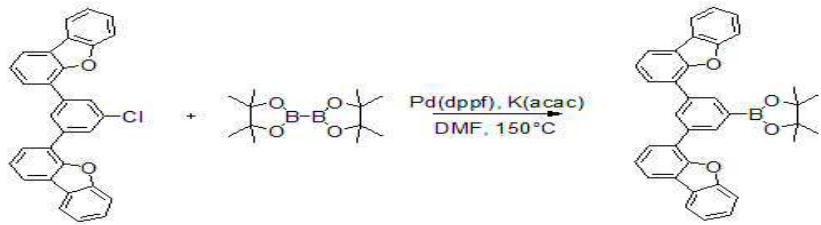


I - 10

[0332]

[0333] 질소 환경에서 1,3-dibromo-5-chlorobenzene dibenzofuran-4-ylboronic acid(100 g, 369.89 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 1.5 L에 녹인 후, 여기에 dibenzofuran-4-ylboronic acid(196.1 g, 924.7 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(21.4 g, 18.5 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(108.9 g, 739.8 mmol)을 넣고 100 °C에서 23시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 $MgSO_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-10(148.4 g, 90 %)을 얻었다.

[0335] 합성예 11: 중간체 I-11의 제조



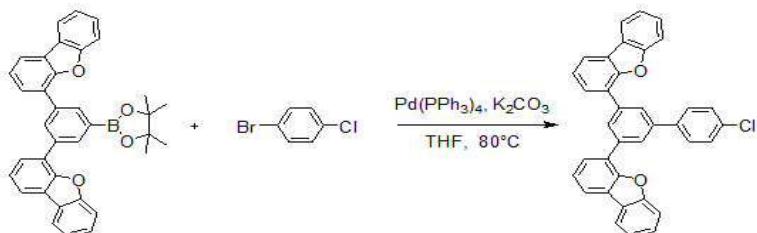
I - 10

I - 11

[0336]

[0337] 질소 환경에서 중간체 I-10(148.4 g, 387.2 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1.5 L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron(147.5 g, 580.8 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(9.49 g, 11.6 mmol) 그리고 potassium acetate(76.0 g, 774.4 mmol)을 넣고 150 °C에서 16시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-11(121.3 g, 58 %)을 얻었다.

[0339]

합성 예 12: 중간체 I-12의 제조

[0340]

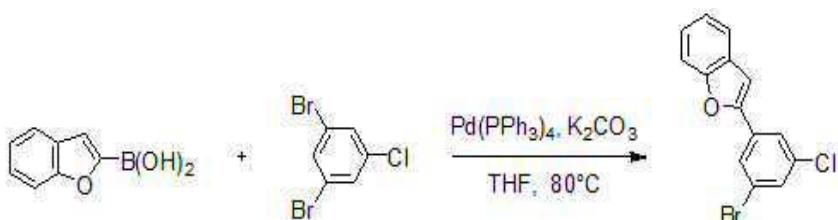
I - 11

I - 12

[0341]

질소 환경에서 중간체 I-11(50 g, 93.2 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.1 L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-4-chlorobenzene(17.8 g, 93.2 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(3.23 g, 2.80 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(27.4 g, 186.4 mmol)을 넣고 80 °C에서 21시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO_4 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-12(44.2 g, 91 %)을 얻었다.

[0343]

합성 예 13: 중간체 I-13의 제조

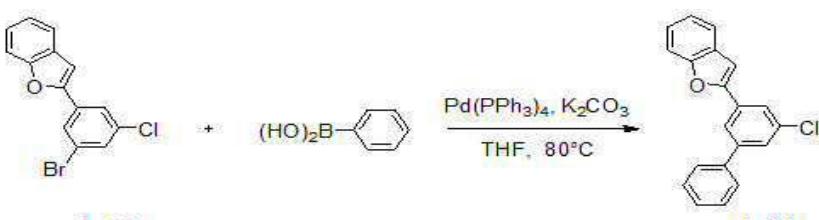
[0344]

I - 13

[0345]

질소 환경에서 benzofuran-2-ylboronic acid(100 g, 617.5 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 1.8 L에 녹인 후, 여기에 1,3-dibromo-5-chlorobenzene(250.4 g, 926.2 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(7.14 g, 6.18 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(181.9 g, 1,235 mmol)을 넣고 80 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO_4 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-13(104.5 g, 55 %)을 얻었다.

[0347]

합성 예 14: 중간체 I-14의 제조

[0348]

I - 13

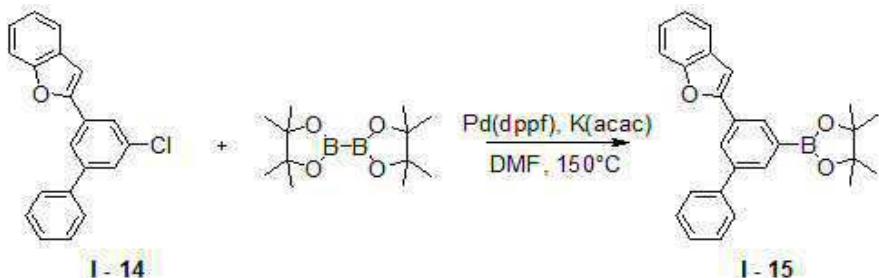
I - 14

[0349]

질소 환경에서 중간체 I-13(100 g, 325.1 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.7 L에 녹인 후, 여기에 phenylboronic acid(43.6 g, 357.6 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(11.3 g, 9.75 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(95.7 g, 650.2 mmol)을 넣고 80 °C에서 20시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO_4 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중

간체 I-14(46.6 g, 47 %)을 얻었다.

[0351] 합성예 15: 중간체 I-15의 제조

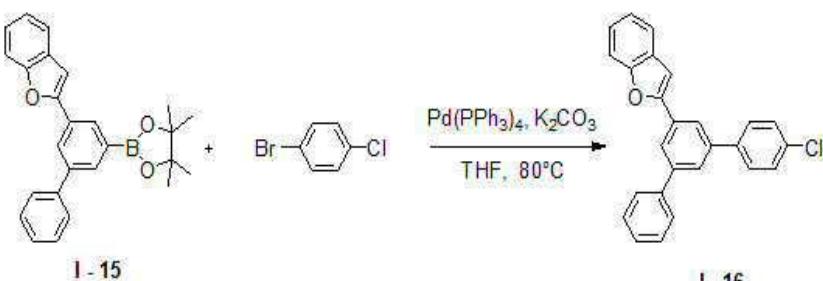


[0352]

[0353] 질소 환경에서 중간체 I-14(46 g, 150.9 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron(57.5 g, 226.4 mmol)과 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(1.23 g, 1.51 mmol) 그리고 potassium acetate(29.6 g, 301.8 mmol)을 넣고 150 °C에서 15시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-15(25.7 g, 43 %)을 얻었다.

[0355]

합성예 16: 중간체 I-16의 제조

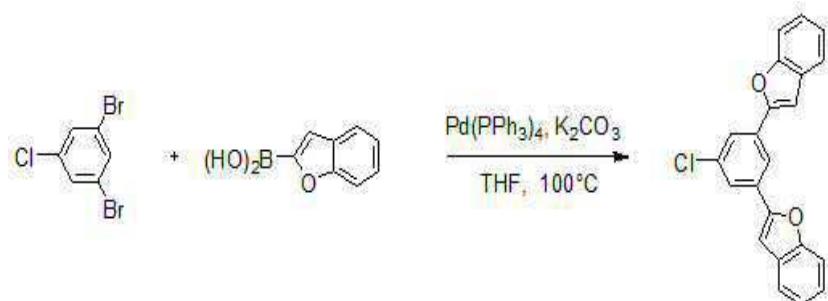


[0356]

[0357] 질소 환경에서 중간체 I-15(25 g, 63.1 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-4-chlorobenzene(12.1 g, 63.1 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(2.19 g, 1.89 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(18.6 g, 126.2 mmol)을 넣고 80 °C에서 24시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-16(21.4 g, 89 %)을 얻었다.

[0359]

합성예 17: 중간체 I-17의 제조

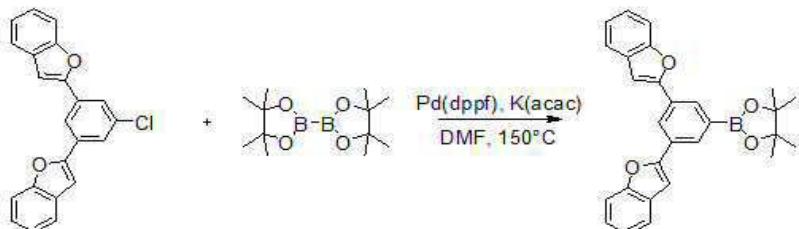


[0360]

[0361] 질소 환경에서 1,3-dibromo-5-chlorobenzene dibenzofuran-4-ylboronic acid(100 g, 369.89 mmol)을

tetrahydrofuran(THF) 1.3 L에 녹인 후, 여기에 benzofuran-2-ylboronic acid(149.8 g, 924.7 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(21.4 g, 18.5 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(108.9 g, 739.8 mmol)을 넣고 100 °C에서 22시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-17(103.3 g, 81 %)을 얻었다.

[0363] 합성 예 18: 중간체 I-18의 제조

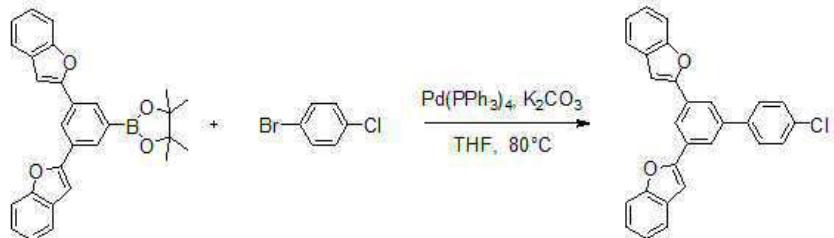


I-17

I-18

[0364] 질소 환경에서 중간체 I-17(100 g, 290.0 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1.5 L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron(110.5 g, 435.0 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(2.37 g, 2.9 mmol) 그리고 potassium acetate(56.9 g, 580 mmol)을 넣고 150 °C에서 28시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-18(62.0 g, 49 %)을 얻었다.

[0367] 합성 예 19: 중간체 I-19의 제조

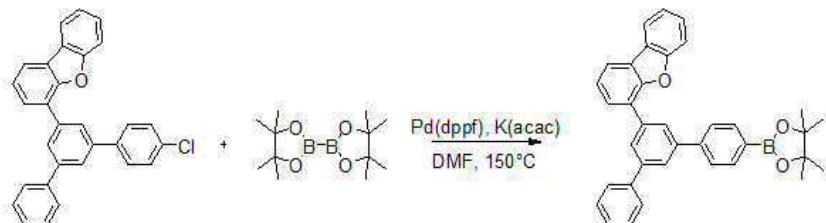


I-18

I-19

[0368] 질소 환경에서 중간체 I-18(62 g, 142.1 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-4-chlorobenzene(27.2 g, 142.1 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(4.93 g, 4.26 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(41.9 g, 284.2 mmol)을 넣고 80 °C에서 27시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-19(58.0 g, 97 %)을 얻었다.

[0371]

합성예 20: 중간체 I-20의 제조

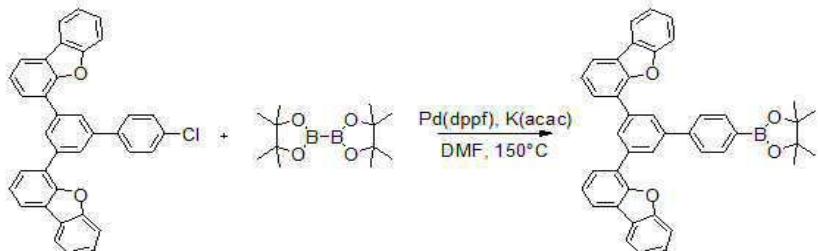
I-9

I-20

[0372]

[0373] 질소 환경에서 중간체 I-9(50 g, 116.0 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron(44.2 g, 174.0 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.95 g, 1.16 mmol) 그리고 potassium acetate(22.8 g, 232 mmol)을 넣고 150 °C에서 42시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-20(33.9 g, 56 %)을 얻었다.

[0375]

합성예 21: 중간체 I-21의 제조

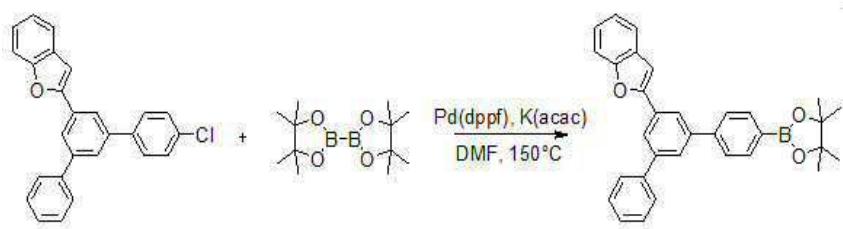
I-12

I-21

[0376]

[0377] 질소 환경에서 중간체 I-12(50 g, 96.0 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 0.4 L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron(36.6 g, 144 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.78 g, 0.96 mmol) 그리고 potassium acetate(18.8 g, 192 mmol)을 넣고 150 °C에서 46시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-21(27.6 g, 47 %)을 얻었다.

[0379]

합성예 22: 중간체 I-22의 제조

I-16

I-22

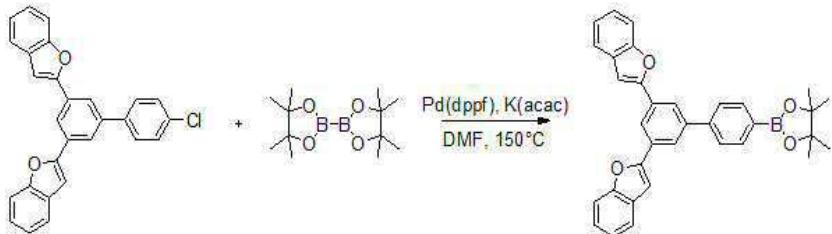
[0380]

[0381] 질소 환경에서 중간체 I-16(50 g, 131.3 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron(50.0 g, 196.9 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(1.07 g, 1.31 mmol) 그리고 potassium acetate(25.8 g, 262.6 mmol)을 넣고 150 °C에서 49시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합

물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-22(31.0 g, 50 %)을 얻었다.

[0383]

합성예 23: 중간체 I-23의 제조



[0384]

I-19

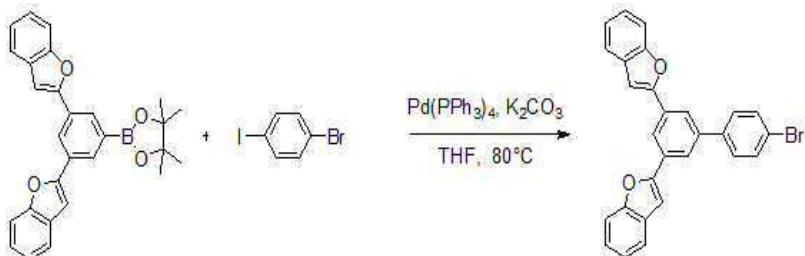
I-23

[0385]

질소 환경에서 중간체 I-19(50 g, 118.8 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron(45.3 g, 178.2 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.97 g, 1.19 mmol) 그리고 potassium acetate(23.3 g, 237.6 mmol)을 넣고 150 °C에서 41시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-23(28.6 g, 47 %)을 얻었다.

[0387]

합성예 24: 중간체 I-24의 제조



[0388]

I-18

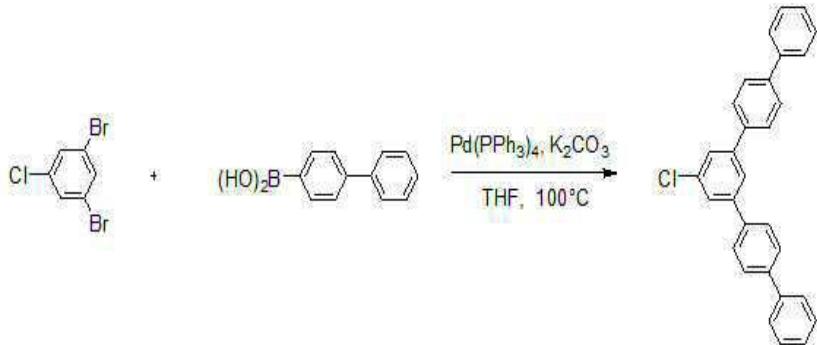
I-24

[0389]

질소 환경에서 중간체 I-18(30 g, 68.8 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.3 L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-4-iodobenzene(29.2 g, 103.1 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.8 g, 0.69 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(20.3 g, 137.6 mmol)을 넣고 80 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 김암 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-24(13.1 g, 41 %)을 얻었다.

[0391]

합성예 25: 중간체 I-25의 제조



[0392]

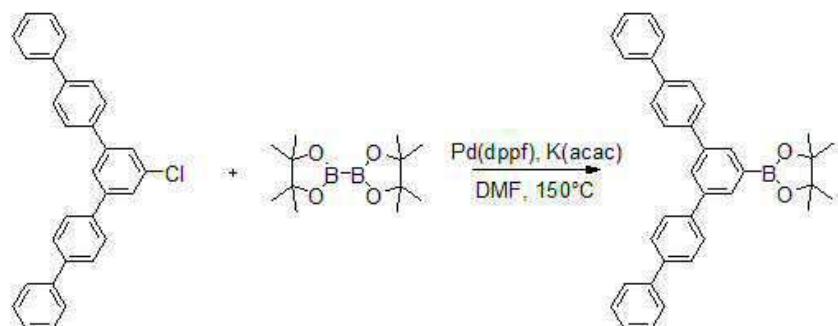
I-25

[0393]

질소 환경에서 1,3-dibromo-5-chlorobenzene dibenzofuran-4-ylboronic acid(100 g, 369.89 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 1.5 L에 녹인 후, 여기에 biphenyl-4-ylboronic acid(183.1 g, 924.7 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(21.4 g, 18.5 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(108.9 g, 739.8 mmol)을 넣고 100 °C에서 22시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-25(134.2 g, 87 %)을 얻었다.

[0395]

합성예 26: 중간체 I-26의 제조



[0396]

I-25

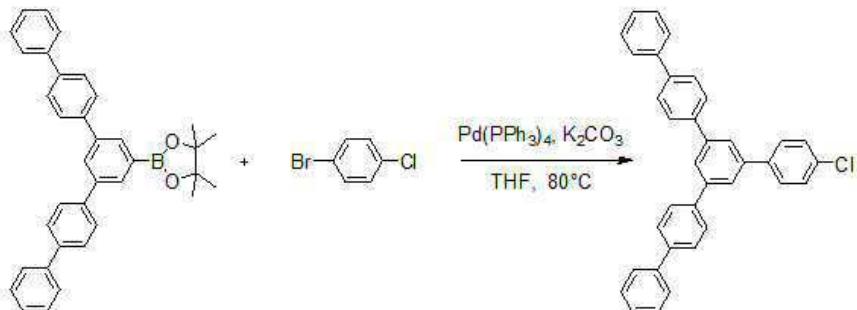
I-26

[0397]

질소 환경에서 중간체 I-25(100 g, 239.8 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1.0 L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron(91.4 g, 359.8 mmol)과 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(1.96 g, 1.19 mmol) 그리고 potassium acetate(47.1 g, 479.6 mmol)을 넣고 150 °C에서 48시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-26(53.7 g, 44 %)을 얻었다.

[0399]

합성예 27: 중간체 I-27의 제조



I-26

I-27

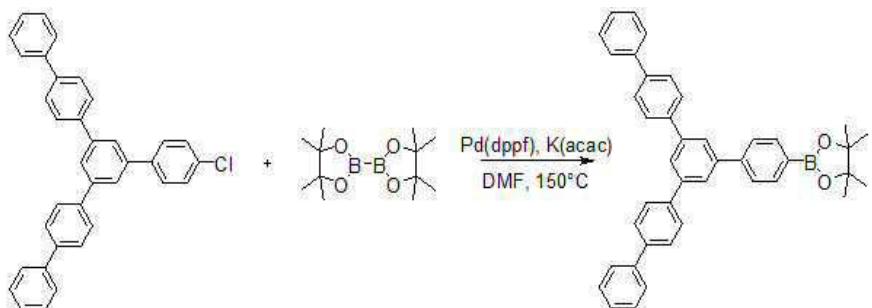
[0400]

[0401]

질소 환경에서 중간체 I-26(50 g, 98.3 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-4-chlorobenzene(18.8 g, 98.3 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(3.41 g, 2.95 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(29.0 g, 196.6 mmol)을 넣고 80°C 에서 16시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO_4 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-27(42.7 g, 88 %)을 얻었다.

[0403]

합성예 28: 중간체 I-28의 제조



I-27

I-28

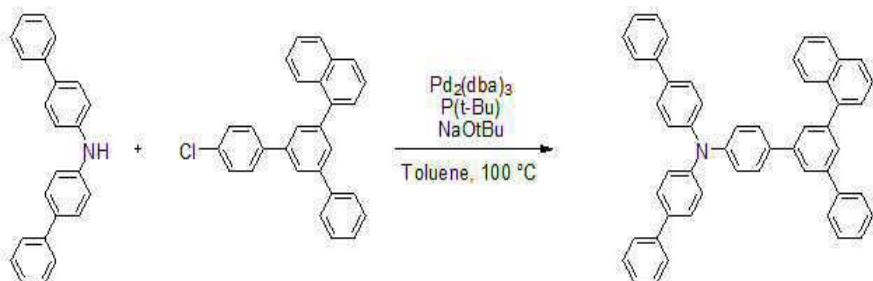
[0404]

[0405]

질소 환경에서 중간체 I-27(30 g, 60.8 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 0.3 L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron(23.2 g, 91.3 mmol)과 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.50 g, 0.61 mmol) 그리고 potassium acetate(11.9 g, 121.6 mmol)을 넣고 150°C 에서 50시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-28(18.5 g, 52 %)을 얻었다.

[0407]

실시예 1: 화합물 1-7의 제조



1 - 4

1 - 7

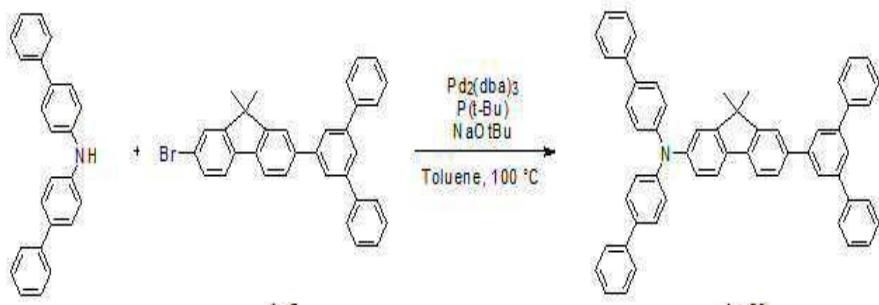
[0408]

[0409]

질소 환경에서 중간체 dibiphenyl-4-ylamine(10 g, 31.1 mmol)을 toluene 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-4(12.2 g, 31.1 mmol), tris(diphenyldieneacetone)dipalladium(o)(0.28 g, 0.31 mmol), tris-tert butylphosphine(0.19 g, 0.93 mmol) 그리고 sodium tert-butoxide(3.14 g, 32.7 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 45시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 $MgSO_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 1-7(14.8 g, 71 %)을 얻었다.

[0411]

실시예 2: 화합물 1-20의 제조



1-5

1 - 20

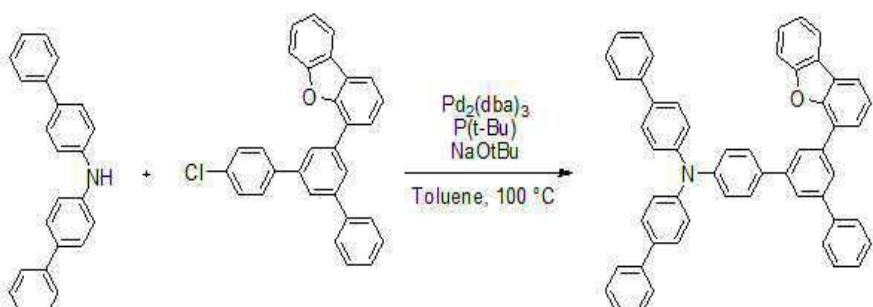
[0412]

[0413]

질소 환경에서 중간체 dibiphenyl-4-ylamine(10 g, 31.1 mmol)을 toluene 0.15 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-5(15.6 g, 31.1 mmol), tris(diphenylideneacetone)dipalladium(o)(0.28 g, 0.31 mmol), tris-tert butylphosphine(0.19 g, 0.93 mmol) 그리고 sodium tert-butoxide(3.14 g, 32.7 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 40시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 $MgSO_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 1-20(18.9 g, 82 %)을 얻었다.

[0415]

실시예 3: 화합물 2-1의 제조



10

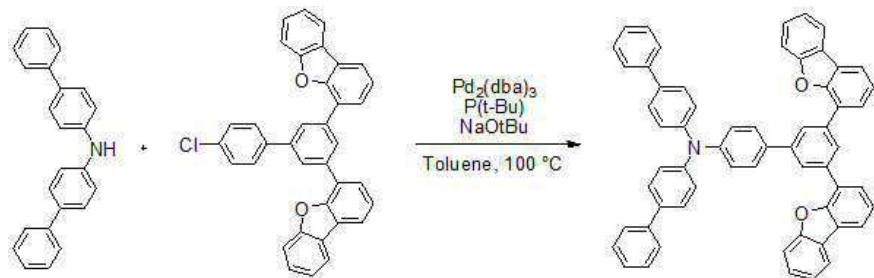
3 1

[0417]

질소 환경에서 중간체 dibiphenyl-4-ylamine(10 g, 31.1 mmol)을 toluene 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-9(13.4 g, 31.1 mmol), tris(diphenyldieneacetone)dipalladium(o)(0.28 g, 0.31 mmol), tris-tert butylphosphine(0.19 g, 0.93 mmol) 그리고 sodium tert-butoxide(3.14 g, 32.7 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 45시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 2-1(20.0 g, 90 %)을 얻었다.

[0419]

실시예 4: 화합물 3-1의 제조



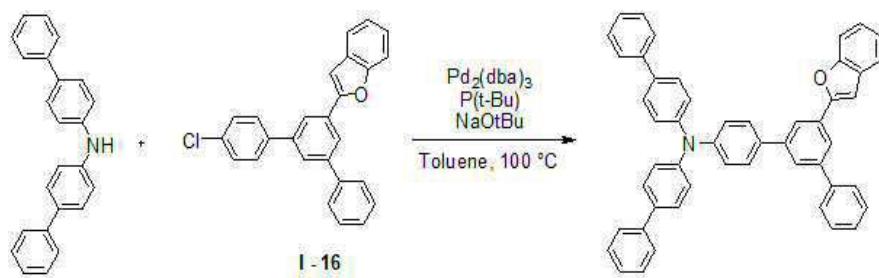
[0420]

[0421]

질소 환경에서 중간체 dibiphenyl-4-ylamine(10 g, 31.1 mmol)을 toluene 0.15 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-12(16.2 g, 31.1 mmol), tris(diphenyldieneacetone)dipalladium(o)(0.28 g, 0.31 mmol), tris-tert butylphosphine(0.19 g, 0.93 mmol) 그리고 sodium tert-butoxide(3.14 g, 32.7 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 38시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 3-1(20.3 g, 81 %)을 얻었다.

[0423]

실시예 5: 화합물 4-1의 제조

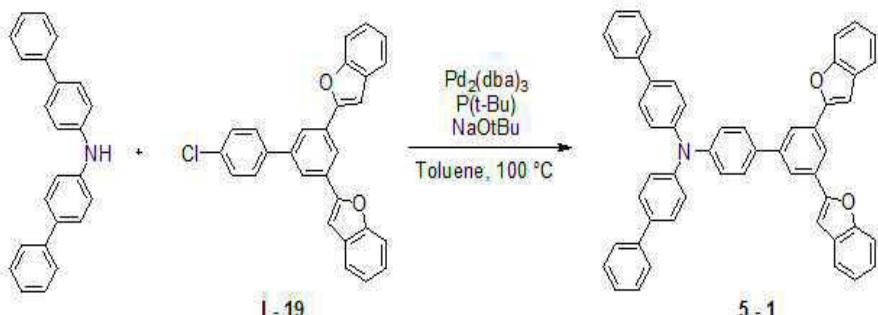


[0424]

[0425]

질소 환경에서 중간체 dibiphenyl-4-ylamine(10 g, 31.1 mmol)을 toluene 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-16(11.8 g, 31.1 mmol), tris(diphenyldieneacetone)dipalladium(o)(0.28 g, 0.31 mmol), tris-tert butylphosphine(0.19 g, 0.93 mmol) 그리고 sodium tert-butoxide(3.14 g, 32.7 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 46시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 4-1(15.5 g, 75 %)을 얻었다.

[0427]

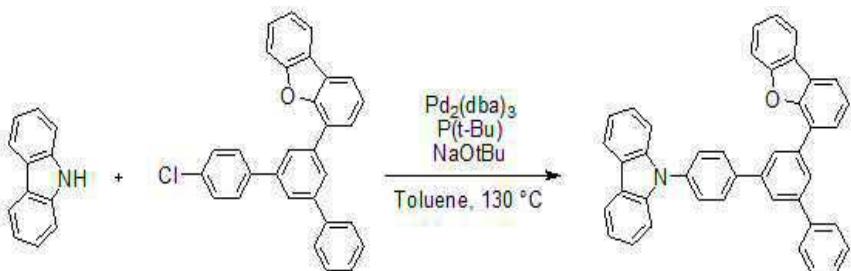
실시예 6: 화합물 5-1의 제조

[0428]

[0429]

질소 환경에서 중간체 dibiphenyl-4-ylamine(10 g, 31.1 mmol)을 toluene 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-19(13.1 g, 31.1 mmol), tris(diphenyldieneacetone)dipalladium(o)(0.28 g, 0.31 mmol), tris-tert butylphosphine(0.19 g, 0.93 mmol) 그리고 sodium tert-butoxide(3.14 g, 32.7 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 50시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 5-1(18.2 g, 83 %)을 얻었다.

[0431]

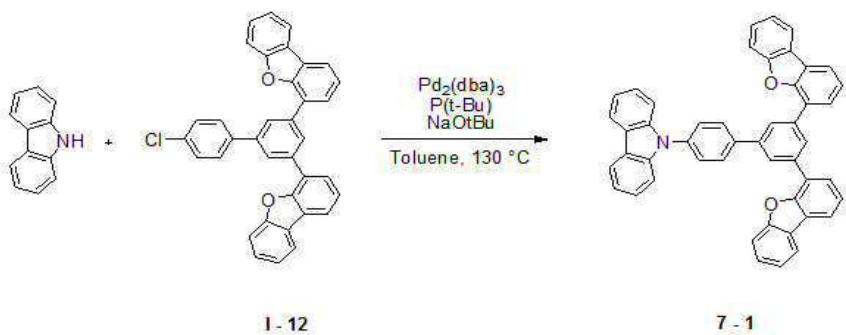
실시예 7: 화합물 6-1의 제조

[0432]

[0433]

질소 환경에서 중간체 cabazole(10 g, 59.8 mmol)을 toluene 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-9(25.8 g, 59.8 mmol), tris(diphenyldieneacetone)dipalladium(o)(1.64 g, 1.79 mmol), tris-tert butylphosphine(1.45 g, 7.16 mmol) 그리고 sodium tert-butoxide(6.9 g, 71.8 mmol)을 순차적으로 넣고 130 °C에서 47시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 6-1(28.9 g, 86 %)을 얻었다.

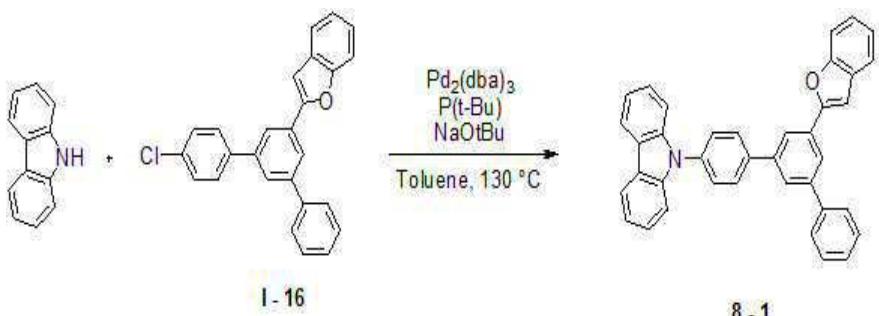
[0435]

실시예 8: 화합물 7-1의 제조

[0436]

[0437] 질소 환경에서 중간체 cabazole(10 g, 59.8 mmol)을 toluene 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-12(31.2 g, 59.8 mmol), tris(diphenyldieneacetone)dipalladium(o)(1.64 g, 1.79 mmol), tris-tert butylphosphine(1.45 g, 7.16 mmol) 그리고 sodium tert-butoxide(6.9 g, 71.8 mmol)을 순차적으로 넣고 130 °C에서 45시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 7-1(34.3 g, 88 %)을 얻었다.

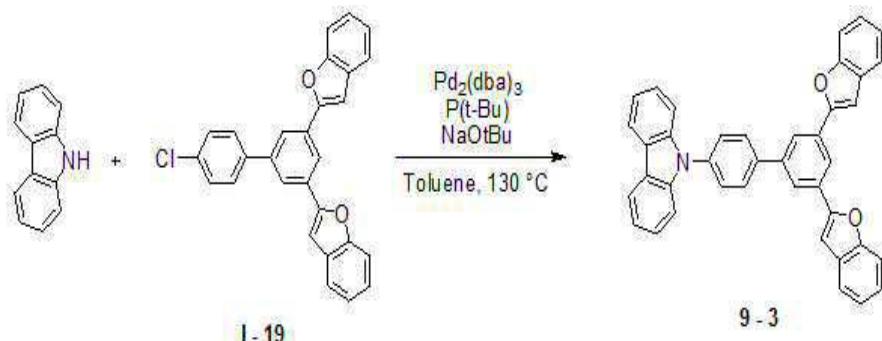
[0439] 실시예 9: 화합물 8-1의 제조



[0440]

[0441] 질소 환경에서 중간체 cabazole(10 g, 59.8 mmol)을 toluene 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-16(22.8 g, 59.8 mmol), tris(diphenylideneacetone)dipalladium(o)(1.64 g, 1.79 mmol), tris-tert butylphosphine(1.45 g, 7.16 mmol) 그리고 sodium tert-butoxide(6.9 g, 71.8 mmol)을 순차적으로 넣고 130 °C에서 68시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 8-1(22.9 g, 75 %)을 얻었다.

[0443] 실시예 10: 화합물 9-3의 제조

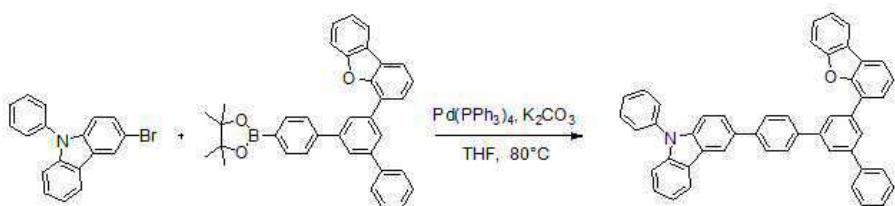


[0444]

[0445] 질소 환경에서 중간체 cabazole(10 g, 59.8 mmol)을 toluene 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-19(25.2 g, 59.8 mmol), tris(diphenyldieneacetone)dipalladium(o)(1.64 g, 1.79 mmol), tris-tert butylphosphine(1.45 g, 7.16 mmol) 그리고 sodium tert-butoxide(6.9 g, 71.8 mmol)을 순차적으로 넣고 130 °C에서 70시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 9-3(25.7 g, 78 %)을 얻었다.

[0447]

실시예 11: 화합물 10-1의 제조



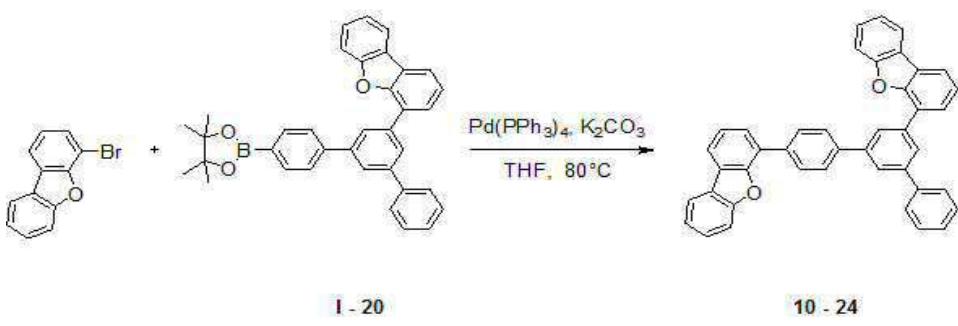
[0448]

[0449]

질소 환경에서 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole(10 g, 31.0 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.15 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-20(16.2 g, 31.0 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(1.07 g, 0.93 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(9.13 g, 62.0 mmol)을 넣고 80 °C에서 23시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 $MgSO_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 10-1(18.0 g, 91 %)을 얻었다.

[0451]

실시예 12: 화합물 10-24의 제조



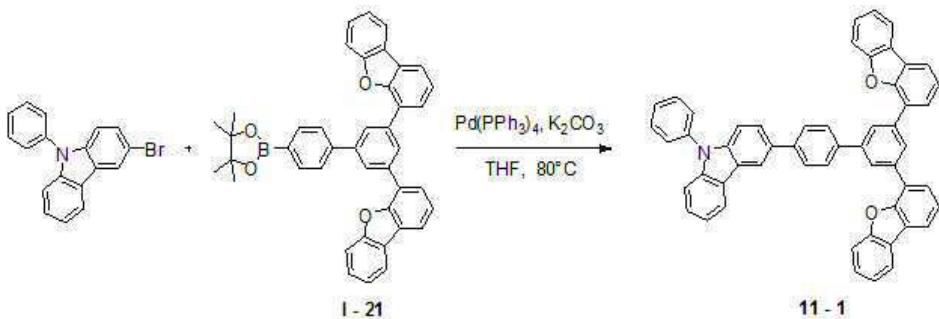
[0452]

[0453]

질소 환경에서 4-bromodibenzofuran(10 g, 40.5 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.15 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-20(21.1 g, 40.5 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(1.40 g, 1.22 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(11.9 g, 81 mmol)을 넣고 80 °C에서 18시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 $MgSO_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 놓축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 10-24(20.3 g, 89 %)을 얻었다.

[0455]

실시예 13: 화합물 11-1의 제조



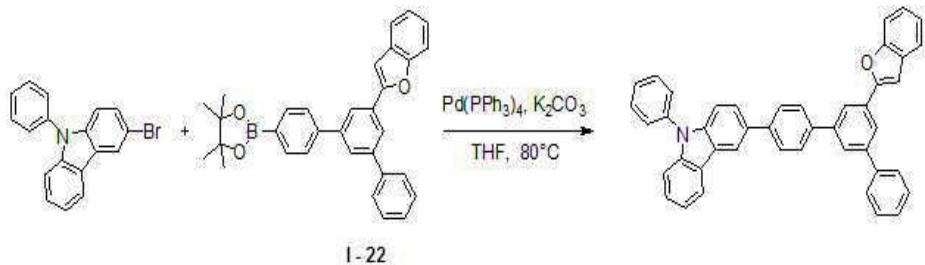
[0456]

[0457]

질소 환경에서 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole(10 g, 31.0 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-21(19.0 g, 31.0 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(1.07 g, 0.93 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 푸화된 potassium carbonate(9.13 g, 62.0 mmol)을 넣고 80 °C에서 21시간 동안 가열하여 화

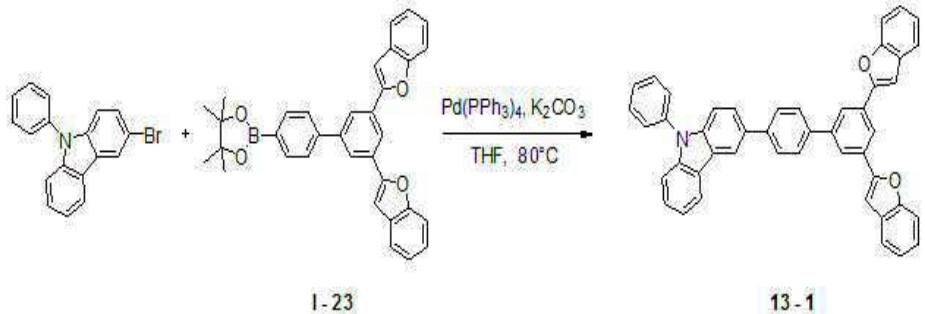
류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 $MgSO_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 11-1(21.0 g, 93 %)을 얻었다.

실시예 14: 화합물 12-1의 제조



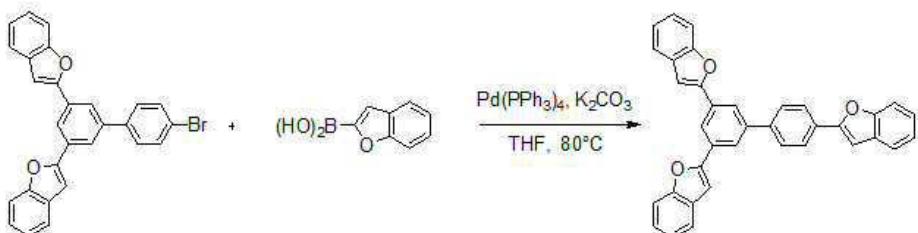
질소 환경에서 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole(10 g, 31.0 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-22(14.6 g, 31.0 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(1.07 g, 0.93 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(9.13 g, 62.0 mmol)을 넣고 80 °C에서 26시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO_4 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 12-1(17.0 g, 93 %)을 얻었다.

실시예 15: 화합물 13-1의 제조



질소 환경에서 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole(10 g, 31.0 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.1 L에 녹인 후, 여기애 중간체 I-23(15.9 g, 31.0 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(1.07 g, 0.93 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(9.13 g, 62.0 mmol)을 넣고 80 °C에서 24시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 $MgSO_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 13-1(17.5 g, 90 %)을 얻었다.

[0467]

실시예 16: 화합물 14-1의 제조

I - 24

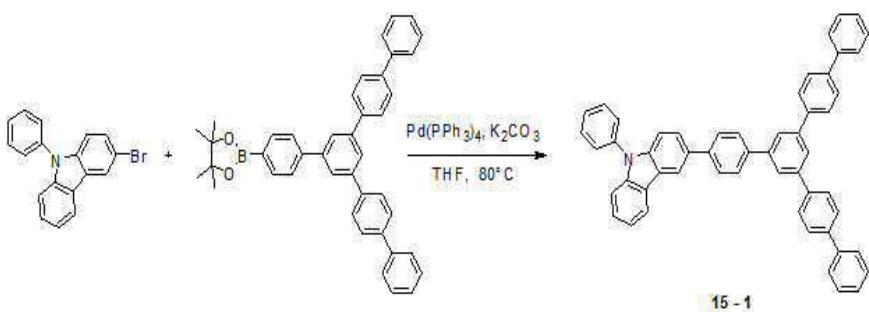
14 - 1

[0468]

[0469]

질소 환경에서 중간체 I-24(10 g, 21.5 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 benzofuran-2-ylboronic acid(3.83 g, 23.6 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.75 g, 0.65 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(6.33 g, 43 mmol)을 넣고 80 °C에서 16시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 14-1(9.9 g, 92 %)을 얻었다.

[0471]

실시예 17: 화합물 15-1의 제조

I - 28

15 - 1

[0472]

[0473]

질소 환경에서 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole(10 g, 31.0 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.15 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-28(18.1 g, 31.0 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(1.07 g, 0.93 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(9.13 g, 62.0 mmol)을 넣고 80 °C에서 24시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 화합물 15-1(20.6 g, 91 %)을 얻었다.

[0475]

(Gaussian 툴을 이용한 에너지 준위 계)

[0476]

슈퍼컴퓨터 GAIA (IBM power 6)를 사용하여 Gaussian 09 방법으로 각 재료의 에너지 준위를 계산하였다. 그 결과는 하기 표 1과 같다.

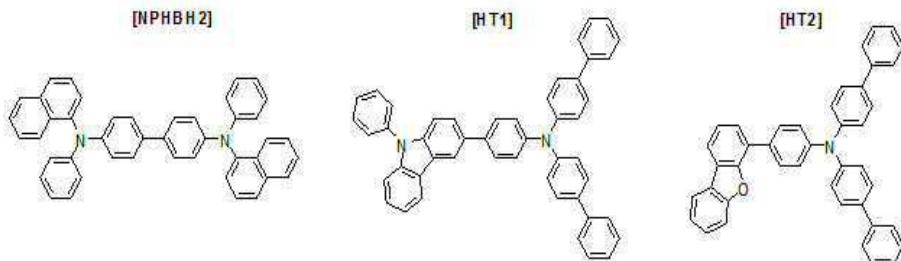
표 1

[0477]

재료	HOMO	LUMO
1-7	5.34	2.49
1-20	5.39	2.27
2-1	5.34	2.19
3-1	5.37	2.33
4-1	5.47	2.36
5-1	5.38	2.39

6-1	5.53	2.06
7-1	5.55	2.44
8-1	5.54	2.29
9-3	5.65	2.38
10-1	5.53	2.13
10-24	5.70	2.19
11-1	5.50	2.32
12-1	5.51	2.29
13-1	5.52	2.38
14-1	5.68	2.25
15-1	5.73	2.32
NPHBH2 (NPB)	5.19	2.12
HT1	5.24	2.10
HT2	5.38	2.26

[0478] 상기 계산에 사용된 비교예 구조는 하기와 같다.



[0479]

[0480] 상기 계산결과에 따르면 비교예에 비해 모두 깊은 HOMO준위를 가지는 것을 알 수 있다. 이는 벤젠기를 중심으로 치환체가 연결되어 나타나는 것으로 유추된다. 또한 아릴아민 보다는 카바졸이 더 깊은 HOMO준위를 가지며, 그 중에서도 카바졸 N위치로 벤젠 치환기가 연결될 경우 더 깊은 HOMO준위를 가짐을 알 수 있다.

[0482]

(유기발광소자의 제조)

[0483] 실시예 18: 유기발광소자의 제조 (블루 보조층)

[0484]

ITO(Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송 시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정 한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상부에 4,4'-bis[N-[4-{N,N-bis(3-methylphenyl)amino}-phenyl]-N-phenylamino]biphenyl (DNTPD)를 진공 증착하여 600 Å 두께의 정공 주입층을 형성하였다. 이어서 HT1을 사용하여 진공 증착으로 250 Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 여기에 보조층으로 실시예 1에서 제조된 화합물 1-7을 사용하여 진공 증착으로 50 Å 두께의 정공 수송층의 보조층을 형성하였다. 상기 정공 수송층 상부에 9,10-di-(2-naphthyl)anthracene(AND)을 호스트로 사용하고 도판트로 2,5,8,11-tetra(tert-butyl)perylene(TBPe)를 3중량%로 도핑하여 진공 증착으로 250 Å 두께의 발광층을 형성하였다. 그 후 상기 발광층 상부에 Alq₃를 진공 증착하여 250 Å 두께의 전자 수송층을 형성하였다. 상기 전자 수송층 상부에 LiF 10 Å과 Al 1000 Å을 순차적으로 진공 증착하여 음극을 형성함으로써 유기발광소자를 제조하였다.

[0485]

상기 유기발광소자는 5층의 유기박막층을 가지는 구조로 되어 있으며, 구체적으로 Al (1000 Å) / LiF (10 Å) / Alq₃ (250 Å) / EML [AND : TBPe = 97 : 3] (250 Å) / 보조층 (50 Å) / HT1 (250 Å) / DNTPD (600 Å) / ITO (1500 Å)의 구조로 제작하였다.

[0486]

실시 예 19

[0488]

상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 2를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조

하였다.

[0490] 실시 예 20

[0491] 상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 3을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0493] 실시 예 21

[0494] 상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 4를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0496] 실시 예 22

[0497] 상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 5를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0499] 실시 예 23

[0500] 상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 6을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0502] 실시 예 24

[0503] 상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 7을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0505] 실시 예 25

[0506] 상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 8을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0508] 실시 예 26

[0509] 상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 9를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0511] 실시 예 27

[0512] 상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 10을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0514] 실시 예 28

[0515] 상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 11을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0517] 실시 예 29

상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 12를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0520] 실시 예 30

상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 13을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0523] 실시 예 31

상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 14를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0526] 실시 예 32

상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 15를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0529] 실시 예 33

상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 16을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0532] 실시 예 34

상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 실시예 17을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0535] 비교예 1

상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 NPB를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다. 상기 NPB의 구조는 하기에 기재되어 있다.

[0538] 비교예 2

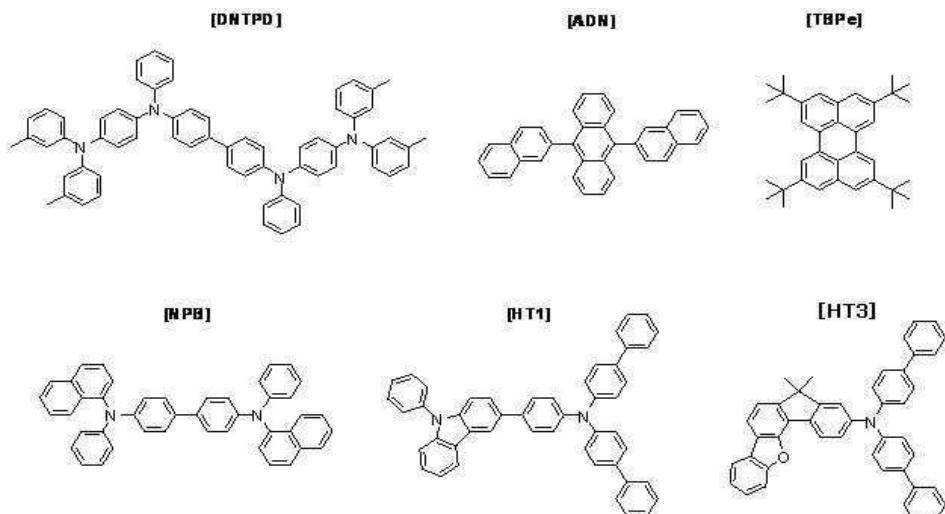
상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 HT1를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다. 상기 HT1의 구조는 하기에 기재되어 있다.

[0541] 비교예 3

상기 실시예 18에서, 실시예 1 대신 HT3를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다. 상기 HT3의 구조는 하기에 기재되어 있다

[0544]

상기 유기발광소자 제작에 사용된 DNTPD, AND, TBPe, NPB, HT1 및 HT3의 구조는 하기와 같다.



[0545]

[0546]

(유기발광소자의 성능 측정)

[0547]

상기 실시예 18 내지 34와 비교예 1 내지 3에서 제조된 각각의 유기발광소자에 대하여 전압에 따른 전류밀도 변화, 휘도변화 및 발광효율을 측정하였다. 구체적인 측정방법은 하기과 같고, 그 결과는 하기 표 2에 나타내었다

[0549]

(1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[0550]

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

[0552]

(2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

[0553]

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

[0555]

(3) 발광효율 측정

[0556]

상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm^2)의 전류 효율(cd/A) 을 계산하였다.

표 2

[0557]

소자	정공 수송층에 사용한 화합물	전압 (V)	색 (EL color)	효율 (cd/A)	반감 수명 (h) At 1000 cd/m ²
실시예 18	1-7	4.1	Blue	6.5	1,400
실시예 19	1-20	3.9	Blue	6.7	1,350
실시예 20	2-1	3.8	Blue	7.0	1,200
실시예 21	3-1	3.8	Blue	6.8	1,850
실시예 22	4-1	4.0	Blue	6.5	1,300
실시예 23	5-1	3.9	Blue	6.1	1,400
실시예 24	6-1	4.7	Blue	7.8	1,650
실시예 25	7-1	4.5	Blue	7.6	1,800
실시예 26	8-1	4.6	Blue	6.8	1,350
실시예 27	9-3	4.7	Blue	6.5	1,500
실시예 28	10-1	5.0	Blue	6.3	1,700
실시예 29	10-24	5.3	Blue	6.0	1,400
실시예 30	11-1	5.1	Blue	6.5	1,950

실시예 31	12-1	5.5	Blue	5.9	1,200
실시예 32	13-1	5.6	Blue	5.8	1,450
실시예 33	14-1	5.8	Blue	6.2	1,350
실시예 34	15-1	6.5	Blue	5.5	1,300
비교예 1	NPB	7.1	Blue	3.9	760
비교예 2	HT1	6.6	Blue	5.7	1,340
비교예 3	HT2	5.9	Blue	6.1	1,450

[0558] 상기 표 2의 결과에 따르면 상기 실시예 18 내지 34에서 정공 수송층의 보조층으로 사용된 재료의 경우, 비교예 1 내지 3과 비교했을 때 구동전압이 많이 낮춰짐을 알 수 있다. 이는 블루 호스트의 깊은 HOMO 준위에 적합한 보조층의 역할임을 알 수 있다. 또한 이를 잘 이용할 경우(실시예 21, 25, 28, 30) 고효율 장수명의 소자도 만들 수 있다. 이를 바탕으로 우수한 정공 주입 및 정공 전달 능력을 가지는 저전압, 고효율, 고효도, 장수명의 유기발광소자를 제작할 수 있었다.

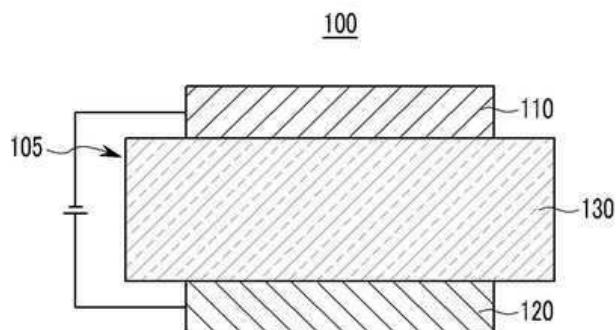
[0560] 본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

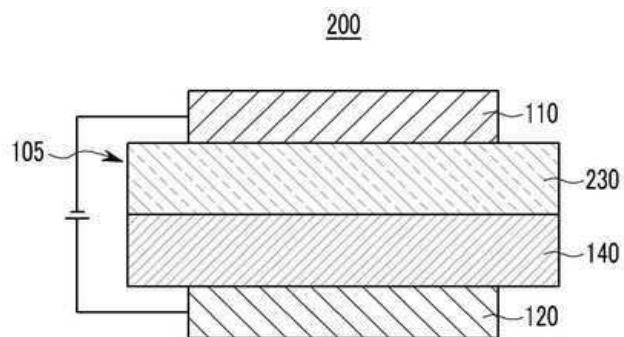
100 : 유기발광소자	110 : 음극
120 : 양극	105 : 유기박막층
130 : 발광층	140 : 정공 수송층
150 : 전자수송층	160 : 전자주입층
170 : 정공주입층	230 : 발광층 + 전자수송층

도면

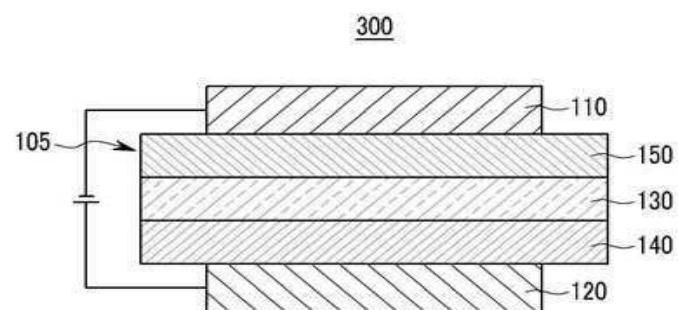
도면1



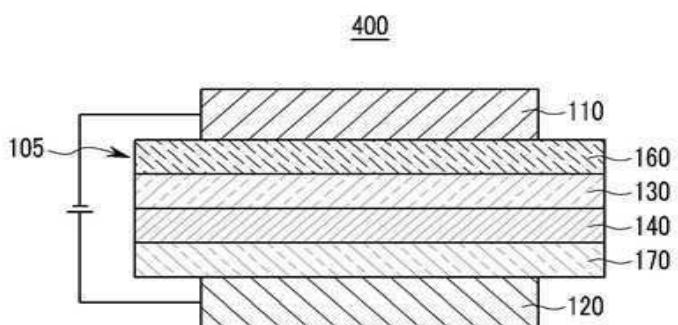
도면2



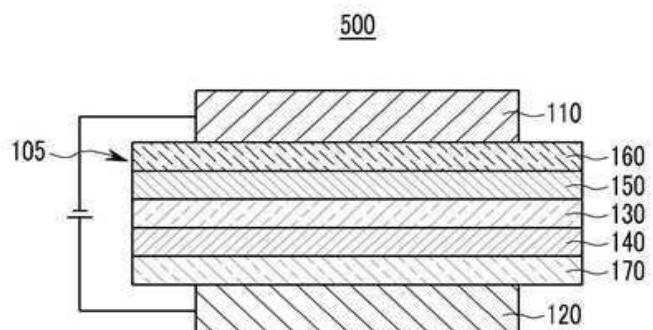
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	用于有机光电子器件的化合物，包括其的有机发光器件，以及包括该有机发光器件的显示器件		
---------	---	--	--

公开(公告)号	KR1020170069992A	公开(公告)日	2017-06-21
---------	----------------------------------	---------	------------

申请号	KR1020170074955	申请日	2017-06-14
-----	-----------------	-----	------------

[标]申请(专利权)人(译)	第一毛织株式会社
----------------	----------

申请(专利权)人(译)	第一毛织有限公司
-------------	----------

[标]发明人	LEE HANILL 이한일 JUNG SUNG HYUN 정성현 CHAE MI YOUNG 채미영 KIM JUN SEOK 김준석 RYU DONG WAN 류동완 YANG YONGTAK 양용탁 RYU DONGKYU 유동규 LEE NAMHEON 이남현 LEE SEUNGJAE 이승재 JANG YUNA 장유나 JO YOUNGKYOUNG 조영경 HUH DALHO 허달호 HONG JINSEOK 홍진석
--------	--

发明人	이한일 정성현 채미영 김준석 류동완 양용탁 유동규 이남현 이승재 장유나 조영경 허달호 홍진석
-----	---

IPC分类号	C09K11/06 H01L51/00 H01L51/50
--------	-------------------------------

CPC分类号	C09K11/06 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1088 C09K2211/1092 H01L51/0032 H01L51/50
--------	--

摘要(译)

用于有机光电子器件的化合物，包含该化合物的有机发光器件，以及包括该有机发光器件的显示器件。提供由以下化学式3表示的用于有机光电子器件的化合物。[式3]

100

