



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2013년09월09일
(11) 등록번호 10-1306531
(24) 등록일자 2013년09월03일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2009-0002318

(22) 출원일자 2009년01월12일

심사청구일자 2011년04월28일

(65) 공개번호 10-2010-0082986

(43) 공개일자 2010년07월21일

(56) 선행기술조사문헌

Chemical Abstract Accession Number 51:1803
(2001.04.22.)

(73) 특허권자

주식회사 엘지화학

서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)

(72) 발명자

이대웅

대전광역시 중구 서문로 32, 108동 502호 (문화동, 한밭우성아파트)

배재순

대전광역시 유성구 엑스포로 448, 104동 1203호 (전민동, 엑스포아파트)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

정순성

전체 청구항 수 : 총 14 항

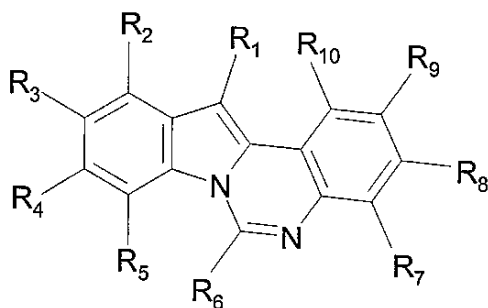
심사관 : 오세주

(54) 발명의 명칭 새로운 유기 발광 소자 재료 및 이를 이용한 유기 발광 소자

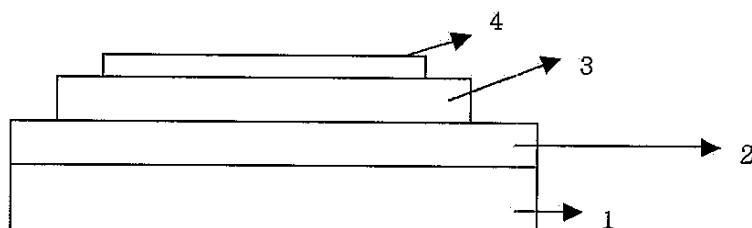
(57) 요약

본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물 및 상기 화합물을 이용한 유기 발광 소자에 관한 것으로서, 본 발명의 신규 화합물은 유기 발광 소자의 수명, 효율, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성을 크게 향상시킬 수 있다.

[화학식 1]



대표도 - 도1



(72) 발명자

남현

대전광역시 유성구 대덕대로603번길 19, LG화학사
원아파트 9동 203호 (도룡동)

홍성길

대전광역시 유성구 가정로 295, 3동 207호 (도룡동, LG사원아파트)

이동훈

대전광역시 유성구 노은로 416, 송림마을아파트
507동 601호 (하기동)

전상영

대전광역시 유성구 배울2로 42, 신동아파밀리에
507동 401호 (관평동)

특허청구의 범위

청구항 1

삭제

청구항 2

삭제

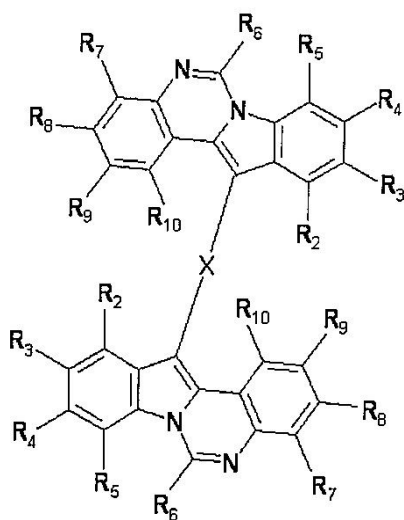
청구항 3

삭제

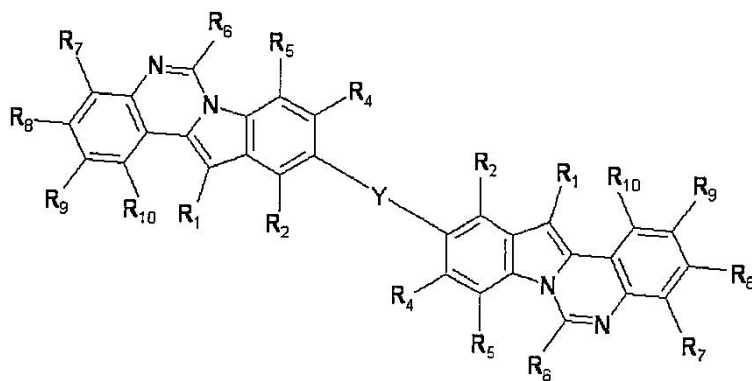
청구항 4

하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 하나로 표시되는 화합물:

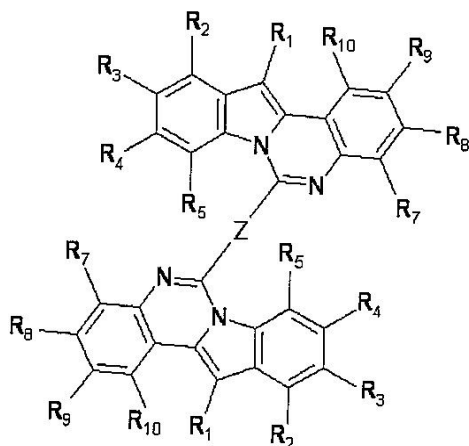
[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



[화학식 1-3]



상기 화학식 1-1 내지 1-3에 있어서,

R_1 및 R_6 은 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠기; 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{1-50} 의 알킬기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{1-40} 의 알콕시기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{2-50} 의 알케닐기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 니트릴기, 실란기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 비스스피로플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 의 아릴기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아세틸기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원소로 O, N, S 또는 P를 갖는 C_{3-60} 의 헤테로고리기; 알킬기, 알케닐기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환된 아민기; 알킬기, 알케닐기 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환된 플루오레닐기; 비스스피로플루오레닐기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기; 니트릴기; 니트로기; 아미드기; 에스테르기; 실란기 및 게르마늄기로 이루어진 군에서 선택되며,

R_2 , R_4 , R_5 및 R_7 내지 R_{10} 은 수소이고,

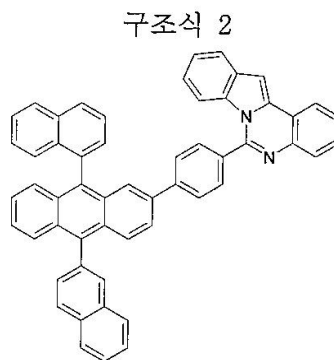
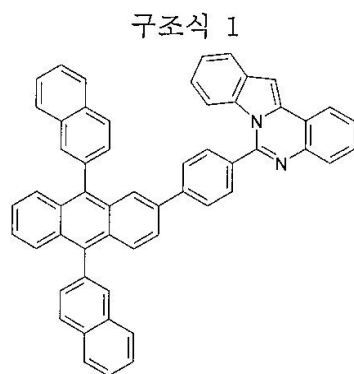
R_3 은 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 니트릴기, 실란기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 비스스피로플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 의 아릴기;

할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원소로 O, N, S 또는 P를 갖는 C₃₋₆₀의 헤테로 고리기; 알킬기, 알케닐기 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환된 플루오레닐기; 비스스피로플루오레닐기; 또는 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이며,

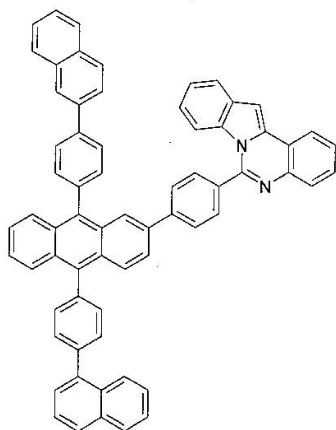
X, Y 및 Z는 각각 독립적으로 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기, 실란기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 비스스피로플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀의 아릴렌기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원소로 O, N, S 또는 P를 갖는 C₃₋₆₀의 2가 헤테로 고리기; 알킬기, 알케닐기 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환된 플루오레닐기; 비스스피로플루오레닐기; 및 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기로 이루어진 군에서 선택된다.

청구항 5

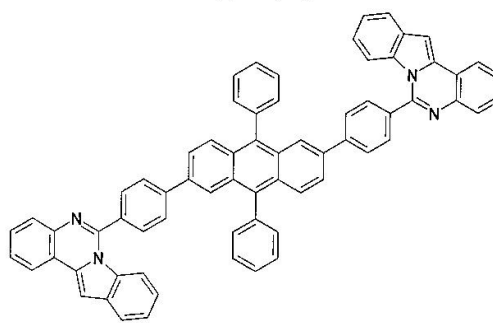
하기 구조식 1 내지 구조식 72 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물.



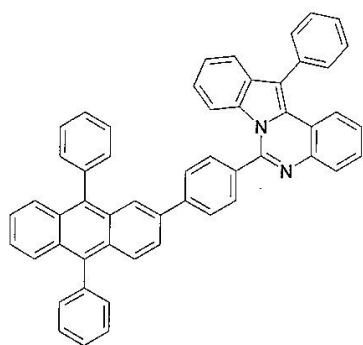
구조식 3



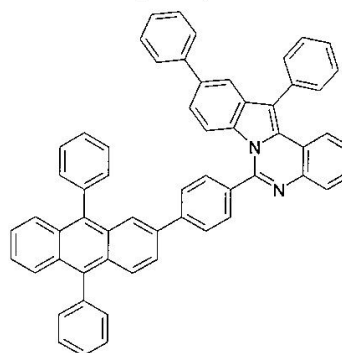
구조식 4



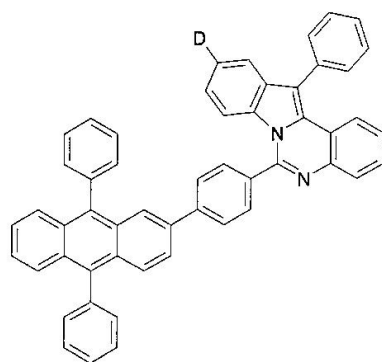
구조식 5



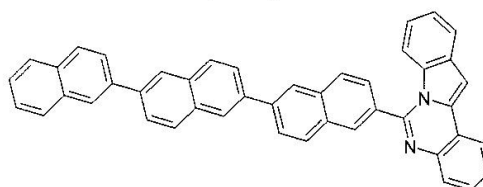
구조식 6



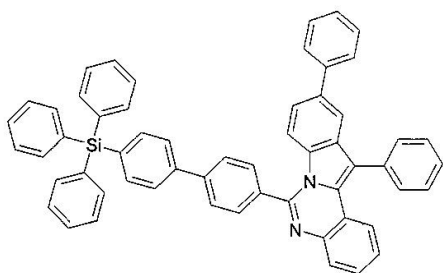
구조식 7



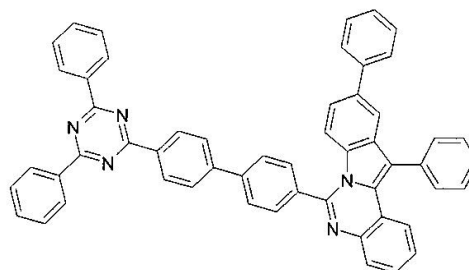
구조식 8



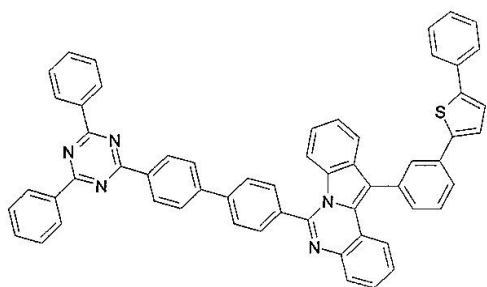
구조식 9



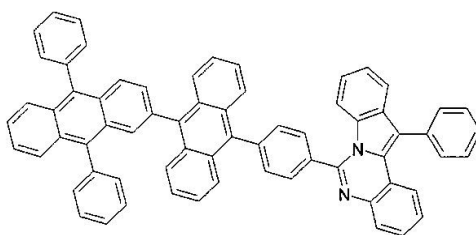
구조식 10



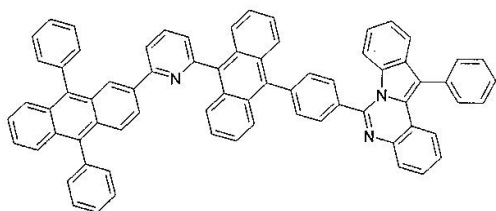
구조식 11



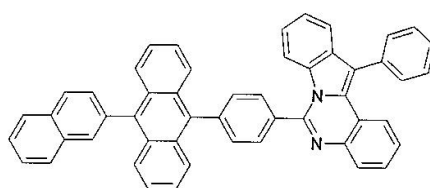
구조식 12



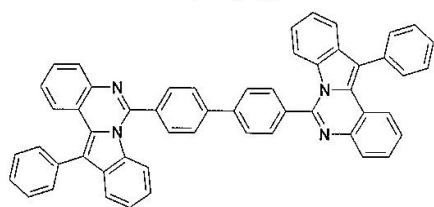
구조식 13



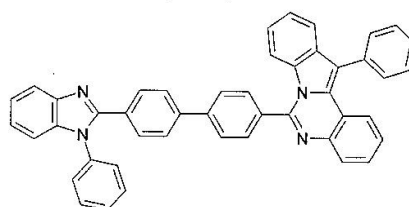
구조식 14



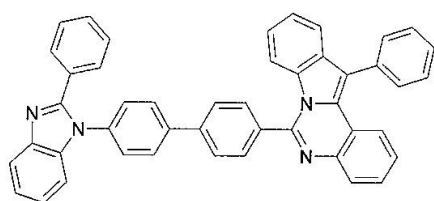
구조식 15



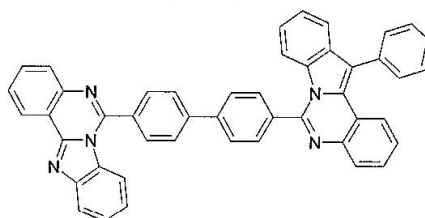
구조식 16



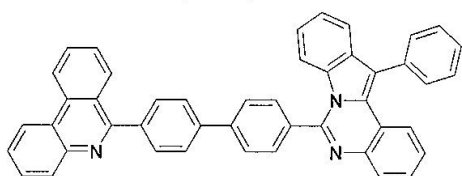
구조식 17



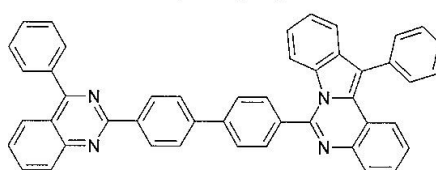
구조식 18



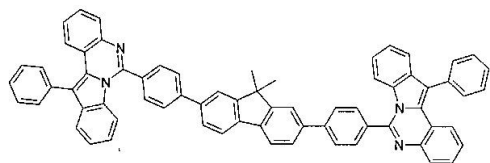
구조식 19



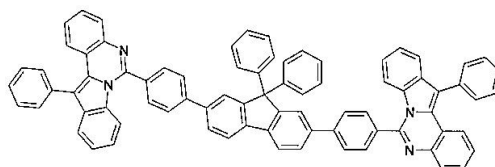
구조식 20



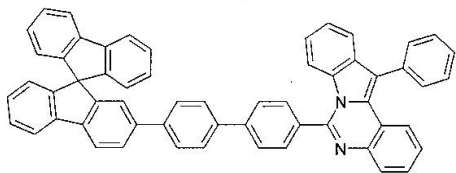
구조식 21



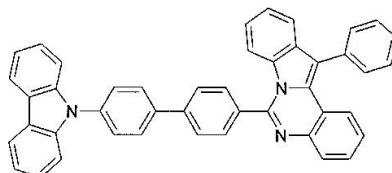
구조식 22



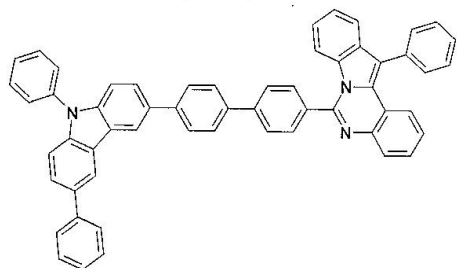
구조식 23



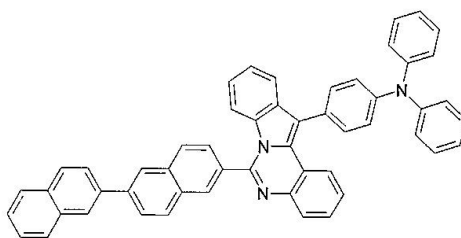
구조식 24



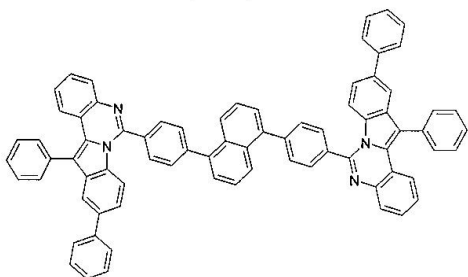
구조식 25



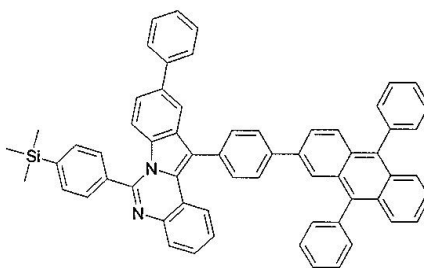
구조식 26



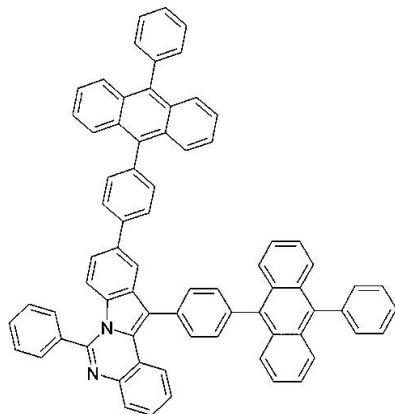
구조식 27



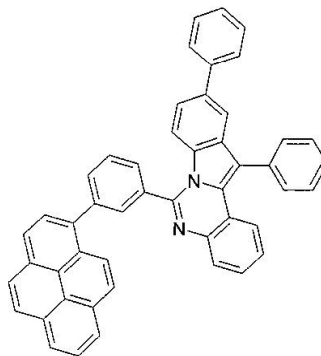
구조식 28



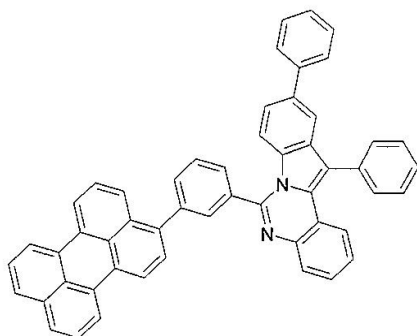
구조식 29



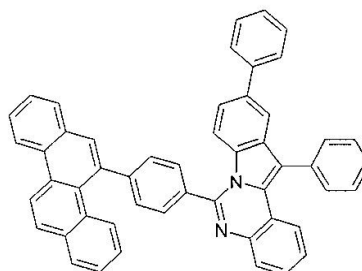
구조식 30



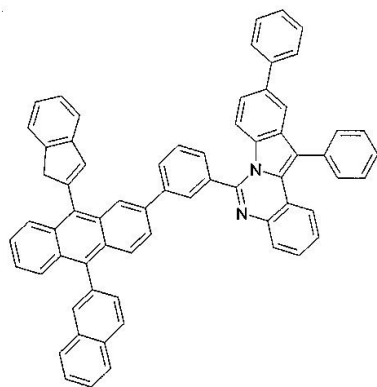
구조식 31



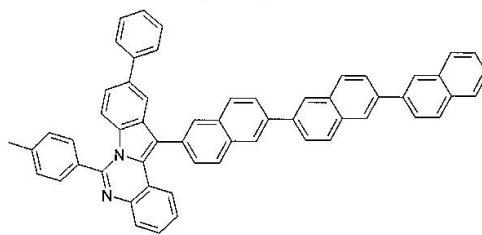
구조식 32



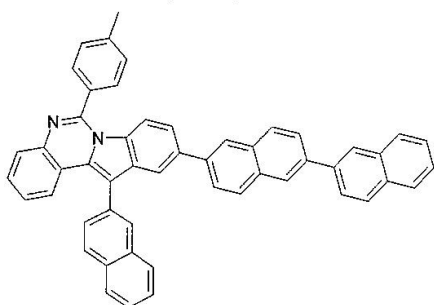
구조식 33



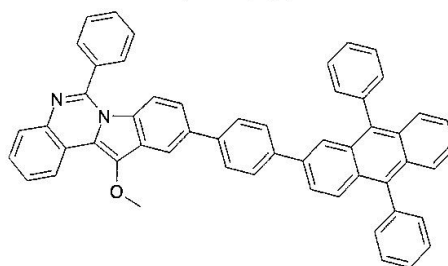
구조식 34



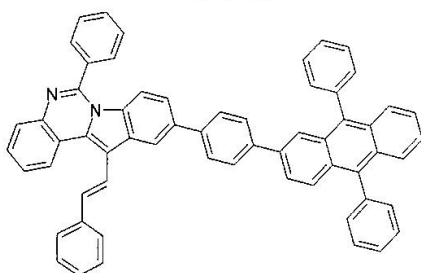
구조식 35



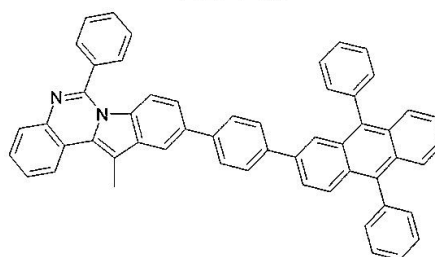
구조식 36



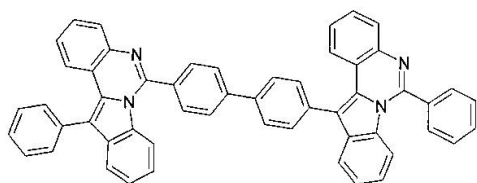
구조식 37



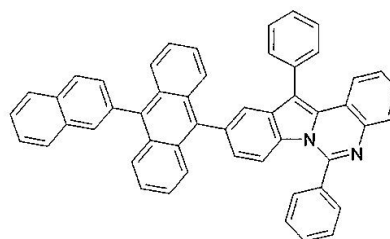
구조식 38



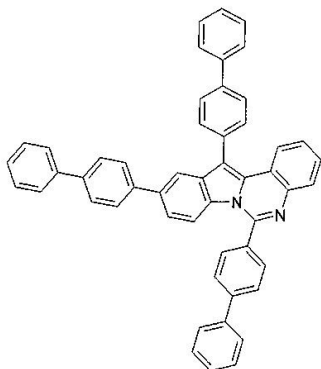
구조식 39



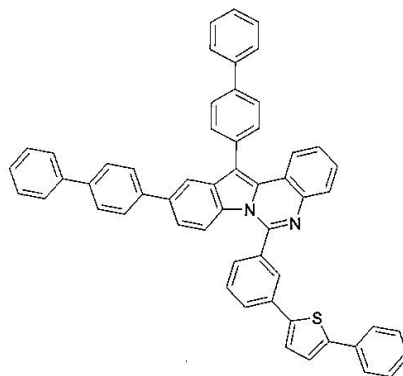
구조식 40



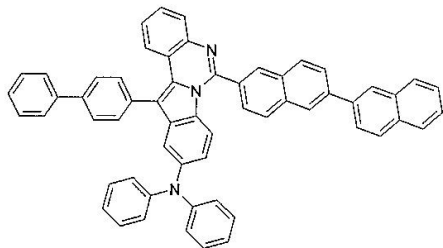
구조식 41



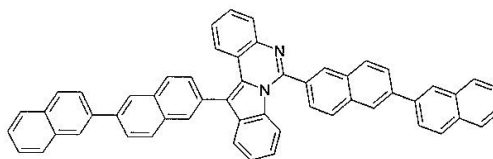
구조식 42



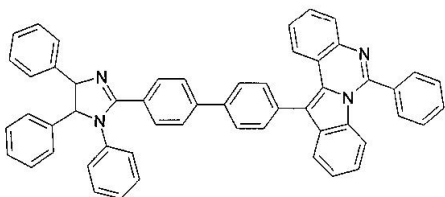
구조식 43



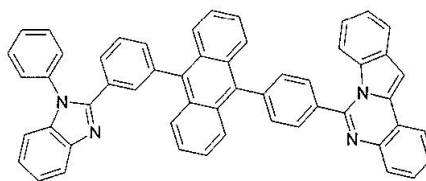
구조식 44



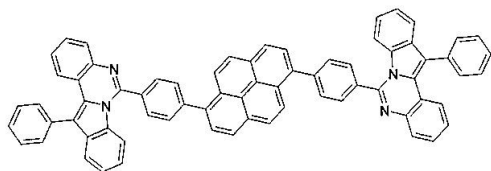
구조식 45



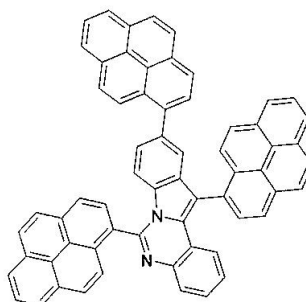
구조식 46



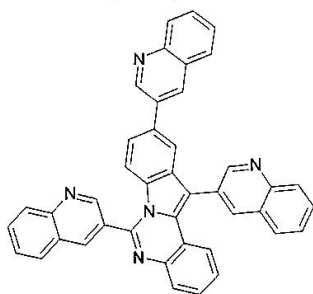
구조식 47



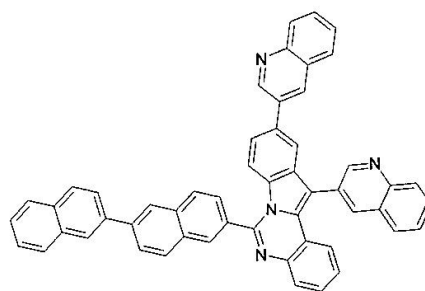
구조식 48



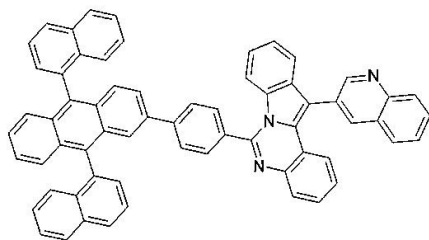
구조식 49



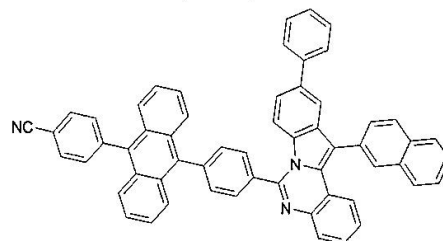
구조식 50



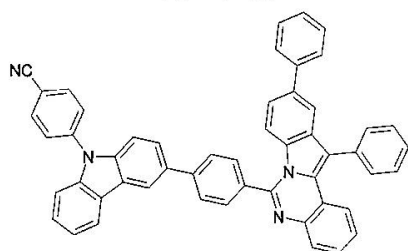
구조식 51



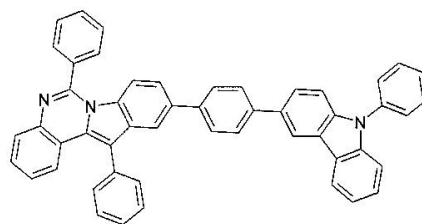
구조식 52



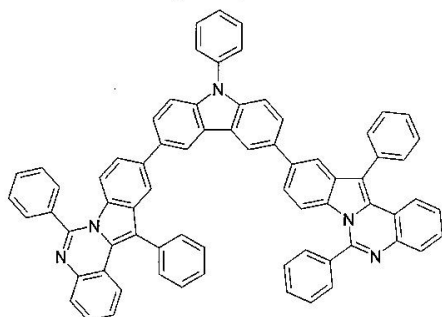
구조식 53



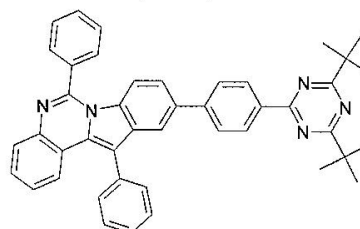
구조식 54



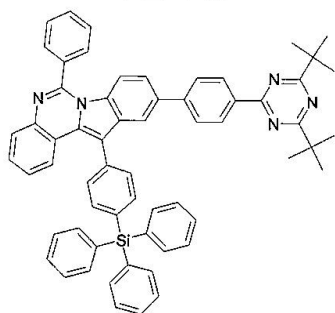
구조식 55



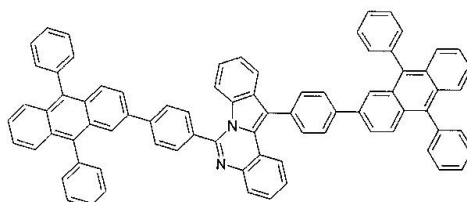
구조식 56



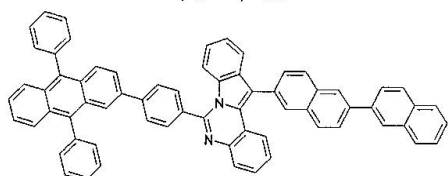
구조식 57



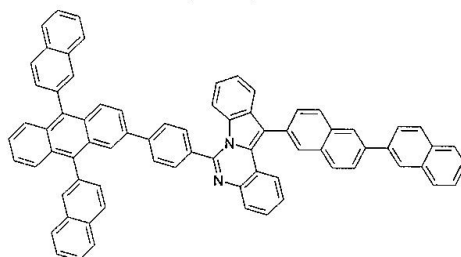
구조식 58



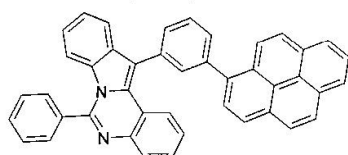
구조식 59



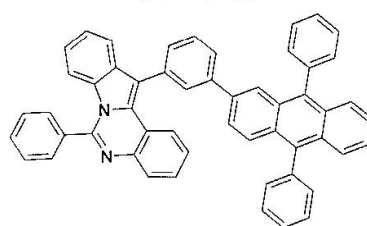
구조식 60



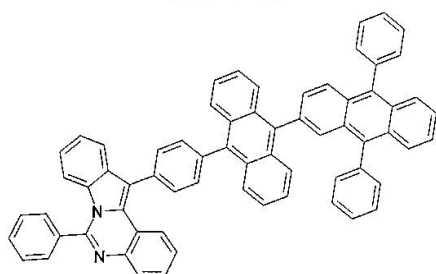
구조식 61



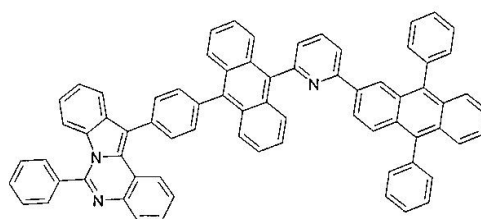
구조식 62



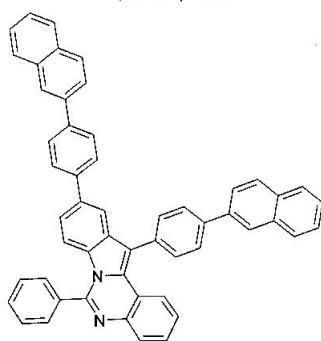
구조식 63



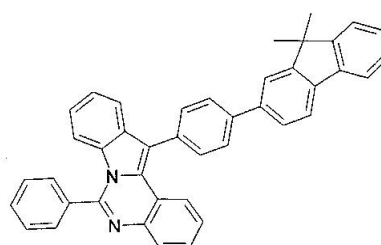
구조식 64



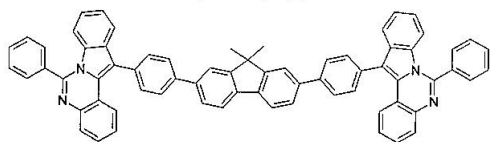
구조식 65



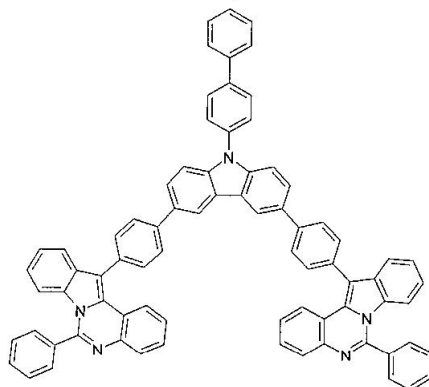
구조식 66



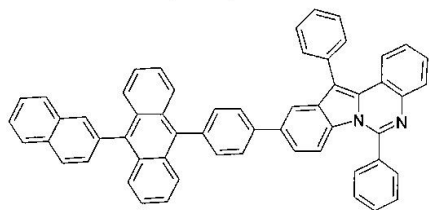
구조식 67



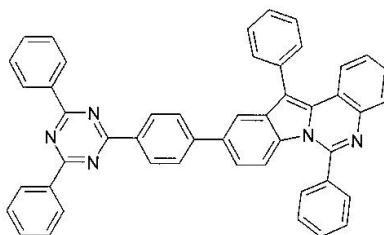
구조식 68



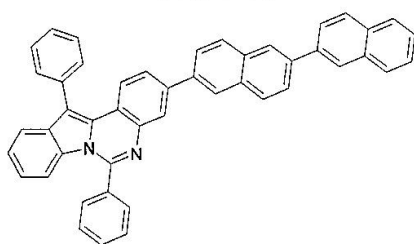
구조식 69



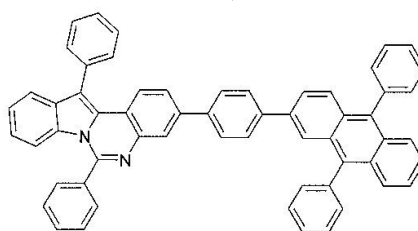
구조식 70



구조식 71



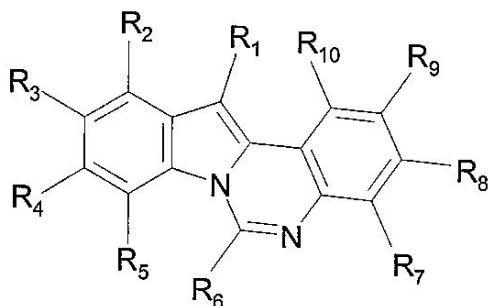
구조식 72



청구항 6

제 1 전극, 제 2 전극, 및 상기 제 1 전극과 제 2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전기 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는, 유기 전기 소자:

[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

R₁ 및 R₆은 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠기; 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로

고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{1-50} 의 알킬기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헥테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{1-40} 의 알콕시기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헥테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{2-50} 의 알케닐기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헥테로 고리기, 니트릴기, 실란기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 비스스피로플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 의 아릴기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헥테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원소로 O, N, S 또는 P를 갖는 C_{3-60} 의 헥테로 고리기; 알킬기, 알케닐기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환된 아민기; 알킬기, 알케닐기 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환된 플루오레닐기; 비스스피로플루오레닐기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헥테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기; 니트릴기; 니트로기; 아미드기; 에스테르기; 실란기 및 게르마늄기로 이루어진 군에서 선택되며,

R_2 , R_4 , R_5 및 R_7 내지 R_{10} 은 수소이고,

R_3 은 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헥테로 고리기, 니트릴기, 실란기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 비스스피로플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 의 아릴기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헥테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원소로 O, N, S 또는 P를 갖는 C_{3-60} 의 헥테로 고리기; 알킬기, 알케닐기 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환된 플루오레닐기; 비스스피로플루오레닐기; 또는 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헥테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이다.

청구항 7

청구항 6에 있어서, 상기 유기물층은 전자주입층 및 전자수송층을 포함하고, 이 전자주입층 및 전자수송층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는, 유기 전기 소자.

청구항 8

청구항 6에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 이 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는, 유기 전기 소자.

청구항 9

청구항 6에 있어서, 상기 유기물층은 정공주입층 및 정공수송층을 포함하고, 이 정공주입층 및 정공수송층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는, 유기 전기 소자.

청구항 10

청구항 6에 있어서, 상기 유기 전기 소자는 유기발광소자, 유기인광소자, 유기태양전지, 유기감광체(OPC) 및 유기트랜지스터로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는, 유기 전기 소자.

청구항 11

청구항 6에 있어서, 상기 유기물층은 전자수송층을 포함하고, 이 전자수송층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것인, 유기 전기 소자.

청구항 12

청구항 8에 있어서, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것인, 유기 전기 소자.

청구항 13

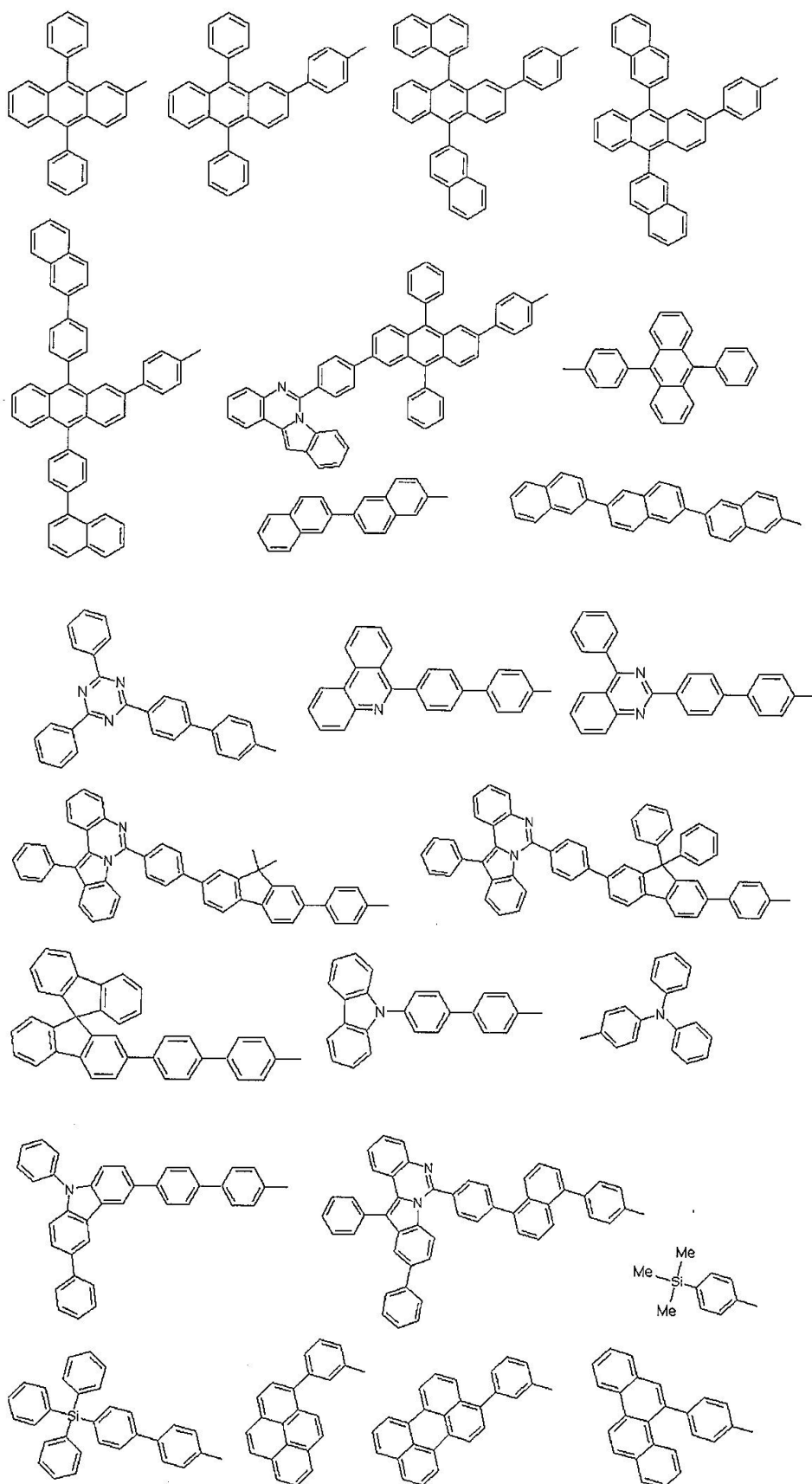
청구항 6에 있어서, 상기 유기물층은 정공수송층을 포함하고, 이 정공수송층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것인, 유기 전기 소자.

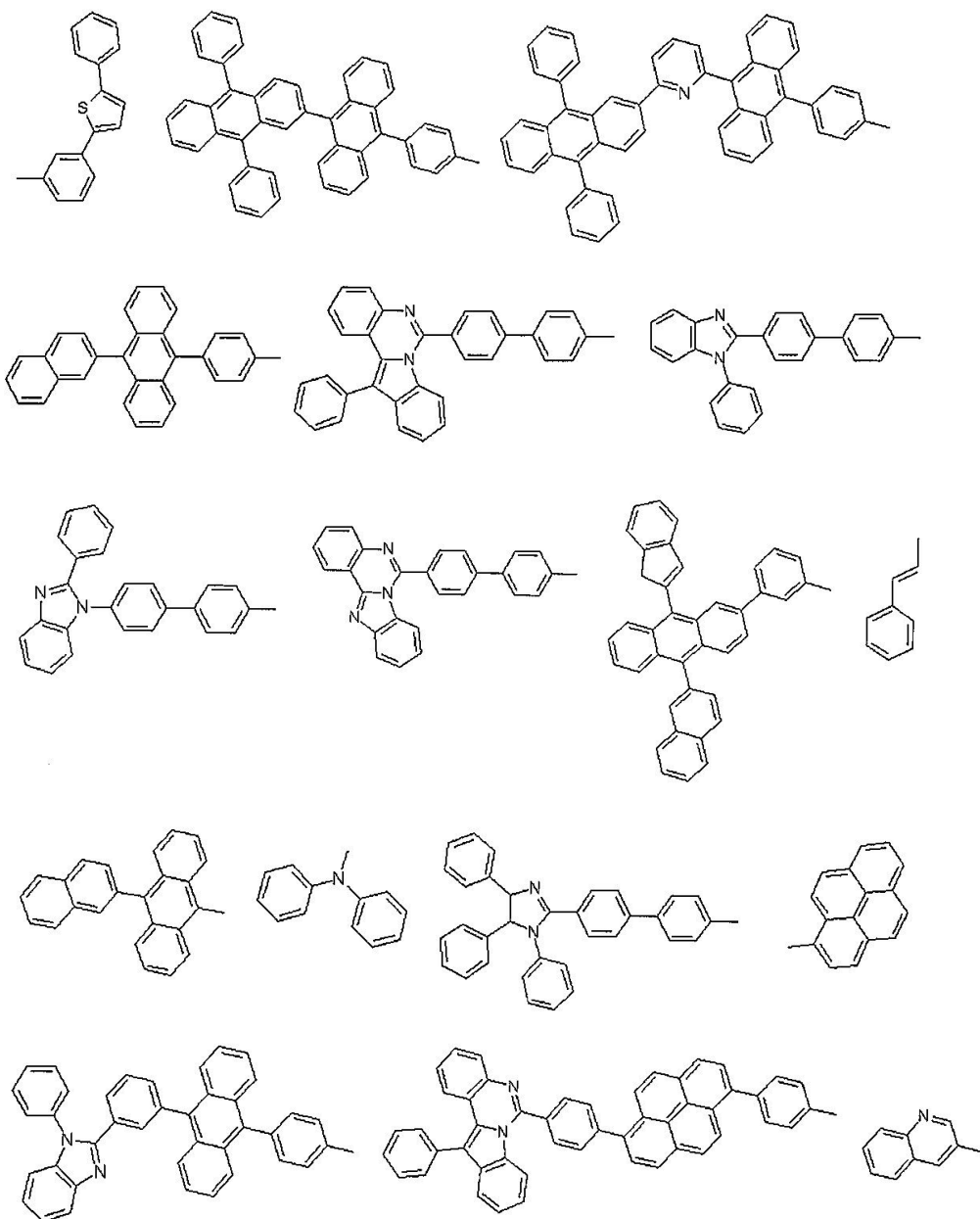
청구항 14

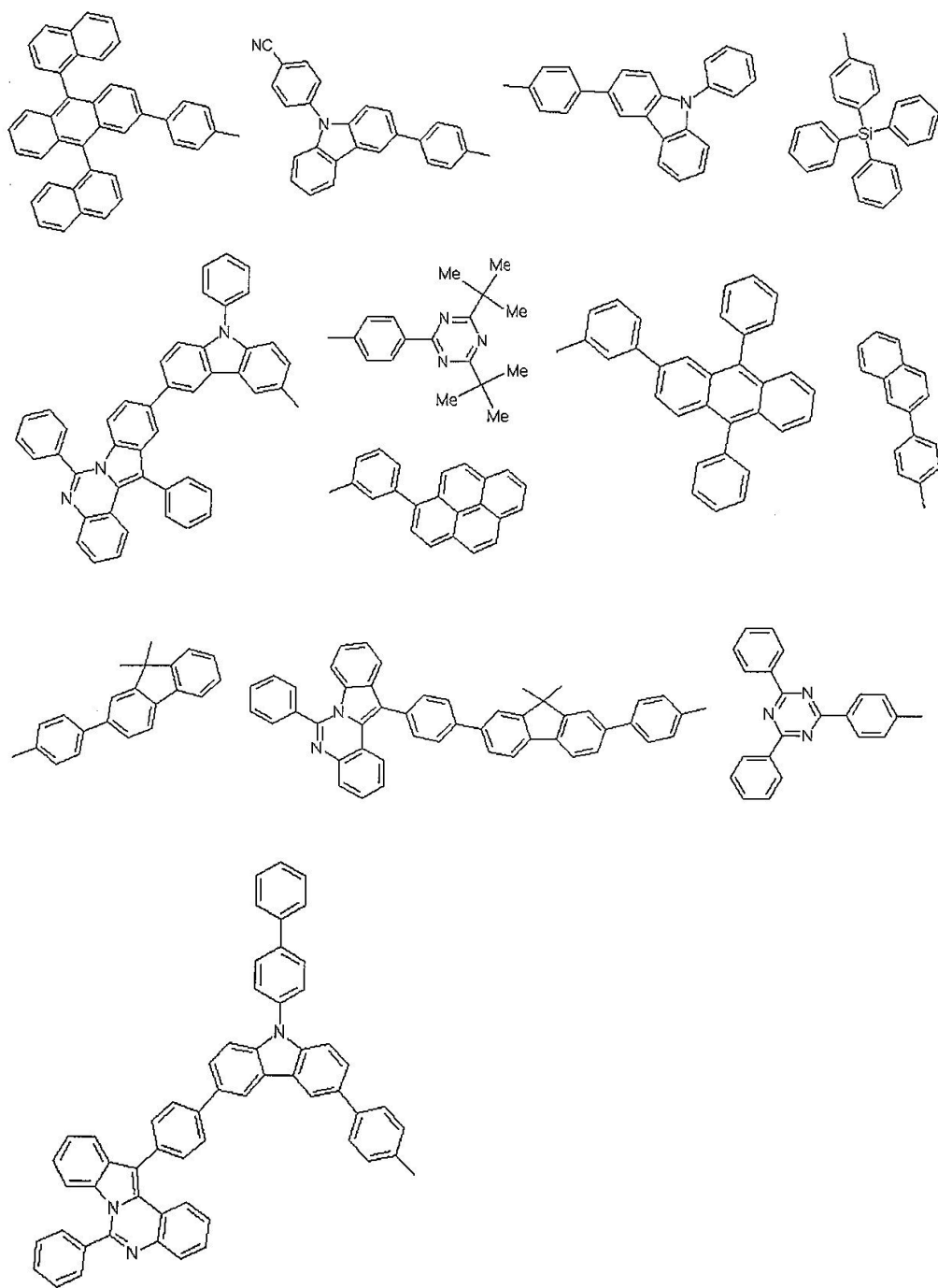
청구항 6에 있어서, 상기 화학식 1의 R_1 및 R_6 은 각각 독립적으로 수소; 중수소; C_{1-40} 의 알킬기; C_{1-40} 의 알콕시기; C_{1-40} 의 알킬기 또는 C_{6-60} 의 아릴기로 치환 또는 비치환된 C_{2-40} 의 알케닐기; 아세틸기; C_{1-40} 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_{7-50} 의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 C_{3-40} 의 헤테로 고리기, 니트릴기, 실란기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 비스스피로플루오레닐기 및 치환 또는 비치환된 카바졸릴기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 의 아릴기; 이종원자로서 O, N, S 또는 P를 갖는 C_{3-60} 의 헤테로 고리기, C_{7-50} 의 아릴알킬기, C_{8-40} 의 아릴알케닐기, C_{6-50} 의 아릴아민기, C_{6-12} 의 아릴기 또는 이종원자로서 O, N, S 또는 P를 갖는 C_{3-60} 의 헤테로 고리기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 플루오레닐기 및 니트릴기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 것을 특징으로 하는 유기 전기 소자.

청구항 15

청구항 6에 있어서, 상기 화학식 1의 R_1 및 R_6 은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 메틸기, 에틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 스틸벤, 나프틸기, 안트라세닐기, 페나트렌기, 파이레닐기, 페틸레닐기, 플루오렌기, 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딜기, 피라다진기, 퀴놀리닐기, 이소퀴롤린기, 아크리딜기, 메톡시, 에톡시, 카바졸릴 및 하기 치환기로 이루어진 군에서 선택되는 것인, 유기 전기 소자.



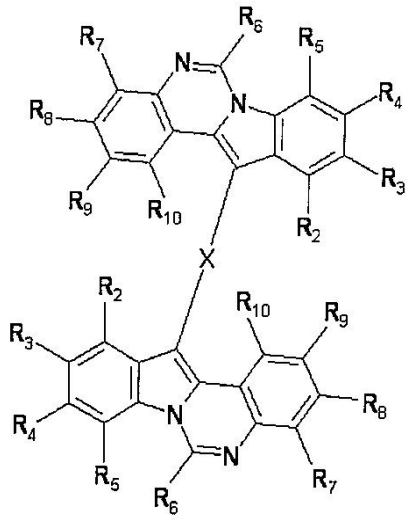




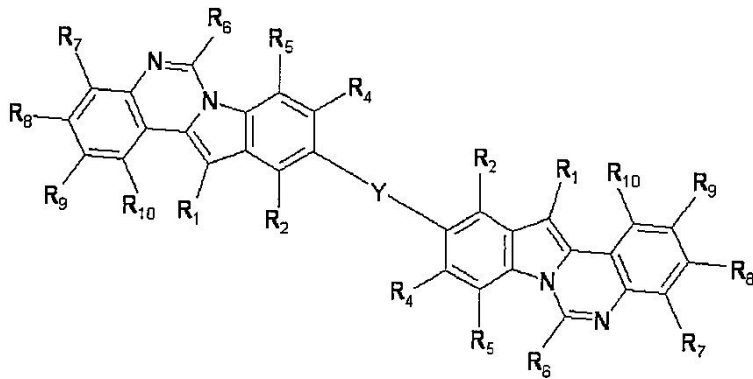
청구항 16

청구항 6에 있어서, 상기 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 하나인 것을 특징으로 하는, 유기 전기 소자:

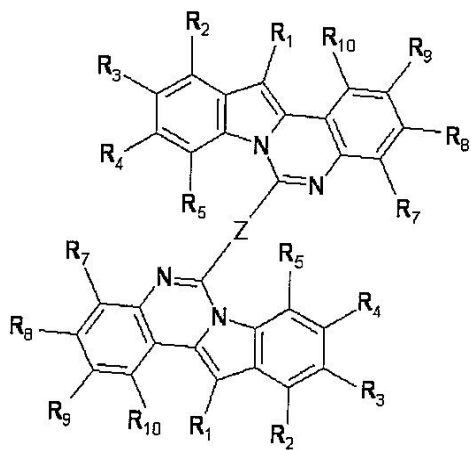
[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



[화학식 1-3]

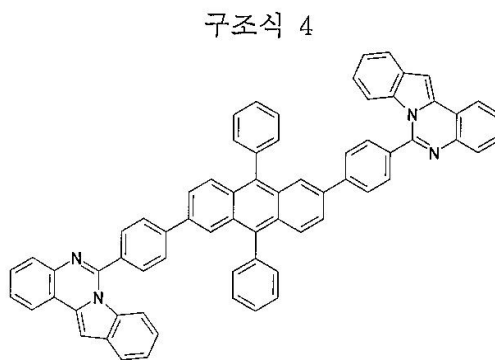
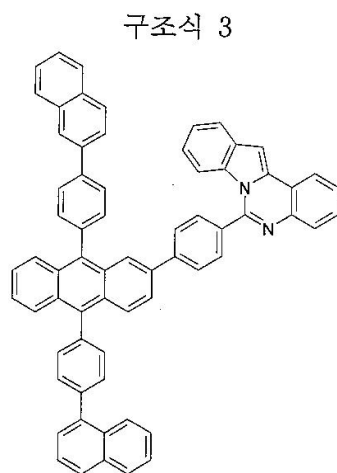
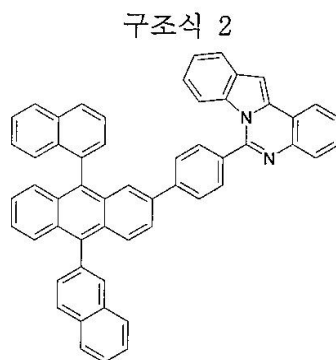
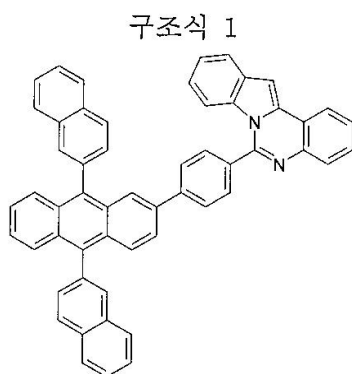


상기 화학식 1-1 내지 1-3에 있어서, R₁ 내지 R₁₀은 각각 서로 같거나 상이하며, 청구항 6에서의 정의와 같고,

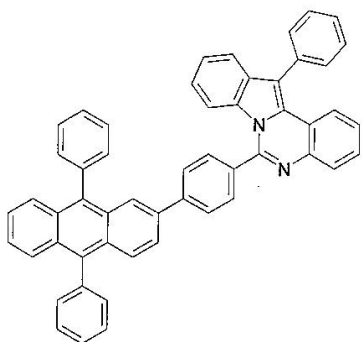
X, Y 및 Z는 각각 독립적으로 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기, 실란기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 비스스피로플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀의 아릴렌기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종 원소로 O, N, S 또는 P를 갖는 C₃₋₆₀의 2가 헤테로 고리기; 알킬기, 알케닐기 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환된 플루오레닐렌기; 비스스피로플루오레닐렌기; 및 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴렌기로 이루어진 군에서 선택된다.

청구항 17

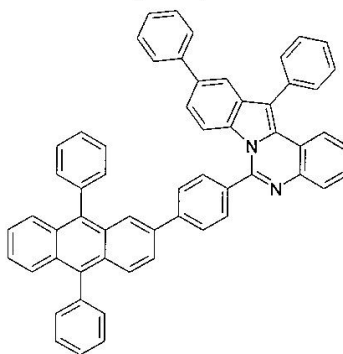
청구항 6에 있어서, 상기 화합물은 하기 구조식 1 내지 구조식 72 중 어느 하나로 표시되는 것인, 유기 전기 소자.



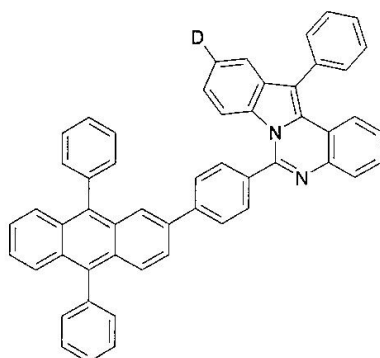
구조식 5



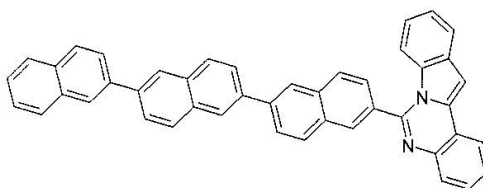
구조식 6



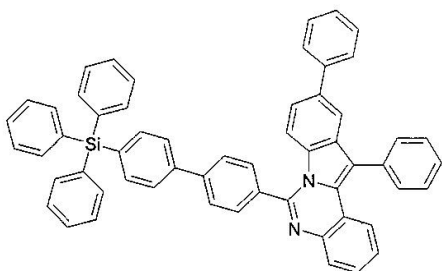
구조식 7



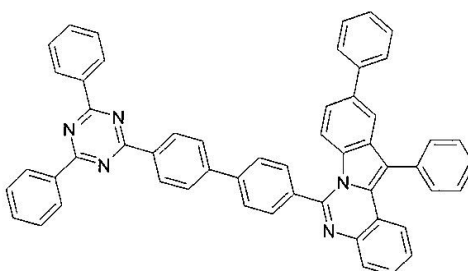
구조식 8



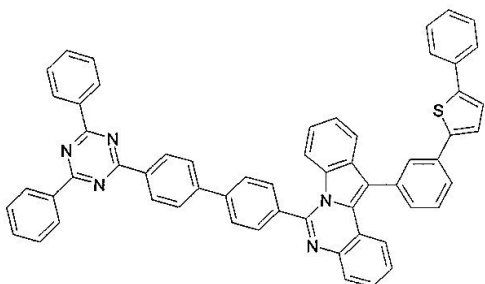
구조식 9



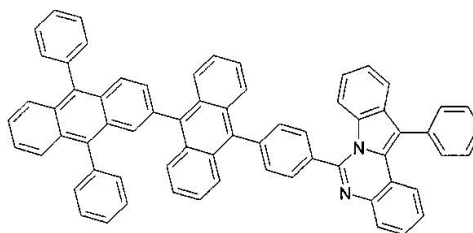
구조식 10



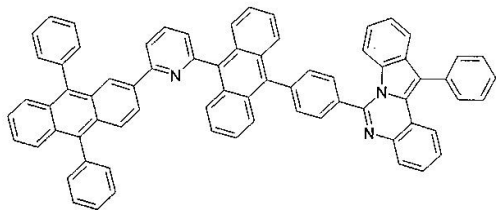
구조식 11



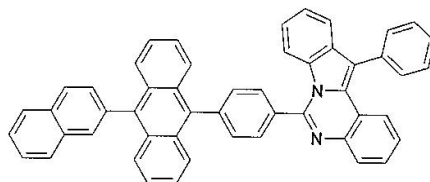
구조식 12



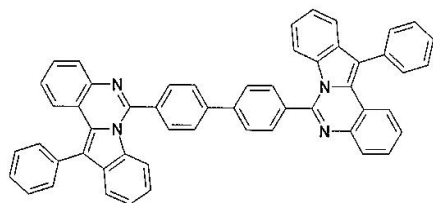
구조식 13



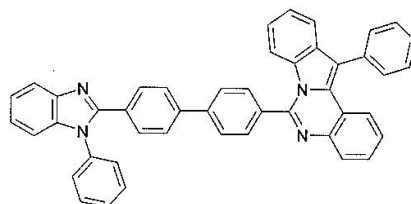
구조식 14



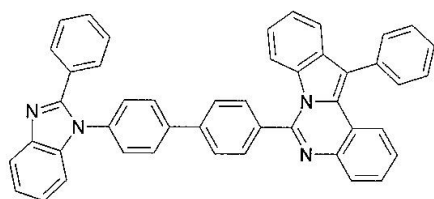
구조식 15



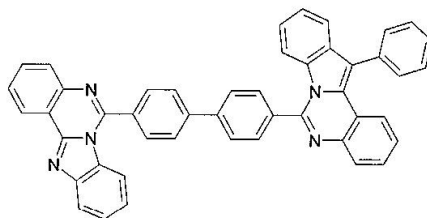
구조식 16



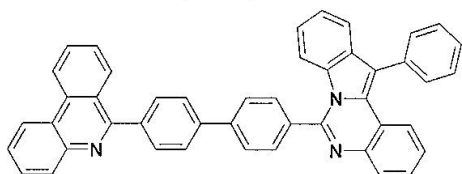
구조식 17



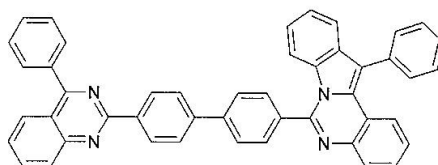
구조식 18



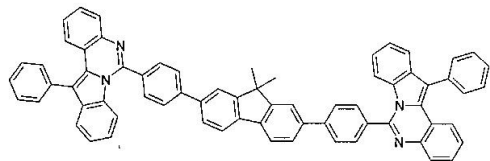
구조식 19



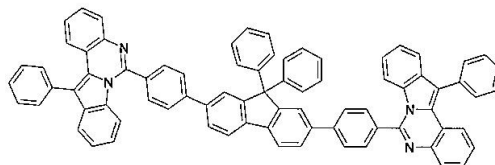
구조식 20



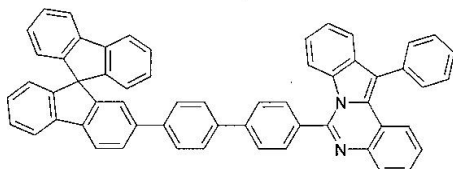
구조식 21



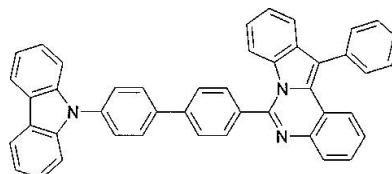
구조식 22



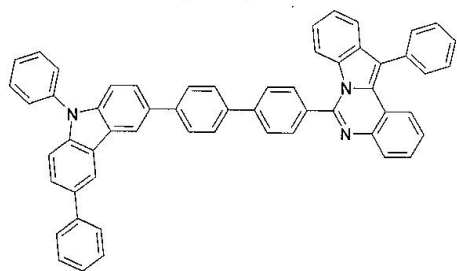
구조식 23



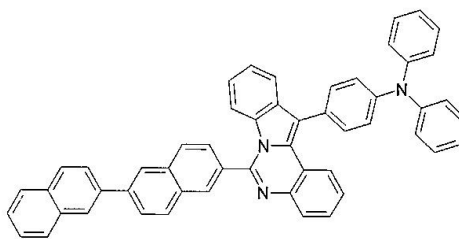
구조식 24



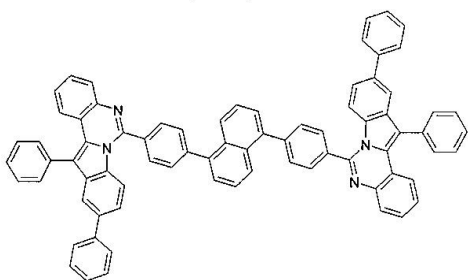
구조식 25



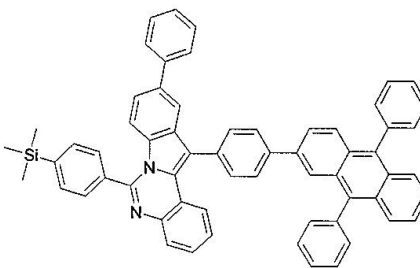
구조식 26



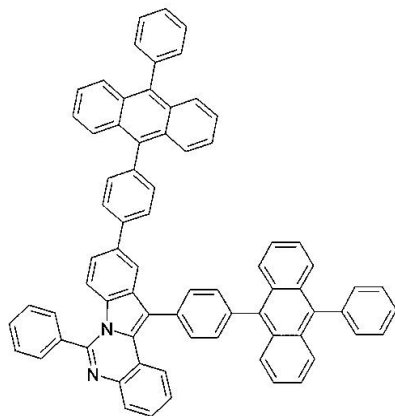
구조식 27



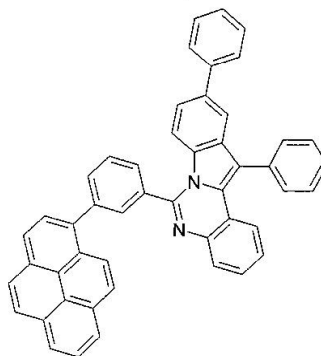
구조식 28



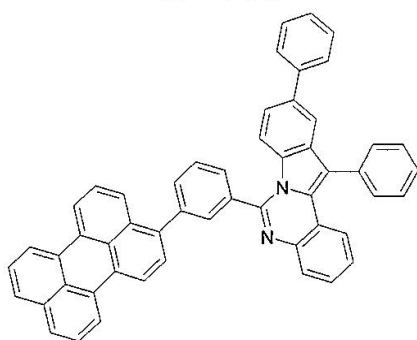
구조식 29



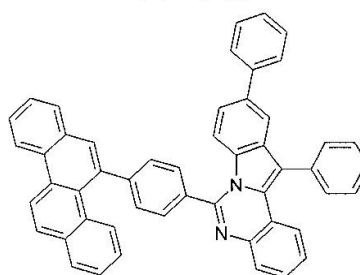
구조식 30



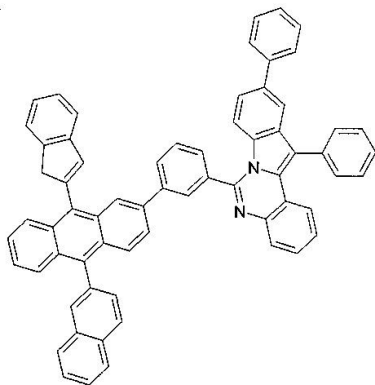
구조식 31



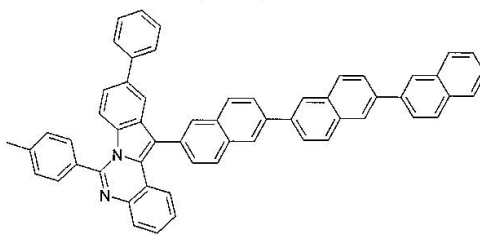
구조식 32



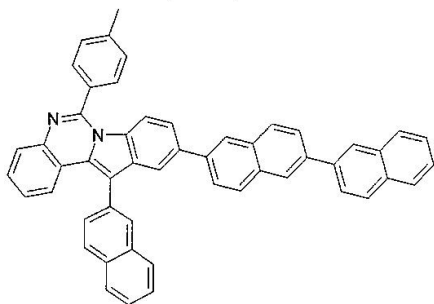
구조식 33



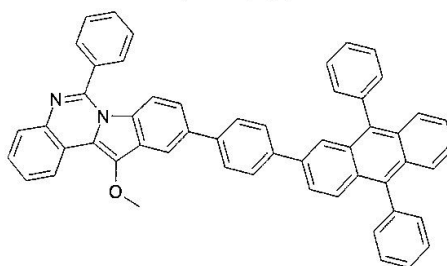
구조식 34



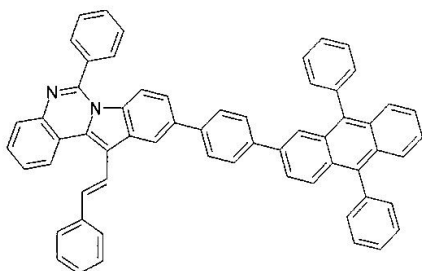
구조식 35



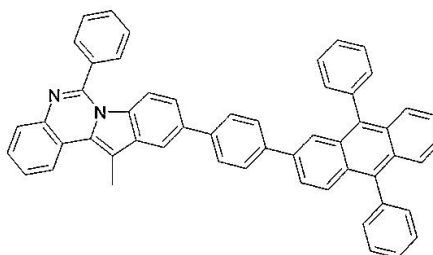
구조식 36



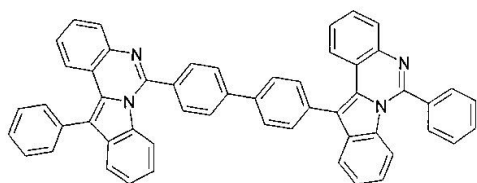
구조식 37



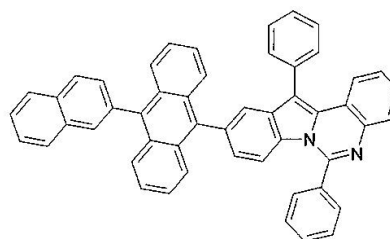
구조식 38



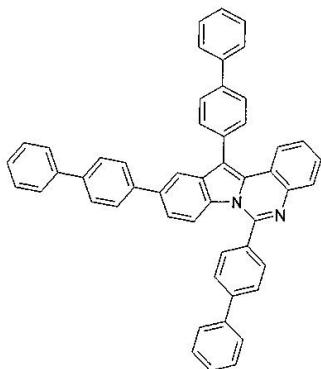
구조식 39



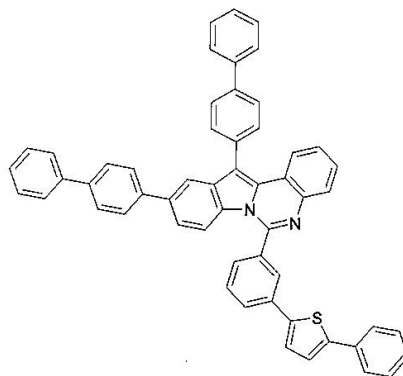
구조식 40



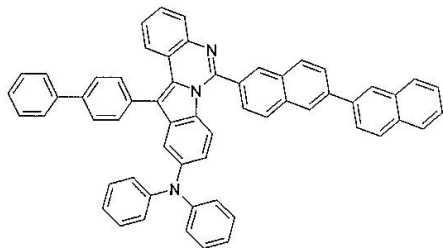
구조식 41



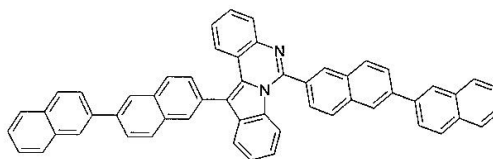
구조식 42



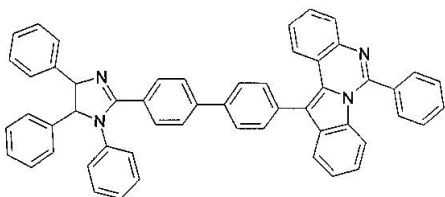
구조식 43



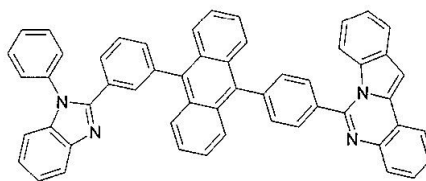
구조식 44



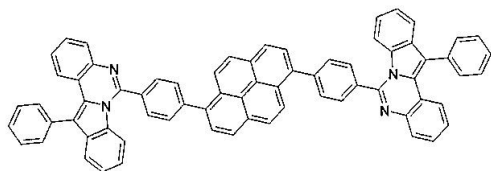
구조식 45



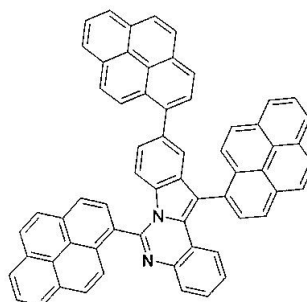
구조식 46



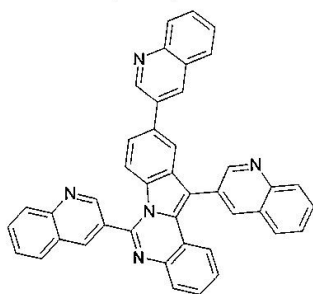
구조식 47



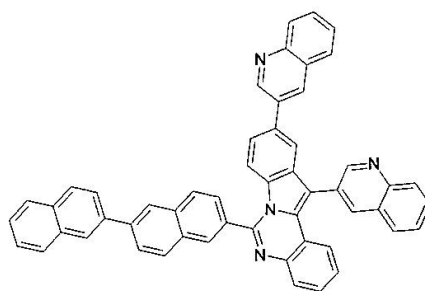
구조식 48



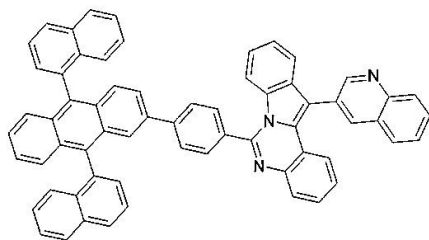
구조식 49



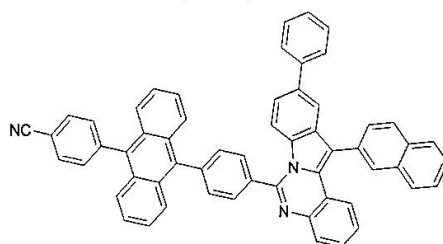
구조식 50



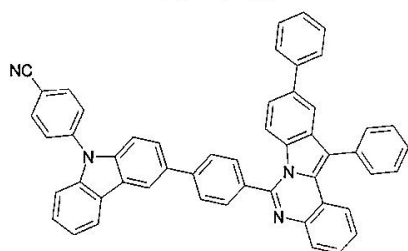
구조식 51



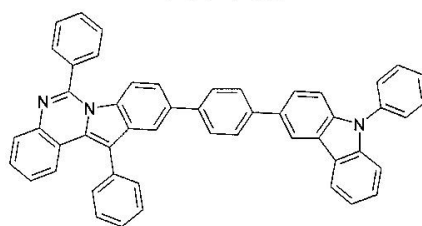
구조식 52



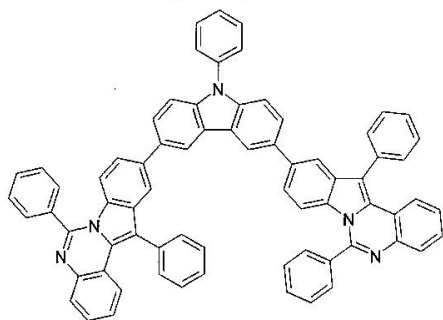
구조식 53



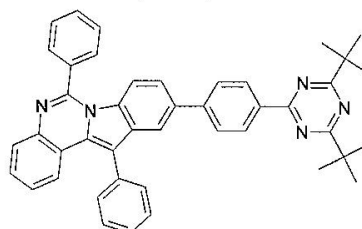
구조식 54



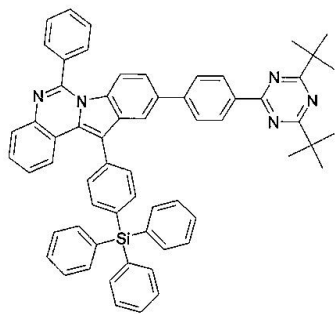
구조식 55



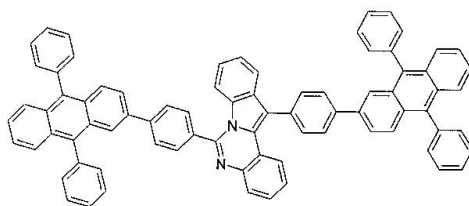
구조식 56



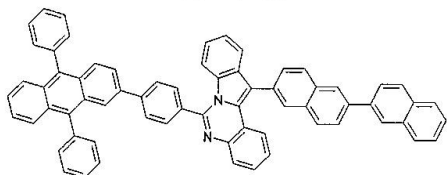
구조식 57



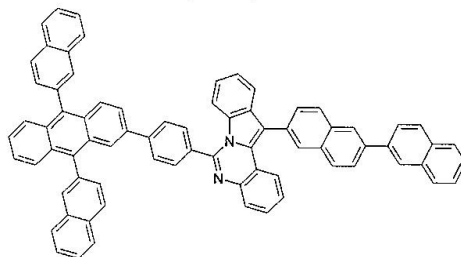
구조식 58



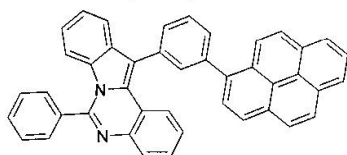
구조식 59



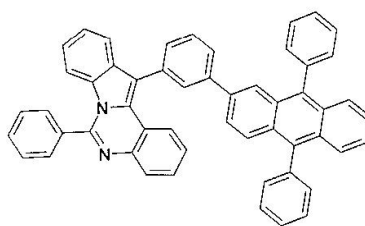
구조식 60



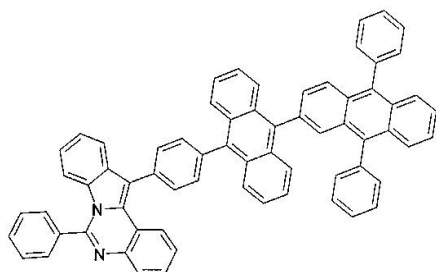
구조식 61



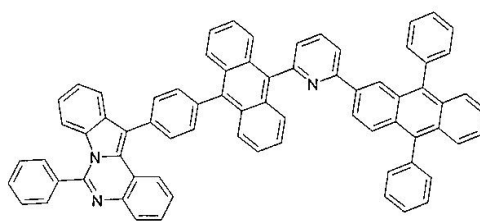
구조식 62



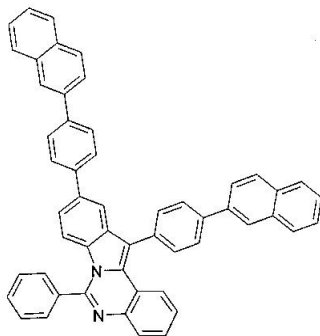
구조식 63



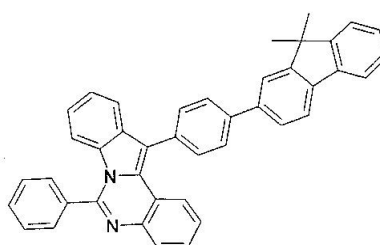
구조식 64



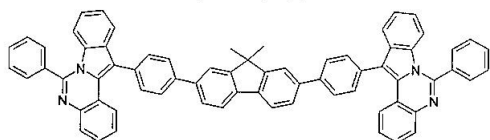
구조식 65



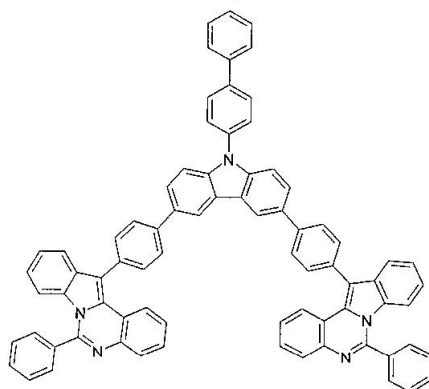
구조식 66



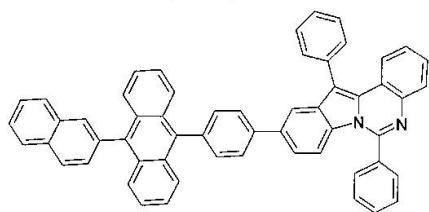
구조식 67



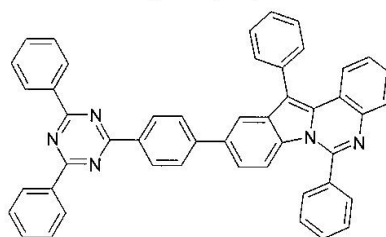
구조식 68



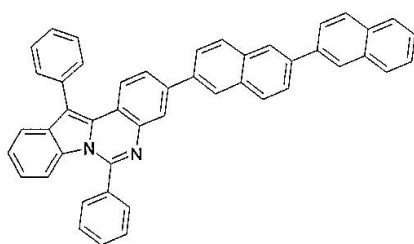
구조식 69



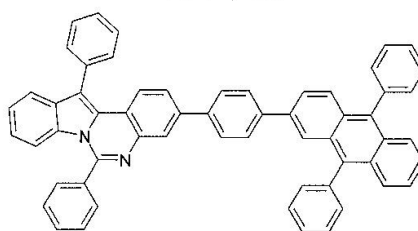
구조식 70



구조식 71



구조식 72



명세서

발명의 상세한 설명

기술분야

[0001] 본 발명은 유기 발광 소자의 수명, 효율, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성을 크게 향상시킬 수 있는 신규 화합물 및 상기 화합물이 유기화합물 층에 포함되어 있는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

[0002] 유기 발광 현상은 특정 유기 분자의 내부 프로세스에 의하여 전류가 가시광으로 전환되는 예의 하나이다. 유기 발광 현상의 원리는 다음과 같다. 양극과 음극 사이에 유기물 층을 위치시켰을 때 두 전극 사이에 전압을 걸어 주게 되면 음극과 양극으로부터 각각 전자와 정공이 유기물 층으로 주입된다. 유기물 층으로 주입된 전자와 정공은 재결합하여 엑시톤(exciton)을 형성하고, 이 엑시톤이 다시 바닥 상태로 떨어지면서 빛이 나게 된다. 이러한 원리를 이용하는 유기 발광소자는 일반적으로 음극과 양극 및 그 사이에 위치한 유기물층, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층을 포함하는 유기물 층으로 구성될 수 있다.

[0003] 유기 발광 소자에서 사용되는 물질로는 순수 유기 물질 또는 유기 물질과 금속이 착물을 이루는 착화합물이 대부분을 차지하고 있으며, 용도에 따라 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등으로 구분될 수 있다. 여기서, 정공주입 물질이나 정공수송 물질로는 p-타입의 성질을 가지는 유기 물질, 즉 쉽게 산화가 되고 산화시에 전기화학적으로 안정한 상태를 가지는 유기물이 주로 사용되고 있다. 한편, 전자

주입 물질이나 전자수송 물질로는 n-타입 성질을 가지는 유기 물질, 즉 쉽게 환원이 되고 환원시에 전기화학적으로 안정한 상태를 가지는 유기물이 주로 사용되고 있다. 발광층 물질로는 p-타입 성질과 n-타입 성질을 동시에 가진 물질, 즉 산화와 환원 상태에서 모두 안정한 형태를 갖는 물질이 바람직하며, 엑시톤이 형성되었을 때 이를 빛으로 전환하는 발광 효율이 높은 물질이 바람직하다.

[0004] 위에서 언급한 외에, 유기 발광 소자에서 사용되는 물질은 다음과 같은 성질을 추가적으로 갖는 것이 바람직하다.

[0005] 저전압 구동 가능한 고효율의 유기 발광 소자를 얻기 위해서는 유기 발광 소자 내로 주입된 정공 또는 전자들이 원활하게 발광층으로 전달되는 동시에, 주입된 정공과 전자들이 발광층 밖으로 빠져나가지 않도록 하여야 한다. 이를 위해서 유기 발광 소자에 사용되는 물질은 적절한 밴드갭(band gap)과 HOMO 또는 LUMO 에너지 준위를 가져야 한다. 현재 전자수송층 물질로 주로 사용되는 Alq3는 충분히 높은 HOMO 에너지 준위를 갖지 못하여, HOMO 에너지 준위가 상대적으로 높은 BA1q층을 더 사용하여야 하기 때문에 공정 및 유기 발광 소자 제조에 어려움이 있다.

[0006] 이외에도 유기 발광 소자에서 사용되는 물질은 화학적 안정성, 전하이동도, 전극이나 인접한 층과의 계면 특성 등이 우수하여야 한다. 즉, 유기 발광소자에서 사용되는 물질은 수분이나 산소에 의한 물질의 변형이 적어야 한다. 또한, 적절한 정공 또는 전자 이동도를 가짐으로써 유기 발광 소자의 발광층에서 정공과 전자의 밀도가 균형을 이루도록 하여 엑시톤 형성을 극대화할 수 있어야 한다. 그리고, 소자의 안정성을 위해 금속 또는 금속 산화물을 포함한 전극과의 계면을 좋게 할 수 있어야 한다.

[0007] 따라서, 당 기술 분야에서는 상기와 같은 요건을 갖춘 유기물의 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

발명의 내용

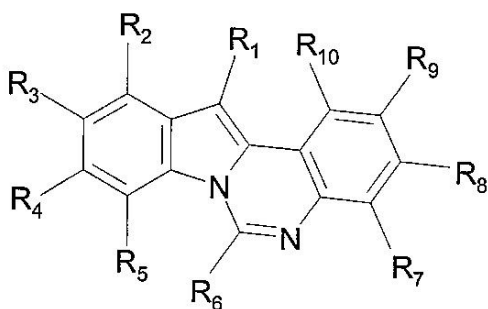
해결 하고자하는 과제

[0008] 본 발명은 상기와 같은 종래 기술의 문제점을 해결하기 위한 것으로, 본 발명의 목적은 유기 발광 소자에서 사용 가능한 물질에 요구되는 조건, 예컨대 적절한 에너지 준위, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성 등을 만족시킬 수 있으며, 치환기에 따라 유기 발광 소자에서 요구되는 다양한 역할을 할 수 있는 화학 구조를 갖는 헥테로 화합물 유도체 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제 해결수단

[0009] 상기 목적을 달성하기 위한 본 발명의 일 측면은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0010] [화학식 1]



[0011]

[0012] 상기 화학식 1에 있어서,

[0013] R₁ 내지 R₁₀은 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠기; 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헥테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₁₋₅₀의 알킬기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헥테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₁₋₄₀의 알콕시기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헥테

로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{2-50} 의 알케닐기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기, 실란기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 비스스피로플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 의 아릴기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{2-40} 의 아세틸기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원소로 O, N, S 또는 P를 갖는 C_{3-60} 의 헤테로 고리기; 알킬기, 알케닐기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환된 아민기; 알킬기, 알케닐기 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환된 플루오레닐기; 비스스피로플루오레닐기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기; 니트릴기; 시아노기; 니트로기; 아미드기; 에스테르기; 실란기 및 게르마늄기로 이루어진 군에서 선택되며 여기서 이들은 서로 인접하는 기와 지방족 또는 헤테로의 축합 고리를 형성할 수 있다.

[0014] 상기 목적을 달성하기 위한 본 발명의 또 다른 측면은, 상기 화합물을 유기물층에 포함하는 유기전자소자를 제공한다.

효 과

[0015] 본 발명의 화합물은 유기 발광 소자에서 유기물층 물질, 특히 전자주입 물질 및/또는 전자수송 물질로 사용될 수 있으며, 이 화합물을 유기 발광 소자에 사용하는 경우 소자의 구동전압을 낮추고, 광효율을 향상시키며, 화합물의 열적 안정성에 의하여 소자의 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

발명의 실시를 위한 구체적인 내용

[0016] 이하 본 발명을 더욱 구체적으로 설명한다.

[0017] 본 발명의 일 측면은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 관한 것이다.

[0018] 상기 화학식 1의 치환기를 상세히 설명하면 다음과 같다.

[0019] 상기 화학식 1의 알킬기 및 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1-50인 것이 바람직하고, 1-40인 것이 더욱 바람직하다.

[0020] 또한, 상기 화학식 1의 알케닐기 및 아세틸기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 2-50인 것이 바람직하고, 2-40인 것이 더욱 바람직하다.

[0021] 또한, 상기 화학식 1의 아릴기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 6-60인 것이 바람직하고, 6-50인 것이 더욱 바람직하다.

[0022] 또한, 상기 화학식 1의 헤테로 고리기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 3-60인 것이 바람직하고, 3-50인 것이 더욱 바람직하며, 이종원자로서 O, N, S 또는 P를 갖는 것이 바람직하다.

[0023] 또한, 상기 화학식 1의 아릴알킬기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 7-50인 것이 바람직하고, 7-40인 것이 더욱 바람직하다.

[0024] 또한, 상기 화학식 1의 아릴알케닐기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 7-50인 것이 바람직하고, 7-40인 것이 더욱 바람직하다.

[0025] 또한, 상기 화학식 1의 아릴아민기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 6-50인 것이 바람직하고, 6-40인 것이

더욱 바람직하다.

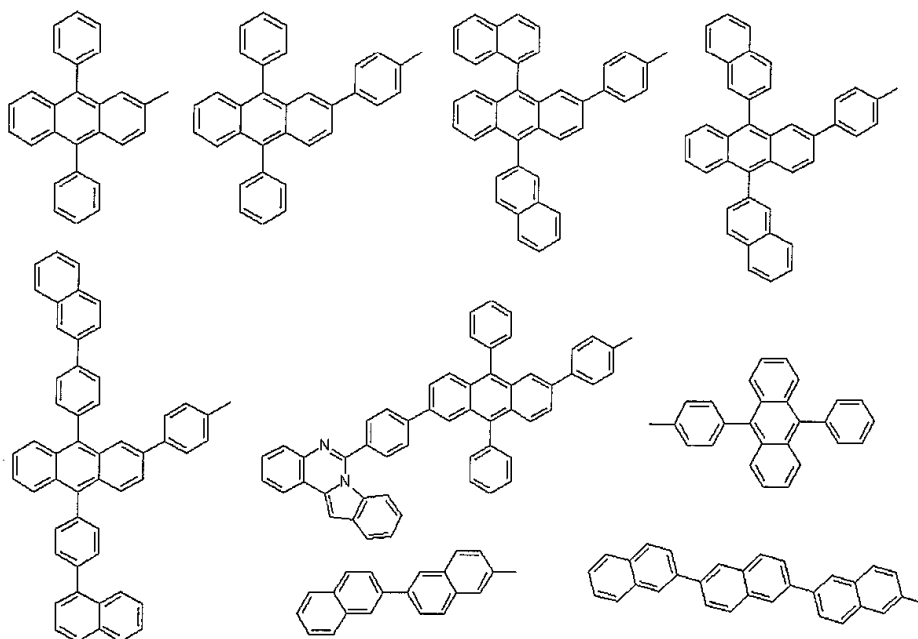
[0026] 상기 화학식 1에서 특별한 설명이 없는 경우, "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로 고리기, 카바졸릴기, 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되는 것이 바람직하나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0027] 화합물 중에 포함되어 있는 알킬기의 길이는 화합물의 공액 길이에는 영향을 미치지 않고, 다만 부수적으로 화합물의 유기 발광 소자에의 적용 방법, 예컨대 진공증착법 또는 용액도포법의 적용에 영향을 미칠 수 있다.

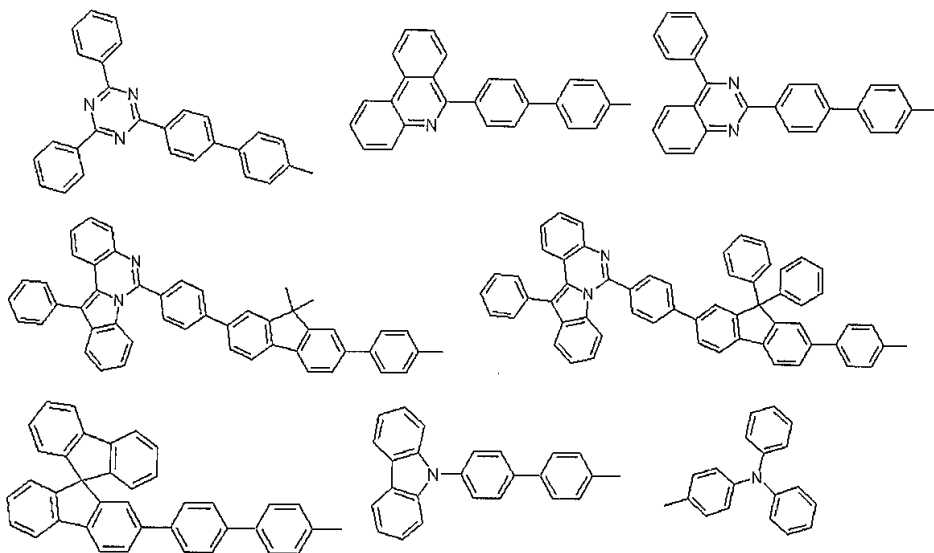
[0028] 상기 화학식 1의 치환기를 더 상세히 설명하면 다음과 같다.

[0029] 상기 화학식 1에서 R_1 내지 R_{10} 은 각각 독립적으로 수소; 중수소; C_{1-40} 의 알킬기; C_{1-40} 의 알콕시기; C_{1-40} 의 알킬기 또는 C_{6-60} 의 아릴기로 치환 또는 비치환된 C_{2-40} 의 알케닐기; C_{2-40} 의 아세틸기; C_{1-40} 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_{7-50} 의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 C_{3-40} 의 헤테로 고리기, 니트릴기, 실란기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 비스스피로플루오레닐기 및 치환 또는 비치환된 카바졸릴기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 의 아릴기; 이종원자로서 O, N, S 또는 P를 갖는 C_{3-60} 의 헤테로 고리기, C_{7-50} 의 아릴알킬기, C_{8-40} 의 아릴알케닐기, C_{6-50} 의 아릴아민기, C_{6-12} 의 아릴기 또는 이종원자로서 O, N, S 또는 P를 갖는 C_{3-60} 의 헤테로 고리기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 플루오레닐기 및 니트릴기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기인 것이 바람직하다.

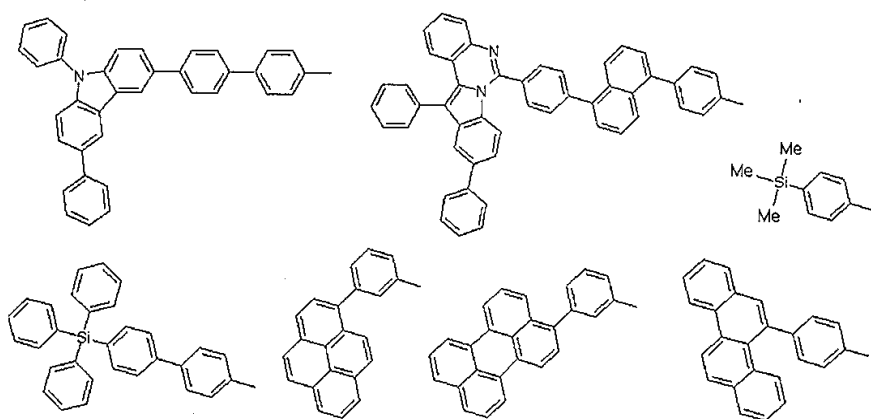
[0030] 상기 화학식 1에서, R_1 내지 R_{10} 은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 메틸기, 에틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 스틸벤, 나프틸기, 안트라세닐기, 페나트렌기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 플루오렌기, 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딜기, 피라다진기, 퀴놀리닐기, 이소퀴롤린기, 아크리딜기, 메톡시, 에톡시, 카바졸릴 및 하기 치환기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.



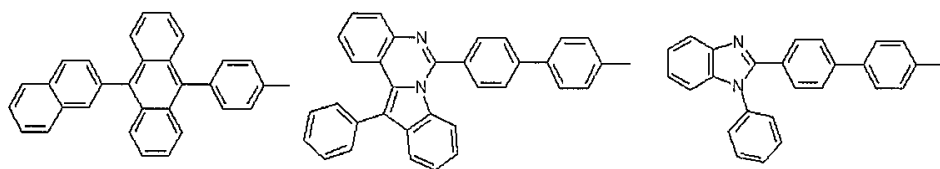
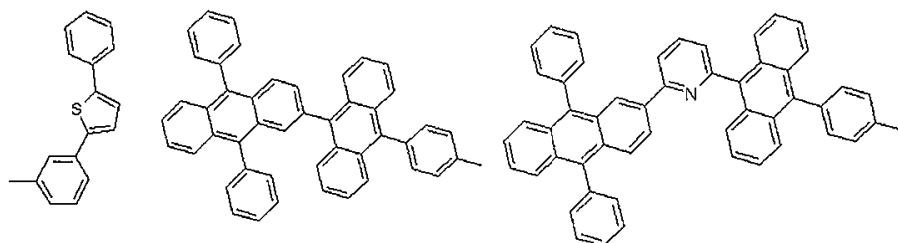
[0031]



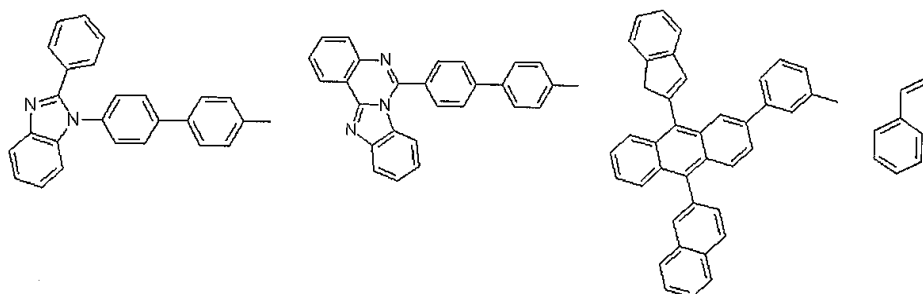
[0032]



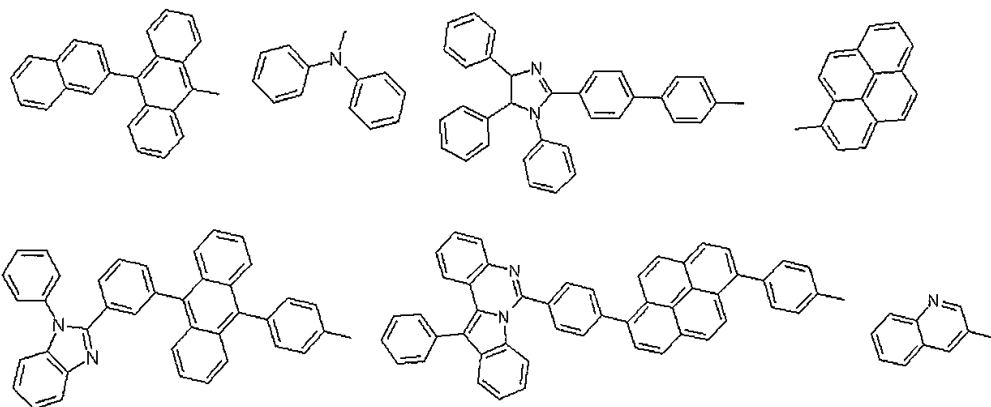
[0033]



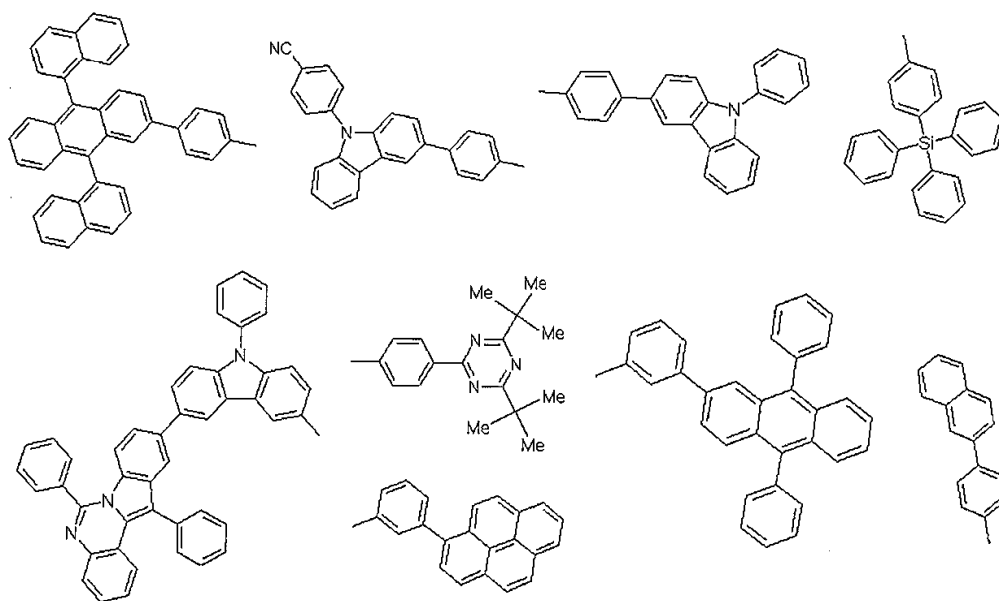
[0034]



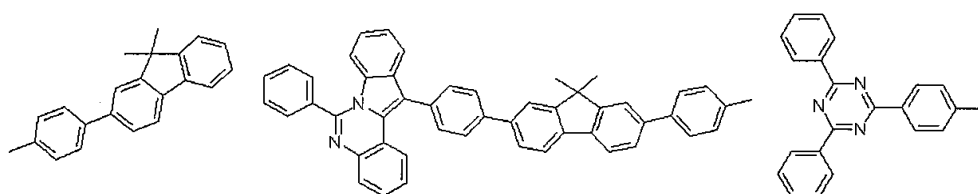
[0035]



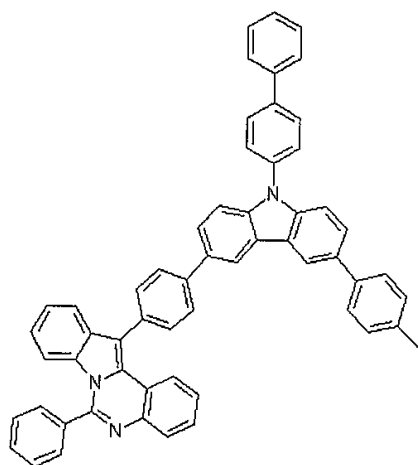
[0036]



[0037]



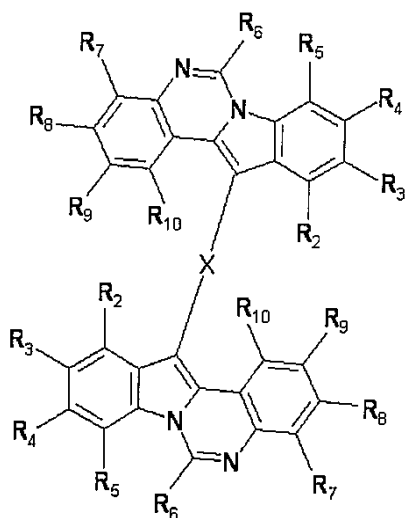
[0038]



[0039]

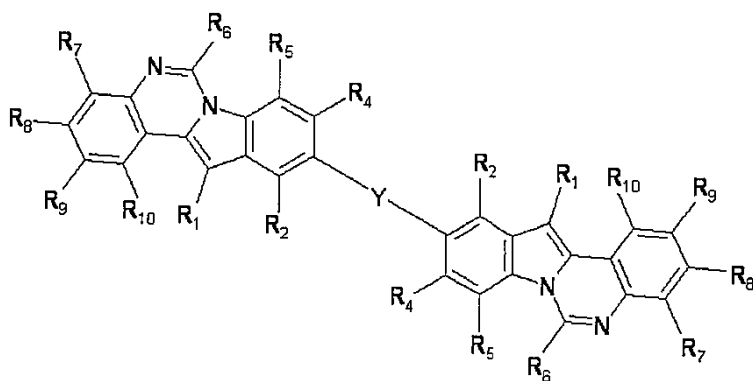
[0040] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 하나로 표시될 수 있다.

[화학식 1-1]



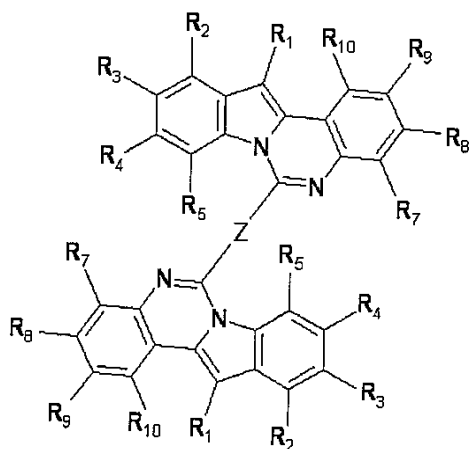
[0041]

[화학식 1-2]



[0042]

[화학식 1-3]



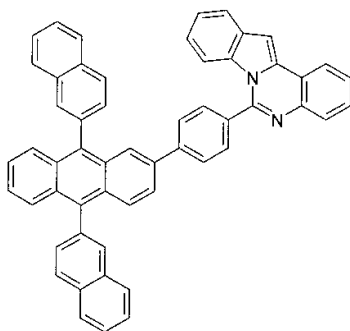
[0043]

[0044] 상기 화학식 1-1 내지 1-3에 있어서, R₁ 내지 R₁₀은 각각 서로 같거나 상이하며, 청구항 1에서의 정의와 같고, X, Y 및 Z는 각각 독립적으로

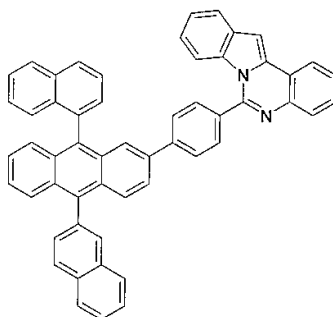
[0045] 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기, 실란기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 비스스피로플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 의 아릴렌기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원소로 O, N, S 또는 P를 갖는 C_{3-60} 의 2가 헤테로 고리기; 알킬기, 알케닐기 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환된 플루오레닐렌기; 비스스피로플루오레닐렌기; 및 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴렌기로 이루어진 군에서 선택된다.

[0046] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 바람직하게는 하기 구조식 1 내지 구조식 72 중 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

구조식 1

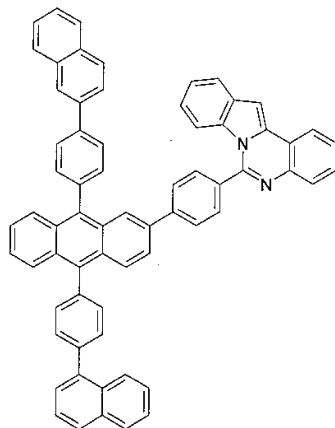


구조식 2

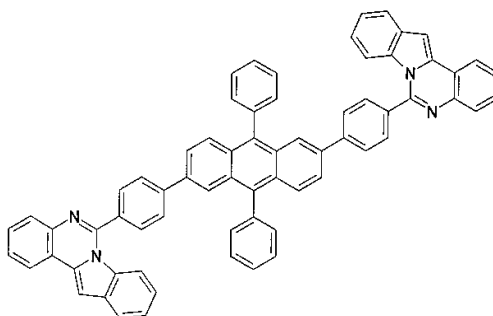


[0047]

구조식 3

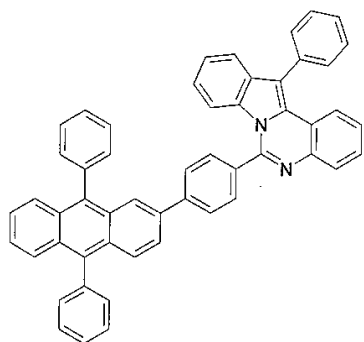


구조식 4

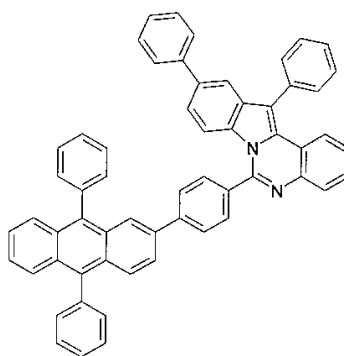


[0048]

구조식 5

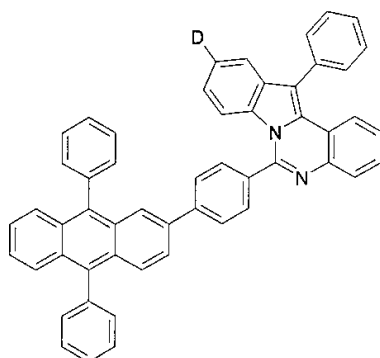


구조식 6

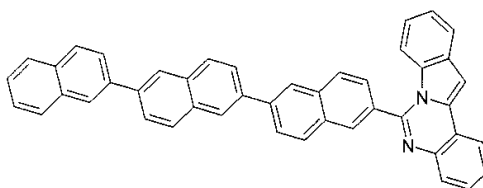


[0049]

구조식 7

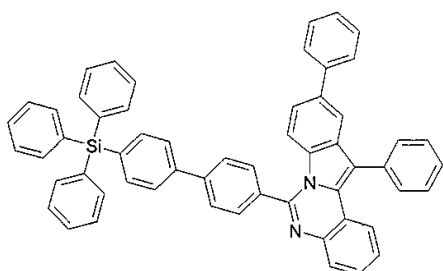


구조식 8

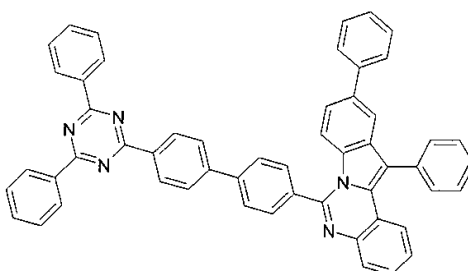


[0050]

구조식 9

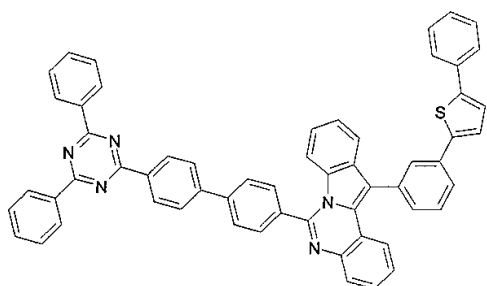


구조식 10

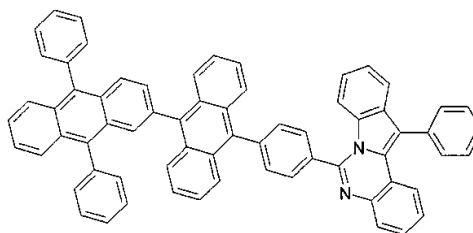


[0051]

구조식 11

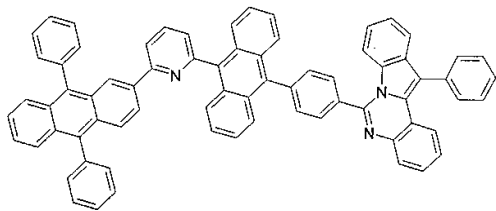


구조식 12

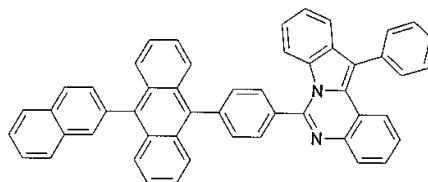


[0052]

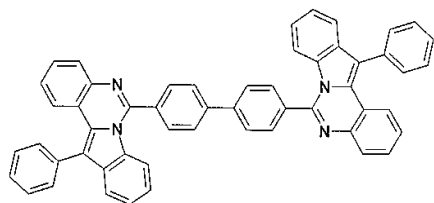
구조식 13



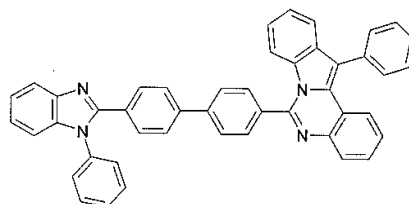
구조식 14



구조식 15

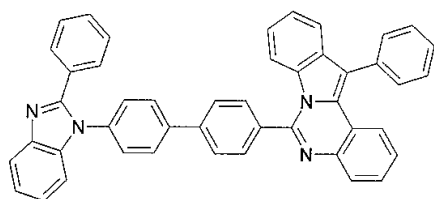


구조식 16

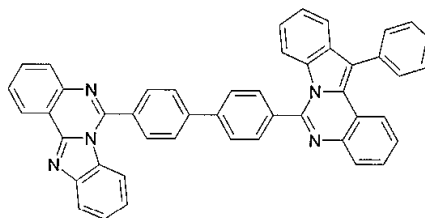


[0053]

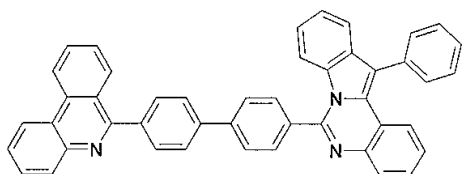
구조식 17



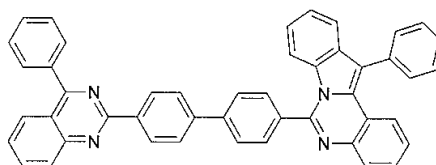
구조식 18



구조식 19

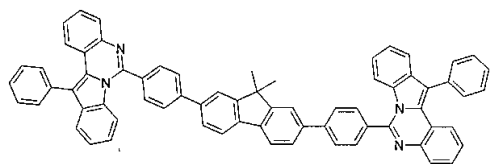


구조식 20

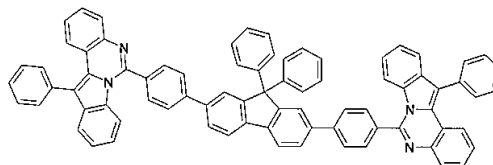


[0054]

구조식 21

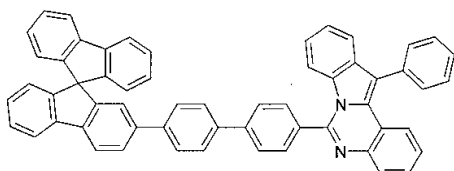


구조식 22

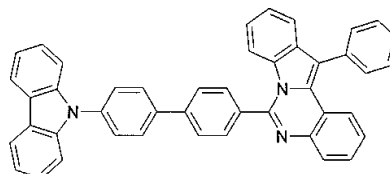


[0055]

구조식 23

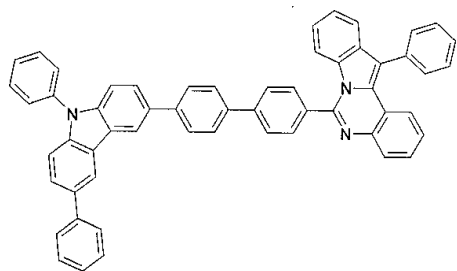


구조식 24

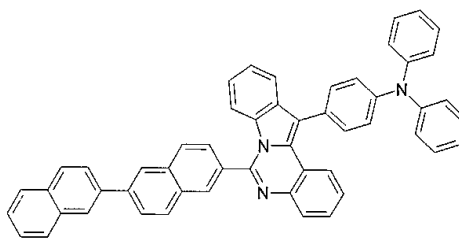


[0056]

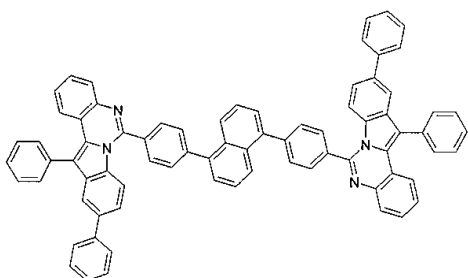
구조식 25



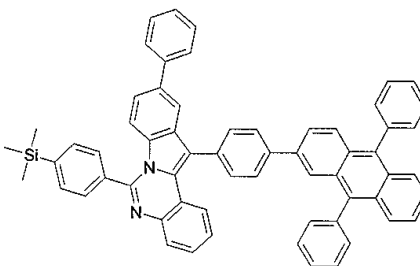
구조식 26



구조식 27

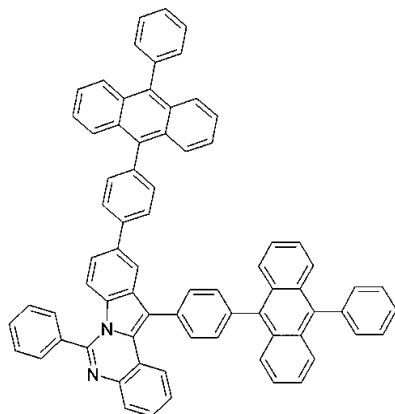


구조식 28

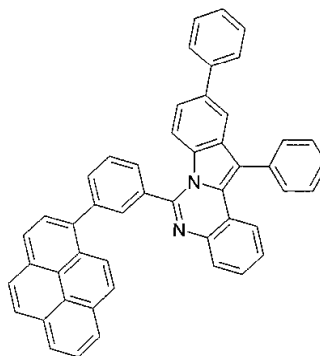


[0057]

구조식 29

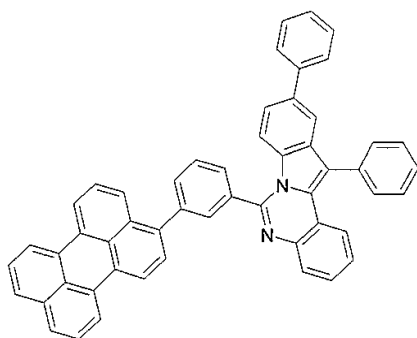


구조식 30

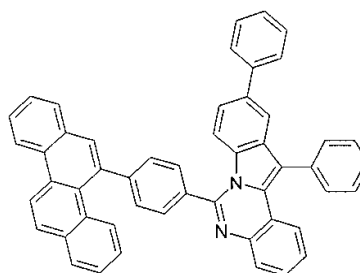


[0058]

구조식 31

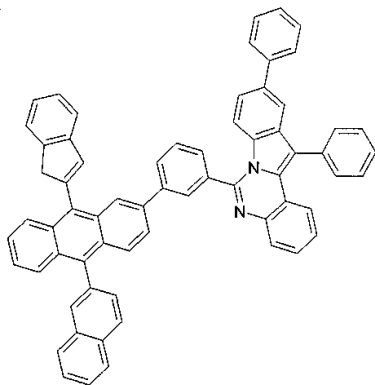


구조식 32

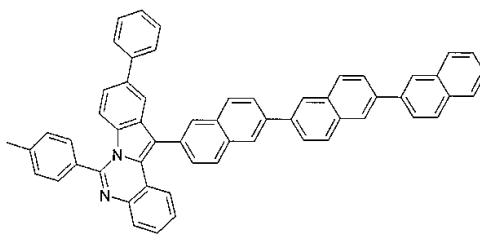


[0059]

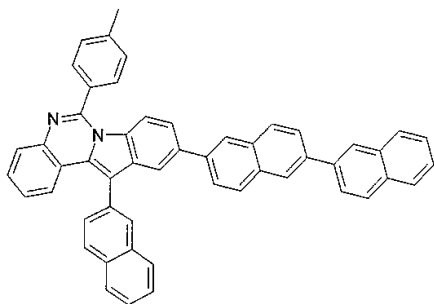
구조식 33



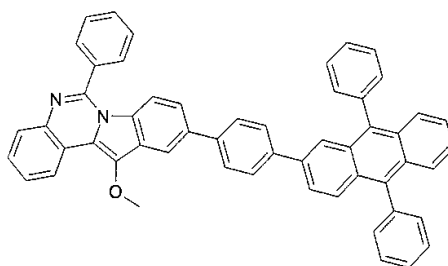
구조식 34



구조식 35

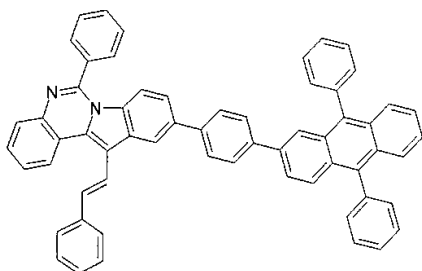


구조식 36

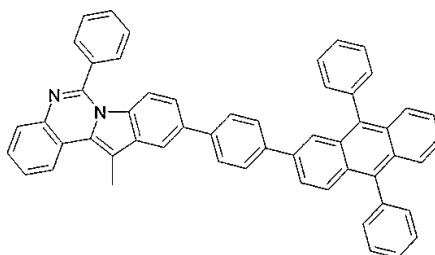


[0060]

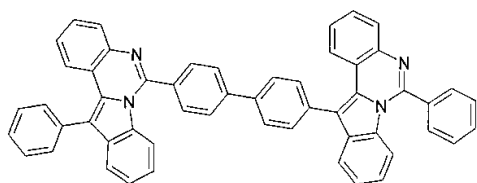
구조식 37



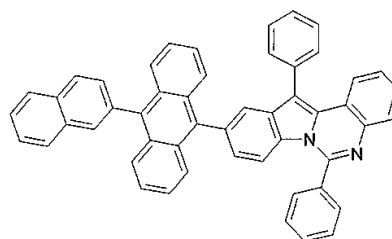
구조식 38



구조식 39

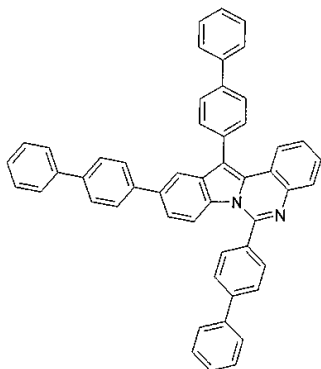


구조식 40

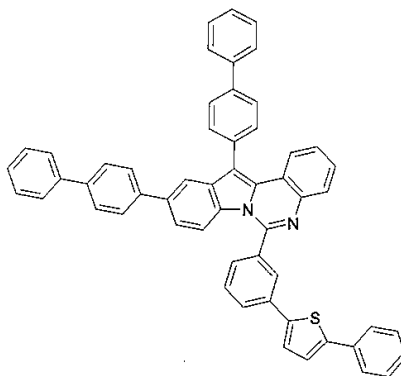


[0061]

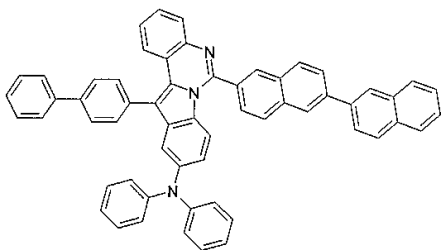
구조식 41



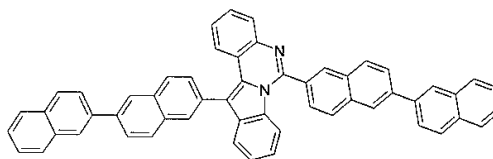
구조식 42



구조식 43

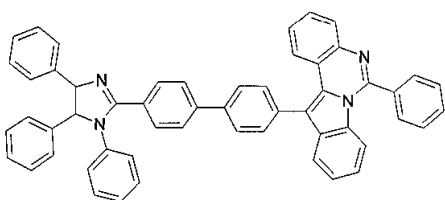


구조식 44

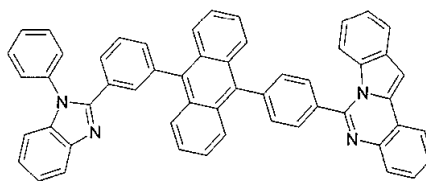


[0062]

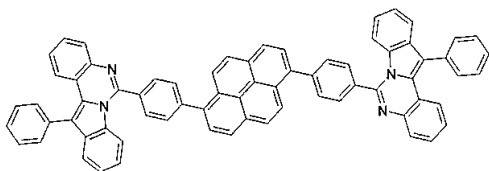
구조식 45



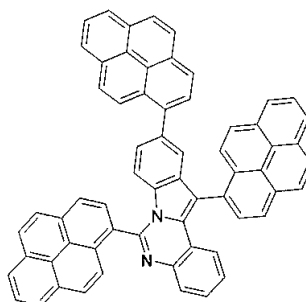
구조식 46



구조식 47

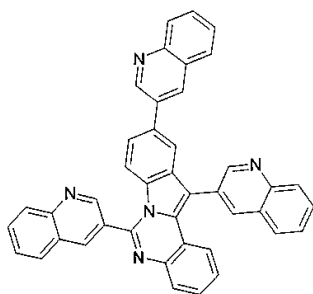


구조식 48

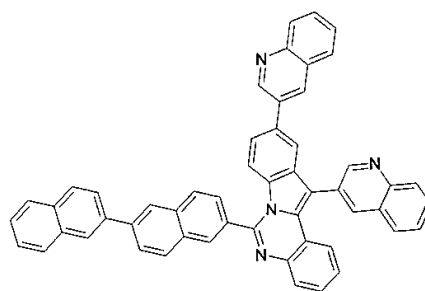


[0063]

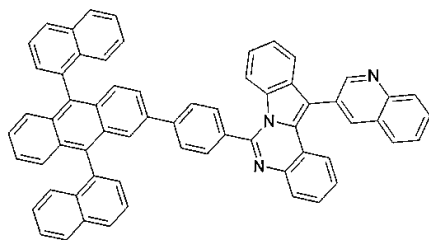
구조식 49



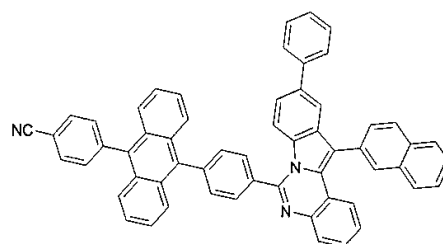
구조식 50



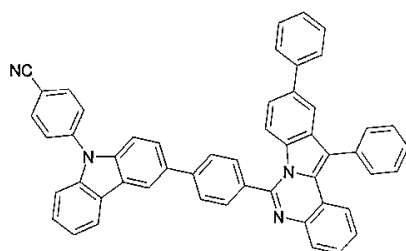
구조식 51



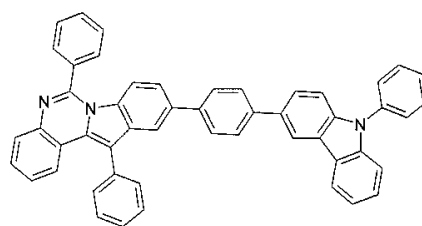
구조식 52



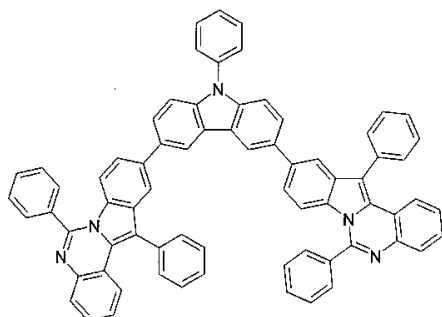
구조식 53



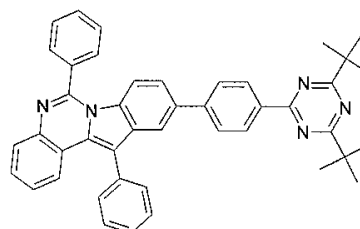
구조식 54



구조식 55



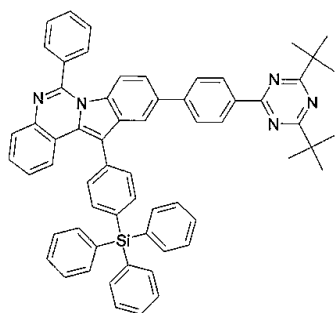
구조식 56



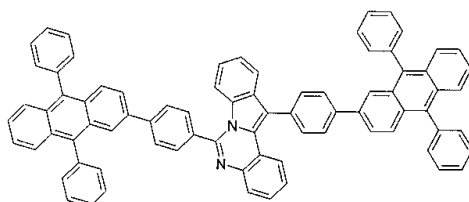
[0064]

[0065]

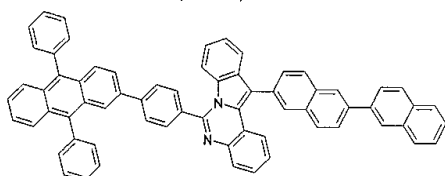
구조식 57



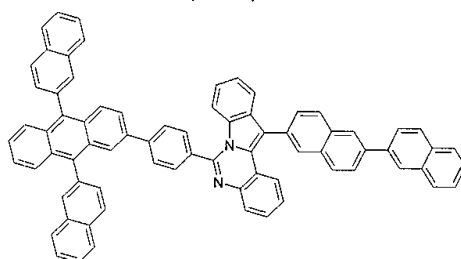
구조식 58



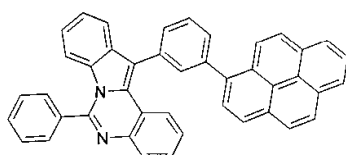
구조식 59



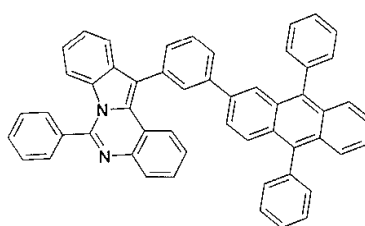
구조식 60



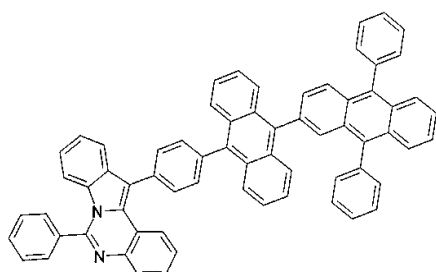
구조식 61



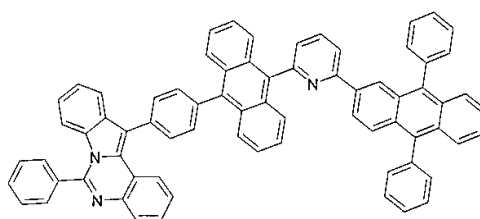
구조식 62



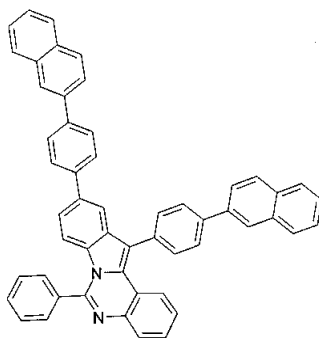
구조식 63



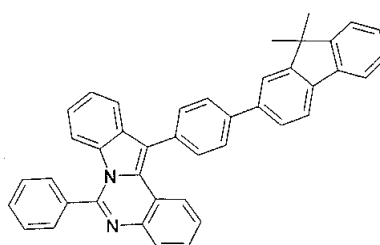
구조식 64



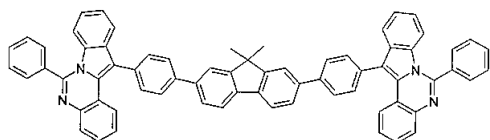
구조식 65



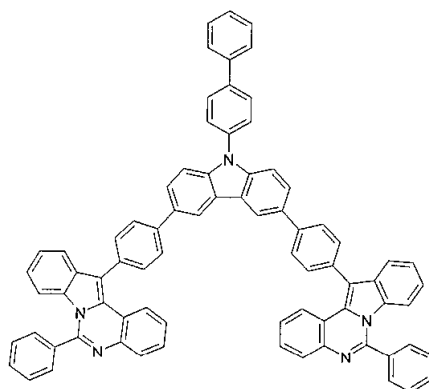
구조식 66



구조식 67

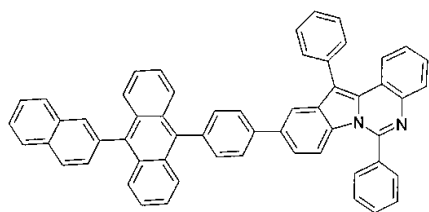


구조식 68

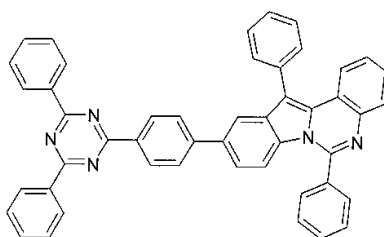


[0069]

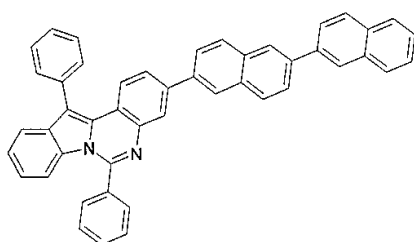
구조식 69



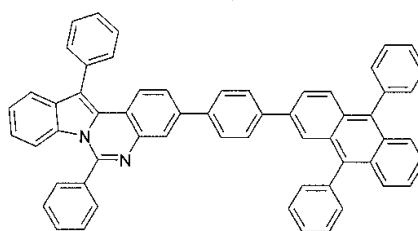
구조식 70



구조식 71



구조식 72



[0070]

[0071] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 일반적인 제조방법은 다음과 같다.

[0072] 치환 또는 비치환된 2'-아미노아세토펜과 치환 또는 비치환된 페닐하이드라진으로 이민을 형성시킨 후, 고리화 반응을 통하여 아민이 치환된 인돌 유도체를 합성한다. 그리고 카보닐기를 포함하는 물질과 아민이 치환된 인돌 유도체로 이민화 반응, 고리화 반응을 반복하여 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 합성할 수 있다.

[0073] 본 기술분야에서 통상의 지식을 가진 기술자라면 상기 일반적인 제조방법과 본 명세서의 실시예를 참고하여 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 용이하게 제조할 수 있다.

[0074] 본 발명의 두 번째 측면은 제 1 전극, 제 2 전극, 및 상기 제 1 전극과 제 2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전기소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는, 유기 전기 소자에 관한 것이다.

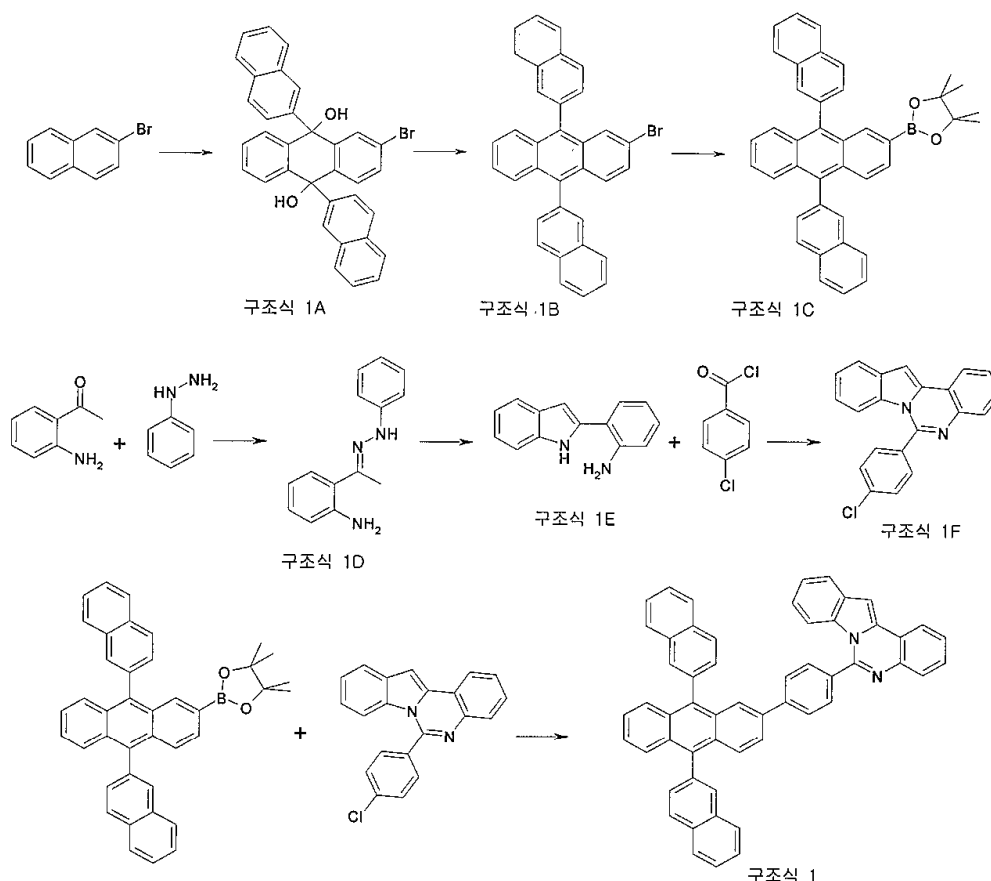
[0075] 상기 화학식 1의 화합물들은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀코팅, 딥코팅, 잉크젯프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.

[0076] 본 발명의 유기 전기 소자는 유기물층 중 1층 이상이 본 발명의 화합물, 즉 상기 화학식 1의 화합물들을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.

[0077] 본 발명의 유기 전기 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다.

[0078] 즉, 상기 유기 전기 소자에서, 상기 유기물층은 전자주입층 및 전자수송층을

- [0079] 포함하고, 이 전자주입층 및 전자수송층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0080] 또한, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 이 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0081] 예컨대, 본 발명의 유기 전기 소자는 유기물층으로서 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 유기 전기 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층을 포함할 수 있다.
- [0082] 또한, 상기 유기 전기 소자는 유기발광소자, 유기인광소자, 유기태양전지, 유기감광체(OPC) 및 유기트랜지스터로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.
- [0083] 또한, 상기 유기 전기 소자에서 상기 유기물층은 전자수송층을 포함하고, 이 전자수송층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물, 또는 이 화합물에 열 경화성 또는 광 경화성 작용기가 도입된 화합물을 포함할 수 있다.
- [0084] 또한, 상기 유기 전기 소자에서 상기 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물, 또는 이 화합물에 열 경화성 또는 광 경화성 작용기가 도입된 화합물을 포함할 수 있다.
- [0085] 본 발명의 유기 전기 소자는 예컨대 기판상에 제1 전극, 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층시킴으로써 제조할 수 있다. 이 때 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 PVD(Physical Vapor Deposition) 방법 등을 이용할 수 있으나, 이들 방법에만 한정되는 것은 아니다.
- [0086] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물들의 제조 방법 및 이들을 이용한 유기 발광 소자의 제조는 이하의 제조예 및 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나, 하기 제조예 및 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.
- [0087] <제조예 1> 구조식 1로 표시되는 화합물의 제조



- [0088]
- [0089] 구조식 1A의 제조

[0090] 2-브로모나프탈렌(34.8 g, 168 mmol)을 테트라하이드로퓨란(170 ml)에 녹인 후 -78 °C로 온도를 낮추고 n-부틸리튬 2.5 M(67.3 mL, 168 mmol)을 천천히 첨가하고, 이를 1 시간 동안 교반하였다. 이어서, 여기에 2-브로모안트라퀴논(21 g, 73.1 mmol)을 첨가하고 상온으로 온도를 서서히 올리면서 2시간 동안 교반하였다. 염화암모늄

수용액을 첨가하고 유기층을 분리한 후 황산마그네슘으로 건조 후 여과하였다. 여과액을 감압 건조하여 용매를 제거한 후 디에틸에테르로 재결정하여 구조식 1A(32.3 g, 82 %)를 얻었다.

[0091] MS: $[M]^+ = 543$

[0092] 구조식 1B의 제조

[0093] 구조식 1A(32.3g, 59.5 mmol), 요오드화칼륨(29.6 g, 178.4 mmol) 및 치아린산소다(38.0 g, 356.8 mmol)를 아세트산(150 mL)에 넣고 2 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮춘 후, 생성된 침전물을 여과하고 물로 씻어준 후 건조하여 구조식 1B(25.5g, 84 %)를 얻었다.

[0094] MS: $[M]^+ = 509$

[0095] 구조식 1C의 제조

[0096] 구조식 1B(10 g, 19.6 mmol), 비스(피나콜라토)디보론(5.5 g, 21.8 mmol), 포타슘아세테이트(5.8 g, 58.8 mmol)를 디옥산(150 mL)에 녹인 후, 50℃로 온도를 올리고, Pd(dppf)Cl₂(0.48 g, 0.6 mmol)를 첨가한 후 12시간 동안 가열 교반하였다. 반응 용액을 실온으로 냉각시킨 후, 증류수(100 mL)를 가하고 메틸렌 클로라이드(100 mL × 3)로 추출하였다. 유기층을 농축시키고 에탄올로 재결정하여 구조식 1C(16.4 g, 92%)를 얻었다.

[0097] MS: $[M+H]^+ = 557$

[0098] 구조식 1D의 제조

[0099] 2'-아미노아세트페논(9.6 mL, 80 mmol)과 페닐하이드라진(15g, 103.7 mmol)을 에탄올(100 mL)과 빙초산(30 mL)에 넣고 5시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하고 에탄올(30 mL)로 세척한 후 진공 건조시켜 구조식 1D(14 g, 수율 83 %)를 얻었다.

[0100] MS: $[M+H]^+ = 226$

[0101] 구조식 1E의 제조

[0102] 메탄선폰산(100 mL)에 오산화인(8.4 g, 58.7 mmol)을 넣고 80 ℃에서 오산화인이 완전히 녹을 때까지 교반하였다. 구조식 1D(6.3 g, 28 mmol)를 천천히 첨가한 후 90℃에서 3시간 동안 교반하고, 상온으로 온도를 내렸다. 반응액을 0 ℃의 수산화나트륨 수용액에 넣고 10분간 교반한 후 생성된 고체를 여과하였다. 증류수로 세척한 후 진공 건조하여 구조식 1E(4 g, 수율 69 %)를 얻었다.

[0103] MS: $[M+H]^+ = 209$

[0104] 구조식 1F의 제조

[0105] 구조식 1E(4 g, 19.2 mmol)와 4-클로로베조일클로라이드(2.4 mL, 19.2 mmol)를 p-톨루엔선폰산(50 mL)에 넣고 5 시간 동안 가열교반하였다. 50 ℃로 온도를 낮춘 후 2,3-디클로로-5,6-디시아노-1,4-벤조퀴논(DDQ)(4.8 g, 21.1 mmol)를 천천히 첨가하였다. 2 시간 동안 가열교반한 후 상온으로 온도를 낮추고 탄산칼륨 수용액을 천천히 첨가하였다. 30 분간 교반한 후 물층은 제거하고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름에서 재결정하여 구조식 1F(5 g, 79 %)를 얻었다.

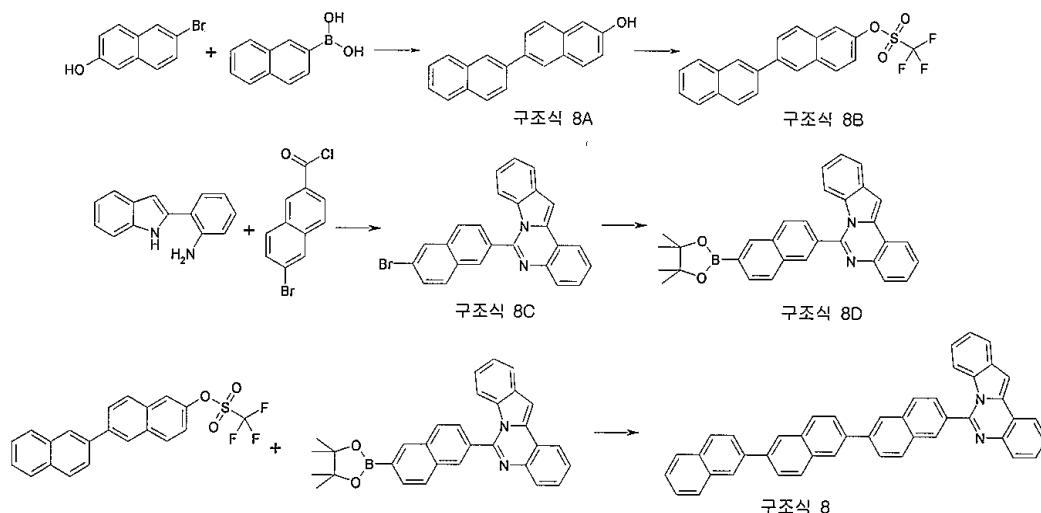
[0106] MS: $[M]^+ = 328$

[0107] 구조식 1의 제조

[0108] 구조식 1C(8.5 g, 15.2 mmol)와 구조식 1F(5.0 g, 15.2 mmol)를 테트라하이드로퓨란(100 mL)에 가열하여 완전히 녹인 후, 2 M 탄산칼륨 수용액 100 mL를 첨가하고 Pd(PPh₃)₄(176 mg, 1.5 × 10⁻¹ mmol)을 넣고 5 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮춘 후 물층을 제거하고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 에틸아세테이트로 재결정하여 구조식 1(7.4 g, 수율 67 %)을 얻었다.

[0109] MS: $[M+H]^+ = 723$

[0110] <제조예 2> 구조식 8로 표시되는 화합물의 제조



[0111]

[0112] 구조식 8A의 제조

[0113] 2-브로모-6-나프톨(10 g, 44.8 mmol)과 2-나프탈렌보론산(9.3 g, 53.8 mmol), 2 M 탄산칼륨 수용액(100 mL), Pd(PPh₃)₄(518 mg, 4.4 x 10⁻¹ mmol)을 테트라하이드로푸란(150 mL)에 넣고, 6 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮춘 후 물층을 제거하고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 에탄올로 재결정하여 구조식 8A(9.8 g, 수율 81 %)를 얻었다.

[0114] MS: [M+H]⁺ = 271

[0115] 구조식 8B의 제조

[0116] 구조식 8A(9.8 g, 36.3 mmol)를 무수디클로로메탄(100 mL)에 녹인 후, 0 ℃로 온도를 낮추고 트리ethyl아민(6.1 g, 43.6 mmol)을 첨가한 후 30분간 교반하였다. 트리플루오로메탄술포산 무수물(7.3 mL, 43.6 mmol)을 천천히 첨가한 후 상온으로 온도를 올리고 1시간 동안 교반하였다. 0 ℃로 온도를 낮추고, 탄산수소나트륨 수용액(100 mL)을 천천히 첨가한 후 디클로로메탄으로 추출하고 물층은 제거하였다. 유기층을 농축시킨 후 n-헥산으로 재결정하여 구조식 8B(13.1 g, 수율 90 %)를 얻었다.

[0117] MS: [M+H]⁺ = 403

[0118] 구조식 8C의 제조

[0119] 4-클로로벤조일클로라이드 대신 6-브로모-2-나프토일클로라이드를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1F의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 8C를 얻었다.

[0120] MS: [M+H]⁺ = 424

[0121] 구조식 8D의 제조

[0122] 구조식 1B 대신 구조식 8C를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1C의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 8D를 얻었다.

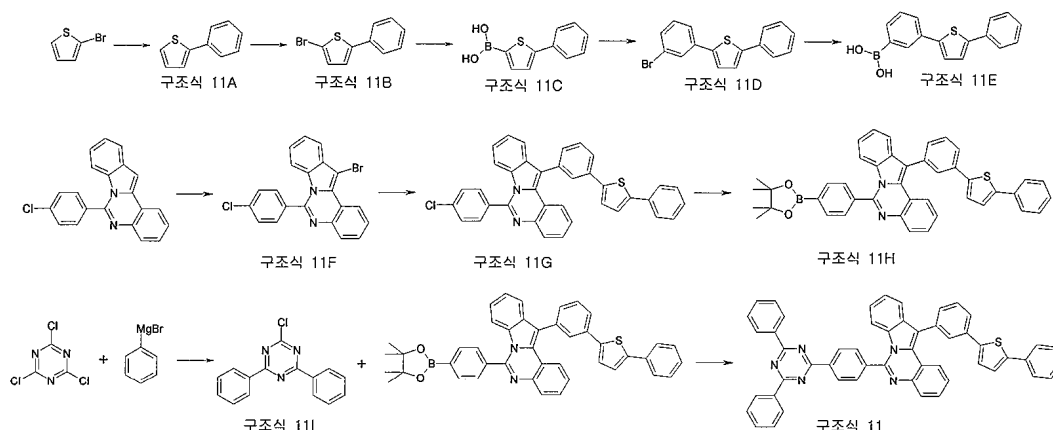
[0123] MS: [M+H]⁺ = 471

[0124] 구조식 8의 제조

[0125] 2-브로모-6-나프톨 대신 구조식 8B, 2-나프탈렌보론산 대신 구조식 8D를 사용한 것을 제외하고, 구조식 8A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 8을 얻었다.

[0126] MS: [M]⁺ = 597

[0127] <제조예 3> 구조식 11로 표시되는 화합물의 제조



[0128]

[0129] 구조식 11A의 제조

[0130] 2-브로모티오펜(10 g, 61.3 mmol)과 페닐보론산(9.0 g, 73.6 mmol)을 테트라하이드로퓨란(150 mL)에 녹인 후, 2M 탄산칼륨 수용액(100 mL)을 첨가한다. 50 °C로 온도를 올린 후 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (708 mg, 6.1×10^{-1} mmol)을 첨가하고 65 °C로 승온하여 4시간 동안 교반한다. 상온으로 온도를 낮춘 후 물 층은 제거하고, 유기층의 용매를 감압증류하여 완전히 제거한 후 상온에서 헥산을 넣고 10분간 교반한다. 생성된 침전물은 여과하여 버리고, 여과액을 -10 °C로 온도를 낮춘 후 1시간 동안 천천히 교반한다. 생성된 침전물을 여과한 후 상온에서 진공 건조하여 구조식 11A(9.1 g, 수율 93 %)를 얻었다.

[0131] MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 161$

[0132] 구조식 11B의 제조

[0133] 구조식 11A(9.1 g, 56.8 mmol)를 클로로포름(100 mL)에 완전히 녹인 후 N-브로모숙신이미드(11.1 g, 62.5 mmol)를 천천히 첨가한 후 30분간 상온에서 교반하였다. 감압증류하여 용매를 완전히 제거한 후 0 °C에서 에탄올을 넣고 20분간 교반하였다. 생성된 침전물을 여과하여 상온에서 진공 건조하여 구조식 11B(13.3 g, 수율 98 %)를 얻었다.

[0134] MS: $[\text{M}]^+ = 239$

[0135] 구조식 11C의 제조

[0136] 구조식 11B(13.3 g, 55.6 mmol)를 무수테트라하이드로퓨란 200 mL에 녹이고 -78 °C로 냉각시킨 후, 2.5 M n-부틸리튬(24.5 mL, 61.2 mmol)을 천천히 첨가한 후 1시간 동안 교반하였다. 이 반응액에 트리메틸보레이트(9.4 mL, 83.4 mmol)를 첨가한 후 30 분간 교반하고 6N HCl 50 mL를 첨가한 후 온도를 상온으로 올려서 1 시간동안 교반하였다. 유기층을 추출하고 농축한 후, n-헥산으로 재결정하여 구조식 11C(10.0 g, 수율 88 %)를 얻었다.

[0137] MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 205$

[0138] 구조식 11D의 제조

[0139] 2-브로모-6-나프톨 대신 3-브로모-1-요오도벤젠, 2-나프탈렌보론산 대신 구조식 11C를 사용한 것을 제외하고, 구조식 8A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 11D를 얻었다.

[0140] MS: $[\text{M}]^+ = 315$

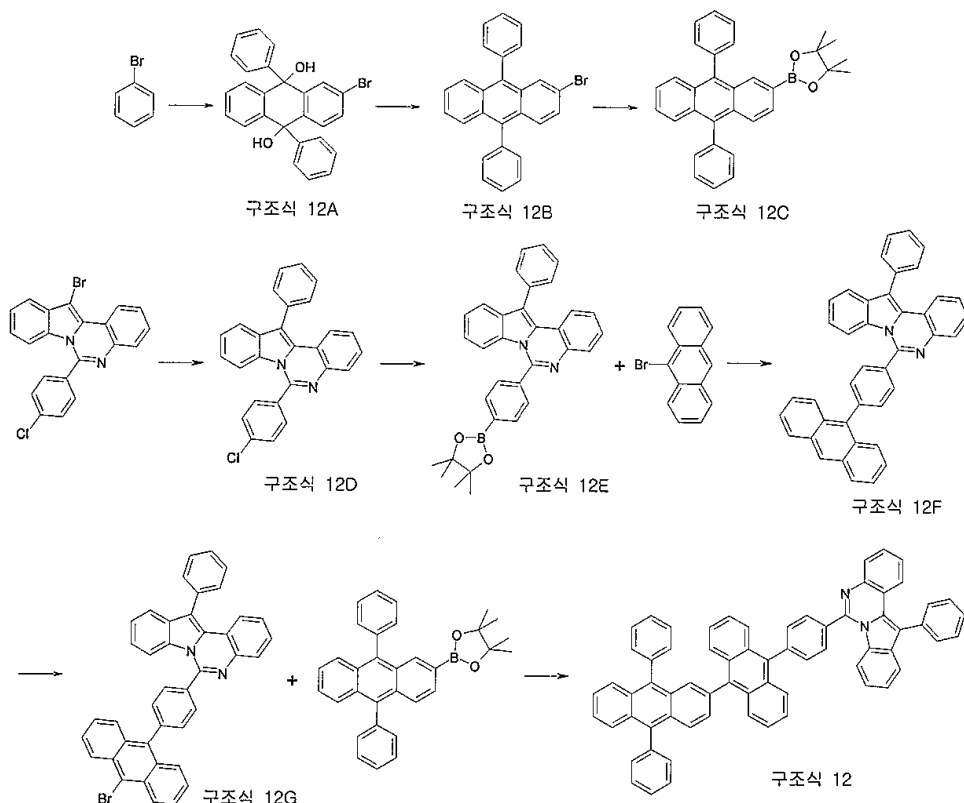
[0141] 구조식 11E의 제조

[0142] 구조식 11B 대신 구조식 11D를 사용한 것을 제외하고, 구조식 11C의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 11E를 얻었다.

[0143] MS: $[\text{M}+\text{H}]^+ = 281$

- [0144] 구조식 11F의 제조
- [0145] 구조식 1F(10 g, 30.4 mmol)를 클로로포름(250 mL)에 완전히 녹인 후, 0 °C로 온도를 낮추고 브롬(1.6 mL, 30.4 mmol)을 천천히 첨가하였다. 20분간 교반한 후 얼음물에 반응액을 천천히 붓고, 5분간 교반한 후 생성된 고체를 여과한 후 컬럼 정제를 통하여 구조식 11F(7.8 g, 수율 63 %)를 얻었다.
- [0146] MS: $[M]^+ = 407$
- [0147] 구조식 11G의 제조
- [0148] 2-브로모-6-나프톨 대신 구조식 11F, 2-나프탈렌보론산 대신 구조식 11E를 사용한 것을 제외하고, 구조식 8A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 11G를 얻었다.
- [0149] MS: $[M+H]^+ = 563$
- [0150] 구조식 11H의 제조
- [0151] 구조식 1B 대신 구조식 11G를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1C의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 11H를 얻었다.
- [0152] MS: $[M+H]^+ = 655$
- [0153] 구조식 11I의 제조
- [0154] 2,4,6-트리클로로-1,3,5-트리아진(15 g, 81.3 mmol)을 무수 테트라하이드로퓨란(150 mL)에 녹인 후, -78 °C로 온도를 낮추고 1 M 페닐 마그네슘 브로마이드(162.6 mL, 162.6 mmol)를 천천히 첨가한 후 상온으로 온도를 서서히 올리면서 3 시간 동안 교반하였다. 1 N 염산 수용액(100 mL)를 첨가한 후 물층을 제거하고 유기층을 농축시킨 후, n-헥산으로 재결정하여 구조식 11I를 얻었다.
- [0155] MS: $[M+H]^+ = 268$
- [0156] 구조식 11의 제조
- [0157] 구조식 1C 대신 구조식 11H, 구조식 1F 대신 구조식 11I를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 11을 얻었다.
- [0158] MS: $[M+H]^+ = 760$

[0159] <제조예 4> 구조식 12로 표시되는 화합물의 제조



[0160]

[0161] 구조식 12A의 제조

[0162] 2-브로모나프탈렌 대신 브로모벤젠을 사용한 것을 제외하고, 구조식 1A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 12A를 얻었다.

[0163] MS: $[M]^+ = 443$

[0164] 구조식 12B의 제조

[0165] 구조식 1A 대신 구조식 12A를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1B의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 12B를 얻었다.

[0166] MS: $[M]^+ = 409$

[0167] 구조식 12C의 제조

[0168] 구조식 1B 대신 구조식 12B를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1C의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 12C를 얻었다.

[0169] MS: $[M+H]^+ = 457$

[0170] 구조식 12D의 제조

[0171] 2-브로모-6-나프톨 대신 구조식 12C, 2-나프탈렌보론산 대신 페닐보론산을 사용한 것을 제외하고, 구조식 8A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 12D를 얻었다.

[0172] MS: $[M+H]^+ = 405$

[0173] 구조식 12E의 제조

[0174] 구조식 1B 대신 구조식 12D를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1C의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 12E를 얻었다.

[0175] MS: $[M+H]^+ = 497$

[0176] 구조식 12F의 제조

[0177] 구조식 1C 대신 구조식 12E, 구조식 1F 대신 9-브로모안트라센을 사용한 것을 제외하고, 구조식 1의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 12F를 얻었다.

[0178] MS: $[M+H]^+ = 547$

[0179] 구조식 12G의 제조

[0180] 구조식 12F(10 g, 18.3 mmol)을 클로로포름(150 mL)에 완전히 녹인 후 N-브로모숙신이미드(3.4 g, 19.2 mmol)를 천천히 첨가한 후 30분간 상온에서 교반한다. 증류수(100 mL)를 첨가한 후, 유기층을 추출하여 농축시키고, 에탄올로 재결정하여 구조식 12G(10 g, 수율 87 %)를 얻었다.

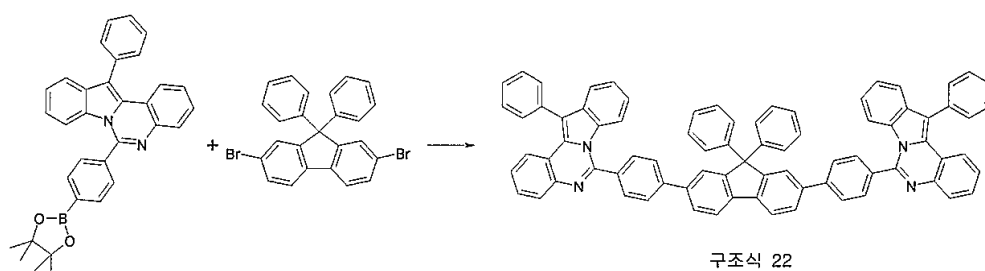
[0181] MS: $[M]^+ = 625$

[0182] 구조식 12의 제조

[0183] 구조식 1C 대신 구조식 12C, 구조식 1F 대신 구조식 12G를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 12를 얻었다.

[0184] MS: $[M+H]^+ = 875$

[0185] <제조예 5> 구조식 22로 표시되는 화합물의 제조



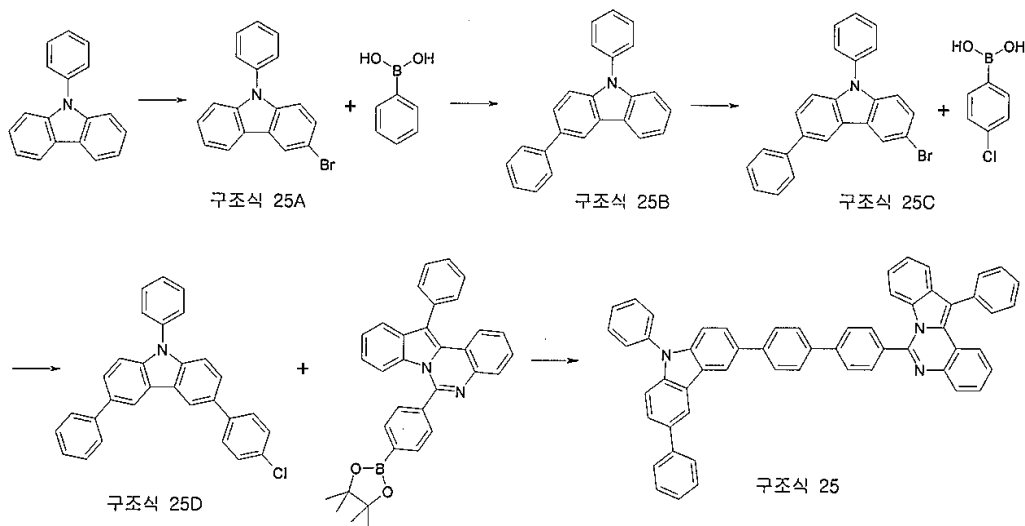
[0186]

[0187] 구조식 22의 제조

[0188] 구조식 12E(10 g, 20.1 mmol)와 2,7-디브로모-9,9-디페닐플루오렌(4.4 g, 9.2 mmol)을 테트라하이드로퓨란(150 mL)에 가열하여 완전히 녹인 후, 2 M 탄산칼륨 수용액 100 mL를 첨가하고 $Pd(PPh_3)_4$ (213 mg, 1.8×10^{-1} mmol)을 넣고 12 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮춘 후 물층을 제거하고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 에틸아세테이트로 재결정하여 구조식 22(7.1 g, 수율 73 %)를 얻었다.

[0189] MS: $[M+H]^+ = 1055$

[0190] <제조예 6> 구조식 25로 표시되는 화합물의 제조



[0191]

[0192] 구조식 25A의 제조

[0193] 구조식 12F 대신 N-페닐카바졸을 사용한 것을 제외하고, 구조식 12G의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 25A를 얻었다.

[0194] MS: $[M]^+ = 322$

[0195] 구조식 25B의 제조

[0196] 2-브로모-6-나프톨 대신 구조식 25A, 2-나프탈렌보론산 대신 페닐보론산을 사용한 것을 제외하고, 구조식 8A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 25B를 얻었다.

[0197] MS: $[M+H]^+ = 320$

[0198] 구조식 25C의 제조

[0199] 구조식 12F 대신 구조식 25B를 사용한 것을 제외하고, 구조식 12G의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 25C를 얻었다.

[0200] MS: $[M]^+ = 398$

[0201] 구조식 25D의 제조

[0202] 2-브로모-6-나프톨 대신 구조식 25C, 2-나프탈렌보론산 대신 4-클로로페닐보론산을 사용한 것을 제외하고, 구조식 8A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 25D를 얻었다.

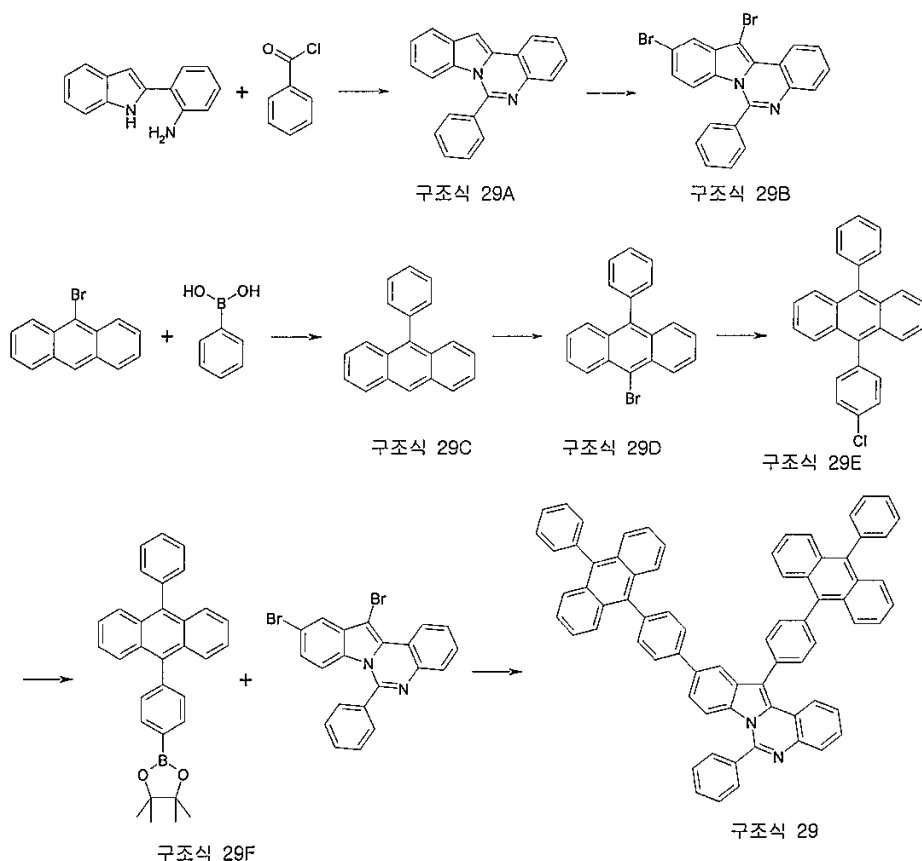
[0203] MS: $[M+H]^+ = 430$

[0204] 구조식 25의 제조

[0205] 구조식 1C 대신 구조식 12E, 구조식 1F 대신 구조식 25D를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 25를 얻었다.

[0206] MS: $[M+H]^+ = 764$

[0207] <제조예 7> 구조식 29로 표시되는 화합물의 제조



[0208]

[0209] 구조식 29A의 제조

[0210] 4-클로로벤조일클로라이드 대신 벤조일클로라이드를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1F의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 29A를 얻었다.

[0211] MS: $[M+H]^+ = 295$

[0212] 구조식 29B의 제조

[0213] 구조식 29A(10 g, 34.0 mmol)를 클로로포름(250 mL)에 완전히 녹인 후, 0℃로 온도를 낮추고 브롬(3.6 mL, 71.3 mmol)을 천천히 첨가하였다. 30분간 교반한 후, 상온으로 온도를 올리고 2시간 동안 교반하였다. 얼음물에 반응액을 천천히 붓고, 5분간 교반한 후 생성된 고체를 여과하고 컬럼 정제를 통하여 구조식 29B(11.5 g, 수율 75 %)를 얻었다.

[0214] MS: $[M]^+ = 452$

[0215] 구조식 29C의 제조

[0216] 2-브로모-6-나프톨 대신 9-브로모안트라센, 2-나프탈렌보론산 대신 페닐보론산을 사용한 것을 제외하고, 구조식 8A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 29C를 얻었다.

[0217] MS: $[M+H]^+ = 255$

[0218] 구조식 29D의 제조

[0219] 구조식 12F 대신 구조식 29C를 사용한 것을 제외하고, 구조식 12G의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 29D를 얻었다.

[0220] MS: $[M]^+ = 333$

[0221] 구조식 29E의 제조

[0222] 2-브로모-6-나프톨 대신 구조식 29D, 2-나프탈렌보론산 대신 4-클로로페닐보론산을 사용한 것을 제외하고, 구조식 8A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 29E를 얻었다.

[0223] MS: $[M+H]^+ = 365$

[0224] 구조식 29F의 제조

[0225] 구조식 1B 대신 구조식 29E를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1C의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 29F를 얻었다.

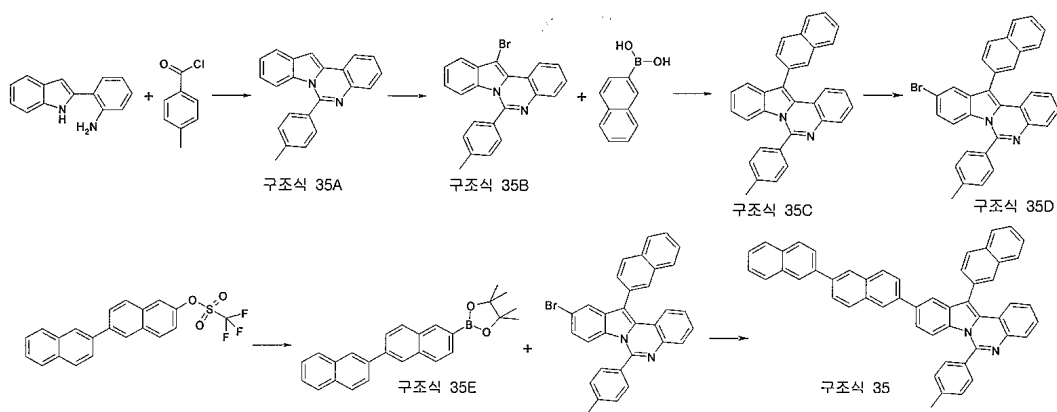
[0226] MS: $[M+H]^+ = 457$

[0227] 구조식 29의 제조

[0228] 구조식 12E 대신 구조식 29F, 2,7-디브로모-9,9-디페닐플루오렌 대신 구조식 29B를 사용한 것을 제외하고, 구조식 22의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 29를 얻었다.

[0229] MS: $[M+H]^+ = 951$

[0230] <제조예 8> 구조식 35로 표시되는 화합물의 제조



[0231]

[0232] 구조식 35A의 제조

[0233] 4-클로로벤조일클로라이드 대신 4-메틸벤조일클로라이드를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1F의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 35A를 얻었다.

[0234] MS: $[M+H]^+ = 309$

[0235] 구조식 35B의 제조

[0236] 구조식 1F 대신 구조식 35A를 사용한 것을 제외하고, 구조식 11F의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 35B를 얻었다.

[0237] MS: $[M]^+ = 387$

[0238] 구조식 35C의 제조

[0239] 2-브로모-6-나프톨 대신 구조식 35B를 사용한 것을 제외하고, 구조식 8A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 35C를 얻었다.

[0240] MS: $[M+H]^+ = 435$

[0241] 구조식 35D의 제조

[0242] 구조식 1F 대신 구조식 35C를 사용한 것을 제외하고, 구조식 11F의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 35D를 얻었다.

[0243] MS: $[M]^+ = 513$

[0244] 구조식 35E의 제조

[0245] 구조식 1B 대신 구조식 8B를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1C의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 35E를 얻었다.

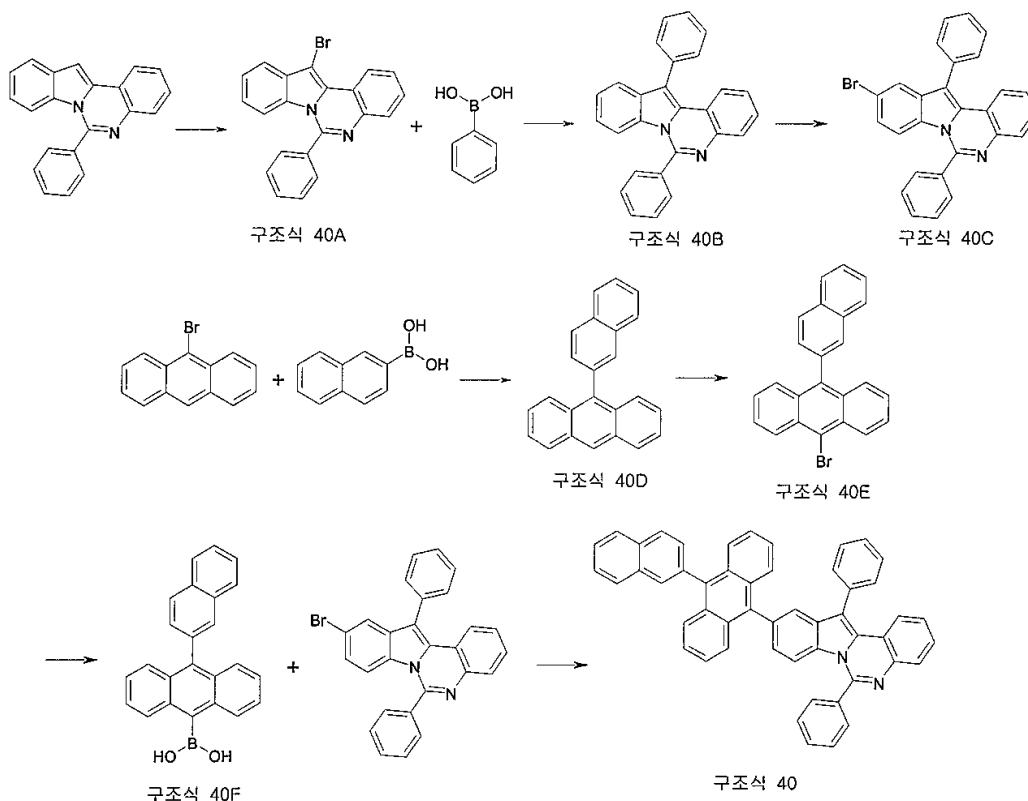
[0246] MS: $[M+H]^+ = 381$

[0247] 구조식 35의 제조

[0248] 구조식 1C 대신 구조식 35E, 구조식 1F 대신 구조식 35D를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 35를 얻었다.

[0249] MS: $[M+H]^+ = 687$

[0250] <제조예 9> 구조식 40으로 표시되는 화합물의 제조



[0251]

[0252] 구조식 40A의 제조

[0253] 구조식 1F 대신 구조식 29A를 사용한 것을 제외하고, 구조식 11F의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 40A를 얻었다.

[0254] MS: $[M]^+ = 407$

[0255] 구조식 40B의 제조

[0256] 2-브로모-6-나프톨 대신 구조식 40A, 2-나프탈렌보론산 대신 페닐보론산을 사용한 것을 제외하고, 구조식 8A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 40B를 얻었다.

[0257] MS: $[M+H]^+ = 371$

[0258] 구조식 40C의 제조

[0259] 구조식 1F 대신 구조식 40B를 사용한 것을 제외하고, 구조식 11F의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 40C를

얻었다.

[0260] MS: $[M]^+ = 449$

[0261] 구조식 40D의 제조

[0262] 2-브로모-6-나프톨 대신 9-브로모안트라센을 사용한 것을 제외하고, 구조식 8A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 40D를 얻었다.

[0263] MS: $[M+H]^+ = 305$

[0264] 구조식 40E의 제조

[0265] 구조식 12F 대신 구조식 40D를 사용한 것을 제외하고, 구조식 12G의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 40E를 얻었다.

[0266] MS: $[M]^+ = 383$

[0267] 구조식 40F의 제조

[0268] 구조식 11B 대신 구조식 40E를 사용한 것을 제외하고, 구조식 11C의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 40F를 얻었다.

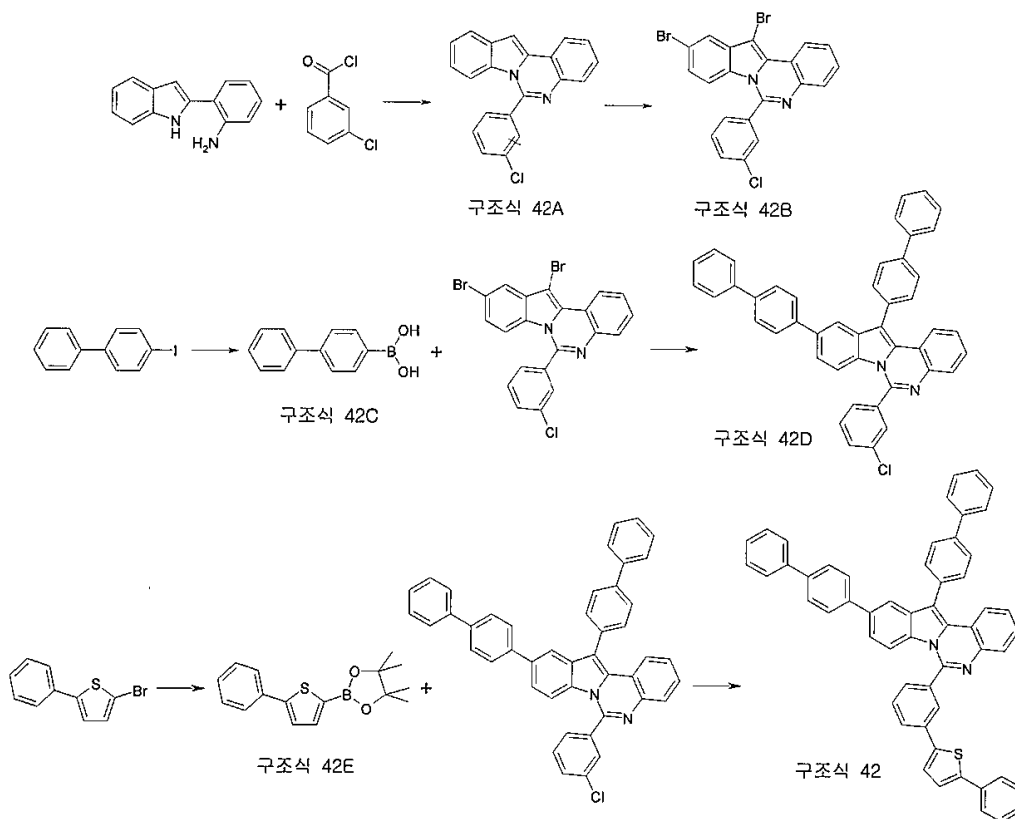
[0269] MS: $[M+H]^+ = 349$

[0270] 구조식 40의 제조

[0271] 구조식 1C 대신 구조식 40F, 구조식 1F 대신 구조식 40C를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 40를 얻었다.

[0272] MS: $[M+H]^+ = 673$

[0273] <제조예 10> 구조식 42으로 표시되는 화합물의 제조



[0274]

[0275] 구조식 42A의 제조

[0276] 4-클로로벤조일클로라이드 대신 3-클로로벤조일클로라이드를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1F의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 42A를 얻었다.

[0277] MS: $[M+H]^+ = 329$

[0278] 구조식 42B의 제조

[0279] 구조식 29A 대신 구조식 42A를 사용한 것을 제외하고, 구조식 29B의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 42B를 얻었다.

[0280] MS: $[M]^+ = 486$

[0281] 구조식 42C의 제조

[0282] 구조식 11B 대신 4-요오도비페닐을 사용한 것을 제외하고, 구조식 11C의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 42C를 얻었다.

[0283] MS: $[M+H]^+ = 199$

[0284] 구조식 42D의 제조

[0285] 구조식 12E 대신 구조식 42C, 2,7-디브로모-9,9-디페닐플루오렌 대신 구조식 42B를 사용한 것을 제외하고, 구조식 22의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 42D를 얻었다.

[0286] MS: $[M+H]^+ = 633$

[0287] 구조식 42E의 제조

[0288] 구조식 1B 대신 구조식 11B를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1C의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 42E를 얻었다.

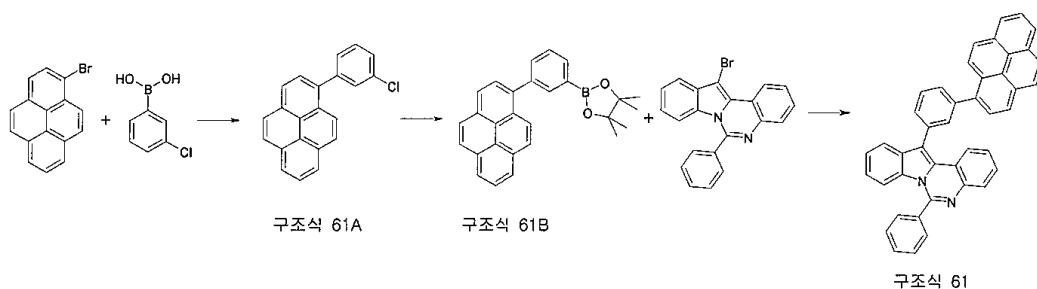
[0289] MS: $[M+H]^+ = 287$

[0290] 구조식 42의 제조

[0291] 구조식 1C 대신 구조식 42E, 구조식 1F 대신 구조식 42D를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1과 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 42를 얻었다.

[0292] MS: $[M+H]^+ = 757$

[0293] <제조예 11> 구조식 61로 표시되는 화합물의 제조



[0294]

[0295] 구조식 61A의 제조

[0296] 2-브로모-6-나프톨 대신 1-브로모파이렌, 2-나프탈렌보론산 대신 3-클로로페닐보론산을 사용한 것을 제외하고, 구조식 8A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 61A를 얻었다.

[0297] MS: $[M+H]^+ = 313$

[0298] 구조식 61B의 제조

[0299] 구조식 1B 대신 구조식 61A를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1C의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 61B를 얻

었다.

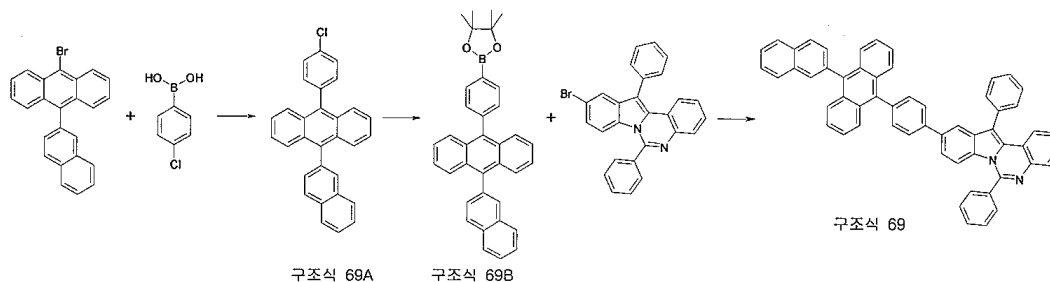
[0300] MS: $[M+H]^+ = 405$

[0301] 구조식 61의 제조

[0302] 구조식 1C 대신 구조식 61B, 구조식 1F 대신 구조식 42A를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1과 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 61을 얻었다.

[0303] MS: $[M+H]^+ = 571$

[0304] <제조예 12> 구조식 69로 표시되는 화합물의 제조



[0305]

[0306] 구조식 69A의 제조

[0307] 2-브로모-6-나프톨 대신 구조식 40E, 2-나프탈렌보론산 대신 4-클로로페닐보론산을 사용한 것을 제외하고, 구조식 8A의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 69A를 얻었다.

[0308] MS: $[M+H]^+ = 415$

[0309] 구조식 69B의 제조

[0310] 구조식 1B 대신 구조식 69A를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1C의 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 69B를 얻었다.

[0311] MS: $[M+H]^+ = 507$

[0312] 구조식 69의 제조

[0313] 구조식 1C 대신 구조식 69B, 구조식 1F 대신 구조식 40C를 사용한 것을 제외하고, 구조식 1 제조방법과 동일한 방법으로 구조식 69를 얻었다.

[0314] MS: $[M+H]^+ = 749$

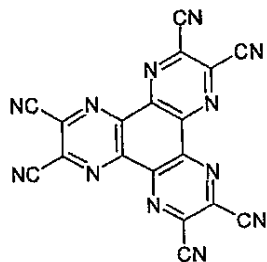
[0315] <실시예 1>

[0316] ITO(인듐주석산화물)가 1000 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판(corning 7059 glass)을, 분산제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 세제는 Fischer Co.의 제품을 사용하였으며, 증류수는 Millipore Co. 제품의 필터(Filter)로 2차 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30 분간 세척한 후, 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10 분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올 용제 순서로 초음파 세척을 하고 건조시켰다.

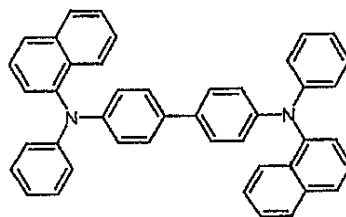
[0317] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(hexanitride hexaazatriphenylene)을 500 Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다. 그 위에 정공을 수송하는 물질인 NPB(400 Å)를 진공 증착한 후 발광층으로 호스트 H1과 도판트 D1 화합물을 300 Å의 두께로 진공 증착하였다. 그 다음에 위 제조예 1에서 합성한 구조식 1 화합물(200 Å)을 전자주입 및 수송층으로 순차적으로 열 진공 증착하였다. 상기 전자 수송층 위에 순차적으로 12 Å 두께의 리튬 플루오라이드(LiF)와 2000 Å 두께의 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하여, 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0318] 상기 전자 수송층의 비교예로 E1을 사용하였다.

[0319] 상기의 과정에서 유기물의 증착 속도는 1 Å/sec를 유지하였고, 리튬플루오라이드는 0.2 Å/sec, 알루미늄은 3~7 Å/sec의 증착 속도를 유지하였다.

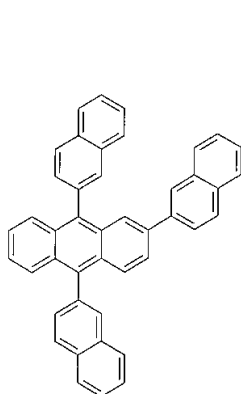


[헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌]

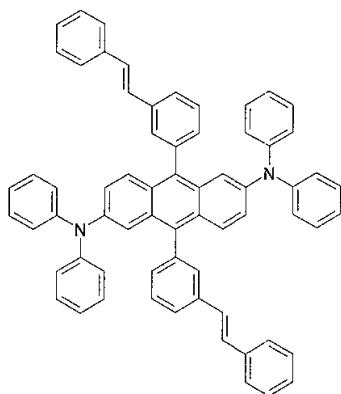


[NPB]

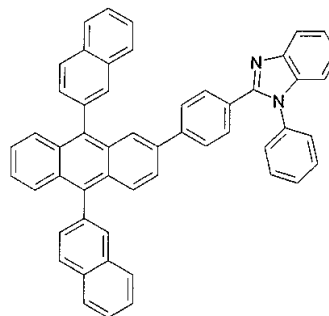
[0320]



[H1]



[D1]



[E1]

[0321]

[0322] <실시예 2>

[0323] 상기 실시예 1에서 전자 수송층으로 제조예 2에서 합성한 구조식 1 대신 구조식 8를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0324] <실시예 3>

[0325] 상기 실시예 1에서 전자 수송층으로 제조예 3에서 합성한 구조식 1 대신 구조식 11을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0326] <실시예 4>

[0327] 상기 실시예 1에서 전자 수송층으로 제조예 4에서 합성한 구조식 1 대신 구조식 12를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0328] <실시예 5>

[0329] 상기 실시예 1에서 전자 수송층으로 제조예 5에서 합성한 구조식 1 대신 구조식 22를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0330] <실시예 6>

[0331] 상기 실시예 1에서 전자 수송층으로 제조예 6에서 합성한 구조식 1 대신 구조식 25를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0332] <실시예 7>

[0333] 상기 실시예 1에서 전자 수송층으로 제조예 7에서 합성한 구조식 1 대신 구조식 29를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0334] <실시예 8>

- [0335] 상기 실시예 1에서 전자 수송층으로 제조예 8에서 합성한 구조식 1 대신 구조식 35을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.
- [0336] <실시예 9>
- [0337] 상기 실시예 1에서 전자 수송층으로 제조예 9에서 합성한 구조식 1 대신 구조식 40를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.
- [0338] <실시예 10>
- [0339] 상기 실시예 1에서 전자 수송층으로 제조예 10에서 합성한 구조식 1 대신 구조식 42를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.
- [0340] <실시예 11>
- [0341] 상기 실시예 1에서 전자 수송층으로 제조예 11에서 합성한 구조식 1 대신 구조식 61를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.
- [0342] <실시예 12>
- [0343] 상기 실시예 1에서 전자 수송층으로 제조예 12에서 합성한 구조식 1 대신 구조식 69를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.
- [0344] <비교예 1>
- [0345] 상기 실시예 1에서 전자 수송층으로 제조예에서 합성한 구조식 1 대신 E1을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.
- [0346] 상기 실시예와 같이 각각의 화합물을 정공 수송층 물질로 사용하여 제조한 유기 발광 소자를 실험한 결과를 표 1에 나타내었다.
- [0347] [표 1]

실험예 5mA/cm ²	HTL물질	전압 (V)	전류효율 (cd/A)	색 좌표 (x,y)
비교예	E1	4.21	19.05	(0.314,0.650)
실시예 1	구조식 1	4.35	20.38	(0.315,0.650)
실시예 2	구조식 8	3.98	19.21	(0.315,0.652)
실시예 3	구조식 11	4.31	19.48	(0.313,0.629)
실시예 4	구조식 12	4.02	20.84	(0.316,0.655)
실시예 5	구조식 22	4.15	18.89	(0.315,0.652)
실시예 6	구조식 25	4.85	20.35	(0.314,0.651)
실시예 7	구조식 29	4.22	20.51	(0.314,0.654)
실시예 8	구조식 35	3.89	19.19	(0.313,0.648)
실시예 9	구조식 40	4.19	19.55	(0.314,0.651)
실시예 10	구조식 42	4.43	20.01	(0.314,0.647)
실시예 11	구조식 61	3.95	20.95	(0.313,0.646)
실시예 12	구조식 69	4.21	19.10	(0.314,0.653)

- [0348]
- [0349] 본 발명에 따른 화학식의 화합물 유도체는 유기발광소자를 비롯한 유기전기소자에서 전자 주입, 전자 수송, 정공 주입 및 수송, 또는 발광 물질 역할을 할 수 있으며, 본 발명에 따른 소자는 효율, 구동전압, 안정성 면에서

우수한 특성을 나타낸다.

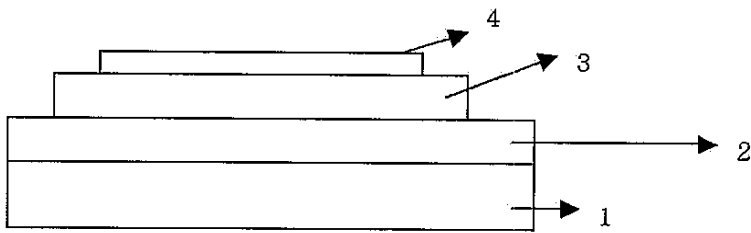
도면의 간단한 설명

[0350] 도 1은 기관(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

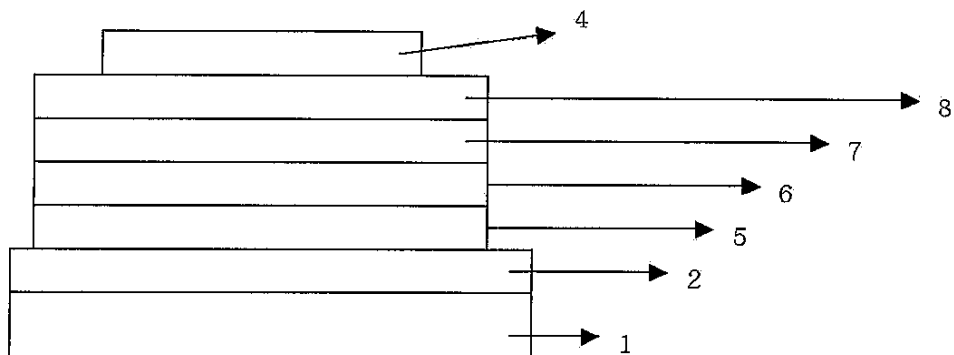
[0351] 도 2는 기관(1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자수송층(8) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	标题：新型机电致发光器件材料和使用其的有机发光器件		
公开(公告)号	KR101306531B1	公开(公告)日	2013-09-09
申请号	KR1020090002318	申请日	2009-01-12
[标]申请(专利权)人(译)	乐金化学股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	LG化学有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	LG化学有限公司		
[标]发明人	LEE DAE WOONG 이대웅 BAE JAE SOON 배재순 NAM HYUN 남현 HONG SUNG KIL 홍성길 LEE DONG HOON 이동훈 JEON SANG YOUNG 전상영		
发明人	이대웅 배재순 남현 홍성길 이동훈 전상영		
IPC分类号	C09K11/06 C09K		
其他公开文献	KR1020100082986A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及由以下化学式1表示的化合物和使用该化合物的有机发光装置。并且本发明的新型化合物可以改善有机发光器件的寿命，效率，电化学稳定性和热稳定性。[化学式1]有机发光装置，有机层，电子注入材料，电子传输材料，发光材料，吡啶化合物，喹啉化合物。

