



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2011-0112120
(43) 공개일자 2011년10월12일

(51) Int. Cl.

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

(21) 출원번호 10-2010-0031553

(22) 출원일자 2010년04월06일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

삼성모바일디스플레이주식회사

경기도 용인시 기흥구 농서동 산24번지

(72) 발명자

임진오

경기도 용인시 기흥구 농서동 산24

황석환

경기도 용인시 기흥구 농서동 산24

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

리앤목특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 헤테로 고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

(57) 요약

헤테로 고리 화합물 및 이를 포함한 유기막을 구비한 유기 발광 소자에 관한 것이다:

대표도 - 도1

제2전극
전자주입층
전자수송층
발광층
정공수송층
정공주입층
제1전극

(72) 발명자

김영국

경기도 용인시 기흥구 농서동 산24

곽윤현

경기도 용인시 기흥구 농서동 산24

정혜진

경기도 용인시 기흥구 농서동 산24

이종혁

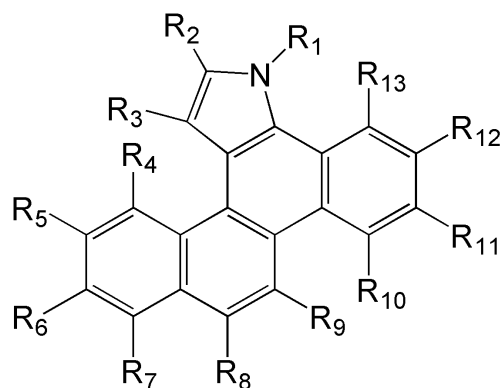
경기도 용인시 기흥구 농서동 산24

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 헤테로 고리 화합물:

<화학식 1>



상기 식 중,

R₁ 내지 R₁₃은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 히드록시기, 카르복시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₅₀ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알콕시기, -(Ar₁)_a-(Ar₁₁)로 표시되는 그룹 및 -N[-(Ar₂)_b-(Ar₁₂)][-(Ar₃)_c-(Ar₁₃)]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되며, R₁ 내지 R₁₃ 중 인접하는 2개 이상은 서로 결합하여 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수도 있고;

Ar₁ 내지 Ar₃은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀ 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₆₀ 헤테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되고;

Ar₁₁, Ar₁₂ 및 Ar₁₃은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀ 아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₅₀ 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₅₀ 아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₆₀ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고;

a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 내지 10의 정수이고;

-(Ar₁)_a-(Ar₁₁)로 표시되는 그룹 중에서 a개의 Ar₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, -N[-(Ar₂)_b-(Ar₁₂)][-(Ar₃)_c-(Ar₁₃)]로 표시되는 그룹 중에서 b개의 Ar₂은 서로 동일하거나 상이할 수 있고 c개의 Ar₃은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₅-C₂₀ 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₂₀ 헤테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

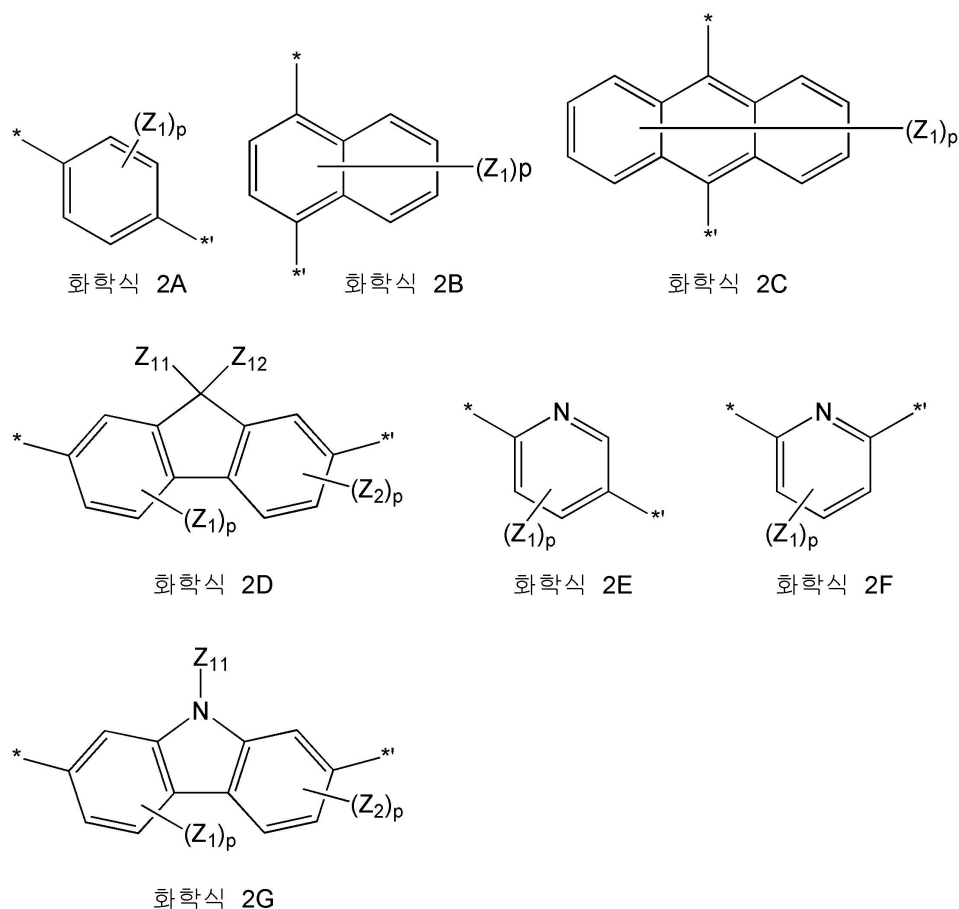
상기 Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 독립적으로 페닐렌기, C₁-C₁₀ 알킬 페닐렌기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페닐렌기, 나프틸렌기,

C₁-C₁₀ 알킬 나프틸렌기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 나프틸렌기, 안트릴렌기, C₁-C₁₀ 알킬 안트릴렌기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 안트릴렌기, 플루오레닐렌기(fluorenylene), C₁-C₁₀ 알킬 플루오레닐렌기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 플루오레닐렌기, C₆-C₁₄ 아릴 플루오레닐렌기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 플루오레닐렌기, 피리딜렌기(pyridylene), C₁-C₁₀ 알킬 피리딜렌기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 피리딜렌기, 카바졸릴렌기(carbazolylene), C₁-C₁₀ 알킬 카바졸릴렌기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 카바졸릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 Ar₁ 내지 Ar₃은 서로 독립적으로 하기 화학식 2A 내지 2G로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물:



상기 식 중, Z₁, Z₂, Z₁₁ 및 Z₁₂는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, C₁-C₁₀ 알킬기, C₁-C₁₀ 알콕시기 및 C₆-C₁₄ 아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고, p는 1 내지 8의 정수이고, *는 Ar₁₁, Ar₁₂ 또는 Ar₁₃와의 결합 사이트이고, *'는 화학식 1의 백본(backbone)을 이루는 고리 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 Ar₁₁, Ar₁₂ 및 Ar₁₃은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₅-C₂₀ 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₂₀ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물.

청구항 6

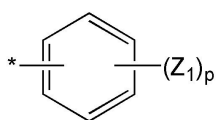
제1항에 있어서,

상기 Ar₁₁, Ar₁₂ 및 Ar₁₃은 서로 독립적으로 페닐기, C₁-C₁₀ 알킬 페닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페닐기, C₆-C₁₄ 아릴 페닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 페닐기, 나프틸기, C₁-C₁₀ 알킬 나프틸기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 나프틸기, C₆-C₁₄ 아릴 나프틸기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 나프틸기, 안트릴기, C₁-C₁₀ 알킬 안트릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 안트릴기, C₆-C₁₄ 아릴 안트릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 안트릴기, 페난트릴기, C₁-C₁₀ 알킬 페난트릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페난트릴기, C₆-C₁₄ 아릴 페난트릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 페난트릴기, 플루오레닐기, C₁-C₁₀ 알킬 플루오레닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 플루오레닐기, C₆-C₁₄ 아릴 플루오레닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 플루오레닐기, 피리딜기, C₁-C₁₀ 알킬 피리딜기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 피리딜기, 피레닐기, C₁-C₁₀ 알킬 피레닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 피레닐기, C₆-C₁₄ 아릴 피레닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 피레닐기, 페난트롤리닐기, C₁-C₁₀ 알킬 페난트롤리닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페난트롤리닐기, C₆-C₁₄ 아릴 페난트롤리닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 페난트롤리닐기, 퀴놀리닐기, C₁-C₁₀ 알킬 퀴놀리닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 퀴놀리닐기, C₆-C₁₄ 아릴 퀴놀리닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 퀴놀리닐기, 벤조옥사졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조옥사졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조옥사졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조옥사졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조옥사졸릴기, 벤조티아졸리기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조티아졸리기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조티아졸리기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조티아졸리기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조티아졸리기, 벤조이미다졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조이미다졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조이미다졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조이미다졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조이미다졸릴기, 이미다졸피리디닐기, C₁-C₁₀ 알킬 이미다졸피리디닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 이미다졸피리디닐기, C₆-C₁₄ 아릴 이미다졸피리디닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 이미다졸피리디닐기, 이미다졸피리미디닐기, C₁-C₁₀ 알킬 이미다졸피리미디닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 이미다졸피리미디닐기, C₆-C₁₄ 아릴 이미다졸피리미디닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 이미다졸피리미디닐기 및 카바졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 카바졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 카바졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 카바졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 카바졸릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물.

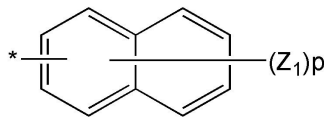
청구항 7

제1항에 있어서,

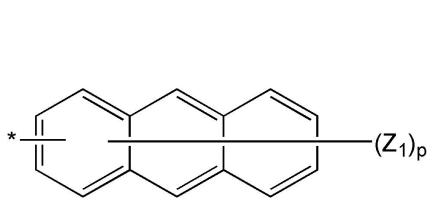
상기 Ar₁₁, Ar₁₂ 및 Ar₁₃은 서로 독립적으로 하기 화학식 3A 내지 3F로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물:



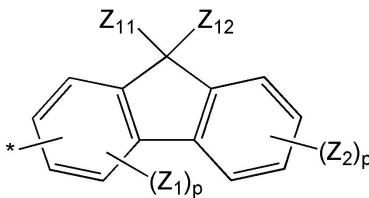
화학식 3A



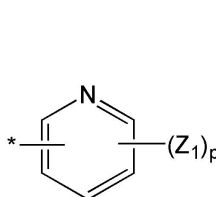
화학식 3B



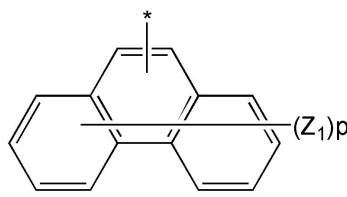
화학식 3C



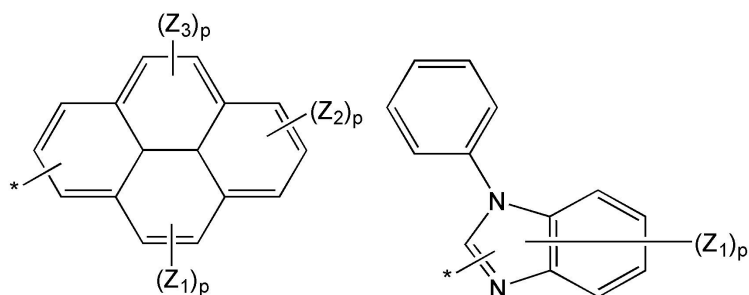
화학식 3D



화학식 3E

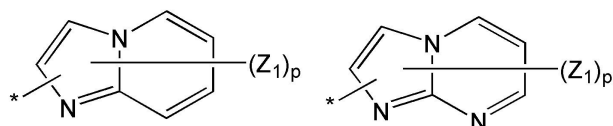


화학식 3F



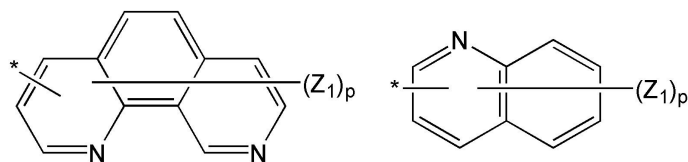
화학식 3G

화학식 3H



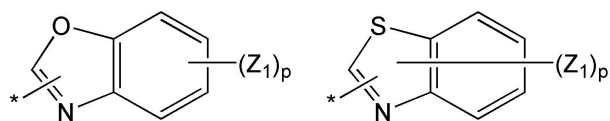
화학식 3I

화학식 3J



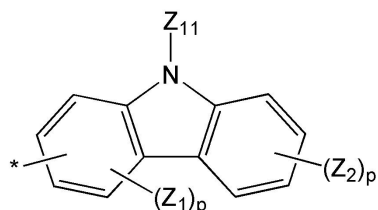
화학식 3K

화학식 3L



화학식 3M

화학식 3N



화학식 3O

상기 식 중, Z_1 , Z_2 , Z_3 , Z_{11} 및 Z_{12} 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기 및 C_6 - C_{14} 아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고, p 는 1 내지 8의 정수이고, *는 Ar_1 , Ar_2 또는 Ar_3 와의 결합 사이트이다.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 a , b 및 c 가 서로 독립적으로 0, 1, 2 또는 3인 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 R_1 내지 R_{13} 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 히드록시기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{10} 알킬기, $-(Ar_1)_a-(Ar_{11})$ 로 표시되는 그룹 및 $-N[-(Ar_2)_b-(Ar_{12})][-(Ar_3)_c-$

(Ar₁₃)]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되고,

상기 Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₅-C₂₀ 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₂₀ 헤테로 아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

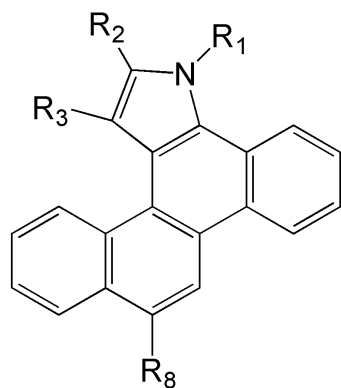
상기 Ar₁₁, Ar₁₂ 및 Ar₁₃은 서로 독립적으로 페닐기, C₁-C₁₀ 알킬 페닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페닐기, C₆-C₁₄ 아릴 페닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 페닐기, 나프틸기, C₁-C₁₀ 알킬 나프틸기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 나프틸기, C₆-C₁₄ 아릴 나프틸기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 나프틸기, 안트릴기, C₁-C₁₀ 알킬 안트릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 안트릴기, C₆-C₁₄ 아릴 안트릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 안트릴기, 페난트릴기, C₁-C₁₀ 알킬 페난트릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페난트릴기, C₆-C₁₄ 아릴 페난트릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 페난트릴기, 플루오레닐기, C₁-C₁₀ 알킬 플루오레닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 플루오레닐기, C₆-C₁₄ 아릴 플루오레닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 플루오레닐기, 피리딜기, C₁-C₁₀ 알킬 피리딜기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 피리딜기, 피레닐기, C₁-C₁₀ 알킬 피레닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 피레닐기, C₆-C₁₄ 아릴 피레닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 피레닐기, 페난트롤리닐기, C₁-C₁₀ 알킬 페난트롤리닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페난트롤리닐기, C₆-C₁₄ 아릴 페난트롤리닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 페난트롤리닐기, 퀴놀리닐기, C₁-C₁₀ 알킬 퀴놀리닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 퀴놀리닐기, C₆-C₁₄ 아릴 퀴놀리닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 퀴놀리닐기, 벤조옥사졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조옥사졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조옥사졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조옥사졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조옥사졸릴기, 벤조티아졸리기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조티아졸리기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조티아졸리기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조티아졸리기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조티아졸리기, 벤조이미다졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조이미다졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조이미다졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조이미다졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조이미다졸릴기, 이미다졸피리디닐기, C₁-C₁₀ 알킬 이미다졸피리디닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 이미다졸피리디닐기, 이미다졸피리미디닐기, C₁-C₁₀ 알킬 이미다졸피리미디닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 이미다졸피리미디닐기, C₆-C₁₄ 아릴 이미다졸피리미디닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 이미다졸피리미디닐기 및 카바졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 카바졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 카바졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 카바졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 카바졸릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

상기 a, b 및 c는 서로 독립적으로 0, 1, 2 또는 3인 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물.

청구항 10

제1항에 있어서, 하기 화학식 2로 표시되는 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물:

<화학식 2>



상기 식 중,

R₁, R₂, R₃ 및 R₈은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₅₀ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알콕시기, -(Ar₁)_a-(Ar₁₁)로 표시되는 그룹 및 -N[-(Ar₂)_b-(Ar₁₂)][-(Ar₃)_c-(Ar₁₃)]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되며, R₁ 내지 R₃ 중 인접하는 2개 이상은 서로 결합하여 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수도

있고;

Ar_1 내지 Ar_3 은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{50} 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{50} 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C_4-C_{60} 헤테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되고;

Ar_{11} , Ar_{12} 및 Ar_{13} 은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{50} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{50} 아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C_4-C_{60} 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고;

a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 내지 10의 정수이고;

$-(Ar_1)_a-(Ar_{11})$ 로 표시되는 그룹 중에서 a개의 Ar_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, $-N[-(Ar_2)_b-(Ar_{12})][-(Ar_3)_c-(Ar_{13})]$ 로 표시되는 그룹 중에서 b개의 Ar_2 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고 c개의 Ar_3 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 11

제10항에 있어서,

상기 Ar_1 내지 Ar_3 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_5-C_{20} 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C_4-C_{20} 헤테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물.

청구항 12

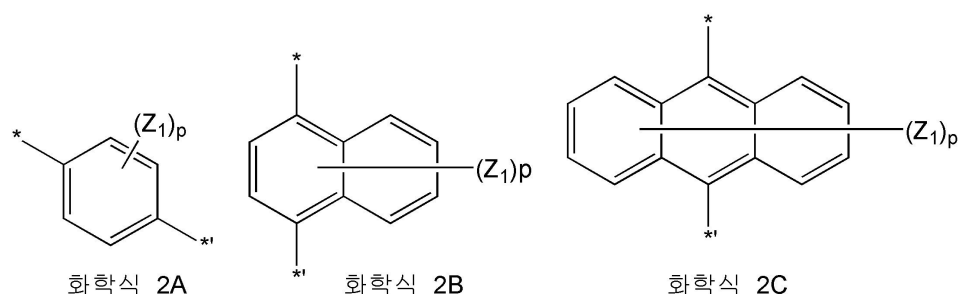
제10항에 있어서,

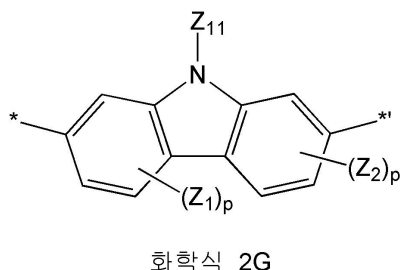
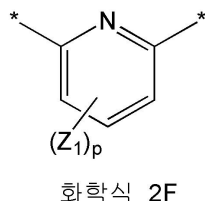
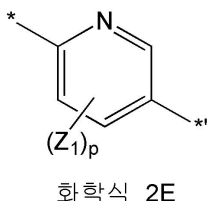
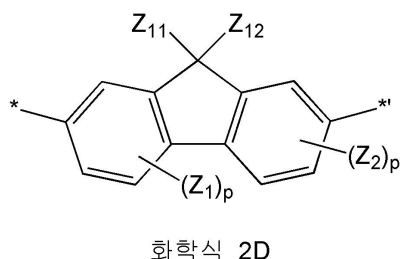
상기 Ar_1 내지 Ar_3 는 서로 독립적으로 페닐렌기, C_1-C_{10} 알킬 페닐렌기, 디(C_1-C_{10} 알킬) 페닐렌기, 나프틸렌기, C_1-C_{10} 알킬 나프틸렌기, 디(C_1-C_{10} 알킬) 나프틸렌기, 안트릴렌기, C_1-C_{10} 알킬 안트릴렌기, 디(C_1-C_{10} 알킬) 안트릴렌기, 플루오레닐렌기(fluorenylene), C_1-C_{10} 알킬 플루오레닐렌기, 디(C_1-C_{10} 알킬) 플루오레닐렌기, C_6-C_{14} 아릴 플루오레닐렌기, 디(C_6-C_{14} 아릴) 플루오레닐렌기, 피리딜렌기(pyridylene), C_1-C_{10} 알킬 피리딜렌기, 디(C_1-C_{10} 알킬) 피리딜렌기, 카바졸릴렌기(carbazolylene), C_1-C_{10} 알킬 카바졸릴렌기, 디(C_1-C_{10} 알킬) 카바졸릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물.

청구항 13

제10항에 있어서,

상기 Ar_1 내지 Ar_3 는 서로 독립적으로 하기 화학식 2A 내지 2G로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물:





상기 식 중, Z_1 , Z_2 , Z_{11} 및 Z_{12} 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기 및 C_6 - C_{14} 아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고, p 는 1 내지 8의 정수이고, *는 Ar_{11} , Ar_{12} 또는 Ar_{13} 와의 결합 사이트이고, *'는 화학식 1의 백본을 이루는 고리 원자와의 결합 사이트이다.

청구항 14

제10항에 있어서,

상기 Ar_{11} , Ar_{12} 및 Ar_{13} 은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{20} 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C_4 - C_{20} 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물.

청구항 15

제10항에 있어서,

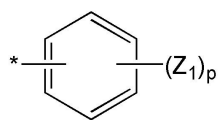
상기 Ar_{11} , Ar_{12} 및 Ar_{13} 은 서로 독립적으로 페닐기, C_1 - C_{10} 알킬 페닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 페닐기, C_6 - C_{14} 아릴 페닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 페닐기, 나프틸기, C_1 - C_{10} 알킬 나프틸기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 나프틸기, C_6 - C_{14} 아릴 나프틸기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 나프틸기, 안트릴기, C_1 - C_{10} 알킬 안트릴기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 안트릴기, C_6 - C_{14} 아릴 안트릴기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 안트릴기, 페난트릴기, C_1 - C_{10} 알킬 페난트릴기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 페난트릴기, C_6 - C_{14} 아릴 페난트릴기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 페난트릴기, 플루오레닐기, C_1 - C_{10} 알킬 플루오레닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 플루오레닐기, C_6 - C_{14} 아릴 플루오레닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 플루오레닐기, 피리딜기, C_1 - C_{10} 알킬 피리딜기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 피리딜기, 피레닐기, C_1 - C_{10} 알킬 피레닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 피레닐기, C_6 - C_{14} 아릴 피레닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 피레닐기, 페난트롤리닐기, C_1 - C_{10} 알킬 페난트롤리닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 페난트롤리닐기, C_6 - C_{14} 아릴 페난트롤리닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 페난트롤리닐기, 퀴놀리닐기, C_1 - C_{10} 알킬 퀴놀리닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 퀴놀리닐기, C_6 - C_{14} 아릴 퀴놀리닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 퀴놀리닐기, 벤조옥사졸릴기, C_1 - C_{10} 알킬 벤조옥사졸릴기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 벤조옥사졸릴기, C_6 - C_{14} 아릴 벤조옥사졸릴기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 벤조옥사졸릴기, 벤조티아졸릴기, C_1 - C_{10} 알킬 벤조티아졸릴기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 벤조티아졸릴기, C_6 - C_{14} 아릴 벤조티아졸릴기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 벤조티아졸릴기, 벤조이미다졸릴기, C_1 - C_{10} 알킬 벤조이미다졸릴기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 벤조이미다졸릴기, C_6 - C_{14} 아릴 벤조이미다졸릴기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 벤조이미다졸릴기, 이미다졸피리디닐기, C_1 - C_{10} 알킬 이미다졸피리디닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 이미다졸피리디닐기, C_6 - C_{14} 아릴 이미다졸피리디닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 이미다졸피리디닐기, 이미다졸피리미디닐기, C_1 - C_{10} 알킬 이미다졸피리미디닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 이미다졸피리미디닐기, C_6 - C_{14} 아릴 이미다졸피리미디닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 이미다졸피리미디닐기 및 카바졸릴기, C_1 - C_{10} 알킬 카바졸릴기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 카바졸릴기,

C₆-C₁₄ 아릴 카바졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 카바졸릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물.

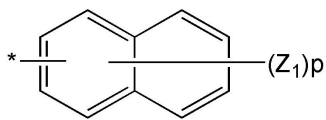
청구항 16

제10항에 있어서,

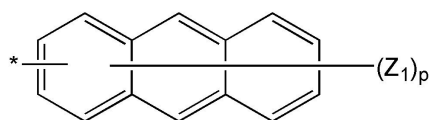
상기 Ar₁₁, Ar₁₂ 및 Ar₁₃은 서로 독립적으로 하기 화학식 3A 내지 3J로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물:



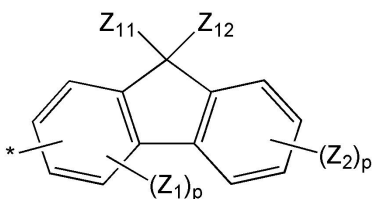
화학식 3A



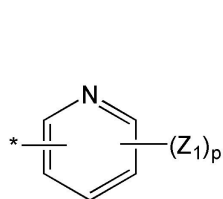
화학식 3B



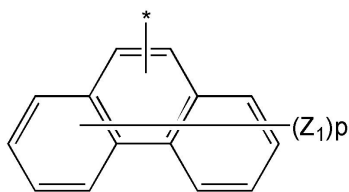
화학식 3C



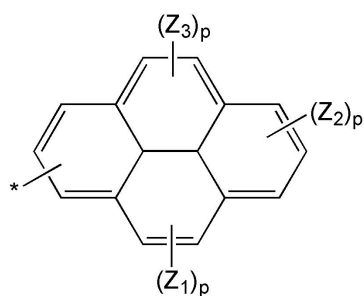
화학식 3D



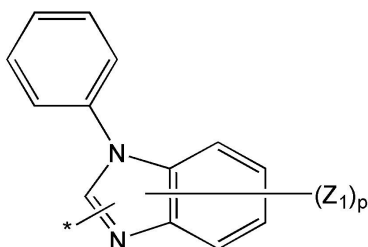
화학식 3E



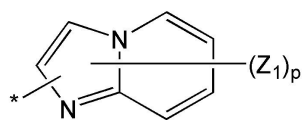
화학식 3F



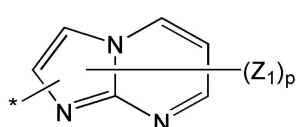
화학식 3G



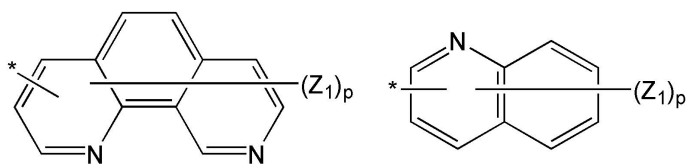
화학식 3H



화학식 3I

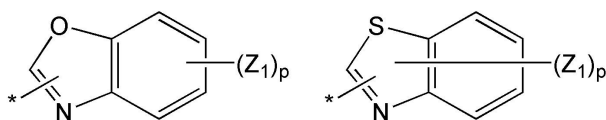


화학식 3J



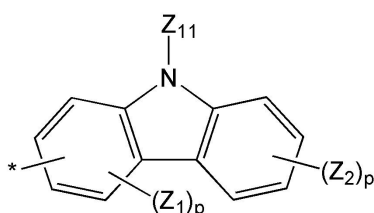
화학식 3K

화학식 3L



화학식 3M

화학식 3N



화학식 3O

상기 식 중, Z_1 , Z_2 , Z_3 , Z_{11} 및 Z_{12} 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, C_1 - C_{10} 알킬기, C_1 - C_{10} 알콕시기 및 C_6 - C_{14} 아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고, p 는 1 내지 8의 정수이고, *는 Ar_1 , Ar_2 또는 Ar_3 와의 결합 사이트이다.

청구항 17

제10항에 있어서,

상기 a , b 및 c 는 서로 독립적으로 0, 1, 2 또는 3인 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물.

청구항 18

제10항에 있어서,

상기 R_1 및 R_8 은 서로 독립적으로 $-(Ar_1)_a-(Ar_{11})$ 로 표시되는 그룹 및 $-N[-(Ar_2)_b-(Ar_{12})][-(Ar_3)_c-(Ar_{13})]$ 로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되며, 상기 R_2 및 R_3 는 서로 독립적으로 메틸기, 페닐기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

상기 Ar_1 내지 Ar_3 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{20} 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C_4 - C_{20} 헤테로 아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

상기 Ar_{11} , Ar_{12} 및 Ar_{13} 은 서로 독립적으로 페닐기, C_1 - C_{10} 알킬 페닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 페닐기, C_6 - C_{14} 아릴 페닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 페닐기, 나프틸기, C_1 - C_{10} 알킬 나프틸기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 나프틸기, C_6 - C_{14} 아릴 나프틸기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 나프틸기, 안트릴기, C_1 - C_{10} 알킬 안트릴기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 안트릴기, C_6 - C_{14} 아릴 안트릴기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 안트릴기, 페난트릴기, C_1 - C_{10} 알킬 페난트릴기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 페난트릴기, C_6 - C_{14} 아릴 페난트릴기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 페난트릴기, 플루오레닐기, C_1 - C_{10} 알킬 플루오레닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 플루오레닐기, C_6 - C_{14} 아릴 플루오레닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 플루오레닐기, 피리딜기, C_1 - C_{10} 알킬 피리딜기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 피리딜기, 피레닐기, C_1 - C_{10} 알킬 피레닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 피레닐기, C_6 - C_{14} 아릴 피레닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 피레닐기, 페난트롤리닐기, C_1 - C_{10} 알킬 페난트롤리닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 페난트롤리닐기, C_6 - C_{14} 아릴 페난트롤리닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 페난트롤리닐기, 퀴놀리닐기, C_1 - C_{10} 알킬 퀴놀리닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 퀴놀리닐기,

C₆-C₁₄ 아릴 퀴놀리닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 퀴놀리닐기, 벤조옥사졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조옥사졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조옥사졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조옥사졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조옥사졸릴기, 벤조티아졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조티아졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조티아졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조티아졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조티아졸릴기, 벤조이미다졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조이미다졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조이미다졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조이미다졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조이미다졸릴기, 이미다졸피리디닐기, C₁-C₁₀ 알킬 이미다졸피리디닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 이미다졸피리디닐기, C₆-C₁₄ 아릴 이미다졸피리디닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 이미다졸피리디닐기, 이미다졸피리미디닐기, C₁-C₁₀ 알킬 이미다졸피리미디닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 이미다졸피리미디닐기, C₆-C₁₄ 아릴 이미다졸피리미디닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 이미다졸피리미디닐기 및 카바졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 카바졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 카바졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 카바졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 카바졸릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

상기 a, b 및 c는 서로 독립적으로 0, 1, 2 또는 3인 것을 특징으로 하는 헤테로 고리 화합물.

청구항 19

제1 전극; 상기 제1전극에 대향된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 개재된 유기막을 구비하고, 상기 유기막이 제1항 내지 제18항 중 어느 한 항의 헤테로 고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 20

제19항에 있어서,

상기 유기막이 전자 주입층, 전자 수송층 또는 발광층인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

명세서

기술 분야

[0001] 헤테로 고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting device)는 자발광형 표시 소자로 시야각이 넓으며 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답시간이 빠르다는 장점을 가지고 있기 때문에 커다란 주목을 받고 있다.

[0003] 유기 발광 소자는 일반적으로 애노드/유기 발광층/캐소드의 적층구조를 갖고, 상기 애노드와 발광층 사이 또는 발광층과 캐소드 사이에 정공 주입층 및/또는 정공 수송층 및 전자 주입층을 더 적층하여 애노드/정공 수송층/유기 발광층/캐소드, 애노드/정공 수송층/유기 발광층/전자 수송층/캐소드 등의 구조를 가진다.

[0004] 이 중, 유기 발광층 재료로서 안트라센 유도체 등이 사용될 수 있으나, 지금까지 알려진 유기 발광 재료를 포함한 유기 발광 소자는 수명, 효율 및 소비전력 특성이 만족할 만한 수준에 이르지 못하여 개선의 여지가 많다.

발명의 내용

해결하려는 과제

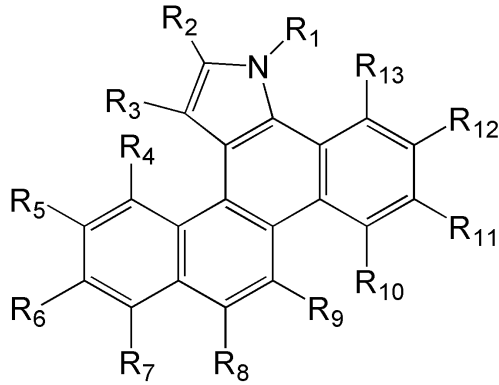
[0005] 본 발명의 한 측면은 개선된 전기적 특성, 전하 수송 능력 및 발광 능력을 가지는 헤테로 고리 화합물을 제공하는 것이다.

[0006] 본 발명의 다른 측면은 상기 헤테로 고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0007] 본 발명의 한 측면에 따라, 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로 고리 화합물이 제공된다:

[0008] <화학식 1>

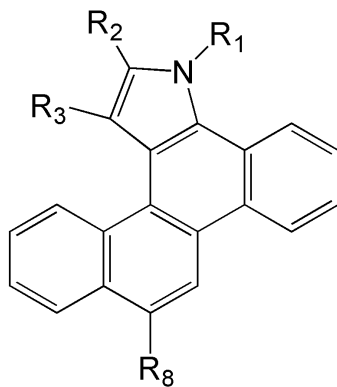


[0009]

[0010] 상기 식 중, R₁ 내지 R₁₃은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 히드록시기, 카르복시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₅₀ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알콕시기, -(Ar₁)_a-(Ar₁₁)로 표시되는 그룹 및 -N[-(Ar₂)_b-(Ar₁₂)][-(Ar₃)_c-(Ar₁₃)]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되며, R₁ 내지 R₁₃ 중 인접하는 2개 이상은 서로 결합하여 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수도 있고; Ar₁ 내지 Ar₃은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀ 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₆₀ 헤테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되고; Ar₁₁, Ar₁₂ 및 Ar₁₃은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀ 아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₅₀ 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₅₀ 아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₆₀ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고; a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 내지 10의 정수이고; -(Ar₁)_a-(Ar₁₁)로 표시되는 그룹 중에서 a개의 Ar₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, -N[-(Ar₂)_b-(Ar₁₂)][-(Ar₃)_c-(Ar₁₃)]로 표시되는 그룹 중에서 b개의 Ar₂은 서로 동일하거나 상이할 수 있고 c개의 Ar₃은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0011] 상기 헤테로 고리 화합물은 하기 화학식 2로 표시될 수 있다:

[0012] <화학식 2>



[0013]

[0014] 상기 식 중, R₁, R₂, R₃ 및 R₈은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₅₀ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알콕시기, -(Ar₁)_a-(Ar₁₁)로 표시되는 그룹 및 -N[-(Ar₂)_b-(Ar₁₂)][-(Ar₃)_c-(Ar₁₃)]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되며, R₁ 내지 R₃ 중 인접하는 2개 이상은 서로 결합하여 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수도 있고; Ar₁, Ar₂, Ar₃, Ar₁₁, Ar₁₂, Ar₁₃, a, b 및 c는 본 명세서에서 상술한 바를 참조한다.

[0015] 본 발명의 다른 측면에 따라, 제1 전극; 상기 제1전극에 대향된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 개재된 유기막을 구비하고, 상기 유기막이 상기 헤테로 고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자가 제공

된다.

발명의 효과

[0016] 본 발명의 한 측면에 따른 신규한 헥테로 고리 화합물은 발광 특성 및 전자 수송 능력이 우수하고, 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 거의 모든 칼라의 형광과 인광 소자에 적합한 전자 수송 재료 또는 녹색, 청색, 흰색의 발광 재료로서 유용하며, 이를 이용하여 고효율, 저전압, 고휘도, 장수명의 유기 발광 소자를 제작할 수 있다.

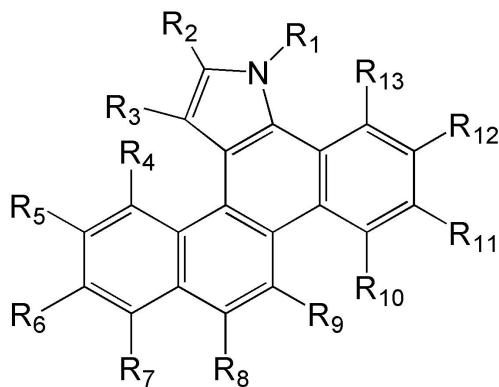
도면의 간단한 설명

[0017] 도 1은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 구조를 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0018] 본 발명의 한 측면에 따른 헥테로 고리 화합물은 하기 화학식 1로 표시될 수 있다:

[0019] <화학식 1>



[0020]

[0021] 상기 화학식 1 중, R₁ 내지 R₁₃은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 히드록시기, 카르복시기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₅₀ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알콕시기, -(Ar₁)_a-(Ar₁₁)로 표시되는 그룹 및 -N[-(Ar₂)_b-(Ar₁₂)][-(Ar₃)_c-(Ar₁₃)]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되며, R₁ 내지 R₁₃ 중 인접하는 2개 이상은 서로 결합하여 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수도 있다.

[0022] 상기 Ar₁ 내지 Ar₃은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀ 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₆₀ 헥테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0023] Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₅-C₂₀ 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₂₀ 헥테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0024] 치환 또는 비치환된 C₅-C₂₀ 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₂₀ 헥테로아릴렌기의 예로는 페닐렌기, C₁-C₁₀ 알킬페닐렌기, C₁-C₁₀ 알콕시페닐렌기, 할로페닐렌기, 시아노페닐렌기, 디시아노페닐렌기, 트리플루오로메톡시페닐렌기, o-, m-, 또는 p-톨릴렌기, o-, m- 또는 p-쿠메닐렌기, 메틸렌기, 페녹시페닐렌기, (α, α-디메틸벤젠)페닐렌기, (C₁-C₁₀알킬사이클로헥실)페닐렌기, (안트라세닐)페닐렌기, 바이페닐렌기, C₁-C₁₀ 알킬바이페닐렌기, C₁-C₁₀ 알콕시바이페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, C₁-C₁₀ 알킬나프틸렌기, C₁-C₁₀ 알콕시나프틸렌기, 할로나프틸렌기, 시아로나프틸렌기, 바이페닐레닐렌기, C₁-C₁₀ 알킬 바이페닐레닐렌기, C₁-C₁₀ 알콕시 바이페닐레닐렌기, 바이페닐안트라세닐렌기, 안트라세닐렌기, 아즈레닐렌기, 헵타레닐렌기, 아세나프틸레닐렌기, 페나레닐렌기, 플루오레닐렌기, 안트라퀴놀일렌기, 메틸안트릴렌기, 페난트레닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 피레닐렌기, 크리세닐렌기, 에틸-크리세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기, 클로로페틸레닐렌기, 펜타페닐렌기,

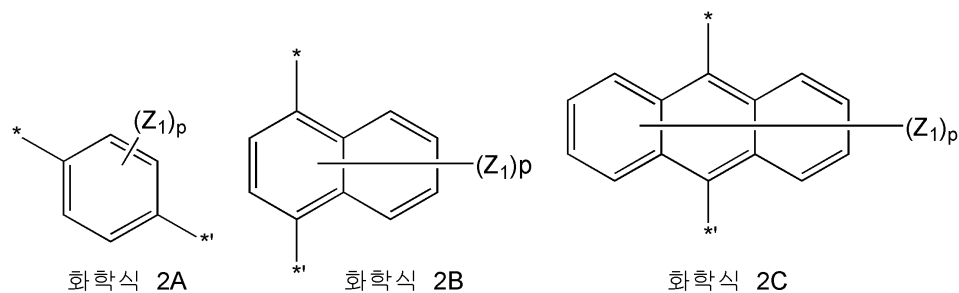
펜타세닐렌기, 테트라페닐레닐렌기, 헥사페닐렌기, 헥사세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 트리나프틸레닐렌기, 헵타페닐렌기, 헵타세닐렌기, 피란트레닐렌기, 오바레닐렌기, 카르바졸릴렌기, C₁-C₁₀ 알킬 카르바졸릴렌기, 티오펜릴렌기, 인돌릴렌기, 푸리닐렌기, 벤즈이미다졸릴렌기, 퀴놀리닐렌기, 벤조티오펜릴렌기, 파라티아지닐렌기, 피롤릴렌기, 피라졸릴렌기, 이미다졸릴렌기, 이미다졸리닐렌기, 옥사졸릴렌기, 티아졸릴렌기, 트리아졸릴렌기, 테트라졸릴렌기, 옥사디아졸릴렌기, 피리디닐렌기, 피리다지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피라지닐렌기 및 티안트레닐렌기(thianthrenylene), 피롤리디닐렌기, 피라졸리디닐렌기, 이미다졸리디닐렌기, 피페리디닐렌기, 피페라지닐렌기 또는 모르폴리닐렌기 등을 들 수 있다.

[0025]

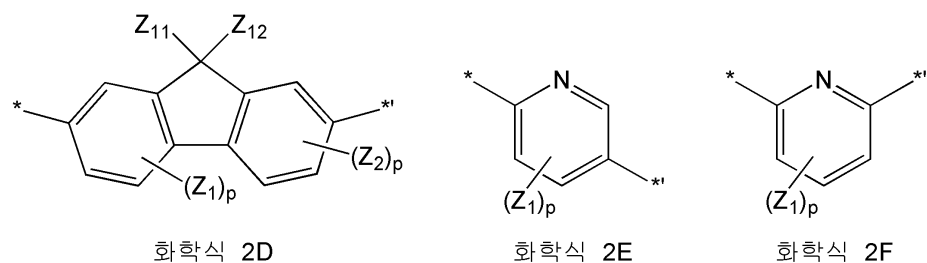
구체적으로, 상기 Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 독립적으로 페닐렌기, C₁-C₁₀ 알킬 페닐렌기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페닐렌기, 나프틸렌기, C₁-C₁₀ 알킬 나프틸렌기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 나프틸렌기, 안트릴렌기, C₁-C₁₀ 알킬 안트릴렌기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 안트릴렌기, 플루오레닐렌기(fluorenylene), C₁-C₁₀ 알킬 플루오레닐렌기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 플루오레닐렌기, C₆-C₁₄ 아릴 플루오레닐렌기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 플루오레닐렌기, 피리디닐렌기(pyridylene), C₁-C₁₀ 알킬 피리디닐렌기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 피리디닐렌기, 카바졸릴렌기(carbazolylene), C₁-C₁₀ 알킬 카바졸릴렌기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 카바졸릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0026]

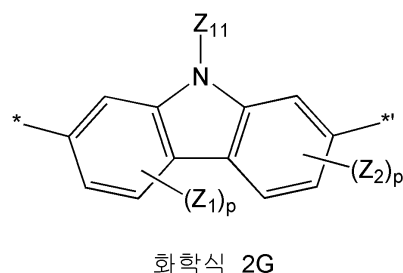
예를 들면, 상기 Ar₁ 내지 Ar₃은 서로 독립적으로 하기 화학식 2A 내지 2G로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0027]



[0028]



[0029]

[0030]

단, 상기 식 중, Z₁, Z₂, Z₁₁ 및 Z₁₂는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, C₁-C₁₀ 알킬기(예를 들면 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸 등), C₁-C₁₀ 알콕시기(예를 들면 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로필옥시, 부톡시 등) 및 C₆-C₁₄ 아릴기(예를 들면 페닐, 나프틸 등)로 이루어진 군으로부터 선택되고, p는 1 내지 8의 정수이고, *는 Ar₁₁, Ar₁₂ 또는 Ar₁₃와의 결합 사이트이고, *'는 화학식 1의 백본(backbone)을 이루는 고리 원자와의 결합 사이트이다.

[0031]

상기 Ar₁₁, Ar₁₂ 및 Ar₁₃은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀ 아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₅₀ 아릴옥

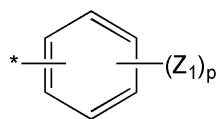
시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₅₀ 아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₆₀ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0032] Ar₁₁, Ar₁₂ 및 Ar₁₃은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₅-C₂₀ 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₂₀ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

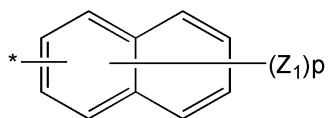
[0033] 치환 또는 비치환된 C₅-C₂₀ 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₂₀ 헤테로아릴렌기의 예로는 페닐렌기, C₁-C₁₀ 알킬페닐렌기, C₁-C₁₀ 알콕시페닐렌기, 할로페닐렌기, 시아노페닐렌기, 디시아노페닐렌기, 트리플루오로메톡시페닐렌기, o-, m-, 또는 p-톨릴렌기, o-, m- 또는 p-쿠메닐렌기, 메시틸렌기, 페녹시페닐렌기, (α, α-디메틸벤젠)페닐렌기, (C₁-C₁₀알킬사이클로헥실)페닐렌기, (안트라세닐)페닐렌기, 바이페닐렌기, C₁-C₁₀ 알킬바이페닐렌기, C₁-C₁₀ 알콕시바이페닐렌기, 펜타레닐기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, C₁-C₁₀ 알킬나프틸렌기, C₁-C₁₀ 알콕시나프틸렌기, 할로나프틸렌기, 시아로나프틸렌기, 바이페닐레닐렌기, C₁-C₁₀ 알킬 바이페닐레닐렌기, C₁-C₁₀ 알콕시 바이페닐레닐렌기, 바이페닐안트라세닐렌기, 안트라세닐렌기, 아즈레닐렌기, 헵타레닐렌기, 아세나프틸레닐렌기, 페나레닐렌기, 플루오레닐렌기, 안트라퀴놀일렌기, 메틸안트릴렌기, 페난트레닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 피레닐렌기, 크리스레닐렌기, 에틸-크리스레닐렌기, 피세닐렌기, 페릴레닐렌기, 클로로페릴레닐렌기, 펜타페닐렌기, 헵타세닐렌기, 테트라페닐레닐렌기, 헥사페닐렌기, 헥사세닐렌기, 루비세닐렌기, 코로네닐렌기, 트리나프틸레닐렌기, 헵타페닐렌기, 헵타세닐렌기, 피란트레닐렌기, 오바레닐렌기, 카르바졸릴렌기, C₁-C₁₀ 알킬 카르바졸릴렌기, 티오펜렌기, 인돌일렌기, 푸리닐렌기, 벤즈이미다졸일렌기, 퀴놀리닐렌기, 벤조티오펜렌기, 파타디아지닐렌기, 피롤일렌기, 피라졸릴렌기, 이미다졸릴렌기, 이미다졸리닐렌기, 옥사졸릴렌기, 티아졸릴렌기, 트리아졸릴렌기, 테트라졸일렌기, 옥사디아졸릴렌기, 피리디닐렌기, 피리다지닐렌기, 피리미디닐렌기, 피라지닐렌기 및 티안트레닐렌기(thianthrylene), 피롤리디닐렌기, 피라졸리디닐렌기, 이미다졸리디닐렌기, 피페리디닐렌기, 피페라지닐렌기 또는 모르폴리닐렌기 등을 들 수 있다.

[0034] 구체적으로, 상기 Ar₁₁, Ar₁₂ 및 Ar₁₃은 서로 독립적으로 페닐기, C₁-C₁₀ 알킬 페닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페닐기, C₆-C₁₄ 아릴 페닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 페닐기, 나프틸기, C₁-C₁₀ 알킬 나프틸기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 나프틸기, C₆-C₁₄ 아릴 나프틸기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 나프틸기, 안트릴기, C₁-C₁₀ 알킬 안트릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 안트릴기, C₆-C₁₄ 아릴 안트릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 안트릴기, 페난트릴기, C₁-C₁₀ 알킬 페난트릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페난트릴기, C₆-C₁₄ 아릴 페난트릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 페난트릴기, 플루오레닐기, C₁-C₁₀ 알킬 플루오레닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 플루오레닐기, C₆-C₁₄ 아릴 플루오레닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 플루오레닐기, 피리딜기, C₁-C₁₀ 알킬 피리딜기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 피리딜기, 피레닐기, C₁-C₁₀ 알킬 피레닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 피레닐기, C₆-C₁₄ 아릴 피레닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 피레닐기, 페난트롤리닐기, C₁-C₁₀ 알킬 페난트롤리닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페난트롤리닐기, C₆-C₁₄ 아릴 페난트롤리닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 페난트롤리닐기, 퀴놀리닐기, C₁-C₁₀ 알킬 퀴놀리닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 퀴놀리닐기, C₆-C₁₄ 아릴 퀴놀리닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 퀴놀리닐기, 벤조옥사졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조옥사졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조옥사졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조옥사졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조옥사졸릴기, 벤조티아졸리기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조티아졸리기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조티아졸리기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조티아졸리기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조티아졸리기, 벤조이미다졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조이미다졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조이미다졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조이미다졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조이미다졸릴기, 이미다졸피리디닐기, C₁-C₁₀ 알킬 이미다졸피리디닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 이미다졸피리디닐기, C₆-C₁₄ 아릴 이미다졸피리디닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 이미다졸피리디닐기, 이미다졸피리미디닐기, C₁-C₁₀ 알킬 이미다졸피리미디닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 이미다졸피리미디닐기, C₆-C₁₄ 아릴 이미다졸피리미디닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 이미다졸피리미디닐기 및 카바졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 카바졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 카바졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 카바졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 카바졸릴기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

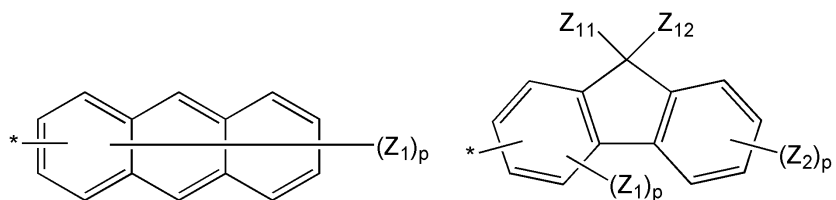
[0035] 예를 들면, 상기 Ar₁₁, Ar₁₂ 및 Ar₁₃은 서로 독립적으로 하기 화학식 3A 내지 3O로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



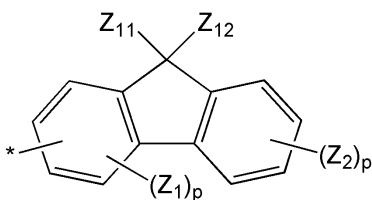
화학식 3A



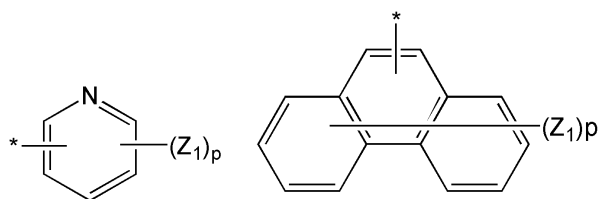
화학식 3B



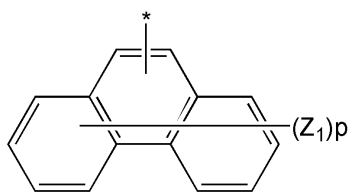
화학식 3C



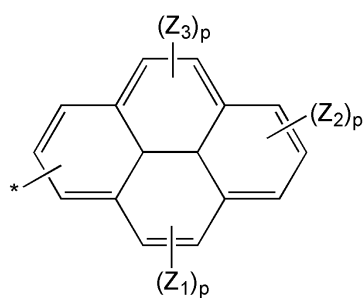
화학식 3D



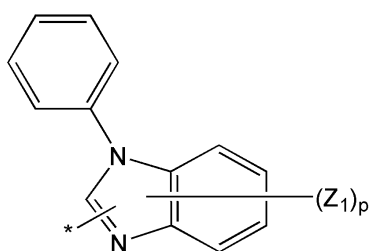
화학식 3E



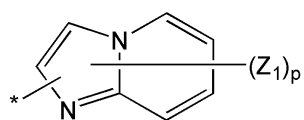
화학식 3F



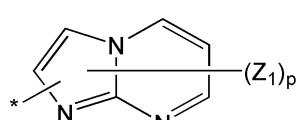
화학식 3G



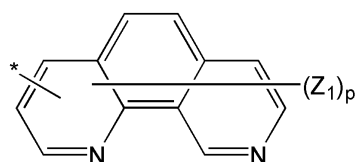
화학식 3H



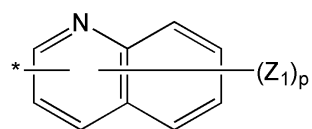
화학식 3I



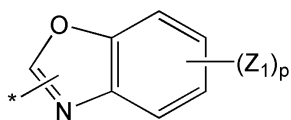
화학식 3J



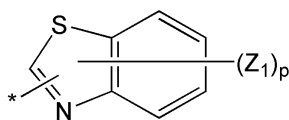
화학식 3K



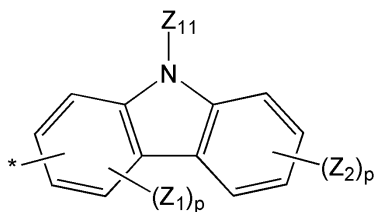
화학식 3L



화학식 3M



화학식 3N



화학식 3O

단, 상기 식 중, Z_1 , Z_2 , Z_3 , Z_{11} 및 Z_{12} 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, C_1 - C_{10} 알킬기(예를 들면 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸 등), C_1 - C_{10} 알콕시기(예를 들면 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로필옥시, 부톡시 등) 및 C_6 - C_{14} 아릴기(예를 들면 페닐, 나프틸 등)로 이루어진 군으로부터 선택되고, p 는 1 내지 8의 정수이고, *는 Ar_1 , Ar_2 또는 Ar_3 와의 결합 사이트이다.

상기 a , b 및 c 는 서로 독립적으로 0 내지 10의 정수일 수 있다.

예를 들면 a , b 및 c 는 서로 독립적으로 0, 1, 2 또는 3일 수 있다

$-(Ar_1)_a-(Ar_{11})$ 로 표시되는 그룹 중에서 a 개의 Ar_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, $-N[-(Ar_2)_b-(Ar_{12})][-(Ar_3)_c-(Ar_{13})]$ 로 표시되는 그룹 중에서 b 개의 Ar_2 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고 c 개의 Ar_3 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다..

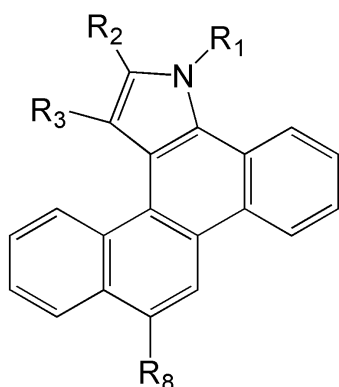
R_1 내지 R_{13} 중 어느 하나가 $-(Ar_1)_a-(Ar_{11})$ 로 표시되는 그룹으로 선택되고 동시에 $a=0$ 인 경우 치환기는 $-(Ar_{11})$ 로 표시될 수 있으며, R_1 내지 R_{13} 중 어느 하나가 $-N[-(Ar_2)_b-(Ar_{12})][-(Ar_3)_c-(Ar_{13})]$ 로 표시되는 그룹으로 선택되고 동시에 $b \neq 0$ 및 $c=0$ 인 경우 치환기는 $-N[-(Ar_2)_b-(Ar_{12})][-(Ar_{13})]$ 로 표시될 수 있다. 여기서 Ar_1 , Ar_2 , Ar_3 , Ar_{11} , Ar_{12} , Ar_{13} , a , b 및 c 는 본 명세서에서 상술한 바를 참조한다.

화학식 1의 헤테로 고리 화합물의 R_1 내지 R_{13} 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 히드록시기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{50} 알킬기, $-(Ar_1)_a-(Ar_{11})$ 로 표시되는 그룹 및 $-N[-(Ar_2)_b-(Ar_{12})][-(Ar_3)_c-(Ar_{13})]$ 로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 Ar_1 내지 Ar_3 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{20} 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C_4 - C_{20} 헤테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 Ar_{11} , Ar_{12} 및 Ar_{13} 은 서로 독립적으로 페닐기, C_1 - C_{10} 알킬 페닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 페닐기, C_6 - C_{14} 아릴 페닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 페닐기, 나프틸기, C_1 - C_{10} 알킬 나프틸기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 나프틸기, C_6 - C_{14} 아릴 나프틸기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 나프틸기, 안트릴기, C_1 - C_{10} 알킬 안트릴기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 안트릴기, C_6 - C_{14} 아릴 안트릴기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 안트릴기, 페난트릴기, C_1 - C_{10} 알킬 페난트릴기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 페난트릴기, C_6 - C_{14} 아릴 페난트릴기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 페난트릴기, 플루오레닐기, C_1 - C_{10} 알킬 플루오레닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 플루오레닐기, C_6 - C_{14} 아릴 플루오레닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 플루오레닐기, 피리딜기, C_1 - C_{10} 알킬 피리딜기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 피리딜기, 피레닐기, C_1 - C_{10} 알킬 피레닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 피레닐기, C_6 - C_{14} 아릴 피레닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 피레닐기, 페난트롤리닐기, C_1 - C_{10} 알킬 페난트롤리닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 페난트롤리닐기, C_6 - C_{14} 아릴 페난트롤리닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 페난트롤리닐기, 퀴놀리닐기, C_1 - C_{10} 알킬 퀴놀리닐기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 퀴놀리닐기, C_6 - C_{14} 아릴 퀴놀리닐기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 퀴놀리닐기, 벤조옥사졸릴기, C_1 - C_{10} 알킬 벤조옥사졸릴기, 디(C_1 - C_{10} 알킬) 벤조옥사졸릴기, C_6 - C_{14} 아릴 벤조옥사졸릴기, 디(C_6 - C_{14} 아릴) 벤조옥사졸릴기, 벤조티아졸리,

C₁-C₁₀ 알킬 벤조티아졸리기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조티아졸리기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조티아졸리기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조티아졸리기, 벤조이미다졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조이미다졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조이미다졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조이미다졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조이미다졸릴기, 이미다졸피리디닐기, C₁-C₁₀ 알킬 이미다졸피리디닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 이미다졸피리디닐기, C₆-C₁₄ 아릴 이미다졸피리디닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 이미다졸피리디닐기, 이미다졸피리미디닐기, C₁-C₁₀ 알킬 이미다졸피리미디닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 이미다졸피리미디닐기, C₆-C₁₄ 아릴 이미다졸피리미디닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 이미다졸피리미디닐기 및 카바졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 카바졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 카바졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 카바졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 카바졸릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 a, b 및 c는 서로 독립적으로 0, 1, 2 또는 3일 수 있다.

[0050] 상기 헤테로 고리 화합물은 하기 화학식 2로 표시될 수 있다(즉, 화학식 1 중, R₄, R₅, R₆, R₇, R₉, R₁₀, R₁₁, R₁₂ 및 R₁₃이 수소임):

[0051] <화학식 2>



[0052]

[0053] 상기 화학식 2 중, R₁, R₂, R₃ 및 R₈은 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀ 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₅₀ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₅₀ 알콕시기, -(Ar₁)_a-(Ar₁₁)로 표시되는 그룹 및 -N[-(Ar₂)_b-(Ar₁₂)][-(Ar₃)_c-(Ar₁₃)]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되며, R₁ 내지 R₃ 중 인접하는 2개 이상은 서로 결합하여 포화 고리 또는 불포화 고리를 형성할 수도 있다.

[0054] Ar₁, Ar₂, Ar₃, Ar₁₁, Ar₁₂, Ar₁₃, a, b 및 c에 대한 설명은 본 명세서의 화학식 1에 대해 상술한 바를 참조한다.

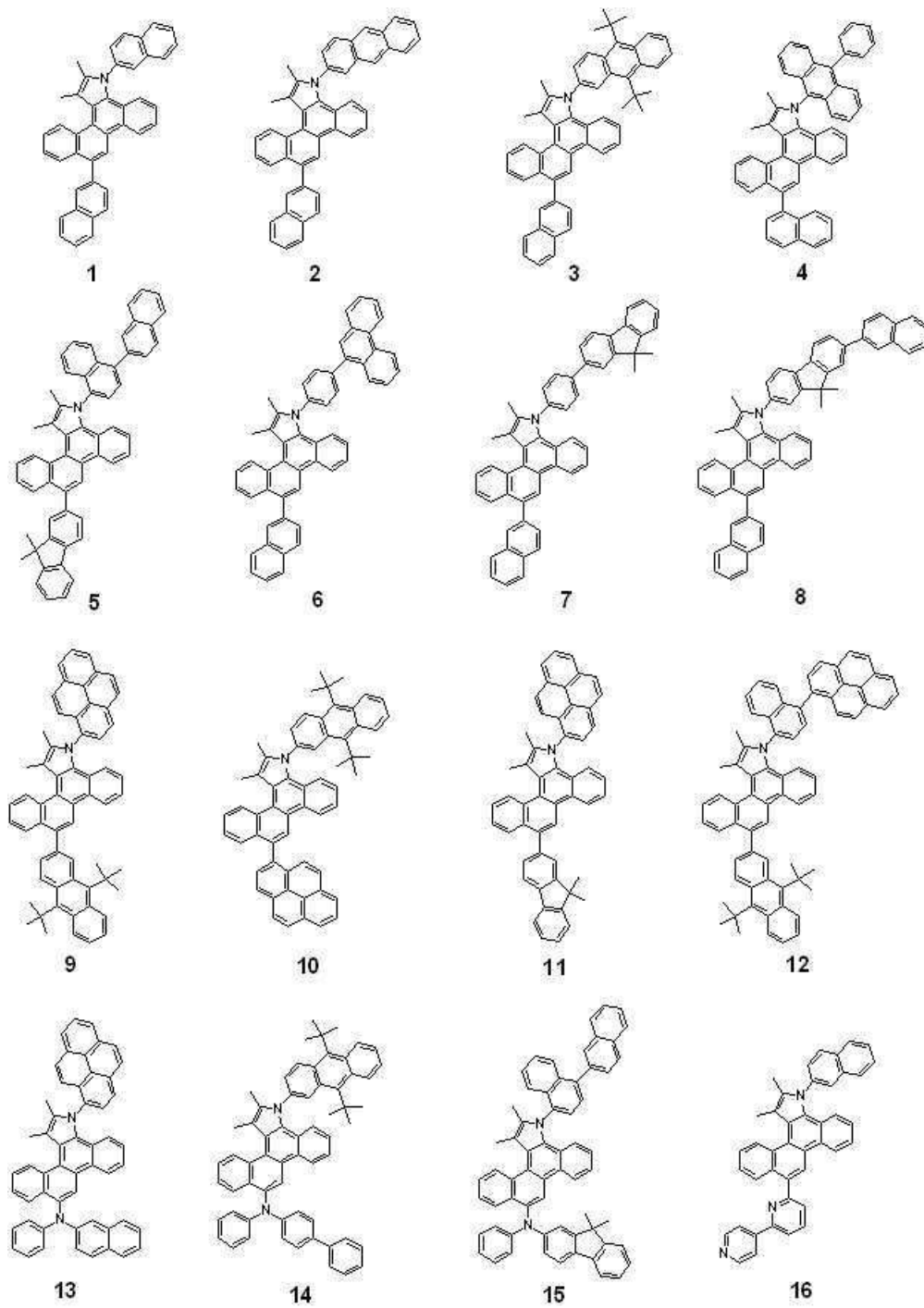
[0055] R₁, R₂, R₃ 및 R₈ 중 어느 하나가 -(Ar₁)_a-(Ar₁₁)로 표시되는 그룹으로 선택되고 동시에 a=0인 경우 치환기는 -(Ar₁₁)로 표시될 수 있으며, R₁, R₂, R₃ 및 R₈ 중 어느 하나가 -N[-(Ar₂)_b-(Ar₁₂)][-(Ar₃)_c-(Ar₁₃)]로 표시되는 그룹으로 선택되고 동시에 b≠0 및 c=0인 경우 치환기는 -N[-(Ar₂)_b-(Ar₁₂)][-(Ar₁₃)]로 표시될 수 있다.

[0056] 예를 들면, 화학식 2의 헤테로 고리 화합물의 R₁ 및 R₈은 서로 독립적으로 -(Ar₁)_a-(Ar₁₁)로 표시되는 그룹 및 -N[-(Ar₂)_b-(Ar₁₂)][-(Ar₃)_c-(Ar₁₃)]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되며, 상기 R₂ 및 R₃는 서로 독립적으로 메틸기, 페닐기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₅-C₂₀ 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C₄-C₂₀ 헤테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 Ar₁₁, Ar₁₂ 및 Ar₁₃은 서로 독립적으로 페닐기, C₁-C₁₀ 알킬 페닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페닐기, C₆-C₁₄ 아릴 페닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 페닐기, 나프틸기, C₁-C₁₀ 알킬 나프틸기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 나프틸기, C₆-C₁₄ 아릴 나프틸기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 나프틸기, 안트릴기, C₁-C₁₀ 알킬 안트릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 안트릴기, C₆-C₁₄ 아릴 안트릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 안트릴기, 페난트릴기, C₁-C₁₀ 알킬 페난트릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페난트릴기, C₆-C₁₄ 아릴 페난트릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 페난트릴기, 플루오레닐기, C₁-C₁₀ 알킬 플루오레닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 플루오레닐기, C₆-C₁₄ 아릴 플루오레닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 플루오레닐기, 피리딜기, C₁-C₁₀ 알킬 피리딜기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 피리딜기,

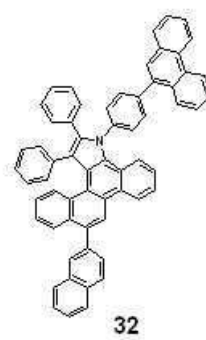
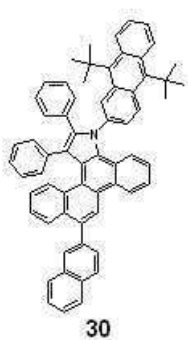
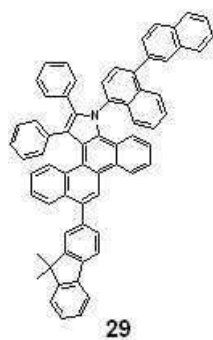
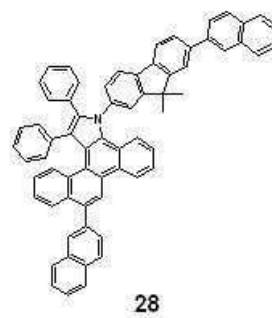
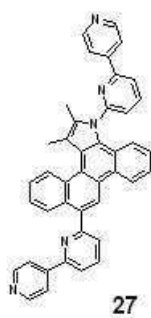
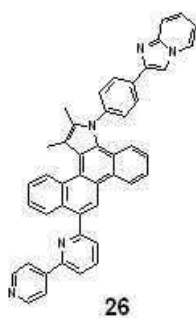
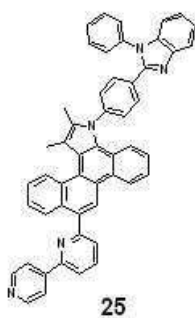
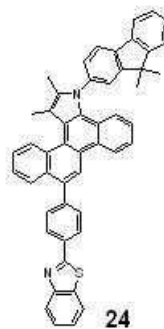
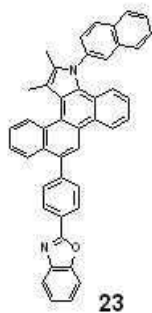
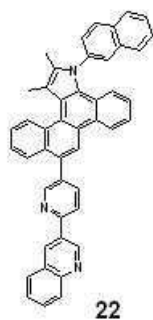
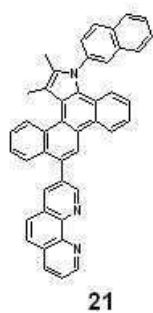
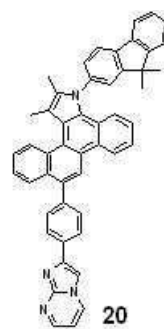
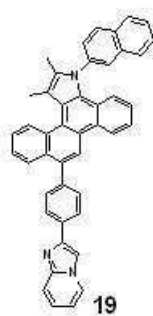
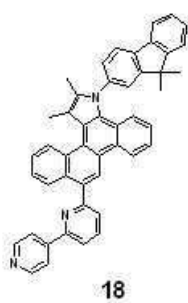
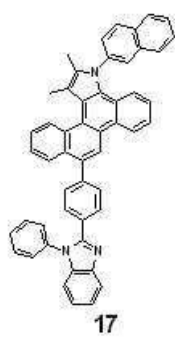
피레닐기, C₁-C₁₀ 알킬 피레닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 피레닐기, C₆-C₁₄ 아릴 피레닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 피레닐기, 페난트롤리닐기, C₁-C₁₀ 알킬 페난트롤리닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 페난트롤리닐기, C₆-C₁₄ 아릴 페난트롤리닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 페난트롤리닐기, 퀴놀리닐기, C₁-C₁₀ 알킬 퀴놀리닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 퀴놀리닐기, C₆-C₁₄ 아릴 퀴놀리닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 퀴놀리닐기, 벤조옥사졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조옥사졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조옥사졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조옥사졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조옥사졸릴기, 벤조티아졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조티아졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조티아졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조티아졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조티아졸릴기, 벤조이미다졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 벤조이미다졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 벤조이미다졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 벤조이미다졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 벤조이미다졸릴기, 이미다졸피리디닐기, C₁-C₁₀ 알킬 이미다졸피리디닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 이미다졸피리디닐기, C₆-C₁₄ 아릴 이미다졸피리디닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 이미다졸피리디닐기, 이미다졸피리미디닐기, C₁-C₁₀ 알킬 이미다졸피리미디닐기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 이미다졸피리미디닐기, C₆-C₁₄ 아릴 이미다졸피리미디닐기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 이미다졸피리미디닐기 및 카바졸릴기, C₁-C₁₀ 알킬 카바졸릴기, 디(C₁-C₁₀ 알킬) 카바졸릴기, C₆-C₁₄ 아릴 카바졸릴기, 디(C₆-C₁₄ 아릴) 카바졸릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 a, b 및 c는 서로 독립적으로 0, 1, 2 또는 3일 수 있다.

[0057]

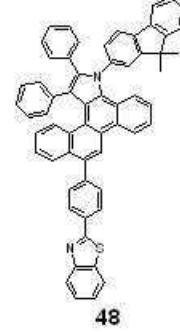
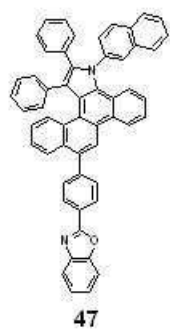
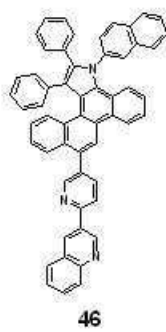
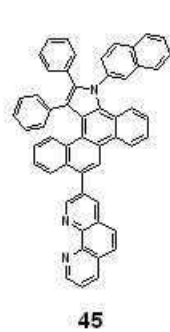
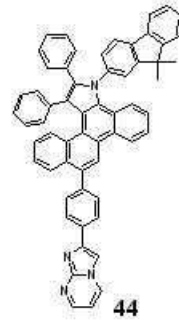
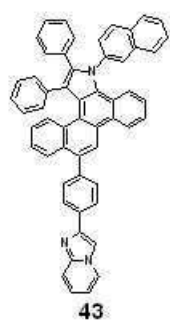
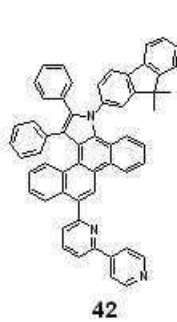
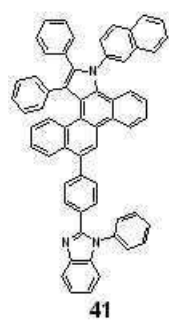
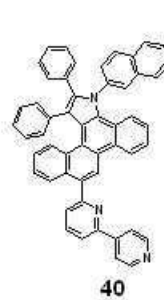
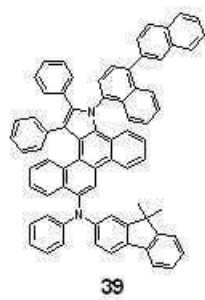
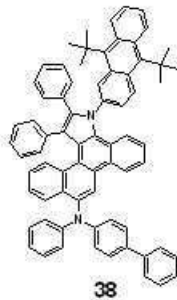
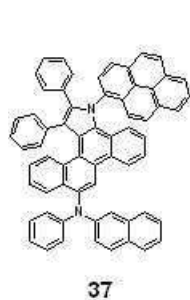
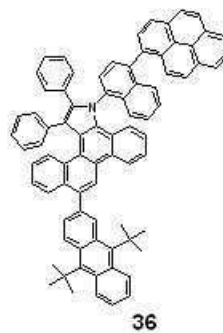
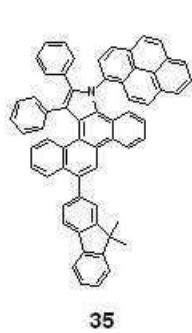
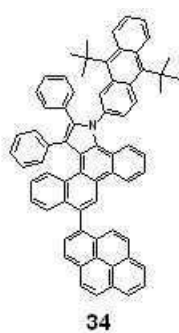
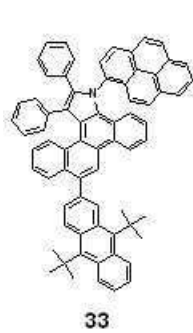
이하 상기 화학식 1로 표현되는 화합물의 상세한 예로서, 하기 화합물 1 내지 60을 들 수 있다. 그러나 상기 화학식 1로 표현되는 화합물이 이들 화합물들로 한정되어서는 안 된다.



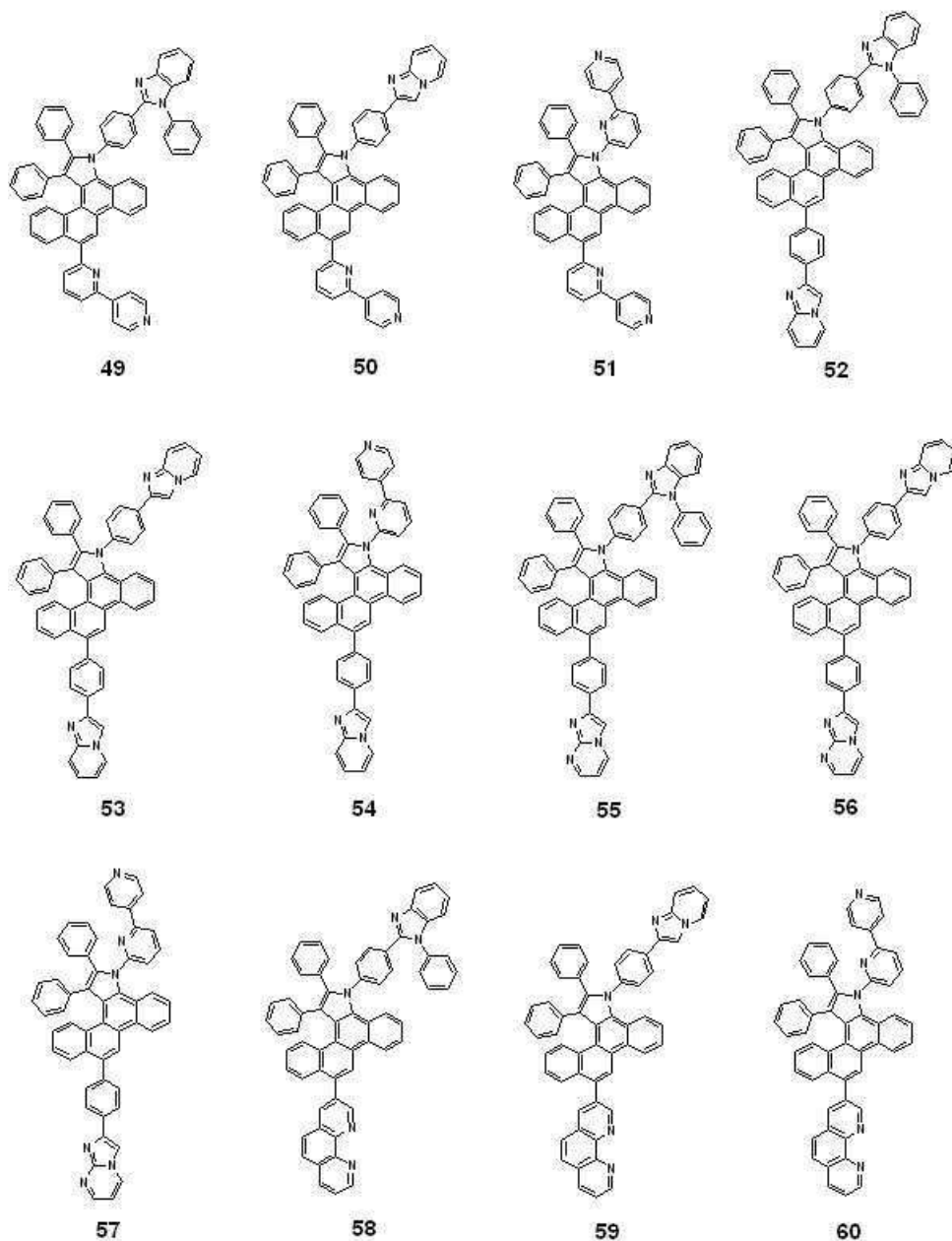
[0058]



[0059]



[0060]



[0061]

[0062]

본 명세서 중 비치환된 C_1 - C_{50} 알킬기는 선형 및 분지형일 수 있으며, 이의 비제한적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실, 헵틸, 옥틸, 노나닐, 도데실 등을 들 수 있다. 상기 C_1 - C_{50} 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 니트로기, 히드록시기, 히드라지닐기, 히드라조닐기, 카르복시기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염, 또는 C_1 - C_{30} 알킬기, C_1 - C_{30} 알콕시기, C_2 - C_{30} 알케닐기, C_2 - C_{30} 알키닐기, C_6 - C_{20} 아릴기, 또는 C_4 - C_{20} 헤테로아릴기, $-N(Q_1)(Q_2)$ 및 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ 로 치환가능하다. 여기서 Q_1 내지 Q_5 는 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 니트로기, 히드록시기, 히드라지닐기, 히드라조닐기, 카르복시기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염, 또는 C_1 - C_{30} 알킬기, C_1 - C_{30} 알콕시기, C_2 - C_{30} 알케닐기, C_2 - C_{30} 알키닐기, C_6 - C_{20} 아릴기, 또는 C_4 - C_{20} 헤테로아릴기일 수 있다.

[0063]

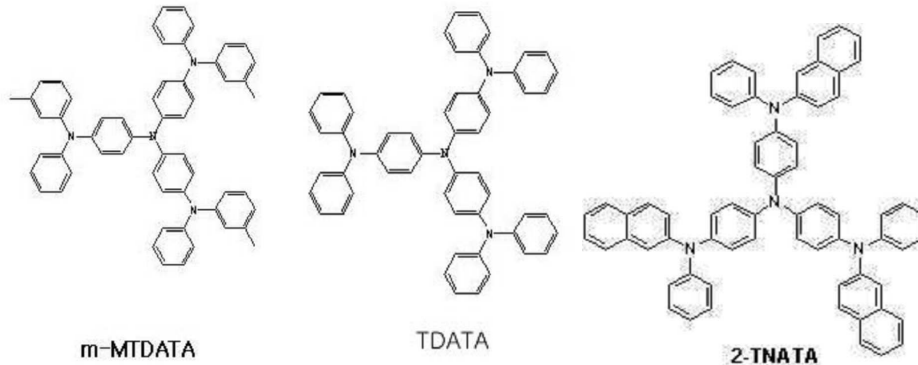
본 명세서 중 비치환된 C_2 - C_{50} 알케닐기는 상기 비치환된 C_2 - C_{50} 알킬기의 중간이나 맨 끝에 하나 이상의 탄소 이중 결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 이의 비제한적인 예로는 에테닐, 프로페닐, 부테닐 등이 있다. 이들 비치환된 C_2 - C_{50} 알케닐기 중 적어도 하나 이상의 수소 원자는 상술한 치환된 C_1 - C_{50} 알킬기의 경우와 동일한 치환기로 치환가능하다.

- [0064] 본 명세서 중 비치환된 C_2-C_{50} 알킬기는 상기 정의된 바와 같은 C_2-C_{50} 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 이의 비제한적인 예로는 아세틸렌, 프로필렌, 페닐아세틸렌, 나프틸아세틸렌, 이소프로필아세틸렌, t-부틸아세틸렌, 디페닐아세틸렌 등이 있다. 이들 알킬기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C_1-C_{50} 알킬기의 경우와 동일한 치환기로 치환가능하다.
- [0065] 본 명세서 중 비치환된 C_3-C_{50} 시클로알킬기는 탄소수 3 내지 50의 고리 형태의 알킬기를 의미하며, 상기 시클로알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 C_1-C_{50} 알킬기의 치환기와 동일한 치환기로 치환가능하다.
- [0066] 본 명세서 중 비치환된 C_1-C_{50} 알콕시기는 $-OA$ (여기서, A는 상술한 바와 같은 비치환된 C_1-C_{50} 알킬기임)의 구조를 갖는 그룹을 의미하며, 이의 비제한적인 예로는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로필옥시, 부톡시, 펜톡시, 등을 들 수 있다. 이들 알콕시기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 C_1-C_{50} 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.
- [0067] 본 명세서 중 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기는 하나 이상의 고리를 포함하는 카보사이클 방향족 시스템을 의미하며, 2개 이상의 고리를 가질 경우, 서로 융합되거나, 단일 결합 등을 통하여 연결될 수 있다. 아릴이라는 용어는 페닐, 나프틸, 안트라세닐과 같은 방향족 시스템을 포함한다. 또한, 상기 아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 C_1-C_{50} 알킬기의 치환기와 동일한 치환기로 치환가능하다. 치환 또는 비치환된 C_6-C_{30} 아릴기의 예로는 페닐기, C_1-C_{10} 알킬페닐기(예를 들면, 에틸페닐기), 할로페닐기(예를 들면, o-, m- 및 p-플루오로페닐기, 디클로로페닐기), 시아노페닐기, 디시아노페닐기, 트리플루오로메톡시페닐기, 바이페닐기, 할로바이페닐기, 시아노바이페닐기, C_1-C_{10} 알킬바이페닐기, C_1-C_{10} 알콕시바이페닐기, o-, m- 및 p-토릴기, o-, m- 및 p-쿠메닐기, 메시틸기, 페녹시페닐기, (α , α -디메틸벤젠)페닐기, (N,N"-디메틸)아미노페닐기, (N,N"-디페닐)아미노페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 할로나프틸기(예를 들면, 플루오로나프틸기), C_1-C_{10} 알킬나프틸기(예를 들면, 메틸나프틸기), C_1-C_{10} 알콕시나프틸기(예를 들면, 메톡시나프틸기), 시아노나프틸기, 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 안트라퀴놀일기, 메틸안트릴기, 페난트릴기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 크리세닐기, 에틸-크리세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 클로로페릴레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네틸기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 피란트레닐기 및 오바레닐기 등을 들 수 있다.
- [0068] 본 명세서 중 비치환된 C_5-C_{50} 아릴옥시기는 $-OA1$ 으로 표시되는 그룹으로서 이 때 A1이 상기 C_5-C_{50} 아릴기인 것을 의미한다. 상기 아릴옥시기의 예로는 페녹시기 등을 들 수 있다. 상기 아릴 옥시기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 C_1-C_{50} 알킬기의 치환기와 동일한 치환기로 치환가능하다.
- [0069] 본 명세서 중 비치환된 C_5-C_{50} 아릴티오기는 $-SA1$ 으로 표시되는 그룹으로서, 이 때 A1이 상기 C_5-C_{50} 아릴기인 것을 의미한다. 상기 아릴티오기의 예로는 페닐티오기, 나프틸티오기, 혹은 플루오레닐티오기 등을 들 수 있다. 상기 아릴티오기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 C_1-C_{50} 알킬기의 치환기와 동일한 치환기로 치환가능하다.
- [0070] 본 명세서 중 비치환된 C_4-C_{60} 헤테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1, 2 또는 3개의 헤테로원자를 포함하고, 2개 이상의 고리를 가질 경우 이들은 서로 융합되거나 단일 결합 등을 통하여 연결될 수 있다. 비치환된 C_4-C_{60} 헤테로아릴기의 예로는, 피라졸일기, 이미다졸일기, 옥사졸일기, 티아졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 들 수 있다. 또한 상기 헤테로아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 C_1-C_{50} 알킬기의 치환기와 동일한 치환기로 치환가능하다.
- [0071] 본 명세서 중 인접하는 2개 이상의 치환기들이 서로 결합하여 형성한 포화 고리 또는 불포화 고리는 하나 이상의 방향족 고리 및/또는 하나 이상의 비방향족 고리가 서로 융합된 2개 이상의 고리를 포함한 치환기를 가리키는 것으로서, 아릴기 또는 헤테로아릴기의 예 중에서 일부 이상이 이에 해당될 수 있다.
- [0072] 본 발명의 다른 측면에 따르는 유기 발광 소자는 제1 전극; 상기 제1전극에 대향된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 개재된 유기막을 구비하고, 상기 유기막이 전술한 바와 같은 화학식 1의 헤테로 고리 화합물을 포함한다.

- [0073] 상기 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자용 발광 재료 및/또는 전자 수송 재료 또는 전자 주입 재료로서의 기능을 가진다. 상기 화학식 1의 화합물은 분자 내 헤테로환의 도입으로 유리전이온도(Tg)나 용점이 높고 결정화를 방지할 수 있다. 특히, 화학식 1의 화합물은 크리센기 및 인돌기가 융합된 구조를 가지고 이러한 화합물을 포함하여 제조된 유기 발광 소자는 보존 시 및 구동 시의 내구성이 높다. 여기에 플루오렌기 등의 치환기를 도입하면 Tg와 Td가 높아져 고온 구동하에서 유기 발광 소자의 특성을 보다 향상시킬 수 있다. 따라서 이러한 화합물을 유기 발광 재료로 사용하는 경우 발광시에 유기층 중, 유기층 사이 내지는, 유기층과 금속 전극간에서 발생하는 줄 열에 대한 내열성 및 고온 환경 하에서 내성이 증가될 수 있다.
- [0074] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로 고리 화합물을 포함한 유기막은 전자 주입층, 전자 수송층 또는 발광층일 수 있으며, 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 가지는 단일막일 수도 있다.
- [0075] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로 고리 화합물을 포함한 유기막은 발광층일 수도 있으며, 상기 유기막이 발광층인 경우에는 상기 헤테로 고리 화합물은 형광 또는 인광 호스트로 사용될 수 있거나 또는 형광 도펀트로 사용될 수도 있다.
- [0076] 본 발명의 일 구현예에 따른 상기 유기 발광 소자의 발광층, 전자 주입층 또는 전자 수송층이 상기 화합물을 포함하는 경우, 상기 발광층은 공지의 안트라센 화합물, 아릴아민 화합물 또는 스티릴 화합물을 포함할 수 있으며, 상기 안트라센 화합물, 아릴아민 화합물 또는 스티릴 화합물은 비치환되거나 또는 상술한 C₁-C₅₀ 알킬기의 치환기와 동일한 치환기로 치환가능하다.
- [0077] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 전자 주입층 또는 전자 수송층이 상기 화합물을 포함하는 경우 적색 발광층, 녹색 발광층, 청색 발광층 또는 백색 발광층이 공지의 인광 화합물을 포함할 수 있다.
- [0078] 여기서, 상기 제1 전극은 애노드이고 상기 제2 전극은 캐소드일 수 있는데, 이와 반대의 경우도 물론 가능하다.
- [0079] 전술한 바와 같은 유기 발광 소자는 필요에 따라, 상기 유기막은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 하나 이상의 층을 더 구비할 수 있고, 필요에 따라서는 상기 유기막의 각 층들을 2층으로 형성하는 것도 가능하다.
- [0080] 예를 들면, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자는 제1 전극/정공 주입층/발광층/제2 전극, 제1 전극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/제2 전극 또는 제1 전극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/전자 주입층/제2 전극의 구조를 가질 수 있다. 또는 상기 유기 발광 소자는 제1 전극/정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 가지는 단일막/발광층/전자 수송층/제2 전극 또는 제1 전극/정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 가지는 단일막/발광층/전자 수송층/전자 주입층/제2 전극의 구조를 가질 수 있다.
- [0081] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자는 전면 발광형, 배면 발광형 등 다양한 구조로 적용 가능하다.
- [0082] 이하, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 제조 방법을 도 1에 도시된 유기 발광 소자를 참조하여 살펴보기로 한다. 도 1의 유기 발광 소자는 기판, 제1 전극(애노드), 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 제2 전극(캐소드)를 구비하고 있다.
- [0083] 먼저 기판 상부에 높은 일함수를 가지는 제1 전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등에 의해 형성하여 제1 전극을 형성한다. 상기 제1 전극은 애노드(anode) 또는 캐소드(cathode)일 수 있다. 여기서 기판은 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용하는데 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판일 수 있다. 제1 전극용 물질로는 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO), Al, Ag, Mg 등을 이용할 수 있으며, 투명 전극 또는 반사 전극으로 형성될 수 있다.
- [0084] 다음으로, 상기 제1 전극 상부에 진공 증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공 주입층(HIL)을 형성할 수 있다.
- [0085] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 일반적으로 증착온도 100 내지 500℃, 진공도 10⁻⁸ 내지 10⁻³ torr, 증착속도 0.01 내지 100 Å/sec의 범위에서 적절히 선택할 수 있다.
- [0086] 스핀코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공 주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 5000rpm의 코팅 속도, 코

팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80 내지 200℃ 온도 범위에서 적절히 선택할 수 있다.

[0087] 상기 정공 주입층 물질로는 공지된 정공 주입 재료를 사용할 수 있다. 예를 들면, 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA [4,4',4"-tris (3-methylphenylphenylamino) triphenylamine], NPB(N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)), TDATA, 2-TNATA, Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonicacid:폴리아닐린/캄페르술포산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트))등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.

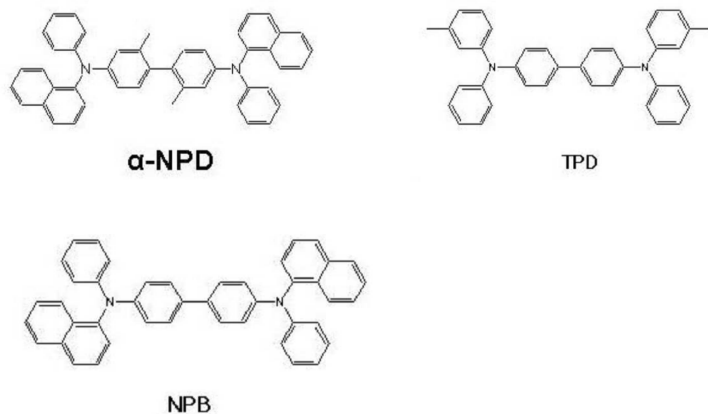


[0088]

[0089] 상기 정공 주입층의 두께는 약 100 내지 10000Å, 예를 들면 100 내지 1000Å일 수 있다. 상기 정공 주입층의 두께가 상기 범위를 만족할 경우, 구동전압 상승 없이, 우수한 정공주입 특성을 얻을 수 있다.

[0090] 다음으로 상기 정공 주입층 상부에 진공 증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공 수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀코팅법에 의하여 정공 수송층을 형성하는 경우, 그 증착조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건 범위 중에서 선택된다.

[0091] 상기 정공 수송층 물질은 공지된 정공 수송층 물질을 이용할 수 있다. 예를 들면, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸 유도체, NPB, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-바이페닐]-4,4'-디아민(TPD), N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐 벤지딘(α -NPD) 등의 방향족 축합환을 가지는 아민 유도체 등을 사용할 수 있다. 이 중, 예를 들면, TCTA의 경우, 정공 수송 역할 외에도, 발광층으로부터 엑시톤이 확산되는 것을 방지하는 역할도 수행할 수 있다.



[0092]

[0093]

[0094] 상기 정공 수송층의 두께는 약 50 내지 1000Å, 예를 들면 100 내지 600Å일 수 있다. 상기 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동전압 상승 없이 우수한 정공수송 특성을 얻을 수 있다.

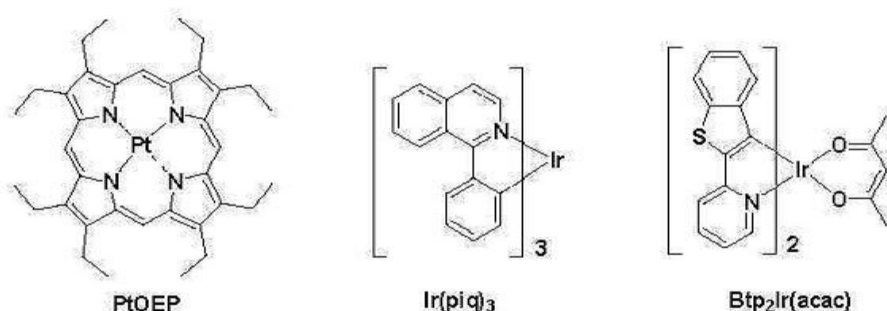
[0095] 다음으로 상기 정공 수송층 상부에 진공 증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하

는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

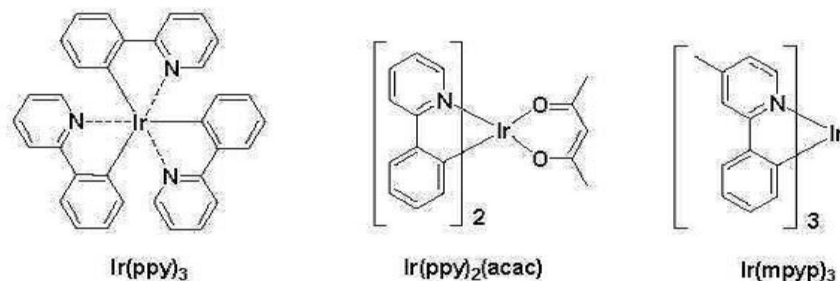
[0096] 상기 발광층은 전술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 헤테로 고리 화합물을 포함할 수 있다. 예를 들어, 화학식 1로 표시되는 헤테로 고리 화합물은 호스트 또는 도펀트로서 사용될 수 있다. 상기 헤테로 고리 화합물 외에, 발광층은 공지된 다양한 발광 물질을 이용하여 형성할 수 있는데, 공지의 호스트 및 도펀트를 이용하여 형성할 수도 있다. 상기 도펀트의 경우, 공지의 형광 도펀트 및 공지의 인광 도펀트를 모두 사용할 수 있다.

[0097] 예를 들어, 호스트로서는 Alq_3 , CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-바이페닐), AND(9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센), 또는 DSA(디스티릴아릴렌) 등을 사용할 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

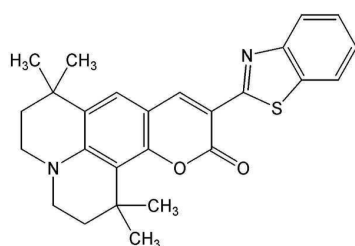
[0098] 한편, 공지된 도펀트의 예로서 PtOEP, $Ir(ppy)_3$, $Btp_2Ir(acac)$, $Ir(ppy)_3$ (ppy = 페닐피리딘), $Ir(ppy)_2(acac)$, $Ir(mppy)_3$, C545T(10-(2-벤조티아졸릴)-2,3,6,7-테트라히드로-1,1,7,7-테트라메틸-1H,5H,11H-(1)벤조피로피라노(6,7-8-i,j)퀴놀리진-11-온), F_2Irpic , $(F_2ppy)_2Ir(tmd)$, $Ir(dfppz)_3$, ter-플루오렌(flourene), 4,4'-비스(4-디페닐아미노스타릴)바이페닐 (DPAVBi) 및 2,5,8,11-테트라-*tert*-부틸 페릴렌 (TBP) 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0099]

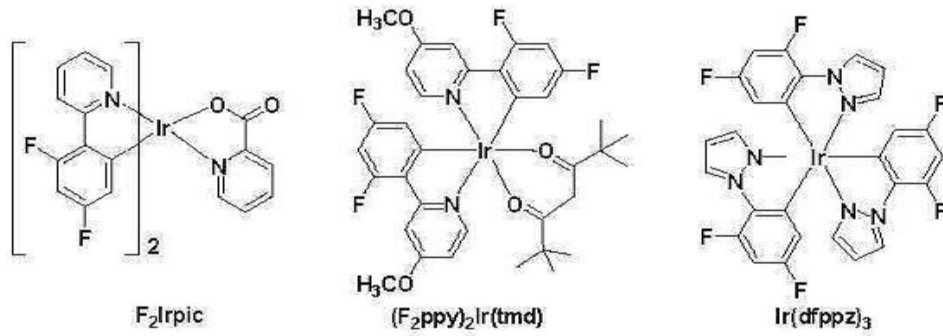


[0100]

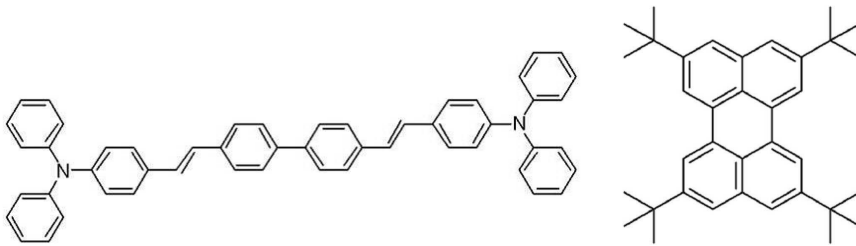


[0101]

[0102] C545T



[0103]



[0104]

[0105] DPAVB

TBP

[0106] 상기 도펀트의 함량은 발광층 형성재료 100 중량부(즉, 호스트와 도펀트의 총중량은 100중량부로 함)를 기준으로 하여 0.1 내지 20 중량부, 예를 들면 0.5 내지 12 중량부일 수 있다. 도펀트의 함량이 상기 범위를 만족하면, 농도 소광 현상이 실질적으로 방지될 수 있다.

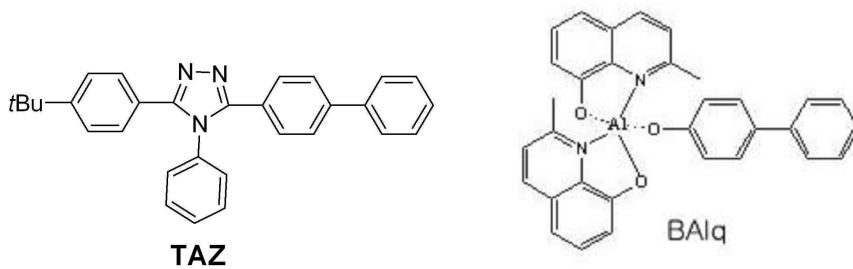
[0107] 상기 발광층의 두께는 약 100 내지 1000Å, 예를 들면 200 내지 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 상기 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동전압 상승 없이 우수한 발광 특성을 얻을 수 있다.

[0108] 발광층이 인광 도펀트를 포함할 경우, 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여 정공 저지층(HBL)을 발광층 상부에 형성할 수 있다(도 1에는 미도시됨). 이 때 사용할 수 있는 정공 저지층 물질은 특별히 제한되지는 않으며, 공지된 정공 저지층 물질 중에서 임의로 선택하여 이용할 수 있다. 예를 들면 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, Balq, BCP 등을 이용할 수 있다.

[0109] 상기 정공 저지층의 두께는 약 50 내지 1000Å, 예를 들면 100 내지 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 50Å 미만인 경우, 정공저지 특성이 저하될 수 있으며, 상기 정공 저지층의 두께가 1000Å을 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.

[0110] 다음으로 전자 수송층(ETL)을 진공 증착법, 또는 스핀코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공 증착법 및 스핀코팅법에 의해 전자 수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

[0111] 상기 전자 수송층 물질은 전술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 헤테로 고리 화합물을 포함할 수 있다. 상기 헤테로 고리 화합물 외에 공지된 전자 수송층 형성 재료를 임의로 선택하여 사용할 수도 있다. 예를 들면, 이의 예로는, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq_3), TAZ, Balq 등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



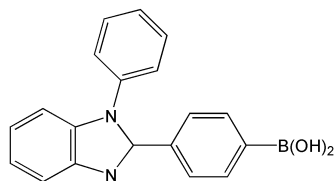
[0112]

- [0113] 상기 전자 수송층의 두께는 약 100 내지 1000Å, 예를 들면 100 내지 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 우수한 전자수송특성을 얻을 수 있다.
- [0114] 또한 전자 수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(EIL)이 적층될 수 있다.
- [0115] 전자 주입층으로서는 전술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 헥테로 고리 화합물을 포함할 수 있다. 상기 헥테로 고리 화합물 외에 LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO 등과 같은 전자 주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 사용할 수도 있다. 상기 전자 주입층의 증착조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.
- [0116] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1 내지 100Å, 예를 들면 5 내지 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 상술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동전압 상승 없이 우수한 전자주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0117] 마지막으로 전자 주입층 상부에 진공 증착법이나 스퍼터링법 등의 방법을 이용하여 제2 전극을 형성할 수 있다. 상기 제2 전극은 캐소드 또는 애노드로 사용될 수 있다. 상기 제2 전극 형성용 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 들 수 있다. 또한, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 사용한 투명 캐소드를 사용할 수도 있다.
- [0118] 본 발명의 일 구현예에 따르는 유기 발광 소자는 다양한 형태의 평판 표시 장치, 예를 들면 수동 매트릭스 유기 발광 표시 장치 및 능동 매트릭스 유기 발광 표시 장치에 구비될 수 있다. 특히, 능동 매트릭스 유기 발광 표시 장치에 구비되는 경우, 기판 측에 구비된 제1 전극은 화소 전극으로서 박막 트랜지스터의 소스 전극 또는 드레인 전극과 전기적으로 연결될 수 있다. 또한, 상기 유기 발광 소자는 양면으로 화면을 표시할 수 있는 평판 표시 장치에 구비될 수 있다.
- [0119] 또한 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 하나 이상의 층은 상기 화학식 1의 화합물을 사용하여 증착 방법으로 형성될 수 있거나, 또는 용액으로 제조된 화학식 1의 화합물을 코팅하는 습식 방법으로도 형성될 수 있다.
- [0120] 이하에서, 화합물 17, 18, 28, 53 및 60의 합성에 및 실시예를 구체적으로 예시하지만, 하기의 실시예로 한정되는 것을 의미하는 것은 아니다.

[0121] **실시예**

[0122] **합성예 : 화합물 17의 합성**

[0123] **중간체 1의 합성**

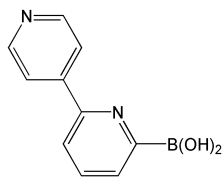


[0124]

[0125] 중간체 1

[0126] 2-(4-브로모페닐)-1-페닐-벤조이미다졸 5 g(14mmol), Bis(pinacolato)diboron 3.56g(14mmol), Pd(dppf)₂ 100mg (0.14mmol), KOAc 4.12g(42mmol), 150mL의 DMSO에 녹이고 180℃에서 24시간 동안 교반하였다. 반응액을 디에틸 에테르 600ml로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 디클로로메탄과 노르말헥산으로 재결정하여 중간체 1을 3.9g(수율 89%) 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 314.1227, found: 314.1495)

[0127] **중간체 2의 합성**

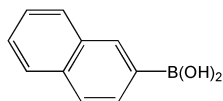


[0128]

[0129] **중간체 2**

[0130] 상기의 중간체 1의 합성과 동일한 방법으로 2-(4-브로모페닐)-1-페닐-벤조이미다졸 대신 [2,4']바이피리디닐을 반응시켜 중간체 2를 85%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 200.0757, found: 200.0692)

[0131] **중간체 3의 합성**

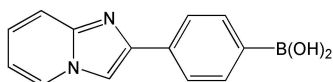


[0132]

[0133] **중간체 3**

[0134] 상기의 중간체 1의 합성과 동일한 방법으로 2-(4-브로모페닐)-1-페닐-벤조이미다졸 대신 2-브로모나프탈렌을 반응시켜 중간체 3을 91%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 172.0696, found: 172.0632)

[0135] **중간체 4의 합성**

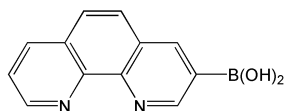


[0136]

[0137] **중간체 4**

[0138] 상기의 중간체 1의 합성과 동일한 방법으로 2-(4-브로모페닐)-1-페닐-벤조이미다졸 대신 2-(4-브로모-페닐)-이미다조-[1,2-]피리딘을 반응시켜 중간체 4를 86%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 162.0601, found: 162.0896)

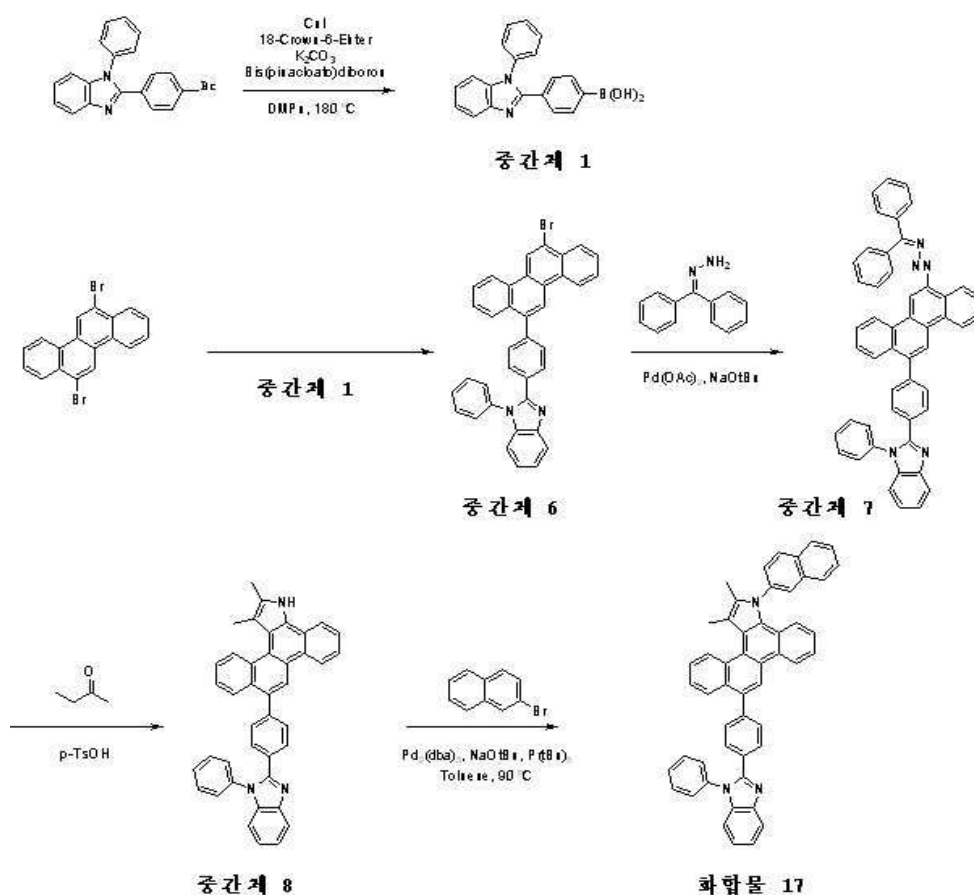
[0139] **중간체 5의 합성**



[0140]

[0141] **중간체 5**

[0142] 상기의 중간체 1의 합성과 동일한 방법으로 2-(4-브로모페닐)-1-페닐-벤조이미다졸 대신 3-브로모-[1,10]페난트릴린을 반응시켜 중간체 4를 88%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 222.0852, found: 222.0957)



[0143]

[0144] **중간체 6의 합성**

[0145]

중간체 1 3g(9.5mmol), 6,12-디브로모-크라이센 3.7 g(9.5mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.3g (0.9mmol) 그리고 K₂CO₃ 3.9g(28.5mmol) 을 100mL의 THF/H₂O(2:1) 혼합용액에 녹이고 80℃에서 5시간 동안 교반하였다. 반응액을 디에틸 에테르 600ml로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 디클로로메탄과 노르말헥산으로 재결정하여 중간체 6을 4.2g(수율 76%) 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 574.1045, found: 574.1821)

[0146]

중간체 7의 합성

[0147]

중간체 6 5.7 g(10 mmol), 벤조페논 하이드라존 2.15 g (11 mmol), t-BuONa 1.44g (15mmol), Pd(OAc)₂ 45mg (0.2mmol) 그리고 2-디시클로헥실포스피노-2',4',6'-트리이소프로필바이페닐 95mg (0.2 mmol)을 톨루엔 30mL에 녹인 후 90℃에서 3시간 교반하였다. 상온으로 식힌 반응물에 증류수를 가하고 디에틸에테르 80 mL로 2번, 디클로로메탄 80mL로 1번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 여과한 후 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 7을 6.5g(수율 93%) 얻었으며 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 703.2736, found: 703.2682)

[0148]

중간체 8의 합성

[0149]

중간체 7 7g(10 mmol), p-톨루엔술포산 수화물(p-toluenesulfonic acid monohydrate) 3.8 g(20 mmol) 및 메틸 에틸케톤 50mL를 가한 후 110℃에서 24시간 교반하였다. 상온으로 식힌 반응물에 증류수를 가하고 디에틸에테르 80mL로 2번, 디클로로메탄 80mL로 2번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 여과한 후 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 8을 3.9g (수율 69%) 얻었으며 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 563.2361, found: 563.2431)

[0150]

화합물 17의 합성

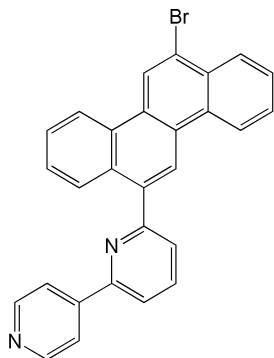
[0151]

질소 하에서, 중간체 8 3.9g(7.0mmol), 2-브로모-나프탈렌 1.7g(8.4mmol), t-BuONa 2.01g(21mmol), Pd₂(dba)₃ 130mg(0.14mmol) 및 P(t-Bu)₃ 28mg(0.14mmol)을 톨루엔 30mL에 녹인 후 90℃에서 3시간 교반하였다. 상기 반응

이 완결된 후, 상온으로 식히고, 이를 증류수와 디에틸에테르 50mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 17을 3.6g(수율 75%) 얻었으며 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 689.2831, found: 689.2653)

[0152] **합성예 : 화합물 18의 합성**

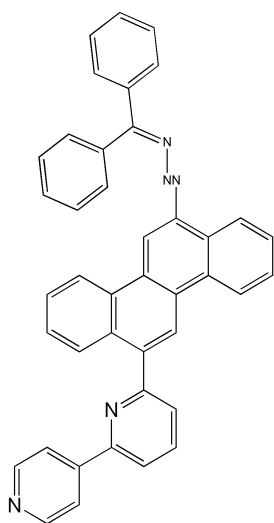
[0153] **중간체 9의 합성**



[0154] **중간체 9**

[0155] 상기의 중간체 6의 합성과 동일한 방법으로 중간체 1 대신 중간체 2를 반응시켜 중간체 9를 수율 79% 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 460.0575, found: 460.0514)

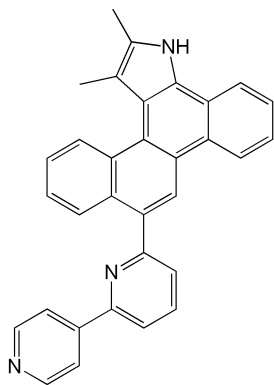
[0156] **중간체 10의 합성**



[0157] **중간체 10**

[0158] 상기의 중간체 7의 합성과 동일한 방법으로 중간체 6 대신 중간체 9를 반응시켜 중간체 10을 85%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 589.2266, found: 589.2147)

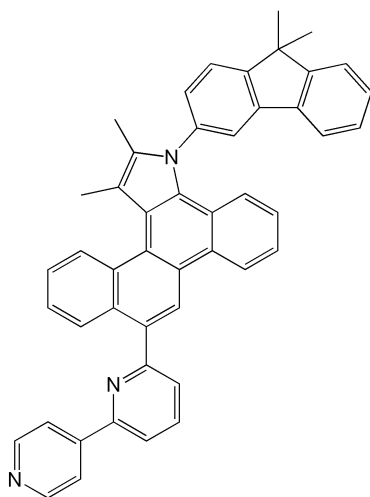
[0159] **중간체 11의 합성**



[0160] **중간체 11**

[0161] 상기의 중간체 8의 합성과 동일한 방법으로 중간체 7 대신 중간체 10을 반응시켜 중간체 11을 81%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 449.1892, found: 449.1217)

[0162] **화합물 18의 합성**

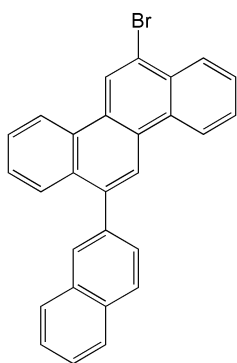


[0163] **화합물 18**

[0164] 상기의 화합물 17의 합성과 동일한 방법으로 중간체 8 대신 중간체 11과 3-브로모-9,9-디메틸-9-플루오렌을 반응시켜 화합물 18을 83%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 641.2831, found: 641.2281)

[0165] **합성예 : 화합물 28의 합성**

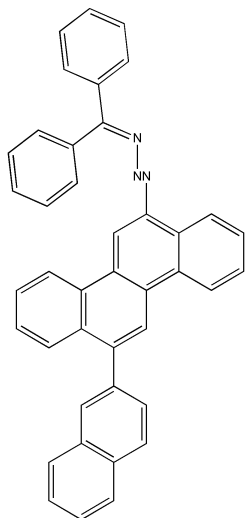
[0166] **중간체 12의 합성**



[0167] **중간체 12**

[0168] 상기의 중간체 6의 합성과 동일한 방법으로 중간체 1 대신 중간체 3을 반응시켜 중간체 12를 수율 75% 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 432.0514, found: 432.0621)

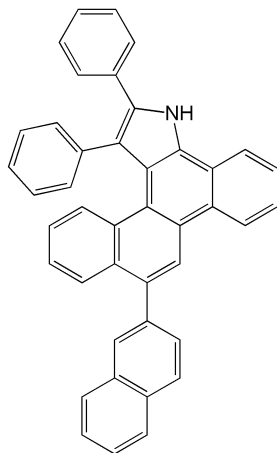
[0169] **중간체 13의 합성**



[0170] **중간체 13**

[0171] 상기의 중간체 7의 합성과 동일한 방법으로 중간체 6 대신 중간체 12를 반응시켜 중간체 13을 77%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 561.2205, found: 561.2628)

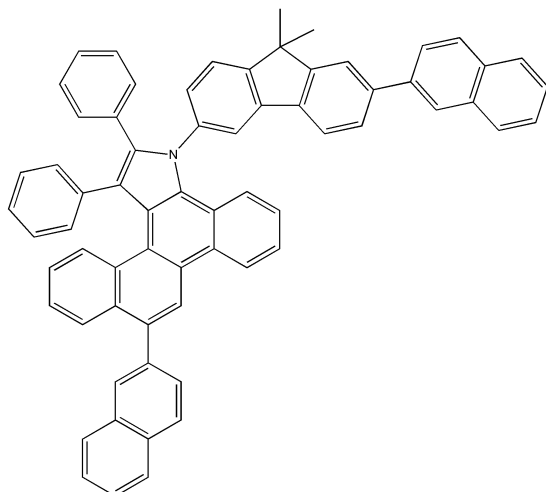
[0172] **중간체 14의 합성**



[0173] **중간체 14**

[0174] 상기의 중간체 8의 합성과 동일한 방법으로 중간체 7 대신 중간체 13을 사용하고 메틸에틸케톤 대신 벤질페닐케톤을 50mL 사용하여 반응시켜 중간체 13을 71%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 545.2143, found: 545.2482)

[0175] 화합물 28의 합성



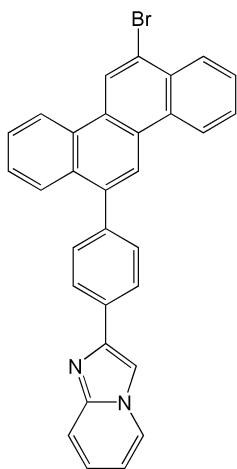
화합물 28

[0176]

[0177] 상기의 화합물 17의 합성과 동일한 방법으로 중간체 8 대신 중간체 14와 6-브로모-9,9-디메틸-2-나프탈렌-2-플루오렌을 반응시켜 화합물 28을 86%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 863.3552, found: 863.3641)

[0178] 합성예 : 화합물 53의 합성

[0179] 중간체 15의 합성

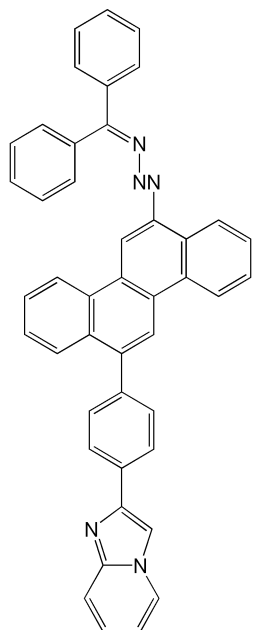


중간체 15

[0180]

[0181] 상기의 중간체 6의 합성과 동일한 방법으로 중간체 1 대신 중간체 4를 반응시켜 중간체 15를 수율 79% 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 498.0732, found: 498.0519)

[0182] 중간체 16의 합성

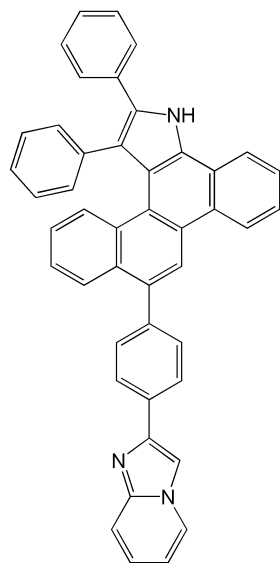


중간체 16

[0183]

[0184] 상기의 중간체 7의 합성과 동일한 방법으로 중간체 6 대신 중간체 15를 반응시켜 중간체 16을 80%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 627.2413, found: 627.2981)

[0185] 중간체 17의 합성

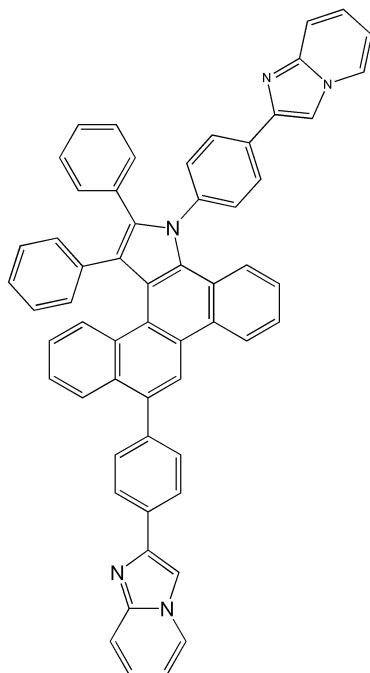


중간체 17

[0186]

[0187] 상기의 중간체 8의 합성과 동일한 방법으로 중간체 7 대신 중간체 14를 사용하고 메틸에틸케톤 대신 벤질페닐케톤을 50mL 사용하여 반응시켜 중간체 17을 75%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 611.2361, found: 611.2981)

[0188] 화합물 53의 합성



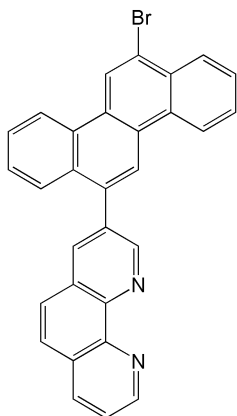
화합물 53

[0189]

[0190] 상기의 화합물 17의 합성과 동일한 방법으로 중간체 8 대신 중간체 17과 2-(4-브로모-페닐)-이미다조[1,2]-피리딘을 반응시켜 화합물 53을 88%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 803.3049, found: 803.3063)

[0191] 합성예 : 화합물 60의 합성

[0192] 중간체 18의 합성

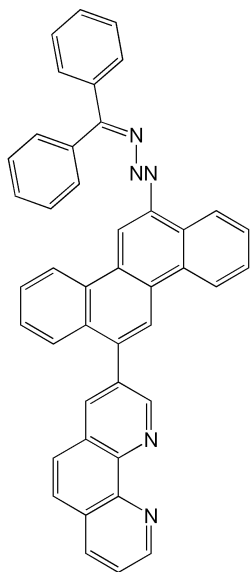


중간체 18

[0193]

[0194] 상기의 중간체 6의 합성과 동일한 방법으로 중간체 1 대신 중간체 5를 반응시켜 중간체 18을 수율 75% 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 484.0575, found: 484.0691)

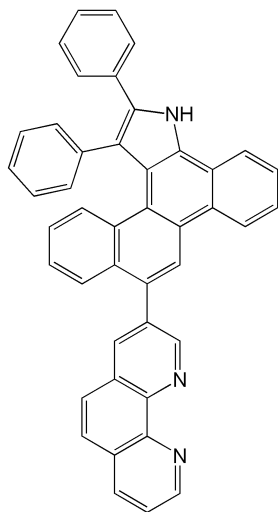
[0195] 중간체 19의 합성



[0196] 중간체 19

[0197] 상기의 중간체 7의 합성과 동일한 방법으로 중간체 6 대신 중간체 18을 반응시켜 중간체 19를 81%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 613.2266, found: 613.2974)

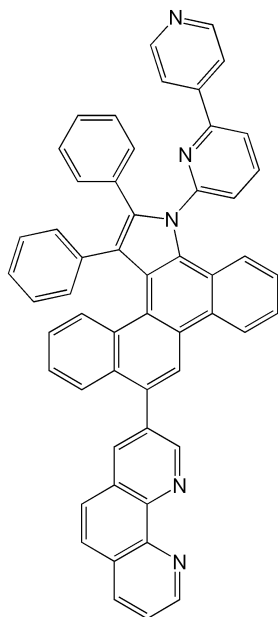
[0198] 중간체 20의 합성



[0199] 중간체 20

[0200] 상기의 중간체 8의 합성과 동일한 방법으로 중간체 7 대신 중간체 19를 사용하고 메틸에틸케톤 대신 벤질페닐케톤을 50mL 사용하여 반응시켜 중간체 20을 77%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 597.2205, found: 597.2921)

[0201] **화합물 60의 합성**



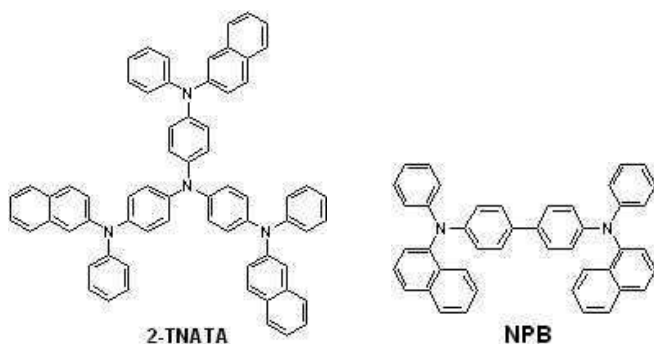
[0202] 화합물 60

[0203] 상기의 화합물 17의 합성과 동일한 방법으로 중간체 8 대신 중간체 20과 6-브로모-[2,4]-바이피리딜을 반응시켜 화합물 60을 81%의 수율로 합성하였고 생성된 화합물은 HR-MS를 통해 확인하였다. (calc: 751.2736, found: 751.2951)

[0204] **실시예 1**

[0205] 애노드는 코닝(corning) $15\Omega/\text{cm}^2$ (1200Å) ITO 유리 기판을 $50\text{mm} \times 50\text{mm} \times 0.7\text{mm}$ 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공증착장치에 이 유리기판을 설치하였다.

[0206] 상기 기판 상부에 우선 정공 주입층으로서 공지의 물질인 2-TNATA를 진공 증착하여 600Å 두께로 형성한 후, 이어서 정공 수송성 화합물로서 공지의 물질인 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]바이페닐(이하, NPB)을 300Å의 두께로 진공 증착하여 정공 수송층을 형성하였다.



[0207]

[0208] 상기 정공 수송층 상부에 공지의 녹색 형광 호스트인 Alq_3 와 공지의 청색 형광 도펀트인 C545T를 중량비 98:2로 동시 증착하여 300Å의 두께로 발광층을 형성하였다.

[0209] 이어서 상기 발광층 상부에 전자수송층으로 화합물 17을 300Å의 두께로 증착한 후, 이 전자수송층 상부에 할로젠화 알칼리금속인 LiF를 전자주입층으로 10Å의 두께로 증착하고, Al를 3000Å(음극 전극)의 두께로 진공 증착하여 LiF/Al 전극을 형성함으로써 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0210] 이 소자는 전류밀도 $50\text{mA}/\text{cm}^2$ 에서 구동전압 5.93V, 발광 휘도 $7,950\text{cd}/\text{m}^2$ 의 고휘도를 나타냈으며, 색좌표는 (0.310, 0.643)이고 발광 효율은 $15.9\text{cd}/\text{A}$ 이었다.

[0211] **실시예 2**

[0212] 전자수송층 형성시 상기 화합물 17 대신 화합물 18을 이용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 하여 유기 발광 소자를 제작했다.

[0213] **실시예 3**

[0214] 전자수송층 형성시 상기 화합물 17 대신 화합물 28를 이용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 하여 유기 발광 소자를 제작했다.

[0215] **실시예 4**

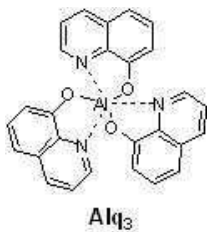
[0216] 전자수송층 형성시 상기 화합물 17 대신 화합물 53을 이용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 하여 유기 발광 소자를 제작했다.

[0217] **실시예 5**

[0218] 발광층 형성시 상기 Alq₃ 대신 화합물 60을 이용한 것을 제외하고는, 실시예 2와 동일하게 하여 유기 발광 소자를 제작했다.

[0219] **비교예 1**

[0220] 전자수송층 형성시 상기 화합물 17 대신 공지의 물질인 Alq₃을 이용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 하여 유기 발광 소자를 제작했다.



[0221]

[0222] 화학식 1의 구조를 가지는 헤테로 고리 화합물들을 전자수송층 또는 발광층으로 유기 발광 소자에 사용한 결과, 모두가 공지의 물질인 Alq₃와 비교해서 구동전압이 1V 이상 낮아졌으며 효율이 대폭 향상된 우수한 I-V-L 특성을 나타내었고 특히 수명개선 효과가 탁월하여 실시예 1 내지 4의 경우 비교예 1 대비 수명이 100% 이상 향상되는 결과를 나타내었다. 대표 수명 결과를 요약하여 아래의 표 1에 나타내었다.

표 1

[0223]

	전자수송재료 또는 발광재료	구동전압(V)	전류밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	효율 (cd/A)	색좌표
실시예 1	화합물 17	5.93	50	7,950	15.9	(0.310, 0.643)
실시예 2	화합물 18	5.47	50	8,540	17.08	(0.310, 0.645)
실시예 3	화합물 28	5.75	50	7,645	15.29	(0.311, 0.643)
실시예 4	화합물 53	5.35	50	7,685	15.37	(0.309, 0.643)
실시예 5	화합물 60	5.83	50	7,423	14.85	(0.311, 0.644)
비교예 1	Alq ₃	7.11	50	6,802	13.6	(0.310, 0.643)

[0224] 본 발명에 대해 상기 합성에 및 실시예를 참고하여 설명하였으나, 이는 예시적인 것에 불과하며, 본 발명에 속하는 기술 분야의 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서 본 발명의 진정한 기술적 보호범위는 첨부된 특허 청구 범위의 기술적 사상에 의해 정해져야 할 것이다.

도면

도면1

제2전극
전자주입층
전자수송층
발광층
정공수송층
정공주입층
제1전극

专利名称(译)	杂环化合物和含有它们的有机发光器件		
公开(公告)号	KR1020110112120A	公开(公告)日	2011-10-12
申请号	KR1020100031553	申请日	2010-04-06
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星移动显示器有限公司. LTD.		
当前申请(专利权)人(译)	三星移动显示器有限公司. LTD.		
[标]发明人	LIM JIN O 임진오 HWANG SEOK HWAN 황석환 KIM YOUNG KOOK 김영국 KWAK YOON HYUN 박윤현 JUNG HYE JIN 정혜진 LEE JONG HYUK 이종혁		
发明人	임진오 황석환 김영국 박윤현 정혜진 이종혁		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0072 C07D209/58 C07D401/14 C07D403/10 C07D471/04 C07D487/04 H01L51/5048 H01L51/5072 H01L51/5092 H01L51/5012		
其他公开文献	KR101758328B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

用途：提供杂环化合物，以确保优异的发光性能和电荷传输能力，并获得高效，低电压，高亮度和长寿命的有机发光器件。组成：杂环化合物以化学为代表在化学式1中，R1-R13独立地选自氢，氘，卤素，氰基，氨基，硝基，羟基，羧基，取代或未取代的C1-C50烷基，取代的或未取代的C2-C50链烯基，取代或未取代的C2-C50炔基，取代或未取代的C3-C50环烷基，取代或未取代的C1-C50烷氧基，- (Ar1) a- (Ar11) 基团和-N- (Ar2) b- (Ar12) - (Ar3) c- (Ar13) group.COPYRIGHT KIPO 2012

제2전극
전자주입층
전자수송층
발광층
정공수송층
정공주입층
제1전극