



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2009-0073852
(43) 공개일자 2009년07월03일

(51) Int. Cl.

C09K 11/06 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2007-0141920

(22) 출원일자 2007년12월31일

심사청구일자 2007년12월31일

(71) 출원인

제일모직주식회사

경상북도 구미시 공단동 290

(72) 발명자

김형선

경기 수원시 권선구 탑동 845-2번지 301호

이호재

경기 용인시 기흥구 동백동 백현마을 동일하이빌
2101동 1904호

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

팬코리아특허법인

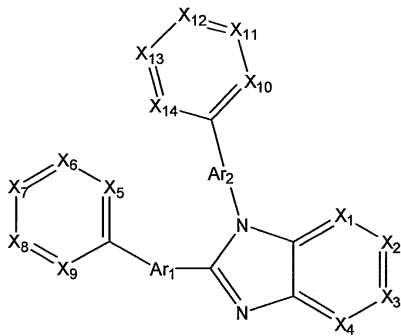
전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 저분자 유기화합물, 및 이를 포함하는 유기광전소자

(57) 요약

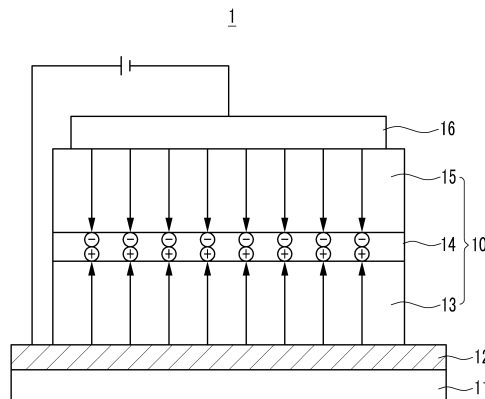
본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 유기화합물을 제공한다.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서 X₁ 내지 X₁₄, Ar₁, 및 Ar₂에 관한 정의는 발명의 상세한 설명에 기재된 바와 같다. 상기 유기 화합물은 유기 용매에 잘 용해되며, 적색 파장에서 청색 파장까지의 형광, 및 인광을 발생시킬 수 있어, 유기광 전소자의 발광층의 호스트 재료로 응용될 수 있다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

유은선

경기 안양시 동안구 비산3동 1039-1 지송빌라 202호

채미영

경기 용인시 수지구 동천동 동천마을 현대2차홈타운 203동 1803호

박영성

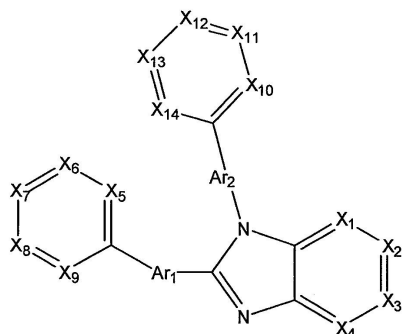
경기 의왕시 고천동 제일모직

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 유기화합물.

[화학식 1]



(상기 화학식 1에서,

상기 X₁ 내지 X₁₄는 각각 독립적으로 CR', 및 N로 이루어진 군에서 선택되고,

상기 Ar₁ 내지 Ar₂는 각각 독립적으로, 단일결합, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

상기 R'는 수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 헤테로 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 실릴 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 아실기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알콕시 카르보닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 아실 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 아실 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알콕시카르보닐 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 20의 아닐옥시카르보닐 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 술포아미노(sulfamoyl) 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 술포닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 헤테로시클로알킬 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 우레이드기(ureide), 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 인산 아마이드기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 실릴기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

상기 치환된이란 수소 원자가 할로젠원자, 시아노기, 히드록시기, 아미노기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 및 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나의 치환기로 치환된 것이다)

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 Ar₁ 내지 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 톨릴기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 스틸벤기, 치환 또는 비치환된 플루오렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 테페닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 디페닐안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 디나프틸안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 펜타세닐기, 치환 또는 비치환된 브로모페닐기, 치환 또는 비치환된 히드록시페닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀린기, 치환 또는 비치환된 퀴놀린기, 치환 또는 비치환된 피리미딜기, 치환 또는 비치환된 아조벤제닐기, 및 치환 또는 비치환된 페로세닐기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

상기 치환된이란 수소 원자가 할로젠원자, 시아노기, 히드록시기, 아미노기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 및 탄

소수 2 내지 30의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나의 치환기로 치환된 것인 유기광전소자용 유기화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

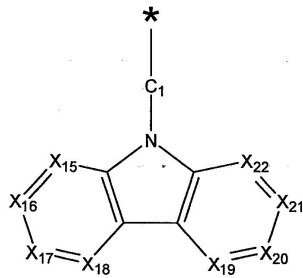
상기 14개의 R'들 중 적어도 어느 하나는 치환 또는 비치환된 플루오렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아민기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 18 내지 30의 바이아릴페닐기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 것인 유기광전소자용 유기화합물.

청구항 4

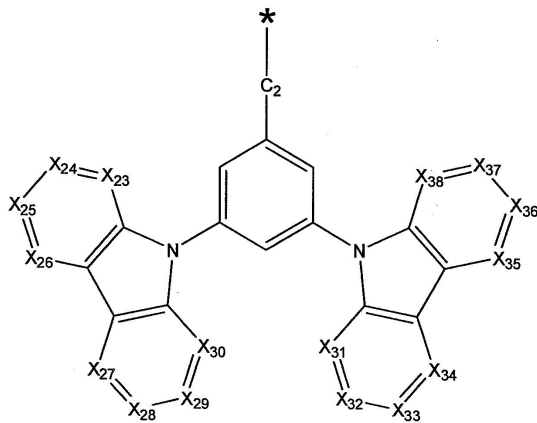
제1항에 있어서,

상기 14개의 R'들 중 적어도 어느 하나는 하기 화학식 2 내지 8로 표시되는 치환기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 것인 유기광전소자용 유기화합물.

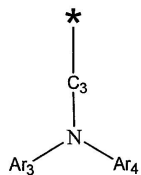
[화학식 2]



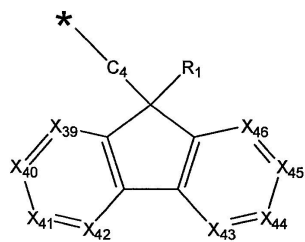
[화학식 3]



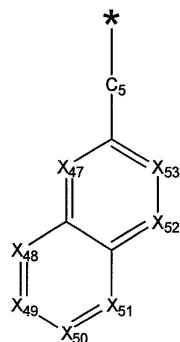
[화학식 4]



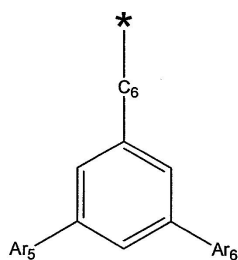
[화학식 5]



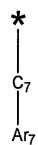
[화학식 6]



[화학식 7]



[화학식 8]



(상기 화학식 2 내지 8에서,

상기 X₁₅ 내지 X₅₃은 각각 독립적으로 CRⁿ, 및 N로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

상기 Rⁿ 및 R₁은 수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 헤테로 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 실릴 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 아실기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알콕시 카르보닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 아실 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 아실 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알콕시카르보닐 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 20의 아닐옥시카르보닐 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 술폰모일 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 술폰닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴 티올기, 치환 또는

는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 헤테로시클로알킬 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 인산 아마이드기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 실릴기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

상기 Ar_3 내지 Ar_7 은 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

상기 C_1 내지 C_7 는 단일결합, 탄소수 1 내지 20의 알킬렌기, 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기, 및 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

상기 치환된이란 수소 원자가 할로겐원자, 시아노기, 히드록시기, 아미노기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 및 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나의 치환기로 치환된 것이다)

청구항 5

제4항에 있어서,

상기 Ar_3 내지 Ar_7 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 톨릴기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 스틸벤기, 치환 또는 비치환된 플루오렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 테페닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 디페닐안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 디나프틸안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 펜타세닐기, 치환 또는 비치환된 브로모페닐기, 치환 또는 비치환된 히드록시페닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀린기, 치환 또는 비치환된 퀴놀린기, 치환 또는 비치환된 피리미딜기, 치환 또는 비치환된 아조벤제닐기, 및 치환 또는 비치환된 페로세닐기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

상기 치환된이란 수소 원자가 할로겐원자, 시아노기, 히드록시기, 아미노기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 및 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나의 치환기로 치환된 것인 유기광전소자용 유기화합물.

청구항 6

한 쌍의 전극 사이에 위치하는 유기막을 포함하며,

상기 유기막은 상기 제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 따른 유기화합물을 포함하는 유기광전소자.

청구항 7

제6항에 있어서,

상기 유기막은 습식공정인 스핀코팅에 의해 제조된 것인 유기광전소자.

청구항 8

제6항에 있어서,

상기 유기막은 발광층인 것인 유기광전소자.

청구항 9

제6항에 있어서,

상기 유기막은 정공주입층, 정공수송층, 정공차단층, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 것인 유기광전소자.

청구항 10

제6항에 있어서,

상기 유기막은 전자주입층, 전자수송층, 전자차단층, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 것인 유기광전소자.

명세서

발명의 상세한 설명

기술 분야

- <1> 본 발명은 유기광전소자용 유기화합물, 및 이를 포함하는 유기광전소자에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 유기 용매에 잘 용해되며, 적색 파장에서 청색 파장까지의 형광, 및 인광을 발생시킬 수 있어, 유기광전소자의 발광층의 호스트 재료로 응용될 수 있는 유기광전소자용 유기화합물, 및 이를 포함하는 유기광전소자에 관한 것이다.

배경 기술

- <2> 유기광전소자(organic photoelectric device)는 차세대 디스플레이 디바이스로 주목 받고 있다. 상기 유기광전소자는 낮은 전압에서 구동이 가능하고 박형화, 광시야각, 빠른 응답속도 등 TFT-LCD 에서 문제로 지적되고 있는 결점을 해소할 수 있다. 또한, 다른 디스플레이 소자에 비해 중형 이하에서는 TFT-LCD와 동등하거나 그 이상의 화질을 가질 수 있고, 제조 공정 또한 단순하여 향후 가격 경쟁에서 유리할 것으로 평가되고 있다.
- <3> 유기광전소자는 투명 유리 기판 위에 애노드 전극으로서 ITO 투명 전극 패턴이 형성되어 있는 형태를 가진 하판과 기판 위에 캐소드 전극으로서 금속 전극이 형성되어 있는 상판 사이의 공간에 유기 발광성 소재가 형성되어, 상기 투명 전극과 상기 금속 전극 사이에 소정의 전압이 인가될 때 유기 발광성 소재에 전류가 흐르면서 빛을 발광하는 성질을 이용하는 디스플레이 장치이다.
- <4> 이와 같은 유기광전소자에 사용되는 유기 발광성 소재는 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사에서는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기발광소재를 처음으로 개발하였고(Applied Physics Letters. 51, 913, 1987), 유기광전소자에 대해서는 1987년에 C. W. Tang 등이 최초로 실용적인 성능을 가진 소자를 보고하였다(Applied Physics Letters, 51(12), 913-915, 1987).
- <5> 상기 문헌은 유기층으로서 디아민 유도체의 박막(정공수송층)과 트리스(8-하이드록시-퀴놀레이트)알루미늄(tris(8-hydroxy-quinolate)aluminum, Alq₃)의 박막을 적층한 구조를 기재하고 있다. 상기 Alq₃의 박막은 전자수송성 발광층으로 기능한다.
- <6> 상기 유기광전소자는 자체 발광형 표시 소자로서 저전압 구동이 가능하고, 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점 이외에 백라이트가 불필요하며 경량 및 박형이 가능하다는 장점을 가지고 있다.
- <7> 이러한 유기광전소자는 일반적으로 투명 전극으로 이루어진 애노드(anode) 전극, 발광영역을 포함하는 유기박막층, 및 금속 전극으로 이루어진 캐소드(cathode) 전극의 순으로 유리기판 위에 형성되어 있는 구조를 가지고 있다.
- <8> 이때, 상기 유기박막층은 발광층, 정공주입층, 정공수송층, 전자수송층 또는 전자주입층을 포함할 수 있으며, 발광층의 발광특성상 전자차단층 또는 정공차단층 등을 추가로 포함할 수 있다.
- <9> 이러한 구조의 유기광전소자에 전기장이 가해지면 애노드 전극과 캐소드 전극으로부터 각각 정공과 전자가 주입되고, 주입된 정공과 전자는 각각의 정공수송층과 전자수송층을 거쳐 발광층에서 재조합(recombination)되어 발광여기자(excitons)를 형성한다. 형성된 발광여기자는 바닥상태(ground states)로 전이하면서 빛을 방출하는데, 이때 발광 상태의 효율과 안정성을 증가시키기 위해 발광 색소(도펀트)를 발광층(호스트)에 도핑하기도 한다.
- <10> 상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기광전소자에 있어서, 상기 발광재료는 그 발광 메커니즘에 따라 일중항 상태의 엑시톤을 이용하는 형광재료와 삼중항 상태를 이용하는 인광재료로 나눌 수 있으며, 형광 발광재료 뿐만 아니라 인광 발광재료도 유기광전소자의 발광재료로 사용될 수 있다(D. F.O'Brien 등, Applied Physics Letters, 74(3), 442-444, 1999; M. A. Baldo 등, Applied Physics letters, 75(1), 4-6, 1999).
- <11> 이러한 인광 발광은 바닥상태에서 여기상태로 전자가 전이한 후, 계간 전이(intersystem crossing)를 통해 단일항 여기자가 삼중항 여기자로 비발광 전이된 다음, 삼중항 여기자가 바닥상태로 전이하면서 발광하는 메커니즘으로 이루어진다.
- <12> 이때, 삼중항 여기자의 전이시 직접 바닥상태로 전이할 수 없어(spin forbidden) 전자 스핀의 뒤바뀜(flipping

g)이 진행된 이후에 바닥상태로 전이되는 과정을 거치기 때문에 형광보다 수명(발광시간: lifetime)이 길어지는 특성을 갖는다.

- <13> 즉, 형광 발광의 발광 지속기간(emission duration)은 수 나노초(several nano seconds)에 불과하지만, 인광 발광의 경우는 상대적으로 긴 시간인 수 마이크로초(several micro seconds)에 해당한다.
- <14> 또한, 양자역학적으로 살펴보면, 유기광전소자에서 애노드 전극에서 주입된 정공과 캐소드 전극에서 주입된 전자가 재결합하여 발광여기자를 형성할 경우, 단일항과 삼중항의 생성 비율은 1:3으로 OLED 소자 내에서 삼중항 발광여기자가 단일항 발광여기자보다 3배 가량 더 생성된다.
- <15> 따라서 형광의 경우 일중항 여기상태의 확률이 25%(삼중항 여기상태 75%)로 발광 효율의 한계가 있는 반면에 인광을 사용하면 삼중항 여기상태 75%와 일중항 여기상태 25%까지 이용할 수 있으므로 이론적으로는 내부양자효율 100%까지 가능하다. 따라서, 인광 발광물질을 사용하는 경우 형광 발광물질에 비해 3배 정도 높은 발광효율을 달성할 수 있다는 장점이 있다.
- <16> 상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기광전소자에 있어서, 발광 상태의 효율과 안정성을 증가시키기 위해 발광 색소(도펀트)를 발광층(호스트)에 첨가하기도 한다.
- <17> 이러한 구조에 있어서는 발광층에 어떤 호스트 재료를 사용하느냐에 따라 발광소자의 효율과 성능이 달라지는데, 그간의 발광층(호스트) 연구를 통하여 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 테트라센, 피렌, 벤조피렌, 크라이센, 피센, 카바졸, 플루오렌, 바이페닐, 터페닐, 트리페닐렌 옥사이드, 디할로바이페닐, 트랜스-스틸벤, 및 1,4-디페닐부타디엔 등이 포함된 물질이 유기 호스트 물질의 예로서 제시되어 왔다.
- <18> 저분자 호스트 재료로는 4,4-N,N-디카바졸바이페닐(CBP)이 주로 사용되는데, 이 화합물은 유리전이온도가 110℃ 이하이며, 열분해온도가 400℃ 이하로 열안정성 낮고 대칭성이 지나치게 좋기 때문에, 결정화하기가 쉬우며, 소자의 내열 시험 결과, 단락이나 화소 결함이 생긴다는 등의 문제가 있다.
- <19> 또한, CBP를 포함한 대부분의 저분자 호스트 재료들은 진공 증착 방법에 의해 소자를 제작하기 때문에 습식 공정에 비해 상대적으로 제조원가가 높다. 그리고 이러한 대부분의 저분자 호스트들은 유기 용매에 대한 용해도가 낮기 때문에 습식 공정으로 균일하면서도 막특성이 우수한 막을 형성하기가 어려워 소자의 성능 및 수명이 떨어진다는 단점이 있다. 또한, 상기 저분자 호스트 재료들은 정공수송성이 전자수송성 보다 좋은 재료들로서, 주입된 정공의 이동이 주입된 전자의 이동보다 빠르기 때문에 발광층에서 엑시톤이 효과적으로 형성되지 못함에 따라 소자의 발광효율이 감소하는 현상이 나타난다.
- <20> 따라서, 고효율, 장수명의 인광 유기전기발광소자를 구현하기 위해서는, 전기적 및 열적 안정성이 높고 정공과 전자를 모두 잘 전달할 수 있는 인광용 호스트 재료의 개발이 필요한 실정이다.

발명의 내용

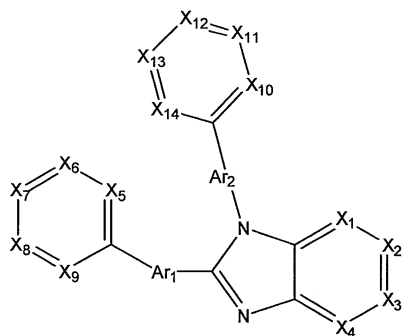
해결 하고자하는 과제

- <21> 본 발명의 목적은 저분량을 가지면서도 유기 용매에 잘 용해되고 적색에서 청색 파장까지의 형광 및 인광을 발생시킬 수 있어, 유기광전소자의 발광층의 호스트 재료로 응용될 수 있는 유기화합물을 제공하는 것이다.
- <22> 본 발명의 또 다른 목적은 상기 유기화합물을 포함하는 유기광전소자를 제공하는 것이다.
- <23> 본 발명이 이루고자 하는 기술적 과제들은 이상에서 언급한 기술적 과제로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 기술적 과제들은 아래의 기재로부터 평균적 기술자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.

과제 해결수단

- <24> 본 발명의 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 유기화합물을 제공한다.

<25> [화학식 1]



<26>

<27> (상기 화학식 1에서,

<28> 상기 X₁ 내지 X₁₄는 각각 독립적으로 CR', 및 N로 이루어진 군에서 선택되고,

<29> 상기 Ar₁ 내지 Ar₂는 각각 독립적으로, 단일결합, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

<30> 상기 R'는 수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴 옥시기, 치환

<31> 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 헤테로 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 실릴 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 아실기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알콕시 카르보닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 아실 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 아실 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알콕시카르보닐 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 20의 아닐옥시 카르보닐 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 술폰아미노(sulfamoyl) 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 술폰기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 헤테로시클로알킬 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 우레이드기(ureide), 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 인산 아마이드기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 실릴기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이다)

<32> 본 발명의 다른 일 구현예에 따르면, 한 쌍의 전극 사이에 위치하는 유기막을 포함하며, 상기 유기막은 상기 유기화합물을 포함하는 유기광전소자를 제공한다.

<33> 기타 본 발명의 구현예들의 구체적인 사항은 이하의 상세한 설명에 포함되어 있다.

효과

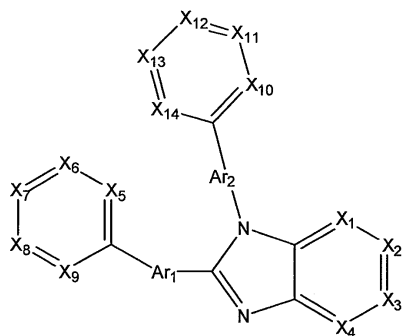
<34> 본 발명의 유기광전소자용 유기화합물은 저분자 물질임에도 불구하고 유기 용매에 잘 용해되어, 고분자와 같이 습식 공적으로도 쉽게 박막을 형성할 수 있으며, 적색 파장에서 청색 파장까지의 형광, 및 인광을 발생시킬 수 있어 유기광전소자의 발광층의 호스트 재료로 응용될 수 있다.

발명의 실시를 위한 구체적인 내용

<35> 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

<36> 상기의 기술적 과제를 해결하기 위하여, 본 발명의 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 유기화합물을 제공한다.

<37> [화학식 1]



<38>

<39> (상기 화학식 1에서,

<40> 상기 X₁ 내지 X₁₄는 각각 독립적으로 CR', 및 N로 이루어진 군에서 선택되고,

<41> 상기 Ar₁ 내지 Ar₂는 각각 독립적으로, 단일결합, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

<42> 상기 R'는 수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 헤테로 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 실릴 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 아실기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알콕시 카르보닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 아실 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 아실 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알콕시카르보닐 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 20의 아닐옥시카르보닐 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 술포아미노(sulfamoyl) 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 술포닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 헤테로시클로알킬 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 우레이드기(ureide), 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 인산 아마이드기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 실릴기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이다)

<43> 본 명세서에서 치환된이란, 특별한 정의가 없는 한 수소 원자가 할로젠원자, 시아노기, 히드록시기, 아미노기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 및 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나의 치환기로 치환된 것을 의미한다.

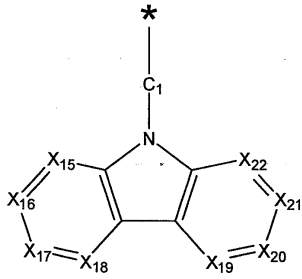
<44> 또한, 본 명세서에서 헤테로란, 특별한 정의가 없는 한 탄소 원자가 N, O, S, 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나의 헤테로 원자로 치환된 것을 의미한다.

<45> 상기 Ar₁ 내지 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 톨릴기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 스틸벤기, 치환 또는 비치환된 플루오렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 테페닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 디페닐안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 디나프틸안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 펜타세닐기, 치환 또는 비치환된 브로모페닐기, 치환 또는 비치환된 히드록시페닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀린기, 치환 또는 비치환된 퀴놀린기, 치환 또는 비치환된 피리미딜기, 치환 또는 비치환된 아조벤제닐기, 및 치환 또는 비치환된 페로세닐기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 것이 더욱 바람직하다.

<46> 상기 14개의 R'들 중 적어도 어느 하나는 치환 또는 비치환된 플루오렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아민기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 18 내지 30의 바이아릴페닐기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 것이 바람직하다. 이 경우, 상기 화학식 1은 저분자량을 가지면서도 유기 용매에 더욱 잘 용해될 수 있어, 습식 공정으로도 우수한 특성을 가지는 유기막의 형성이 가능하다.

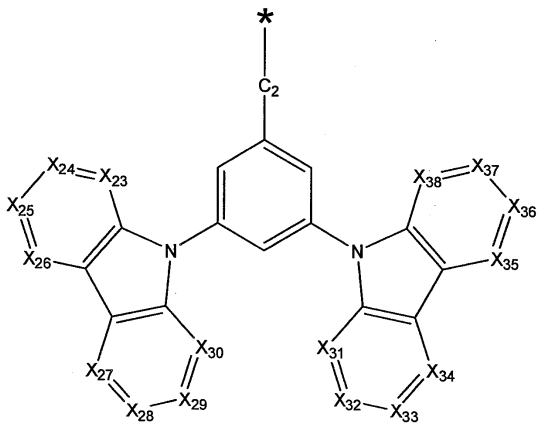
<47> 상기 R'의 더욱 구체적인 예들로는 하기 화학식 2 내지 8로 표시되는 치환기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 것을 들 수 있다.

<48> [화학식 2]



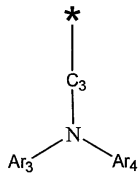
<49>

<50> [화학식 3]



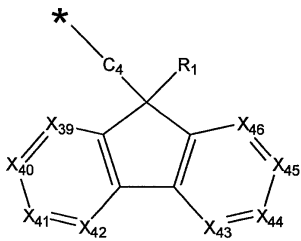
<51>

<52> [화학식 4]



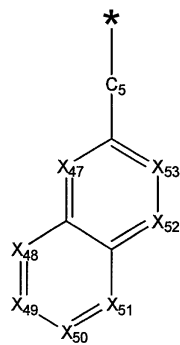
<53>

<54> [화학식 5]



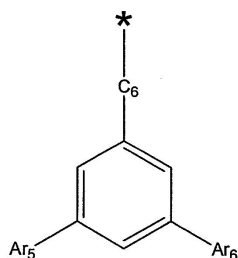
<55>

<56> [화학식 6]



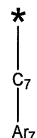
<57>

<58> [화학식 7]



<59>

<60> [화학식 8]



<61>

<62> (상기 화학식 2 내지 8에서,

<63> 상기 X15 내지 X53은 각각 독립적으로 CR", 및 N로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

<64> 상기 R" 및 R1은 수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 헤테로 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 실릴 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 아실기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알콕시 카르보닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 아실 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 아실 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알콕시카르보닐 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 20의 아닐옥시카르보닐 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 술폰모일 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 술폰닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 헤테로시클로알킬 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 우레이드기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 인산 아마이드기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 40의 실릴기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

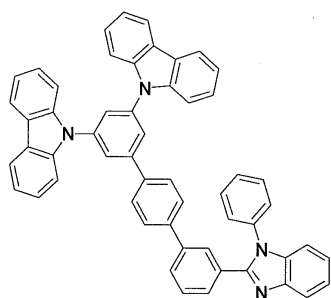
<65> 상기 Ar3 내지 Ar7은 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고,

<66> 상기 C1 내지 C7는 단일결합, 탄소수 1 내지 20의 알킬렌기, 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기, 및 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이다)

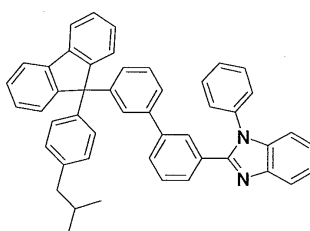
<67> 상기 Ar₃ 내지 Ar₇은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 톨릴기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 스틸벤기, 치환 또는 비치환된 플루오렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 테페닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 디페닐안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 디나프틸안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 펜타세닐기, 치환 또는 비치환된 브로모페닐기, 치환 또는 비치환된 히드록시페닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀린기, 치환 또는 비치환된 퀴놀린기, 치환 또는 비치환된 피리미딜기, 치환 또는 비치환된 아조벤제닐기, 및 치환 또는 비치환된 페로세닐기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 것이 더욱 바람직하다.

<68> 상기 화학식 1로 표시되는 유기화합물의 구체적인 예를 들면 하기 화학식 9 내지 26과 같지만, 이에 한정되는 것은 아니다.

<69> [화학식 9]

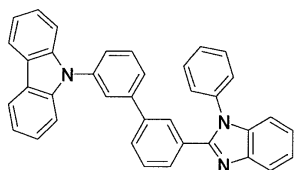


[화학식 10]

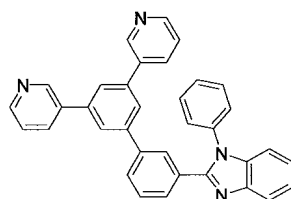


<70>

<71> [화학식 11]

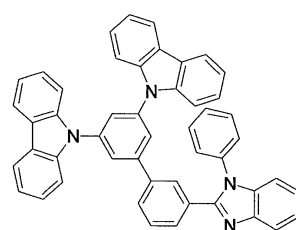


[화학식 12]

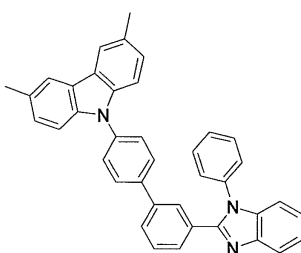


<72>

<73> [화학식 13]

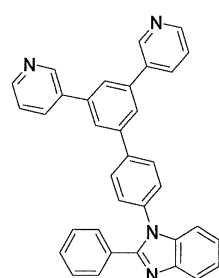


[화학식 14]

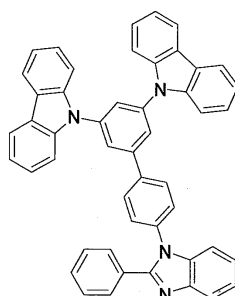


<74>

<75> [화학식 15]

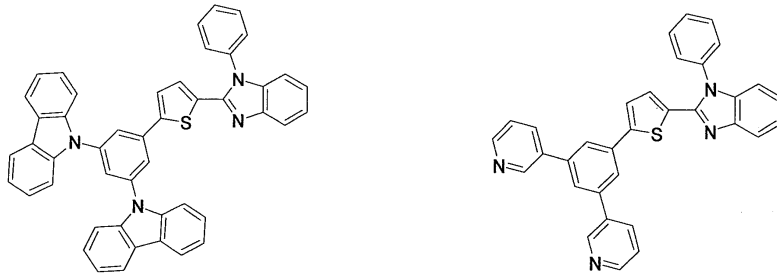


[화학식 16]

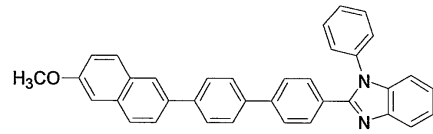


<76>

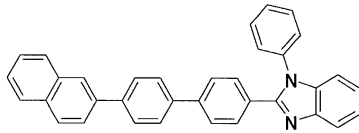
<77> [화학식 17] [화학식 18]



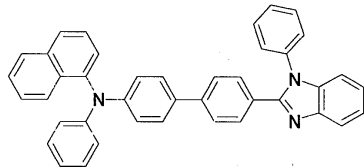
<78>
<79> [화학식 19]



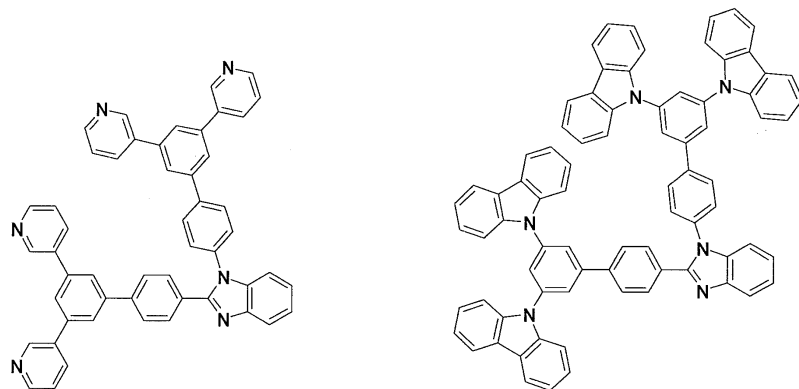
<80>
<81> [화학식 20]



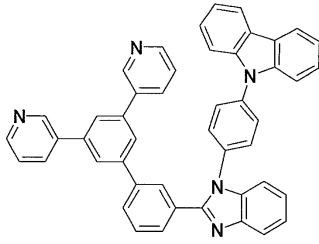
<82>
<83> [화학식 21]



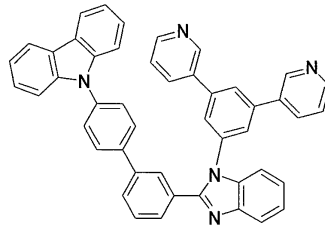
<84>
<85> [화학식 22] [화학식 23]



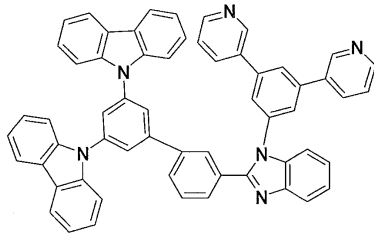
<86>
<87> [화학식 24] [화학식 25]



<88>



<89> [화학식 26]



<90>

<91> 상기 유기화합물의 합성 방법은 특별히 제한되지 않고, 종래의 유기화합물의 합성 방법이면 어느 것이나 바람직하게 이용할 수 있다. 다만, 야마모토(Yamamoto) 반응, 스즈키(Suzuki) 반응, 스틸(stille) 반응 등을 이용하는 것이 더욱 바람직하다.

<92> 상기 합성 방법을 이용하여, 반응 온도, 반응 용매, 또는 반응 시간 등을 적절히 바꾸어 상기 유기화합물을 제조할 수 있다.

<93> 본 발명의 다른 일 구현예에 따르면, 한 쌍의 전극 사이에 위치하는 유기막을 포함하며, 상기 유기막은 상기 유기 화합물을 포함하는 유기광전소자를 제공한다. 상기 유기광전소자는 유기전계발광소자(organic light emission diode)인 것이 바람직하다.

<94> 상기 유기막은 발광층, 정공주입층, 정공수송층, 전자수송층, 전자주입층, 계면층(interlayer), 정공차단층일 수 있고, 발광층인 것이 바람직하다.

<95> 상기 유기광전소자는 애노드 전극, 발광층, 및 캐소드 전극을 포함하는 가장 일반적인 소자 구성 뿐만 아니라, 인터레이어층, 정공수송층, 및 전자수송층을 선택적으로 더욱 포함하여 구성될 수 있다.

<96> 도 1은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자(1)의 단면도를 모식적으로 나타낸 도면이다. 도 1은 기판(11), 애노드 전극(12), 유기막(10), 및 캐소드 전극(16)으로 구성된 유기광전소자의 구조를 나타낸다. 상기 유기막(10)은 상기 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 유기화합물을 포함한다.

<97> 상기 유기막(10)은 발광층(14)을 포함하며, 선택적으로 제1 버퍼층(13)과 제2 버퍼층(15)을 포함할 수 있다. 이 경우, 상기 발광층(14), 제1 버퍼층(13), 또는 제2 버퍼층(15) 중 적어도 어느 하나가 상기 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 유기화합물을 포함한다.

<98> 상기 제1, 2버퍼층(13, 15)은 정공주입층, 정공수송층, 전자수송층 또는 전자주입층을 포함할 수 있으며, 상기 발광층(14)의 발광 특성상 전자차단층 또는 정공차단층 등을 더 포함할 수 있다.

<99> 도 1을 참조하여 상기 유기 화합물을 이용하여 유기광전소자를 제조하는 방법을 설명하면 다음과 같다.

<100> 먼저, 기판(11) 상부에 애노드 전극(12)용 물질을 코팅한다.

<101> 여기서, 기판(11)으로는 통상적인 유기광전소자에서 사용되는 기판을 사용하는데, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성, 및 방수성이 우수한 유리기판, 또는 투명 플라스틱 기판이 사용될 수 있다.

<102> 또한, 상기 애노드 전극(12)용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등이 사용될 수 있다.

<103> 다음으로, 제1 버퍼층(13)으로 정공수송층이 애노드 전극(12) 상부에 진공증착, 스퍼터링, 또는 스프인코팅을 이용하여 형성될 수 있고, 상기 정공수송층 위에 발광층(14)이 진공 증착, 스프인코팅, 잉크젯 프린팅 등의 용액코

팅법을 이용해 형성될 수 있다.

<104> 또한, 제2 버퍼층(15)으로 전자수송층이 캐소드 전극(16)이 형성되기 전에 발광층(14)의 상부에 형성된다.

<105> 이때, 상기 발광층(14)의 두께는 5nm 내지 1 μ m인 것이 바람직하고, 10 내지 500nm인 더욱 바람직하며, 상기 정공수송층, 및 전자수송층의 두께는 각각 10 내지 10,000Å인 것이 바람직하다.

<106> 상기 정공수송층 및 전자수송층은 운반자들을 발광층(14)으로 효율적으로 전달시켜 줌으로써, 발광층(14) 내에서 발광 결합의 확률을 높이는 역할을 한다.

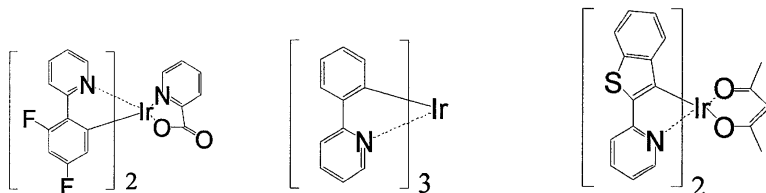
<107> 본 발명에서 사용 가능한 정공수송층 형성 물질은 특별히 제한되지는 않으나, 폴리(스티렌설포닉에시드)(PSS)층으로 도핑된 폴리(3,4-에틸렌디옥시-티오펜)(PEDOT)인 PEDOT:PSS, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD)이 바람직하게 사용될 수 있다. 또한, 상기 정공수송층 형성 물질로 본 발명의 일 구현예에 따른 유기화합물도 사용할 수 있음은 당연하다.

<108> 본 발명에서 사용 가능한 전자수송층 형성 물질은 특별히 제한되지는 않으나, 알루미늄 트리하이드록시퀴놀린(aluminum trihydroxyquinoline; Alq₃), 1,3,4-옥사디아졸 유도체인 2-(4-바이페닐일-5-페닐-1,3,4-옥사디아졸(2-(4-biphenyl)-5-phenyl-1,3,4-oxadiazole, PBD), 퀴놀살린 유도체인 1,3,4-트리스[(3-페닐-6-트리플루오로메틸)퀴놀살린-2-일] 벤젠(1,3,4-tris[(3-phenyl-6-trifluoromethyl)quinoxaline-2-yl] benzene, TPQ), 및 트리아졸 유도체 등이 바람직하게 사용될 수 있다. 또한, 상기 정공수송층 형성 물질로 본 발명의 일 구현예에 따른 유기화합물도 사용할 수 있음은 당연하다.

<109> 상기 유기화합물은 인광 발광 가능한 유기 화합물과 혼합하여 사용할 수 있다. 상기 인광 유기 화합물로는 3중항 상태에서부터 인광 발광 가능한 유기 금속 착체이고, 적어도 멘델(Gregor Johann Mendel)의 주기율표 VIII족 금속 이온을 포함하는 금속 착체를 바람직하게 사용할 수 있다. 상기 주기율표 VIII족 금속 이온은 Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd, Os, Ir, 및 Pt로 이루어진 군에서 선택되는 금속 이온이 바람직하게 사용될 수 있고, Ir 또는 Pt이 더욱 바람직하게 사용될 수 있다.

<110> 하기 화학식 27 내지 29에 구체적인 금속 착체의 예를 들지만 상기 금속 착체는 이것들로 한정되는 것은 아니다.

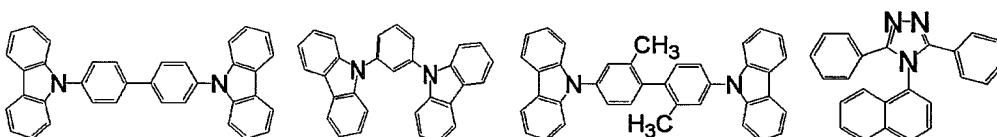
<111> [화학식 27] [화학식 28] [화학식 29]



<112>

<113> 한편, 용액코팅법을 이용하여 상기 유기화합물로 상기 유기막(10)을 형성하는 경우, 다른 저분자 호스트 재료와 혼합하여 사용될 수 있다. 하기 화학식 30 내지 33에 저분자 호스트 재료의 구체적인 예를 들지만 본 발명은 이것들로 한정되는 것이 아니다.

<114> [화학식 30] [화학식 31] [화학식 32] [화학식 33]



<115>

<116> 또한, 상기 유기화합물은 플루오렌계 고분자, 폴리페닐렌비닐렌계, 폴리파라페닐렌계 등의 공액 이중결합을 갖는 고분자들과 블렌딩하여 사용할 수도 있고, 경우에 따라서는 바인더 수지들을 혼합하여 사용할 수도 있다.

<117> 상기 바인더 수지들의 예로는, 폴리비닐카바졸, 폴리카보네이트, 폴리에스테르, 폴리아릴레이트, 폴리스티렌, 아크릴 고분자, 메타크릴 고분자, 폴리부티랄, 폴리비닐아세탈, 디알릴프탈레이트 고분자, 페놀수지, 에폭시 수지, 실리콘 수지, 폴리설폰 수지, 또는 우레아 레진 등이 있으며, 이 수지들은 각각 또는 조합하여 사용될 수

있다.

<118> 선택적으로는, 정공차단층(hole-blocking layer)을 진공 증착 등의 방법으로 형성시켜 발광층(14)에서의 정공의 전달속도를 제한하고, 전자-정공의 결합확률을 증가시킬 수 있다.

<119> 상기 전자수송층 상에 캐소드 전극(16)용 물질을 코팅한다.

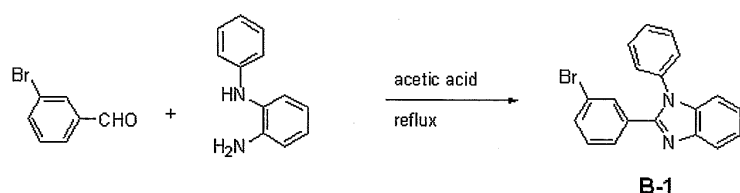
<120> 상기 캐소드 전극용 물질로는 일 함수(work function)가 작은 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 알루미늄(Al), Al:Li, Ba:Li, 또는 Ca:Li 등이 사용된다.

<121> 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

<122> **(합성예 1)**

<123> 하기 반응식 1의 반응을 이용하여 하기 B-1 화합물을 얻었다.

<124> [반응식 1]



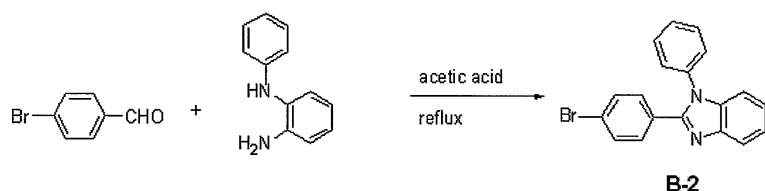
<125>

<126> 환류콘덴서와 교반기가 부착된 500 밀리리터 둥근바닥 플라스크에 3-브로모 알데히드 23.7g(0.128 mol)과 N-페닐-o-페닐렌디아민 25g(0.136 mol)을 아세트산에 넣어 녹인 다음 가열하여 환류하였다. 반응 종결 후 반응물을 증류수에 붓고 에틸아세테이트를 사용하여 추출하였다. 용매를 제거 한 후, 실리카겔 크로마토 그래피를 이용하여 화합물을 분리하여 23g(수율은 51.5%)의 B-1 화합물을 얻었다.

<127> **(합성예 2)**

<128> 하기 반응식 2의 반응을 이용하여 하기 B-2 화합물을 얻었다.

<129> [반응식 2]



<130>

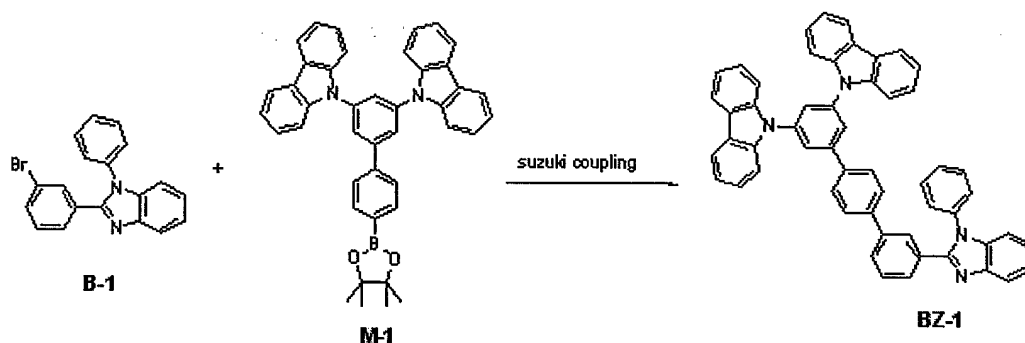
<131> 상기 합성예 1에서 3-브로모 알데히드를 대신하여 4-브로모 알데히드를 사용한 것을 제외하고는 합성예 1과 동일하게 실시하여 B-2 화합물을 제조하였다.

<132> **(유기화합물의 제조)**

<133> **(제조예 1: BZ-1 화합물의 합성)**

<134> 하기 반응식 3의 반응을 이용하여 BZ-1 화합물을 얻었다.

<135> [반응식 3]



<136>

<137> 온도계와 환류콘덴서, 교반기가 부착된 250 밀리리터의 둥근 바닥 플라스크에 아르곤 분위기 하에서 B-1 화합물 1 g(2.7 mmol), M-1 화합물 1.92 g(3.15 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.07 g(0.061 mmol)을 30 mL THF(tetrahydrofuran)에 녹이고, 여기에 2M-포타슘카보네이트 수용액 15mL을 넣은 후 90 °C에서 24시간 동안 환류하여 반응시켰다.

<138> 반응이 종결된 후, 상기 반응물을 실온으로 냉각시키고, 메틸렌클로라이드로 여러 차례 추출한 후 물로 여러 번 세척하였다.

<139> 상기 세척한 반응물을 무수 황산마그네슘으로 수분을 제거하고 이를 거른 후 용매를 제거하였다.

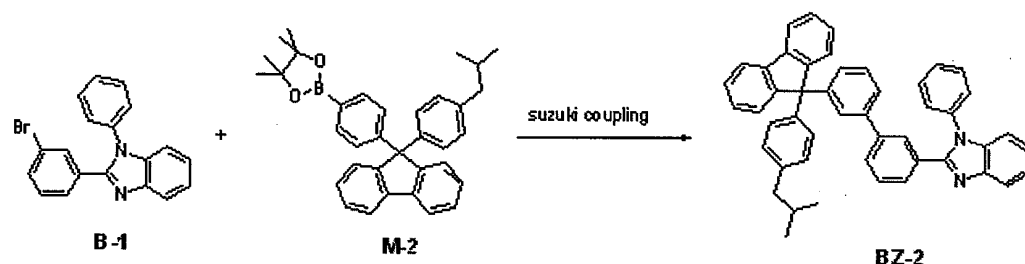
<140> 상기 용매를 제거한 반응물을 클로로포름/헥산(1:2) 혼합용매에 의해 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여 1.55 g(수율은 72%임)의 BZ-1 화합물을 얻었다.

<141> 상기 제조된 화합물에 대하여 원소 분석을 실시하였다. 최대 발광 파장(필름): 387 nm, 옵티컬 밴드 갭(optical band gap): 355 nm, 계산값(C₅₅H₃₆N₄): C, 87.74; H, 4.82; N, 7.44, 측정값: C, 87.1; H, 4.4; N, 7.3.

<142> (제조예 2: BZ-2 화합물의 합성)

<143> 하기 반응식 4의 반응을 이용하여 BZ-2 화합물을 얻었다.

<144> [반응식 4]



<145>

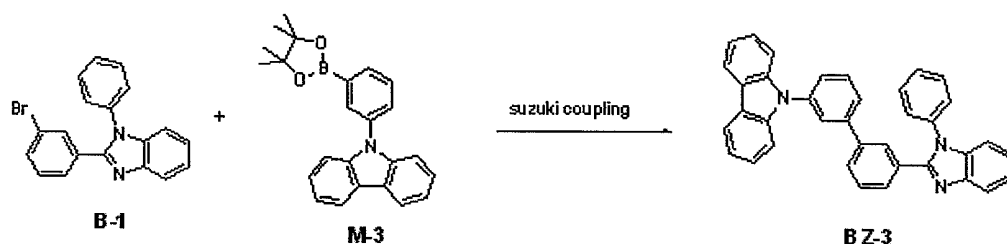
<146> 제조예 1에서 M-1 화합물을 대신하여 M-2 화합물을 사용한 것을 제외하고는 제조예 1과 동일하게 실시하여 BZ-2 화합물을 제조하였다.

<147> 상기 제조된 화합물에 대하여 원소 분석을 실시하였다. 최대 발광 파장(필름): 358 nm, 계산값(C₄₈H₃₈N₂): C, 89.68; H, 5.96; N, 4.36, 측정값: C, 89.2; H, 5.8; N, 4.2.

<148> (제조예 3: BZ-3 화합물의 합성)

<149> 하기 반응식 5의 반응을 이용하여 BZ-3 화합물을 얻었다.

<150> [반응식 5]



<151>

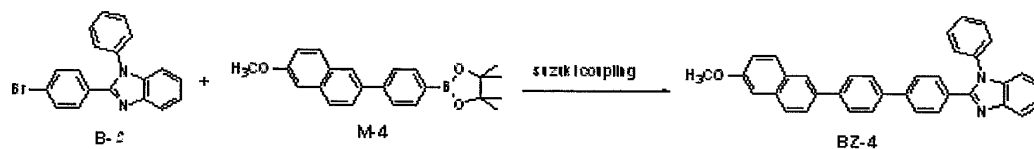
<152> 1과 동일하게 실시하여 BZ-3 화합물을 제조하였다.

<153> 상기 제조된 화합물에 대하여 원소 분석을 실시하였다. 최대 발광 파장(필름) : 355 nm, 계산값($C_{37}H_{25}N_3$): C, 86.86; H, 4.93; N, 8.21, 측정값: C, 86.5; H, 4.9; N, 7.9.

<154> (제조예 4: BZ-4 화합물의 합성)

<155> 하기 반응식 6의 반응을 이용하여 BZ-4 화합물을 얻었다.

<156> [반응식 6]



<157>

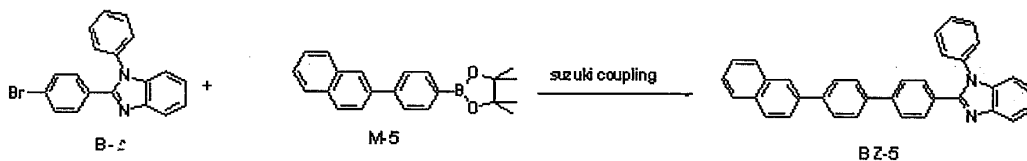
<158> 제조예 1에서 B-1 화합물을 대신하여 B-2 화합물을 사용하고, M-1 화합물을 대신하여 M-4 화합물을 사용한 것을 제외하고는 제조예 1과 동일하게 실시하여 BZ-4 화합물을 제조하였다.

<159> 상기 제조된 화합물에 대하여 원소 분석을 실시하였다. 최대 발광 파장(필름): 414 nm, 계산값($C_{36}H_{26}N_2O$): C, 86.03; H, 5.21; N, 5.57, 측정값: C, 85.7; H, 5.2; N, 5.5.

<160> (제조예 5: BZ-5 화합물의 합성)

<161> 하기 반응식 7의 반응을 이용하여 BZ-5 화합물을 얻었다.

<162> [반응식 7]



<163>

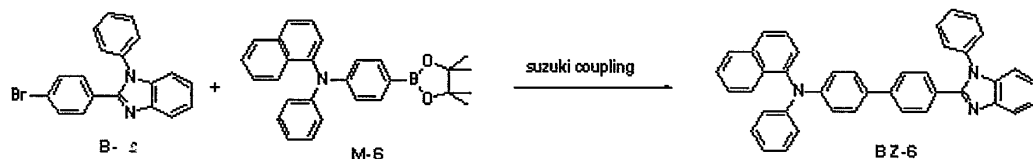
<164> 제조예 1에서 B-1 화합물을 대신하여 B-2 화합물을 사용하고, M-1 화합물을 대신하여 M-5 화합물을 사용한 것을 제외하고는 제조예 1과 동일하게 실시하여 BZ-5 화합물을 제조하였다.

<165> 상기 제조된 화합물에 대하여 원소 분석을 실시하였다. 최대 발광 파장(필름) : 418 nm, 계산값($C_{35}H_{24}N_2$): C, 88.95; H, 5.12; N, 5.93, 측정값: C, 88.0; H, 5.1; N, 5.8.

<166> (제조예 6: BZ-6 화합물의 합성)

<167> 하기 반응식 8의 반응을 이용하여 BZ-6 화합물을 얻었다.

<168> [반응식 8]



<169>

<170> 제조예 1에서 B-1 화합물을 대신하여 B-2 화합물을 사용하고, M-1 화합물을 대신하여 M-6 화합물을 사용한 것을 제외하고는 제조예 1과 동일하게 BZ-6 화합물을 제조하였다.

<171> 상기 제조된 화합물에 대하여 원소 분석을 실시하였다. 최대 발광 파장(필름) : 442 nm, 계산값($C_{41}H_{29}N_3$): C, 87.36; H, 5.19; N, 7.45, 측정값: C, 87.2; H, 5.1; N, 7.3.

<172> **(유기화합물의 박막 특성)**

<173> 상기 제조예 3에서 제조된 유기화합물의 박막 특성을 원자현미경(AFM)을 통하여 측정하였으며, 그 결과를 도 2에 나타내었다. 상기 도 2를 참조하면, 상기 제조예 3에서 제조된 유기화합물은 균일한 박막을 형성하고 있음을 알 수 있다.

<174> 또한, 상기 제조예 1 내지 6에서 제조된 유기화합물은 클로로포름, 메틸렌클로라이드, 클로로벤젠 등의 일반적인 유기용매에 상온에서도 잘 용해되었고, 우수한 용해성으로 인해 저분자임에도 불구하고 좋은 코팅성 및 박막 특성을 보였음을 확인하였다.

<175> 상기 제조예 3에서 제조된 유기화합물을 이용해 제작된 유기막의 표면 조도(roughness)는 0.411 nm로 아주 균일한 막을 형성하고 있어, 평탄도가 매우 우수하다. 상기 유기막은 클로로벤젠 용액에 4wt%의 농도로 제작된 용액을 ITO 기판 위에 스핀코팅으로 형성한 PEDOT 상부에 스핀코팅으로 제작하였다. 상기의 스핀코팅에 의한 유기막의 제작은 일 예를 든 것이지 상기의 방법으로 한정하는 것은 아니다.

<176> **(유기광전소자의 제조)**

<177> **(실시예 1)**

<178> 애노드 전극으로는 ITO 기판을 사용하였고, 상기 기판 상부에 PEDOT를 스핀코팅하였다.

<179> 이어서, 상기 PEDOT 상부에, 상기 제조예 2에서 제조된 BZ-1 화합물에 도판트로 트리스(2-4(4-톨릴)페닐피리딘)이리듐(tris(2-4(4-tolyl)phenylpyridine) iridium, $Ir(mppy)_3$)을 6 내지 7 중량% 도핑되게 하여 발광층을 스핀코팅에 의해서 형성하였다.

<180> 발광층 위에 비스(2-메틸-8-퀴놀리노레이트)-4-(페닐페놀레이트)알루미늄(bis(2-methyl-8-quinolinolate)-4-(phenylphenolate)aluminum, BA1q)을 진공 증착하여 50Å 두께의 정공차단층을 형성 하였다.

<181> 그 후 상기 발광층 상부에 Alq_3 를 진공 증착하여 200Å 두께의 전자수송층을 형성하였다.

<182> 상기 전자수송층 상부에 LiF 10Å과 Al 1000Å을 순차적으로 진공 증착하여 캐소드 전극을 형성함으로써 유기광전소자를 완성하였다.

<183> 상기 제조된 유기광전소자의 구조는 Al(1000Å)/ LiF(10Å)/ Alq_3 (200Å)/ BA1q(50Å)/ BZ-1+ $Ir(mppy)_3$ / PEDOT/ ITO(1500Å)이었다.

<184> **(비교예 1)**

<185> 실시예 1에서 BZ-1 화합물을 대신하여 폴리 비닐카바졸(poly vinylcarbazole, PVK)을 고분자 호스트로 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일하게 실시하였다.

<186> 상기 제조된 유기광전소자의 구조는 Al(1000Å)/ LiF(10Å)/ Alq_3 (200Å)/ BA1q(50Å)/ PVK+ $Ir(mppy)_3$ / PEDOT/ ITO(1500Å)이었다.

<187> **(유기광전소자의 성능)**

<188> 상기 실시예 1, 및 비교예 1에서 제조된 유기광전소자에 있어서, 전압의 변화에 따른 전류 밀도의 변화, 및 전압의 변화에 따른 휘도의 변화를 측정하였고, 그 결과를 도 3에 나타내었다.

<189> 또한, 초기 구동 전압, 및 1000nit에서의 구동전압, 발광효율 및 전력효율을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

<190> 상기 전압 변화에 따른 전류 밀도의 변화는 유기광전소자에 대해, 전압을 0V 부터 14V 까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 전류 밀도를 측정하였고, 상기 전압 변화에 따른 휘도의 변화는 전압을 0V 부터 14V 까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 측정하였다. 발광효율 또는 전력효율은 상기 측정된 전류 밀도와 휘도를 이용하여 계산하였다.

<191> [표 1]

소자종류	유기 화합물	초기 구동전압 (V)	1000 nit에서의 측정 결과		
			구동전압 (V)	발광효율 (cd/A)	전력효율 (lm/W)
Green	비교예 1 (PVK)	4.20	8.80	4.47	1.85
	실시예 1 (BZ-1)	4.60	8.60	5.21	1.94

<193> 상기 도 3, 및 표 1을 참조하면, 제조예 1에서 제조된 BZ-1 화합물은 유기광전소자용 호스트 물질로 사용될 수 있음을 알 수 있다. 특히, 제조예 1에서 제조된 BZ-1 화합물은 저분자 물질로서 고분자에 비해 정제가 쉬워 고순도로 제작할 수 있으며, 또한 고분자에 비해 균일한 분자량을 갖는다는 장점이 있다.

<194> 본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

도면의 간단한 설명

<195> 도 1은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자의 단면도.

<196> 도 2는 본 발명의 제조예 3에서 제조한 유기화합물을 이용해 습식공정으로 제작한 필름의 원자현미경사진.

<197> 도 3은 본 발명의 실시예 1, 및 비교예 1에서 제조한 유기광전소자의 전압에 따른 발광효율의 변화를 나타내는 그래프.

<198> <도면의 주요 부분에 대한 부호의 설명>

<199> 1 : 유기광전소자 10 : 유기막

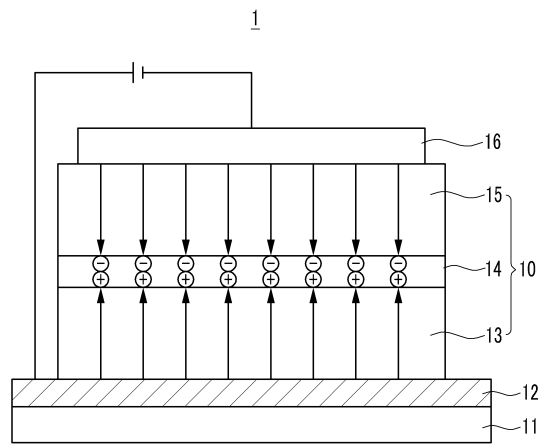
<200> 11 : 기판 12 : 애노드 전극

<201> 13 : 제1 버퍼층 14 : 발광층

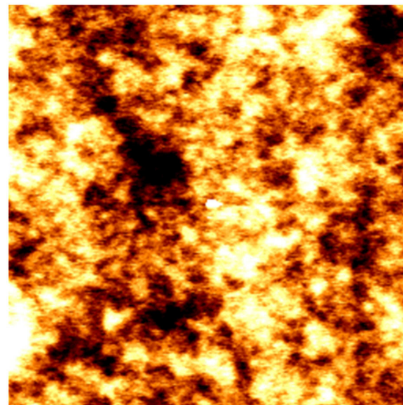
<202> 15 : 제2 버퍼층 16 : 캐소드 전극

도면

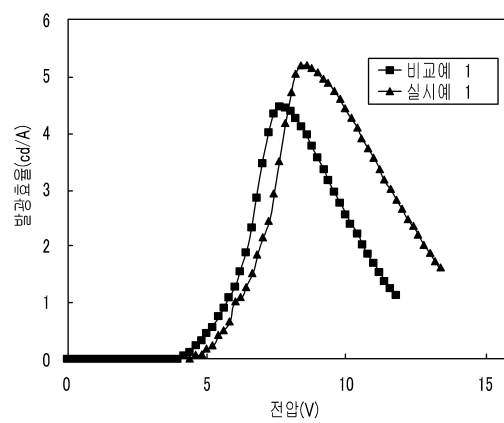
도면1



도면2



도면3



专利名称(译)	低分子有机化合物和含有它们的有机光电器件		
公开(公告)号	KR1020090073852A	公开(公告)日	2009-07-03
申请号	KR1020070141920	申请日	2007-12-31
[标]申请(专利权)人(译)	第一毛织株式会社		
申请(专利权)人(译)	第一毛织有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	第一毛织有限公司		
[标]发明人	KIM HYUNG SUN 김형선 LEE HO JAE 이호재 YU EUN SUN 유은선 CHAE MI YOUNG 채미영 PARK YOUNG SUNG 박영성		
发明人	김형선 이호재 유은선 채미영 박영성		
IPC分类号	C09K11/06		
CPC分类号	C07C13/567 C07C2603/18 C07D235/04 C07D235/14 C09K11/06 H01L51/0067 H01L51/50 H01L51/5012 H01L51/5056		
其他公开文献	KR100959189B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明提供下述化学式1所示的有机光电装置用有机化合物。[化学式1]化学式1中，X 1~X 14，Ar 1和Ar 2的定义为与在本发明的细节中描述的相同。有机化合物很好地溶解在有机溶剂中。并且可以在红色波长中产生对蓝色波长和磷光的荧光。可以与有机光电装置的发光层的主体材料一起施加磷光。有机光电器件，有机化合物，发光层，苯并咪唑，咔唑，溶液法，湿法处理，低分子量主体，磷光，OLED。

