



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2013년02월15일
(11) 등록번호 10-1233368
(24) 등록일자 2013년02월07일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2008-0137222
(22) 출원일자 2008년12월30일
심사청구일자 2010년11월29일
(65) 공개번호 10-2010-0039792
(43) 공개일자 2010년04월16일
(30) 우선권주장
1020080098769 2008년10월08일 대한민국(KR)
(56) 선행기술조사문헌
EP00825804 B1*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
제일모직주식회사
경상북도 구미시 구미대로 58 (공단동)
(72) 발명자
인규열
경기도 의왕시 고산로 56 (고천동, 제일모직)
강명순
경기도 수원시 영통구 인계로 239, 매탄 206동
705호 (매탄동, 성일아파트)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
팬코리아특허법인

전체 청구항 수 : 총 9 항

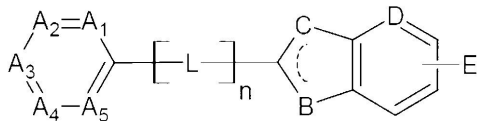
심사관 : 오세주

(54) 발명의 명칭 신규한 유기 광전 소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기 광전 소자

(57) 요약

본 발명은 신규한 유기 광전 소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기 광전 소자에 관한 것으로, 상기 유기 광전 소자용 재료는 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

[화학식 1]

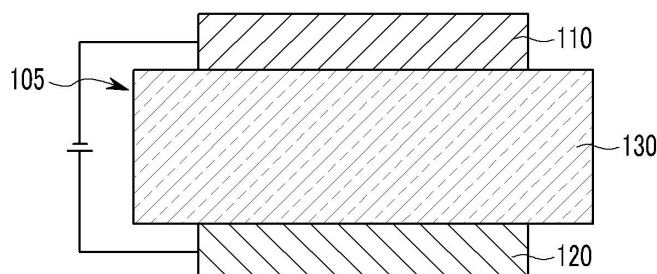


상기 화학식 1에서 A₁ 내지 A₅, B, C, D, E, L, 및 n의 정의는 명세서에 기재된 바와 같다.

본 발명에 따른 유기 광전 소자용 화합물은 유기발광소자를 비롯한 유기 광전 소자에서 정공주입, 정공수송, 발광, 또는 전자주입 및/또는 전자수송의 역할을 할 수 있으며, 적절한 도펀트와 함께 발광 호스트로서의 역할도 할 수 있다. 상기 재료는 열적 안정성이 우수하여 유기발광소자를 비롯한 유기 광전 소자에 적용할 경우 유기 광전 소자의 구동전압을 낮추고, 수명과 효율을 향상시킬 수 있다.

대표도 - 도1

100



(72) 발명자

정호국

인천 부평구 갈산동 동남아파트 2동 401호

김남수

경기도 부천시 오정구 상오정로 39, 101동 503호
(오정동, 오복타운)

강의수

경기도 안양시 동안구 시민대로 266, 1동 512호 (관양동, 평촌샤르망오피스텔)

채미영

경기 용인시 수지구 동천동 동천마을 현대2차홈타운 203동 1803호

박진성

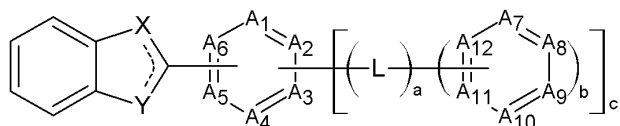
경기도 안양시 동안구 시민대로 277, 1212호 (관양동, 세방 글로벌시티)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 112 로 표시되는 것인 유기 광전 소자용 화합물.

[화학식112]



(상기 화학식 112에서,

A₁ 내지 A₁₂는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 CR₁ 내지 CR₁₂ 및 N로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 단, A₇ 내지 A₁₂ 중에서 선택되는 적어도 어느 하나는 반드시 N을 포함하고, 이 때, 상기 R₁ 내지 R₆ 중에서 서로 인접한 두 개는 융합링을 형성할 수 있고, 상기 R₇ 내지 R₁₂ 중에서 서로 인접한 두 개는 융합링을 형성할 수 있고,

X 는 O, S, Se, 및 NR₁₃ 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, Y 는 CR₁₄ 또는 N 이고, 단, X 가 O, S, 및 Se 로 이루어진 군에서 선택되는 것인 경우, Y 는 N 이고,

L 은 탄소수 6 내지 50 의 치환 또는 비치환된 아릴렌기이고,

a 는 0 또는 1 이고, 단, a 가 0 인 경우, A₁ 내지 A₆ 는 각각 독립적으로 CR₁ 내지 CR₆ 이고, a 가 1 인 경우, A₁ 내지 A₆ 중에서 선택되는 적어도 어느 하나는 반드시 N 이고,

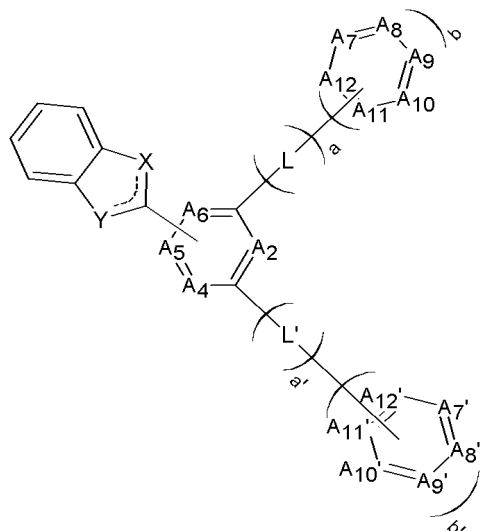
b 및 c 는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 3 사이의 정수이고,

상기 R₁ 내지 R₁₄ 는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 수소, 할로젠기, 니트릴기, 시아노기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 에스테르기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 알키닐기, 치환 또는 비치환된 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 치환 또는 비치환된 아미노기, BRR', 및 SiRR' R" 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 이 때, 상기 R, R', 및 R" 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 아릴기임.)

청구항 2

하기 화학식 113 으로 표시되는 것인 유기광전소자용 화합물:

[화학식 113]



(상기 화학식 113 에서,

A_2 , A_4 내지 A_{12} , 및 A_7' 내지 A_{12}' 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 CR_2 , CR_4 내지 CR_{12} , CR_7' 내지 CR_{12}' 및 N 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 단, A_7 내지 A_{12} 중에서 선택되는 적어도 어느 하나는 반드시 N 을 포함하고, A_7' 내지 A_{12}' 중에서 선택되는 적어도 어느 하나는 반드시 N 을 포함하고, 이 때, 상기 R_4 내지 R_6 중에서 서로 인접한 두 개는 융합링을 형성할 수 있고, 상기 R_7 내지 R_{12} 중에서 서로 인접한 두 개는 융합링을 형성할 수 있고, 상기 R_7' 내지 R_{12}' 중에서 서로 인접한 두 개는 융합링을 형성할 수 있고,

X 는 O, S, Se, 및 NR_{13} 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, Y 는 CR_{14} 또는 N 이고, 단, X 가 O, S, 및 Se 로 이루어진 군에서 선택되는 것인 경우, Y 는 N 이고,

L 및 L' 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 50 의 치환 또는 비치환된 아릴렌기이고,

a 및 a' 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 또는 1 이고, 단, a 및 a' 이 각각 독립적으로 0 인 경우, A_2 , A_4 내지 A_6 는 각각 독립적으로 CR_2 , CR_4 내지 CR_6 이고, a 및 a' 이 각각 독립적으로 1 인 경우, A_2 , A_4 내지 A_6 중에서 선택되는 적어도 어느 하나는 반드시 N 이고,

b 및 b' 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 3 사이의 정수이고,

상기 R_2 , R_4 내지 R_{14} , R_7' 내지 R_{12}' 는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 수소, 할로젠기, 니트릴기, 시아노기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 에스테르기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 알키닐기, 치환 또는 비치환된 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 치환 또는 비치환된 아미노기, BRR' , 및 $SiRR'$ R" 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 이 때, 상기 R, R', 및 R" 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 아릴기임.)

청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 화학식 112 에서 R_7 내지 R_{12} 중에서 선택되는 어느 하나는 아민 치환된 알킬기, 아민 치환된 사이클로알킬기, 아민 치환된 아릴기, 및 아민 치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환된 것이고,

상기 화학식 112 에서 R_1 내지 R_6 중에서 선택되는 다른 어느 하나는 니트릴기, 니트로기, 아미드기,

카르보닐기, 및 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환되는 것인 유기광 전소자용 화합물.

청구항 4

양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기 박막층을 포함하는 유기 광전 소자에 있어서,

상기 유기 박막층 중 적어도 어느 한 층은 본 발명의 제 1 항 또는 제 2 항 중 어느 한 항에 따른 유기 광전 소자용 화합물을 포함하는 것인 유기 광전 소자.

청구항 5

제 4 항에 있어서,

상기 유기 광전 소자용 화합물은 호스트 재료 또는 전하수송재료로 사용되는 것인 유기 광전 소자.

청구항 6

제 4 항에 있어서,

상기 유기 박막층은 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 및 전자주입층으로 이루어진 군에서 선택되는 층인 것인 유기 광전 소자.

청구항 7

제 4 항에 있어서,

상기 유기 박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 유기 광전 소자용 화합물과 환원성 도펀트를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 광전 소자.

청구항 8

제 7 항에 있어서,

상기 환원성 도펀트는 알칼리 금속, 알칼리토류 금속, 희토류 금속, 알칼리 금속의 산화물, 알칼리 금속의 할로젠화물, 알칼리 금속의 유기 착체, 알칼리토류 금속의 산화물, 알칼리토류 금속의 할로젠화물, 알칼리토류 금속의 유기 착체, 희토류 금속의 산화물, 희토류 금속의 할로젠화물, 및 희토류 금속의 유기 착체로 이루어진 군에서 선택되는 것인 유기 광전 소자.

청구항 9

제 4 항의 유기 광전 소자를 포함하는 것인 표시장치.

청구항 10

삭제

청구항 11

삭제

청구항 12

삭제

청구항 13

삭제

청구항 14

삭제

청구항 15

삭제

청구항 16

삭제

청구항 17

삭제

명세서

발명의 상세한 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 신규한 유기 광전 소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기 광전 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 열적 안정성이 우수한 유기 광전 소자용 재료를 포함하여 유기 광전 소자의 구동전압을 낮추고, 수명과 효율을 향상시킬 수 있는 유기 광전 소자용 재료 및 이를 포함하는 유기 광전 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 광전 소자는 유기 재료에 전류를 가하여 전기 에너지를 빛 에너지로 바꿔 주는 소자로서 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 기능성 유기물 층이 삽입된 구조를 갖는다.

[0003] 유기 광전 소자의 전기적인 특성은 발광소자(light emitting diodes, LED)와 유사하며, 양극에서 정공(hole)이 주입되고 음극에서 전자(electron)가 주입된 후 각각의 정공 및 전자는 서로 상대편 전극을 향해 이동하다가 재결합(recombination)에 의해 에너지가 높은 여기자(exciton)를 형성하게 된다. 이 때, 형성된 여기자가 기저 상태(ground state)로 이동하면서 특정한 파장을 갖는 빛이 발생하게 된다.

[0004] 유기물에 의한 발광현상은 1960년대 초에 안트라센(anthracene)을 이용한 발광 현상이 처음 발견되었으나 구동 전압이 너무 높은 단점이 있었고, 1980년대 후반 Eastman Kodak의 C. W. Tang에 의하여 저전압 구동의 소자가 개발되었으며, 이 후, 1990년대 후반에 캠브리지(cambridge)에서 폴리(p-페닐렌비닐렌)(poly(p-phenylenevinylene), PPV)을 이용한 고분자 발광소자를 개발하면서 크게 저분자 발광 소자(SMOLED)와 고분자 유기 발광 소자(PLED)로 나뉘어 연구가 진행되고 있는 실정이다. 이러한 저분자 유기 발광 소자는 진공 증착법에 의해 박막의 형태로 소자를 제조하므로 효율 및 수명성능이 좋고, 고분자 유기 발광 소자는 잉크젯(Inkjet) 또는 스핀코팅(spin coating)법을 사용하여 초기 투자비가 적고 대면적화가 유리한 장점이 있다.

[0005] 저분자 유기 발광 소자 및 고분자 유기 발광 소자는 모두 자체발광, 고속응답, 광시야각, 초박형, 고화질, 내구성, 넓은 구동온도범위 등의 장점을 가지고 있고, 특히 자체발광의 특성 때문에 기존의 LCD(liquid crystal display)와 비교하여 시안성이 좋고, 백라이트가 필요없어 LCD의 1/3수준으로 두께 및 무게를 줄일 수 있는 장점이 있다. 또한, 응답속도가 LCD에 비해 1000 배 이상 빠른 마이크로 초 단위이기 때문에 잔상없이 완벽한 동영상 구현할 수 있다. 이러한 장점을 바탕으로 1980년대 후반 최초 개발 이후 효율 80 배, 수명 100 배 이상에 이르는 급격한 기술발전을 이루어 왔고, 최근에는 40 인치 유기 발광 소자 패널이 발표되는 등 대형화가 급속히 진행되고 있는 실정이다.

[0006] 대형화를 위해서는 발광 효율의 증대 및 소자의 수명 향상이 수반되어야 한다. 이 때, 소자의 발광 효율은 발광층 내의 정공과 전자의 결합이 원활히 이루어져야 한다. 그러나, 일반적으로 유기물의 전자 이동도는 정공 이동도에 비하여 느리기 때문에 발광층 내의 정공과 전자의 결합이 효율적으로 이루어지기 어려운 단점이 있다. 따라서 음극으로부터의 전자 주입 및 이동도를 높이는 동시에, 정공의 이동을 차단할 수 있는 신규한 화합물의 개발이 절실한 실정이다.

[0007] 또한, 소자의 수명은 소자의 구동시 발생하는 줄 열(Joule heat)에 의하여 재료가 결정화면서, 수명이 단축될 수 있다. 이러한 문제점을 해결하기 위하여 전자의 이동 속도가 빠른 2-(4-비페닐릴)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-

옥사디아졸(PBD)(Jpn. J. Appl. Phys., 27, L269 (1988))와 같은 재료가 제안되었으나, 열적 안정성이 부족하여 소자 구동시 결정화되는 문제점이 있었다. 또한, 정공 이동도를 낮추는 특성이 우수한 바소쿠프로인(BCP) 및 알루미늄 혼합 배위착체(BAlq, Bis(2-methyl-8-quinolinolate)-4-(phenylphenolate)aluminum)에 대한 연구도 활발히 진행되었다. 그러나 상기 재료들은 정공 이동도를 낮추는 특성이 우수한 반면, 전자주입 특성이 저하되고, 소자 구동시 결정화되는 문제점이 있어, 만족할 만한 소자 특성을 보여 주지는 못하였다.

[0008] 따라서, 전자의 주입 및 이동성이 우수하며, 구동시 결정화를 방지할 수 있는 열적안정성이 높은 유기 화합물에 대한 개발이 절실한 실정이다.

발명의 내용

해결 하고자하는 과제

[0009] 본 발명의 일 구현예는 정공주입, 정공수송, 발광, 또는 전자주입 및/또는 전자수송의 역할을 할 수 있으며, 적절한 도펀트와 함께 발광 호스트로서의 역할도 할 수 있는 신규한 유기 광전 소자용 재료를 제공하고자 한다.

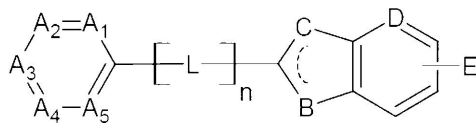
[0010] 본 발명의 다른 구현예는 상기 유기 광전 소자용 재료를 포함하여 유기 광전 소자의 구동전압을 낮추고, 수명과 효율은 향상된 유기 광전 소자를 제공하고자 한다.

[0011] 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

[0012] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1 로 표시되는 유기 광전 소자용 화합물을 제공한다:

[0013] [화학식1]



[0014]

[0015] 상기 화학식 1 에 있어서,

[0016] 상기 A₁ 내지 A₅ 는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 CR₁ 내지 CR₅ 이거나 N 이고, 단, 상기 A₁ 내지 A₅ 중에서 선택되는 3 개 이하가 N 이고,

[0017] A₁ 내지 A₅ 중에서 선택되는 어느 하나가 N 인 경우, A₁ 내지 A₅ 중에서 선택되는 나머지 4 개가 각각 CR₁ 내지 CR₅ 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 이 때, 상기 R₁ 내지 R₅ 중에서 선택되는 적어도 2 개는 수소가 아니고,

[0018] A₁ 내지 A₅ 이 각각 CR₁ 내지 CR₅ 인 경우, R₁ 내지 R₅ 중 적어도 2 개는 수소가 아니다.

[0019] 상기 B는 O, S, Se, 및 NR^{''} 으로 이루어진 군에서 선택되는 것이다.

[0020] 상기 C 및 D 는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 CR['] 및 N 으로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 단, B 가 NR^{''} 이 아닌 경우 C 는 N 이다.

[0021] 상기 R₁ 내지 R₅, R['], 및 R^{''} 는 각각 독립적으로 수소, 할로젠기, 니트릴기, 시아노기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 에스테르기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 치환 또는 비치환된 아미노기, BR₆R₇, 및 SiR₆R₇R₈ 으로 이루어진 군에서 선택되는 것이고,

[0022] 이 때, 상기 R₆ 내지 R₈ 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기, 및 치환 또

는 비치환된 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 것이다.

- [0023] 상기 E 는 수소, 니트릴기, 시아노기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 플루오로알킬기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 및 SO_2R_0 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고,
- [0024] 이 때, 상기 R_0 는 니트릴기, 시아노기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 것이다.
- [0025] 상기 L 은 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 것이고,
- [0026] n 은 0 또는 1이다.
- [0027] 본 발명의 다른 일 구현예에 따르면, 양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기 박막층을 포함하는 유기 광전 소자에 있어서, 상기 유기 박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 유기 광전 소자용 화합물을 포함하는 것인 유기 광전 소자를 제공한다.
- [0028] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기 광전 소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.
- [0029] 기타 본 발명의 구현예들의 구체적인 사항은 이하의 상세한 설명에 포함되어 있다.

효 과

- [0030] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 광전 소자용 화합물은 전체적으로 비대칭 구조를 이룬다. 이러한 비대칭 구조는 비정질 특성을 강화시켜 결정화를 억제할 수 있으므로, 유기 광전 소자용 화합물의 열적 안정성을 향상시킨다. 따라서 유기 광전 소자 구동시 유기 광전 소자의 구동전압을 낮추고, 수명과 효율을 향상시킬 수 있다.
- [0031] 본 발명의 다른 일 구현예에 따른 유기 광전 소자용 재료는 유기 발광소자를 비롯한 유기 광전 소자에서 정공주입, 정공수송, 발광, 또는 전자주입 및/또는 전자수송역할을 할 수 있으며, 적절한 도펀트와 함께 발광 호스트로서의 역할로서 적용 가능하다.

발명의 실시를 위한 구체적인 내용

- [0032] 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.
- [0033] 본 명세서에 있어서, 별도의 정의가 없는 한, "알킬기"라 함은 탄소수 1 내지 30 의 알킬기, 보다 바람직하기로는 탄소수 1 내지 15 의 알킬기이고; "알콕시기"라 함은 탄소수 1 내지 30 의 알콕시기, 보다 바람직하기로는 탄소수 1 내지 15 의 알콕시기이고; "알케닐기"라 함은 탄소수 2 내지 30 의 알케닐기, 보다 바람직하기로는 탄소수 2 내지 15 의 알케닐기이고; "사이클로알킬기"라 함은 탄소수 3 내지 30 의 사이클로알킬기, 보다 바람직하기로는 탄소수 3 내지 15 의 사이클로알킬기이고; "아릴기"라 함은 탄소수 6 내지 50 의 아릴기, 보다 바람직하기로는 탄소수 6 내지 25 의 아릴기이고; "아릴아민기"라 함은 탄소수 7 내지 50 의 아릴아민기, 보다 바람직하기로는 탄소수 7 내지 25 의 아릴아민기이고; "헤테로아릴아민기"라 함은 탄소수 7 내지 50 의 헤테로아릴아민기, 보다 바람직하기로는 탄소수 7 내지 25 의 헤테로아릴아민기이고; "헤테로고리기"라 함은 탄소수 5 내지 50 의 헤테로고리기, 보다 바람직하기로는 탄소수 5 내지 25 의 헤테로고리기이고; "플루오로알킬기"라 함은 탄소수 1 내지 10 의 플루오로알킬기를 의미한다.
- [0034] 본 명세서에서 별도의 정의가 없는 한, "에스테르"란 $-\text{COOR}$ 로 표시되는 것을 의미하고; "카르보닐"이란 $-\text{COR}'$ 로 표시되는 것을 의미한다. 여기서 R, 및 R' 은 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 10 의 알킬기, 탄소수 6 내지 20 의 아릴기, 탄소수 3 내지 20 의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 10 의 알케닐기, 탄소수 2 내지 10 의 알키닐기, 또는 이들의 조합인 것이다.
- [0035] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 할로젠기, 니트릴기, 시아노기, 니트로기, 아미드기, 카르보

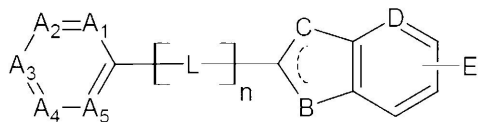
닐기, 아세틸렌기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 치환 또는 비치환된 아민기, 및 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, BR_6R_7 , 및 $SiR_6R_7R_8$ (이 때, 상기 R_6 내지 R_8 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30 의 알킬기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50 의 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 것임.)으로 이루어진 군에서 선택되는 것을 의미한다.

[0036] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 고리기내에 N, O, S, 및 P 로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3 개 함유하고, 나머지는 탄소인 것이 바람직하다.

[0037] 특히, 본 명세서에서 "헤테로고리기"란 별도의 정의가 없는 한, 상기 헤테로 원자를 포함하는 탄소수 5 내지 50 의 헤테로아릴기, 탄소수 5 내지 50 의 헤테로사이클로알킬기, 탄소수 5 내지 50 의 헤테로사이클로알케닐기, 탄소수 5 내지 50 의 헤테로사이클로알킬닐기 및 이들의 융합 고리로 이루어진 군에서 선택되는 것을 의미한다. 상기 헤테로고리기는 상기한 헤테로 원자 1 내지 20 개를 포함하는 것이 바람직하고, 보다 더 바람직하기로는 헤테로 원자 1 내지 15 개를 포함할 수 있다.

[0038] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1 로 표시되는 유기 광전 소자용 화합물을 제공한다:

[0039] [화학식1]



[0040]

[0041] 상기 화학식 1에 있어서,

[0042] 상기 A_1 내지 A_5 는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 CR_1 내지 CR_5 이거나 N 이고, 단, 상기 A_1 내지 A_5 중에서 선택되는 3 개 이하가 N 이고,

[0043] A_1 내지 A_5 중에서 선택되는 어느 하나가 N 인 경우, A_1 내지 A_5 중에서 선택되는 나머지 4 개가 각각 CR_1 내지 CR_5 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 이 때, 상기 R_1 내지 R_5 중에서 선택되는 적어도 2 개는 수소가 아니고,

[0044] A_1 내지 A_5 이 각각 CR_1 내지 CR_5 인 경우, R_1 내지 R_5 중 적어도 2 개는 수소가 아니다.

[0045] 상기 B 는 O, S, Se, 및 NR' 으로 이루어진 군에서 선택되는 것이다.

[0046] 상기 C 및 D 는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 CR' 및 N 으로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 단, B 가 NR' 이 아닌 경우 C 는 N이다.

[0047] 상기 R_1 내지 R_5 , R' , 및 R' 는 각각 독립적으로 수소, 할로젠기, 니트릴기, 시아노기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 에스테르기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 치환 또는 비치환된 아미노기, BR_6R_7 , 및 $SiR_6R_7R_8$ 으로 이루어진 군에서 선택되는 것이고,

[0048] 이 때, 상기 R_6 내지 R_8 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기, 및 치환 또는 비치환된 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 것이다.

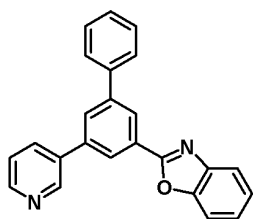
[0049] 상기 E 는 수소, 니트릴기, 시아노기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 플루오로알킬기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 및 SO_2R_9 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고,

[0050] 이 때, 상기 R_9 는 니트릴기, 시아노기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군

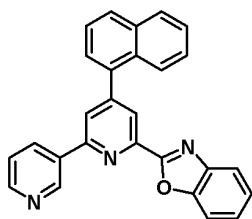
에서 선택되는 것이다.

- [0051] 상기 L 은 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 것이고,
- [0052] n 은 0 또는 1이다.
- [0053] 상기 화학식 1 의 신규한 유기 광전소자용 화합물은 A_1 내지 A_5 를 포함하는 부분과; 아릴기 또는 헤테로아릴기를 포함하는 연결기인 L; 그리고 5 각환을 포함하는 기능성 치환체 부분으로 나누어 생각할 수 있다.
- [0054] 상기 화학식 1 에서 A_1 내지 A_5 는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 CR_1 내지 CR_5 이거나 N 이고, 단, 상기 A_1 내지 A_5 중에서 선택되는 3 개 이하가 N 이다. 만약, A_1 내지 A_5 중에서 적어도 어느 하나가 N 인 경우, LUMO (Lowest unoccupied molecular orbital) 에너지 준위를 낮추고 분자의 전자친화도를 높여 전자의 주입 및 이동 특성을 향상시킬 수 있다. 따라서, 유기 발광 소자의 구동에 필요한 전압을 감소시킬 수 있으므로, 전력 효율을 증대시키는 효과를 부여할 수 있다. 그러나, A_1 내지 A_5 중에서 선택되는 4 개 이상이 N 인 경우에는 너무 낮은 LUMO 에너지 레벨을 유발하여 전자의 주입이 어려울 수 있으므로 바람직하지 못하다.
- [0055] 특히, A_1 내지 A_5 중에서 선택되는 어느 하나가 N 인 경우, A_1 내지 A_5 중에서 선택되는 나머지 4 개가 각각 CR_1 내지 CR_5 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 이 때, 상기 R_1 내지 R_5 중에서 선택되는 적어도 2 개는 수소가 아니다. 만약, 상기 R_1 내지 R_5 중에서 선택되는 어느 하나만이 수소가 아닌 치환기인 경우에는 화합물의 강직성(rigidity)이 높아져 결정화가 일어나기 쉬우므로 바람직하지 못하며, 또한 상기 R_1 내지 R_5 모두 수소인 경우에는 열적 안정성이 떨어지고 전자의 주입이 어려워져 바람직하지 못하다.
- [0056] A_1 내지 A_5 이 모두 N 으로 치환되지 않는 경우, A_1 내지 A_5 는 CR_1 내지 CR_5 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 이 때, 상기 R_1 내지 R_5 중 적어도 2 개는 수소가 아니다. 만약, 상기 R_1 내지 R_5 중에서 선택되는 어느 하나만이 수소가 아닌 치환기인 경우에는 화합물의 강직성(rigidity)이 높아져 결정화가 일어나기 쉬우므로 바람직하지 못하며, 또한, 상기 R_1 내지 R_5 모두 수소인 경우에는 열적 안정성이 떨어지고 전자의 주입이 어려워져 바람직하지 못하다.
- [0057] 특히, 상기 R_1 내지 R_5 중에서 선택되는 적어도 2 개가 수소가 아닌 치환기를가지는 경우, 특히, 상기 치환기위 위치에 서로 다른 종류의 치환기를 도입함으로써, 비정질 특성을 높일 수 있다. 따라서 소자의 구동시 발생하는 줄 열에 의한 결정화를 억제할 수 있게 되어, 유기 발광 소자 구동시 수명 특성을 향상시킬 수 있다.
- [0058] 다만, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 광전 소자용 화합물의 상기 A_1 과 A_5 는 서로 동일하지 않고, A_2 와 A_4 는 서로 동일하지 않는 것이 보다 바람직하다. 이러한 유기 광전 소자용 화합물의 구조는 A_3 를 포함하는 대칭축을 기준으로 상하의 치환기가 비대칭 구조를 이룬다. 이러한 비대칭 구조는 비정질 특성을 강화시켜 결정화를 억제할 수 있으므로, 유기 광전 소자 구동시 수명 특성을 향상시킬 수 있다. 또한, 유기 광전 소자의 구동전압을 낮추고, 효율 및 열적 안정성 면에서 우수한 효과를 가지는 유기 광전 소자를 제공할 수 있다.
- [0059] 상기 아릴기 또는 헤테로아릴기를 포함하는 연결기인 L 은 분자간의 상호작용을 높여 열적안정성 향상에 도움을 줄 수 있고, 파이공액길이(π -conjugation length)를 조절하여 가시영역에서 발광 조절을 가능하게 한다. 따라서 본 발명의 유기 광전 소자용 화합물은 발광층에 유용하게 적용될 수 있다.
- [0060] 또한, 오(5)각환을 포함하는 기능성 치환체 부분의 B 는 O, S, Se, 및 NR' 으로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, C 및 D 는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 CR' 및 N으로 이루어진 군에서 선택되는 것이다. 단, B가 NR' 이 아닌 경우 C는 N 이다. 상기 5 각환을 포함하는 기능성 치환체 부분은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 광전 소자용 화합물의 구조를 전체적으로 비대칭 구조를 이루게 하여, 상기 화합물에 열적 안정성을 부여한다.
- [0061] 상기 화학식 1 에서 R_1 내지 R_5 , R' , 및 R' 이 각각 독립적으로 아릴기인 경우, 상기 아릴기는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40 의 아릴기인 것이 보다 바람직하다. 이 때, 상기 아릴기는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 스티렌 등의 단환식 아릴기; 또는 나프틸기, 안트라세닐기, 페나트렌기, 파이레닐기, 페릴레닐기 등의 다환식 아릴기를 사용하는 경우 발광층으로서 유용하게 사용할 수 있으므로 보다 바람직하다.

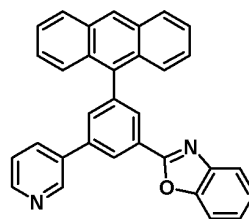
- [0062] 상기 화학식 1 에서 R_1 내지 R_5 , R' , 및 R'' 이 각각 독립적으로 아릴아민기인 경우, 상기 아릴아민기는 디페닐아민기, 디나프틸아민기, 디비페닐아민기, 페닐 나프틸아민기, 페닐 디페닐아민기, 디톨릴아민기, 페닐 톨릴아민기, 카바졸기, 및 트리페닐아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 보다 바람직하게 사용할 수 있다.
- [0063] 상기 화학식 1 에서 R_1 내지 R_5 , R' , 및 R'' 이 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기인 경우, 상기 헤테로고리기는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸릴기, 티아졸릴기, 옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 트리아졸릴기, 피리디닐기, 피라다진기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 아크리딜기, 이미다조피리디닐기, 및 이미다조피리미디닐기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 보다 바람직하게 사용할 수 있다.
- [0064] 상기 치환 또는 비치환된 헤테로고리기가 이미다졸기 또는 트리아졸기인 경우, 상기 이미다졸기 또는 트리아졸기의 질소(N) 원소에 결합되는 치환기는 치환 또는 비치환된 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 터셔리-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기 등과 같은 알킬기; 치환 또는 비치환된 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기 등과 같은 사이클로알킬기; 치환 또는 비치환된 페닐기, 비페닐기, 나프틸기 등과 같은 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 보다 바람직하게 사용할 수 있다. 이 때, 상기 헤테로고리기는 피리딜기, 비피리딜기, 퀴놀릴기, 이소퀴놀릴기 등과 같은 헤테로아릴기인 것이 바람직하다.
- [0065] 한편, 상기 화학식 1 에서 R_1 내지 R_5 , R' , 및 R'' 은 전자주입 특성이 우수한 작용기이거나, 또는 열적 안정성을 증가시킬 수 있는 작용기들로 구성될 수 있다. 또한, 선택적으로 정공주입/전달능력 및 전자주입/전달능력을 부여할 수 있어, 발광층에서의 효율적인 정공-전자 결합을 가능하게 할 수 있다.
- [0066] 예를 들어, R_1 내지 R_5 , R' , 및 R'' 중에서 선택되는 어느 하나가 아민 치환된 알킬기, 아민 치환된 사이클로알킬기, 아민 치환된 아릴기, 및 아민 치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환되는 경우에는 상기 화합물을 정공 주입층 및 정공 수송층 물질로 유용하게 사용할 수 있다.
- [0067] 한편, R_1 내지 R_5 , R' , 및 R'' 중에서 선택되는 어느 하나가 전자 친화성이 우수한 니트릴기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환되는 경우에는 전자 주입층 또는 전자 수송층 물질로 유용하게 사용할 수 있다.
- [0068] 따라서, 상기 화학식 1 에서 R_1 내지 R_5 , R' , 및 R'' 중에서 선택되는 어느 하나는 아민 치환된 알킬기, 아민 치환된 사이클로알킬기, 아민 치환된 아릴기, 및 아민 치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환된 것이고, 상기 화학식 1 에서 R_1 내지 R_5 , R' , 및 B의 R'' 중에서 선택되는 다른 어느 하나는 니트릴기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환되는 것을 사용하는 경우, 정공전달 및 전자전달 능력을 동시에 가지므로 보다 바람직하다. 이 때, 상기 아민 치환된 헤테로고리기는 아민 치환된 헤테로아릴기인 것이 보다 바람직하고, 헤테로고리기는 헤테로아릴기인 것이 보다 바람직하다.
- [0069] 또한, 상기 화학식 1에서 E, 및 B의 R'' 중에서 선택되는 어느 하나는 아민 치환된 알킬기, 아민 치환된 사이클로알킬기, 아민 치환된 아릴기, 및 아민 치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환된 것이고, 상기 화학식 1 에서 E, 및 B의 R' 중에서 선택되는 다른 어느 하나는 니트릴기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환되는 것을 사용하는 경우, 비정질의 특성을 강화하고, 정공 및 전자 전달 특성의 세부 조절이 가능하기 때문에 보다 바람직하다. 이 때, 상기 아민 치환된 헤테로고리기는 아민 치환된 헤테로아릴기인 것이 보다 바람직하고, 헤테로고리기는 헤테로아릴기인 것이 보다 바람직하다.
- [0070] 상기 L 은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30 의 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 경우 보다 바람직하다.
- [0071] 상술한 상기 화학식 1 로 표현되는 신규 화합물에 치환될 수 있는 다양한 치환기는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 광전 소자용 화합물의 근본적인 물성을 변화시키지는 않는다.
- [0072] 상기 화학식 1 로 표시되는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 광전 소자용 화합물의 대표적인 예로는, 하기 화학식 2 내지 111 로 표현되는 화합물을 들 수 있으며, 본 발명의 화합물이 이에 한정되는 것은 아니다.



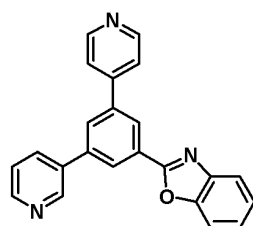
화학식2



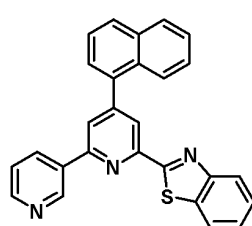
화학식3



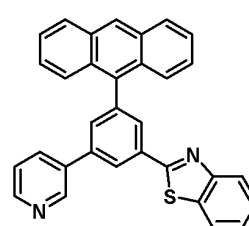
화학식4



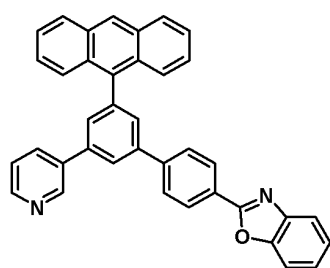
화학식5



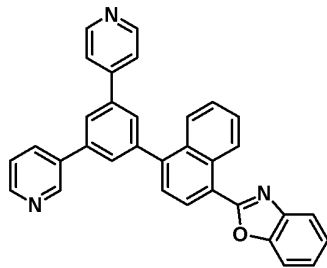
화학식6



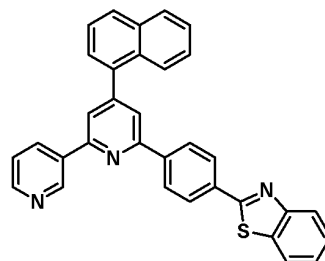
화학식7



화학식8

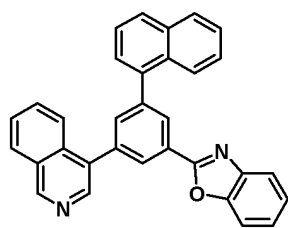


화학식9

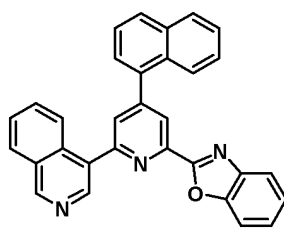


화학식10

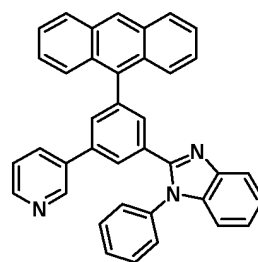
[0073]



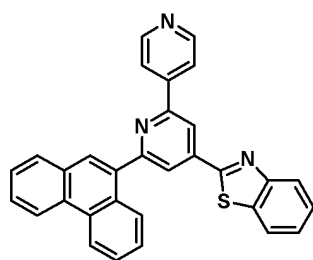
화학식 11



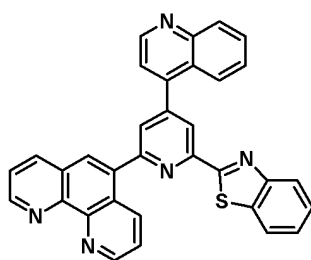
화학식 12



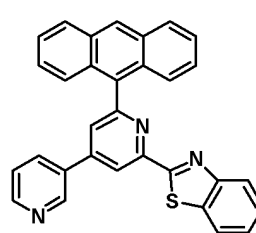
화학식 13



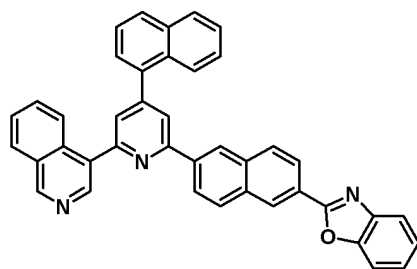
화학식 14



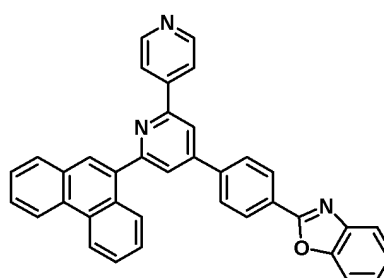
화학식 15



화학식 16

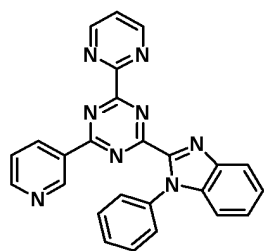


화학식 17

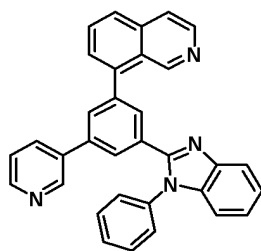


화학식 18

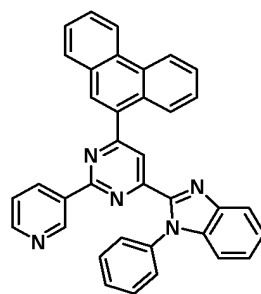
[0074]



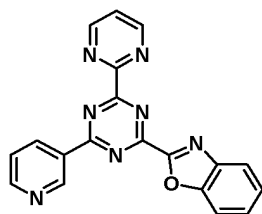
화학식19



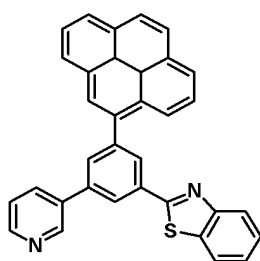
화학식20



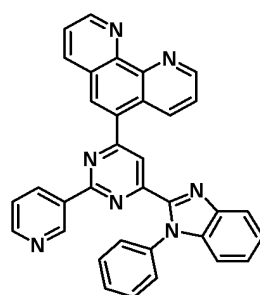
화학식21



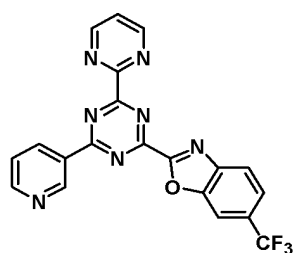
화학식22



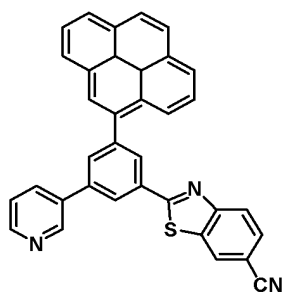
화학식23



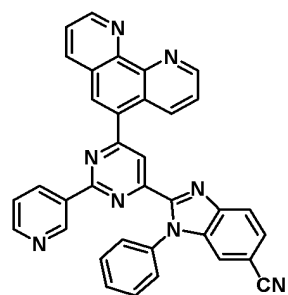
화학식24



화학식25

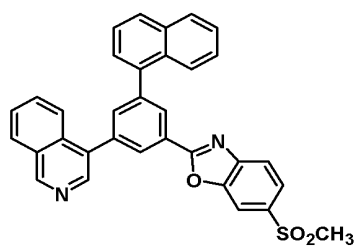


화학식26

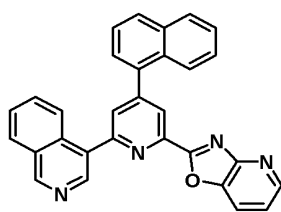


화학식27

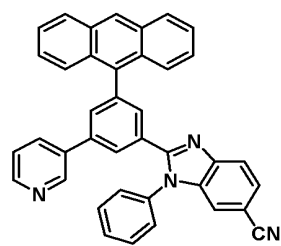
[0075]



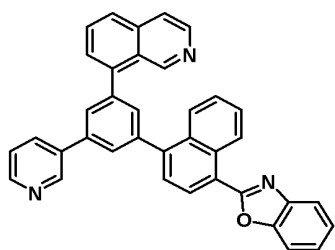
화학식28



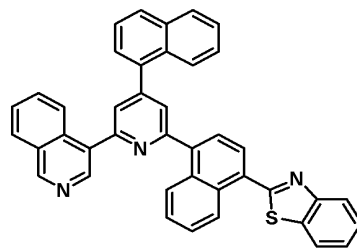
화학식29



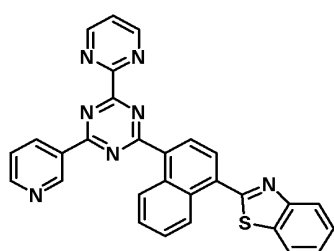
화학식30



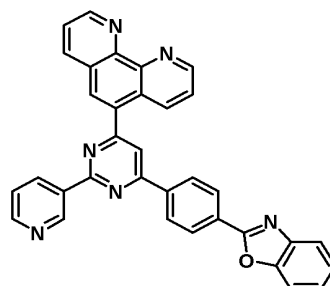
화학식31



화학식32

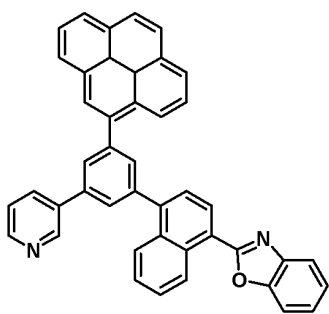


화학식33

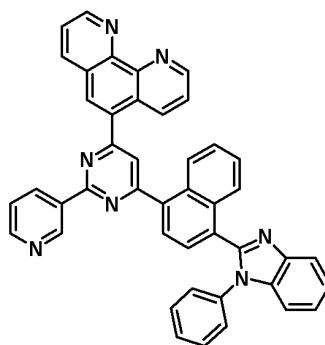


화학식34

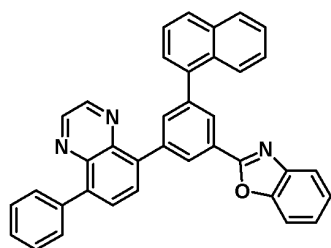
[0076]



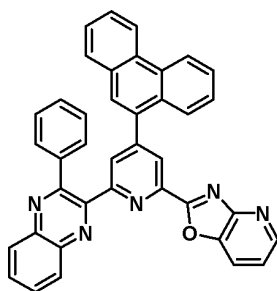
화학식35



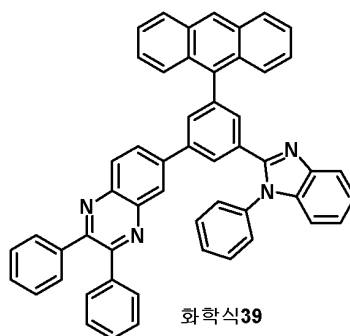
화학식36



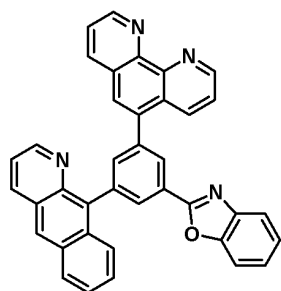
화학식37



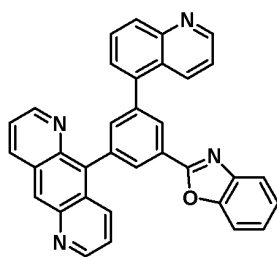
화학식38



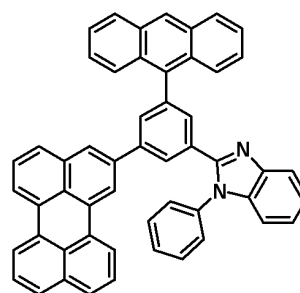
화학식39



화학식40

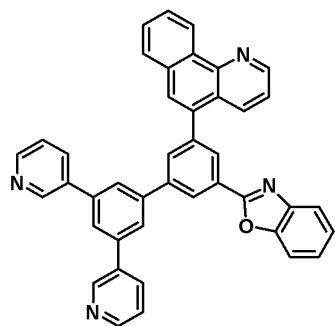


화학식41

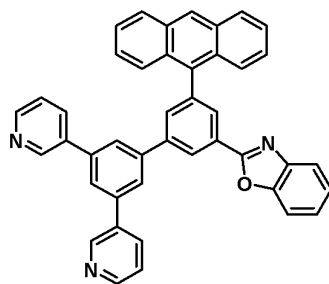


화학식42

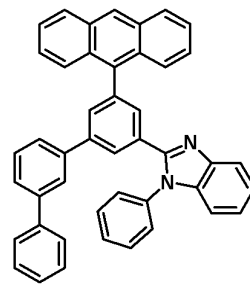
[0077]



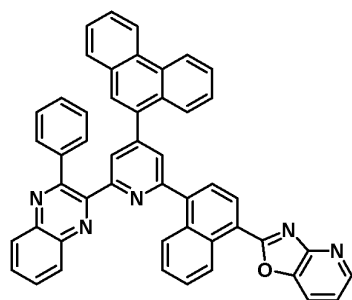
화학식43



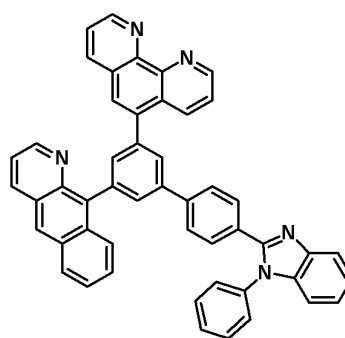
화학식44



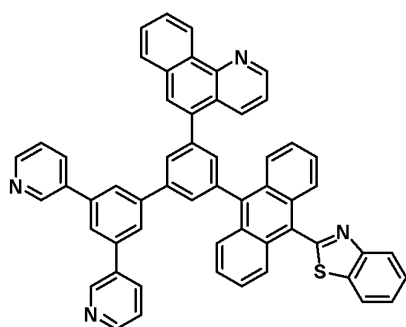
화학식45



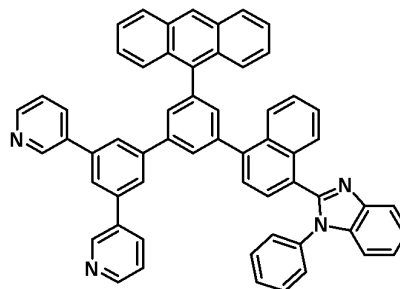
화학식46



화학식47

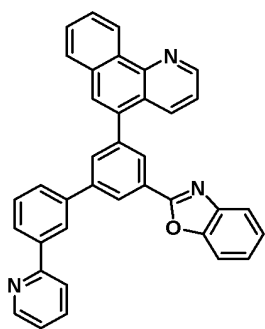


화학식48

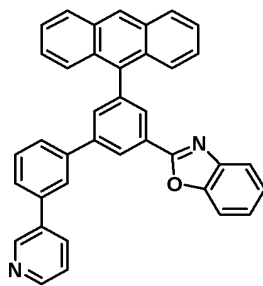


화학식49

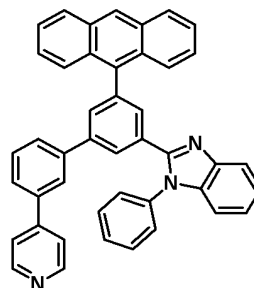
[0078]



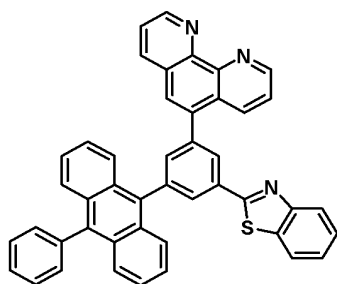
화학식50



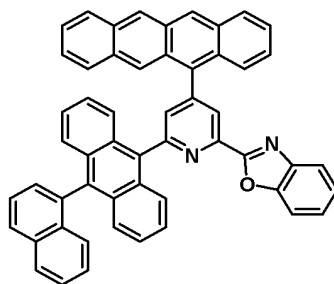
화학식51



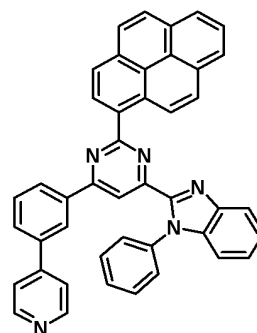
화학식52



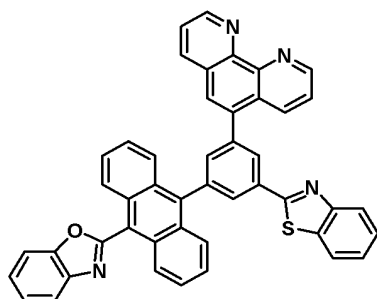
화학식53



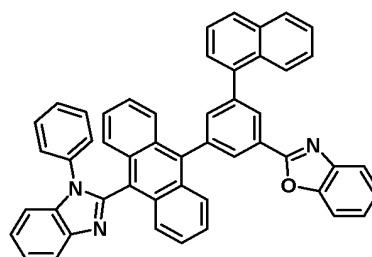
화학식54



화학식55

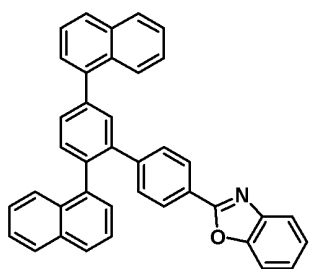


화학식56

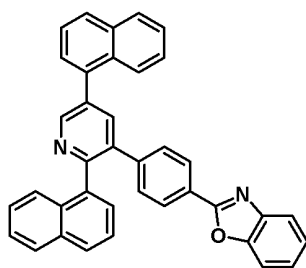


화학식57

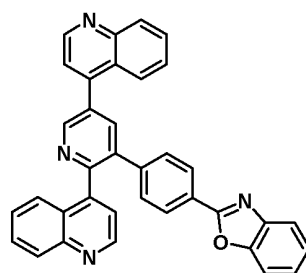
[0079]



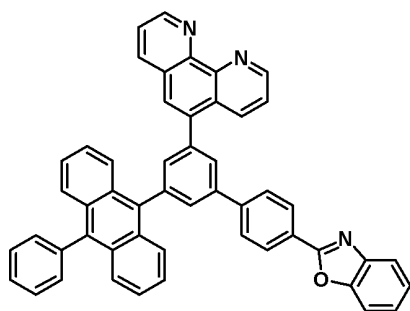
화학식58



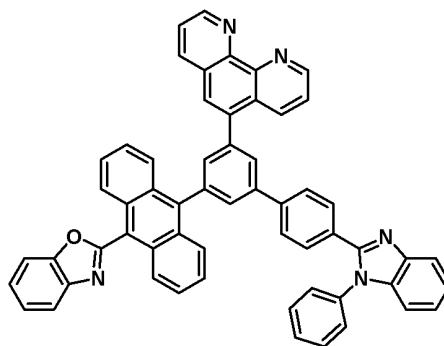
화학식59



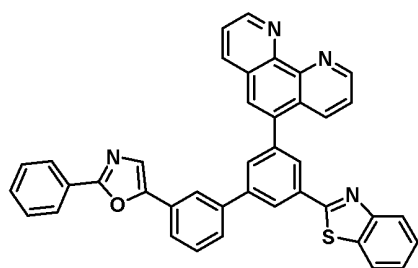
화학식60



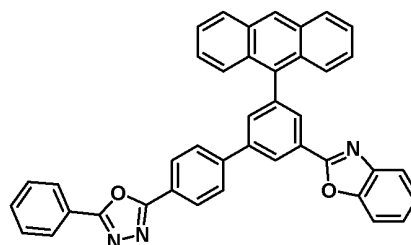
화학식61



화학식62

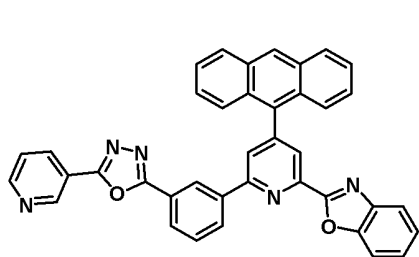


화학식63

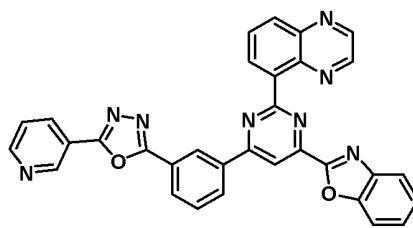


화학식64

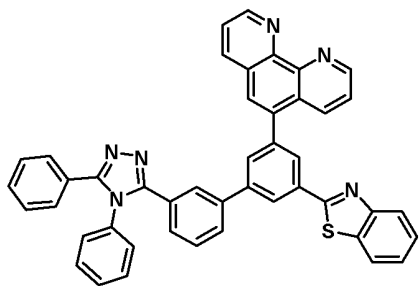
[0080]



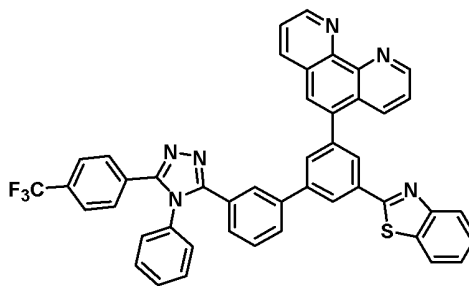
화학식65



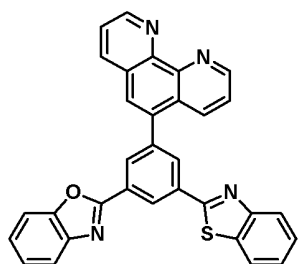
화학식66



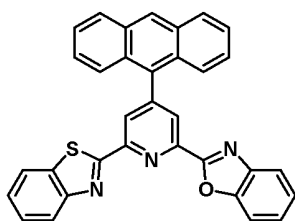
화학식67



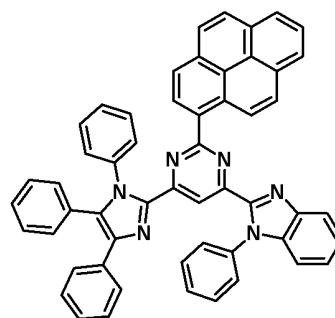
화학식68



화학식69

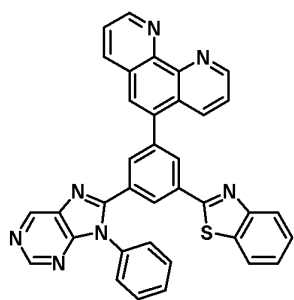


화학식70

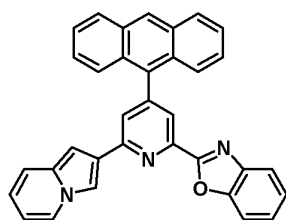


화학식71

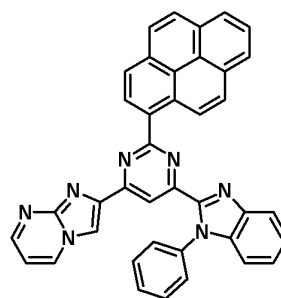
[0081]



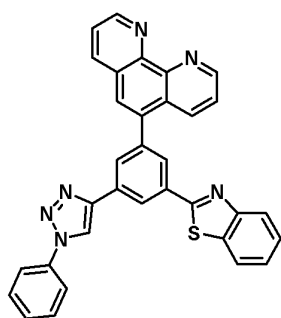
화학식72



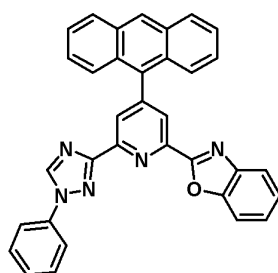
화학식73



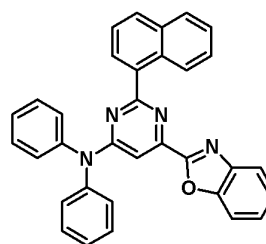
화학식74



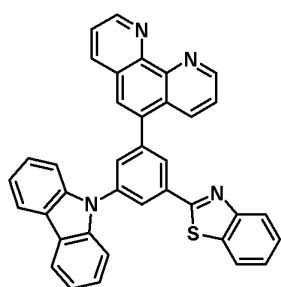
화학식75



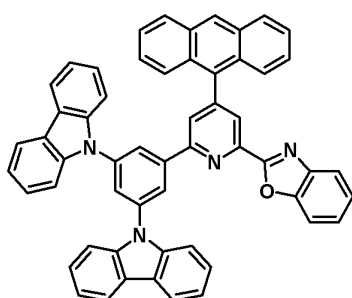
화학식76



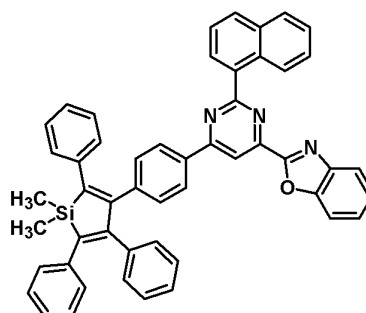
화학식77



화학식78

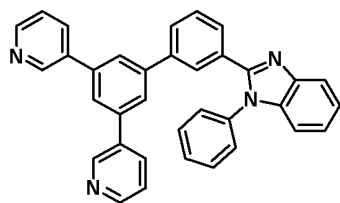


화학식79

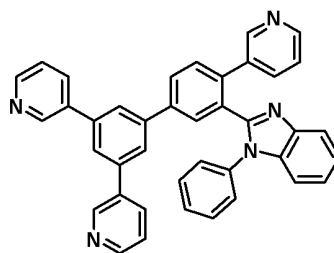


화학식80

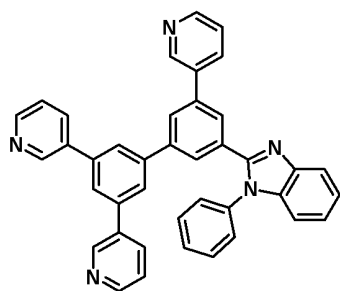
[0082]



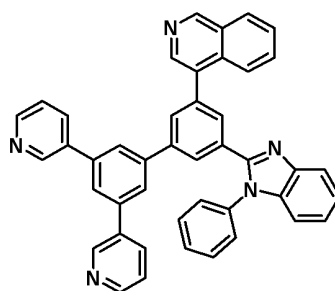
화학식81



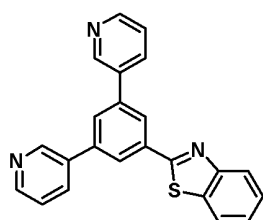
화학식82



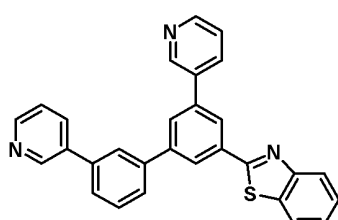
화학식83



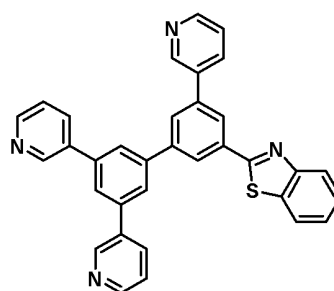
화학식84



화학식85

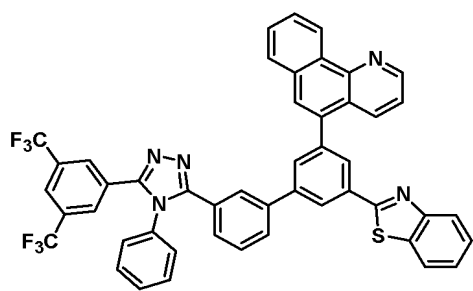


화학식86

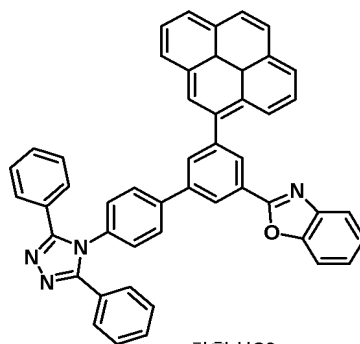


화학식87

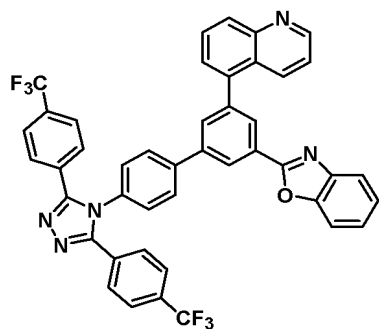
[0083]



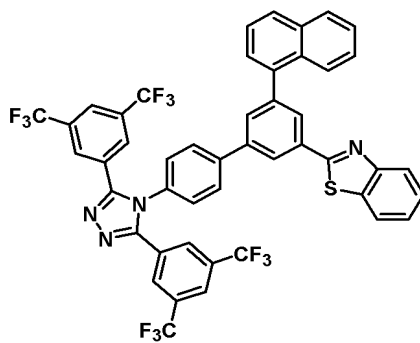
화학식88



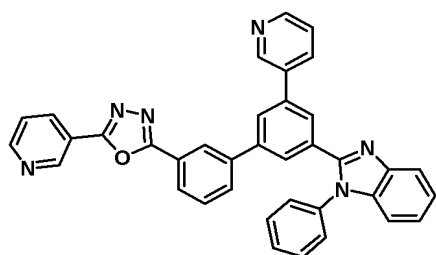
화학식89



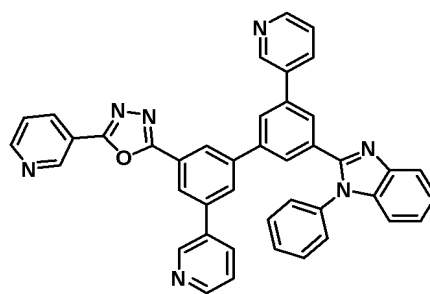
화학식90



화학식91

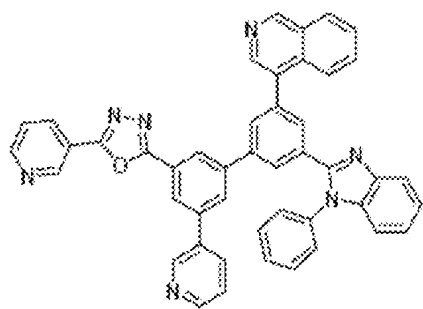


화학식92

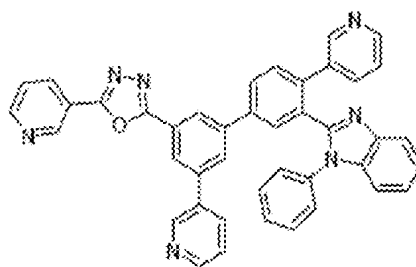


화학식93

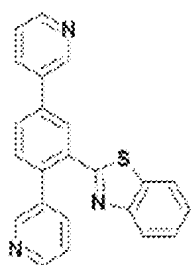
[0084]



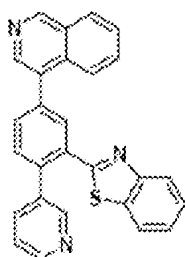
화학식94



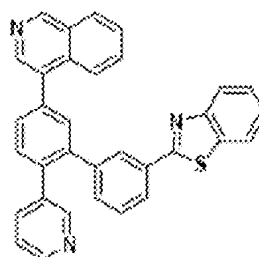
화학식95



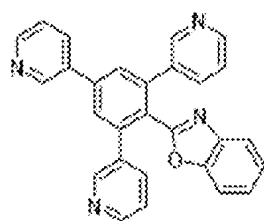
화학식96



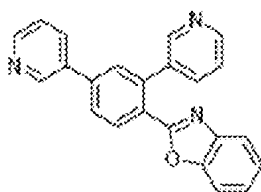
화학식97



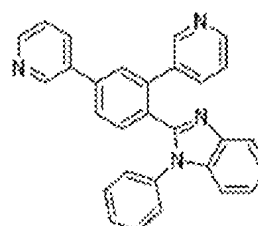
화학식98



화학식99

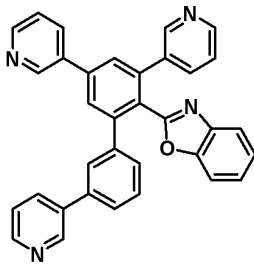


화학식100

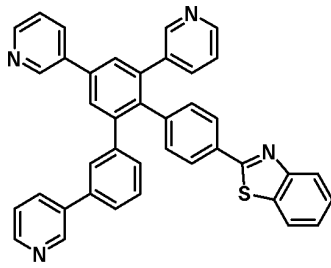


화학식101

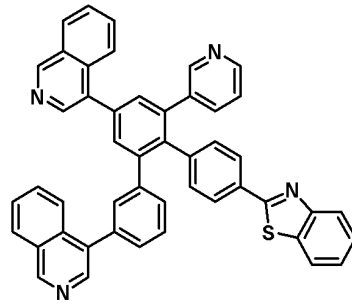
[0085]



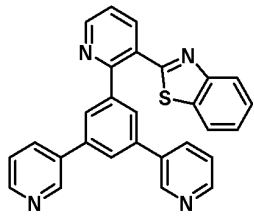
화학식 102



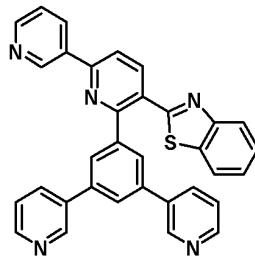
화학식 103



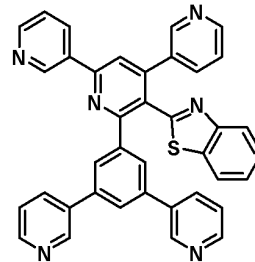
화학식 104



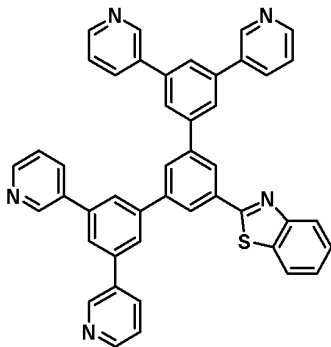
화학식 105



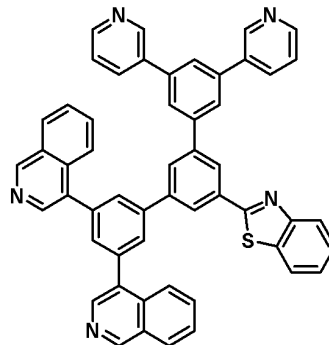
화학식 106



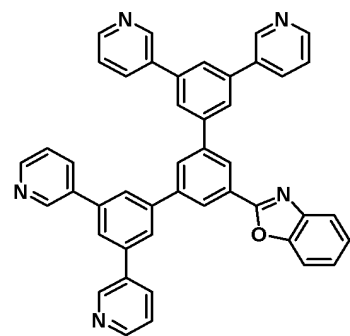
화학식 107



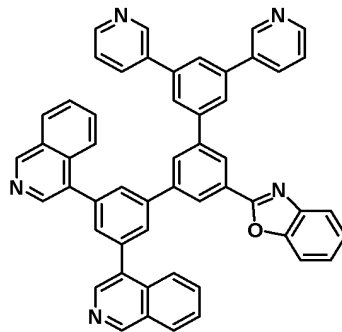
화학식 108



화학식 109



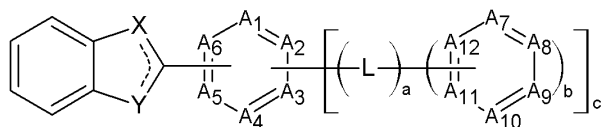
화학식 110



화학식 111

또한, 본 발명의 일 구현에는 아릴기 및 헤테로고리기가 순서대로 반복되는 구조를 가지는 하기 화학식 112 로 표시되는 유기광전소자용 화합물을 제공할 수 있다.

[0089] [화학식112]



[0090]

[0091] (상기 화학식 112 에서 A_1 내지 A_{12} 는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 CR_1 내지 CR_{12} 및 N 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 단, A_7 내지 A_{12} 중에서 선택되는 적어도 어느 하나는 반드시 N 을 포함하고, 이때, 상기 R_1 내지 R_6 중에서 서로 인접한 두 개는 융합링을 형성할 수 있고, R_7 내지 R_{12} 중에서 서로 인접한 두 개는 융합링을 형성할 수 있다.

[0092] X는 O, S, Se, 및 NR_{13} 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, Y 는 CR_{14} 또는 N 이고, 단, X 가 O, S, 및 Se 로 이루어진 군에서 선택되는 것인 경우, Y 는 N 이고,

[0093] L 은 탄소수 6 내지 50 의 치환 또는 비치환된 아릴렌기이고,

[0094] a 는 0 또는 1이고, 단, a 가 0 인 경우, A_1 내지 A_6 는 각각 독립적으로 CR_1 내지 CR_6 이고, a 가 1 인 경우, A_1 내지 A_6 중에서 선택되는 적어도 어느 하나는 반드시 N 이고,

[0095] b 및 c 는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 3 사이의 정수이고,

[0096] 상기 R_1 내지 R_{14} 는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 수소, 할로젠기, 니트릴기, 시아노기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 에스테르기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 알키닐기, 치환 또는 비치환된 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 치환 또는 비치환된 아미노기, BRR' , 또는 $SiRR''$ (R'' 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 이 때, 상기 R, R' , 및 R'' 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이다.)

[0097] 상기 R_1 내지 R_6 중에서 서로 인접한 두 개가 융합링을 형성하거나, R_7 내지 R_{12} 중에서 서로 인접한 두 개가 융합링을 형성하는 경우, A_1 내지 A_6 을 포함하는 융합링, 및 A_7 내지 A_{12} 를 포함하는 융합링은 나프틸, 안트라세닐, 페난트레닐, 파이레닐, 페틸레닐, 피레닐, 플루오레닐 등의 다환식 아릴일 수 있다. 특히, 상기 A_7 내지 A_{12} 중에서 선택되는 적어도 어느 하나가 반드시 N 인 경우라 함은 예를 들어, 상기 다환식 아릴의 하나 또는 하나 이상의 탄소가 N 으로 치환되어 있음을 의미한다.

[0098] 또한, 상기 R_7 내지 R_{12} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 아릴렌기인 경우 발광층으로 매우 유용하게 적용될 수 있다.

[0099] 또한, X 가 O, S, 및 Se 로 이루어진 군에서 선택되는 것인 경우, Y 는 N 인 것으로, 즉, 상기 X 및 Y 중에서 선택된 적어도 어느 하나는 반드시 N 인 것이다. 이 경우, LUMO(Lowest unoccupied molecular orbital) 에너지 준위를 낮추고 분자의 전자친화도를 높여 전자의 주입 및 이동 특성을 향상시킬 수 있다. 따라서, 유기 발광 소자의 구동에 필요한 전압을 감소시킬 수 있으므로, 전력 효율을 증대시키는 효과를 부여할 수 있다.

[0100] 또한, X 및 Y 를 포함하는 기능성 치환체 부분은 화합물에 일정한 강직성을 부여하여 분자간의 상호작용을 증대시킬 수 있다. 이로써, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 높은 유리전이온도를 가지게 되어 열적 안정성을 높여줌으로써 유기 발광 소자의 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

[0101] 또한, L 은 탄소수 6 내지 50 의 치환 또는 비치환된 아릴렌기이다. 보다 구체적으로, 상기 R_7 내지 R_{12} 및 L 의 아릴은 탄소수 6 내지 50 의 아릴인 것으로, 페닐과 같은 단환식 아릴; 또는 나프틸, 안트라세닐, 페난트레닐, 파이레닐, 페틸레닐, 피레닐 등의 다환식 아릴을 사용하여 유기광전소자의 발광층으로 매우 유용하게 사용될 수 있다.

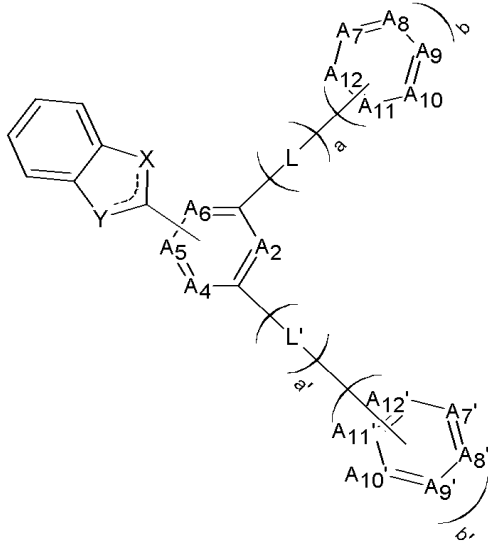
[0102] 상기 연결기인 L 도 분자간의 상호작용을 높여 열적안정성 향상에 도움을 줄 수 있고, 파이프랙길리((-

conjugation length)를 조절하여 가시영역에서 발광 조절을 가능하게 한다. 따라서 본 발명의 유기광전소자용 화합물은 발광층에 유용하게 적용될 수 있다.

[0103] 또한, b 및 c 는 1 내지 3 사이의 정수이고, 이 때, b 및 c 가 2 이상인 경우, 각각의 반복단위는 상이할 수 있다.

[0104] 특히, 상기 c 가 2 인 경우, 두 반복단위는 A_1 내지 A_6 을 포함하는 벤젠링에서 메타위치에 결합되는 것이 좋다. 이에, 상기 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 하기 113 으로 표시되는 것을 사용하는 것이 좋다:

[0105] [화학식113]



[0106]

[0107] (상기 화학식 113 에서,

[0108] A_2 , A_4 내지 A_{12} , 및 A_7' 내지 A_{12}' 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 CR_2 , CR_4 내지 CR_{12} , CR_7' 내지 CR_{12}' 및 N 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 단, A_7 내지 A_{12} 중에서 선택되는 적어도 어느 하나는 반드시 N 을 포함하고, A_7' 내지 A_{12}' 중에서 선택되는 적어도 어느 하나는 반드시 N 을 포함하고, 이 때, 상기 R_4 내지 R_6 중에서 서로 인접한 두 개는 융합링을 형성할 수 있고, 상기 R_7 내지 R_{12} 중에서 서로 인접한 두 개는 융합링을 형성할 수 있고, 상기 R_7' 내지 R_{12}' 중에서 서로 인접한 두 개는 융합링을 형성할 수 있고,

[0109] X 는 O , S , Se , 및 NR_{13} 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, Y 는 CR_{14} 또는 N 이고, 단, X 가 O , S , 및 Se 로 이루어진 군에서 선택되는 것인 경우, Y 는 N 이고,

[0110] L 및 L' 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 50 의 치환 또는 비치환된 아릴렌기이고,

[0111] a 및 a' 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 또는 1 이고, 단, a 및 a' 이 각각 독립적으로 0 인 경우, A_2 , A_4 내지 A_6 는 각각 독립적으로 CR_2 , CR_4 내지 CR_6 이고, a 및 a' 이 각각 독립적으로 1 인 경우, A_2 , A_4 내지 A_6 중에서 선택되는 적어도 어느 하나는 반드시 N 이고,

[0112] b 및 b' 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 3 사이의 정수이고,

[0113] 상기 R_2 , R_4 내지 R_{14} , R_7' 내지 R_{12}' 는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 수소, 할로젠기, 니트릴기, 시아노기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 에스테르기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 사이클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기, 치환 또는 비치환된 아미노기, BRR' , 및 $SiRR''$ R'' 로 이루어진 군에서 선택되는 것이고, 이 때, 상기 R , R' , 및 R'' 은 서로 같거나 다른 것

으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이다.)

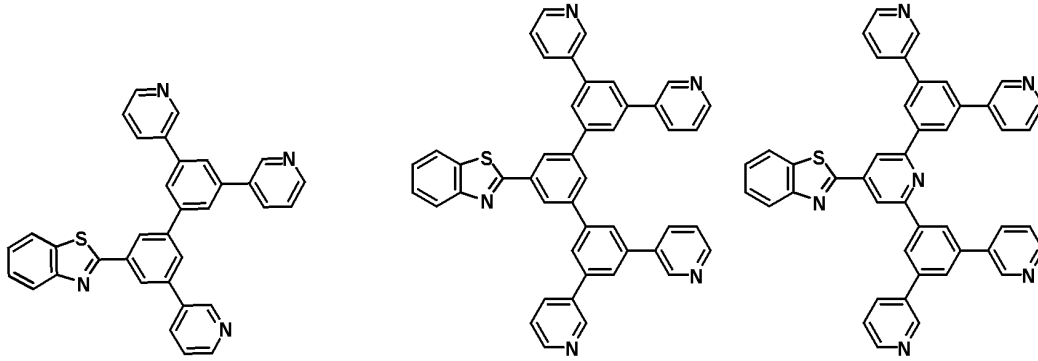
- [0114] 이 때, 상기 R_4 내지 R_6 중에서 서로 인접한 두 개는 융합링을 형성할 수 있고, 상기 R_7 내지 R_{12} 중에서 서로 인접한 두 개는 융합링을 형성할 수 있고, 상기 R_7' 내지 R_{12}' 중에서 서로 인접한 두 개는 융합링을 형성할 수 있다. 상기 융합링은 나프틸, 안트라세닐, 페난트레닐, 파이레닐, 페틸레닐, 피레닐, 플루오레닐 등의 다환식 아릴일 수 있다. 특히, 상기 A_7 내지 A_{12} 중에서 선택되는 적어도 어느 하나가 반드시 N 인 경우 및 A_7' 내지 A_{12}' 중에서 선택되는 적어도 어느 하나가 반드시 N 인 경우라 함은 예를 들어, 상기 다환식 아릴의 하나 또는 하나 이상의 탄소가 N 으로 치환되어 있음을 의미한다.
- [0115] L 및 L'은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 50 의 치환 또는 비치환된 아릴렌기이다. 보다 구체적으로, 상기 아릴은 탄소수 6 내지 50 의 아릴인 것으로, 페닐과 같은 단환식 아릴; 또는 나프틸, 안트라세닐, 페난트레닐, 파이레닐, 페틸레닐, 피레닐 등의 다환식 아릴을 사용하여 유기광전소자의 발광층으로 매우 유용하게 사용될 수 있다.
- [0116] b 및 b' 은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 3 사이의 정수이고, 이 때, b 및 b' 이 2 이상인 경우, 각각의 반복단위는 상이할 수 있다.
- [0117] 한편, 상기 화학식 112 의 R_1 내지 R_{14} , 및 화학식 113 의 R_2 , R_4 내지 R_{14} , R_7' 내지 R_{12}' 이 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 아릴아민기인 경우, 상기 아릴은 탄소수 6 내지 50 의 아릴인 것이다. 특히, 페닐, 비페닐, 터페닐, 스티렌 등의 단환식 아릴; 또는 나프틸, 안트라세닐, 페난트레닐, 파이레닐, 페틸레닐, 피레닐 등의 다환식 아릴을 사용하여 유기광전소자의 발광층으로 매우 유용하게 사용될 수 있다.
- [0118] 또한, 상기 화학식 112 의 R_1 내지 R_{14} , 및 화학식 113 의 R_2 , R_4 내지 R_{14} , R_7' 내지 R_{12}' 이 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기인 경우에도 상기 아릴의 정의는 상기한 바와 동일하다. 단, 하나의 고리내에 N, O, S, 또는 P 의 헤테로 원자를 1 내지 3 개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.
- [0119] 또한, 상기 화학식 112 의 R_1 내지 R_{14} , 및 화학식 113 의 R_2 , R_4 내지 R_{14} , R_7' 내지 R_{12}' 이 치환 또는 비치환된 아릴아민기인 경우, 상기 아릴아민은 디페닐 아민기, 디나프틸 아민기, 디비페닐 아민기, 페닐 나프틸 아민기, 페닐 디페닐 아민기, 디톨릴 아민기, 페닐 톨릴 아민기, 카바줄기, 및 트리페닐 아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 사용하여 전자 및 정공의 이동 특성에 균형을 부여할 수 있다.
- [0120] 또한, 상기 화학식 112 의 R_1 내지 R_{14} , 및 화학식 113 의 R_2 , R_4 내지 R_{14} , R_7' 내지 R_{12}' 이 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기인 경우, 상기 헤테로고리기는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸릴기, 티아졸릴기, 옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 트리아졸릴기, 피리디닐기, 피라다진기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 아크리딜기, 이미다조피리디닐기, 및 이미다조피리미디닐기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 사용할 수 있다.
- [0121] 특히, 상기 이미다졸기 또는 트리아졸기의 질소(N) 원소에 결합되는 치환기는 치환 또는 비치환된 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 터셔리-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기 등과 같은 알킬기; 치환 또는 비치환된 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기 등과 같은 사이클로알킬기; 치환 또는 비치환된 페닐기, 비페닐기, 나프틸기 등과 같은 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 보다 바람직하게 사용할 수 있다. 이 때, 상기 헤테로고리기는 피리딜기, 비피리딜기, 퀴놀릴기, 이소퀴놀릴기 등과 같은 헤테로아릴기인 것이 바람직하다.
- [0122] 또한, 상기 화학식 112 의 R_1 내지 R_{12} 중에서 선택되는 어느 하나 및 화학식 113 의 R_2 , R_4 내지 R_{12} , R_7' 내지 R_{12}' 중에서 선택되는 어느 하나는 아민 치환된 알킬기, 아민 치환된 사이클로알킬기, 아민 치환된 아릴기, 및 아민 치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환되어 정공 주입층 및 정공 수송층 물질로 유용하게 사용할 수 있다.
- [0123] 또한, 상기 화학식 112 의 R_1 내지 R_{12} 중에서 선택되는 다른 어느 하나 및 화학식 113 의 R_2 , R_4 내지 R_{12} , R_7' 내지 R_{12}' 중에서 선택되는 다른 어느 하나는 니트릴기, 니트로기, 아미드기, 카르보닐기, 및 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환되어 전자 주입 또는 수송능력을 강화시켜 전자 주입층 또는 전자 수송층 물질로 유용하게 사용할 수 있다. 따라서, 정공전달 및 전자전달 능력을 동시에 향상시

킬 수 있다.

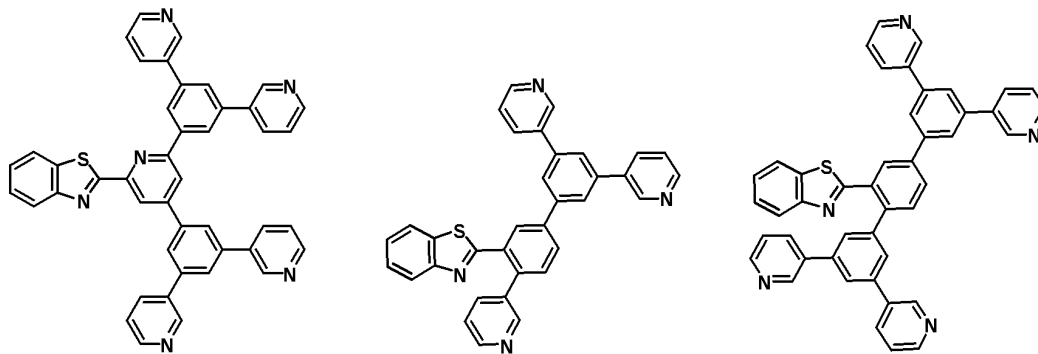
[0124] 상술한 상기 화학식 112 과 화학식 113 으로 표현되는 신규 화합물에 치환될 수 있는 다양한 치환기는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물의 근본적인 물성을 변화시키지는 않는다.

[0125] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 보다 구체적으로, 하기 화학식 114 내지 화학식 183으로 표시되는 화합물을 사용할 수 있다. 그러나 본 발명의 화합물이 이에 한정되는 것은 아니다.

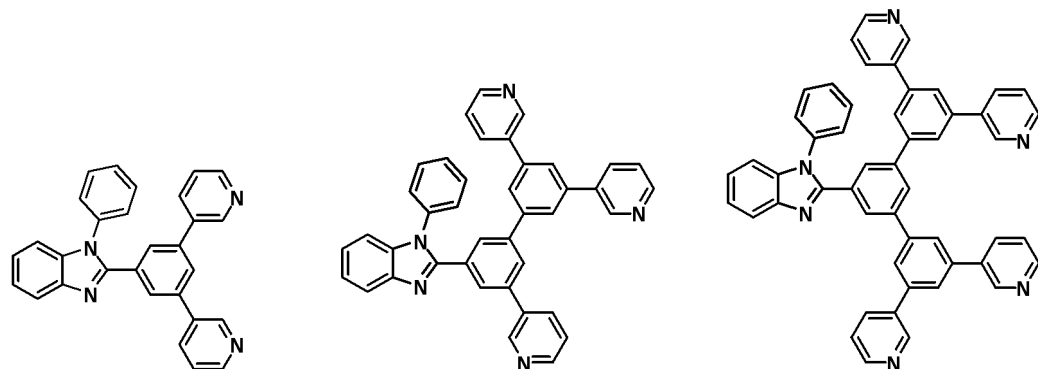
[0126] [화학식 114] [화학식 115] [화학식 116]



[0127] [화학식 117] [화학식 118] [화학식 119]



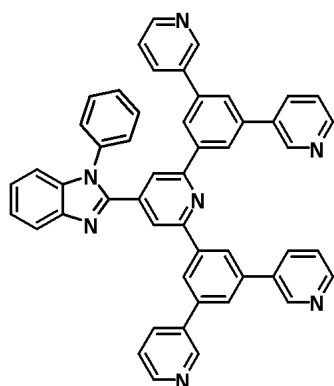
[0129] [화학식 120] [화학식 121] [화학식 122]



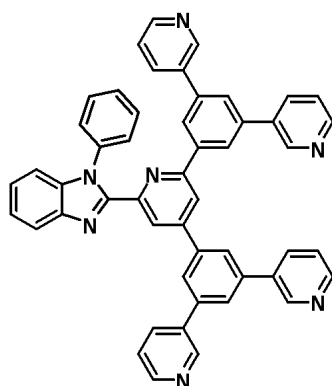
[0131]

[0132]

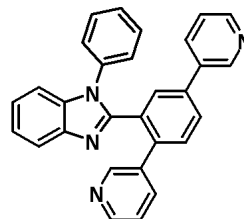
[화학식 123]



[화학식 124]



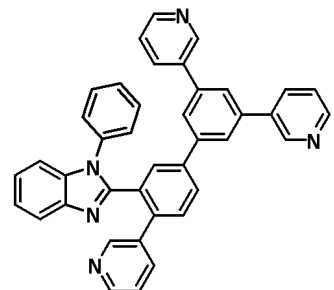
[화학식 125]



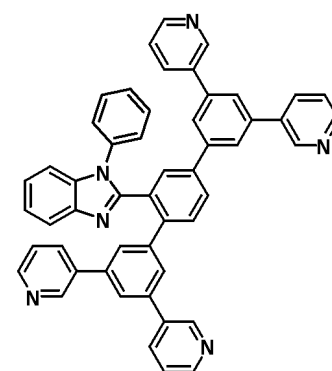
[0133]

[0134]

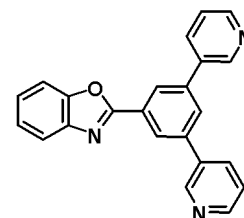
[화학식 126]



[화학식 127]



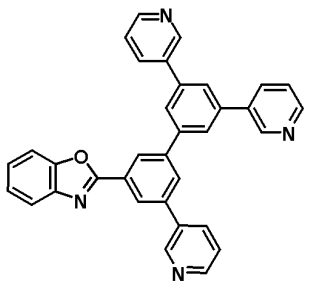
[화학식 128]



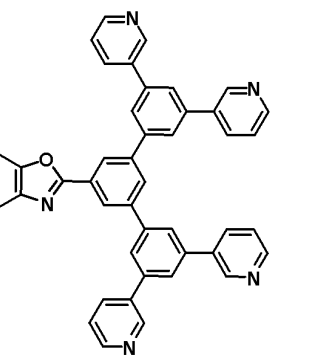
[0135]

[0136]

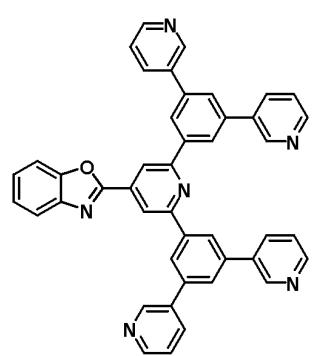
[화학식 129]



[화학식 130]



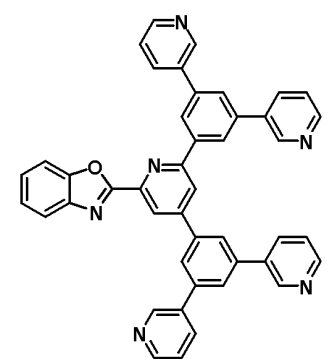
[화학식 131]



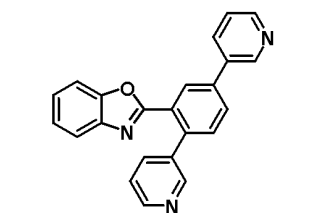
[0137]

[0138]

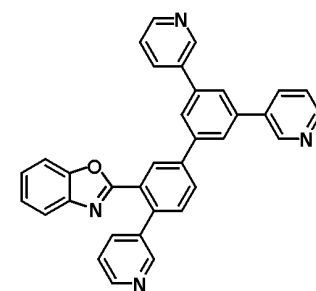
[화학식 132]



[화학식 133]



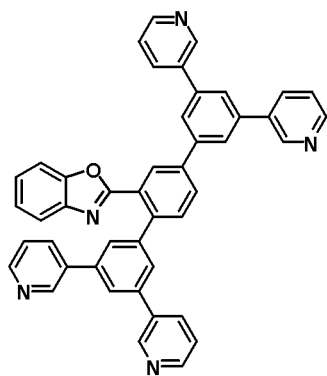
[화학식 134]



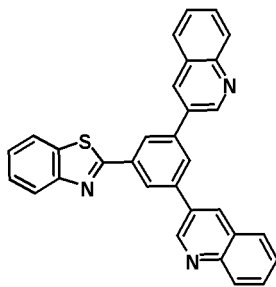
[0139]

[0140]

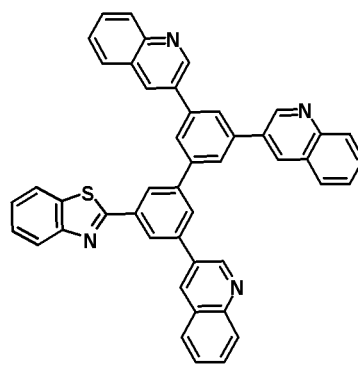
[화학식 135]



[화학식 136]



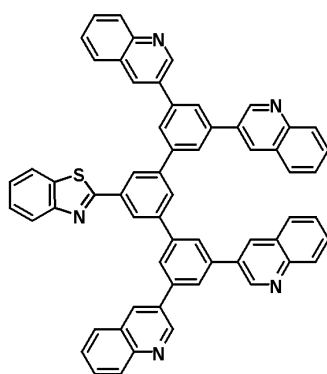
[화학식 137]



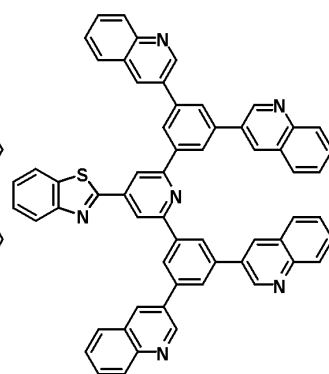
[0141]

[0142]

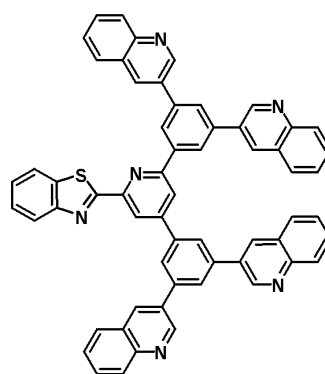
[화학식 138]



[화학식 139]



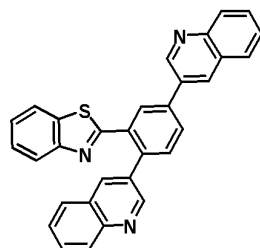
[화학식 140]



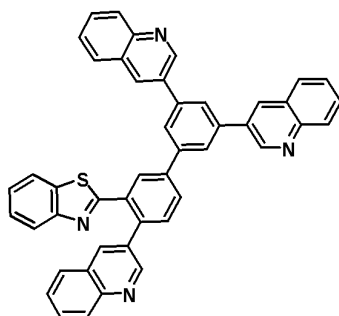
[0143]

[0144]

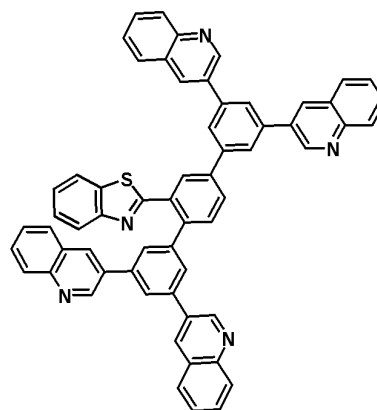
[화학식 141]



[화학식 142]



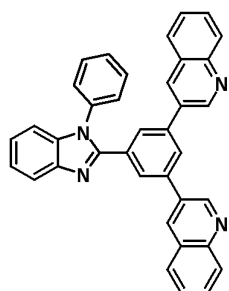
[화학식 143]



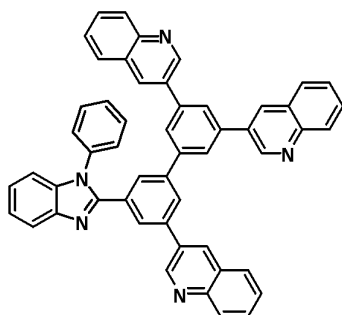
[0145]

[0146]

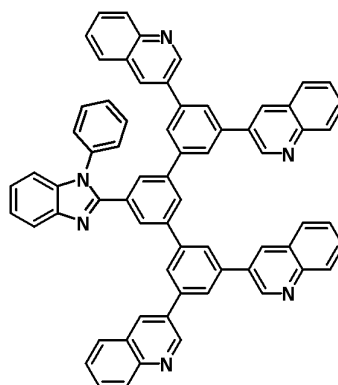
[화학식 144]



[화학식 145]



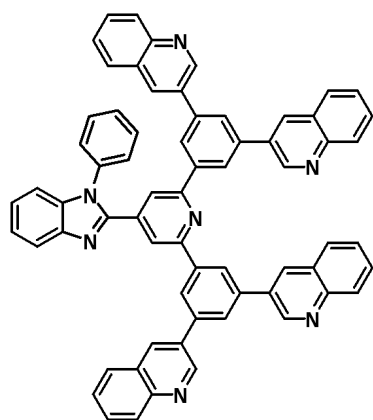
[화학식 146]



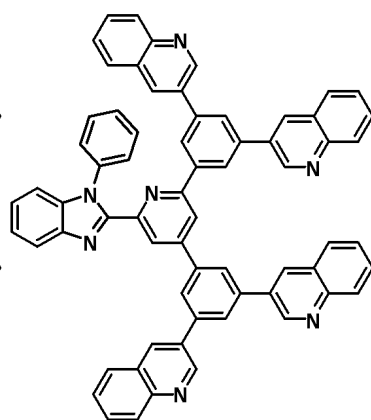
[0147]

[0148]

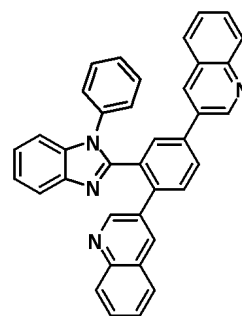
[화학식 147]



[화학식 148]



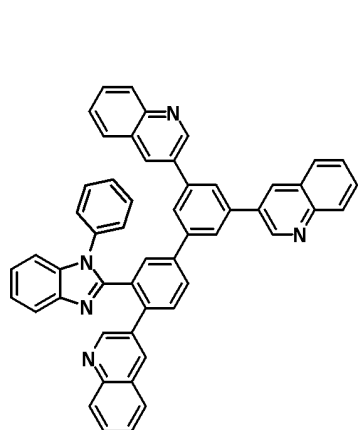
[화학식 149]



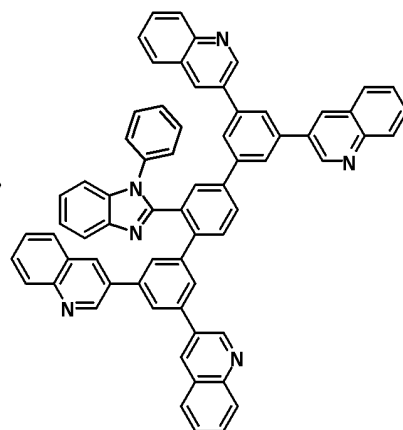
[0149]

[0150]

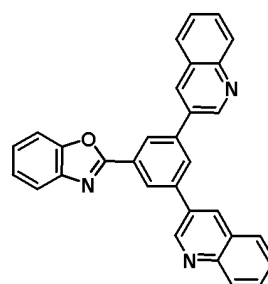
[화학식 150]



[화학식 151]



[화학식 152]



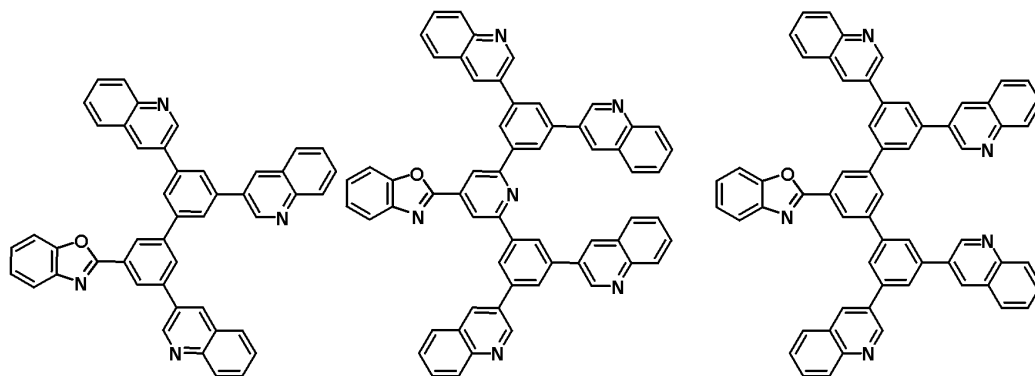
[0151]

[0152]

[화학식 153]

[화학식 154]

[화학식 155]



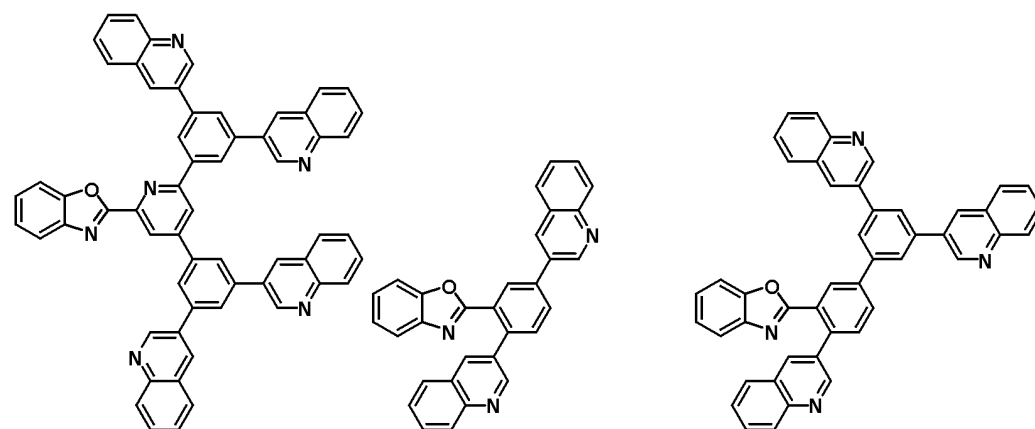
[0153]

[0154]

[화학식 156]

[화학식 157]

[화학식 158]



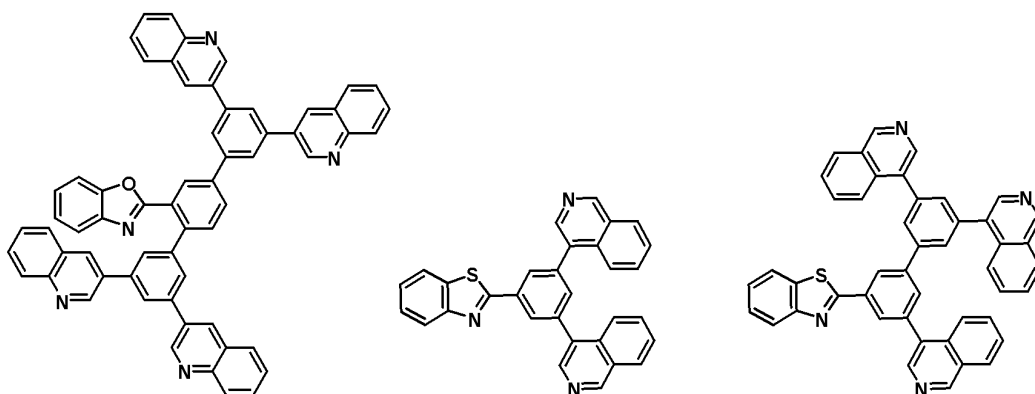
[0155]

[0156]

[화학식 159]

[화학식 160]

[화학식 161]



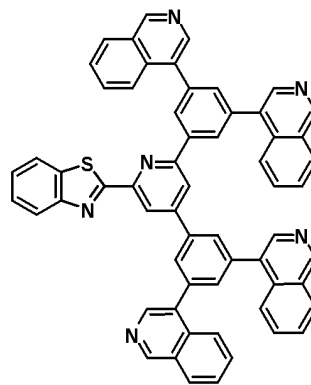
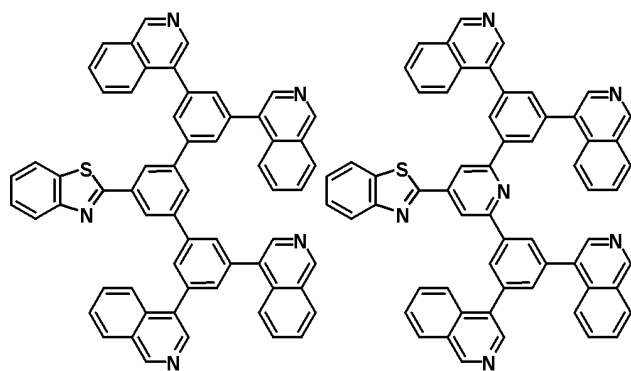
[0157]

[0158]

[화학식 162]

[화학식 163]

[화학식 164]



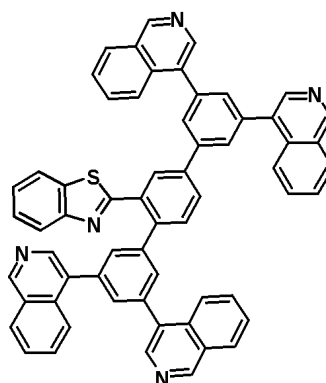
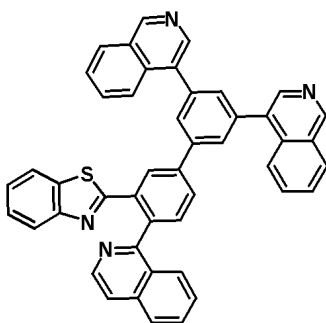
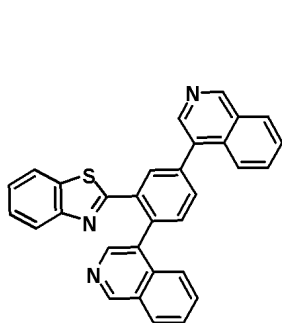
[0159]

[0160]

[화학식 165]

[화학식 166]

[화학식 167]



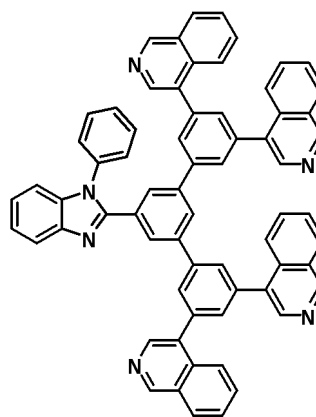
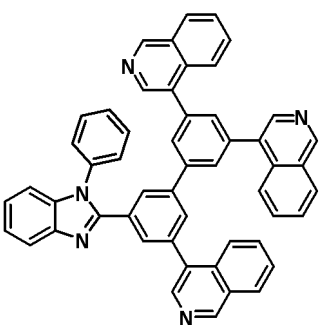
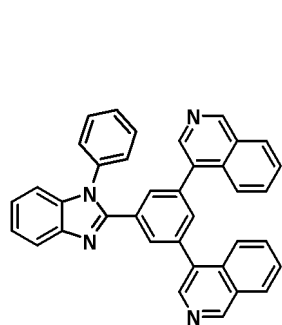
[0161]

[0162]

[화학식 168]

[화학식 169]

[화학식 170]



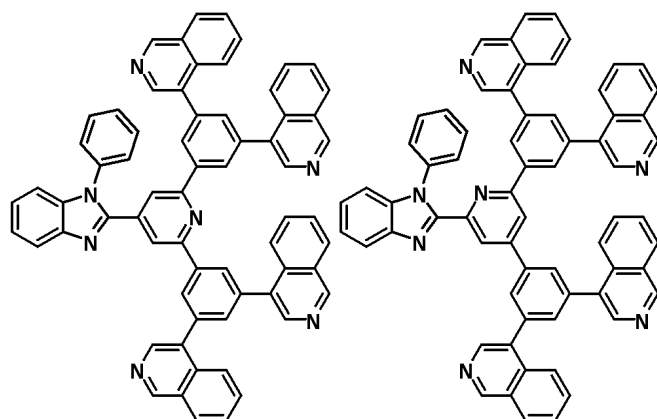
[0163]

[0164]

[화학식 171]

[화학식 172]

[화학식 173]



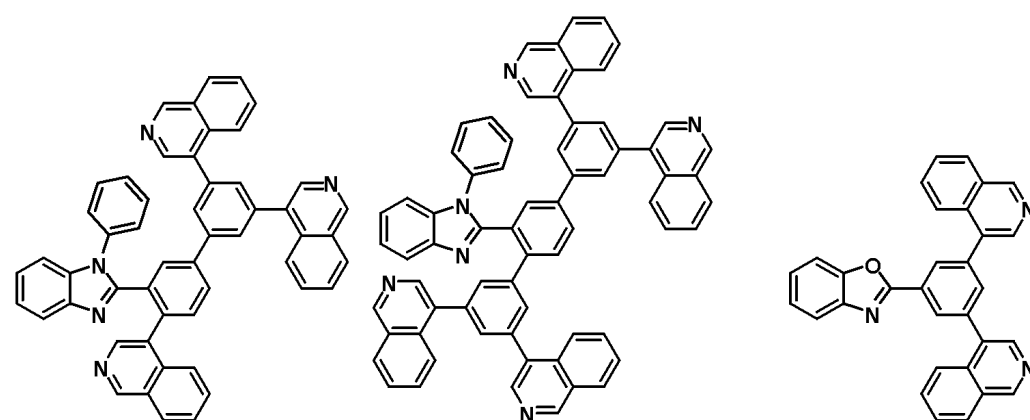
[0165]

[0166]

[화학식 174]

[화학식 175]

[화학식 176]



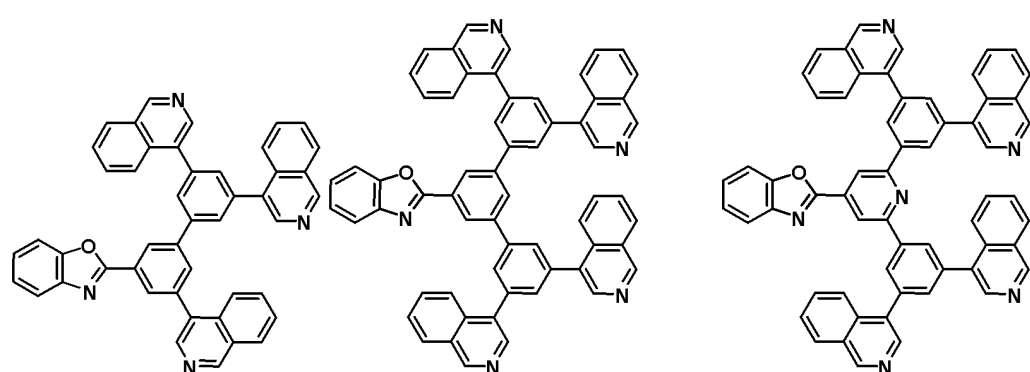
[0167]

[0168]

[화학식 177]

[화학식 178]

[화학식 179]



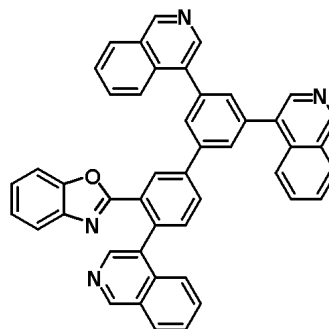
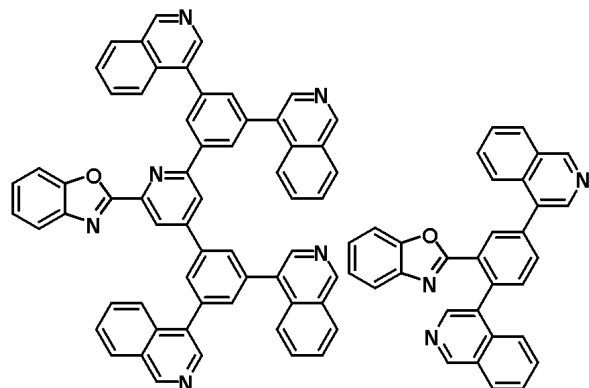
[0169]

[0170]

[화학식 180]

[화학식 181]

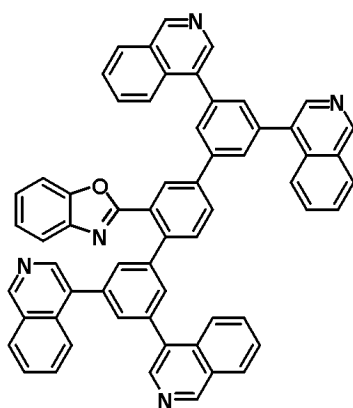
[화학식 182]



[0171]

[0172]

[화학식 183]



[0173]

[0174]

상기와 같은 화합물을 포함하는 유기 광전 소자용 화합물은 정공주입, 정공수송, 발광, 또는 전자 주입 및/또는 수송역할을 할 수 있으며, 적절한 도펀트와 함께 발광 호스트로서의 역할도 할 수 있다. 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 광전 소자용 화합물은 유기 박막층에 사용되어 유기 광전 소자의 수명 특성과 효율 특성 향상을 위한 열적 안정성을 향상시키며, 구동전압을 낮출 수 있다.

[0175]

상기와 같은 화합물을 포함하는 유기광전소자용 화합물은 정공과 전자의 수송능력이 우수하여, 적절한 도펀트와 함께 발광 호스트로서의 역할도 할 수 있다. 특히, 상기 도펀트로는 환원성 도펀트인 것이 좋은 바, 보다 구체적으로 상기 환원성 도펀트는 알칼리 금속, 알칼리토류 금속, 희토류 금속, 알칼리 금속의 산화물, 알칼리 금속의 할로겐화물, 알칼리 금속의 유기 착체, 알칼리토류 금속의 산화물, 알칼리토류 금속의 할로겐화물, 알칼리토류 금속의 유기 착체, 희토류 금속의 산화물, 희토류 금속의 할로겐화물, 및 희토류 금속의 유기 착체로 이루어진 군에서 선택되는 것을 사용할 수 있다.

[0176]

상기와 같은 신규한 유기 광전 소자용 화합물은 상기 화합물을 포함하는 호스트 재료 또는 전하수송재료로 매우 유용하게 사용할 수 있다. 이 때, 유기 광전 소자라 함은 유기 발광 소자, 유기 태양 전지, 유기 트랜지스터, 그리고 유기 메모리 소자 등을 의미한다.

[0177]

유기 태양 전지의 경우에는 본 발명의 신규 화합물이 전극이나 전극 버퍼층에 포함되어 양자 효율을 증가시키며, 유기 트랜지스터의 경우에는 게이트, 소스-드레인 전극 등에서 전극 물질로 사용될 수 있다.

[0178]

이하에서는 유기 발광 소자에 대하여 구체적으로 설명한다. 본 발명의 다른 일 구현예에 따르면, 양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기 박막층을 포함하는 유기 광전 소자에 있어서, 상기 유기 박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기한 유기 광전 소자용 화합물을 포함하는 유기 광전 소자를 제공한다.

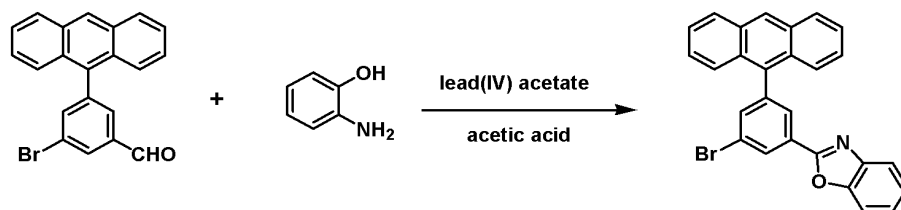
[0179]

본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자는, 다양한 에너지 밴드 갭을 갖는 화합물을 형성하여, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 주입층, 전자 수송층 등에 요구되는 다양한 조건을 충족시킬 수 있는 신규 화합물을 포함한다. 따라서, 구동 전압이 낮고 발광 효율이 높은 소자를 구현할 수 있다.

- [0180] 따라서, 상기 유기박막층은 발광층, 전자수송층, 전자주입층, 정공수송층, 정공주입층, 및 정공저지층으로 이루어진 군에서 선택되는 층을 포함할 수 있는 바, 이 중에서 적어도 어느 하나의 층은 본 발명에 따른 유기 광전 소자용 화합물을 포함한다.
- [0181] 도 1 내지 도 5 는 본 발명의 일 구현예에 따라 제조된 신규한 유기 광전 소자용 화합물을 이용한 유기 발광 소자의 단면도이다.
- [0182] 도 1 내지 도 5 를 참조하면, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자 (100, 200, 300, 400, 및 500)는 양극 (120), 음극 (110), 및 이 양극과 음극 사이에 개재된 적어도 1 층의 유기박막층 (105)을 포함하는 구조를 갖는다.
- [0183] 상기 양극(120)은 양극 물질을 포함하며, 이 양극 물질로는 통상 유기 박막층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금 등과 같은 금속 및 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO) 등과 같은 금속 산화물; ZnO 와 Al 또는 SnO₂ 와 Sb 와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](polyethylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤, 폴리아닐린 등과 같은 전도성 고분자 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0184] 상기 음극(110)은 음극 물질을 포함하여, 이 음극 물질로는 통상 유기박막층으로 전자주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 및 이들의 합금; LiF/Al, Liq/Al, LiO₂/Al, LiF/Ca, LiF/Al, BaF₂/Ca 등과 같은 다층 구조 물질 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0185] 먼저 도 1 을 참조하면, 도 1 은 유기 박막층 (105)으로서 발광층 (130)만이 존재하는 유기광전소자 (100)를 나타낸 것으로, 상기 유기박막층(105)은 발광층(130)만으로 존재할 수 있다.
- [0186] 도 2 를 참조하면, 도 2 는 유기박막층 (105)으로서 전자수송층을 포함하는 발광층 (230)과 정공수송층 (140)이 존재하는 2 층형 유기광전소자 (200)를 나타낸 것으로서, 유기박막층 (105)은 발광층 (230) 및 정공 수송층 (140)을 포함하는 2 층형일 수 있다. 이 경우 발광층 (130)은 전자 수송층의 기능을 하며, 정공 수송층 (140)은 ITO 와 같은 투명전극과의 접합성 및 정공수송성을 향상시키는 기능을 한다.
- [0187] 도 3 을 참조하면, 도 3 은 유기박막층 (105)으로서 전자수송층 (150), 발광층 (130), 및 정공수송층 (140)이 존재하는 3 층형 유기광전소자 (300)를 나타낸 것으로서, 상기 유기박막층 (105)에서 발광층 (130)은 독립된 형태로 되어 있고, 전자수송성이나 정공수송성이 우수한 막 (전자수송층 (150) 및 정공수송층 (140))을 별도의 층으로 쌓은 형태를 나타내고 있다.
- [0188] 도 4 를 참조하면, 도 4 는 유기박막층 (105)으로서 전자주입층 (160), 발광층 (130), 정공수송층 (140), 및 정공주입층 (170)이 존재하는 4 층형 유기광전소자 (400)를 나타낸 것으로서, 상기 정공주입층 (170)은 양극으로 사용되는 ITO 와의 접합성을 향상시킬 수 있다.
- [0189] 도 5 를 참조하면, 도 5 는 유기박막층 (105)으로서 전자주입층 (160), 전자수송층 (150), 발광층 (130), 정공수송층 (140), 및 정공주입층 (170)과 같은 각기 다른 기능을 하는 5 개의 층이 존재하는 5 층형 유기광전소자 (500)를 나타낸 것으로서, 상기 유기광전소자 (500)는 전자주입층 (160)을 별도로 형성하여 저전압화에 효과적이다.
- [0190] 상기에서 설명한 유기 발광 소자는, 기판에 양극을 형성한 후, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금, 이온도금 등과 같은 건식성막법; 또는 스핀코팅(spin coating), 침지법(dipping), 유동코팅법(flow coating) 등과 같은 습식성막법 등으로 유기박막층을 형성한 후, 그 위에 음극을 형성하여 제조할 수 있다.
- [0191] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기 광전 소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.
- [0192] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

[0193] **합성예 1 : 2-(3-(anthracen-9-yl)-5-bromophenyl)benzo[d]oxazole의 합성**

[0194] [반응식 1]

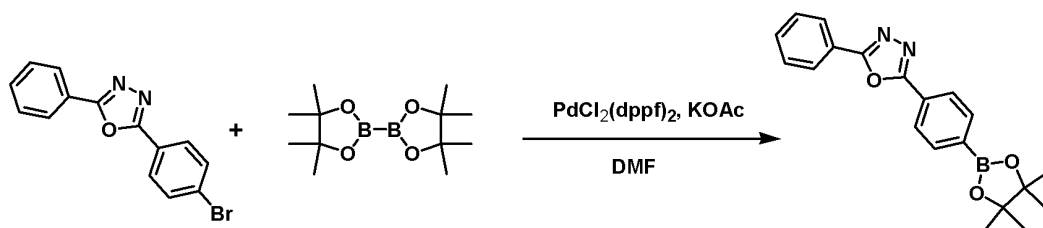


[0195]

[0196] 3-(안트라센-9-일)-5-브로모벤즈알데하이드 (3-(anthracen-9-yl)-5-bromobenzaldehyde) 10 g (27.7 mmol) 및 2-아미노페놀 (2-aminophenol) 3.6 g (33.2 mmol)을 아세트산 (acetic acid) 100 ml 에 녹인 후 상온에서 30 분 동안 교반하였다. 여기에 아세트산 납(IV) (lead(IV) acetate) 14.7 g (33.2 mmol)을 투입한 후 50 ℃에서 1 시간 동안 교반하였다. 수득한 반응물을 물에 붓고 에틸아세테이트로 추출한 후 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 4.5 g (Y=33 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0197] **합성예 2 : 2-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-5-phenyl-1,3,4-oxadiazole의 합성**

[0198] [반응식 2]

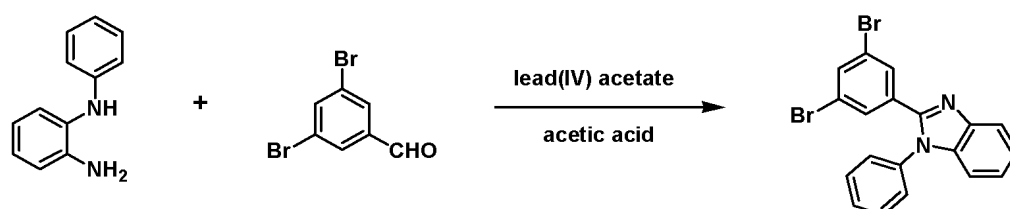


[0199]

[0200] 2-(4-브로모페닐)-5-페닐-1,3,4-옥사디아졸 (2-(4-bromophenyl)-5-phenyl-1,3,4-oxadiazole) 5 g (16.6 mmol), 비스(피나콜라토)디보론 (bis(pinacolato)diboron) 5.1 g (19.9 mmol), [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로-팔라듐(II)과 디클로로메탄의 복합체 (a complex [1,1'-Bis(diphenylphosphino)ferrocene]dichloro-palladium(II) with dichloromethane) 0.41 g (3 mol%), 포타슘아세테이트 (potassium acetate) 4.9 g (49.8 mmol)을 디메틸포름아미드 (dimethylformamide, DMF) 100 ml 에 녹인 후 80 ℃에서 12 시간 동안 반응시켰다. 수득한 반응물을 에틸아세테이트로 추출한 후 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 3.1 g (Y=53 %)의 옅은 노란색 고체를 얻었다.

[0201] **합성예 3 : 2-(3,5-dibromophenyl)-1-phenyl-1H-benzo[d]imidazole의 합성**

[0202] [반응식 3]



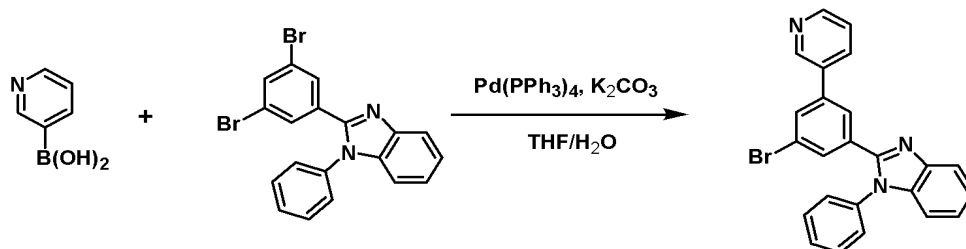
[0203]

[0204] 3,5-디브로모벤즈알데하이드 (3,5-dibromobenzaldehyde) 20 g (75.8 mmol)과 N-페닐-o-페닐렌디아민 (N-phenyl-o-phenylenediamine) 16.8 g (90.9 mmol)을 아세트산 150 mL 에 녹인 후 상온에서 30 분 동안 교반하였다. 여기에 아세트산 납(IV) (lead(IV) acetate) 37 g (83.4 mmol)을 투입한 후 50 ℃에서 1 시간 동안 교반하였다. 수득한 반응물을 물에 붓고 에틸아세테이트로 추출한 후 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한

후 건조시켜 9.5 g (Y=29 %)의 노란색 고체를 얻었다.

합성예 4 : 2-(3-bromo-5-(pyridin-3-yl)phenyl)-1-phenyl-1H-benzo[d]imidazole의 합성

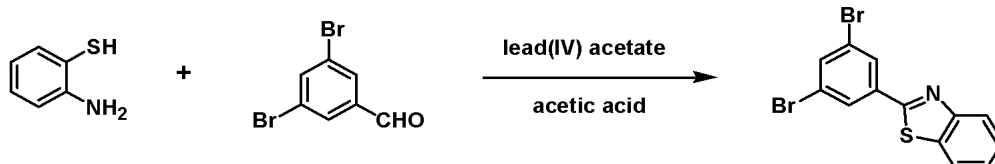
[반응식 4]



합성예 3 에서 제조된 2-(3,5-디브로모페닐)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸 (2-(3,5-dibromophenyl)-1-phenyl-1H-benzo[d]imidazole) 9.4 g (22.0 mmol), 피리딘-3-보로닉 에시드 (pyridine-3-boronic acid) 2.7 g (22.0 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 0.76 g (3 mol%), 및 탄산칼륨 (potassium carbonate) 6.1 g (44.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란/물 (tetrahydrofuran/H₂O=2/1의 부피비) 300 ml 에 녹인 후 80 ℃에서 12 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물을 에틸아세테이트로 추출한 후, 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 5.15 g (Y=54 %)의 노란색 고체를 얻었다.

합성예 5 : 2-(3,5-dibromophenyl)benzo[d]thiazole의 합성

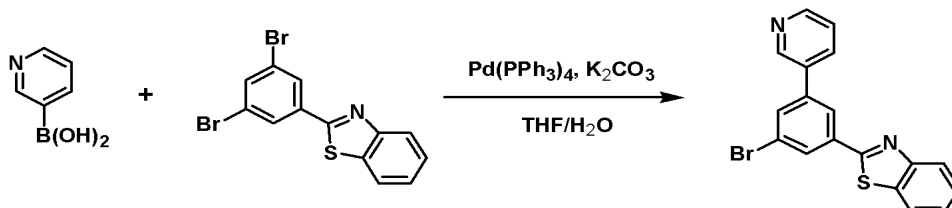
[반응식 5]



3, 5-디브로모벤즈알데하이드 (3,5-dibromobenzaldehyde) 5.03 g (19.1 mmol)과 2-아미노사이오페놀 (2-aminothiophenol) 3.1 mL (28.6 mmol)을 아세트산 60 mL 에 녹인 후 상온에서 30 분 동안 교반하였다. 여기에 아세트산 납(IV) (lead(IV) acetate) 9.78 g (21.0 mmol)을 투입한 후 50 ℃에서 1 시간 동안 교반하였다. 수득한 반응물을 물에 붓고 에틸아세테이트로 추출한 후 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 4.74 g (Y=67 %)의 흰색 고체를 얻었다.

합성예 6 : 2-(3-bromo-5-(pyridin-3-yl)phenyl)benzo[d]thiazole의 합성

[반응식 6]

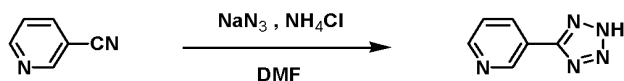


합성예 5 에서 제조된 2-(3,5-디브로모페닐)벤조[d]티아졸 (2-(3,5-dibromophenyl)benzo[d]thiazole) 4.74 g (12.8 mmol), 피리딘-3-보로닉 에시드 (pyridine-3-boronic acid) 1.89 g (15.4 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 0.44 g (3 mol%), 및 탄산칼륨 (potassium

carbonate) 5.31 g (38.4 mmol)을 테트라하이드로퓨란/물 (tetrahydrofuran/H₂O=4/1의 부피비) 50 ml 에 녹인 후 80 ℃에서 12 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물을 에틸아세테이트로 추출한 후, 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 2.54 g (Y=54 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0217] **합성예 7 : 3-(2H-tetrazol-5-yl)pyridine의 합성**

[0218] [반응식 7]

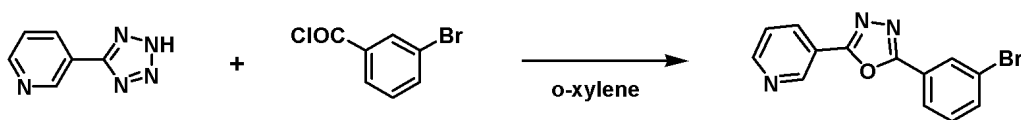


[0219]

[0220] 3-피디딘카보니트릴 (3-pyridinecarbonitrile) 30 g (288 mmol), 소듐 아지드(sodium azide, NaN₃) 28.1 g (432 mmol), 염화암모늄 (ammonium chloride) 23.1 g (432 mmol)을 DMF 200 mL 에 녹인 후 100 ℃에서 24 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물을 물에 붓고 염산으로 중화한 후 여과하여 19.6 g (Y=46 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0221] **합성예 8 : 3-(5-(3-bromophenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl)pyridine의 합성**

[0222] [반응식 8]

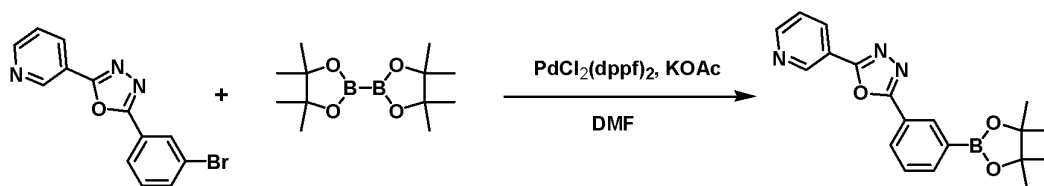


[0223]

[0224] 합성예 7 에서 제조된 3-(2H-테트라졸-5-일)피리딘 (3-(2H-tetrazol-5-yl)pyridine) 16.8 g (114 mmol)과 3-브로모벤조일클로라이드 (3-bromobenzoylchloride) 25 g (114 mmol)을 o-자이렌 (o-xylene) 180 mL 에 녹인 후 150 ℃에서 8 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물은 감압여과하고 메탄올로 세정하여 30 g (Y=87 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0225] **합성예 9 : 3-(5-(3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl)pyridine의 합성**

[0226] [반응식 9]



[0227]

[0228] 합성예 8 에서 제조된 3-(5-(3-브로모페닐)-1,3,4-옥사디아졸-2-일)피리딘 (3-(5-(3-bromophenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl)pyridine) 12 g (40 mmol), 비스(피나콜라토)디보론 (bis(pinacolato)diboron) 12.2 g (48 mmol), [1,1'-비스(디페닐포스포노)페로센]디클로로-팔라듐(II)과 디클로로메탄의 복합체 (a complex [1,1'-Bis(diphenylphosphino)ferrocene]dichloro-palladium(II) with dichloromethane) 0.98 g (3 mol%), 포타슘아세테이트 (potassium acetate) 5.9 g (60 mmol)을 디메틸포름아미드 (dimethylformamide, DMF) 250 ml 에 녹인 후 80 ℃에서 12 시간 동안 반응시켰다. 수득한 반응물을 에틸아세테이트로 추출한 후 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 10 g (Y=71 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0229] **합성예 10 : 2-(2,5-dibromophenyl)benzo[d]thiazole의 합성**

[0230] [반응식 10]

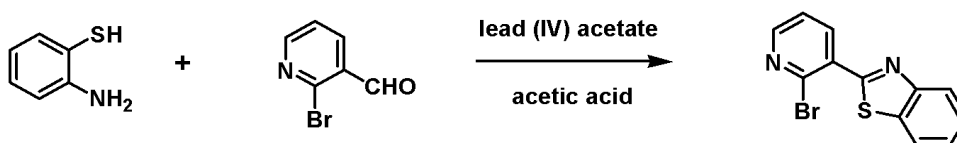


[0231]

[0232] 2,5-디브로모벤즈알데하이드 (2,5-dibromobenzaldehyde) 5 g (18.5 mmol), 2-아미노티오펜올 (2-aminothiophenol) 3 mL (27.7 mmol), 요오드 (Iodine) 2.35 g (9.25 mmol)을 DMF 100 mL 에 녹인 후 100 °C에서 1 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물은 칼럼으로 정제하여 4.64 g (Y=68 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0233] **합성예 11 : 2-(2-bromopyridin-3-yl)benzo[d]thiazole의 합성**

[0234] [반응식 11]

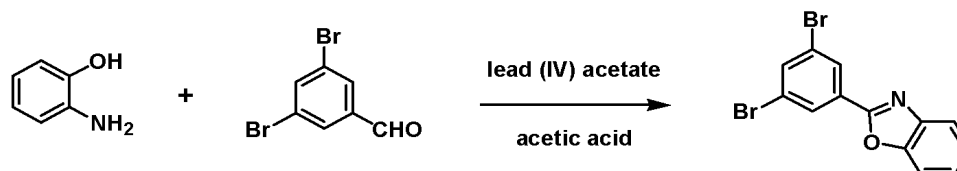


[0235]

[0236] 2-브로모-3-피리딘카보알데하이드 (2-bromo-3-pyridinecarboxaldehyde) 6.58 g (34.0 mmol)과 2-아미노티오펜올 (2-aminothiophenol) 5.5 mL (50.9 mmol)을 아세트산 150 mL 에 녹인 후 상온에서 30 분 동안 교반하였다. 여기에 아세트산 납(IV) (lead(IV) acetate) 19.0 g (40.8 mmol)을 투입한 후 50 °C에서 1 시간 동안 교반하였다. 수득한 반응물을 물에 붓고 에틸아세테이트로 추출한 후 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 5.55 g (Y=55 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0237] **합성예 12 : 2-(3,5-dibromophenyl)benzo[d]oxazole**

[0238] [반응식 12]

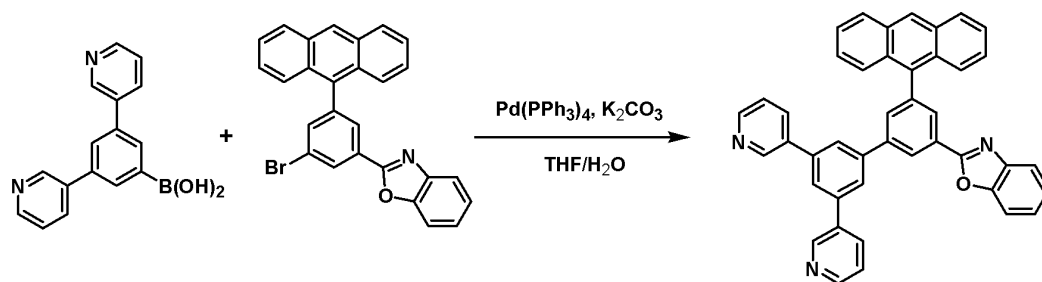


[0239]

[0240] 3,5-디브로모벤즈알데하이드 (3,5-dibromobenzaldehyde) 10 g (37.9 mmol)과 2-아미노페놀 (2-aminophenol) 5 g (45.5 mmol)을 아세트산 200 mL 에 녹인 후 상온에서 30 분 동안 교반하였다. 여기에 아세트산 납(IV) (lead(IV) acetate) 20.2 g (45.5 mmol)을 투입한 후 50 °C에서 1 시간 동안 교반하였다. 수득한 반응물을 물에 붓고 에틸아세테이트로 추출한 후 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 5.7 g (Y=42 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0241] **실시예 1 : 화학식 44의 화합물 합성**

[0242] [반응식 13]

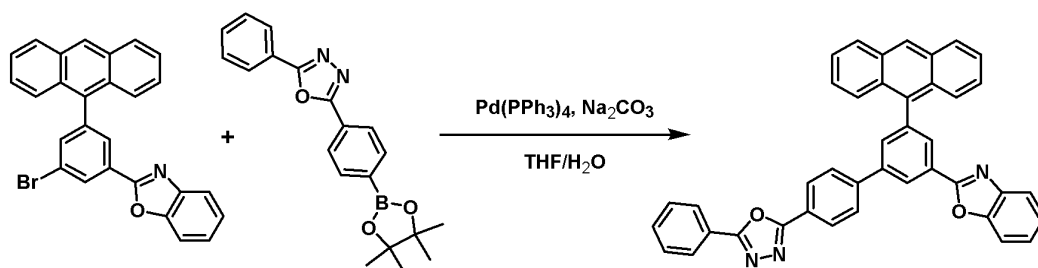


[0243]

[0244] 3,5-디-(3-피리딘일)-벤젠보로닉 에시드 (3,5-di-(3-pyridinyl)-benzene boronic acid) 5 g(18.1 mmol), 합성예 1에서 제조된 2-(3-(안트라센-9-일)-5-브로모페닐)벤조[d]옥사졸 (2-(3-(anthracen-9-yl)-5-bromophenyl)benzo[d]oxazole) 8.16 g(18.1 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 0.63 g(3 mol%), 및 탄산칼륨(potassium carbonate) 5 g(36.2 mmol)을 테트라하이드로퓨란/물 (tetrahydrofuran/ H_2O =2/1의 부피비) 450 ml 에 녹인 후 80 °C에서 12 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물을 에틸아세테이트로 추출한 후, 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 6 g (Y=55 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0245] 실시예 2 : 화학식 64의 화합물 합성

[0246] [반응식 14]

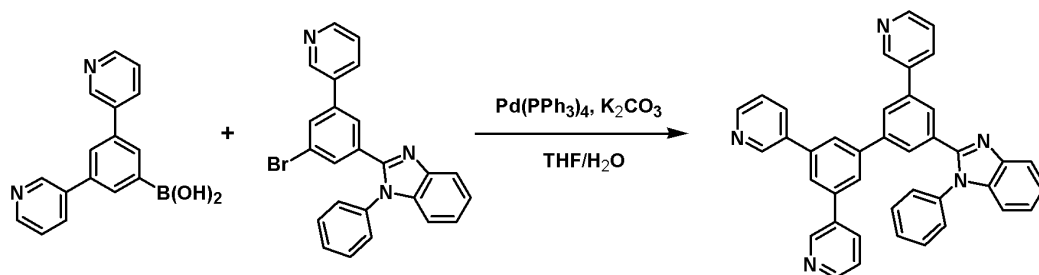


[0247]

[0248] 합성예 2 에서 제조된 2-(4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)-5-페닐-1,3,4-옥사디아졸 (2-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-5-phenyl-1,3,4-oxadiazole) 2.32 g (6.7 mmol), 합성예 1 에서 제조된 2-(3-(안트라센-9-일)-5-브로모페닐)벤조[d]옥사졸 (2-(3-(anthracen-9-yl)-5-bromophenyl)benzo[d]oxazole) 2.5 g (5.5 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 0.19 g (3 mol%), 및 탄산나트륨 (sodium carbonate) 1.2 g (11.1 mmol)을 테트라하이드로퓨란/물 (tetrahydrofuran/ H_2O =2/1의 부피비) 90 ml에 녹인 후 80 °C에서 12 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물을 에틸아세테이트로 추출한 후, 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 2.6 g (Y=79 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0249] 실시예 3 : 화학식 83의 화합물 합성

[0250] [반응식 15]

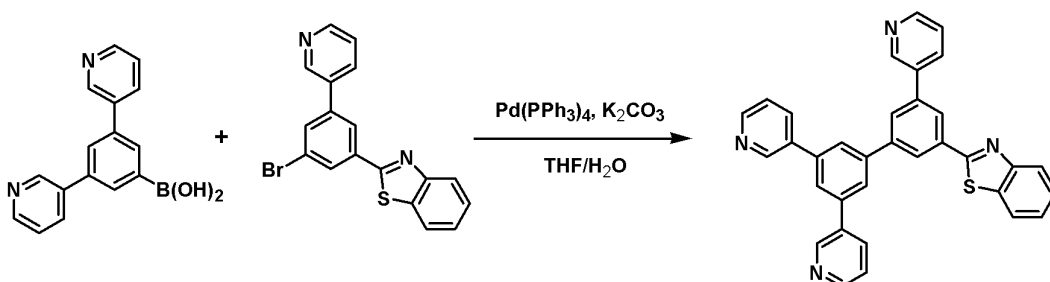


[0251]

[0252] 3,5-디-(3-피리딘일)-벤젠보로닉 에시드 (3,5-di-(3-pyridinyl)-benzene boronic acid) 4.14 g (15.0 mmol), 합성예 4 에서 제조된 2-(3-브로모-5-(피리딘-3-일)페닐)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸 (2-(3-bromo-5-(pyridin-3-yl)phenyl)-1-phenyl-1H-benzo[d]imidazole) 6.4 g (15.0 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 0.52 g (3 mol%), 및 탄산칼륨 (potassium carbonate) 4.15 g (30.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란/물 (tetrahydrofuran/H₂O=2/1의 부피비) 300 ml 에 녹인 후 80 °C에서 12 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물을 에틸아세테이트로 추출한 후, 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 1.2 g (Y=13 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0253] 실시예 4 : 화학식 87의 화합물 합성

[0254] [반응식 16]

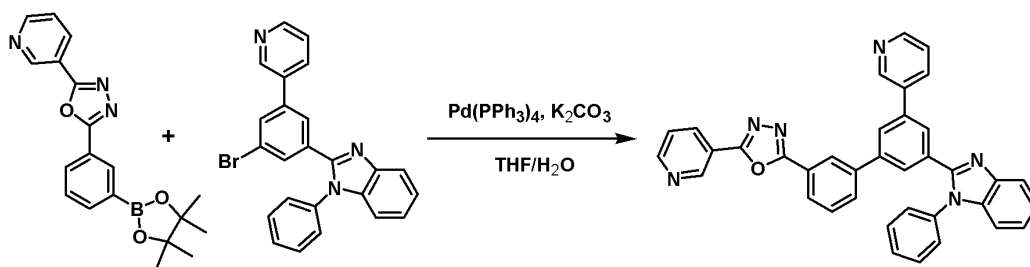


[0255]

[0256] 3,5-디-(3-피리딘일)-벤젠보로닉 에시드 (3,5-di-(3-pyridinyl)-benzene boronic acid) 0.84 g (3.1 mmol), 합성예 6 에서 제조된 2-(3-브로모-5-(피리딘-3-일)페닐)벤조[d]티아졸 (2-(3-bromo-5-(pyridin-3-yl)phenyl)benzo[d]thiazole) 1.0 g (2.8 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 0.14 g (5 mol%), 및 탄산칼륨 (potassium carbonate) 1.15 g (8.34 mmol)을 테트라하이드로퓨란/물 (tetrahydrofuran/H₂O=4/1의 부피비) 25 mL 에 녹인 후 80 °C에서 12 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물을 에틸아세테이트로 추출한 후, 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 1.35 g (Y=92 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0257] 실시예 5 : 화학식 92의 화합물 합성

[0258] [반응식 17]

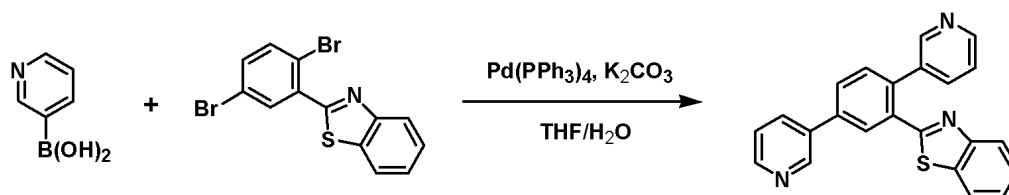


[0259]

[0260] 합성예 9 에서 제조된 3-(5-(3-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)페닐)-1,3,4-옥사디아졸-2-일)피리딘 (3-(5-(3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl)pyridine) 4.63 g (13.3 mmol), 합성예 4에서 제조된 2-(3-브로모-5-(피리딘-3-일)페닐)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸 (2-(3-bromo-5-(pyridin-3-yl)phenyl)-1-phenyl-1H-benzo[d]imidazole) 5.15 g (12.1 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 0.47 g (3 mol%), 및 탄산칼륨 (potassium carbonate) 3.3 g (24.2 mmol)을 테트라하이드로퓨란/물(tetrahydrofuran/H₂O=4/1의 부피비) 300 mL 에 녹인 후 80 ℃에서 12 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물을 에틸아세테이트로 추출한 후, 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 2 g (Y=33 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0261] 실시예 6 : 화학식 96의 화합물 합성

[0262] [반응식 18]

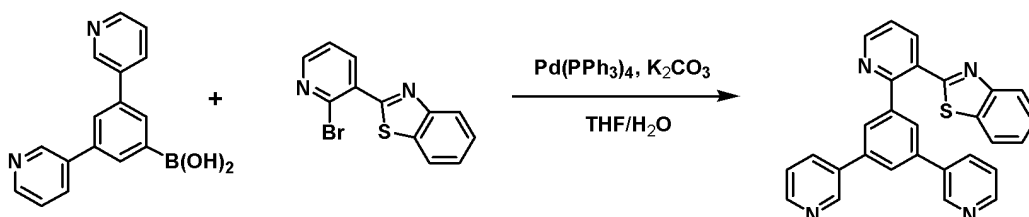


[0263]

[0264] 합성예 10 에서 제조된 2-(2,5-디브로모페닐)벤조[d]티아졸 (2-(2,5-dibromophenyl)benzo[d]thiazole) 1 g (2.76 mmol), 피리딘-3-보로닉 에시드 (pyridine-3-boronic acid) 0.85 g (6.9 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 0.28 g (10 mol%), 및 탄산칼륨 (potassium carbonate) 2.3 g (16.6 mmol)을 테트라하이드로퓨란/물(tetrahydrofuran/H₂O=4/1의 부피비) 25 mL 에 녹인 후 80 ℃에서 12 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물을 에틸아세테이트로 추출한 후, 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 0.8 g (Y=79 %)의 흰색 고체를 얻었다.

[0265] 실시예 7 : 화학식 105의 화합물 합성

[0266] [반응식 19]



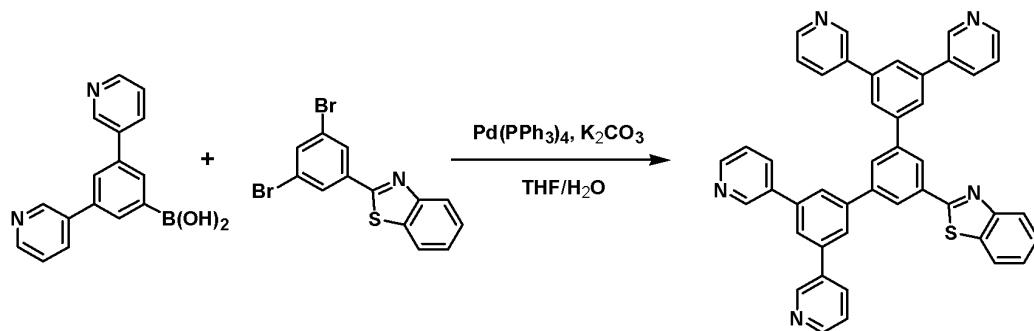
[0267]

[0268] 3,5-디-(3-피리딘일)-벤젠보로닉 에시드 (3,5-di-(3-pyridinyl)-benzene boronic acid) 1.33 g (4.8mmol), 합성예 11 에서 제조된 2-(2-브로모피리딘-3-일)벤조[d]티아졸(2-(2-브로모피리딘-3-일)벤조[d]티아졸) 1.7 g (5.8 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 0.28 g (5

mol%), 및 탄산칼륨 (potassium carbonate) 2.0 g (14.4 mmol)을 테트라하이드로퓨란/물 (tetrahydrofuran/H₂O=4/1의 부피비) 30 mL 에 녹인 후 80 °C에서 12 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물을 에틸아세테이트로 추출한 후, 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 2.28 g (Y=88 %)의 흰색 고체를 얻었다.

실시예 8 : 화학식 108의 화합물 합성

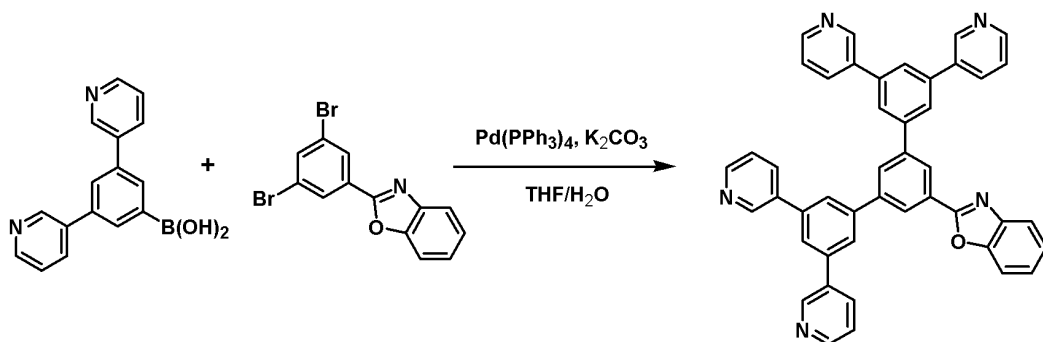
[반응식 20]



3,5-디-(3-피리딘일)-벤젠보로닉 에시드 (3,5-di-(3-pyridinyl)-benzene boronic acid) 2.3 g (8.4 mmol), 합성에 5 에서 제조된 2-(3,5-디브로모페닐)벤조[*d*]티아졸 (2-(3,5-dibromophenyl)benzo[*d*]thiazole) 1.5 g (4.0 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 0.46 g (10 mol%), 및 탄산칼륨 (potassium carbonate) 3.3 g (23.9 mmol)을 테트라하이드로퓨란/물 (tetrahydrofuran/H₂O=4/1의 부피비) 50 mL 에 녹인 후 80 °C에서 12 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물을 에틸아세테이트로 추출한 후, 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 2.04 g(Y=75 %)의 흰색 고체를 얻었다.

실시예 9 : 화학식 110의 화합물 합성

[반응식 21]



3,5-디-(3-피리딘일)-벤젠보로닉 에시드 (3,5-di-(3-pyridinyl)-benzene boronic acid) 4.3 g (15.6 mmol), 합성에 12 에서 제조된 2-(3,5-디브로모페닐)벤조[*d*]옥사졸 (2-(3,5-dibromophenyl)benzo[*d*]oxazole) 2.5 g (7.1 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 0.82 g (10 mol%), 및 탄산칼륨 (potassium carbonate) 5.9 g (42.7 mmol)을 테트라하이드로퓨란/물 (tetrahydrofuran/H₂O=4/1의 부피비) 100 mL 에 녹인 후 80 °C에서 12 시간 동안 반응하였다. 수득한 반응물을 에틸아세테이트로 추출한 후, 용매를 감압하여 제거하고 칼럼으로 분리한 후 건조시켜 3.37 (Y=72 %)의 흰색 고체를 얻었다.

상기 실시예 1 내지 9 에서 합성된 화합물에 대하여 핵자기공명분광법(¹H NMR(nuclear magnetic resonance spectroscopy))로 분석한 결과를 각각 도 6 내지 도 14 에 나타내었다.

- [0278] **비교예 1:** 2-(4-비페닐릴)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(PBD)
- [0279] 종래(Jpn. J. Appl. Phys., 27, L269 (1988))에 전자수송 능력이 뛰어난 것으로 알려진 2-(4-비페닐릴)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(PBD)을 준비하였다.
- [0280] **실시예 10 : 유기 발광 소자의 제작**
- [0281] 코닝(corning)사의 $15 \Omega/\text{cm}^2$ (120 nm) ITO 유리 기판을 25 mm x 25 mm x 0.7 mm 크기로 잘라서, 이소프로필 알코올 및 순수 물 속에서 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30 분 동안 UV 및 오존으로 세정하였다.
- [0282] 상기 기판 상부에 N,N'-디(4-(N,N'-디페닐-아미노)-페닐)-N,N'-디페닐벤지딘 (N,N'-di(4-(N,N'-diphenyl-amino)-phenyl)-N,N'-diphenylbenzidine: DNTPD) 40 nm 두께의 정공주입층을 형성하였다.
- [0283] 상기 정공주입층 상부에 N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)벤지딘 (N,N'-bis(naphthalene-1-yl)-N,N'-bis(phenyl)benzidine: NPB)을 진공 증착하여 10 nm 두께의 정공수송층을 형성하였다.
- [0284] 상기 정공수송층 상부에 발광 재료로서 EB-46(E-Ray 사)과 EB-512(E-Ray 사)를 94:6 의 중량비로 진공 증착하여 40 nm의 두께로 발광층을 형성하였다.
- [0285] 상기 발광층 상부에 전자수송물질로 본 발명의 실시예 2에서 합성된 화합물을 진공 증착하여 10 nm 두께의 전자 수송층을 형성하였다.
- [0286] 상기 전자수송층 상부에 LiF 0.5 nm/Al 100 nm을 각각 순차적으로 진공 증착하여 LiF/Al 으로 형성되는 음극을 형성함으로써 실시예 10 의 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0287] **실시예 11 : 유기 발광 소자의 제작**
- [0288] 전자수송층으로 본 발명의 실시예 3 에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실시예 10 과 동일하게 실시 하여 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0289] **실시예 12 : 유기 발광 소자의 제작**
- [0290] 전자수송층으로 본 발명의 실시예 4 에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실시예 10 과 동일하게 실시 하여 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0291] **실시예 13 : 유기 발광 소자의 제작**
- [0292] 전자 수송층으로 본 발명의 실시예 5 에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실시예 10 과 동일하게 실시하여 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0293] **실시예 14 : 유기 발광 소자의 제작**
- [0294] 전자 수송층으로 본 발명의 실시예 7 에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실시예 10 과 동일하게 실시하여 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0295] **실시예 15 : 유기 발광 소자의 제작**
- [0296] 전자 수송층으로 본 발명의 실시예 8 에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실시예 10 과 동일하게 실시하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0297] 실시예 16 : 유기 발광 소자의 제작

[0298] 전자 수송층으로 본 발명의 실시예 9 에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실시예 10 과 동일하게 실시하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0299] 비교예 2: 유기 발광 소자의 제작

[0300] 전자수송층으로 전자수송물질인 Alq_3 를 사용한 점을 제외하고는 실시예 10 과 동일하게 실시하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0301] 물성 측정결과 및 분석

[0302] 1) 구동 전압, 휘도, 및 발광 효율 측정

[0303] 실시예 10 내지 16 및 비교예 2 의 유기 발광 소자에 대하여 1000 nit의 밝기를 내는 데 필요한 구동 전압(Vd)을 측정하고, 동일 밝기의 전류 효율(cd/A) 및 전력 효율(lm/W)을 측정하여 표 1 에 나타내었다.

[0304] [표 1]

[0305]

소자	at 1000 cd/m ²			Von	max	
	Vd (V)	cd/A	lm/W		cd/A	lm/W
비교예 2	7.40	4.68	1.99	3.60	4.72	2.88
실시예 10	6.20	5.19	2.63	3.20	5.35	3.25
실시예 11	7.20	5.29	2.31	3.80	5.32	2.77
실시예 12	6.40	5.00	2.45	3.00	5.32	3.34
실시예 13	7.40	4.99	2.12	3.20	5.32	3.37
실시예 14	6.40	5.80	2.85	3.00	5.88	3.51
실시예 15	7.20	5.56	2.43	3.40	5.66	3.54
실시예 16	6.00	6.04	3.16	3.20	6.32	4.14

[0306] 상기 표 1, 도 15, 및 도 16 을 참조하면, 실시예 10 내지 16 의 유기 발광 소자는 비교예 2 의 유기 발광 소자에 비하여 구동 전압이 현저히 낮음을 확인할 수 있다. 또한, 표 1, 도 17, 및 도 18 을 참조하면, 실시예 10 내지 16 의 유기 발광 소자는 구동 전압이 현저히 낮는데 반해, 전류 효율 및 전력 효율은 월등히 높음을 확인할 수 있다.

[0307] 이러한 유기 발광 소자의 측정 결과는, 발광층 내의 정공과 전자의 결합이 균형을 이루어 나타나는 결과로써, 실시예 10 내지 16 에서 사용된 화합물이 일반적인 전자수송재료인 Alq_3 에 비하여, 우수한 전자 주입 특성 및 이동 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

[0308] 2) 열적 안정성 측정

[0309] 실시예 1 내지 9 에서 얻어진 화합물을 시차주사열량계법(DSC: differential scanning calorimetry)로 1 차 분석하였고, 1 차 분석을 마친 화합물을 가지고 동일한 방법을 통하여 2 차로 분석하였다. 이 중에서 실시예 5 및 비교예 1 의 화합물에 대한 분석 결과를 도 19 및 도 20 에 나타내었다. 도 19 및 도 20 을 참조하면, 실시예 5 의 화합물은 1 차 분석에서 용융점 피크가 나타났으나, 2 차 분석에서는 용융점 피크가 나타나지 않았다. 이에 비하여 비교예 1 에서 준비된 2-(4-비페닐릴)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(PBD)은 1 차와 2 차 분석 모두 138 ℃에서 용융점 피크를 확인할 수 있으며 또한 2 차 분석에서는 65 ℃정도에서 결정화 온도가 관측되었다. 이로부터 실시예 5 의 화합물이 기존의 재료에 비하여 안정한 비정질 상태로 존재함을 확인할 수 있었다. 따라서 본 발명에 의한 화합물로 제작된 유기 발광 소자는 구동시 줄 열에 의하여 영향을 줄일 수 있으며, 기존의 유기 발광 소자에 비하여 향상된 수명 특성을 나타낼 수 있음을 예측할 수 있다.

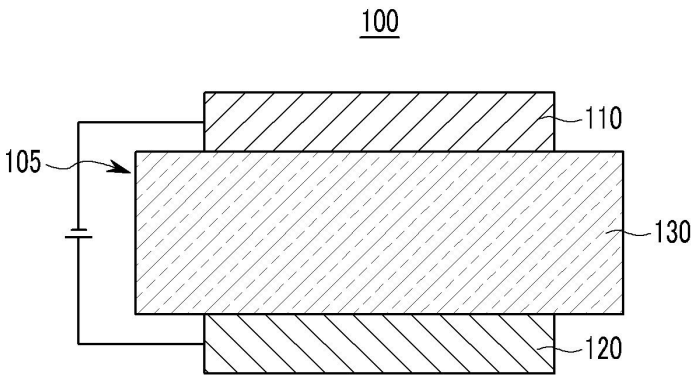
[0310] 본 발명의 단순한 변형 또는 변경은 모두 이 분야의 통상의 지식을 가진 자에 의하여 용이하게 실시될 수 있으며, 이러한 변형이나 변경은 모두 본 발명의 영역에 포함되는 것으로 볼 수 있다.

도면의 간단한 설명

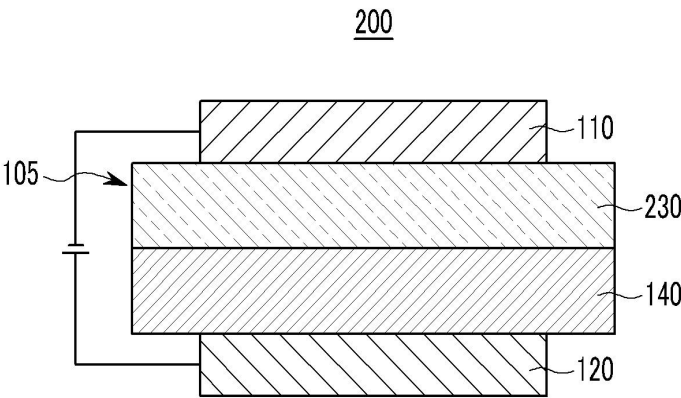
- [0311] 도 1 내지 도 5 는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 광전 소자용 화합물을 포함하여 제조될 수 있는 유기 광전 소자에 대한 다양한 구현예들을 나타내는 단면도이다.
- [0312] 도 6 은 본 발명의 실시예 1 에 따라 제조된 화합물의 ^1H NMR 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- [0313] 도 7 은 본 발명의 실시예 2 에 따라 제조된 화합물의 ^1H NMR 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- [0314] 도 8 은 본 발명의 실시예 3 에 따라 제조된 화합물의 ^1H NMR 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- [0315] 도 9 는 본 발명의 실시예 4 에 따라 제조된 화합물의 ^1H NMR 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- [0316] 도 10 은 본 발명의 실시예 5 에 따라 제조된 화합물의 ^1H NMR 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- [0317] 도 11 은 본 발명의 실시예 6 에 따라 제조된 화합물의 ^1H NMR 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- [0318] 도 12 는 본 발명의 실시예 7 에 따라 제조된 화합물의 ^1H NMR 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- [0319] 도 13 은 본 발명의 실시예 8 에 따라 제조된 화합물의 ^1H NMR 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- [0320] 도 14 는 본 발명의 실시예 9 에 따라 제조된 화합물의 ^1H NMR 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- [0321] 도 15 는 본 발명의 실시예 10 내지 13 및 비교예 2 에 따라 제조된 유기 발광 소자의 전압-휘도 특성을 측정한 그래프이다.
- [0322] 도 16 은 본 발명의 실시예 14 내지 16 및 비교예 2 에 따라 제조된 유기 발광 소자의 전압-휘도 특성을 측정한 그래프이다.
- [0323] 도 17 은 본 발명의 실시예 10 내지 13 및 비교예 2 에 따라 제조된 유기 발광 소자의 전력 효율을 측정한 그래프이다.
- [0324] 도 18 은 본 발명의 실시예 14 내지 16 및 비교예 2 에 따라 제조된 유기 발광 소자의 전력 효율을 측정한 그래프이다.
- [0325] 도 19 는 본 발명의 실시예 5 에 따라 제조된 화합물의 열적 특성을 나타낸 그래프이다.
- [0326] 도 20 은 본 발명의 비교예 1 에 따라 제조된 화합물의 열적 특성을 나타낸 그래프이다.
- [0327] <도면의 주요 부분에 대한 부호의 설명>
- | | |
|---------------------|-------------------|
| [0328] 100 : 유기광전소자 | 110 : 음극 |
| [0329] 120 : 양극 | 105 : 유기 박막층 |
| [0330] 130 : 발광층 | 140 : 정공 수송층 |
| [0331] 150 : 전자수송층 | 160 : 전자주입층 |
| [0332] 170 : 정공주입층 | 230 : 발광층 + 전자수송층 |

도면

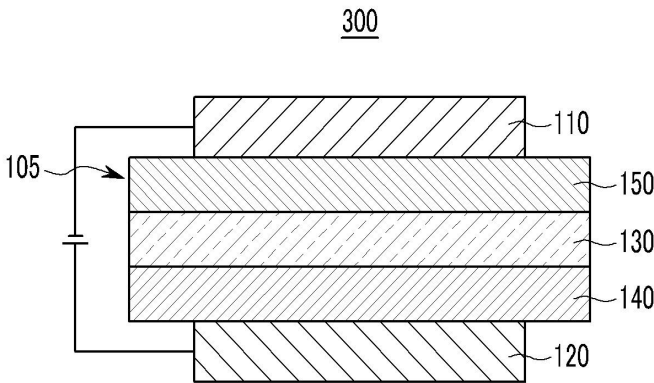
도면1



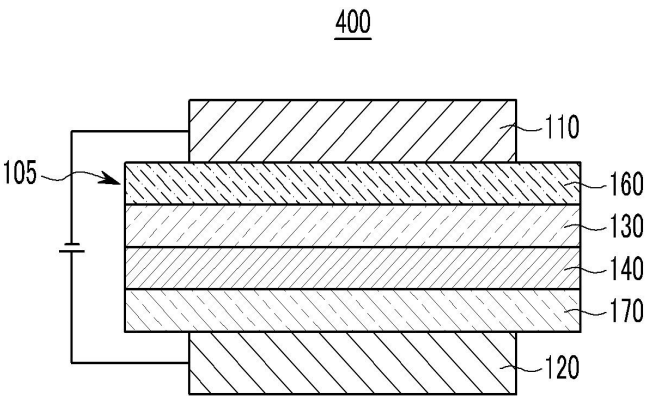
도면2



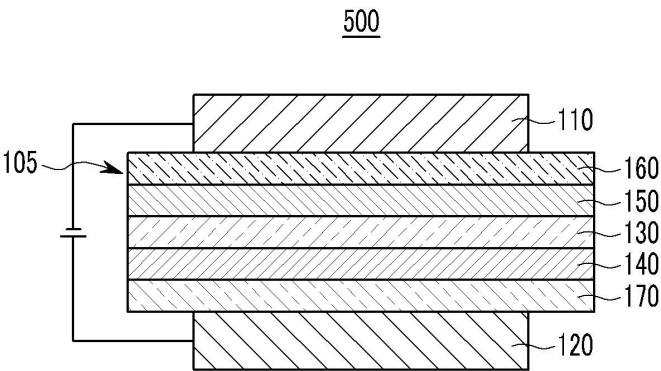
도면3



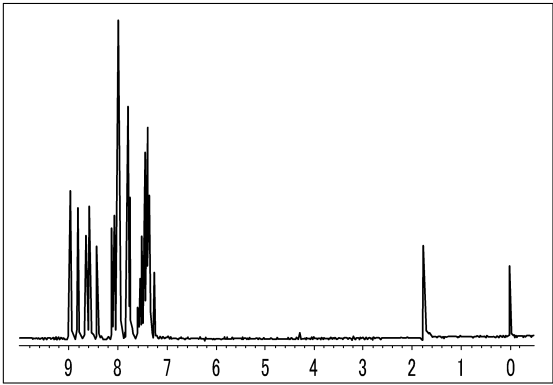
도면4



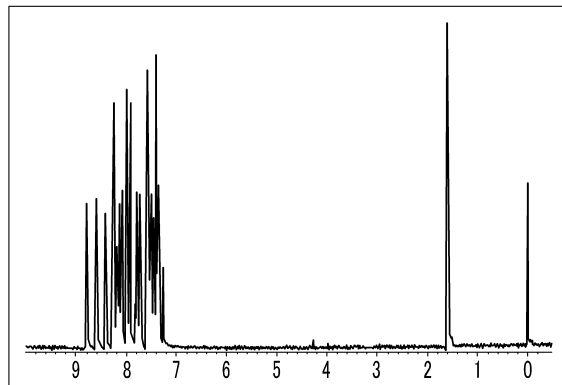
도면5



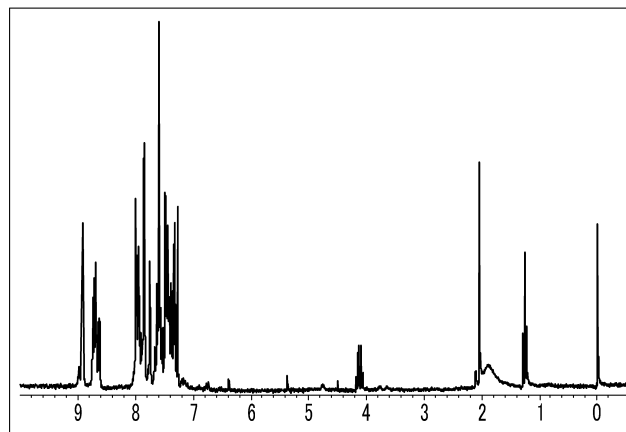
도면6



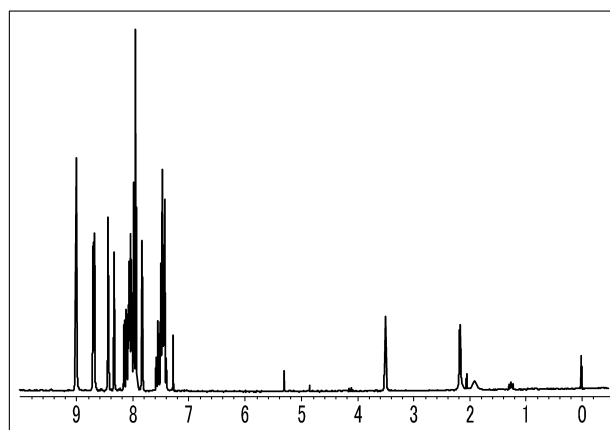
도면7



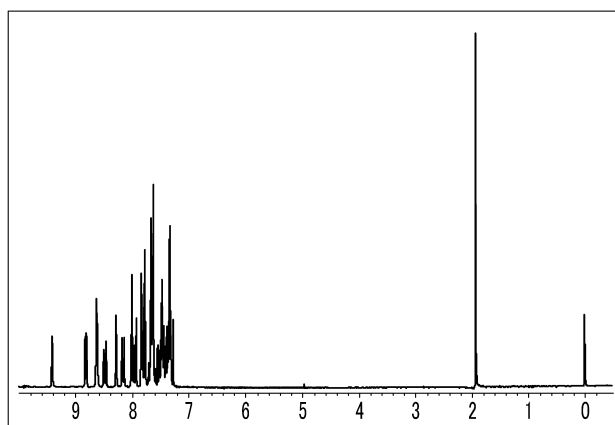
도면8



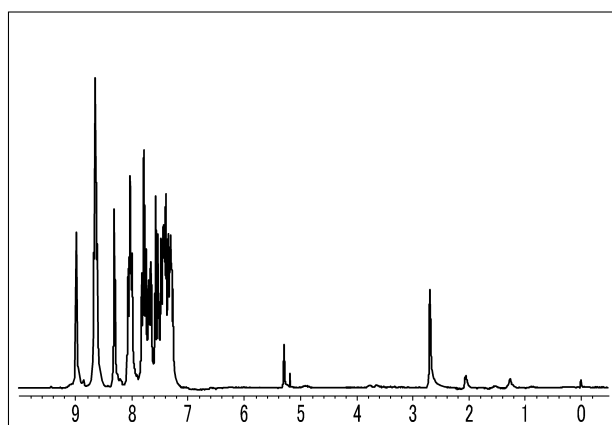
도면9



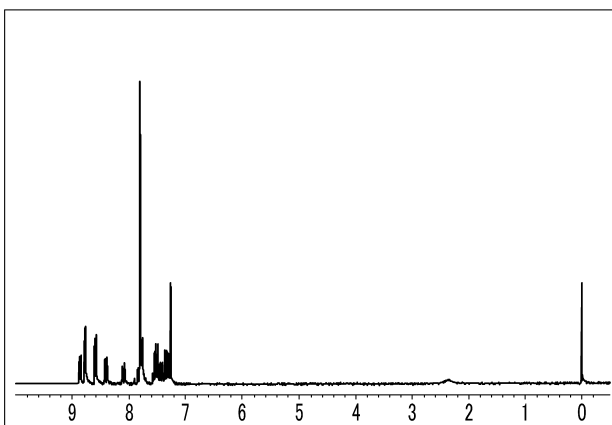
도면10



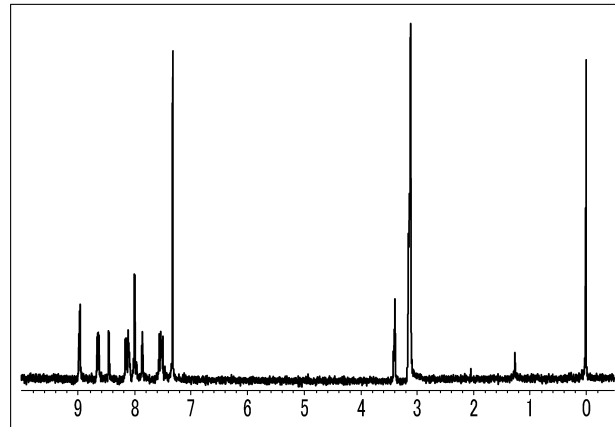
도면11



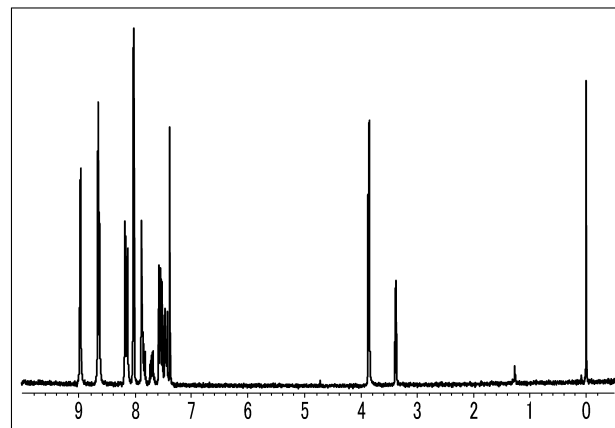
도면12



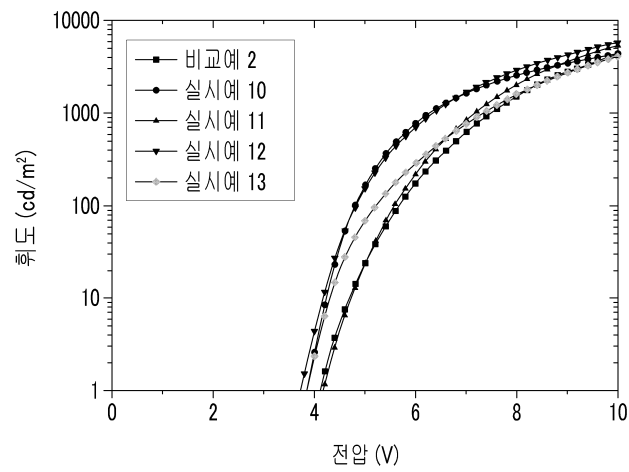
도면13



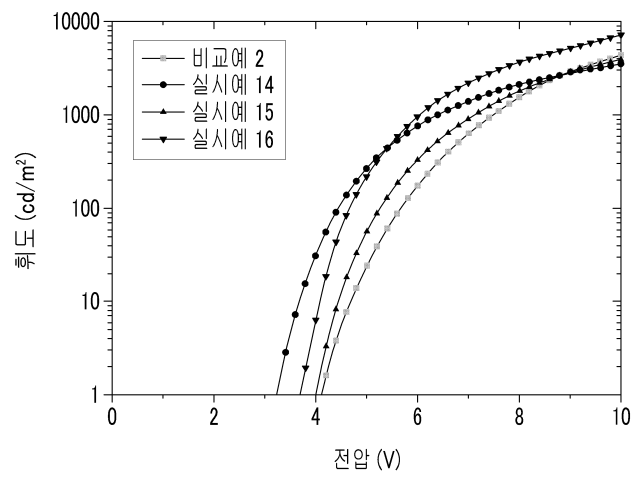
도면14



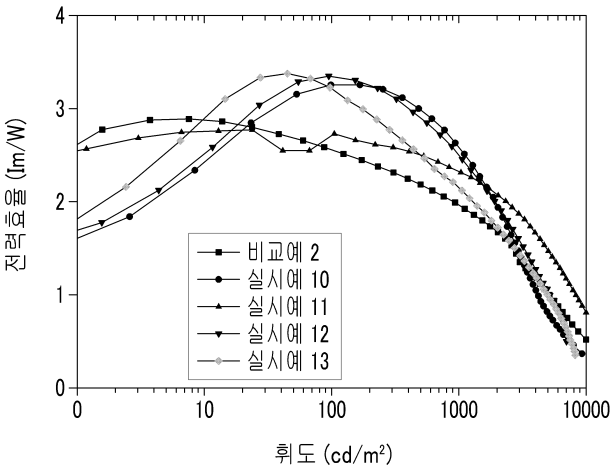
도면15



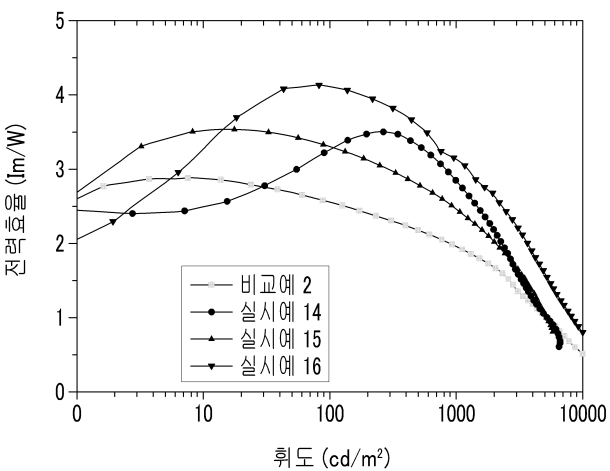
도면16



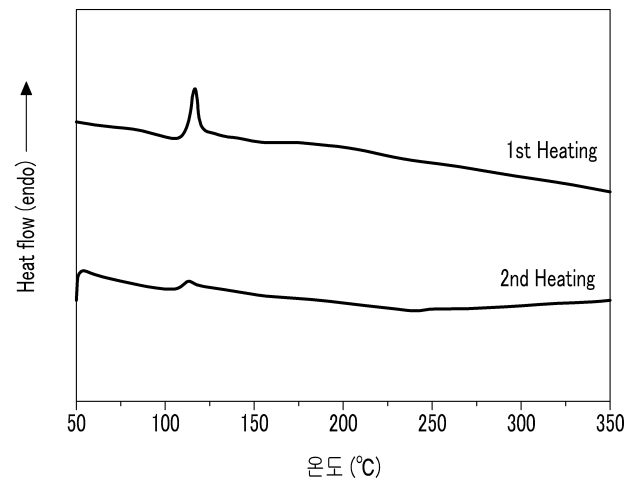
도면17



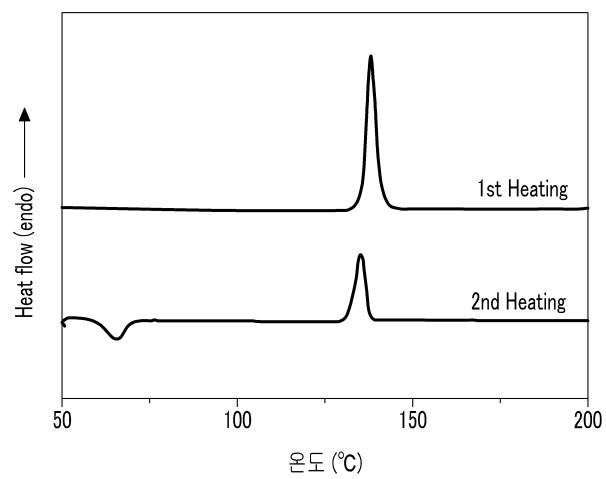
도면18



도면19



도면20



专利名称(译)	标题：新型有机光电器件化合物和含有它的有机光电器件		
公开(公告)号	KR101233368B1	公开(公告)日	2013-02-15
申请号	KR1020080137222	申请日	2008-12-30
[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	IN KYU YEOL 인규열 KANG MYEONG SOON 강명순 JUNG HO KUK 정호국 KIM NAM SOO 김남수 KANG EUI SU 강의수 CHAE MI YOUNG 채미영 PARK JIN SEONG 박진성		
发明人	인규열 강명순 정호국 김남수 강의수 채미영 박진성		
IPC分类号	C09K11/06		
CPC分类号	C09K2211/1037 C09K2211/1033 C07D413/10 C07D413/04 C09K2211/1059 C09K2211/1044 C09K2211/1007 C07D401/14 C09K11/06 C07D519/00 C07D498/04 C07D401/10 C07D413/14 C09K2211/1011 C07D471/04 C07D235/18 H01L51/0071 C07D417/10 C09K2211/1029 C07D417/14 H05B33/10 C09K2211/1048 H01L51/5056		
优先权	1020080098769 2008-10-08 KR		
其他公开文献	KR1020100039792A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

目的：提供一种用于有机光电器件的新型化合物，其用作空穴注入，空穴传输或电子注入和/或电子传输，以及发光主体和适当的掺杂剂。组成：用于有机光电器件的新型化合物具有由化学式1表示的结构，其中A1至A5相同或不同，并且CRi至CR5是N，条件是当Ai至A5中的三个或更少是N时，如果A1至A5中的至少两个不是氢，并且当A1至A5分别是CR1至CR5时，则A 1至A 5中的剩余四个分别选自CR1至CR5组成的组中的A1至A5。R1至R5中的至少两个不是氢，B选自O，S，Se和NR³；C和D相同或不同，并且独立地选自CR和N，条件是当B不是NR³时，C是N；R1至R5，并且R独立地选自氢组成的组。，卤素，腈，氰基，硝基，酰胺，羰基，酯，取代或未取代的烷基，取代或未取代的烷氧基，取代的或未取代的链烯基，取代或未取代的环烷基，取代或未取代的芳基，取代或未取代的芳基胺，取代或未取代的杂芳基胺，取代或未取代的杂环，取代或未取代的氨基，BR6R7和SiR6R7R，

其中R6至R8是相同或不同，并且独立地选自取代或未取代的烷基，和取代或未取代的芳基；E选自氢，腈，氰基，硝基，酰胺，羰基，取代或未取代的烷基，取代或未取代的氟代烷基，取代或未取代的环烷基，取代或未取代的芳基，取代或未取代的杂环，和SO₂R₉，其中R₉选自腈，氰基，硝基，酰胺，羰基，取代或未取代的烷基，取代或未取代的环烷基，取代或未取代的芳基，和取代或未取代的杂环；L选自取代或未取代的芳基和取代或未取代的杂芳基；和n为0或1。

