(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2013년02월15일
(11) 등록번호 10-1233378
(24) 등록일자 2013년02월07일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2009-0040341
(22) 출원일자 2009년05월08일
심사청구일자 2010년11월30일
(65) 공개번호 10-2010-0121267
(43) 공개일자 2010년11월17일
(56) 선행기술조사문헌
US6812497 B2

(73) 특허권자
제일모직주식회사
경상북도 구미시 구미대로 58 (공단동)
(72) 발명자
김영훈
경기도 안양시 만안구 삼덕로63번길 17 (안양동)
유은선
경기도 안양시 동안구 관악대로263번길 49-11, 지송빌라 202호 (비산동)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
팬코리아특허법인

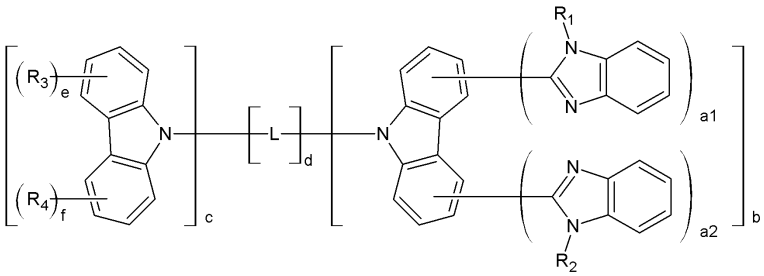
전체 청구항 수 : 총 14 항 심사관 : 오세주

(54) 발명의 명칭 **유기광전소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기광전소자**

(57) 요 약

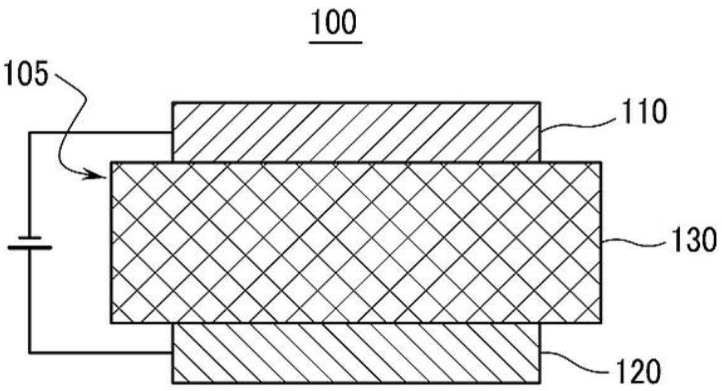
본 명세서에서는 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기광전소자가 제공된다.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서 L, R_1 내지 R_4, a1, a2, b, c, d, e 및 f의 정의는 명세서에 기재된 바와 같다.

대 표 도 - 도1



(72) 발명자

정성현

경기도 군포시 산본천로 119-9, 주공11단지아파트 1106동 212호 (산본동)

강의수

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

박영성

경기도 의왕시 고산로 56 (고천동, 제일모직)

채미영

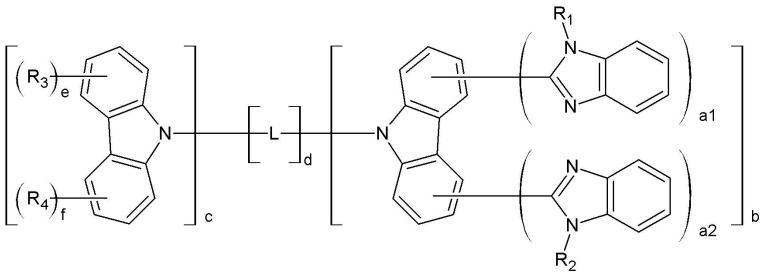
경기 용인시 수지구 동천동 동천마을 현대2차홈타운 203동 1803호

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서

L은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

R_1 및 R_2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

R_3 및 R_4는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 수소 또는 탄소수 1 내지 10의 저급 알킬기이고,

a1 및 a2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고, 단, a1 + a2는 1 이상의 정수이고,

b는 1 내지 4의 정수이고,

c는 0 내지 4의 정수이고,

d는 1 내지 5의 정수이고,

e 및 f는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수임.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 화합물에서 L은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이고,

상기 아릴렌기는 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 테트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기 또는 이들의 조합인 것인 유기광전소자용 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

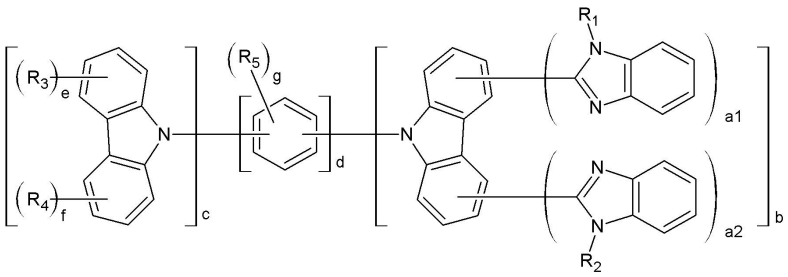
상기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 화합물에서 a1 및 a2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이고, 단, a1 + a2는 1 내지 3의 정수인 것인 유기광전소자용 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 2로 표시되는 것인 유기광전소자용 화합물:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서

R_1 및 R_2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고,

R_3 내지 R_5는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 수소 또는 탄소수 1 내지 10의 저급 알킬기이고,

a1 및 a2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이고, 단, a1 + a2는 1 내지 3의 정수이고,

b는 1 내지 4의 정수이고,

c는 0 내지 4의 정수이고,

d는 1 내지 5의 정수이고,

e 및 f는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고,

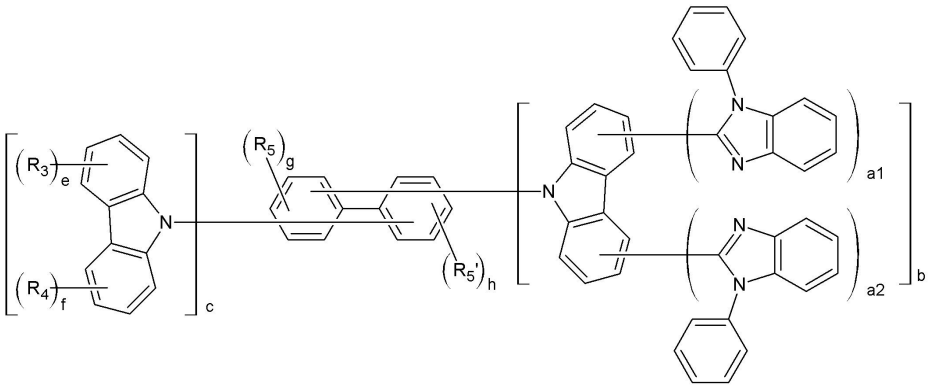
g는 1 내지 4의 정수임.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 3으로 표시되는 것인 유기광전소자용 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서

R_3 내지 R_5, 및 R_5'은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 수소 또는 탄소수 1 내지 10의 저급 알킬기이고,

a1 및 a2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이고, 단, a1 + a2는 1 내지 3의 정수

이고,

b는 1 내지 4의 정수이고,

c는 0 내지 4의 정수이고,

e 및 f는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고,

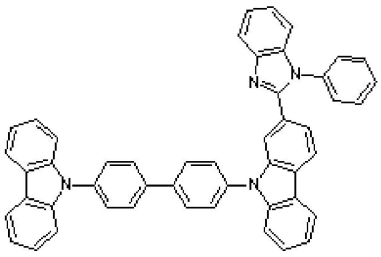
g 및 h는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수임.

청구항 6

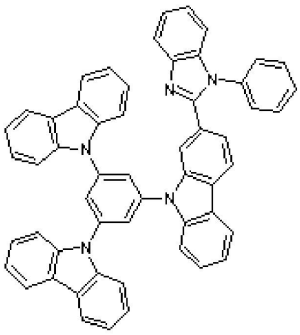
제1항에 있어서,

상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 4 내지 31로 표시되는 것인 유기광전소자용 화합물:

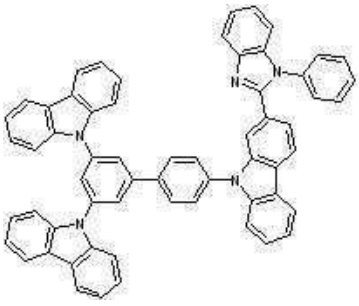
[화학식 4]



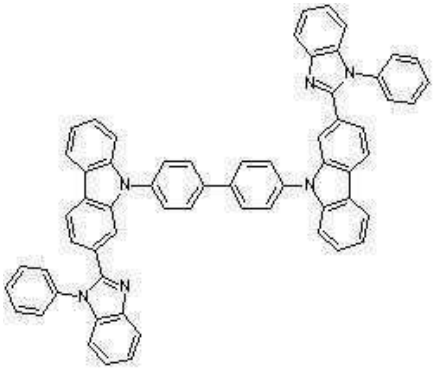
[화학식 5]



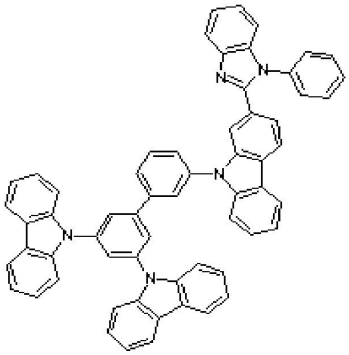
[화학식 6]



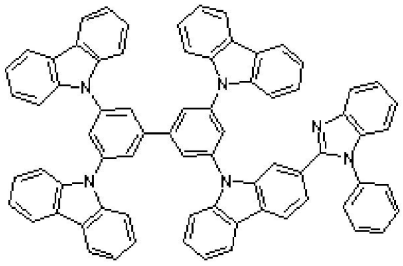
[화학식 7]



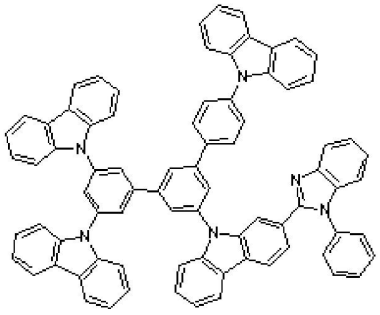
[화학식 8]



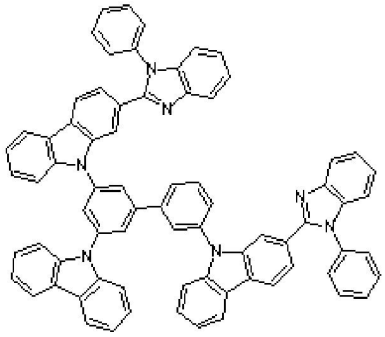
[화학식 9]



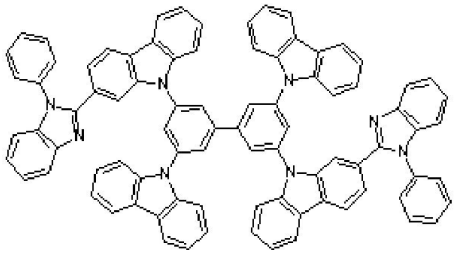
[화학식 10]



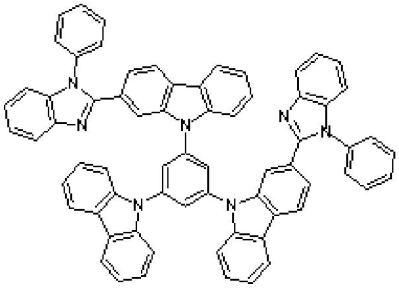
[화학식 11]



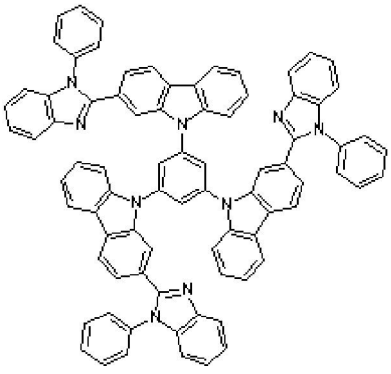
[화학식 12]



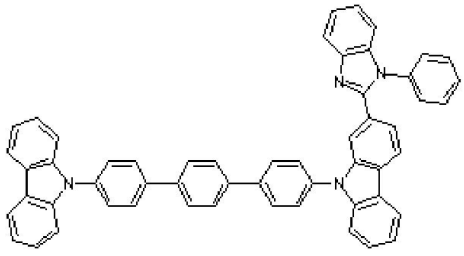
[화학식 13]



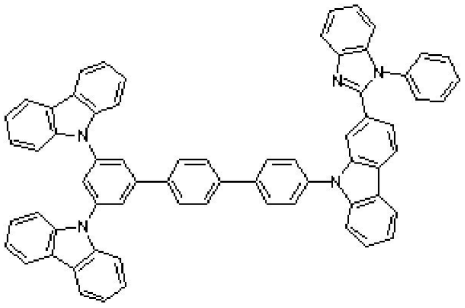
[화학식 14]



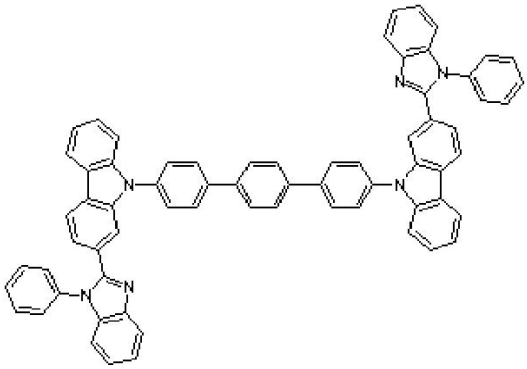
[화학식 15]



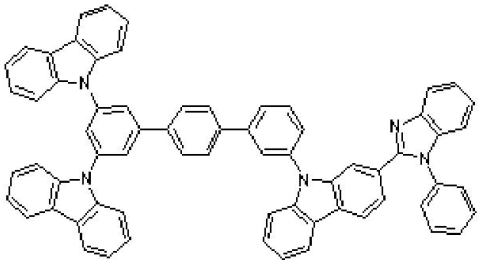
[화학식 16]



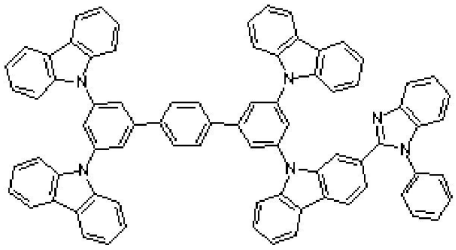
[화학식 17]



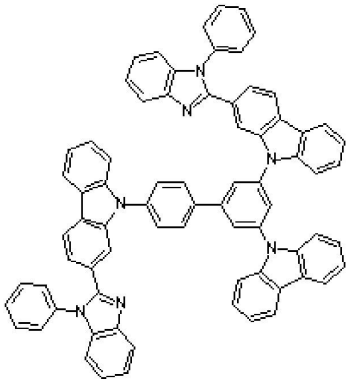
[화학식 18]



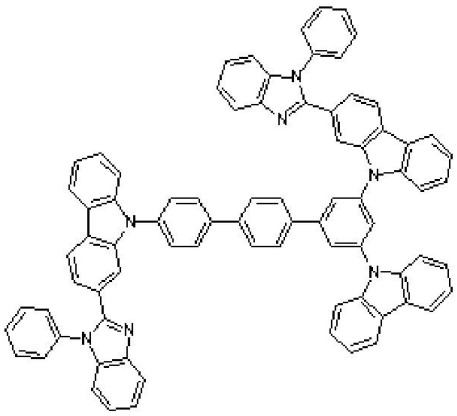
[화학식 19]



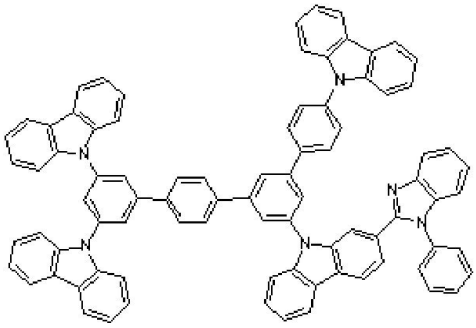
[화학식 20]



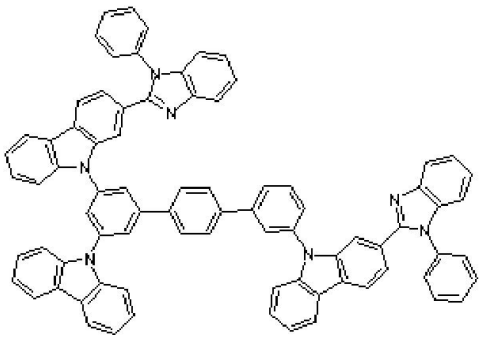
[화학식 21]



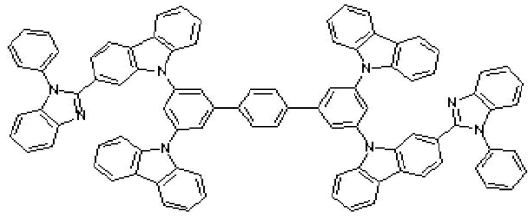
[화학식 22]



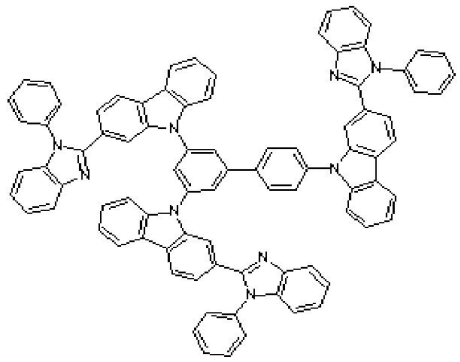
[화학식 23]



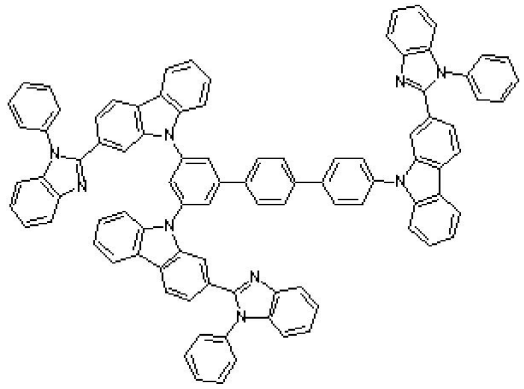
[화학식 24]



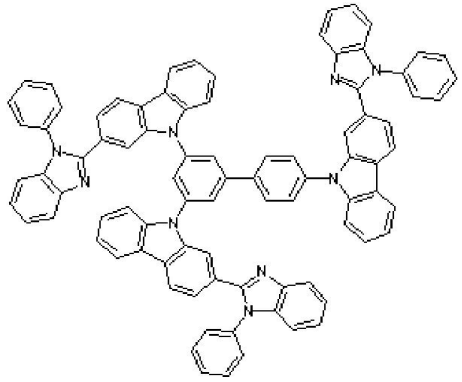
[화학식 25]



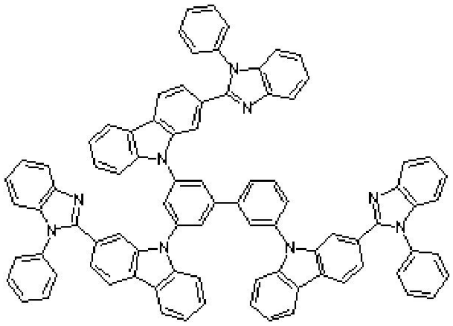
[화학식 26]



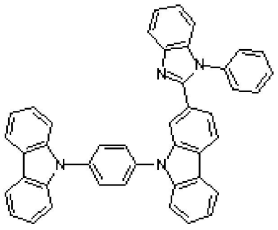
[화학식 27]



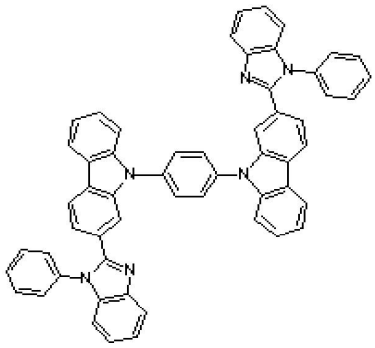
[화학식 28]



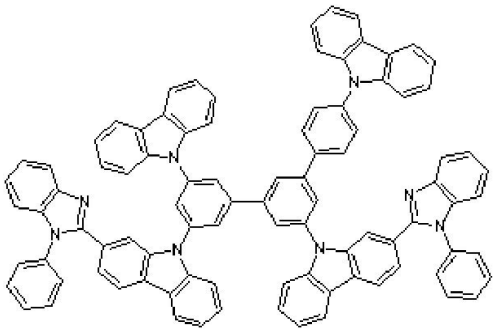
[화학식 29]



[화학식 30]



[화학식 31]



청구항 7

제1항에 있어서,

상기 유기광전소자용 화합물은 전하수송 재료 또는 호스트 재료로 사용될 수 있는 것인 유기광전소자용 화합물.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 유기광전소자용 화합물은 녹색 또는 적색 발광의 호스트 재료로 사용될 수 있는 것인 유기광전소자용 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 유기광전소자용 화합물은 유리전이온도(T_g)가 110 ℃ 이상이고, 열분해온도(T_d)가 400 ℃ 이상인 유기광전소자용 화합물.

청구항 10

양극 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 유기박막층을 포함하고,

상기 유기박막층은 제1항 내지 제9항 중 어느 한 항에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함하는 것인 유기광전소자.

청구항 11

제10항에 있어서,

상기 유기 박막층은 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 정공저지층, 전자수송층, 전자주입층, 전자저지층 또는 이들의 조합인 것인 유기광전소자.

청구항 12

제10항에 있어서,

상기 유기박막층은 도펀트를 더 포함하는 것인 유기광전소자.

청구항 13

제12항에 있어서,

상기 도펀트는 적색, 녹색 또는 청색의 인광도펀트인 것인 유기광전소자.

청구항 14

제10항에 따른 유기광전소자를 포함하는 것인 표시장치.

명 세 서

발명의 상세한 설명

기 술 분 야

[0001] 본 기재는 유기광전소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기광전소자에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 광전소자(photoelectric device)는 넓은 의미로 빛에너지를 전기에너지로 변환하거나, 전기에너지를 빛에너지로 변환하는 소자이다. 상기 광전소자는 유기발광소자(OLED: Organic Light Emitting Diodes), 태양전지, 트랜지스터 등을 예로 들 수 있다. 특히, 유기발광소자는 최근 평판디스플레이(flat panel display)의 수요가 증가함에 따라 주목받고 있다.

[0003] 유기발광소자는 유리기판 위에 투명전극으로 이루어진 양극(anode), 발광영역을 포함하는 유기박막층 및 금속전극으로 이루어진 음극(cathode)이 순차적으로 형성되는 구조를 가진다. 상기 유기박막층은 발광층, 정공주입층, 정공수송층, 전자수송층 또는 전자주입층을 포함할 수 있으며, 발광층의 발광 특성상 전자저지층 또는 정공저지층을 추가로 포함할 수 있다.

[0004] 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사에서는 저분자의 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하여 합성된 발광층을 포함하는 유기발광소자를 개발하였고(Appl. Phys. Lett., 51, 913, 1987), 1987년 C. W. Tang 등은 실용적인 성능을 가진 유기발광소자를 최초로 보고하였다(Appl. Phys. Lett., 51(12), 913, 1987). 상기 문헌에서는 유기박막층으로서 디아민 유도체의 정공수송층과 Alq3(tris(8-hydroxy-quinolate)aluminum)의 전자수송성 발광층을 적층한 구조를 기재하고 있다.

[0005] 유기발광소자에 전류를 가하면 양극과 음극으로부터 각각 정공과 전자가 주입되고, 주입된 정공과 전자는 각각의 정공수송층과 전자수송층을 거쳐 발광층에서 재결합(recombination)하여 발광여기자(exciton)를 형성한다. 이와 같이 형성된 발광여기자는 바닥상태(ground states)로 전이하면서 빛을 방출한다. 상기 빛은 발광 메카니즘에 따라 단일항 여기자를 이용하는 형광과 삼중항 여기자를 이용하는 인광으로 나뉠 수 있고, 상기 형광 및 인광은 유기발광소자의 발광원로 사용될 수 있다(D. F.O'Brien 등, Appl. Phys. Lett., 74(3), 442, 1999; M. A. Baldo 등, Appl. Phys. lett., 75(1), 4, 1999).

[0006] 전자가 바닥상태에서 여기상태로 전이하면, 계간전이(intersystem crossing)를 통해 단일항 여기자가 삼중항 여기자로 비발광 전이되고, 상기 삼중항 여기자는 다시 바닥상태로 전이하여 발광이 이루어진다. 이 때, 발생하는 빛을 인광이라고 한다. 상기 삼중항 여기자는 바닥상태로 직접 전이할 수 없고(spin forbidden), 반드시 전자스핀의 뒤바뀜(flipping) 단계를 거쳐야 한다. 따라서, 인광은 형광보다 반감기(발광시간, lifetime)가 길다는 특성을 가진다.

[0007] 또한, 정공과 전자가 재결합하여 발광여기자를 형성하는 경우, 삼중항 여기자는 단일항 여기자 보다 약 3 배 정도 많이 생성된다. 따라서 단일항 여기자만을 사용하는 형광은 단일항 여기자의 발생 확률이 25 %로서 발광 효율에 한계가 존재한다. 그러나 인광은 삼중항 여기자의 발생 확률 75 %뿐만 아니라, 단일항 여기자의 발생 확률인 25 %까지 사용할 수 있어, 이론적으로 발광 효율은 100 %까지 가능하게 된다. 즉, 인광은 형광과 비교하여 약 4 배 정도 높은 발광효율을 달성할 수 있다는 장점이 있다.

[0008] 한편, 유기발광소자의 효율과 안정성을 증가시키기 위하여 발광층에 호스트 재료와 도펀트를 함께 첨가할 수 있다. 상기 호스트 재료로는 4,4-N,N-다이카바졸바이페닐(CBP)이 주로 사용되었다. 그러나 CBP는 구조적 대칭성이 매우 높아 결정화되기 쉽고, 열적 안정성 낮기 때문에, 소자의 내열 시험결과, 단락이나 화소 결함이 발생하는 단점이 있었다. 또한, CBP와 같은 대부분의 호스트 재료들은 정공의 이동 속도가 전자의 이동 속도보다 빠르기 때문에 발광층에서 효과적으로 재결합되지 못하여, 소자의 발광 효율이 감소하는 단점이 있었다.

[0009] 따라서, 고효율 및 장수명의 인광 유기광전소자를 구현하기 위해서는, 전기적 및 열적 안정성이 높고, 정공과 전자를 모두 잘 전달할 수 있는 바이폴라(bipolar) 특성을 가지는 인광성 호스트 재료의 개발이 필요한 실정이다.

발명의 내용

해결 하고자하는 과제

[0010] 본 발명의 일 구현예는 열적 안정성이 우수하고, 정공과 전자를 모두 잘 전달할 수 있는유기광전소자용 화합물을 제공하기 위한 것이다.

[0011] 본 발명의 다른 일 구현예는 상기 유기광전소자용 화합물을 포함하여 효율, 및 구동전압 특성이 우수한 유기광

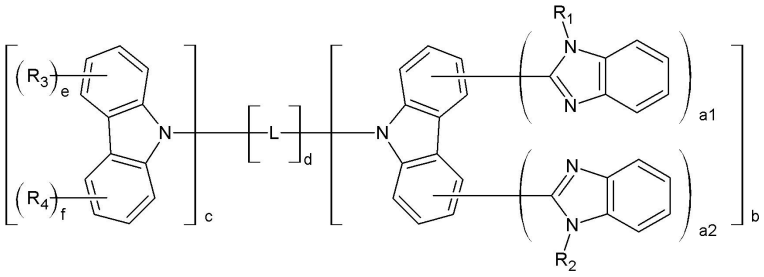
전소자를 제공하기 위한 것이다.

[0012] 본 발명의 또 다른 일 구현예는 상기 유기광전소자를 포함하는 표시장치를 제공하기 위한 것이다.

과제 해결수단

[0013] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 화합물을 제공한다:

[0014] [화학식 1]



[0015]

[0016] 상기 화학식 1에서

[0017] L은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

[0018] R_1 및 R_2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

[0019] R_3 및 R_4는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 수소 또는 탄소수 1 내지 10의 저급 알킬기이고,

[0020] a1 및 a2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고, 단, a1 + a2는 1 이상의 정수이고,

[0021] b는 1 내지 4의 정수이고,

[0022] c는 0 내지 4의 정수이고,

[0023] d는 1 내지 5의 정수이고,

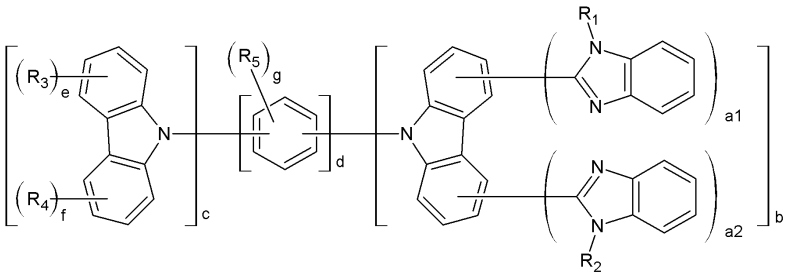
[0024] e 및 f는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이다.

[0025] 상기 L은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이고, 상기 아릴렌기는 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 테트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기 또는 이들의 조합일 수 있다.

[0026] 상기 a1 및 a2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수일 수 있고, 단, a1 + a2는 1 내지 3의 정수이다.

[0027] 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 2로 표시되는 것일 수 있다:

[0028] [화학식 2]



[0029]

[0030] 상기 화학식 2에서

[0031] R_1 및 R_2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고,

[0032] R_3 내지 R_5는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 수소 또는 탄소수 1 내지 10의 저급 알킬기이고,

[0033] a1 및 a2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이고, 단, a1 + a2는 1 내지 3의 정수이고,

[0034] b는 1 내지 4의 정수이고,

[0035] c는 0 내지 4의 정수이고,

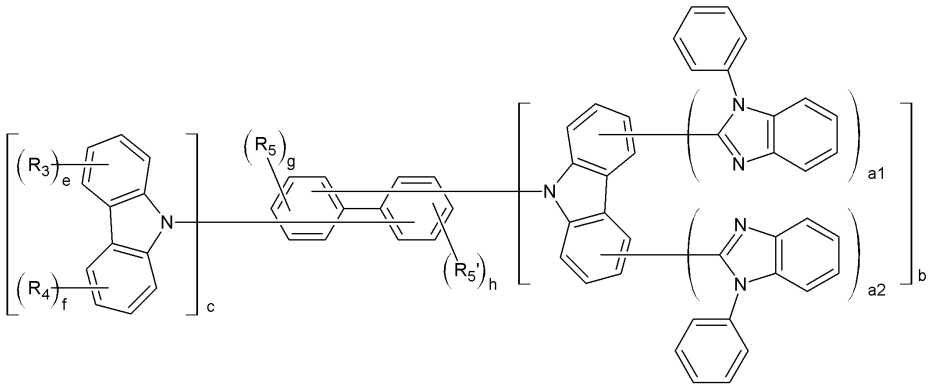
[0036] d는 1 내지 5의 정수이고,

[0037] e 및 f는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고,

[0038] g는 1 내지 4의 정수이다.

[0039] 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 3으로 표시되는 것일 수 있다:

[0040] [화학식 3]



[0041]

[0042] 상기 화학식 3에서

[0043] R_3 내지 R_5, 및 R_5'은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 수소 또는 탄소수 1 내지 10의 저급 알킬기이고,

[0044] a1 및 a2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이고, 단, a1 + a2는 1 내지 3의 정수이고,

[0045] b는 1 내지 4의 정수이고,

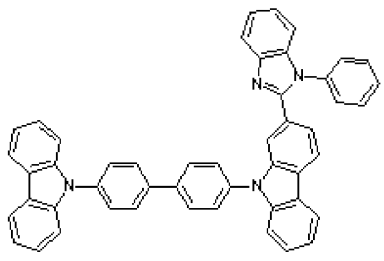
[0046] c는 0 내지 4의 정수이고,

[0047] e 및 f는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고,

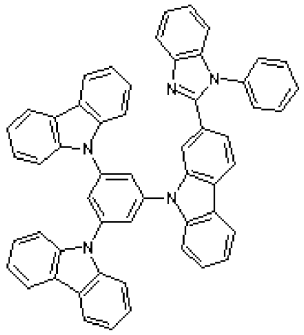
[0048] g 및 h는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이다.

[0049] 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 4 내지 31로 표시되는 것일 수 있다.

[0050] [화학식 4]

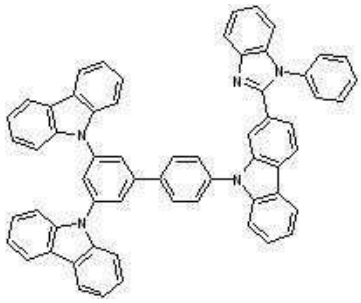
[0051] 

[0052] [화학식 5]



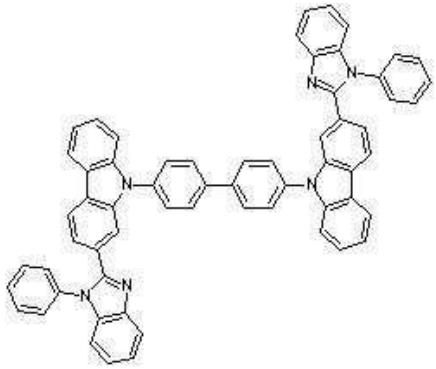
[0053]

[0054] [화학식 6]



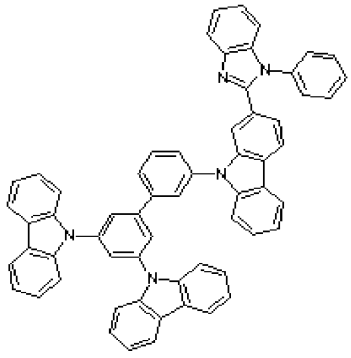
[0055]

[0056] [화학식 7]



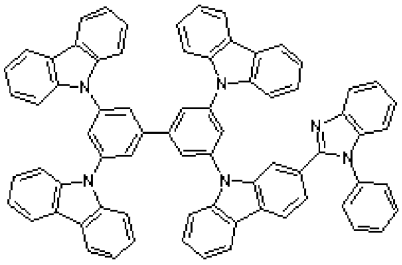
[0057]

[0058] [화학식 8]



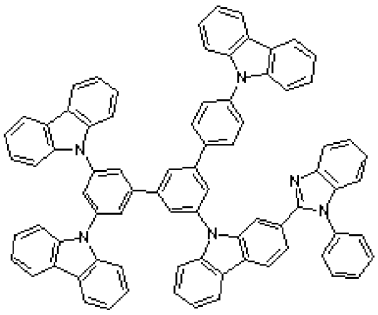
[0059]

[0060] [화학식 9]



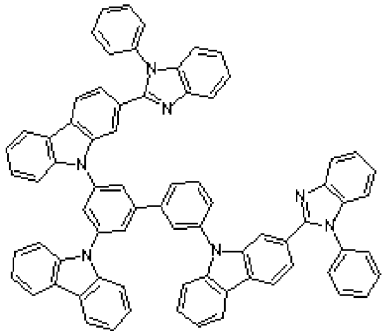
[0061]

[0062] [화학식 10]



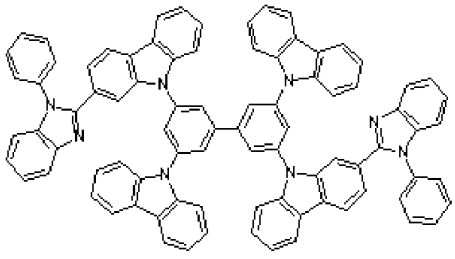
[0063]

[0064] [화학식 11]



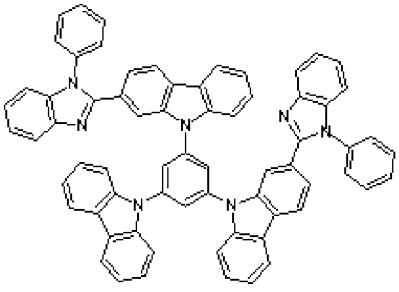
[0065]

[0066] [화학식 12]



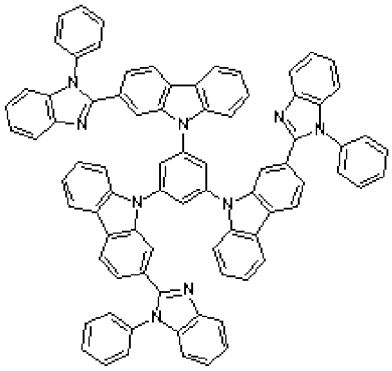
[0067]

[0068] [화학식 13]



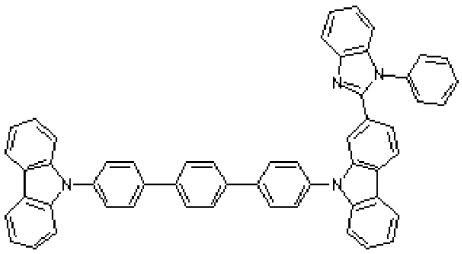
[0069]

[0070] [화학식 14]



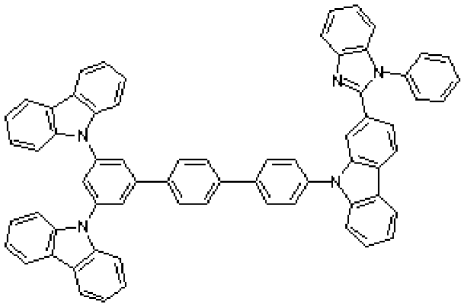
[0071]

[0072] [화학식 15]



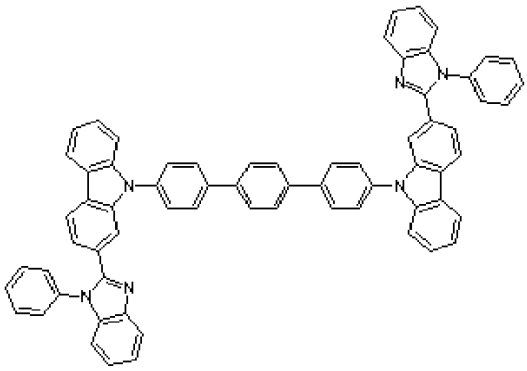
[0073]

[0074] [화학식 16]



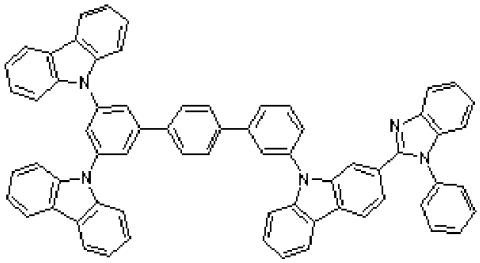
[0075]

[0076] [화학식 17]



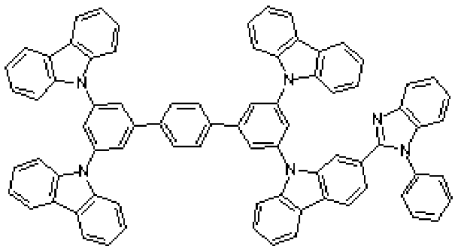
[0077]

[0078] [화학식 18]



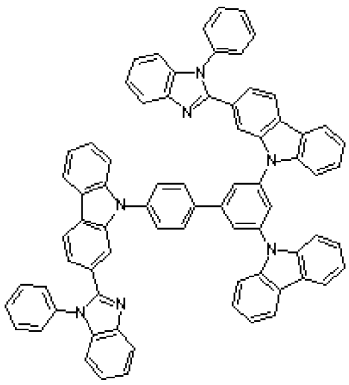
[0079]

[0080] [화학식 19]



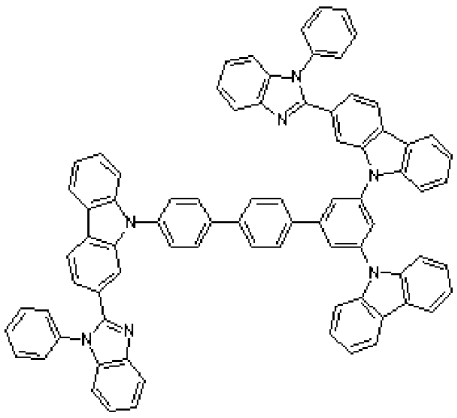
[0081]

[0082] [화학식 20]



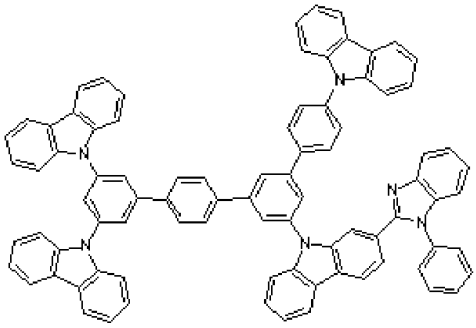
[0083]

[0084] [화학식 21]



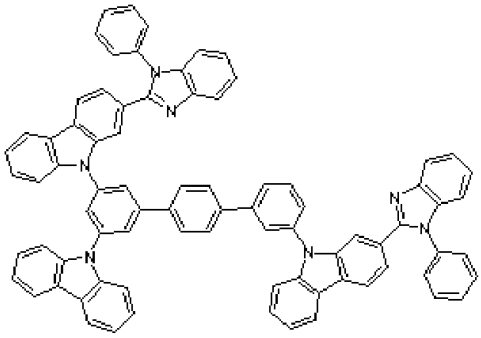
[0085]

[0086] [화학식 22]



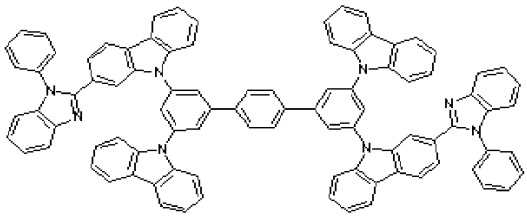
[0087]

[0088] [화학식 23]



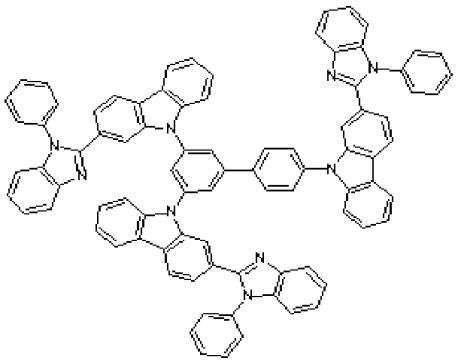
[0089]

[0090] [화학식 24]



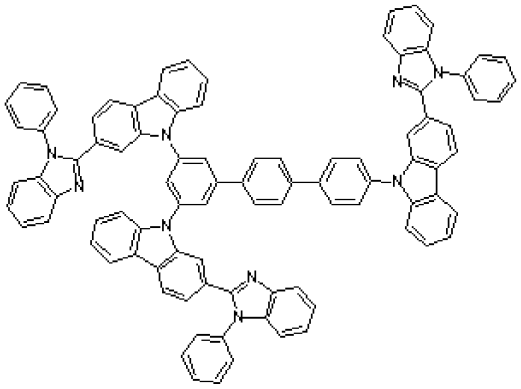
[0091]

[0092] [화학식 25]



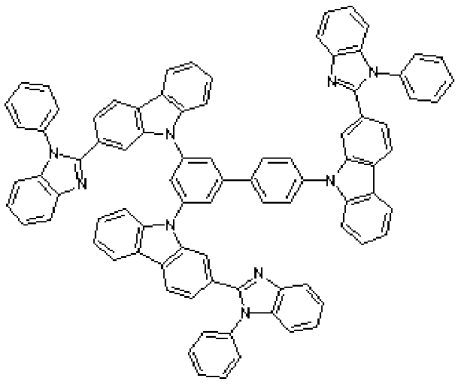
[0093]

[0094] [화학식 26]



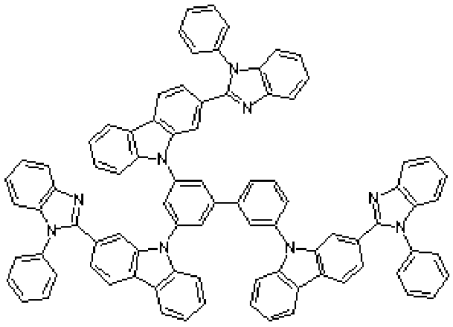
[0095]

[0096] [화학식 27]



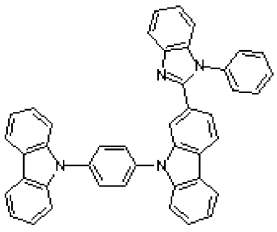
[0097]

[0098] [화학식 28]



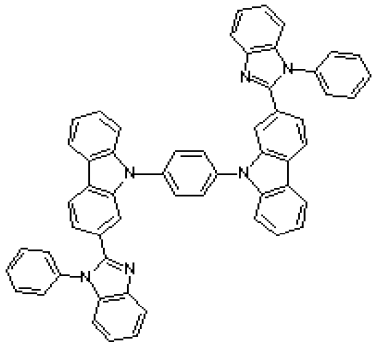
[0099]

[0100] [화학식 29]



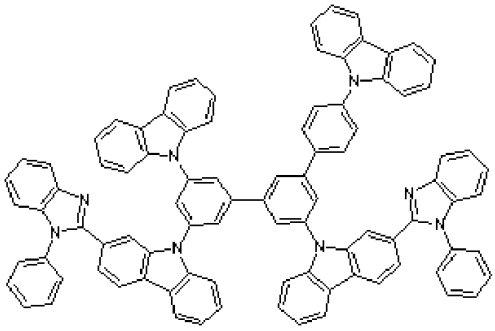
[0101]

[0102] [화학식 30]



[0103]

[0104] [화학식 31]



[0105]

[0106] 상기 유기광전소자용 화합물은 전하수송 재료 또는 호스트 재료로 사용될 수 있고, 특히, 상기 유기광전소자용 화합물은 녹색 또는 적색 발광의 호스트 재료로 사용될 수 있으며, 상기 유기광전소자용 화합물은 유리전이온도(T_g)가 110 ℃ 이상이고, 열분해온도(T_d)가 400 ℃ 이상인 것일 수 있다.

[0107] 본 발명의 다른 일 구현예에 따르면, 양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 유기박막층을 포함하고, 상기 유기박막층은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함하는것인 유기광전소자를 제공한다.

[0108] 상기 유기 박막층은 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 정공저지층, 전자수송층, 전자주입층, 전자저지층 또는 이들의 조합인 것일 수 있고, 상기 유기박막층은 도펀트를 더 포함할 수 있고, 상기 도펀트는 적색, 녹색, 또는 청색의 인광도펀트일 수 있다.

[0109] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기광전소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

[0110] 기타 본 발명의 구현예들의 구체적인 사항은 이하의 상세한 설명에 포함되어 있다.

효 과

[0111] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 우수한 열적안정성을 가지는 호스트 재료 또는 전하수송 재료로 사용될 수 있고, 특히, 유기광전소자의 유기박막층에 사용되어 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가지고, 수명이 향상된 유기광전소자 및 표시장치를 제공할 수 있다.

발명의 실시를 위한 구체적인 내용

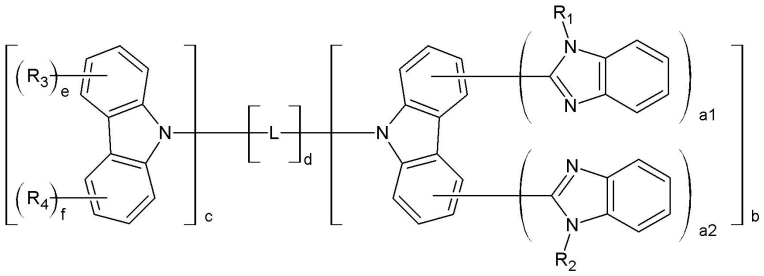
[0112] 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

[0113] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환된 것을 의미한다.

[0114] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 고리기 내에 N, O, S, P 또는 이들의 조합으로 이루어진 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

[0115] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 화합물을 제공한다:

[0116] [화학식 1]



[0117]

[0118] 상기 화학식 1에서

[0119] L은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

[0120] R_1 및 R_2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

[0121] R_3 및 R_4는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 수소 또는 탄소수 1 내지 10의 저급 알킬기이고,

[0122] a1 및 a2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고, 단, a1 + a2는 1 이상의 정수이고,

[0123] b는 1 내지 4의 정수이고,

[0124] c는 0 내지 4의 정수이고,

[0125] d는 1 내지 5의 정수이고,

[0126] e 및 f는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이다.

[0127] 또한, 상기 a1, a2, b, c, d, e 및 f가 각각 독립적으로 2 이상의 정수인 경우, 2 이상의 각 반복 단위는서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0128] 상기 화학식 1에서 카바졸기는 정공수송기로서의 기능을 수행하고,벤즈이미다졸기는 전자수송기로서의 기능을 수행한다. 상기 정공수송기로서의 기능이란, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 정공 형성에 의한 양이온 특성을 가질 수 있는 기능을 의미한다. 또한 상기 전자수송기로서의 기능이란, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 전자 형성에 의한 음이온 특성을 가질 수 있는 기능을 의미한다.

[0129] 따라서 본 발명의 일구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 상기 벤즈이미다졸기가 카바졸기에 직접 치환되어 정공 및 전자의 수송 역할을 동시에 수행할 수 있는 것이다. 즉, 상기 유기광전소자용 화합물은 양쪽성의 성질을 가질 수 있으므로, 정공과 전자가 결합하는 유기광전소자의 발광층에서 우수한 계면 특성 및 전하수송 능력을 나타낼 수 있다.

[0130] 또한, 상기 벤즈이미다졸기가 카바졸기에 직접 치환되어 있는 구조는 본 발명의 일구현예에 따른 유기광전소자용 화합물의 전체적인 구조에 비대칭성을 부여하여, 용이하게 결정화되는 것을 방지할 수 있다. 즉, 본 발명의 일구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 우수한 열적 안정성을 가지는 호스트 재료, 정공전달 재료, 또는 전자전달 재료로 유용하게 적용될 수 있다.

[0131] 상기 화학식 1에서 L은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이고, 상기 아릴렌기는 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 테트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기 또는 이들의 조합일 수 있다. 보다 구체적으로, 상기 아릴렌은 페닐렌일 수 있으나, 상기 아릴렌이 이에 한정되는 것은 아니다.

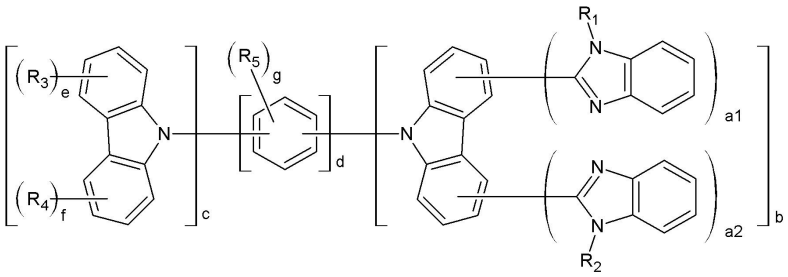
[0132] 또한, 상기 화학식 1에서 R_1 및 R_2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기인 것을 사용하여 본 발명의 일구현예에 따른 유기광전소자용 화합물의 구조적 안정성을 부여할 수 있다. 보다 구체적으로, 상기 화학식 1에서 R_1 및 R_2는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 12의 아릴기일 수 있다.

[0133] 또한, 상기 화학식 1에서 a1 및 a2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수일 수 있다. 단, a1 + a2는 1 내지 3의 정수이다.

[0134] 또한, 상기 화학식 1에서 헤테로아릴렌기 또는 헤테로아릴기는 각각 하나의 고리기 내에 N, O, S, P 또는 이들의 조합으로 이루어진 헤테로 원자를 1 내지 3 개 함유하고, 나머지는 탄소인 헤테로아릴렌기 또는 헤테로아릴기일 수 있다. 보다 구체적으로, 상기 헤테로아릴렌기 또는 헤테로아릴기는 각각 N 원자를 포함할 수 있다. 보다 더 구체적으로 상기 N 원자를 포함하는 헤테로아릴렌기 또는 헤테로아릴기는 각각 독립적으로 이미다졸 고리기, 옥사졸 고리기, 티아졸 고리기, 셀레나졸(Selenazol) 고리기, 트리아졸 고리기, 테트라졸 고리기, 옥사디아졸 고리기, 티아디아졸 고리기, 옥사트리아졸 고리기, 티아트리아졸 고리기, 피리미딘 고리기, 피리다진 고리기, 피라진 고리기, 트리아진 고리기, 테트라진 고리기 또는 이들의 조합으로 이루어진 고리기를 포함하는 것일 수 있다.

[0135] 보다 구체적으로, 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 2로 표시되는 것일 수 있다:

[0136] [화학식 2]



[0137]

[0138] 상기 화학식 2에서

[0139] R_1 및 R_2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고,

[0140] R_3 내지 R_5는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 수소 또는 탄소수 1 내지 10의 저급 알킬기이고,

[0141] a1 및 a2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이고, 단, a1 + a2는 1 내지 3의 정수이고,

[0142] b는 1 내지 4의 정수이고,

[0143] c는 0 내지 4의 정수이고,

[0144] d는 1 내지 5의 정수이고,

[0145] e 및 f는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고,

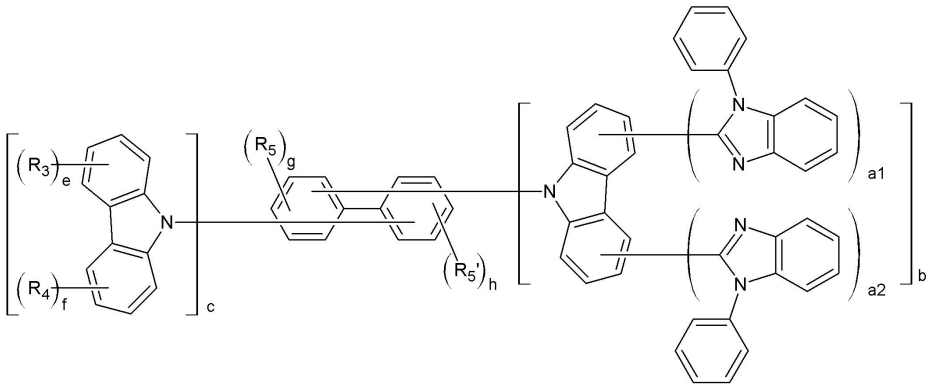
[0146] g는 1 내지 4의 정수이다.

[0147] 또한, 상기 a1, a2, b, c, d, e, f 및 g가 각각 독립적으로 2 이상의 정수인 경우, 2 이상의 각 반복 단위는서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0148] 또한, 상기 화학식 1 및 2에서 d가 1 또는 2인 경우, 상기 화합물을 포함하는 발광층이 원하는 파장 범위에서 발광하도록 조절하는 것이 가능하고, 승화 정제를 용이하게 수행하여 상기 화합물을 높은 순도로 얻을 수 있다.

[0149] 보다 더 구체적으로, 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 3으로 표시되는 것일 수 있다:

[0150] [화학식 3]



[0151]

[0152] 상기 화학식 3에서

[0153] R_3 내지 R_5, 및 R_5'은 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 수소 또는 탄소수 1 내지 10의 저급 알킬기이고,

[0154] a1 및 a2는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이고, 단, a1 + a2는 1 내지 3의 정수이고,

[0155] b는 1 내지 4의 정수이고,

[0156] c는 0 내지 4의 정수이고,

[0157] e 및 f는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고,

[0158] g 및 h는 서로 같거나 다른 것으로, 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이다.

[0159] 또한, 상기 a1, a2, b, c, e, f, g 및 h가 각각 독립적으로 2 이상의 정수인 경우, 2 이상의 각 반복 단위는서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0160] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 상기 화학식 4 내지 31로 표시되는 것일 수 있다. 다만, 본 발명은 상기 화합물에 한정되지 아니한다.

[0161] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 유기박막층에 사용되어 유기광전소자의 효율 특성을 향상시키며, 구동전압을 낮출 수 있다. 또한, 수명특성을 향상시킬 수 있다.

[0162] 상기 유기광전소자용 화합물은 정공 및 전자의 수송능력이 뛰어난 전하수송 재료로 사용될 수 있다. 또한, 상기 유기광전소자용 화합물은 그 단독으로 사용하는 것도 가능하나, 도펀트와 함께 호스트 재료로 사용될 수 있다. 특히, 상기 유기광전소자용 화합물은 녹색 또는 적색 발광의 호스트 재료로 사용될 수 있다.

[0163] 상기 도펀트란 그 자체로서 발광능력이 높은 화합물로, 호스트에 미량 혼합하여 사용하기 때문에 이를 게스트(guest)라고도 한다. 즉, 도펀트는 호스트 재료에 도핑(doping)되어 발광을 일으키는 물질로서, 일반적으로 삼중항 상태 이상으로 여기시키는 다중항 여기(multiplet excitation)에 의해 발광하는 금속 착체(metal complex)와 같은 물질이 사용된다. 이러한 도펀트로는 당분야에서 일반적으로 사용되는 적색(R), 녹색(G), 청색(B)의 형광 또는 인광 도펀트가 모두 사용가능하나, 특히, 적색, 녹색 또는 청색의 인광도펀트를 사용하는 것이 좋다. 또한, 발광 효율이 높고, 잘 응집되지 않으며, 호스트 재료속에 균일하게 분포되는 것을 사용할 수 있다.

[0164] 상기 인광 도펀트의 예로는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm 또는 이들의 조합인 원소를 포함하는 유기 금속화합물을 들 수 있다. 보다 구체적으로, 적색 인광 도펀트로는 PtOEP, $Ir(Piq)_2(acac)$, $Ir(Piq)_3$, UDC사의 RD 61 등을 사용할 수 있고, 녹색 인광 도펀트로는 $Ir(PPy)_2(acac)$, $Ir(PPy)_3$, UDC사의 GD48 등을 사용할 수 있으며, 청색 인광 도펀트로는$(4,6\text{-}F2PPy)_2Irpic$(참조문헌: *Appl. Phys. Lett.*, 79, 2082-2084, 2001) 등을 사용할 수 있다. 이 때, 상기 Piq는 1-페닐이소퀴놀린(1-phenylisoquinoline)을 의미하고, acac는 펜탄-2,4-디온(pentane-2,4-dione)을 의미하며, PPy는 2-페닐피리딘(2-phenylpyridine)을 의미한다.

[0165] 또한, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 유리전이온도(T_g)가 110 ℃ 이상이고, 열분해온도

(T_d)가 400 ℃ 이상인 것으로, 보다 구체적으로는 유리전이온도가 110 내지 200 ℃의 범위이고, 열분해온도가 400 내지 600 ℃의 범위인 것을 사용할 수 있다. 보다 더 구체적으로 상기 열분해온도는 430 ℃ 이상인 것을 사용할 수 있다. 이로써, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 열적안정성이 우수한 호스트 재료 또는 전하수송 재료로 사용될 수 있는 것이다.

[0166] 본 발명의 다른 일 구현예에 따르면 상기 유기광전소자용 화합물을 포함하는 유기광전소자를 제공한다. 이 때, 상기 유기광전소자라 함은 유기발광소자, 유기 태양 전지, 유기 트랜지스터, 유기 감광체 드럼, 유기 메모리 소자 등을 의미한다. 유기 태양 전지의 경우에는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물이 전극이나 전극 버퍼층에 포함되어 양자 효율을 증가시키며, 유기 트랜지스터의 경우에는 게이트, 소스-드레인 전극 등에서 전극 물질로 사용될 수 있다.

[0167] 이하에서는 유기광전소자에 대하여 구체적으로 설명한다. 본 발명의 다른 일 구현예에 따르면, 양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 배치되는 적어도 1층의 유기박막층을 포함하고, 상기 유기박막층은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함하는 것인 유기광전소자를 제공한다.

[0168] 상기 유기광전소자용 화합물을 포함할 수 있는 유기박막층으로는 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 정공저지층, 전자수송층, 전자주입층, 전자저지층 또는 이들의 조합인층을 포함할 수 있는 바, 이 중에서 적어도 어느 하나의 층은 본 발명의 일구현예에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함한다. 보다 구체적으로 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층또는 이들의 조합인층에 본 발명의 일구현예에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함할 수 있다.

[0169] 도 1 내지 도 5는 상기 유기광전소자용 화합물을 포함하는 유기광전소자의 단면도이다.

[0170] 도 1 내지 도 5를 참조하면, 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.

[0171] 상기 양극(120)은 유기박막층으로 정공 주입이 원활하게 일어날 수 있도록 일함수가 큰 물질을 포함하는 것이 좋다. 상기 양극의 구체적인 예로는 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금 등과 같은 금속 또는 이들 금속의 합금 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(indium tin oxide, ITO), 인듐아연산화물(IZO) 등과 같은 금속 산화물 ZnO/Al, SnO2/Sb 등과 같은 금속 산화물과 금속의 조합 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](poly[3,4-(ehtylene-1,2-dioxy)thiophene]: PEDOT 또는 PEDT), PEDOT/폴리스티렌설포네이트(polystyrenesulfonate: PSS) 폴리피롤, 폴리아닐린 등과 같은 전도성 고분자 등을 들 수 있다. 다만, 양극이 상기한 물질에 한정되는 것은 아니다. 상기 양극은 보다 구체적으로 ITO를 포함하는 투명전극을 사용할 수 있다.

[0172] 상기 음극(110)은 유기박막층으로 전자 주입이 원활하게 일어날 수 있도록 일함수가 작은 물질을 포함하는 것이 좋다. 상기 음극의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금 LiF/Al, LiO2/Al, LiF/Ca, LiF/Al, BaF2/Ca 등과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있다. 다만, 음극이 상기한 물질에 한정되는 것은 아니다. 상기 음극은 보다 구체적으로 알루미늄 등과 같은 금속전극을 사용할 수 있다.

[0173] 먼저, 도 1은 유기 박막층(105)으로서 발광층(130)만이 존재하는 유기광전소자(100)를 나타낸 것으로, 상기 유기박막층(105)은 발광층(130)만으로 존재할 수 있다.

[0174] 도 2는 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 ITO와 같은 투명전극과의 접합성 및 정공수송성을 향상시키는 기능을 한다.

[0175] 도 3은 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.

[0176] 도 4는 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 ITO와의 접합성을 향상시킬 수 있다.

[0177] 도 5는 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.

[0178] 상기 도 1 내지 도 5에서 상기 유기박막층(105)을 이루는 전자수송층(150), 전자주입층(160), 발광층(130, 230), 정공수송층(140), 정공주입층(170) 또는 이들의 조합에는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물이 포함될 수 있다. 이 때, 상기 유기광전소자용 화합물은 전자수송층(150) 또는 전자주입층(160)을 포함하는 전자수송층(150)에 사용될 수 있으며, 그 중에서도 전자수송층에 포함될 경우 정공저지층을 별도로 형성할 필요가 없어 보다 단순화된 구조의 유기광전소자를 제공할 수 있다.

[0179] 또한, 상기 유기광전소자용 화합물이 발광층(130, 230) 내에 포함되는 경우 상기 유기광전소자용 화합물은 인광 호스트로서 사용될 수 있고, 상기 발광층(130, 230)은 도펀트를 더 포함할 수 있다. 이 때, 상기 도펀트는 적색, 녹색 또는 청색의 인광도펀트일 수 있다.

[0180] 상기에서 설명한 유기광전소자는, 기판에 양극을 형성한 후, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금, 이온도금 등과 같은 건식성막법 스핀코팅(spin coating), 침지법(dipping), 유동코팅법(flow coating) 등과 같은 습식성막법 등으로 유기박막층을 형성한 후, 그 위에 음극을 형성하여 제조할 수 있다.

[0181] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기광전소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

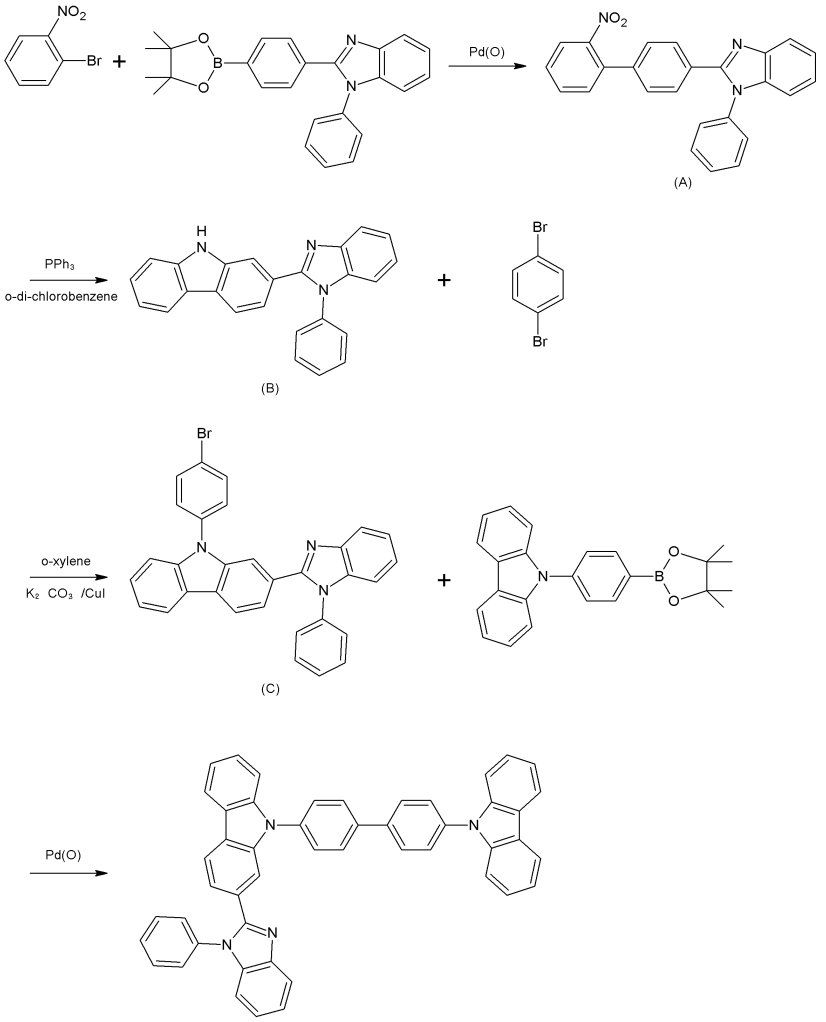
[0182] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

[0183] **유기광전소자용 화합물의 합성**

[0184] **실시예 1: 화학식 4로 표시되는 화합물의 합성**

[0185] 구체적인 예로서 제시된 상기 화학식 4로 표시되는 유기광전소자용 화합물은 아래의 반응식 1과 같이 합성되었다.

[0186] [반응식 1]



[0187]

[0188] 제 1단계 중간체 생성물(A)의 합성

[0189] 1-브로모-2-니트로벤젠 5 g(24 mmol), 4-(1-페닐-벤즈이미다졸-2-일)-페닐 보론산 피나콜레이트(4-(1-phenyl-benzimidazol-2-yl)-phenyl boronic acid pinacolate) 9.51 g(24 mmol), 탄산칼륨 3.3 g(24 mmol) 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)2 g(24 mmol)을 테트라히드로퓨란 200 ml, 톨루엔 100 ml 및 물 20 ml에 현탁하여, 질소 분위기 하에서 24 시간 동안 가열 환류하였다.

[0190] 유기용매를 감압하에서 증류하여 제거한 후, 그 잔류물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 생성물(A) 5 g(수율: 50 %)을 수득하였다.

[0191] 제 2단계 중간체 생성물(B)의 합성

[0192] 상기 1 단계에서 얻어진 중간체 생성물(A) 5 g(12 mmol)및 트리페닐포스핀 6.7 g(24 mmol)을 디클로로벤젠 50 ml에 용해하고, 아르곤 분위기 하에서 160 ℃로 24 시간 동안 가열 환류하였다.

[0193] 유기용매를 감압하에서 증류하여 제거한 후, 그 잔류물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 생성물(B) 3 g(수율: 60 %)을 수득하였다.

[0194] 제 3단계 중간체 생성물(C)의 합성

[0195] 상기 2 단계에서 얻어진 중간체 생성물(B) 5 g(12 mmol), 1,4-디브로모벤젠 1.41 g(12 mmol), 탄산칼륨 3.31 g(24 mmol) 및 요오드화 구리(copper iodine) 220 mg을 자일렌 50 ml에 용해하고, 아르곤 분위기 하에서 160

℃로 24 시간 동안 가열 환류하였다.

[0196] 유기용매를 감압하에서 증류하여 제거한 후, 그 잔류물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 생성물(C) 3 g(수율: 48 %)을 수득하였다.

[0197] 제 4단계 화학식 4로 표시되는 화합물의 합성

[0198] 상기 3 단계에서 얻어진 중간체 생성물(C) 5 g(9.7 mmol), 4-(N-카바졸일)-페닐 보론산 피나콜레이트(4-(N-carbazolyl)-phenyl boronic acid pinacolate) 3.58 g(9.7 mmol) 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) 0.49 g(0.426 mmol)을 테트라히드로퓨란 100 ml 및 톨루엔 100 ml의 혼합 용액에 현탁하고, 상기 현탁액과 탄산칼륨 1.96 g(14.2 mmol) 및 물 100 ml의 혼합 용액을 혼합하여, 질소 분위기 하에서 9 시간 동안 가열 환류하였다.

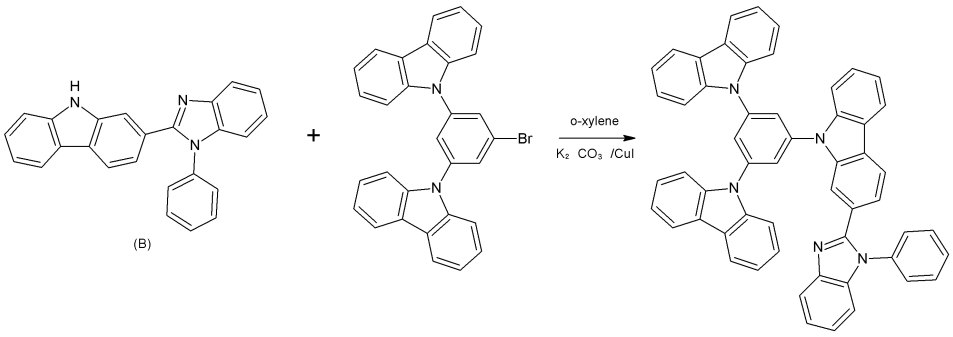
[0199] 반응 유체를 2 층으로 분리한 후, 유기층을 염화나트륨 포화수용액으로 세정하고, 무수 황산나트륨으로 건조하였다. 유기용매를 감압하에서 증류하여 제거한 후, 그 잔류물을 톨루엔으로 재결정하였다. 상기 석출된 결정은 여과하여 분리한 후, 톨루엔으로 세정함으로써, 화학식 4로 표시되는 화합물 4 g(수율: 60 %)을 수득하였다. 상기 수득된 화학식 4의 화합물을 원소 분석(EA(Elemental Analyzer))한 결과는 다음과 같다.

[0200] EA 분석결과 :C, 86%; H, 4.5%; N, 8.3%

[0201] **실시예 2: 화학식 5로 표시되는 화합물의 합성**

[0202] 구체적인 예로서 제시된 상기 화학식 5로 표시되는 유기광전소자용 화합물은 아래의 반응식 2과 같이 합성되었다.

[0203] [반응식 2]



[0204]

[0205] 상기 실시예 1의 2 단계에서 얻어진 중간체 생성물(B) 5 g(14 mmol),디카바졸일-5-브로모 벤젠(1,3-dicarbazolyl-5-bromo benzene) 6.78 g(14 mmol), 요오드화 구리 260 mg(1.4 mmol) 및 탄산칼륨 1.93 g(14 mmol)을 자일렌 50 ml에 용해하고, 아르곤 분위기 하에서 160 ℃로 24 시간 동안 가열 환류하였다.

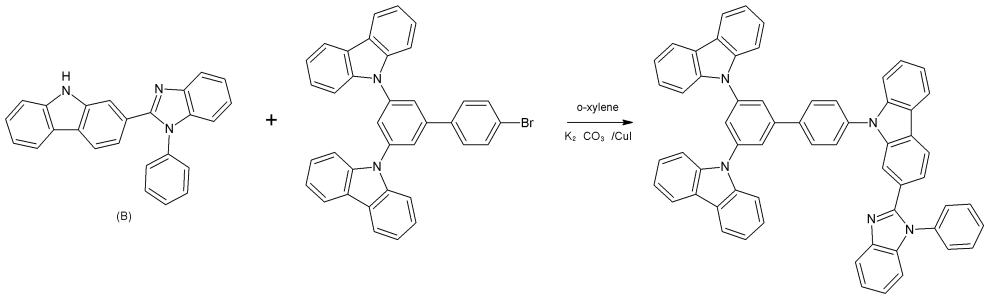
[0206] 반응 유체를 2 층으로 분리한 후, 유기층을 염화나트륨 포화수용액으로 세정하고, 무수 황산나트륨으로 건조하였다. 유기용매를 감압하에서 증류하여 제거한 후, 그 잔류물을 톨루엔으로 재결정하였다. 상기 석출된 결정은 여과하여 분리한 후, 톨루엔으로 세정함으로써, 화학식 5로 표시되는 화합물 6.3 g(수율: 63 %)을 수득하였다. 상기 수득된 화학식 5의 화합물을 원소 분석(EA(Elemental Analyzer))한 결과는 다음과 같다.

[0207] EA함량 : C, 86.2%; H, 4.5%; N, 9.1%

[0208] **실시예 3: 화학식 6으로 표시되는 화합물의 합성**

[0209] 구체적인 예로서 제시된 상기 화학식 6으로 표시되는 유기광전소자용 화합물은 아래의 반응식 3과 같이 합성되었다.

[0210] [반응식 3]



[0211]

[0212] 상기 실시예 1의 2 단계에서 얻어진 중간체 생성물(B) 5 g(14 mmol), 1,3-디카바졸일-5-(4-브로모페닐)벤젠(1,3-dicarbazolyl-5-(4-bromophenyl) benzene) 7.88 g(14 mmol), 요오드화 구리 260 mg(1.4 mmol) 및 탄산칼륨 1.93 g(14 mmol)을 자일렌 50 ml에 용해하고, 아르곤 분위기 하에서 160 ℃로 24 시간 동안 가열 환류하였다.

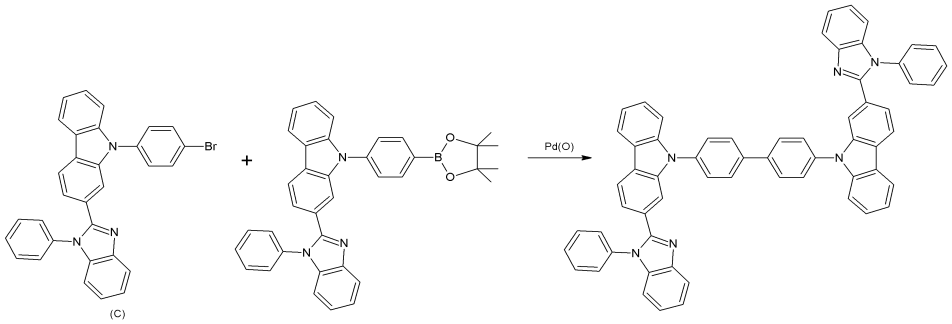
[0213] 반응 유체를 2 층으로 분리한 후, 유기층을 염화나트륨 포화수용액으로 세정하고, 무수 황산나트륨으로 건조하였다. 유기용매를 감압하에서 증류하여 제거한 후, 그 잔류물을 톨루엔으로 재결정하였다. 상기 석출된 결정은 여과하여 분리한 후, 톨루엔으로 세정함으로써, 화학식 6으로 표시되는 화합물 7.3 g(수율: 61 %)을 수득하였다. 상기 수득된 화학식 6의 화합물을 원소 분석(EA(Elemental Analyzer))한 결과는 다음과 같다.

[0214] EA 함량 :C, 87%; H, 4.5%; N, 8.3%

[0215] **실시예 4: 화학식 7로 표시되는 화합물의 합성**

[0216] 구체적인 예로서 제시된 상기 화학식 7로 표시되는 유기광전소자용 화합물은 아래의 반응식 4와 같이 합성되었다.

[0217] [반응식 4]



[0218]

[0219] 상기 실시예 1의 3 단계에서 얻어진 중간체 생성물(C) 5 g(9.7 mmol), 4-((1-페닐-벤즈이미다졸-2-일)-N-카바졸일)-페닐 보론산 피나콜레이트(4-((1-phenyl-benzimidazol-2-yl)-N-carbazolyl)-phenyl boronic acid pinacolate) 5.44 g(9.7 mmol) 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)1.12 g(0.97 mmol)을 테트라히드로퓨란 100 ml 및 톨루엔 100 ml의 혼합 용액에 현탁하고, 상기 현탁액과 탄산칼륨 2.68 g(18 mmol) 및 물 100 ml의 혼합 용액을 혼합하여, 질소 분위기 하에서 9 시간 동안 가열 환류하였다.

[0220] 반응 유체를 2 층으로 분리한 후, 유기층을 염화나트륨 포화수용액으로 세정하고, 무수 황산나트륨으로 건조하였다. 유기용매를 감압하에서 증류하여 제거한 후, 그 잔류물을 톨루엔으로 재결정하였다. 상기 석출된 결정은 여과하여 분리한 후, 톨루엔으로 세정함으로써, 화학식 7로 표시되는 화합물 3.5 g(수율: 41 %)을 수득하였다. 상기 수득된 화학식 7의 화합물을 원소 분석(EA(Elemental Analyzer))한 결과는 다음과 같다.

[0221] EA 함량 : C, 85.5%; H, 4.6%; N, 9.67%

[0222] **실험예 1: 유기광전소자용 화합물의 열적안정성 물성측정**

[0223] 상기 실시예 1 내지 4에서 합성된 유기광전소자용 화합물에 대하여 다음의 측정 항목별로 물성을 측정하고 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[0224] (1) PL 발광 특성(nm): 형광분석기(fluorecence spectrometer, F4500, Hitachi 사)을 이용하여, 피크(peak)를 보이는 파장을 측정하여, 하기 표 1에 기재하였다.

[0225] (2) 단일항 밴드갭 에너지(ΔEs, eV): 형광분석기(fluorecence spectrometer, F4500, Hitachi 사) 및 UV 분광광도계(UV-VIS Spectrophotometer, 1650pc, SHIMADZU 사)를 이용하여 측정함으로써, 하기 표 1에 기재하였다.

[0226] (3) HOMO(eV) : Cyclic voltametry(모델명: Epsilon, 제조사: Bioanalytical. Systems, Inc)를 이용하여 측정함으로써, 하기 표 1에 기재하였다.

[0227] (4) LUMO(eV) : 상기 측정된 HOMO 값과 단일항 밴드갭 에너지(ΔES)의 값을 합하여 계산되었다.

[0228] [표 1]

[0229]

구분	실시예 1	실시예 2	실시예 3	실시예 4
PL 발광특성(nm)	436	417	427	440
단일항 밴드갭 에너지 (ΔEs, eV)	3.26	3.30	3.30	3.30
HOMO(eV)	-5.64	-5.7	-5.74	-5.75
LUMO(eV)	-2.38	-2.4	-2.44	-2.45

[0230] 상기 표 1을 참조하면, 본 발명의 실시예 1 내지 4에서 합성된 화합물들의 최대 발광은 유기발광소자의 녹색 및 적색 영역에 적합한 파장을 나타내는 것을 확인할 수 있다.

[0231] **유기발광소자의 제조**

[0232] **실시예 5**

[0233] 상기 실시예 1에서 제조된 화합물을 호스트로 사용하고, $Ir(PPy)_3$를 도펀트로 사용하여 유기발광소자를 제작하였다. 양극으로는 ITO를 1000 Å의 두께로 사용하였고, 음극으로는 알루미늄(Al) 을 1000 Å의 두께로 사용하였다.

[0234] 구체적으로, 유기발광소자의 제조방법을 설명하면, 양극은 15Ω/cm2의 면저항값을 가진 ITO 유리 기판을 50 mm × 50 mm × 0.7 mm의 크기로 잘라서 아세톤과 이소프로필알코올과 순수물 속에서 각 15 분 동안 초음파 세정한 후, 30 분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다.

[0235] 상기 기판 상부에 진공도 650×10^{-7}Pa, 증착속도 0.1 내지 0.3 nm/s의 조건으로 N,N'-디페닐-N,N'-비스-[4-(페닐-m-톨릴아미노)-페닐)]-비페닐-4,4'-디아민(N,N′ -diphenyl-N,N′ -bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4′ -diamine: DNTPD)(60 nm), N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphtyl)-N,N'-diphenylbenzidine: NPB)(30 nm), 및 4,4',4"-트리(N-카바졸릴)트리페닐아민(4,4',4"-tri(N-carbazolyl)triphenylamine: TCTA)(20 nm)을 증착하여 1100 Å의 정공수송층을 형성하였다.

[0236] 이어서, 동일한 진공 증착조건에서 상기 실시예 1에서 제조된 화합물을 이용하여 막 두께 300 Å의 발광층을 형성하였고, 이 때, 인광 도펀트인 $Ir(PPy)_3$을 동시에 증착하였다. 이 때, 인광 도펀트의 증착속도를 조절하여, 발광층의 전체량을 100 중량%로 하였을 때, 인광 도펀트의 배합량이 10중량%가 되도록 증착하였다.

[0237] 상기 발광층 상부에 동일한 진공 증착조건을 이용하여, Alq_3를 증착하여, 막 두께 200 Å의 전자수송층을 형성하였다.

[0238] 상기 전자수송층 상부에 음극으로서 LiF와 Al을 순차적으로 증착하여 유기발광소자를 제작하였다.

[0239] 상기 유기발광소자의 구조는 ITO/ DNTPD(60 nm)/ NPB(30 nm)/ TCTA(20nm)/ EML(실시예 1의 화합물(10 중량%) + $Ir(PPy)_3$, 30 nm)/ Alq_3(20 nm)/ LiF/ Al(100 nm)의 구조로 제작되었다.

[0240] **실시예 6**

[0241] 상기 실시예 1에서 제조된 화합물을 발광층의 호스트로 사용한 것을 대신하여, 실시예 3에서 제조된 화합물을 발광층의 호스트로 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 5와 동일한 방법으로 제조되었다.

[0242] **실시예 7**

[0243] 상기 실시예 1에서 제조된 화합물을 이용하여 막 두께 300 Å의 발광층을 형성함에 있어서, 인광 도펀트의 증착 속도를 조절하여, 발광층의 전체량을 100 중량%로 하였을 때, 인광 도펀트의 배합량이 5중량%가 되도록 증착한 것을 제외하고는 상기 실시예 5와 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[0244] **실시예 8**

[0245] 발광층으로서 상기 실시예 1에서 제조된 화합물을 이용하여 막 두께 300 Å의 발광층을 형성하고, 이 때, 인광 도펀트인 Ir(PPy)3을 동시에 증착한 후, 바쏘쿠프로인(BCP) 50 Å을 더 증착하여, 하기 구조로 제작된 것을 제외하고는 상기 실시예 5와 동일한 방법으로 제조되었다.

[0246] ITO/ DNTPD(60 nm)/ NPB(30 nm)/ TCTA(20 nm)/ EML(실시예 1의 화합물(10 중량%) + $Ir(PPy)_3$, 30 nm)/ BCP(5 nm)/ Alq_3(20 nm)/ LiF/ Al(100 nm)

[0247] **실시예 9**

[0248] 상기 실시예 1에서 제조된 화합물을 발광층의 호스트로 사용한 것을 대신하여, 실시예 3에서 제조된 화합물을 발광층의 호스트로 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 8과 동일한 방법으로 제조되었다.

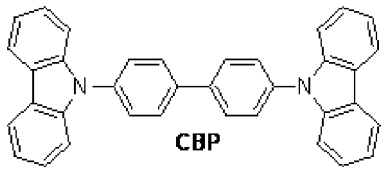
[0249] **실시예 10**

[0250] 상기 실시예 1에서 제조된 화합물을 이용하여 막 두께 300 Å의 발광층을 형성함에 있어서, 인광 도펀트의 증착 속도를 조절하여, 발광층의 전체량을 100 중량%로 하였을 때, 인광 도펀트의 배합량이 5 중량%가 되도록 증착한 것을 제외하고는 상기 실시예 8과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[0251] **비교예 1**

[0252] 상기 실시예 1에서 제조된 화합물을 발광층의 호스트로 사용한 것을 대신하여, 하기 화학식 32로 표시되는4,4-N,N-다이카바졸바이페닐(CBP)를 발광층의 호스트로 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 5와 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[0253] [화학식 32]

[0254] 

[0255] **비교예 2**

[0256] 상기 실시예 1에서 제조된 화합물을 발광층의 호스트로 사용한 것을 대신하여, 상기 화학식 32로 표시되는 CBP를 발광층의 호스트로 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 8과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[0257] **실험예 2:유기발광소자의 성능 측정**

[0258] 상기 실시예 5 내지 10 및 비교예 1 내지 2에서 제조된 각각의 유기발광소자에 대하여 전압에 따른 전류밀도 변화, 휘도 변화 및 발광효율을 측정하였다. 구체적인 측정방법은 다음과 같고, 그 결과는 하기 표 2에 나타내었다.

[0259] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[0260] 상기 제조된 유기발광소자에 대하여 전압을 0 V 부터 10 V 까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위 소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[0261] (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

[0262] 상기 제조된 유기발광소자에 대하여 전압을 0 V 부터 10 V 까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그 때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

[0263] (3) 발광효율 측정

[0264] 상기 "(1) 전압 변화에 따른 전류 밀도의 변화 측정" 및 "(2) 전압 변화에 따른 휘도 변화 측정"에서 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 밝기(1000 cd/m^2)에서의 전류 효율(cd/A) 및 전력 효율(lm/W)을 계산하였다.

[0265] [표 2]

[0266]

	소자구조	발광층의 호스트 재료	1000 cd/cm^2		
			구동 전압 (V)	전류 효율 (cd/A)	전력 효율 (lm/W)
실시예 5	ITO/ DNTPD/ NPB/ TCTA/ EML/ Alq_3/ LiF/ Al	실시예 1의 화합물 (10 중량%)	5.30	52.09	34.23
실시예 6		실시예 3의 화합물 (10 중량%)	6.43	32.04	17.38
비교예 1		CBP (10 중량%)	9.49	25.00	9.18
실시예 8	ITO/ DNTPD/ NPB/ TCTA/ EML/ BCP/ Alq_3/ LiF/ Al	실시예 1의 화합물 (10 중량%)	5.34	55.95	36.47
비교예 2		CBP (10 중량%)	7.70	42.70	19.20

[0267] 상기 표 2를 참조하면, 본 발명의 실시예 1 및 3에 따른 화합물을 발광층의 호스트로 사용하여 제조된 유기발광소자의 소자특성 평가 결과, 휘도 1000 cd/cm^2에서 구동전압은 6.5 V 이하로 나타난다. 이것은 비교예 1 및 2에서 CBP를 발광층의 호스트로 사용하여 제조된유기발광소자가 7.7 V 및 9.5 V의 구동전압을 가지는 것과 비교하여 매우 낮은 구동전압을 가지는 것을 확인할 수 있다. 특히, 실시예 1에 따른 화합물을 발광층의 호스트로 사용하여 제조된 실시예 5 및 8에 따른 유기발광소자는 구동전압이 각각 5.30 V 및 5.34 V로 구동전압의 감소 효과가 매우 우수한 것을 확인할 수 있다.

[0268] 또한, 실시예 1 및 3에서 제조된 화합물을 발광층의 호스트로 사용하는 유기발광소자의 전류효율 및 전력효율도 비교예 1 및 2에 따른 유기발광소자와 비교하여, 매우 향상된 것을 확인할 수 있다. 특히, 실시예 5 및 8에 따른 유기발광소자는 비교예 1에 따른 유기발광소자와 비교하여, 각각 3.72 배 및 1.89 배 이상 향상된 전력효율을 가지는 것을 확인할 수 있다.

[0269] 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

[0270] 도 1 내지 도 5는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함하여 제조될 수 있는 유기광전소자에 대한 다양한 구현예들을 나타내는 단면도이다.

[0271] <도면의 주요 부분에 대한 부호의 설명>

[0272] 100 : 유기광전소자 : 음극

[0273] 120 : 양극 : 유기 박막층

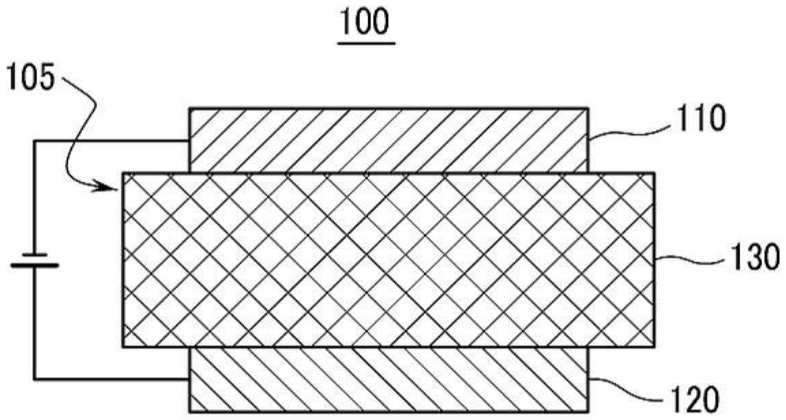
[0274] 130 : 발광층 : 정공 수송층

[0275] 150 : 전자수송층 : 전자주입층

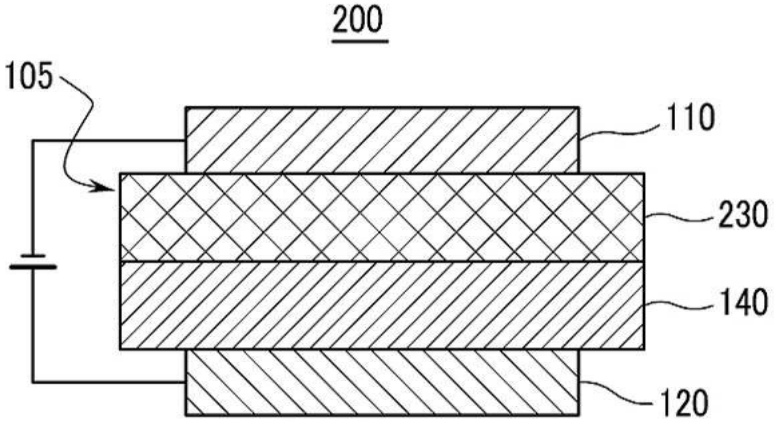
[0276] 170 : 정공주입층 : 발광층 + 전자수송층

도면

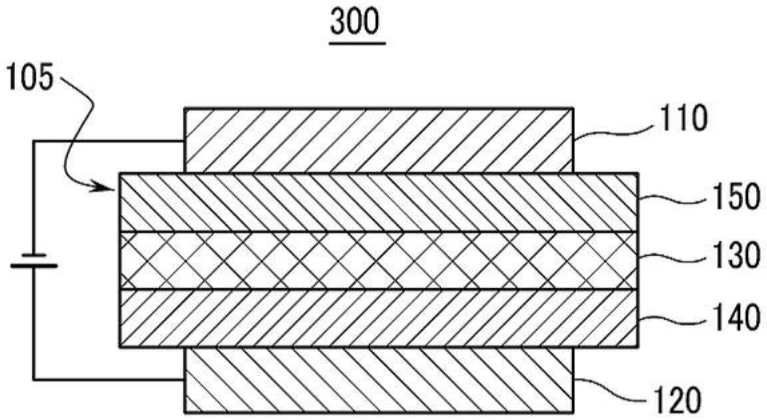
도면1



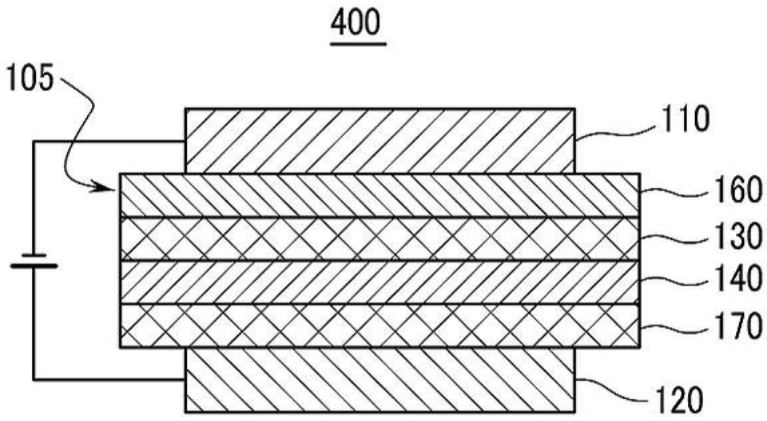
도면2



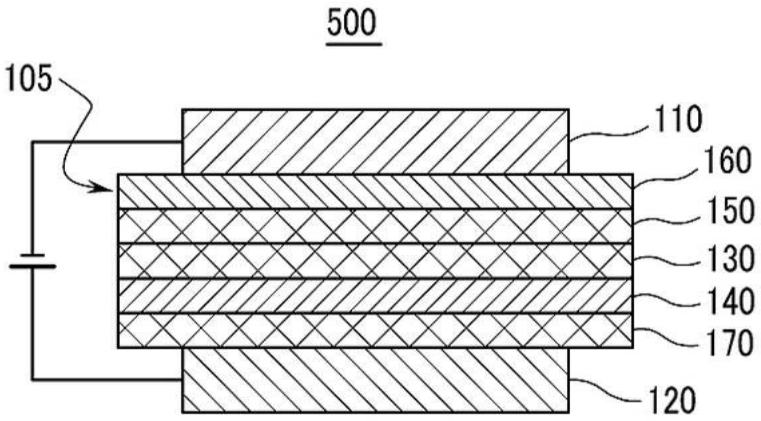
도면3



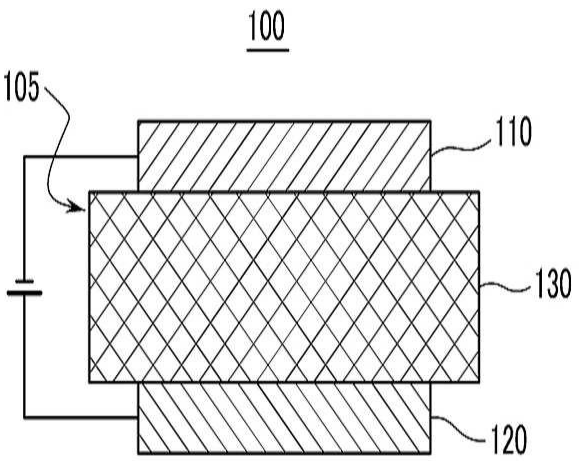
도면4



도면5



专利名称(译)	标题：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	KR101233378B1	公开(公告)日	2013-02-15
申请号	KR1020090040341	申请日	2009-05-08
[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 YOUNG HOON 김영훈 YU EUN SUN 유은선 JUNG SUNG HYUN 정성현 KANG EUI SU 강의수 PARK YOUNG SUNG 박영성 CHAE MI YOUNG 채미영		
发明人	김영훈 유은선 정성현 강의수 박영성 채미영		
IPC分类号	C09K11/06		
CPC分类号	H01L51/0072 C09K2211/1466 H01L51/5012 C09B57/00 C07D403/14 C09K11/06		
其他公开文献	KR1020100121267A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明提供由式1表示的有机光电元件用化合物，和包含该化合物的有机光电元件。用于有机光电元件的化合物可用作具有优异热稳定性的主体材料或电荷传输材料，并且特别是可提供更持久的有机光电元件和即使在低驱动电压下也具有高发光效率的显示装置当用作有机光电元件中的有机薄膜层时。