



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년08월07일
(11) 등록번호 10-1885697
(24) 등록일자 2018년07월31일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2011-0063032
(22) 출원일자 2011년06월28일
심사청구일자 2016년06월27일
(65) 공개번호 10-2013-0007047
(43) 공개일자 2013년01월18일
(56) 선행기술조사문헌
US04619994 A

(73) 특허권자
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(72) 발명자
한상현
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
황석환
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
(74) 대리인
리엔목록특허법인
(뒷면에 계속)

전체 청구항 수 : 총 21 항

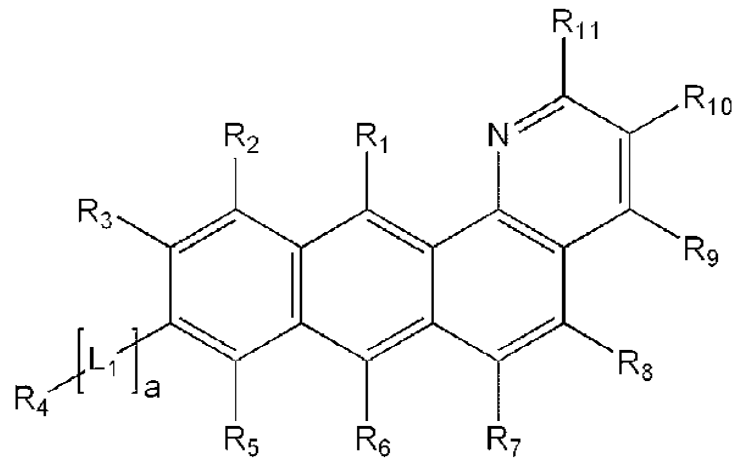
심사관 : 송이화

(54) 발명의 명칭 **헤테로고리 화합물, 이를 포함한 유기 전계 발광 소자 및 상기 유기 전계 발광 소자를 포함하는 평판 표시 장치**

(57) 요약

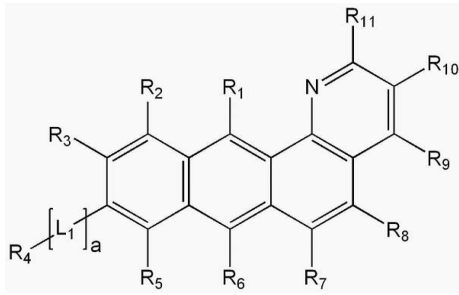
하기 화학식 1 로 표시되는 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자 및 평판 표시 장치가 제공
(뒷면에 계속)

대표도 - 도2



된다:

<화학식 1>



상기 식 중, R₁ 내지 R₁₁, L₁ 및 a 는 발명의 상세한 설명을 참조한다. 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기층을 구비한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고발광 효율 및 장수명의 특성을 가진다.

(72) 발명자

김영국

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

정혜진

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

임진오

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

조세진

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

이중혁

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

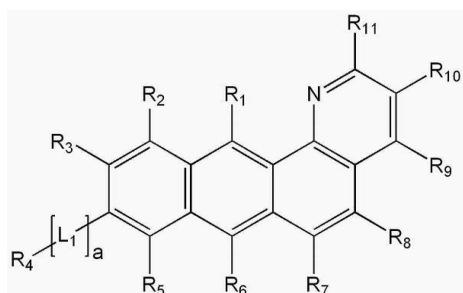
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물(heterocyclic compound):

<화학식 1>



상기 식 중,

R_1 및 R_6 은 서로 독립적으로 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴티오기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나이고,

R_2 내지 R_5 , R_7 및 R_8 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴티오기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나이고,

R_9 내지 R_{11} 은 수소 원자이고,

L_1 은 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 헤테로아릴렌기 중 하나이고, a 는 1 또는 2의 정수 중 하나이고, a 가 2인 경우 두 개의 L_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 R_1 및 R_6 은 서로 독립적으로 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 헥실기, 치환 또는 비치환된 비헥실기, 치환 또는 비치환된 테펜틸기, 치환 또는 비치환된 페녹시기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디아지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리스세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 피리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고,

상기 R_2 내지 R_5 , R_7 및 R_8 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 헥실기, 치환 또는 비치환된 비헥실기, 치환 또는 비치환된 테펜틸기, 치환 또는 비치환된 페녹시기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디아지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리스세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 피리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고,

상기 Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 헥실기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나인 헤테로고리 화합물.

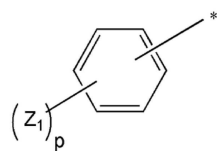
청구항 3

제1항에 있어서,

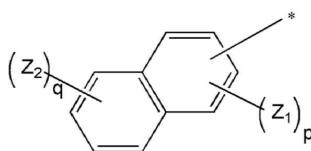
상기 R_1 및 R_6 은 서로 독립적으로 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기 및 하기 화학식 2A 내지 2P로 표시되는 그룹 중 하나이고,

상기 R_2 내지 R_5 , R_7 및 R_8 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기 및 하기 화학식 2A 내지 2P로 표시되는 그룹 중 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로고리 화합물:

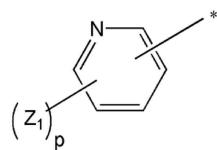
<화학식 2A>



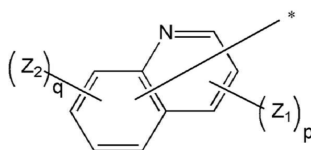
<화학식 2B>



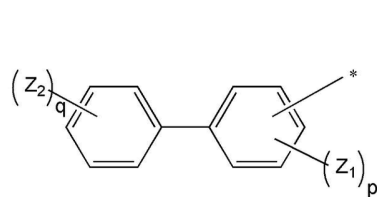
<화학식 2C>



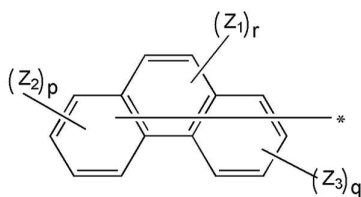
<화학식 2D>



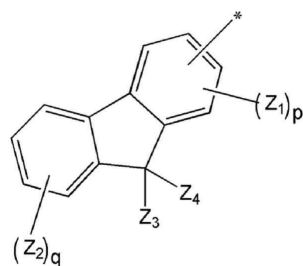
<화학식 2E>



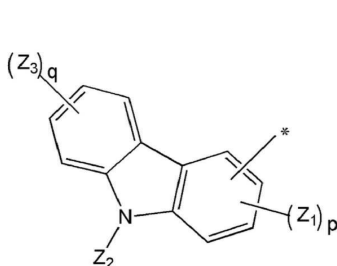
<화학식 2F>



<화학식 2G>

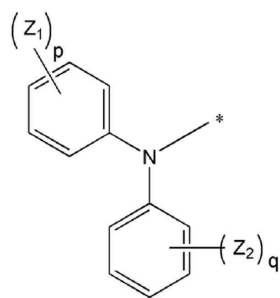


<화학식 2H>

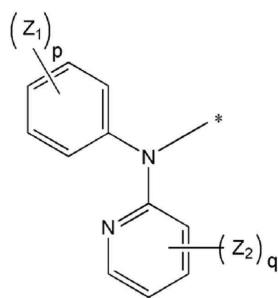


<화학식 2I>

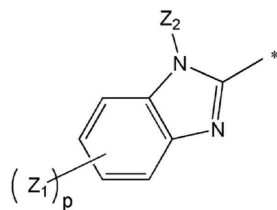
<화학식 2J>



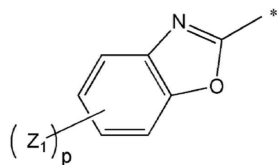
<화학식 2K>



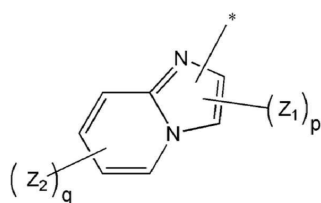
<화학식 2L>



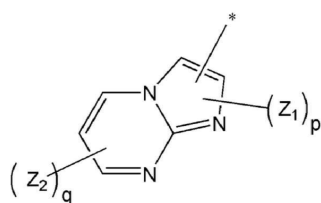
<화학식 2M>



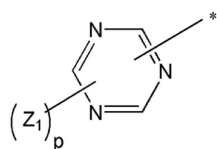
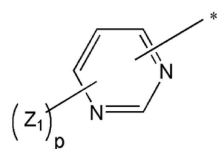
<화학식 2N>



<화학식 2O>



<화학식 2P>



상기 식 중,

Z_1 , Z_2 및 Z_3 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 메톡시기, 치환 또는 비치환된 에톡시기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기 및 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기 중 하나이고, 복수 개의 Z_1 , Z_2 및 Z_3 은 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있고, p 및 q 는 1 내지 5의 정수 중 하나이고, r 은 1 또는 2 이고, * 은 결합 사이트이다.

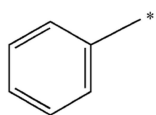
청구항 4

제1항에 있어서,

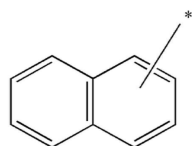
상기 R_1 및 R_6 은 서로 독립적으로 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 터트부틸기 및 하기 화학식 3A 내지 3R 로 표시되는 그룹 중 하나이고,

상기 R_2 내지 R_5 , R_7 및 R_8 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 터트부틸기 및 하기 화학식 3A 내지 3R 로 표시되는 그룹 중 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로고리 화합물:

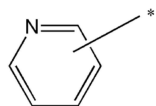
<화학식 3A>



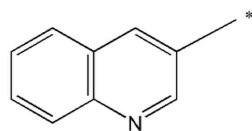
<화학식 3B>



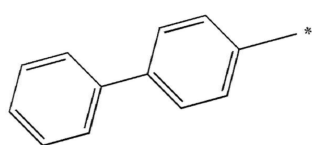
<화학식 3C>



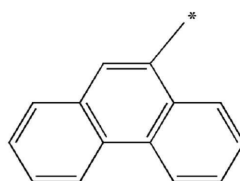
<화학식 3D>



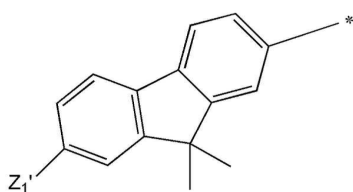
<화학식 3E>



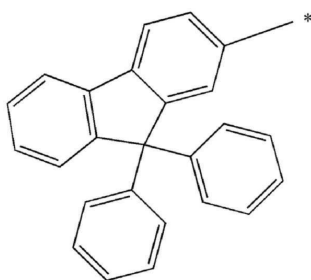
<화학식 3F>



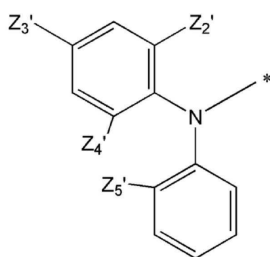
<화학식 3G>



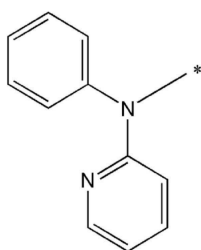
<화학식 3H>



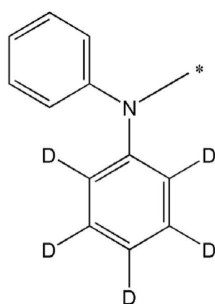
<화학식 3I>



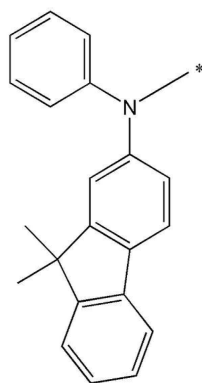
<화학식 3J>



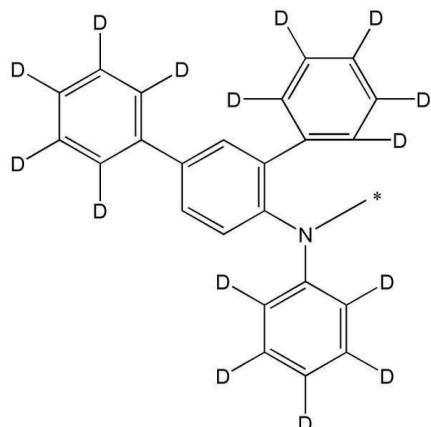
<화학식 3K>



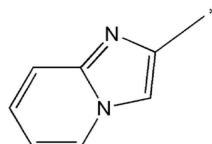
<화학식 3L>



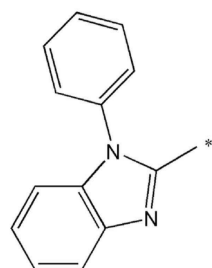
<화학식 3M>



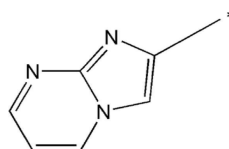
<화학식 3N>



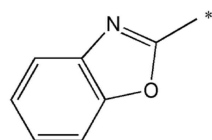
<화학식 3O>



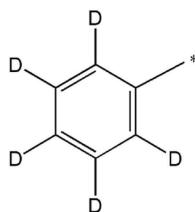
<화학식 3P>



<화학식 3Q>



<화학식 3R>



상기 식 중,

$Z_{1'}$ 은 수소 또는 페닐기이고, $Z_{2'}$, $Z_{3'}$, $Z_{4'}$ 및 $Z_{5'}$ 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 플루오르기, 메틸기 또는 페닐기 중 하나이고, 복수 개의 $Z_{2'}$, $Z_{3'}$, $Z_{4'}$ 및 $Z_{5'}$ 는 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있고, * 은 결합 사이트이다.

청구항 5

제1항에 있어서,

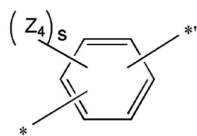
상기 L_1 이 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트라닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크리세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기 및 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일렌기 중 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로고리 화합물.

청구항 6

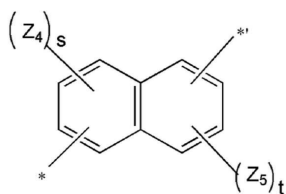
제1항에 있어서,

상기 L₁ 이 하기 화학식 4A 내지 4H로 표시되는 그룹 중 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로고리 화합물:

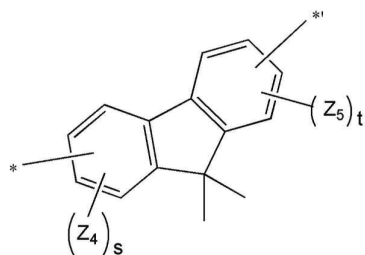
<화학식 4A>



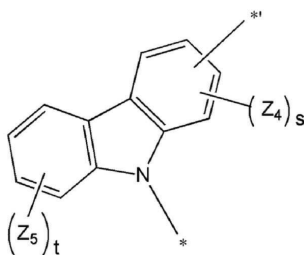
<화학식 4B>



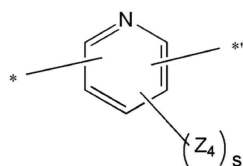
<화학식 4C>



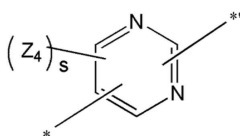
<화학식 4D>



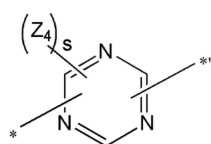
<화학식 4E>



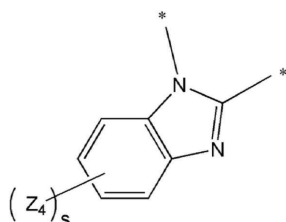
<화학식 4F>



<화학식 4G>



<화학식 4H>



상기 식 중,

Z₄ 및 Z₅ 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기 중 하나이고, 복수 개의 Z₄ 및 Z₅ 는 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있고,

s 및 t는 1 내지 4의 정수 중 하나이고, *'은 안트라센 백본과의 결합 사이트이고, *은 R₄ 과의 결합 사이트이다.

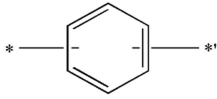
청구항 7

제1항에 있어서,

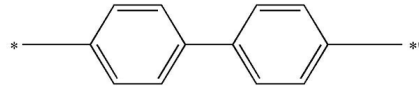
상기 L₁ 이 하기 화학식 5A 내지 5I 로 표시되는 그룹 중 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로고리 화합물:

<화학식 5A>

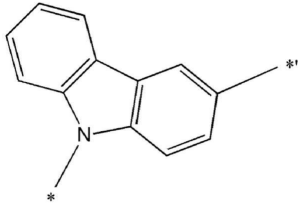
<화학식 5B>



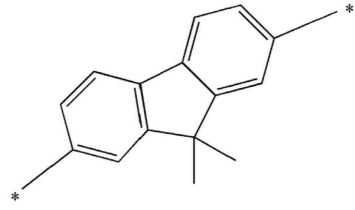
<화학식 5C>



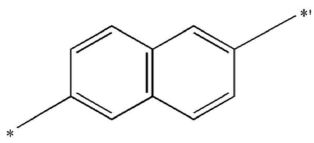
<화학식 5D>



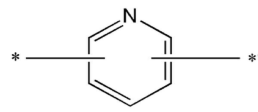
<화학식 5E>



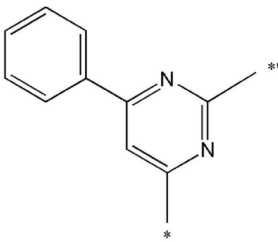
<화학식 5F>



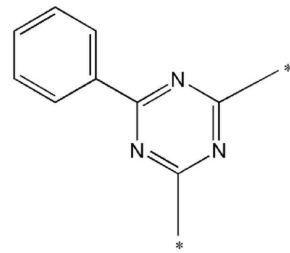
<화학식 5G>



<화학식 5H>



<화학식 5I>



상기 식 중,

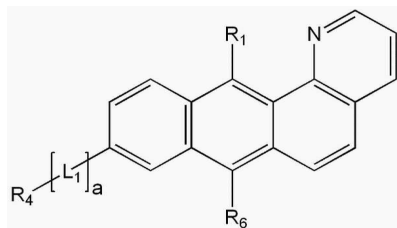
*' 은 안트라센 백본과의 결합 사이트이고, * 은 R₄ 과의 결합 사이트이다.

청구항 8

제1항에 있어서,

하기 화학식 1a 로 표시되는 헤테로고리 화합물:

<화학식 1a>



상기 식 중,

상기 R_1 및 R_6 이 서로 독립적으로 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디아지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 피리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고,

상기 R_4 는 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디아지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 피리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고,

상기 Q_1 및 Q_2 가 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 및 치환 또는 비치환된 카바졸일기 중 하나이고,

상기 L_1 이 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크리세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴렌기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기 및 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일렌기 중 하나이고,

a 는 1 또는 2 의 정수 중 하나이고, a 가 2 인 경우 두 개의 L_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 9

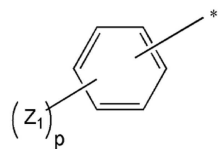
제8항에 있어서,

상기 R_1 및 R_6 이 서로 독립적으로 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기 및 하기 화학식 2A 내지 2P로 표시되는 그룹

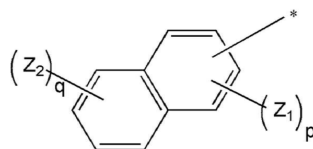
중 하나이고,

상기 R₄ 는 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기 및 하기 화학식 2A 내지 2P로 표시되는 그룹 중 하나이고,

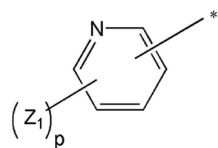
<화학식 2A>



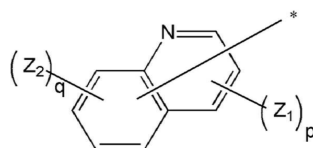
<화학식 2B>



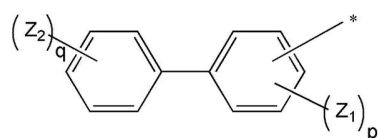
<화학식 2C>



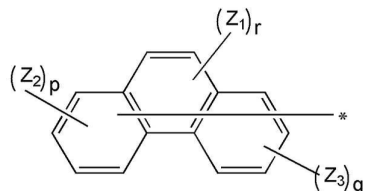
<화학식 2D>



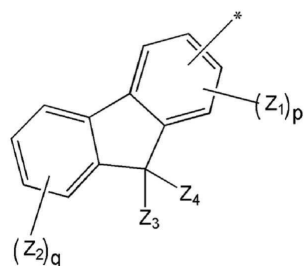
<화학식 2E>



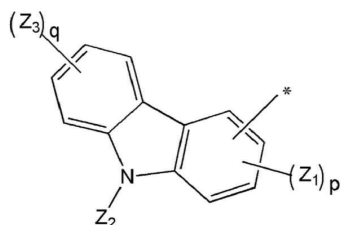
<화학식 2F>



<화학식 2G>

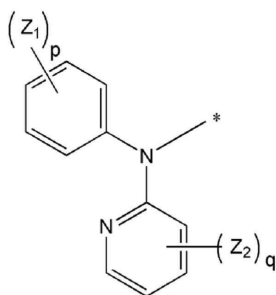
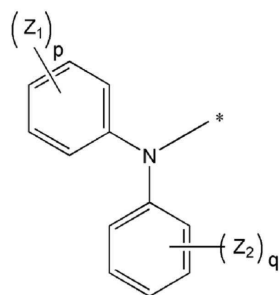


<화학식 2H>



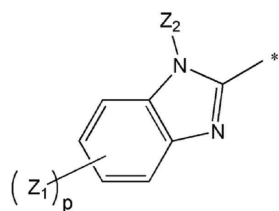
<화학식 2I>

<화학식 2J>

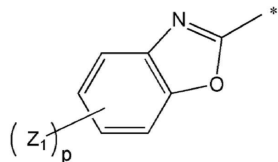


<화학식 2K>

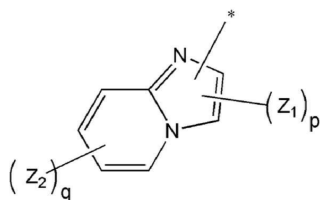
<화학식 2L>



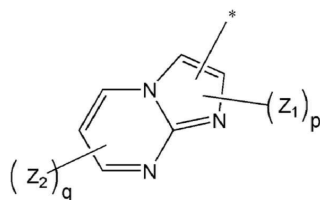
<화학식 2M>



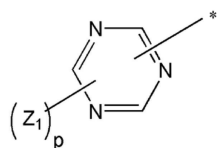
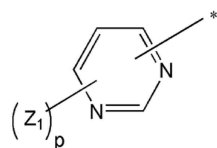
<화학식 2N>



<화학식 2O>



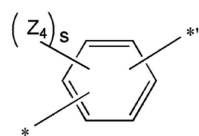
<화학식 2P>



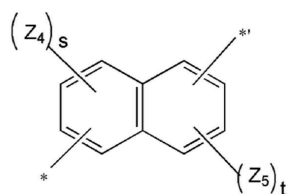
상기 식 중, Z_1 , Z_2 및 Z_3 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 메톡시기, 치환 또는 비치환된 에톡시기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기 및 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기 중 하나이고, 복수 개의 Z_1 , Z_2 및 Z_3 은 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있고, p 및 q 는 1 내지 5의 정수 중 하나이고, r 은 1 또는 2 이고, $*$ 은 결합 사이트이고,

상기 L_1 이 하기 화학식 4A 내지 4H로 표시되는 그룹 중 하나인 헤테로고리 화합물:

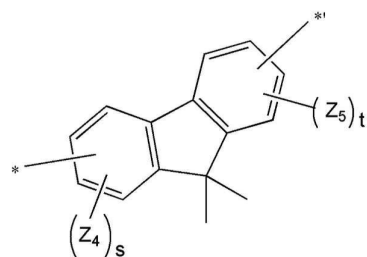
<화학식 4A>



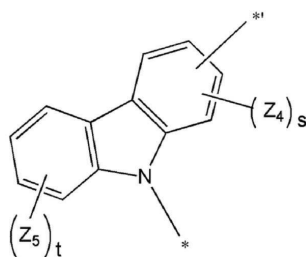
<화학식 4B>



<화학식 4C>

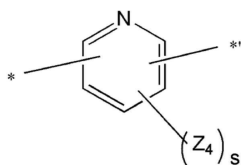


<화학식 4D>

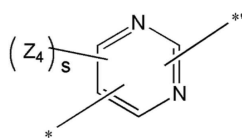


<화학식 4E>

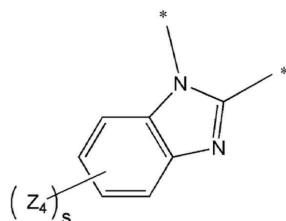
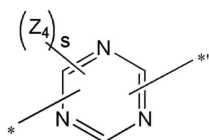
<화학식 4F>



<화학식 4G>



<화학식 4H>



상기 식 중, Z_4 및 Z_5 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기 중 하나이고, 복수 개의 Z_4 및 Z_5 는 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있고, s 및 t 는 1 내지 4의 정수 중 하나이고, '*'은 안트라센 백본과의 결합 사이트이고, *은 R_4 과의 결합 사이트이다.

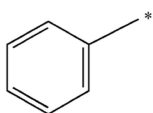
청구항 10

제8항에 있어서,

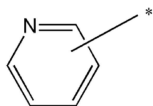
상기 R_1 및 R_6 이 서로 독립적으로 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 터트부틸기 및 하기 화학식 3A 내지 3R 로 표시되는 그룹 중 하나이고,

상기 R_4 는 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 터트부틸기 및 하기 화학식 3A 내지 3R 로 표시되는 그룹 중 하나이고::

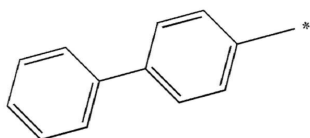
<화학식 3A>



<화학식 3C>

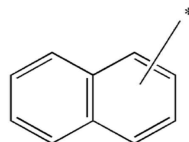


<화학식 3E>

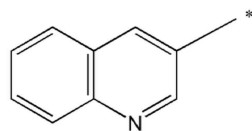


<화학식 3G>

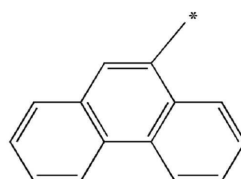
<화학식 3B>



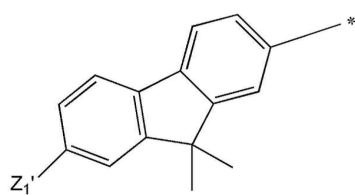
<화학식 3D>



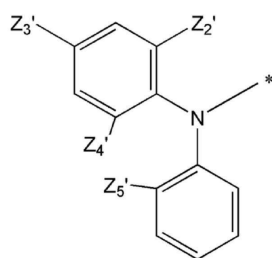
<화학식 3F>



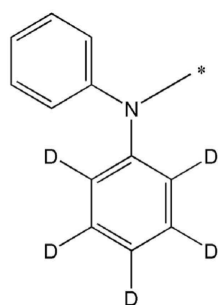
<화학식 3H>



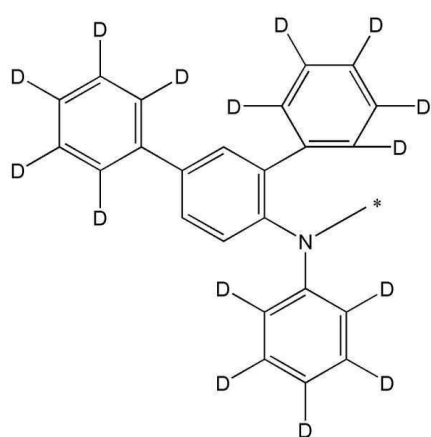
<화학식 3I>



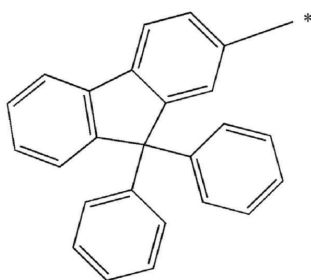
<화학식 3K>



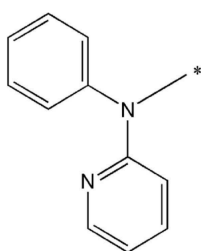
<화학식 3M>



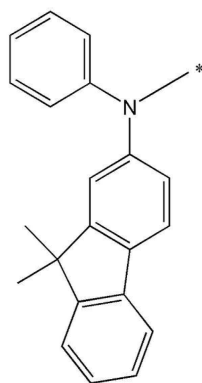
<화학식 3O>



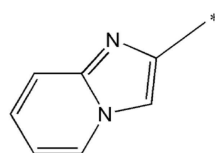
<화학식 3J>



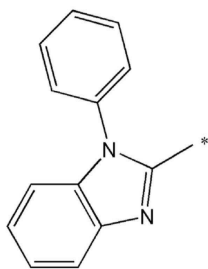
<화학식 3L>



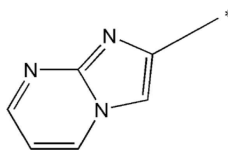
<화학식 3N>



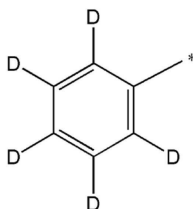
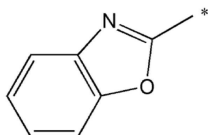
<화학식 3P>



<화학식 3Q>



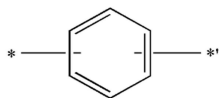
<화학식 3R>



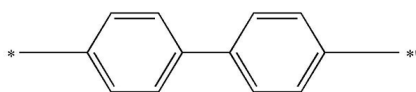
상기 식 중, Z_1' 은 수소 또는 페닐기이고, Z_2' , Z_3' , Z_4' 및 Z_5' 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 플루오르기, 메틸기 또는 페닐기 중 하나이고, 복수 개의 Z_2' , Z_3' , Z_4' 및 Z_5' 는 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있고, * 은 결합 사이트이고,

상기 L_1 이 하기 화학식 5A 내지 5I 로 표시되는 그룹 중 하나인 헤테로고리 화합물:

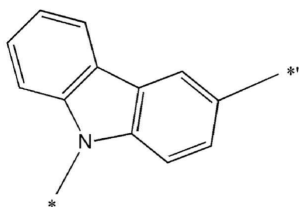
<화학식 5A>



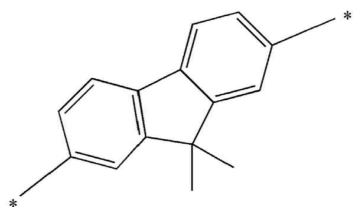
<화학식 5B>



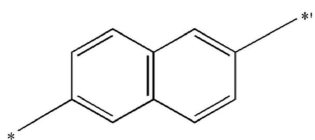
<화학식 5C>



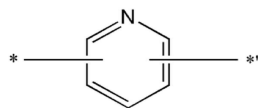
<화학식 5D>



<화학식 5E>

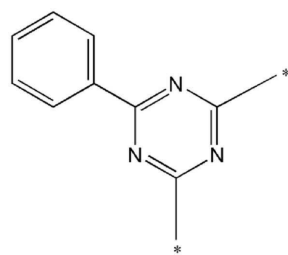
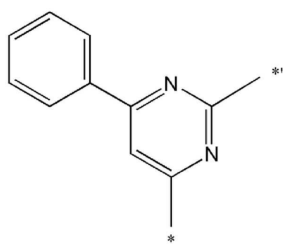


<화학식 5F>

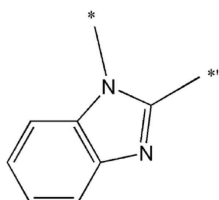


<화학식 5G>

<화학식 5H>



<화학식 5I>

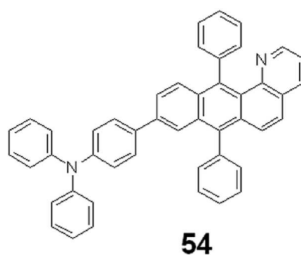
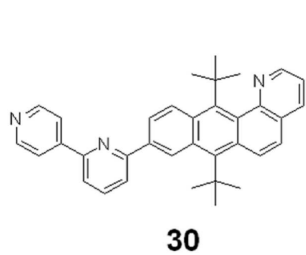
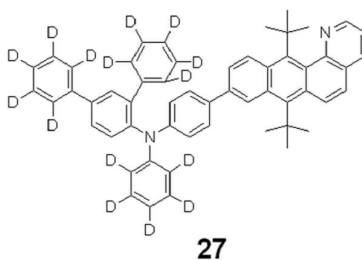
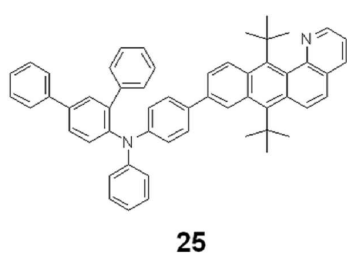


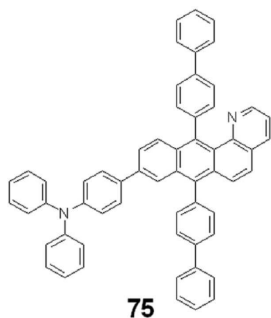
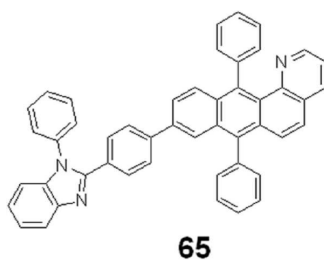
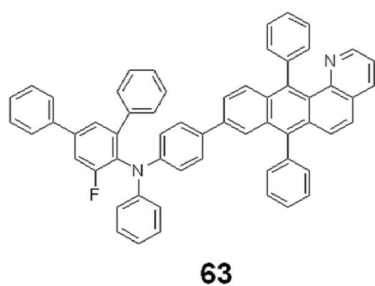
상기 식 중, '*' 은 안트라센 백본과의 결합 사이트이고, * 은 R₄ 과의 결합 사이트이다.

청구항 11

제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물이 하기 화합물 25, 27, 30, 54, 63, 65 및 75 으로 표시되는 화합물들 중 하나인 헤테로고리 화합물:





청구항 12

제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 제1층을 포함하고,

상기 제1층이 제1항 내지 제11항 중 어느 한 항의 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 13

제12항에 있어서,

상기 제1층이 전자 주입층, 전자 수송층 또는 전자 주입 기능 및 전자 주입 기능을 동시에 갖는 기능층 또는 발광층 중 적어도 하나인 유기 발광 소자.

청구항 14

제13항에 있어서,

상기 제1층이 발광층을 포함하고, 상기 헤테로고리 화합물이 상기 발광층의 형광 호스트, 인광 호스트 또는 형광 도펀트인 유기 발광 소자.

청구항 15

제13항에 있어서,

상기 제1층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 안트라센 화합물, 아릴아민 화합물 또는 스티릴 화합물을 더 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 16

제12항에 있어서,

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에, 상기 제1층 외의 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 정공 저지층, 전자 주입층, 전자 수송층 또는 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 또는 이들 중 2 이상의 조합을 더 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 17

제16항에 있어서,

상기 제1층 외의 층이 발광층을 포함하고, 상기 제1층 이외의 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함하고, 상기 도펀트는 형광 도펀트 또는 인광 도펀트인 유기 발광 소자.

청구항 18

제16항에 있어서,

상기 제1층 이외의 층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 안트라센 화합물, 아릴아민 화합물 또는 스티릴 화합물을 더 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 19

제12항에 있어서,

상기 제1층이 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층은 상기 헤테로고리 화합물과 금속-함유 물질을 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 20

제12 항에 있어서,

상기 제1층 및 상기 제1층 이외의 층 중 하나 이상의 층이 습식 공정에 의하여 형성되는 유기 발광 소자.

청구항 21

소스, 드레인, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 제12항의 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 소스 및 드레인 중 하나와 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 전기적으로 연결된 평판 표시 장치.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 헤테로고리 화합물, 이를 포함하는 유기 발광 소자 및 상기 유기 발광 소자를 포함하는 평판 표시 장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting diode)는 자발광형 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라, 응답시간이 빠르며, 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.

[0003] 일반적인 유기 발광 소자는 기판 상부에 애노드가 형성되어 있고, 이 애노드 상부에 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 여기에서 정공수송층, 발광층 및 전자수송층은 유기화합물로 이루어진 유기 박막들이다.

[0004] 상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기 발광 소자의 구동 원리는 다음과 같다. 상기 애노드 및 캐소드간에 전압을 인가하면, 애노드로부터 주입된 정공은 정공수송층을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자수송층을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exiton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

발명의 내용

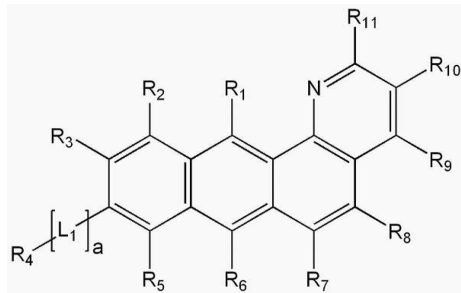
해결하려는 과제

[0005] 저전압, 고휘도, 고효율, 장수명의 유기 전계 발광 소자 용 신규한 헤테로고리 화합물, 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기층을 채용한 유기 발광 소자 및 상기 유기 발광 소자를 포함하는 평판 표시 장치를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

일 측면에 따라 하기 화학식 1 로 표시되는 헤테로고리 화합물이 제공된다.

<화학식 1>



상기 식 중, R_1 내지 R_{11} 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴옥시기 또는 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴티오기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나이고,

L_1 은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 헤테로아릴렌기 중 하나이고, a 는 0 내지 2 의 정수 중 하나이고, a 가 2 인 경우 두 개의 L_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

다른 측면에 따라 제1전극, 상기 제1전극에 대향하는 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 제1층을 포함하고, 상기 제1층이 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자가 제공된다.

또 다른 측면에 따라, 소스, 드레인, 게이트 및 활성층을 포함하는 트랜지스터 및 상기 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 소스 및 드레인 중 하나와 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 전기적으로 연결된, 평판 표시 장치가 제공된다.

발명의 효과

상기 화학식 1 로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함한 유기 발광 소자는 우수한 성능, 예를 들면, 저구동 전압, 고휘도, 고효율 및 장수명 등을 가질 수 있는 바, 고품위의 평판 표시 장치를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

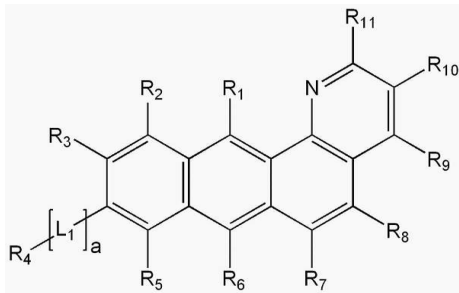
도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

도 2는 본 발명의 일 구현예를 따르는 화학식을 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

상기 헤테로고리 화합물은 하기 화학식 1 로 표시된다.

[0016] <화학식 1>



[0017]

[0018] 상기 식 중, R_1 내지 R_{11} 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴옥시기 또는 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴티오기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나일 수 있다.

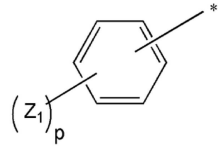
[0019] L_1 은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 헤테로아릴렌기 중 하나일 수 있다. a 는 0 내지 2 의 정수 중 하나이고, a 가 2 인 경우 두 개의 L_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0020] 구체적으로, 상기 R_1 내지 R_{11} 이 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 페녹시기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디아지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리스레닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 피리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있다. 상기 Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환

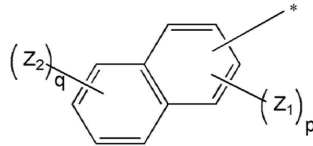
또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 헥실기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

예를 들어, 상기 R_1 내지 R_{11} 이 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기 및 하기 화학식 2A 내지 2P로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

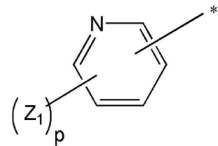
<화학식 2A>



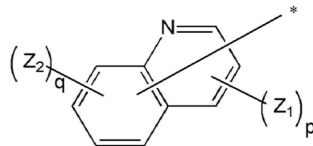
<화학식 2B>



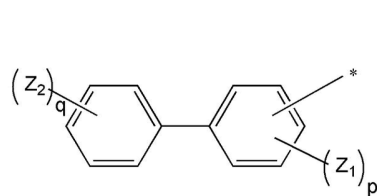
<화학식 2C>



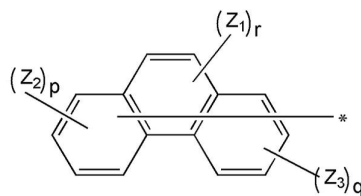
<화학식 2D>



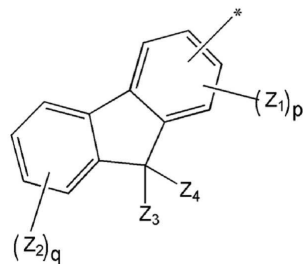
<화학식 2E>



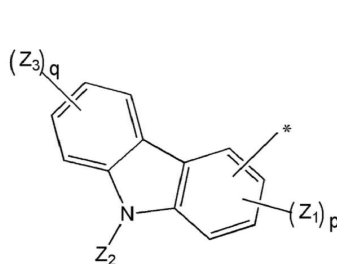
<화학식 2F>



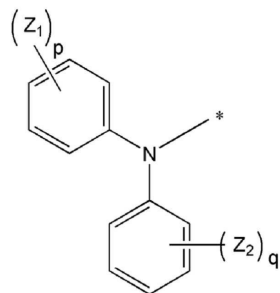
<화학식 2G>



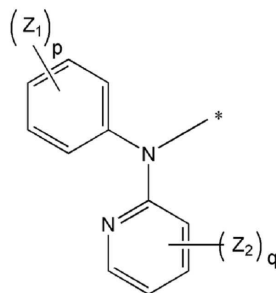
<화학식 2H>



<화학식 2I>

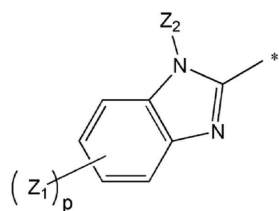


<화학식 2J>

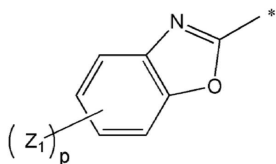


<화학식 2K>

<화학식 2L>



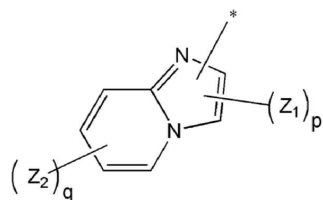
[0033]



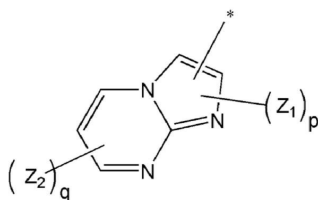
[0034]

<화학식 2M>

<화학식 2N>



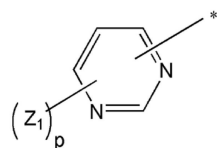
[0035]



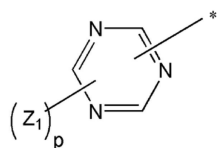
[0036]

<화학식 2O>

<화학식 2P>



[0037]



[0038]

상기 식 중, Z_1 , Z_2 및 Z_3 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 메톡시기, 치환 또는 비치환된 에톡시기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기 및 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기 중 하나일 수 있고, 복수 개의 Z_1 , Z_2 및 Z_3 은 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다. p 및 q 는 1 내지 5 의 정수 중 하나이고, r 은 1 또는 2 이고, * 은 결합 사이트이다.

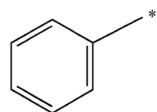
[0039]

예를 들어, 상기 R_1 내지 R_{11} 이 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 터트부틸기 및 하기 화학식 3A 내지 3R 로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

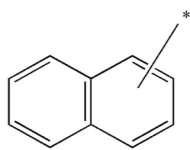
[0040]

<화학식 3A>

<화학식 3B>



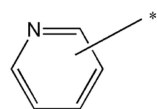
[0041]



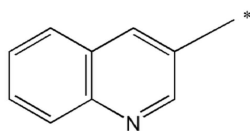
[0042]

<화학식 3C>

<화학식 3D>



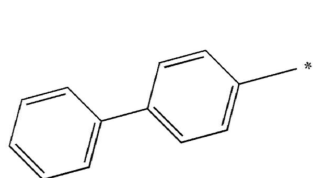
[0043]



[0044]

<화학식 3E>

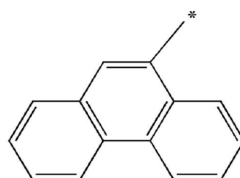
<화학식 3F>



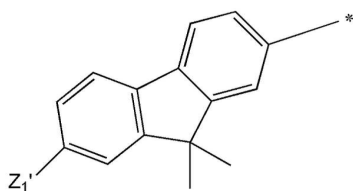
[0045]

[0046]

<화학식 3G>



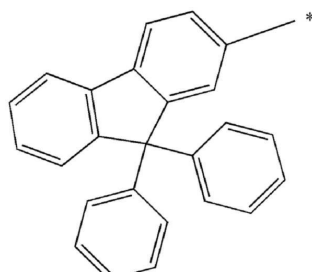
<화학식 3H>



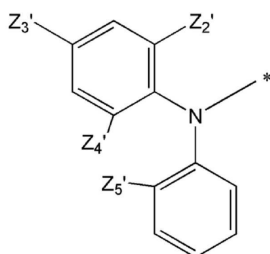
[0047]

[0048]

<화학식 3I>



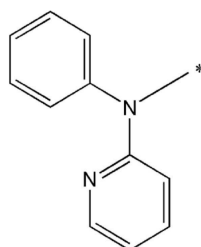
<화학식 3J>



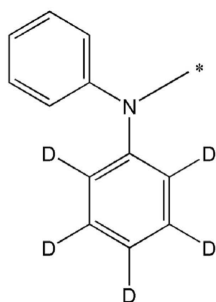
[0049]

[0050]

<화학식 3K>



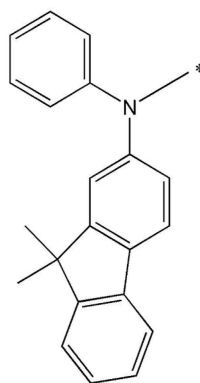
<화학식 3L>



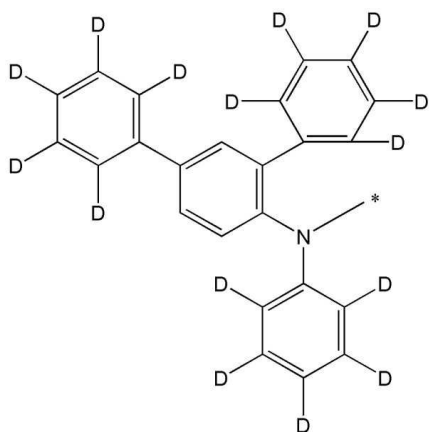
[0051]

[0052]

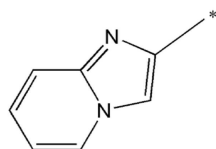
<화학식 3M>



<화학식 3N>

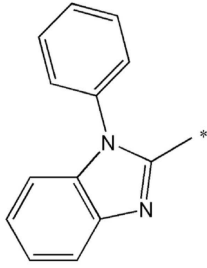


[0053]



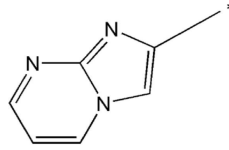
[0054]

<화학식 3Q>



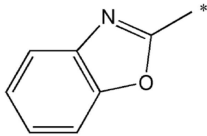
[0055]

<화학식 3P>



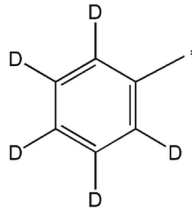
[0056]

<화학식 3Q>



[0057]

<화학식 3R>



[0058]

상기 식 중, Z_1' 은 수소 또는 페닐기이고, Z_2' , Z_3' , Z_4' 및 Z_5' 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 플루오르기, 메틸기 또는 페닐기 중 하나일 수 있고, 복수 개의 Z_2' , Z_3' , Z_4' 및 Z_5' 는 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다. * 은 결합 사이트이다.

[0059]

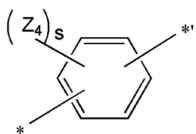
상기 L_1 이 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크리스세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기 및 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일렌기 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0060]

구체적으로, 상기 L_1 이 하기 화학식 4A 내지 4H로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

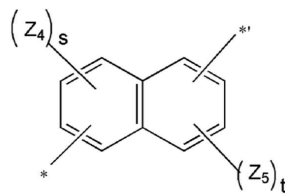
[0061]

<화학식 4A>



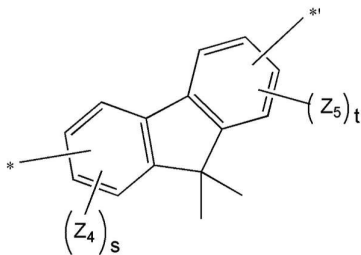
[0062]

<화학식 4B>



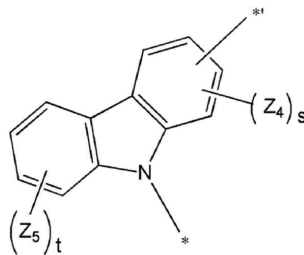
[0063]

<화학식 4C>



[0064]

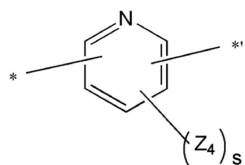
<화학식 4D>



[0065]

<화학식 4E>

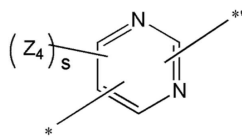
<화학식 4F>



[0066]

[0067]

<화학식 4G>



<화학식 4H>

[0068]

[0069]

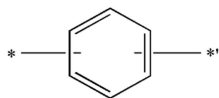
상기 식 중, Z_4 및 Z_5 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기 중 하나일 수 있고, 복수 개의 Z_4 및 Z_5 는 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다. s 및 t 는 1 내지 4의 정수 중 하나이고, *'은 안트라센 몸체와의 결합 사이트이고, *은 R_4 와의 결합 사이트이다.

[0070]

예를 들면, 상기 L_1 이 하기 화학식 5A 내지 5I로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0071]

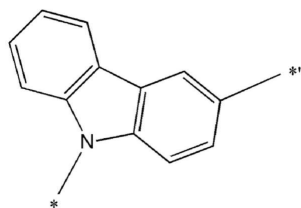
<화학식 5A>



[0072]

[0073]

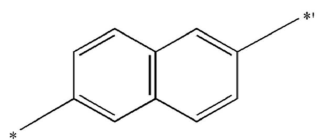
<화학식 5C>



[0074]

[0075]

<화학식 5E>

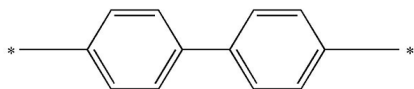


[0076]

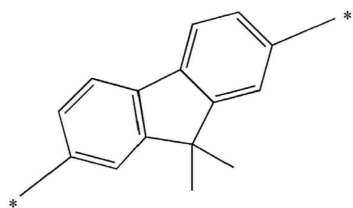
[0077]

<화학식 5G>

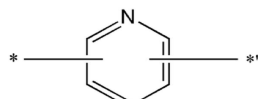
<화학식 5B>



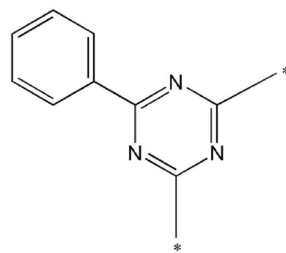
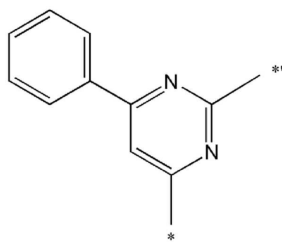
<화학식 5D>



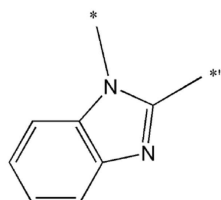
<화학식 5F>



<화학식 5H>



<화학식 5I>

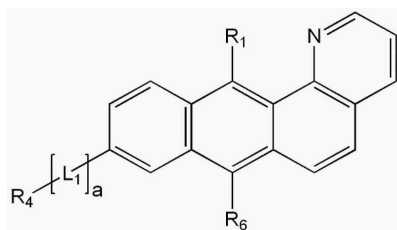


상기 식 중, '*' 은 안트라센 몸체와의 결합 사이트이고, * 은 R₄ 와의 결합 사이트이다.

한편, 상기 R₁ 및 R₆ 이 서로 동일할 수 있다.

상기 화학식 1 로 표시되는 헤테로고리 화합물은 하기 화학식 1a 로 표시될 수 있다:

<화학식 1a>



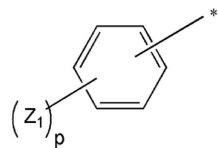
상기 화학식 1a 중, 상기 R₁, R₄ 및 R₆ 이 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 헥실기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트렌일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디아지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 피리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기 및 N(Q₁)(Q₂) 로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있다. 상기 Q₁ 및 Q₂ 가 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 헥실기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 및 치환 또는 비치환된 카바졸일기 중 하나일 수 있다.

상기 L₁ 이 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트라닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트렌일렌기, 치환 또는 비치환된 피렌일렌기, 치환 또는 비치환된 크리세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴렌일렌기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기 및 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일렌기 중 하나일 수 있다.

[0088] a 는 0 내지 2 의 정수 중 하나일 수 있고, a 가 2 인 경우 두 개의 L₁ 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

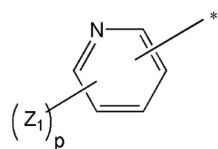
[0089] 상기 화학식 1a 중에서, 구체적으로 상기 R₁, R₄ 및 R₆ 이 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기 및 하기 화학식 2A 내지 2P로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있고:

[0090] <화학식 2A>



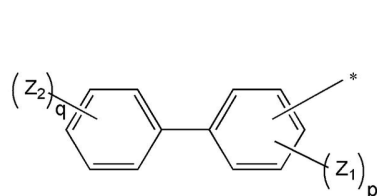
[0091]

[0092] <화학식 2C>



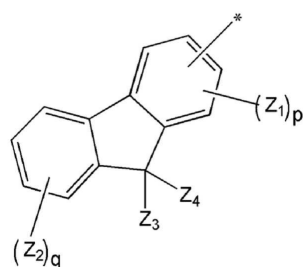
[0093]

[0094] <화학식 2E>



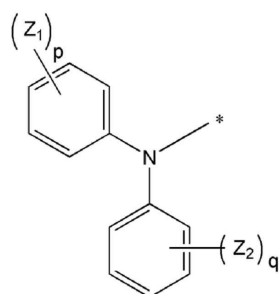
[0095]

[0096] <화학식 2G>



[0097]

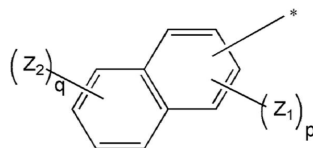
[0098] <화학식 2I>



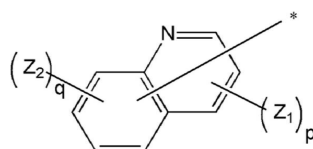
[0099]

[0100] <화학식 2K>

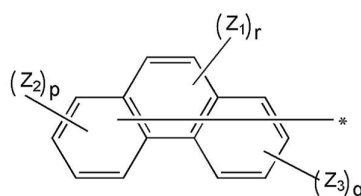
<화학식 2B>



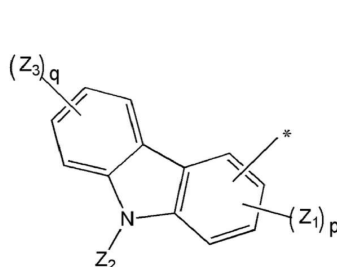
<화학식 2D>



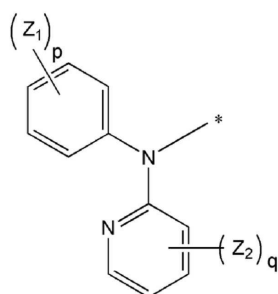
<화학식 2F>



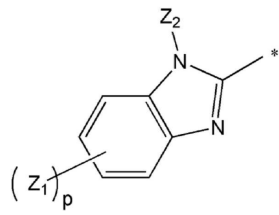
<화학식 2H>



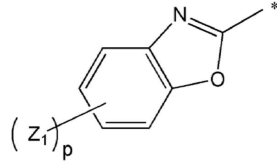
<화학식 2J>



<화학식 2L>



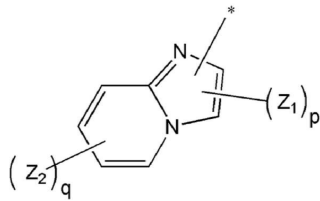
[0101]



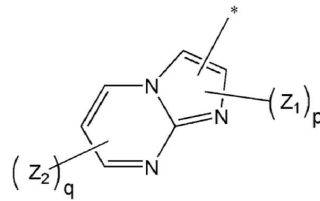
[0102]

<화학식 2M>

<화학식 2N>



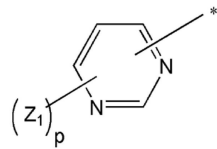
[0103]



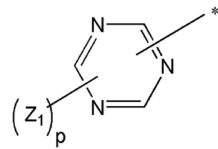
[0104]

<화학식 2O>

<화학식 2P>



[0105]



[0106]

상기 식 중, Z_1 , Z_2 및 Z_3 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 메톡시기, 치환 또는 비치환된 에톡시기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기 및 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기 중 하나일 수 있고, 복수 개의 Z_1 , Z_2 및 Z_3 은 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다. p 및 q 는 1 내지 5 의 정수 중 하나이고, r 은 1 또는 2 이고, * 은 결합 사이트이다.

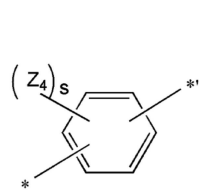
[0107]

상기 화학식 1a 중에서, 구체적으로 상기 L_1 이 하기 화학식 4A 내지 4H로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있다:

[0108]

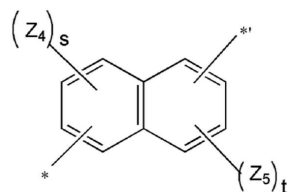
<화학식 4A>

<화학식 4B>



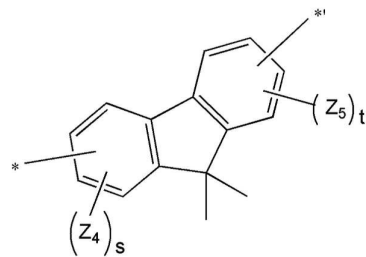
[0109]

4C>

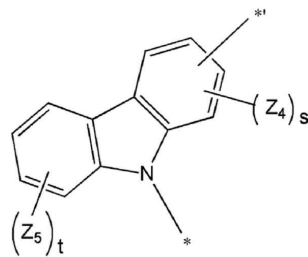


<화학식 4D>

<화학식



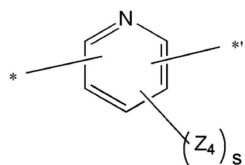
[0110]



[0111]

<화학식 4E>

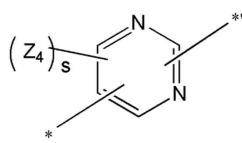
<화학식 4F>



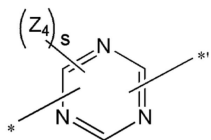
[0112]

[0113]

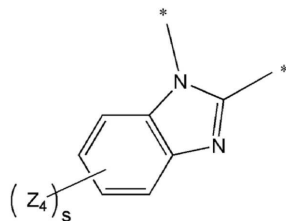
<화학식 4G>



<화학식 4H>



[0114]



[0115]

상기 식 중, Z_4 및 Z_5 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기 중 하나일 수 있고, 복수 개의 Z_4 및 Z_5 는 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다. s 및 t 는 1 내지 4의 정수 중 하나이고, '*'은 안트라센 백본과의 결합 사이트이고, *은 R_4 와의 결합 사이트이다.

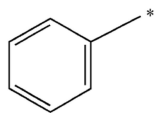
[0116]

화학식 1a 중, 예를 들어 상기 R_1 , R_4 및 R_6 이 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 터트부틸기 및 하기 화학식 3A 내지 3R 로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있다:

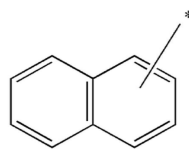
[0117]

<화학식 3A>

<화학식 3B>



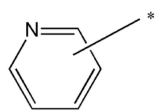
[0118]



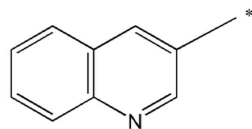
[0119]

<화학식 3C>

<화학식 3D>



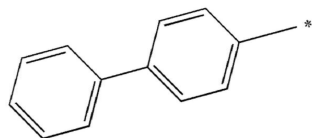
[0120]



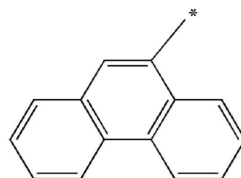
[0121]

<화학식 3E>

<화학식 3F>



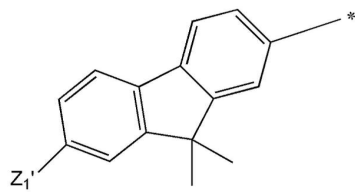
[0122]



[0123]

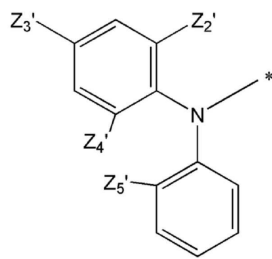
<화학식 3G>

<화학식 3H>



[0124]

<화학식 3I>

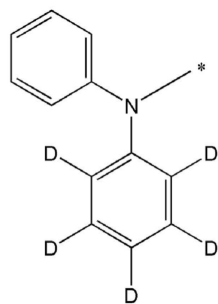


[0125]

[0126]

[0127]

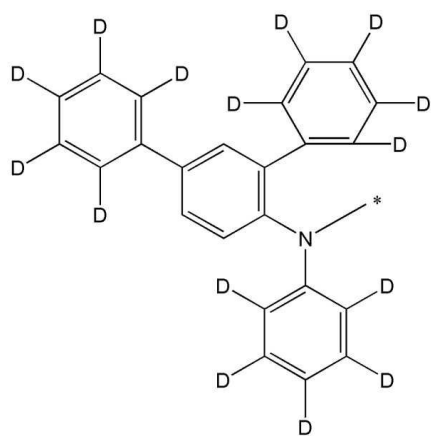
<화학식 3K>



[0128]

[0129]

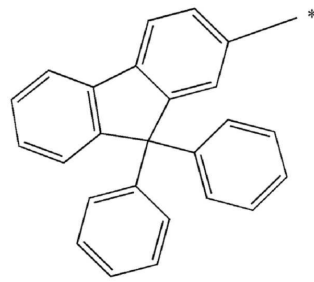
<화학식 3M>



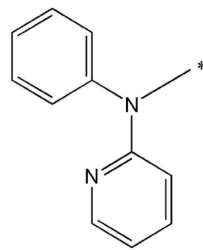
[0130]

[0131]

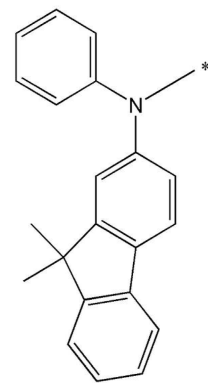
<화학식 3O>



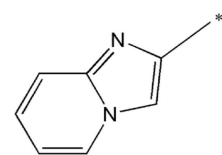
<화학식 3J>



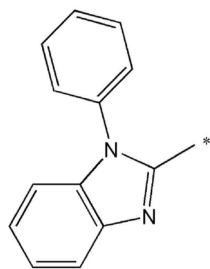
<화학식 3L>



<화학식 3N>

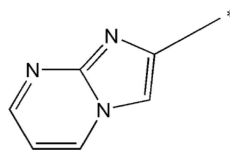


<화학식 3P>

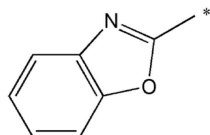


[0132]

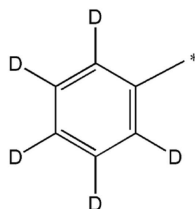
[0133] <화학식 3Q>



<화학식 3R>



[0134]



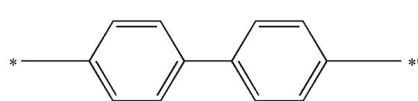
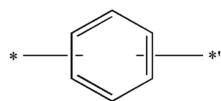
[0135] 상기 식 중, Z_1' 은 수소 또는 페닐기이고, Z_2' , Z_3' , Z_4' 및 Z_5' 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 플루오르기, 메틸기 또는 페닐기 중 하나일 수 있고, 복수 개의 Z_2' , Z_3' , Z_4' 및 Z_5' 는 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다. * 은 결합 사이트이다.

[0136] 한편, 상기 R_1 및 R_6 이 서로 동일할 수 있다.

[0137] 상기 화학식 1a 중에서, 예를 들어 상기 L_1 이 하기 화학식 5A 내지 5I 로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있다.

[0138] <화학식 5A>

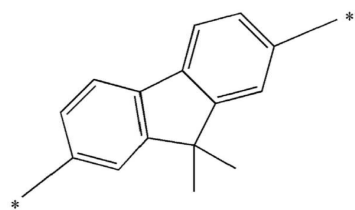
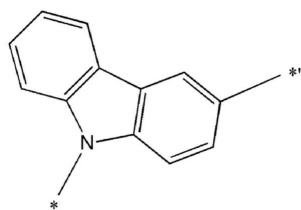
<화학식 5B>



[0139]

[0140] <화학식 5C>

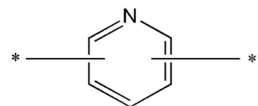
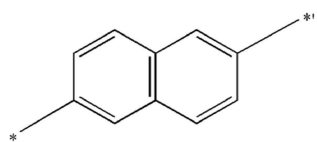
<화학식 5D>



[0141]

[0142] <화학식 5E>

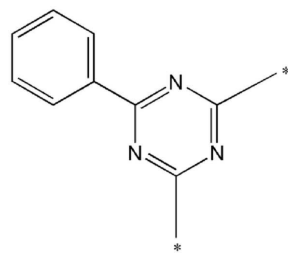
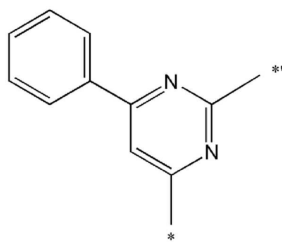
<화학식 5F>



[0143]

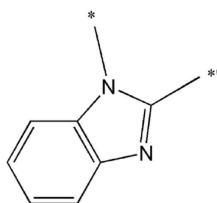
[0144] <화학식 5G>

<화학식 5H>



[0145]

[0146] <화학식 5I>

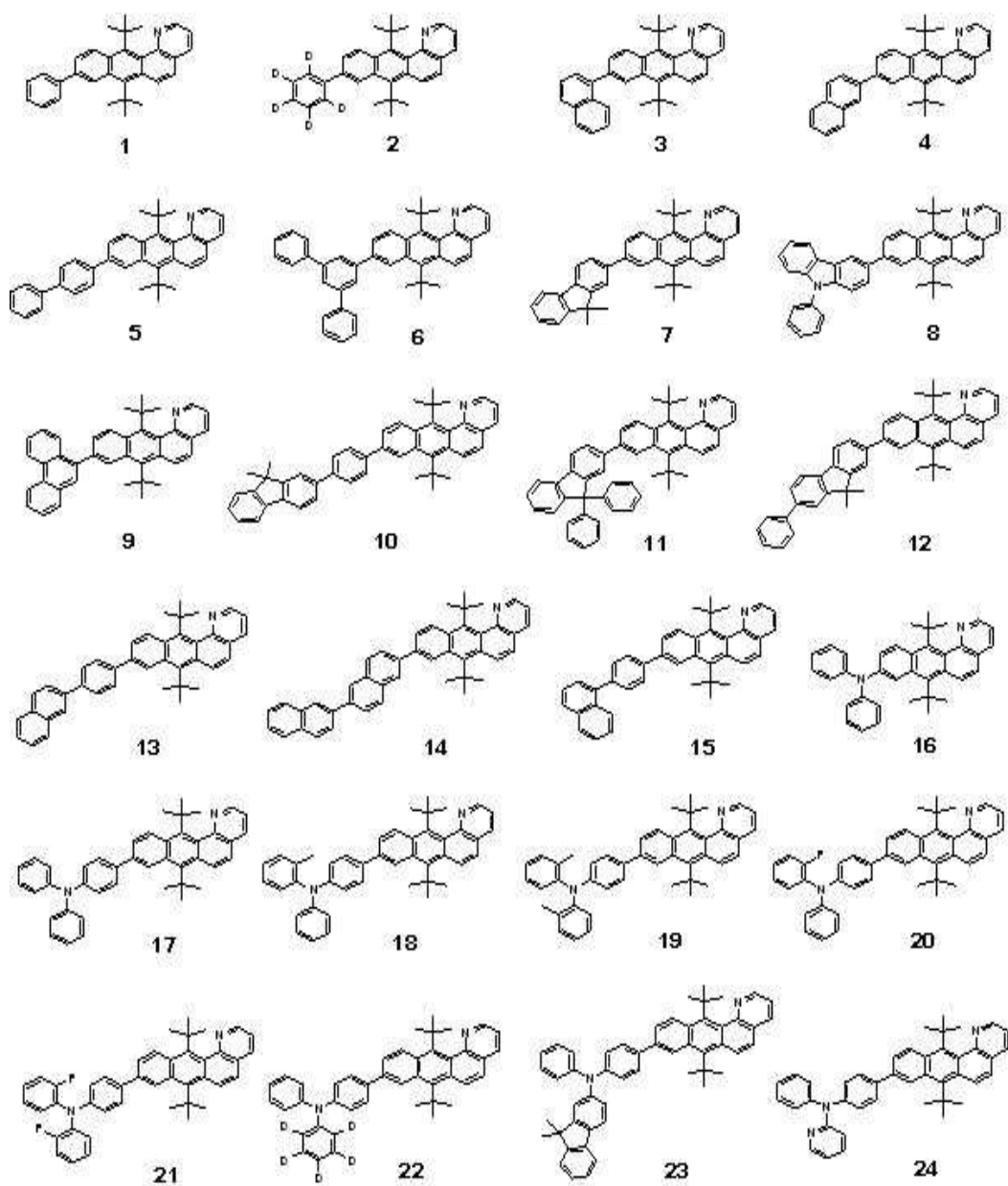


[0147]

[0148] 상기 식 중, '*' 은 안트라센 백본과의 결합 사이트이고, * 은 R₄ 과의 결합 사이트이다.

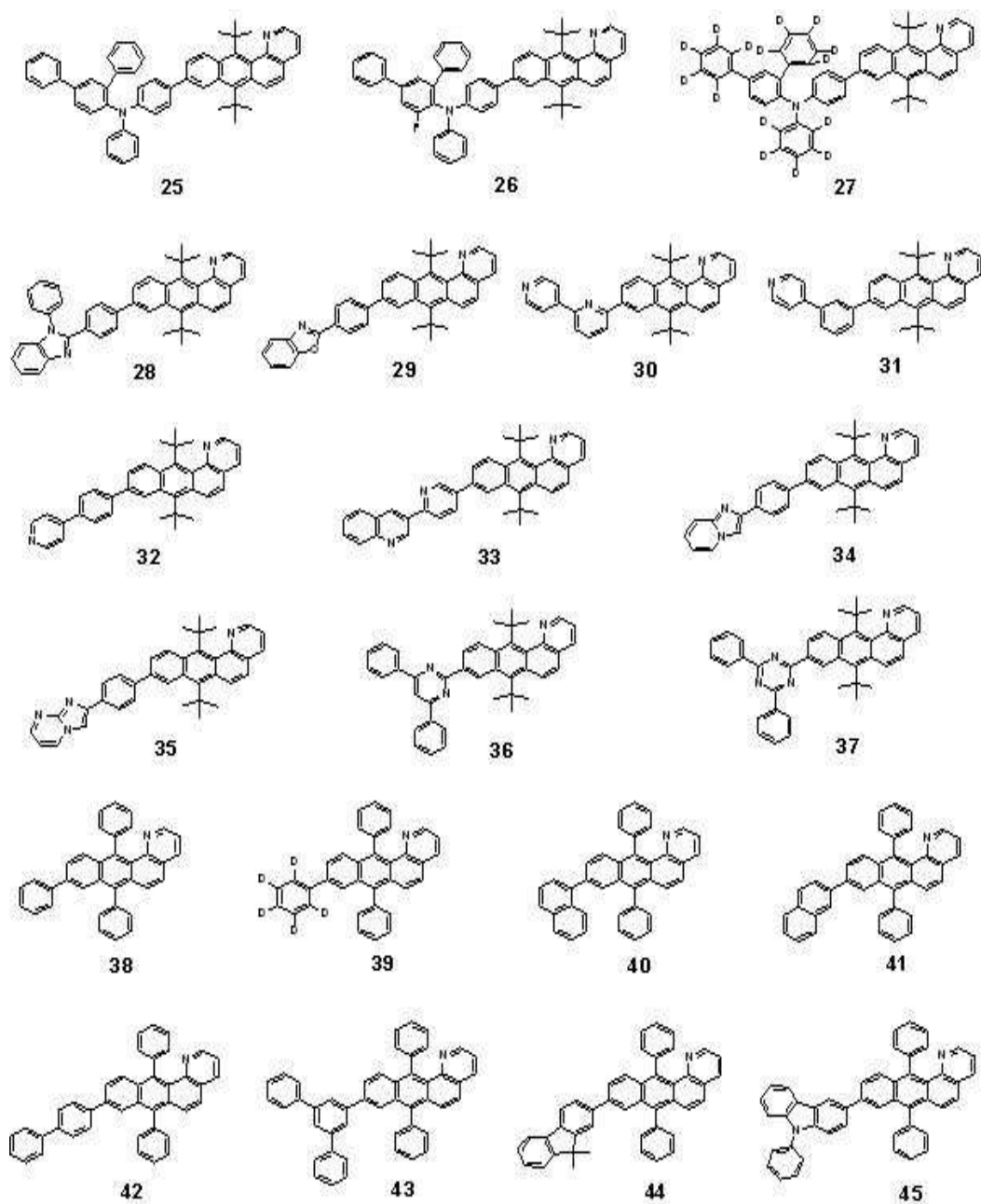
[0149] 상기 화학식 1 로 표시되는 화합물들은 유기 발광 소자용 발광재료 및/또는 전자수송재료로서의 기능을 가질 수 있다. 또한, 화학식 1 의 분자 내 헤테로고리를 함유하는 화합물들은 헤테로고리의 도입으로 유리전이온도(Tg)나 용점이 높은 특성을 갖는다. 따라서 전계 발광시에 있어서의 유기층 중, 유기층 사이 내지는, 유기층과 금속전극간에서 발생하는 줄 열에 대한 내열성 및 고온 환경 하에서의 내성이 증가된다. 또한, 화학식 1 로 표시되는 헤테로고리 화합물은 분자 내에 헤테로 원자인 질소를 가지고 안트라센 고리에 헤테로 고리가 융합되어 있는 구조를 갖는다. 이러한 구조로 말미암아 화학식 1 로 표시되는 헤테로고리 화합물은 안트라센 분자에 비해 p 전자가 더 풍부하게 되고, 질소 원자의 비공유 전자쌍 또한 발광에 참여할 수 있게 되어 분자 내에서 p→p*, n→p* 로의 전이 확률이 높아지게 되므로 발광효율의 증가를 기대 할 수 있다. 또한, 화학식 1 로 표시되는 헤테로고리 화합물은 플루오렌기 등의 치환기가 도입되면 유기층의 모폴로지가 개선되어 유기 발광 소자의 특성을 향상시킬 수 있다.

[0150] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물이 하기 화합물 1 내지 80 으로 표시되는 화합물들 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

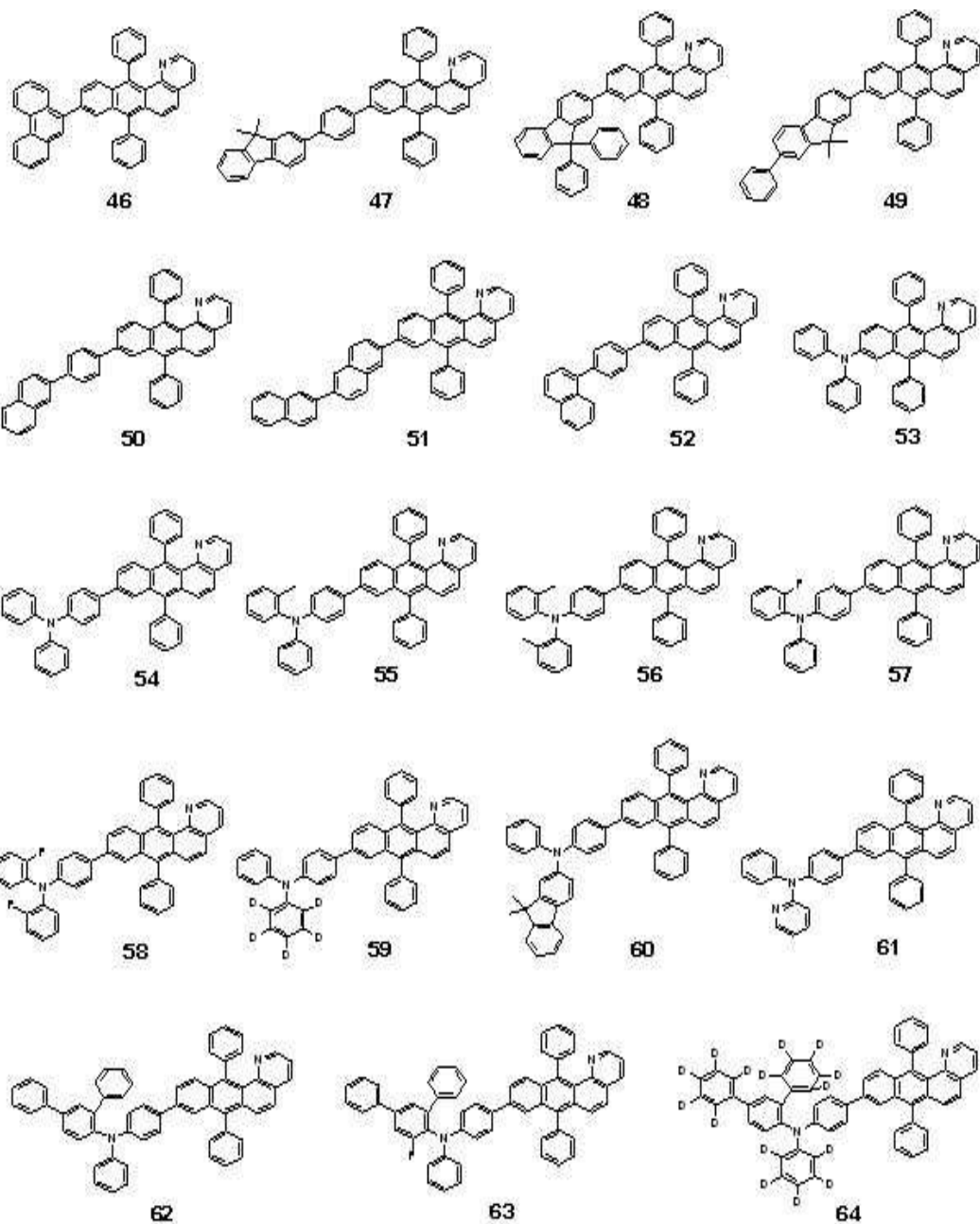


[0151]

-1-

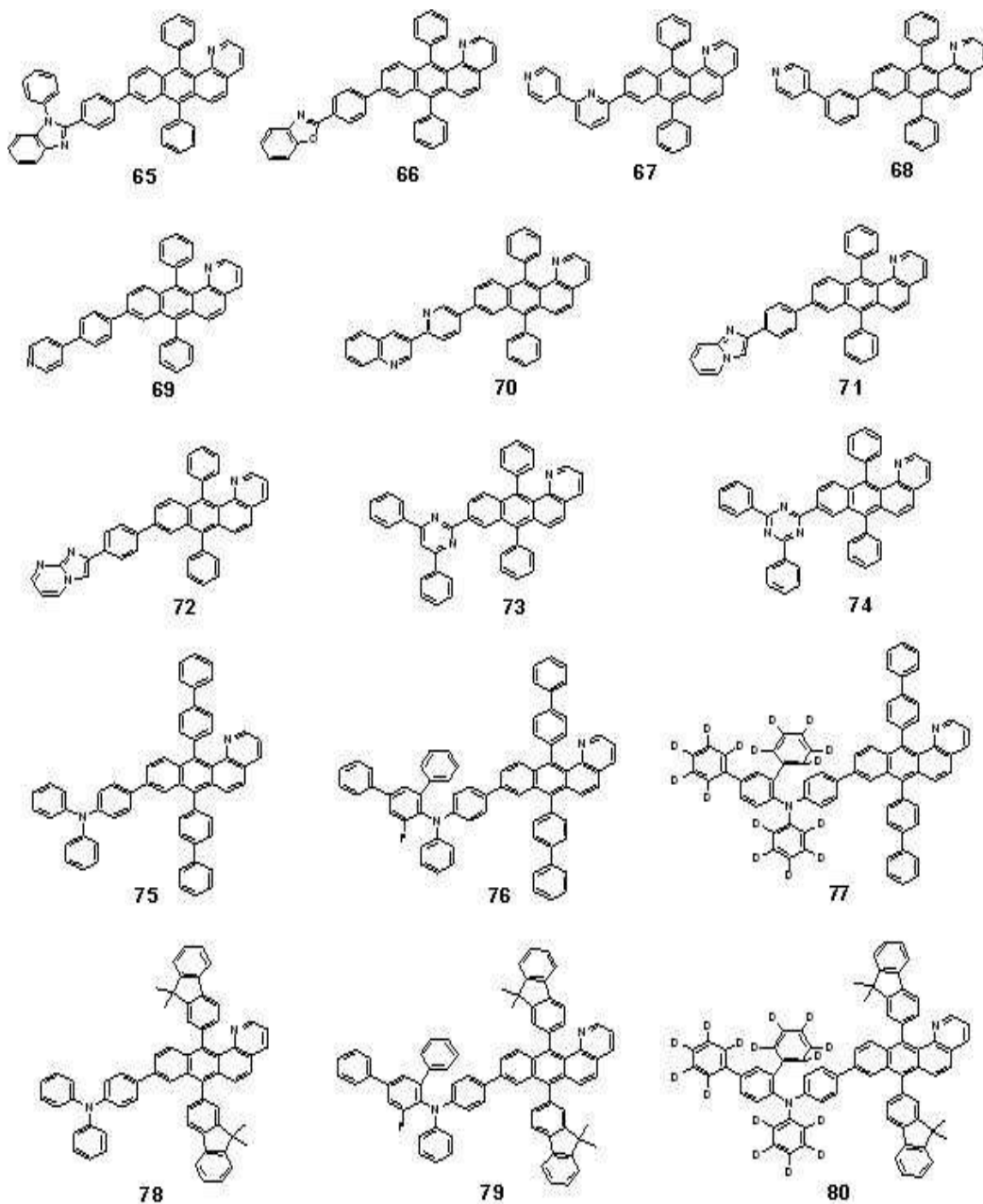


[0152]



[0153]

- 1 -



- 1 -

[0154]

[0155]

본 명세서 중의 "치환 또는 비치환된 A(A는 임의의 치환기)"라는 표현 중 "치환된 A"란 용어는 "상기 A의 하나 이상의 수소 원자가 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기 또는 이의 염 유도체, 술폰산기 또는 이의 염 유도체, 인산기 또는 이의 염 유도체, C₁-C₃₀ 알킬기, C₂-C₃₀ 알케닐기, C₂-C₃₀ 알키닐기, C₁-C₃₀ 알콕시기, C₃-C₃₀ 시클로알킬기, C₃-C₃₀ 시클로알케닐기, C₅-C₃₀ 아릴기, C₅-C₃₀ 아릴옥시기, C₅-C₃₀ 아릴티오기, C₃-C₃₀ 헤테로아릴기, N(Q₁₀₁)(Q₁₀₂)로 표시되는 그룹 및 Si(Q₁₀₃)(Q₁₀₄)(Q₁₀₅)로 표시되는 그룹 중 하나로 치환된 A"를 의미한다. 여기서, Q₁₀₁ 내지 Q₁₀₅는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, C₁-C₃₀ 알킬기, C₂-C₃₀ 알케닐기, C₂-C₃₀ 알키닐기, C₁-C₃₀ 알콕시기, C₃-C₃₀ 시클로알킬기, C₃-C₃₀ 시클로알케닐기, C₅-C₃₀ 아릴기, C₅-C₃₀ 아릴옥시기, C₅-C₃₀ 아릴티오기 및 C₃-C₃₀ 헤테로아릴기 중 하나일 수 있다.

[0156]

예를 들어, 상기 "치환된 A"란 "상기 A의 하나 이상의 수소 원자가 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 메톡시기, 에톡시기, 페닐기, 비페

닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵타레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스피로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 페난트리디닐기, 페난트롤리닐기, 안트릴기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 벤조이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리다지닐기, 인돌일기, 이소인돌일기, 피리도인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 페나지닐기, 푸라닐기, 벤조푸라닐기, 디벤조푸라닐기, 티오펜일기, 벤조티오펜일기, 디벤조티오펜일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 벤조티아졸일기, 옥사졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소옥사졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아졸일기, 트리아지닐기, 테트라졸일기, N(Q₁₀₁)(Q₁₀₂)로 표시되는 그룹 및 Si(Q₁₀₃)(Q₁₀₄)(Q₁₀₅)로 표시되는 그룹 중 하나로 치환된 A"를 의미할 수 있다.

[0157] 본 명세서 중 비치환된 C₁-C₃₀ 알킬기는 알칸(alkane)에서 수소 원자 1 개가 결여된 선형 및 분지형 구조의 포화 탄화수소기를 의미한다. 비치환된 C₁-C₃₀ 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있다. 치환된 C₁-C₃₀ 알킬기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0158] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₃₀ 알케닐기는 상기 비치환된 C₂-C₃₀ 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기의 예로는 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 헥세닐, 헵테닐, 옥테닐, 프로파디에닐(propadienyl), 이소프레닐(isoprenyl), 알릴(allyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C₂-C₃₀ 알케닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0159] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₃₀ 알키닐기는 상기 비치환된 C₂-C₆₀ 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 비치환된 C₂-C₃₀ 알키닐기의 예로는 아세틸레닐(acetylenyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C₂-C₃₀ 알키닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0160] 본 명세서 중 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기는 -OY(단, Y는 상기 비치환된 C₁-C₃₀알킬기임)의 화학식을 가지며, 이의 구체적인 예로서 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시, 부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있다. 치환된 C₁-C₃₀알콕시기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0161] 본 명세서 중 비치환된 C₃-C₃₀ 시클로알킬기는 고리형 포화 탄화수소기를 가리키는 것으로서, 이의 구체예로는 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로옥틸 등을 들 수 있다. 치환된 C₃-C₃₀ 시클로알킬기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0162] 본 명세서 중 비치환된 C₃-C₃₀ 시클로알케닐기는 하나 이상의 탄소 이중결합을 가지면서 방향족 고리가 아닌 고리형 불포화 탄화수소기를 의미한다. 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기의 예로는 시클로프로페닐(cyclopropenyl), 시클로부테닐(cyclobutenyl), 시클로펜테닐, 시클로헥세닐, 시클로헵테닐, 1,3-시클로헥사디에닐기, 1,4-시클로헥사디에닐기, 2,4-시클로헵타디에닐기, 1,5-히클로옥타디에닐기 등을 들 수 있다. 치환된 C₃-C₆₀시클로알케닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0163] 본 명세서 중 비치환된 C₅-C₃₀ 아릴기는 탄소 원자수 5 내지 30개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭(monocyclic) 또는 폴리시클릭(polycyclic) 그룹 동일 수 있다. 폴리시클릭 그룹인 경우, 이에 포함된 2 이상의 고리는 서로 융합될(fused) 수 있다. 비치환된 C₅-C₃₀ 아릴기의 예로는 페닐(phenyl), 펜타레닐(pentalenyl), 인데닐(indenyl), 나프틸(naphtyl), 아줄레닐(azulenyl), 헵타레닐(heptalenyl), 인다세닐(indacenyl), 아세나프틸(acenaphtyl), 플루오레닐(fluorenyl), 스피로-플루오레닐, 페날레닐(phenalenyl), 페난트레닐(phenanthrenyl), 안트릴(anthryl), 플루오란테닐(fluoranthenyl), 트리페닐레닐(triphenylenyl), 피레닐(pyrenyl), 크리세닐(chrysenyl), 나프타세닐(naphthacenyl), 피세닐(picenyl), 페릴레닐(perylenyl), 펜타페닐(pentaphenyl), 헥사세닐(hexacenyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C₅-C₃₀ 아릴기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

- [0164] 본 명세서 중 비치환된 C₅-C₃₀ 아릴옥시기는 상기 C₅-C₃₀ 아릴기의 탄소 원자가 산소 연결기(-O-)를 통하여 부착된 1가 그룹을 의미한다. 치환된 C₅-C₃₀ 아릴옥시기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0165] 본 명세서 중 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기는 상기 C₅-C₃₀아릴기의 탄소 원자가 황 연결기(-S-)를 통하여 부착된 1가 그룹을 의미한다. 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기의 예로는 페닐티오, 나프틸티오, 인다닐티오 및 인데닐티오 등을 들 수 있다. 치환된 C₅-C₃₀아릴티오기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0166] 본 명세서 중 비치환된 C₃-C₃₀ 헤테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하는 고리를 하나 이상 포함하는 1가 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹 동일 수 있다. 폴리시클릭 그룹일 경우, 이에 포함된 2 이상의 고리는 서로 융합될 수 있다. 비치환된 C₃-C₃₀헤테로아릴기의 구체예로는 피롤일(pyrrolyl), 이미다졸일(imidazolyl), 피라졸일(pyrazolyl), 피리디닐(pyridinyl), 피라지닐(pyrazinyl), 피리미디닐(pyrimidinyl), 피리다지닐(pyridazinyl), 이소인돌일(isoindolyl), 인돌일(indolyl), 인다졸일(indazolyl), 푸리닐(purinyl), 퀴놀리닐(quinolinyl), 벤조퀴놀리닐(benzoquinolinyl), 프탈라지닐(phthalazinyl), 나프티리디닐(naphthyridinyl), 퀴녹살리닐(quinoxalyl), 퀴나졸리닐(quinazolinyl), 시놀리닐(cinnolinyl), 카바졸일(carbazolyl), 페난트리디닐(phenanthridinyl), 아크리디닐(acridinyl), 페난트롤리닐(phenanthrolinyl), 페나지닐(phenazinyl), 벤조옥사졸일(benzooxazolyl), 벤조이미다졸일(benzoimidazolyl), 푸라닐(furanyl), 벤조푸라닐(benzofuranyl), 티오펜일(thiophenyl), 벤조티오펜일(benzothiophenyl), 티아졸일(thiazolyl), 이소티아졸일(isothiazolyl), 벤조티아졸일(benzothiazolyl), 이소옥사졸일(isoxazolyl), 옥사졸일(oxazolyl), 트리아졸일, 테트라졸, 옥사디아졸일, 트리아지닐, 벤조옥사졸일(benzooxazolyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C₃-C₃₀헤테로아릴기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0167] 본 명세서 중 비치환된 C₁-C₃₀ 알킬렌기는 알칸에서 수소 원자 2 개가 결여된 선형 및 분지형 구조의 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 비치환된 C₁-C₃₀ 알킬렌기의 예는 상기 비치환된 C₁-C₃₀ 알킬기의 예를 참조하여 이해될 수 있다. 치환된 C₁-C₃₀ 알킬렌기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0168] 본 명세서 중 비치환된 C₅-C₃₀ 아릴렌기는 탄소 원자수 5 내지 30개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다. 비치환된 C₅-C₃₀ 아릴렌기의 구체예는 상기 비치환된 C₅-C₃₀아릴기의 예를 참조하여 이해될 수 있다. 치환된 C₅-C₃₀ 아릴렌기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0169] 상기 화학식 1 을 갖는 헤테로고리 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 헤테로고리 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자에게 용이하게 인식될 수 있다.
- [0170] 상기 화학식 1 을 갖는 헤테로고리 화합물은 유기 발광 소자에 사용될 수 있다.
- [0171] 일 구현예에 따라, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 제1층을 포함하고, 상기 제1층이 상술한 바와 같은 화학식 1 로 표시된 헤테로고리 화합물을 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0172] 상기 유기 발광 소자는, 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에, 상술한 바와 같은 제1층 외에, 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 정공 저지층, 전자 주입층, 전자 수송층 또는 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 또는 이들 중 2 이상의 조합을 갖는 층을 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 유기 발광 소자는, 제1전극/정공 주입층/정공 수송층/상기 헤테로고리 화합물을 포함한 제1층(즉, 발광층의 역할을 함)/전자 수송층/전자 주입층/제2전극의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0173] 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재된 층들 중 하나 이상은 증착법 또는 습식 공정에 의하여 형성될 수 있다.
- [0174] 본 명세서 중 "습식 공정"이란 소정의 물질을 소정의 용매와 혼합하여 수득한 혼합물을 소정의 기판 상에 제공한 후, 건조 및/또는 열처리하여 상기 소정의 용매의 일부 이상을 제거함으로써, 상기 기판 상에 상기 소정의 물질을 포함한 막을 형성하는 공정을 말한다.

- [0175] 예를 들어, 상기 제1층은 통상의 진공 증착법에 의하여 형성될 수 있다. 또는, 상기 헤테로고리 화합물 및 용매를 포함한 혼합물을 스핀 코팅법, 스프레이법, 잉크젯 프린팅법, 디핑법, 캐스팅, 그라비아 코팅, 바코팅, 롤 코팅, 와이어 바 코팅, 스크린 코팅, 플렉소 코팅, 오프셋 코팅, 레이저 전사법 등을 이용하여 상기 제1층 형성 영역(예를 들면, 정공 수송층 상부 등)에 제공한 후, 제1층 형성 영역에 제공된 상기 혼합물을 건조 및/또는 열처리하여 상기 용매의 일부 이상을 제거함으로써, 제1층을 형성할 수 있다.
- [0176] 한편, 베이스 필름에 상술한 바와 같은 진공 증착법 또는 습식 공정을 이용하여 제1층을 형성한 후, 상기 제1층을 제1층 형성 영역(예를 들면, 정공 수송층 상부 등)에 레이저 등을 이용하여 전사시키는 등의 레이저 전사법도 이용할 수 있다.
- [0177] 상기 제1층이 전자 주입층, 전자 수송층 또는 전자 주입 기능 및 전자 주입 기능을 동시에 갖는 기능층 또는 발광층 중 적어도 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0178] 상기 제1층이 발광층일 경우, 상기 제1층은 상기 헤테로고리 화합물만을 포함할 수도 있고, 상기 헤테로고리 화합물 외의 이종의 화합물을 더 포함할 수 있다.
- [0179] 예를 들어, 상기 제1층이 발광층이고, 상기 제1층에 포함된 상기 헤테로고리 화합물은 형광 호스트 또는 인광 호스트로 사용될 수 있다. 여기서, 상기 제1층은 형광 도펀트 또는 인광 도펀트를 더 포함할 수 있다. 구체적으로, 상기 제1층은 형광 호스트의 역할을 하는 상기 헤테로고리 화합물과 형광 도펀트를 포함한 발광층이거나, 인광 호스트의 역할을 하는 상기 헤테로고리 화합물과 인광 도펀트를 포함한 발광층일 수 있다. 또는, 상기 제1층이 발광층이고, 상기 제1층에 포함된 상기 헤테로고리 화합물은 형광 도펀트로 사용될 수 있다. 여기서, 상기 제1층은 형광 호스트 또는 인광 호스트를 더 포함할 수 있다. 구체적으로, 상기 제1층은 형광 도펀트의 역할을 하는 상기 헤테로고리 화합물과 인광 호스트 또는 형광 호스트를 포함한 발광층일 수 있다.
- [0180] 한편, 상기 유기 발광 소자 중 상기 발광층은 안트라센계 화합물, 아릴아민계 화합물 및 스티릴계 화합물 중 하나 이상을 더 포함할 수 있다.
- [0181] 또한, 상기 유기 발광 소자 중 제1층은 전자 수송층이고, 상기 전자 수송층은 상기 헤테로고리 화합물과 금속-함유 물질을 포함할 수 있다. 이때 금속-함유 물질이 Li 착체를 포함할 수 있다.
- [0182] 또한, 상기 유기 발광 소자 중 제1층은 전자 수송층이고, 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 발광층이 추가로 개재되되, 상기 발광층은 적색 발광 영역, 녹색 발광 영역, 청색 발광 영역 및 백색 발광 영역 중 하나 이상의 영역을 포함하고, 상기 적색 발광 영역, 녹색 발광 영역, 청색 발광 영역 및 백색 발광 영역 중 하나 이상의 영역은 인광 화합물을 포함할 수 있다. 상기 적색 발광 영역, 녹색 발광 영역, 청색 발광 영역 및 백색 발광 영역은 풀 컬러 화상 또는 백색 발광 등의 구현을 위하여 공지의 방법으로 패터닝되어 있을 수 있다. 상기 인광 화합물은 공지의 인광 호스트 및 인광 도펀트 중에서 선택될 수 있다. 인광 도펀트는 예를 들면 Ir, Pt, Os, Re, Ti, Zr, Hf 또는 이들 중 2 이상의 조합을 포함하는 유기 금속 착체일 수 있다.
- [0183] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.
- [0184] 유기 발광 소자(10)는 기판(11), 제1전극(13) 유기층(15) 및 제2전극(17)을 차례로 구비한다.
- [0185] 상기 기판(11)으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.
- [0186] 상기 제1전극(13)은 기판 상부에 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(13)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록 제1전극용 물질은 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(13)은 반사형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 이용하면, 상기 제1전극(13)을 반사형 전극으로 형성할 수도 있다.
- [0187] 상기 제1전극(13) 상부로는 유기층(15)이 구비되어 있다. 본 명세서에 있어서, "유기층"이란 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 모든 층을 포괄하여 지칭하는 것으로서, 상기 유기층은 금속 착체 등도 포함할 수 있는 것으로서, 반드시 유기물로만 이루어진 층을 의미하는 것은 아니다.

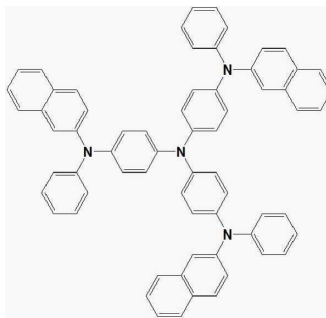
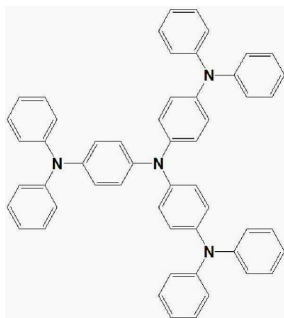
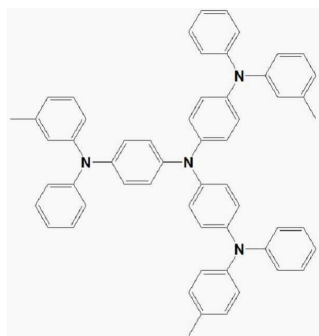
[0188] 상기 유기층(15)은 상기 화학식 1로 표시되는 헥테로고리 화합물을 포함한 제1층을 포함하며, 이외에, 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 및 전자 주입층 중 하나 이상의 층을 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 제1층이 전자 수송층일 경우, 상기 유기층(15)은 상기 전자 수송층의 기능을 하는 상기 제1층 외에, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 주입층을 더 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0189] 정공 주입층(HIL)은 상기 제1전극(13) 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

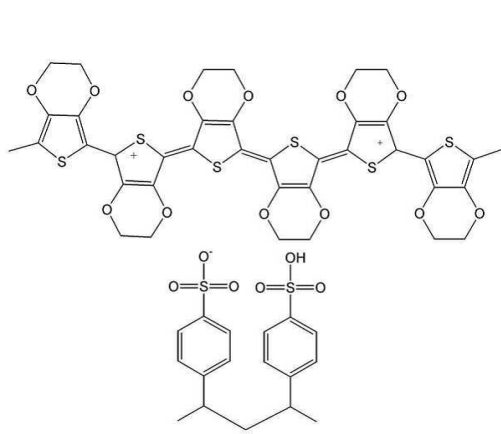
[0190] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500 °C, 진공도 약 10^{-8} 내지 약 10^{-3} torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0191] 습식 공정으로서, 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80°C 내지 200°C의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

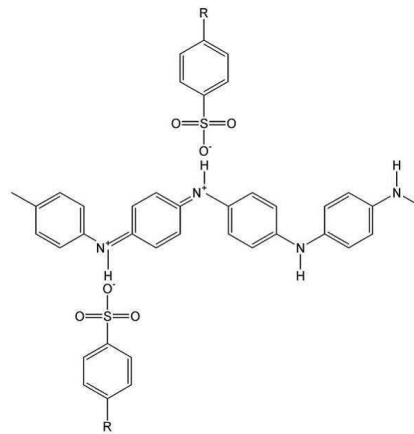
[0192] 정공 주입층 물질로는 공지된 정공 주입 재료를 사용할 수 있는데, 예를 들면, DNTPD(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine: N,N'-디페닐-N,N'-비스-[4-(페닐-m-톨일-아미노)-페닐]-비페닐-4,4'-디아민), 구리프탈로시아닌 등과 같은 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA(4,4',4''-tris(3-methylphenylphenylamino) triphenylamine: 4,4',4''-트리스(3-메틸페닐페닐아미노)트리페닐아민), NPB(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine: N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘), TDATA(4,4',4''-Tris(N,N-diphenylamino)triphenylamine: 4,4',4''-트리스(N,N'-디페닐아미노)트리페닐아민), 2T-NATA(4,4',4''-tris{N,-(2-naphthyl)-N-phenylamino}-triphenylamine: 4,4',4''-트리스{N,-(2-나프틸)-N-페닐아미노}-트리페닐아민), PANI/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐린/도데실벤젠설포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트)), PANI/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid:폴리아닐린/캄페르설포산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린)/폴리(4-스티렌설포네이트))등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.



[0193] [0194] m-MTDATA TDATA 2T-NATA



PEDOT/PSS

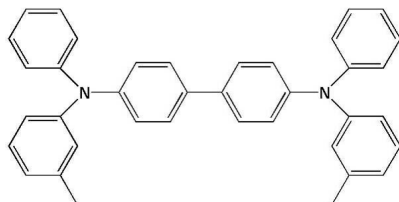


Pani/DBSA

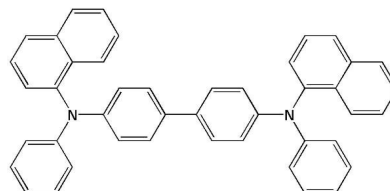
상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스러운 정도의 정공 주입 특성을 얻을 수 있다.

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

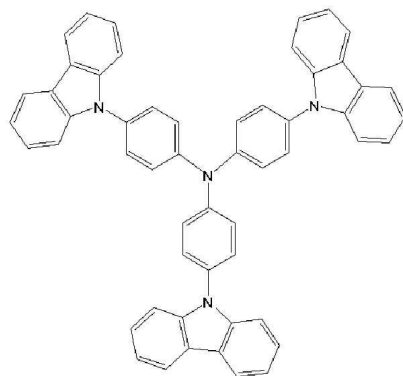
정공 수송층 물질로는 공지된 정공 수송 재료를 이용할 수 있는데, 예를 들면, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸 유도체, TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine: N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1-비페닐]-4,4'-디아민), α-NPD(4,4'-bis[N-(1-naphthyl)-N-phenylamino]biphenyl: 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐) 등의 방향족 축합환을 갖는 아민 유도체, TCTA(4,4',4''-tris(N-carbazolyl)triphenylamine: 4,4',4''-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민) 등과 같은 트리페닐아민계 물질과 같은 공지된 정공 수송 물질을 사용할 수 있다.



TPD



α-NPD



TCTA

상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 800Å일 수 있다. 상기 정공 수송층(14)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의

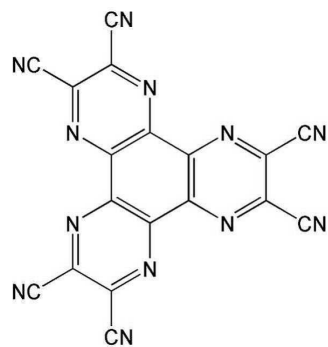
정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0205] 또는, 정공 주입층과 정공 수송층 대신, 정공 주입 기능과 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층을 형성할 수 있다. 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 물질은 공지된 재료 중에서 선택될 수 있다.

[0206] 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나는, 공지된 정공 주입 재료 및 공지된 정공 수송 재료 외에, 막의 도전성 등을 향상시키기 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.

[0207] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라사이아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라사이아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 100 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0208] <화합물 100>



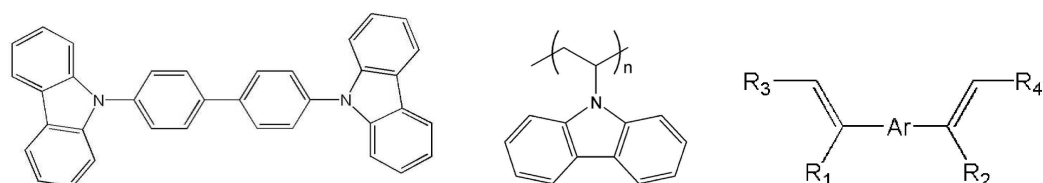
[0209]

[0210] 상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층이 상기 전하-생성 물질을 더 포함할 경우, 상기 전하-생성 물질은 상기 층들 중에 균일하게(homogeneous) 분산되거나, 또는 불균일하게 분포될 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0211] 상기 정공 수송층 또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0212] 상기 발광층 물질로는 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물 및 공지의 발광 재료(호스트 및 도펀트를 모두 포함) 중 1종 이상의 물질을 사용할 수 있다. 상기 발광층이 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함하는 경우, 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 외에, 공지의 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도펀트 또는 형광 도펀트를 더 포함할 수 있다. 상기 헤테로고리 화합물은 인광 호스트, 형광 호스트 또는 형광 도펀트로서의 역할을 할 수 있다.

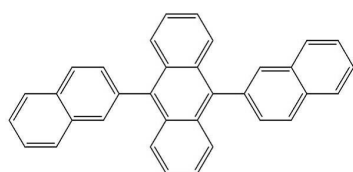
[0213] 예를 들면, 공지의 호스트로서, Alq₃, CBP(4,4'-N,N'-dicabazole-biphenyl: 4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), PVK(poly(n-vinylcabazole): 폴리(n-비닐카바졸)), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene: 9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센), TCTA, TPBI(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene: 1,3,5-트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠), TBADN(3-tert-butyl-9,10-di(naphth-2-yl) anthracene : 3-터트-부틸-9,10-디(나프트-2-일) 안트라센), DSA(distyrylarylene: 디스티릴아릴렌), E3 등을 사용할 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.



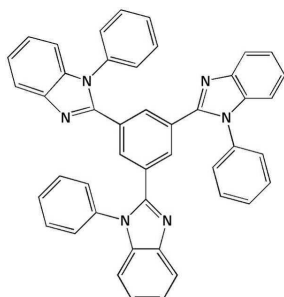
[0214]

[0215]

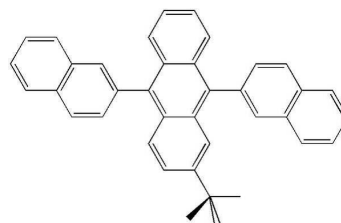
CBP



PVK



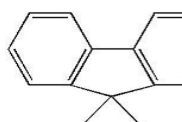
DSA



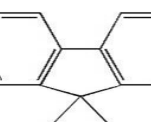
[0216]

[0217]

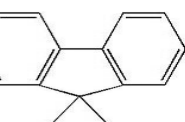
ADN



TPBI



TBADN



[0218]

[0219]

E3

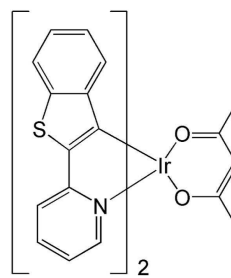
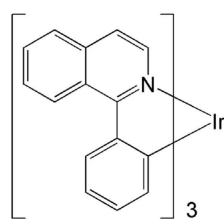
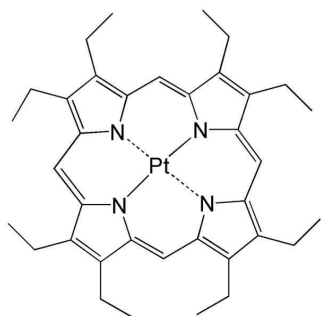
[0220]

상기 도펀트는 형광 도펀트 및 인광 도펀트 중 적어도 하나일 수 있다. 상기 인광 도펀트는, Ir, Pt, Os, Re, Ti, Zr, Hf 또는 이들 중 2 이상의 조합을 포함한 유기 금속 착체일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0221]

한편, 적색 도펀트로서 PtOEP(하기 화학식 참조), Ir(piq)₃(하기 화학식 참조) Btp₂Ir(acac)(하기 화학식 참조) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0222]



[0223]

PtOEP

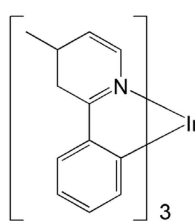
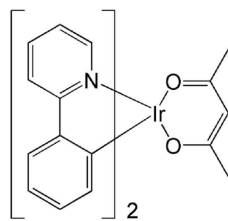
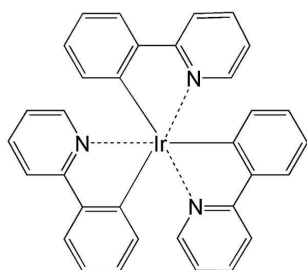
Ir(piq)₃

Btp₂Ir(acac)

[0224]

또한, 녹색 도펀트로서, Ir(ppy)₃ (ppy = 페닐피리딘, 하기 화학식 참조), Ir(ppy)₂(acac)(하기 화학식 참조), Ir(mppy)₃(하기 화학식 참조) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0225]



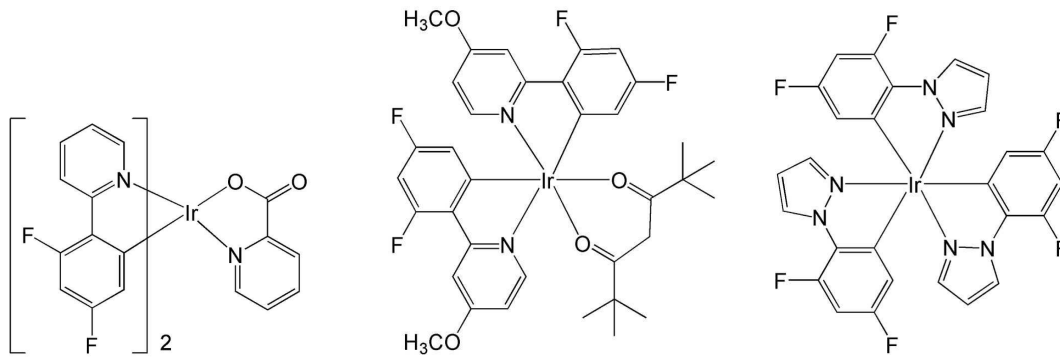
[0226]

Ir(ppy)₃

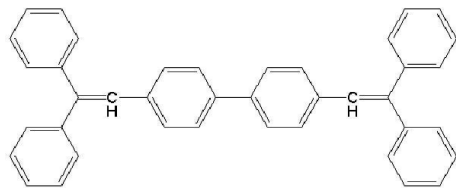
Ir(ppy)₂(acac) Ir(mppy)₃

[0227]

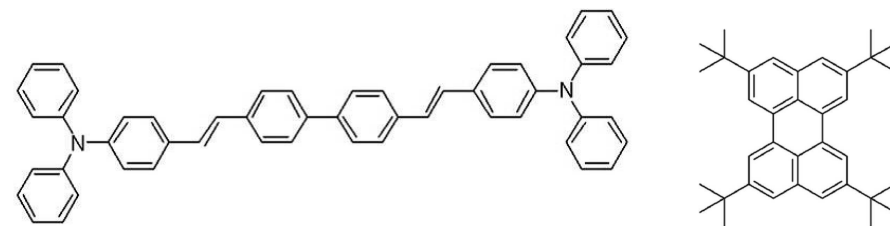
한편, 청색 도펀트로서, F₂Irpic(하기 화학식 참조), (F₂ppy)₂Ir(tmd)(하기 화학식 참조), Ir(dfppz)₃(하기 화학식 참조), DPVBi(하기 화학식 참조), DPAVB(4,4'-비스(4-디페닐아미노스타릴)비페닐), TBP(2,5,8,11-테트라-tert-부틸 페릴렌) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



Ir(ppy)_3 $(\text{F}_2\text{ppy}_2)\text{Ir(tmd)}$ Ir(dfppz)_3



DPVBi



DPAVBi TBPe

상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

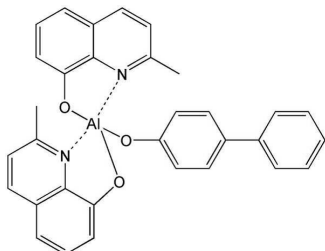
발광층에 인광 도펀트와 함께 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 정공 수송층과 발광층 사이에 진공증착법, 스퍼코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공 저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스퍼코팅법에 의해 정공 저지층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 될 수 있다. 공지의 정공 저지 재료도 사용할 수 있는데, 이의 예로는, 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체 등을 들 수 있다.

상기 정공 저지층의 두께는 약 50Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

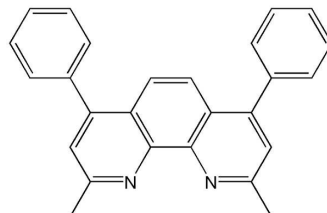
다음으로 전자 수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스퍼코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공증착법 및 스퍼코팅법에 의해 전자수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

상기 전자 수송층 물질로는 상술한 바와 같은 헥테로고리 화합물을 이용할 수 있다. 또는 상기 전자 수송층 물질로는 공지의 전자 수송 물질을 이용할 수 있다. 이의 예로는, 퀴놀린 유도체, 특히 Alq_3 (트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline: 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트

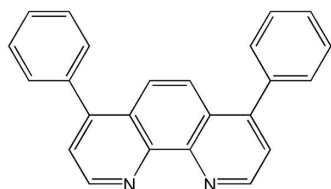
롤린), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline: 4,7-디페닐-1,10-페난트롤린), TAZ(3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole: 3-(4-비페닐릴)-4-페닐-5-tert-부틸페닐-1,2,4-트리아졸), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole: 4-(나프탈렌-1-일)-3,5-디페닐-4H-1,2,4-트리아졸), tBu-PBD(2-(4-Biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole: 2-(4-비페닐릴)-5-(4-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸), BA1q(하기 화학식 참조), Beq₂(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)) 등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



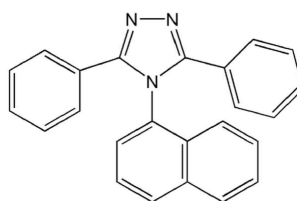
BA1q



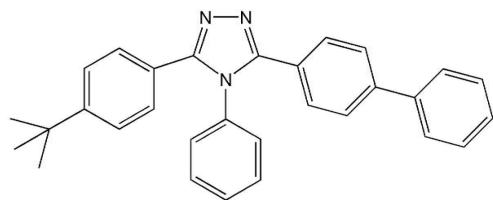
BCP



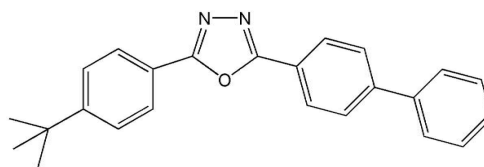
Bphen



NTAZ



TAZ



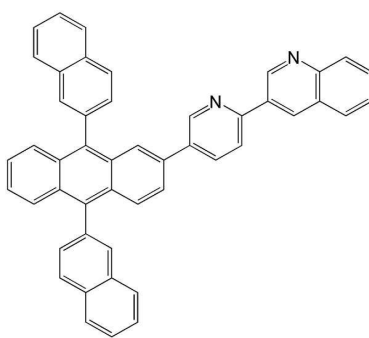
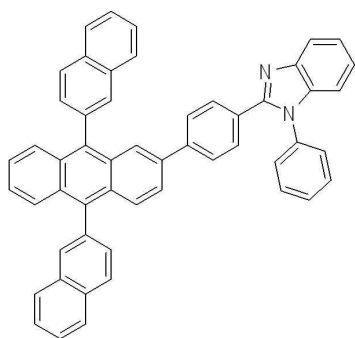
tBu-PBD

상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

또는, 상기 전자 수송층은 전자 수송성 유기 화합물 및 금속-함유 물질을 포함할 수 있다. 상기 전자 수송성 유기 화합물의 비제한적인 예로는, ADN(9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센); 및 하기 화합물 101 및 102와 같은 안트라센계 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

<화합물 101>

<화합물 102>



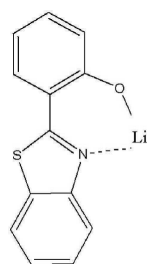
[0248]

[0249]

상기 금속-함유 물질은 Li 작체를 포함할 수 있다. 상기 Li 작체의 비제한적인 예로는, 리튬 퀴놀레이트(LiQ) 또는 하기 화합물 103 등을 들 수 있다:

[0250]

<화합물 103>



[0251]

[0252]

또한 전자 수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

[0253]

상기 전자 주입층 형성 재료로는 LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0254]

상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0255]

이와 같은 유기층(15) 상부로는 제2전극(17)이 구비되어 있다. 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드(Cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극 형성용 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 박막으로 형성하여 투과형 전극을 얻을 수 있다. 한편, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용한 투과형 전극을 형성할 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.

[0256]

상기 유기 발광 소자 중, 상기 제1층이 정공 주입층, 정공 수송층 또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 단일막일 경우, 상기 제1층은 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 외에, 상술한 바와 같은 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다. 또는, 상기 유기 발광 소자 중, 상기 제1층이 발광층일 경우, 상기 제1층은 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 외에, 상술한 바와 같은 인광 도펀트를 더 포함할 수 있는 등 다양한 변형예가 가능하다.

[0257]

상기 유기 발광 소자는 트랜지스터를 포함한 평판 표시 장치에 포함될 수 있다. 따라서, 소스, 드레인, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 상술한 바와 같은 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 소스 및 드레인 중 하나와 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 전기적으로 연결된, 평판 표시 장치가 제공된다. 상기 트랜지스터의 활성층은 비정질 실리콘층, 결정질 실리콘층, 유기 반도체층, 산화물 반도체층 등으로 다양한 변형이 가능하다.

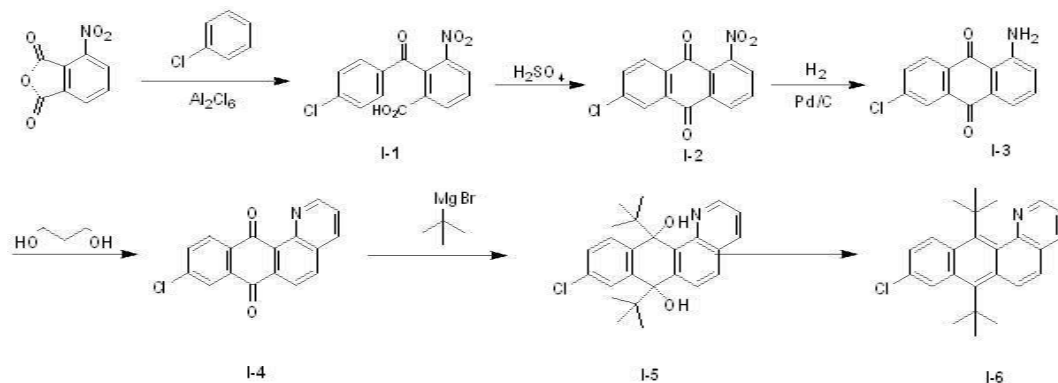
[0258]

이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0259]

[실시예]

[0260] 합성예 1: 중간체 I-6 의 합성



[0261] 합성

[0262] 3-니트로프탈릭안하이드라이드 19.311g(100mmol)을 클로로벤젠 56.28g (500mmol)에 녹이고, Al_2Cl_6 26.668(100mmol)을 염산 가스가 발생하지 않을 때까지 추가한 용액을 100℃ 하에서 8시간 동안 교반하였다. 상기 용액을 상온으로 식히고 얼음물을 가한 뒤 증류하여 클로로벤젠을 제거하였고, 남은 용액을 여과하고 따뜻한 물로 씻어 주었다. 20% 소듐카보네이트용액으로 추출한 뒤 황산을 가하여 고체를 생성시켰다. 생성된 고체를 여과하여 중간체 I-1 12.532g (수율 41%)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0263] $\text{C}_{14}\text{H}_8\text{ClNO}_5$ 계산치: 305.6; 실측치 306.6

[0264] 중간체 I-2 의 합성

[0265] 중간체 I-1 12.532g (41mmol)에 6당량의 황산을 가한 용액을 150℃ 하에서 4시간 동안 교반하였다. 상기 용액을 상온으로 식히고 20% 소듐카보네이트 용액을 가한 뒤 여과하고 110℃ 하에서 건조시켰다. 벤젠을 사용하여 속슬렛 추출(S Soxhlet extraction)한 뒤 건조하여 중간체 I-3 11.439g(수율 97%)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0266] $\text{C}_{14}\text{H}_9\text{ClNO}_4$ 계산치: 287.6; 실측치 288.5

[0267] 중간체 I-3 의 합성

[0268] 중간체 I-2 11.439g(39.7mmol) 과 5% Pd/C을 메탄올에 녹인 용액에 수소 가스를 가해주면서 상온에서 4시간 동안 교반하였다. 상기 반응 용액을 여과한 뒤 남은 용액을 농축하고 잔류물을 실리카젤관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-4 10.014g (수율 97.7%)를 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0269] $\text{C}_{14}\text{H}_8\text{ClNO}_2$ 계산치: 257.6; 실측치 258.6

[0270] 중간체 I-4의 합성

[0271] 중간체 I-3 10.014g (38.8mmol)과 1,3-프로판 다이올 2.952g (38.8mmol)을 메시틸렌(mesitylene) 20ml에 녹였다. 상기 용액에 염화이리듐수화물 0.240g (0.4mmol), BINAP (2,2'-bis-diphenylphosphino-1,1'-binaphtyl) 0.720g (12mmol) 및 소듐카보네이트 1.275g (12mmol)을 가하고 170℃에서 15시간 동안 교반하였다. 여액을 농축하고 잔류물을 실리카젤관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-4 11.395g 수율 96%)를 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0272] $\text{C}_{17}\text{H}_8\text{ClNO}_2$ 계산치: 293.7; 실측치 294.7

[0273] 중간체 I-5의 합성

[0274] tert-부틸마그네슘브로마이드 (20.4 mmol, 4.23 g)을 건조된 THF 100 mL에 넣어서 완전히 녹이고, 여기에 -78℃ 하에서 n-부틸리튬 (8.2 ml, 헥산 중 2.5M 용액) 을 아주 천천히 넣었다. 1 시간 후에 중간체 I-4 11.395g (37.2 mmol)을 넣었다. 30분 후에 냉각 용기를 제거하고 상온에서 3시간 동안 반응시켰다. 반응이 끝난 후에 NH_4Cl 수용액을 넣은 후 에틸에테르로 추출하였다. 추출한 반응물을 무수 마그네슘설페이트로 건조하고 농축시킨 후, 소량의 에틸에테르를 넣고 교반하다가 에탄올을 넣고 교반하였다. 이어서, 반응물을 여과하고 건조하여

중간체 I-5 16.758g (수율 95%)를 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

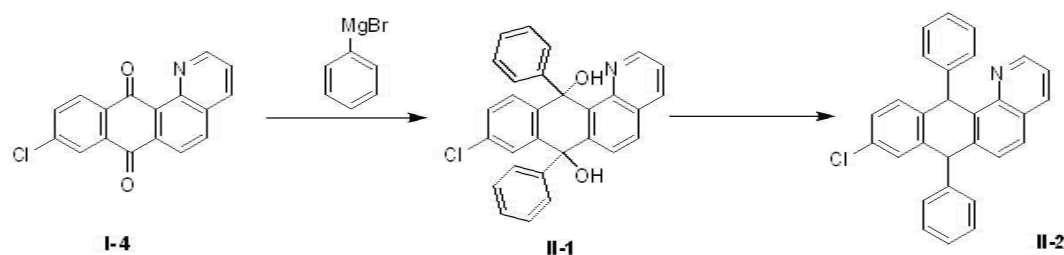
[0275] $C_{25}H_{28}ClNO_2$ 계산치: 409.9; 실측치 410.8

[0276] 중간체 I-6의 합성

[0277] 중간체 I-5 16.758g (37.2mmol), 요오드화칼륨 6.15g (37.2mmol) 및 차아인산나트륨 39.45 g (372mmol)을 500 mL의 아세트산에서 3시간 동안 환류시켰다. 상기 반응물을 상온으로 냉각시킨 후 여과하고, 물과 에탄올로 여러 번 씻어준 후 건조하여 중간체 I-6 9.63g (수율62%)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0278] $C_{25}H_{26}ClN$ 계산치: 375.9; 실측치 376.9

[0279] 합성예 2: 중간체 II-2 의 합성



[0280]

[0281] 중간체 II-1 의 합성

[0282] 중간체 I-4와 페닐마그네슘브로마이드를 이용하여 중간체 I-5의 합성 방법과 동일한 방법에 의하여 중간체 II-1을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

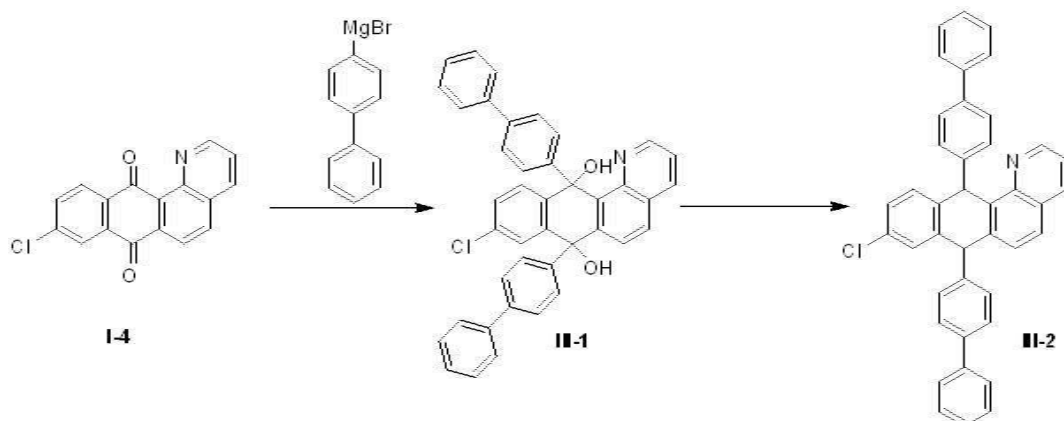
[0283] $C_{29}H_{20}ClNO_2$ 계산치: 449.9; 실측치 450.8

[0284] 중간체 II-2 의 합성

[0285] 중간체 II-1을 이용하여 중간체 I-6의 합성 방법과 동일한 방법으로 중간체 II-2를 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0286] $C_{29}H_{20}ClN$ 계산치: 417.9; 실측치 418.9

[0287] 합성예 3: 중간체 III-2 의 합성



[0288]

[0289] 중간체 III-1 의 합성

[0290] 중간체 I-4와 비페닐마그네슘브로마이드를 이용하여 중간체 I-5의 합성 방법과 동일한 방법에 의하여 중간체 III-1을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

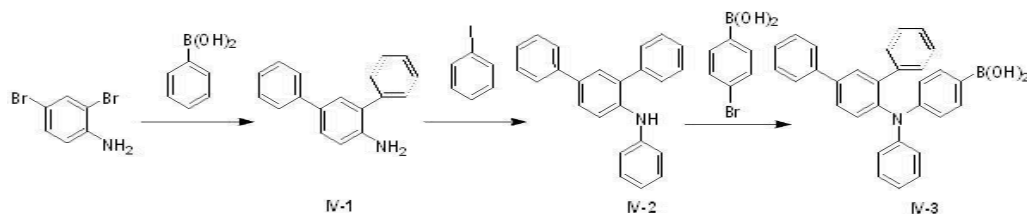
[0291] $C_{41}H_{28}ClNO_2$ 계산치: 601.1; 실측치 602.2

[0292] 중간체 III-2 의 합성

[0293] 중간체 III-1을 이용하여 중간체 I-6의 합성 방법과 동일한 방법으로 중간체 III-2를 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0294] $C_{41}H_{28}ClN$ 계산치: 570.1; 실측치 571.1

[0295] 합성예 4: 중간체 IV-3의 합성



[0296]

[0297] 중간체 IV-1의 합성

[0298] 질소대기 하에서 2,4-디브로모아닐린 5.018g (20mmol), 페닐보론산 4.877g (40mmol), $Pd(PPh_3)_4$ 1.15g (1.0mmol) 및 K_2CO_3 8.29g (60.0 mmol)을 THF/ H_2O (2/1) 혼합용액 60ml 에 녹인 후, 70 °C에서 5시간 동안 교반 하였다. 상기 반응액을 실온으로 식힌 후 물 40 mL를 가하고 에틸에테르 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제 하여 중간체 IV-1 4.464g (수율 91%)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS 로 확인하였다.

[0299] $C_{18}H_{15}N$ 계산치: 245.3; 실측치 246.3

[0300] 중간체 IV-2의 합성

[0301] 질소대기 하에서 IV-1 4.464g (18.2 mmol), 요오드벤젠 6.12 g (30.0 mmol), $Pd_2(dba)_3$ 0.36 g (0.4 mmol), $PtBu_3$ 0.08 g (0.8 mmol) 및 $KOtBu$ 3.88 g (30.0 mmol)을 톨루엔 100 ml 에 녹인 후 85 °C 에서 4 시간 동안 교 반하였다. 상기 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL와 디에틸에테르 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기 층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제 하 여 중간체 IV-2 4.34g (수율 75 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

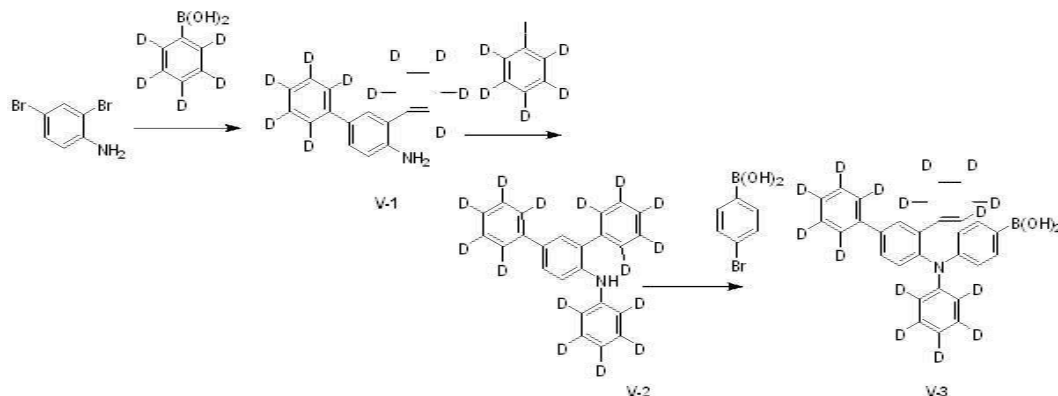
[0302] $C_{24}H_{19}N$ 계산치: 321.4; 실측치 322.4

[0303] 중간체 IV-3의 합성

[0304] 질소대기 하에서 IV-2 4.34g (13.5 mmol), 4-브로모페닐보론산 4.076 g (20.0 mmol), $Pd_2(dba)_3$ 0.36 g (0.4 mmol), $PtBu_3$ 0.08 g (0.8 mmol) 및 $KOtBu$ 2.16 g (20.0 mmol) 톨루엔 100 ml 에 녹인 후 85 °C 에서 4 시간 동 안 교반하였다. 상기 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정 제하여 중간체 IV-3 3.572 g (수율 60 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0305] $C_{30}H_{29}BNO_2$ 계산치: 441.3; 실측치 442.3

[0306] 합성예 5: 중간체 V-3의 합성



[0307]

[0308] 중간체 V-1의 합성

[0309] 질소대기 하에서 2,4-디브로모아닐린 5.018g (20mmol), 5D-페닐보론산 4.877g (40mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.15 g (1.0 mmol) 및 K₂CO₃ 8.29g (60.0 mmol) 을 THF/H₂O(2/1) 혼합용액 60ml 에 녹인 후, 70 °C에서 5시간 동안 교반하였다. 상기 반응액을 실온으로 식힌 후 물 40 mL를 가하고 에틸에테르 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 V-1 4.443 g (수율 89 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0310] C₁₈H₅D₁₀N 계산치: 255.3; 실측치 265.3

[0311] 중간체 V-2의 합성

[0312] 질소대기 하에서 중간체 V-1 4.443g (17.8 mmol), 5D-요오드벤젠 6.13 g (30.0 mmol), Pd₂(dba)₃ 0.36 g (0.4 mmol), PtBu₃ 0.08 g (0.8 mmol) 및 KOtBu 3.88 g (30.0 mmol) 톨루엔 100 ml 에 녹인 후 85 °C 에서 4 시간 동안 교반하였다. 상기 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 V-2 4.192 g (수율 70 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

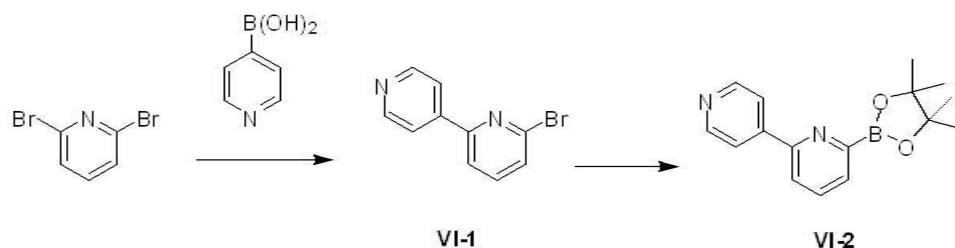
[0313] C₂₄H₄D₁₅N 계산치: 336.5; 실측치 337.5

[0314] 중간체 V-3의 합성

[0315] 질소대기 하에서 중간체 V-2 4.192g (12.4 mmol), 4-브로모페닐보론산 4.076 g (20.0 mmol), Pd₂(dba)₃ 0.36 g (0.4 mmol), PtBu₃ 0.08 g (0.8 mmol) 및 KOtBu 2.16 g (20.0 mmol) 톨루엔 100 ml 에 녹인 후 85 °C 에서 4 시간 동안 교반하였다. 상기 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 V-3 3.848 g (수율 68 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0316] C₃₀H₉D₁₅BN₂O₂ 계산치: 456.4; 실측치 466.4.

[0317] 합성예 6: VI-2의 합성



[0318]

[0319] 질소대기 하에서 2,6-디브로모피리딘 7.106g (30.0mmol), 4-피리딘보론산 1.843g (15.0mmol), $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 1.733 g (1.5 mmol) 및 K_2CO_3 4.146g (30.0 mmol) 을 THF/ H_2O (2/1) 혼합용액 120ml 에 녹인 후, 70 °C에서 5시간 동안 교반하였다. 상기 반응액을 실온으로 식힌 후 물 70 mL를 가하고 에틸에테르 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 VI-1 1.76 g (수율 25 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

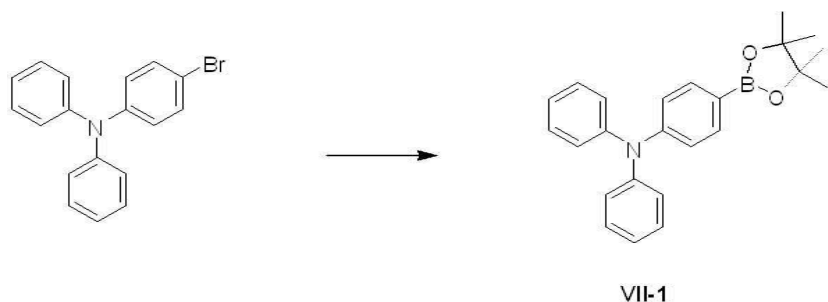
[0320] $\text{C}_{10}\text{H}_7\text{BrN}_2$ 계산치: 235.0 ; 실측치 235.9

[0321] 중간체 VI-2의 합성

[0322] 4-브로모트리페닐아민 9.72 g (30.0 mmol), 비스(피나콜라토)디보레인 (bis(pinacolato)diboron) 7.62g (30.0 mmol), [1,1'-비스(디페닐포스포노) 페로센]디클로로팔라듐(II) ([1,1'-Bis(diphenylphosphino)ferrocene]dichloropalladium(II)) (이하 $\text{PdCl}_2(\text{dppf})_2$) 1.08g (1.5 mmol) 및 KOAc 9g (90.0 mmol) 을 DMSO 120 ml 에 녹인 후 80°C 에서 6시간 동안 교반하였다. 상기 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 100 mL 와 디에틸에테르 100 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 VI-2 7.71g (수율 89 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0323] $\text{C}_{16}\text{H}_{19}\text{BN}_2\text{O}_2$ 계산치: 282.1 ; 실측치 283.2

[0324] 합성예 7: 중간체 VII-1의 합성

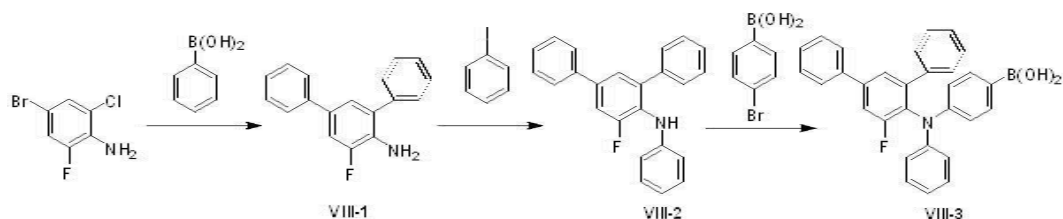


[0325]

[0326] 4-브로모트리페닐아민 9.72 g (30.0 mmol), 비스(피나콜라토)디보레인 7.62g (30.0mmol), $\text{PdCl}_2(\text{dppf})_2$ 1.08 g (1.5mmol) 및 KOAc 9 g (90.0 mmol) 을 DMSO 120 ml 에 녹인 후 80°C 에서 6시간 동안 교반하였다. 상기 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 100 mL 와 디에틸에테르 100 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 VII-1 7.71 g (수율 89 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0327] $\text{C}_{24}\text{H}_{26}\text{BNO}_2$ 계산치: 371.2 ; 실측치 372.2

[0328] 합성예 8: 중간체 VIII-3의 합성



[0329]

[0330] 중간체 VIII-1의 합성

[0331] 질소대기 하에서 2-염화-4-브로모-6-플로로아닐린 4.449g (20mmol), 페닐보론산 4.877g (40mmol), $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 1.15 g (1.0 mmol) 및 K_2CO_3 8.29g (60.0 mmol) 을 THF/ H_2O (2/1) 혼합용액 60ml 에 녹인 후, 70°C에서 5시간

동안 교반하였다. 상기 반응액을 실온으로 식힌 후 물 40 mL를 가하고 에틸에테르 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 VIII-1 4.465 g (수율 81 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0332] $C_{18}H_{14}FN$ 계산치: 263.1 ; 실측치 264.1

[0333] 중간체 VIII-2의 합성

[0334] 질소대기 하에서 VIII-1 4.465g (16.2 mmol), 요오드벤젠 5.10 g (25.0 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)(Tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(이하, $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$) 0.36 g (0.4 mmol), PtBu_3 0.08 g (0.8 mmol) 및 KOtBu 3.88 g (30.0 mmol) 톨루엔 100 ml 에 녹인 후 85 °C 에서 4 시간 동안 교반하였다. 상기 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설레이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 VIII-2 3.906 g (수율 72 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

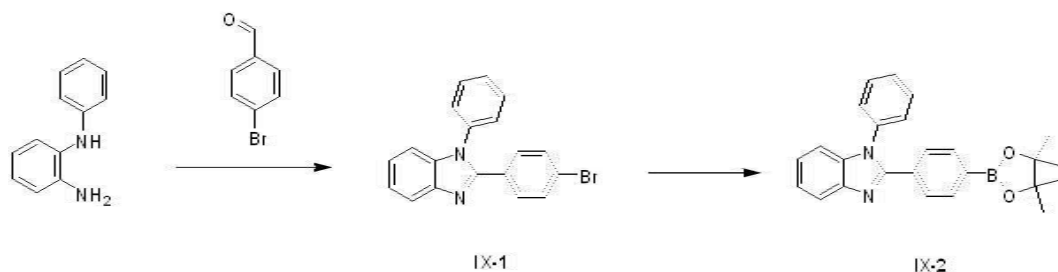
[0335] $C_{24}H_{18}FN$ 계산치: 339.40 ; 실측치 340.1

[0336] 중간체 VIII-3의 합성

[0337] 질소대기 하에서 중간체 VIII-2 3.906g (11.5 mmol), 4-브로모페닐보론산 3.057g (15.0 mmol), Pd₂(dba)₃ 0.36g (0.4 mmol), PtBu₃ 0.08 g (0.8 mmol) 및 KOtBu 2.16 g (20.0 mmol) 톨루엔 100 ml 에 녹인 후 85 °C 에서 4 시간 동안 교반하였다. 상기 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 VIII-3 4.12g (수율 78 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0338] $C_{30}H_{23}BFNO_2$ 계산치: 459.3 ; 실측치 460.2

[0339] 합성예 9: 중간체 IX-2의 합성



[0340]

[0341] 중간체 IX-1의 합성

[0342] 4-브로모-벤즈알데하이드(3.688g, 20.0 mmol)를 30ml의 니트로벤젠에 분산시킨 후, N-페닐-1,2-페닐렌디아민(N-phenyl-1,2-phenylenediamine) (3.684g, 20.0mmol)을 첨가하고 6시간 동안 180 °C에서 가열하였다. 상기 반응액을 실온으로 냉각한 후, 니트로벤젠을 감압 증류하여 제거한 후, 얻어진 고체를 여과하고 에틸에테르로 씻어준 후 진공 건조하여 중간체 IX-1(4.958g, 71%)를 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

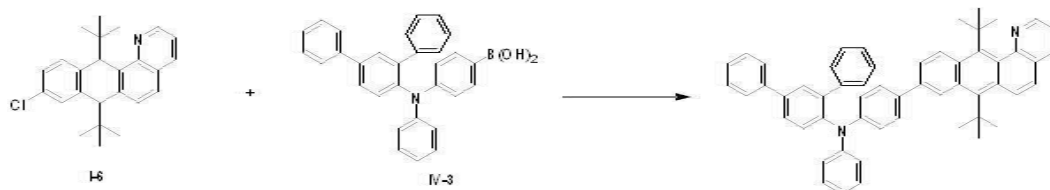
[0343] $C_{19}H_{13}BrN_2$ 계산치: 349.3 ; 실측치 350.3

[0344] 중간체 IX-2의 합성

[0345] 중간체 IX-1 (4.958g, 14.2mmol), 비스(피나콜라토)디보레인 3.812g (15.0 mmol), $\text{PdCl}_2(\text{dppf})_2$ 0.54 g (0.75 mmol) 및 KOAc 4.5 g (45.0 mmol) 을 DMSO 120 ml 에 녹인 후 80℃ 에서 6 시간 동안 교반하였다. 상기 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 100 mL 와 디에틸에테르 100 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설염이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 IX-2 7.71 g (수율 89 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS로 확인하였다.

[0346] $C_{25}H_{25}BN_2O_2$ 계산치: 396.3 ; 실측치 397.3

[0347] 합성예 10: 화합물 25의 합성



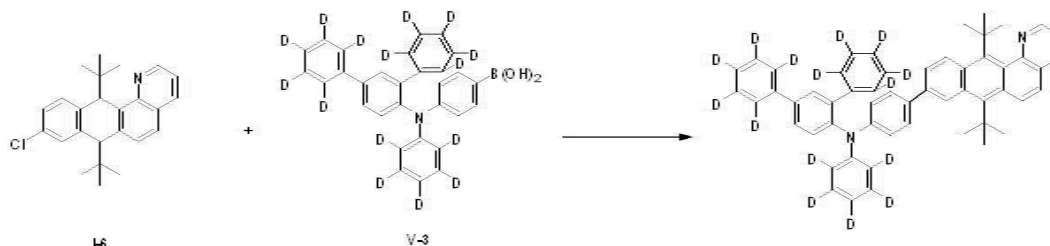
[0348]

[0349] 질소대기 하에서 중간체 I-6 2.903g (8.0mmol), 중간체 IV-3 3.528g (8.0mmol), $Pd(PPh_3)_4$ 0.05 g (0.04 mmol) 및 K_2CO_3 2.76g (20.0 mmol) 을 THF/ H_2O (2/1) 혼합용액 60ml 에 녹인 후, 70 °C에서 5시간 동안 교반하였다. 상기 반응액을 실온으로 식힌 후 물 40 mL를 가하고 에틸에테르 30 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔관 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 25 3.657 g (수율 65 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0350] $C_{55}H_{48}N_2$ 계산치: 736.9; 실측치 737.9

[0351] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.88 (dd, 1H), 8.23 (d, 1H), 8.09 (d, 1H), 8.07 (d, 1H), 7.80-7.66 (m, 8H), 7.60-7.50 (m, 2H), 7.48-7.40 (m, 8H), 7.26-7.18 (m, 3H), 7.14-7.12 (m, 2H), 7.05-7.01 (m, 1H), 6.98-6.96 (m, 2H), 1.53 (s, 9H), 1.51 (s, 9H)

[0352] 합성예 11: 화합물 27의 합성



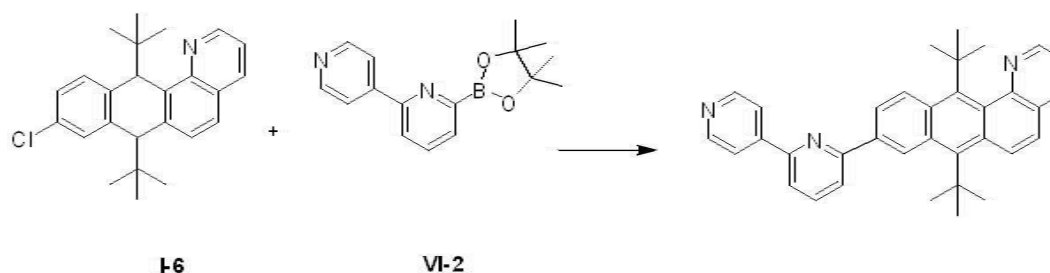
[0353]

[0354] 중간체 I-6 와 중간체 V-3을 사용하여 화합물 25의 합성 방법과 동일한 방법에 의하여 화합물 27을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0355] $C_{55}H_{33}D_{15}N_2$ 계산치: 752.1; 실측치 753.1

[0356] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.88 (dd, 1H), 8.23 (d, 1H), 8.06 (d, 1H), 8.05 (d, 1H), 7.79 (d, 1H), 7.75 (q, 2H), 7.53-7.46 (m, 4H), 7.40 (dd, 1H), 7.26 (d 1H), 7.14 (dd, 2H), 1.53 (s, 9H), 1.51 (s, 9H)

[0357] 합성예 12: 화합물 30의 합성



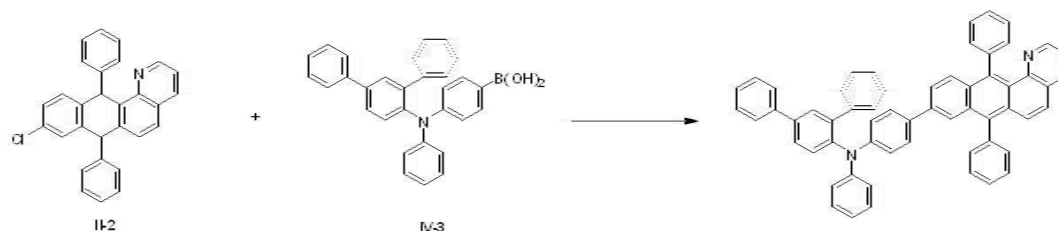
[0358]

[0359] 중간체 I-6 와 중간체 VI-2를 사용하여 화합물 25의 합성 방법과 동일한 방법에 의하여 화합물 30을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0360] $C_{35}H_{33}N_3$ 계산치: 495.6; 실측치 496.6

[0361] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.84 (dd, 1H), 8.79 (d, 1H), 8.65 (dd, 2H), 8.24-8.21(m, 2H), 8.09 (dd, 1H), 8.04 (dd, 2H), 7.87 (t, 1H), 7.80 (d, 1H), 7.74-7.70 (m, 3H), 7.51 (q, 1H), 1.53 (s, 9H), 1.51 (s, 9H)

[0362] 합성예 13: 화합물 54의 합성



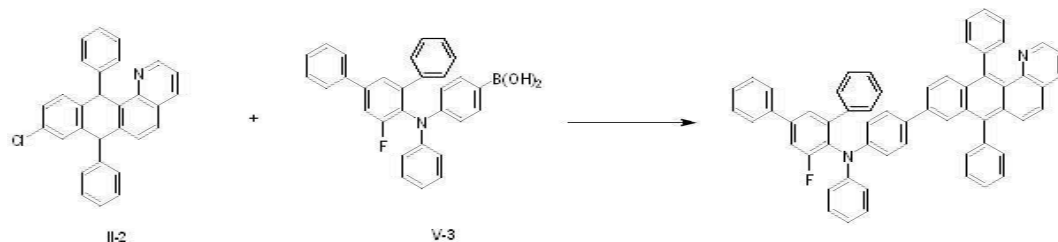
[0363]

[0364] 중간체 II-2 와 중간체 IV-3을 사용하여 화합물 25의 합성 방법과 동일한 방법에 의하여 화합물 54를 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0365] $C_{59}H_{40}N_2$ 계산치: 776.9; 실측치 777.9

[0366] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.88(dd, 1H), 8.29 (d, 1H), 8.23 (d, 1H), 8.03 (s, 1H), 7.95 (d, 2H), 7.87 (dd, 2H), 7.85 (dd, 1H), 7.72-7.41 (m, 23H), 7.29-7.19 (m, 3H), 7.14 (d, 2H), 7.09 (t, 1H), 6.98 (m, 2H), 1.53 (s, 9H)

[0367] 합성예 14: 화합물 63의 합성



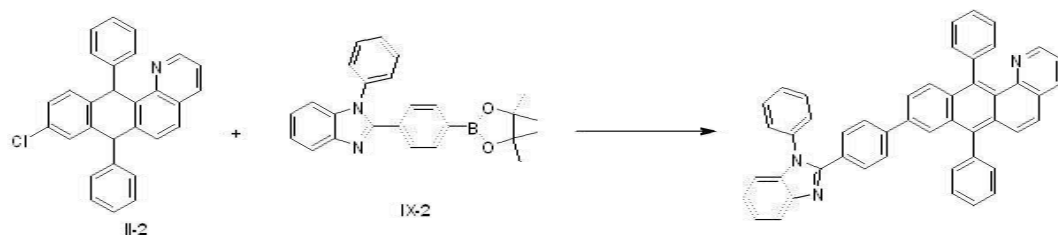
[0368]

[0369] 중간체 II-2 와 중간체 V-3을 사용하여 화합물 25의 합성 방법과 동일한 방법에 의하여 화합물 63을 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0370] $C_{59}H_{39}FN_2$ 계산치: 794.9; 실측치 795.6

[0371] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.86(dd, 1H), 8.27 (d, 1H), 8.22 (d, 1H), 8.03 (s, 1H), 7.95 (d, 2H), 7.87 (dd, 2H), 7.82 (dd, 1H), 7.72 (dd, 2H), 7.65-7.41 (m, 20H), 7.23 (d, 1H), 7.19 (m, 2H), 7.15 (q, 2H), 7.10 (q, 1H), 6.98 (m, 2H)

[0372] 합성예 15: 화합물 65의 합성



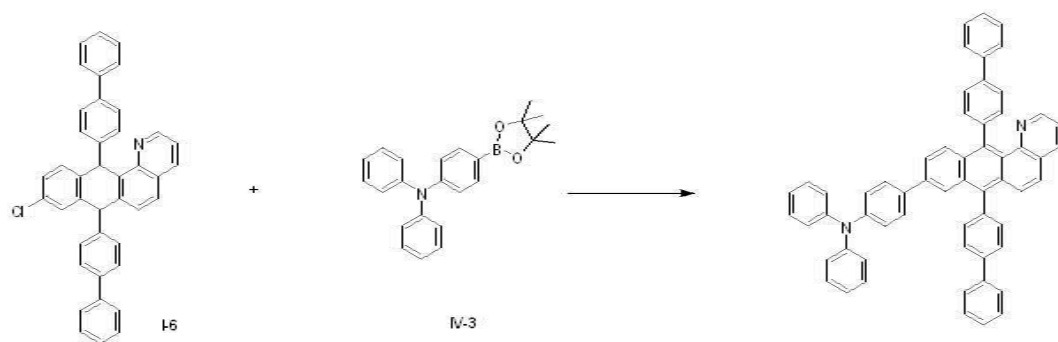
[0373]

[0374] 중간체 II-2 와 중간체 IX-2를 사용하여 화합물 25의 합성 방법과 동일한 방법에 의하여 화합물 65를 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0375] $C_{48}H_{31}N_3$ 계산치: 649.7; 실측치 650.8

[0376] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.88 (dd, 1H), 8.27 (dd, 1H), 8.22 (dd, 1H), 8.14 (d, 1H), 7.95-7.93 (m, 2H), 7.90-7.85 (m, 3H), 7.82-7.72 (m, 5H), 7.67-7.43 (m, 10H), 7.40-7.37 (m, 5H), 7.30 (dd, 1H), 7.19 (m, 1H)

[0377] 합성예 16: 화합물 75의 합성



[0378]

[0379] 중간체 I-6 과 중간체 IV-3을 사용하여 화합물 25의 합성 방법과 동일한 방법에 의하여 화합물 75를 얻었다. 생성된 화합물은 LC/MS와 NMR을 통해 확인하였다.

[0380] $C_{59}H_{40}N_2$ 계산치: 776.9; 실측치 777.6

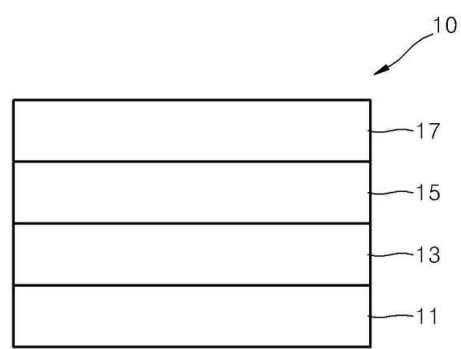
[0381] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.88 (dd, 1H), 8.29 (d, 1H), 8.23 (d, 1H), 8.06 (s, 1H), 7.94 (d, 2H), 7.85 (s, 4H), 7.82 (d, 1H), 7.72 (d, 2H), 7.63-7.58 (m, 6H), 7.55-7.48 (m, 7H), 7.44-7.37 (m, 2H), 7.28 (t, 4H), 7.15 (d, 2H), 7.11 (t, 2H), 7.05 (d, 4H)

부호의 설명

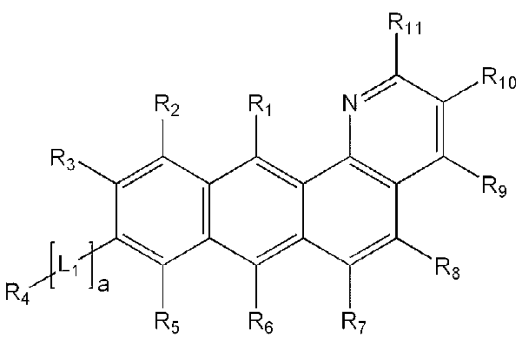
- | | | |
|--------|--------------|---------|
| [0382] | 10: 유기 발광 소자 | 11: 기판 |
| | 13: 제1전극 | 15: 유기층 |
| | 17: 제2전극 | |

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	杂环化合物，包括其的机电致发光器件，以及包括机电致发光器件的平板显示器件		
公开(公告)号	KR101885697B1	公开(公告)日	2018-08-07
申请号	KR1020110063032	申请日	2011-06-28
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
[标]发明人	HAN SANG HYUN 한상현 HWANG SEOK HWAN 황석환 KIM YOUNG KOOK 김영국 JUNG HYE JIN 정혜진 LIM JIN O 임진오 CHO SE JIN 조세진 LEE JONG HYUK 이종혁		
发明人	한상현 황석환 김영국 정혜진 임진오 조세진 이종혁		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0072 H01L51/0061 H01L51/5012 H01L51/5016 C07D401/14 C07D221/18 C07D401/04 C07D401/10 C07D413/10 C07D471/04 H01L2251/30 C09K11/06 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1033 C09K2211/1044 H05B33/14		
其他公开文献	KR1020130007047A		

摘要(译)

目的：提供一种机电致发光器件，具有低驱动电压，高亮度，高效率和使用寿命，并提供高质量的平板显示器件。组成：杂环化合物用化学式1表示。有机光发光器件（10）包括第一电极（13），面对第一电极的第二电极（17），以及插入第一电极和第二电极之间的第一层。第一层包含杂环化合物。一种平板显示装置，包括：晶体管，包括源极，漏极，栅极和有源层;以及有机发光装置。源极和漏极中的一个电连接到有机发光装置。

