



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년08월01일
(11) 등록번호 10-1872407
(24) 등록일자 2018년06월22일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2011-0060806
(22) 출원일자 2011년06월22일
심사청구일자 2016년06월21일
(65) 공개번호 10-2013-0000228
(43) 공개일자 2013년01월02일
(56) 선행기술조사문헌
KR1020110034103 A

(73) 특허권자
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(72) 발명자
김영국
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
황석환
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
(74) 대리인
리엔목특허법인

전체 청구항 수 : 총 22 항

심사관 : 송이화

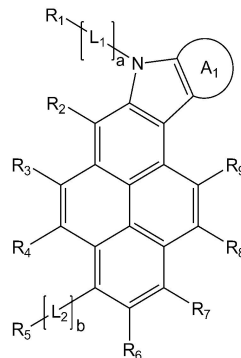
(54) 발명의 명칭 **헤테로고리 화합물, 이를 포함하는 유기 발광 소자 및 평판 표시 장치**

(57) 요약

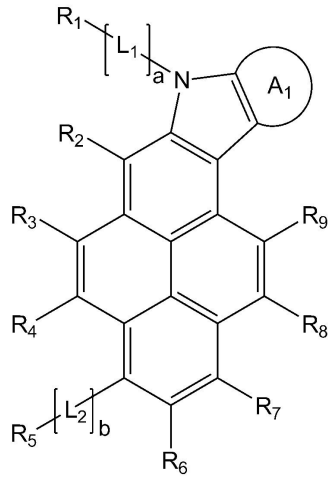
하기 화학식 1을 가지는 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자 및 평판 표시 장치가 제공된다:

(뒷면에 계속)

대표도 - 도2



<화학식 1>



상기 식 중,

A₁은 치환 또는 비치환된 융합된 피리딘 고리이고, R₁ 내지 R₉, L₁, L₂, a 및 b는 발명의 상세한 설명을 참조한다. 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기층을 구비한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고발광 효율 및 장수명의 특성을 가진다.

(72) 발명자

정혜진

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

임진오

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

한상현

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

곽윤현

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

이선영

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

고희주

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

이종혁

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

김성철

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

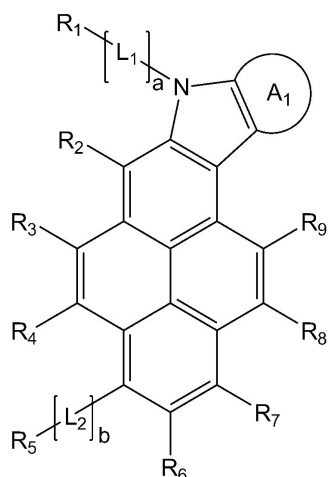
명세서

청구범위

청구항 1

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

<화학식 1>



상기 식 중,

A₁은 치환 또는 비치환된 융합된 피리딘 고리이고,

R₁ 및 R₅는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀헤테로아릴기 및 N(Q₁)(Q₂)로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q₁ 및 Q₂는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀헤테로아릴기 중 하나이고,

R₂ 내지 R₄ 및 R₆ 내지 R₉는 수소 원자이고,

L₁ 및 L₂는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀헤테로아릴렌기 중 하나이고, a 및 b는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수 중 하나이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

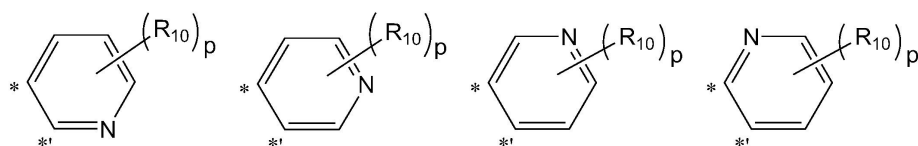
상기 A₁이 하기 화학식 2A 내지 2D로 표시되는 그룹 중 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로고리 화합물:

<화학식 2A>

<화학식 2B>

<화학식 2C>

<화학식 2D>



상기 식 중,

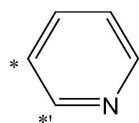
R_{10} 은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{30} 아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 헤테로아릴기 중 하나이고, 복수 개의 R_{10} 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, p 는 1 내지 3의 정수 중 하나이고, * 및 *'은 융합되는 사이트이다.

청구항 3

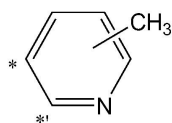
제1항에 있어서,

상기 A_1 이 하기 화학식 3A 내지 3P로 표시되는 그룹 중 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로고리 화합물:

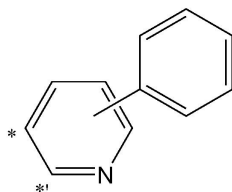
<화학식 3A>



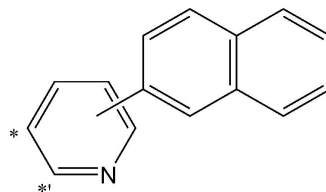
<화학식 3B>



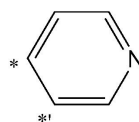
<화학식 3C>



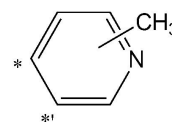
<화학식 3D>



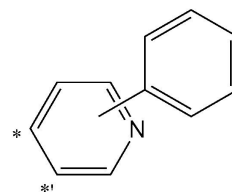
<화학식 3E>



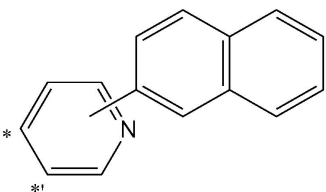
<화학식 3F>



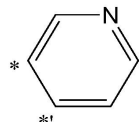
<화학식 3G>



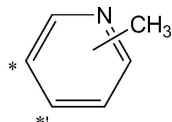
<화학식 3H>



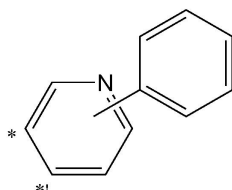
<화학식 3I>



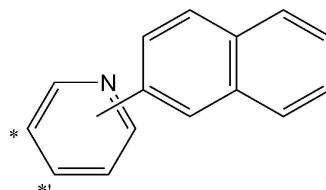
<화학식 3J>



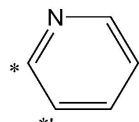
<화학식 3K>



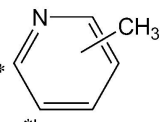
<화학식 3L>



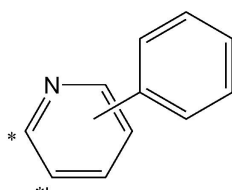
<화학식 3M>



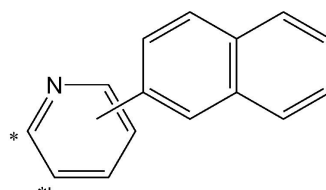
<화학식 3N>



<화학식 3O>



<화학식 3P>



상기 식 중, * 및 *'은 융합되는 사이트이다.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 R_1 및 R_5 는 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 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란데닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페틸레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 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 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 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 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 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, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 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 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리디닐기 중 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로고리 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 R_1 및 R_5 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, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 피리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 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 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q_1 및 Q_2 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, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리디닐기 중 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로고리 화합물.

청구항 6

삭제

청구항 7

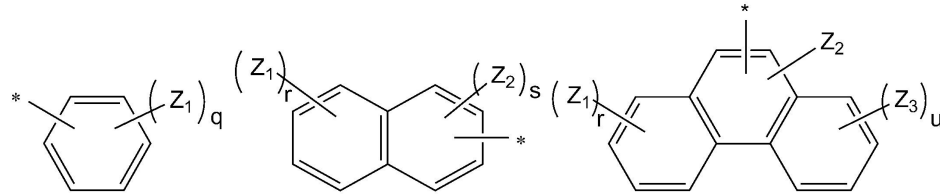
제1항에 있어서,

상기 R_1 및 R_5 가 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 이소부틸기, 및 하기 화학식 4A 내지 4V로 표시되는 그룹 중 하나인, 헤테로고리 화합물:

<화학식 4A>

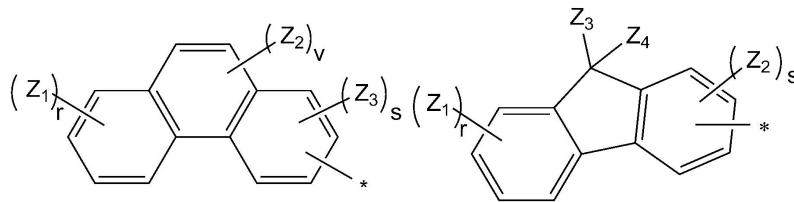
<화학식 4B>

<화학식 4C>



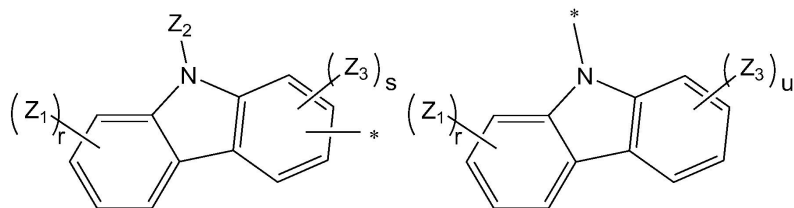
<화학식 4D>

<화학식 4E>



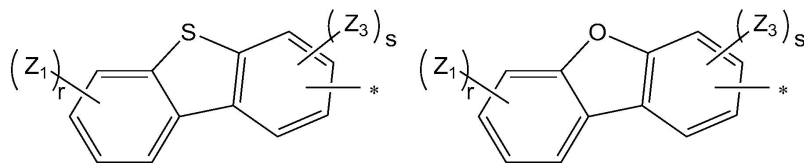
<화학식 4F>

<화학식 4G>



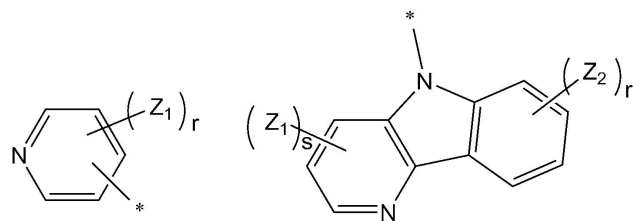
<화학식 4H>

<화학식 4I>



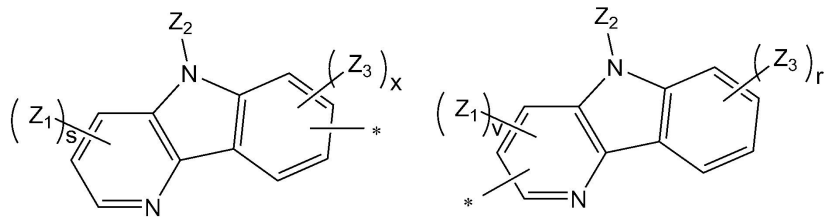
<화학식 4J>

<화학식 4K>



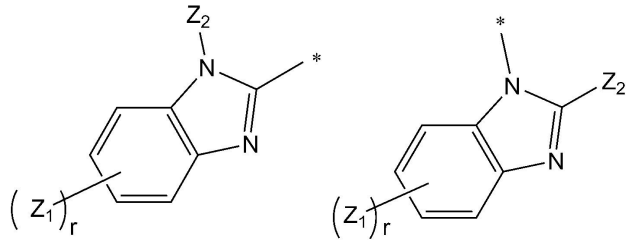
<화학식 4L>

<화학식 4M>



<화학식 4N>

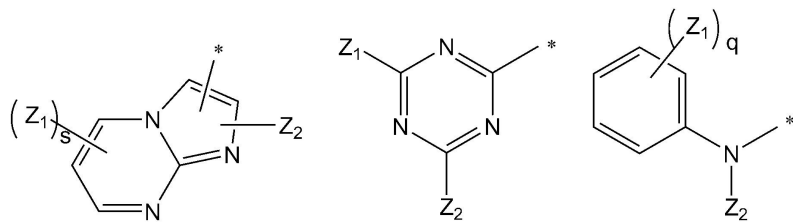
<화학식 4O>



<화학식 4P>

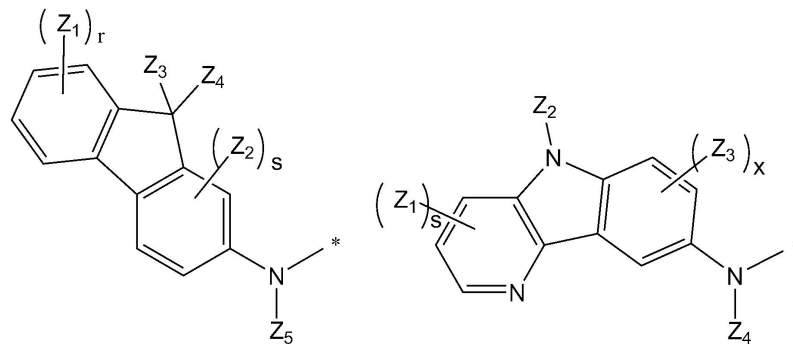
<화학식 4Q>

<화학식 4R>



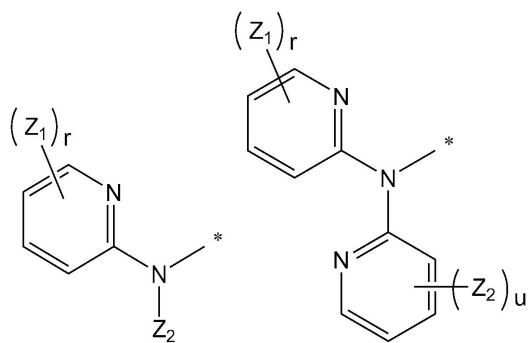
<화학식 4S>

<화학식 4T>



<화학식 4U>

<화학식 4V>



상기 식 중,

Z_1 , Z_2 , Z_3 , Z_4 및 Z_5 는 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 피리다닐기 중 하나이고, 복수 개의 Z_1 , Z_2 , Z_3 , Z_4 및 Z_5 는 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있고, q 는 1 내지 5의 정수 중 하나이고 r 및 u 는 서로 독립적으로 1 내지 4의 정수 중 하나이고 s 및 x 는 서로 독립적으로 1 내지 3의 정수 중 하나이고 v 는 1 내지 2의 정수 중 하나이고, *은 결합 사이트이다.

청구항 8

제1항에 있어서,

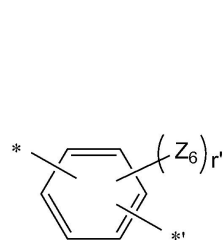
상기 L_1 및 L_2 가 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크리세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기 및 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일렌기 중 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로고리 화합물.

청구항 9

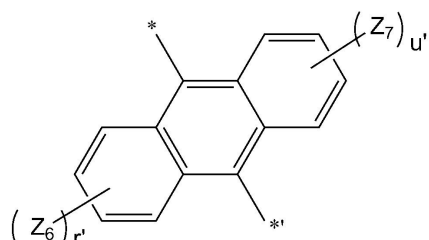
제1항에 있어서,

상기 L_1 및 L_2 가 하기 화학식 5A 내지 5G로 표시되는 그룹 중 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로고리 화합물:

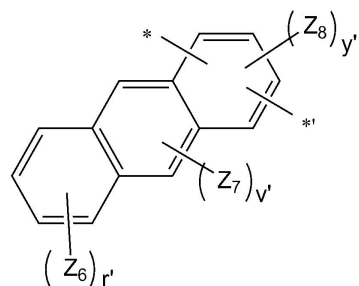
<화학식 5A>



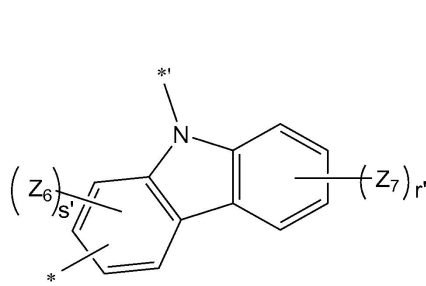
<화학식 5B>



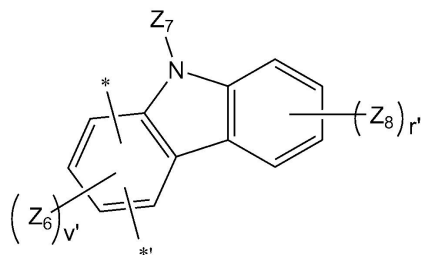
<화학식 5C>



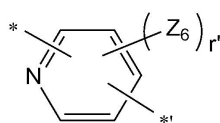
<화학식 5D>



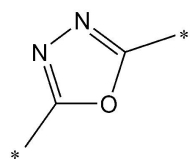
<화학식 5E>



<화학식 5F>



<화학식 5G>



상기 식 중,

Z_6 , Z_7 및 Z_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 부틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기 중 하나이고, 복수 개의 Z_6 , Z_7 및 Z_8 은 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있고, r' 및 u' 은 서로 독립적으로 1 내지 4의 정수 중 하나이고 s' 은 1 내지 3의 정수 중 하나이고, v' 및 y' 은 서로 독립적으로 1 내지 2의 정수 중 하나이고, * 및 *'은 각각 결합 사이트이다.

청구항 10

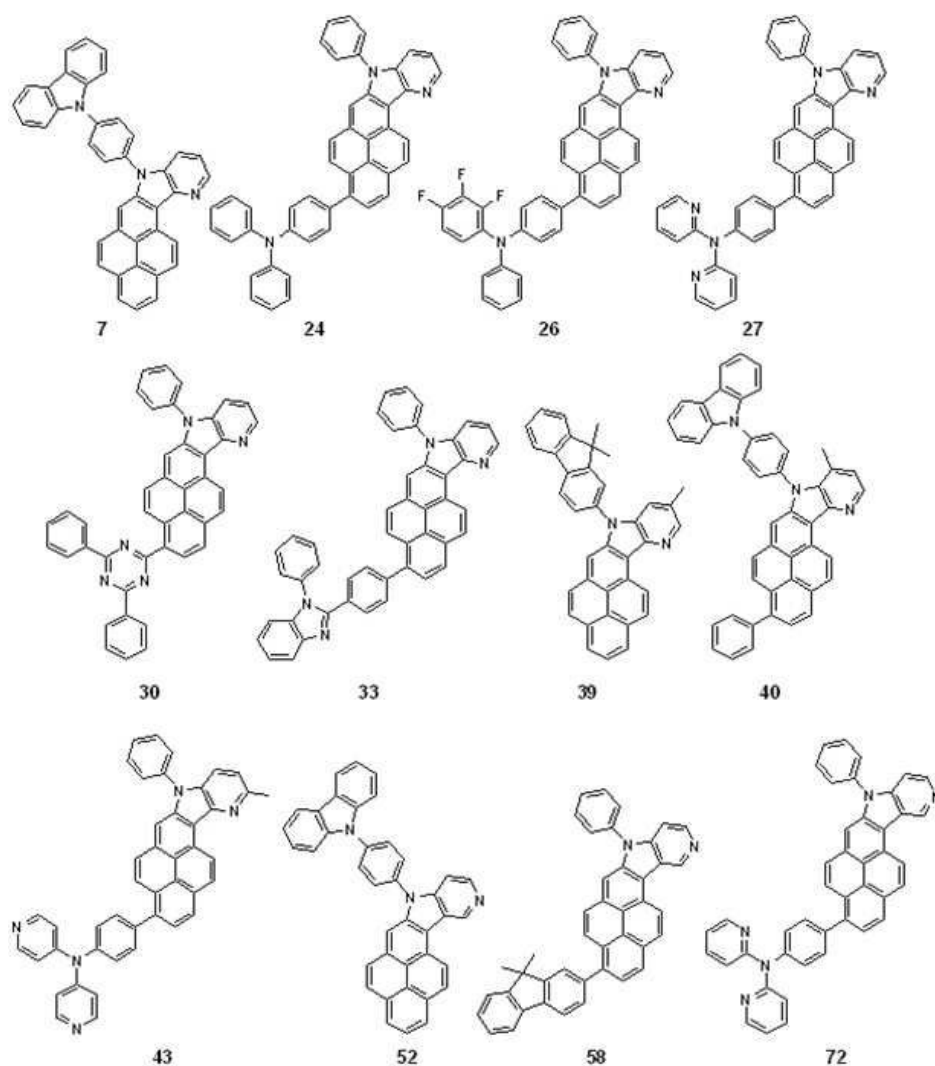
제1항에 있어서,

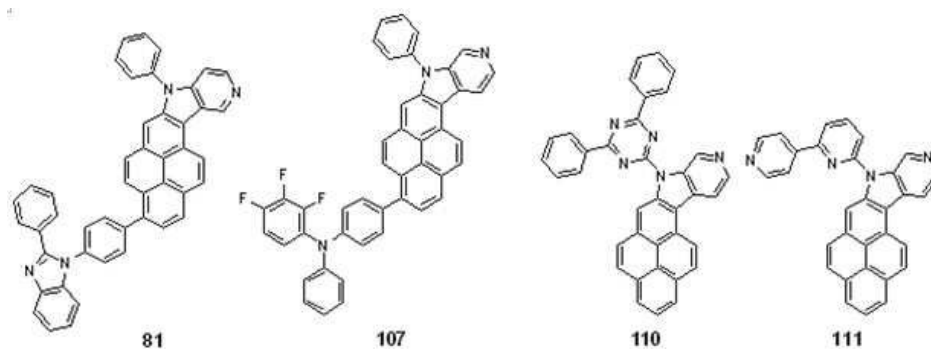
상기 a 및 b는 서로 독립적으로 0 또는 1의 정수 중 하나인 것을 특징으로 하는 하의 헤테로고리 화합물.

청구항 11

제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물이 하기 화합물 7, 24, 26, 27, 30, 33, 39, 40, 43, 52, 58, 72, 81, 107, 110 및 111로 표시되는 화합물들 중 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로고리 화합물:





청구항 12

제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 제1층을 포함하고, 상기 제1층이 제1항 내지 제5항 및 제7항 내지 제11항 중 어느 한 항의 헤테로고리 화합물을 단일 물질 또는 서로 다른 물질의 혼합물의 형태로 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 13

제12항에 있어서,

상기 제1층이 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송 기능 및 전자 주입 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 14

제12항에 있어서,

상기 제1층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 형광 호스트, 인광 호스트, 형광 도펀트 및 인광 도펀트 중 하나 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 15

제14항에 있어서,

상기 발광층에 상기 헤테로고리 화합물이 포함되어 있고, i) 상기 형광 호스트가 상기 헤테로고리 화합물이거나, ii) 상기 형광 도펀트가 상기 헤테로고리 화합물이거나, iii) 상기 형광 호스트 및 형광 도펀트가 각각 상기 헤테로고리 화합물인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 16

제12항에 있어서,

상기 제1층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 안트라센계 화합물, 아릴아민계 화합물 및 스티릴계 화합물 중 하나 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 17

제16항에 있어서,

상기 발광층에 상기 헤테로고리 화합물이 포함되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 18

제12항에 있어서,

상기 제1층이 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층에 상기 헤테로고리 화합물이 포함되는 것을 특징으로

하는 유기 발광 소자.

청구항 19

제12항에 있어서,

상기 제1층이 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층에 금속 함유 화합물이 포함되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 20

제19항에 있어서,

상기 금속 함유 화합물이 Li 착체를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 21

제12항에 있어서,

상기 제1층이 발광층 및 전자 수송층을 포함하고, 상기 발광층 및 전자 수송층에 각각 상기 헤테로고리 화합물이 포함되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 22

제12항에 있어서,

상기 제1층이 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나가 전하 생성 물질을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 23

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 평판 표시 장치에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 유기 발광 소자의 발광 재료 또는 전자 수송 재료로서 사용하기 적합한 헤테로고리 화합물, 이를 포함하는 유기 발광 소자 및 상기 유기 발광 소자를 포함하는 평판 표시 장치에 관한 것이다. 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기층을 구비한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고발광 효율 및 장수명의 특성을 가진다.

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, 애노드 상부에 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 여기에서 정공수송층, 발광층 및 전자수송층은 유기화합물로 이루어진 유기 박막층들이다. 애노드 및 캐소드 간에 전압을 인가하면, 애노드로부터 주입된 정공은 정공수송층을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자수송층을 경유하여 발광층으로 이동한다. 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exiton)을 생성하고 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

[0004] 유기 발광 소자의 발광층 재료로서는 안트라센 유도체가 잘 알려져 있고(미국 특허 제6,596,415호 및 제6,465,115호), 전자수송 재료로서는 공지의 물질인 Alq₃, TBPi, PBD, PF-6P 또는 PyPySPyPy 등이 잘 알려져 있다. 일본 특허공개공보 제96-12600호에는 페닐안트라센의 2량체 또는 3량체의 화합물을 사용한 유기 발광 소자

가 개시되어 있지만 이 화합물을 이용한 소자는 공역계를 통해 연결된 안트라센을 2개 또는 3개 포함하고 있기 때문에 에너지 갭이 작아지고 청색발광의 색순도가 떨어진다. 또한 이 화합물은 산화되기 쉬운 약점이 있어서 불순물이 생기기 쉬워 정제면에서 어려운 점이 있었다. 이러한 어려움을 개선하기 위해 안트라센기의 1,9-위치가 나프탈렌으로 치환된 안트라센 화합물이나 페닐기의 m-위치에 아릴기가 치환된 디페닐안트라센 화합물을 이용한 유기 발광 소자가 알려져 있지만 발광 효율이 낮은 특성을 가진다. 또, 일본 특허공개공보 제00-3782호에는 나프탈렌 치환된 모노안트라센 유도체를 사용한 유기발광소자가 개시되어 있지만 발광효율이 1cd/A 정도로 낮아 실용적이지 못했다. 또한 미국특허 제5972247호에는 페닐안트라센 구조를 갖는 화합물을 사용한 유기발광소자가 개시되어 있지만 이 화합물은 m-위치가 아릴기로 치환되어 있기 때문에 내열성은 우수하나 발광효율 특성이 2cd/A 정도로 낮아 만족할 만한 수준에 이르지 못하여 개선의 여지가 많다.

발명의 내용

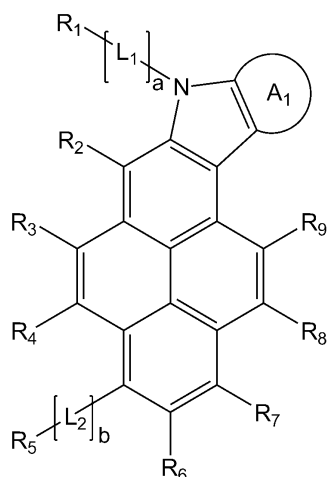
해결하려는 과제

[0005] 신규한 구조의 헤테로고리 화합물을 제공하고, 상기 헤테로고리 화합물을 포함하여 저구동 전압, 고발광 효율 및 장수명 특성을 가지는 유기 발광 소자 및 평판 표시를 제공한다.

과제의 해결 수단

[0006] 한 측면에 따라, 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물이 제공된다:

[0007] <화학식 1>



[0008]

[0009] 상기 식 중, A₁은 치환 또는 비치환된 융합된 피리딘 고리이고, R₁ 내지 R₉는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀헤테로아릴기 및 N(Q₁)(Q₂)로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q₁ 및 Q₂는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀헤테로아릴기 중 하나이고, L₁ 및 L₂는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀헤테로아릴렌기 중 하나이고, a 및 b는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수 중 하나이다.

[0010] 다른 한 측면에 따라, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 제1층을 포함하고, 상기 제1층이 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 단일 물질 또는 서로 다른

물질의 혼합물의 형태로 포함하는 유기 발광 소자가 제공된다.

[0011] 또 다른 한 측면에 따라, 소스, 드레인, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 소스 및 드레인 중 하나와 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 전기적으로 연결된 평판 표시 장치가 제공된다.

발명의 효과

[0012] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 우수한 발광 특성 및 전하 수송 능력을 가진다. 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 구동 전압이 낮고 발광 효율이 높으며 장수명 특성을 가지며, 우수한 성능의 평판 표시 장치를 제공한다.

도면의 간단한 설명

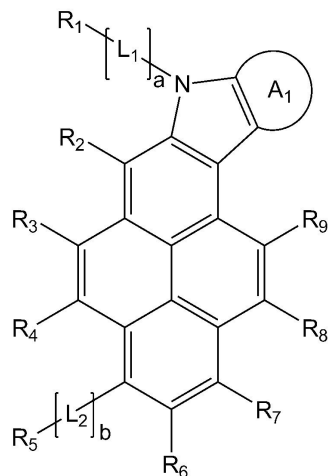
[0013] 도 1은 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 것이다.

도 2는 일 구현예에 따른 헤테로고리 화합물을 나타낸 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0014] 일 구현예에 따라, 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물이 제공된다:

[0015] <화학식 1>

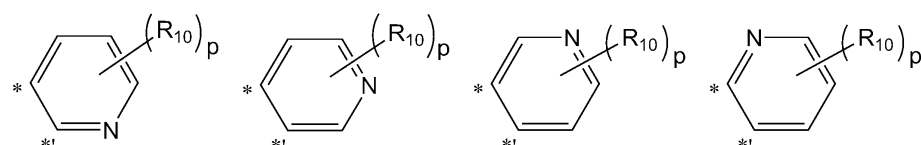


[0016]

[0017] 상기 식 중, A₁은 치환 또는 비치환된 융합된 피리딘 고리를 나타낸다. 즉, 화학식1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 치환 또는 비치환된 피리딘 화합물이 화학식 1의 백본에 융합된 구조를 가진다. 융합된 피리딘기를 구성하는 수소 원자 중 적어도 하나는 치환체로 치환되거나 또는 치환되지 않을 수 있다. 상기 헤테로고리 화합물은 화학식 1의 분자 내에 피리딘 고리를 포함하여 유리 전이 온도나 용점이 높은 특성을 가진다.

[0018] A₁은 하기 화학식 2A 내지 2D로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있으나 이에 한정되는 것이 아니다:

[0019] <화학식 2A> <화학식 2B> <화학식 2C> <화학식 2D>



[0020]

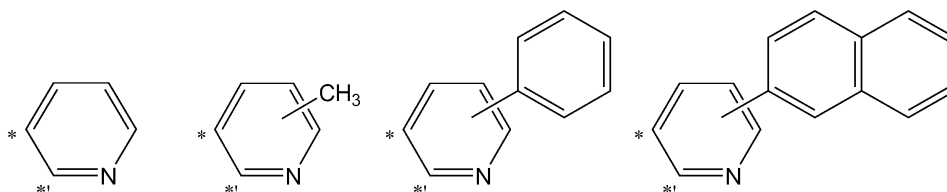
[0021] 여기서, R₁₀은 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₃₀아릴티오

기 및 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 헤테로아릴기 중 하나이고, 예를 들면 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 페닐기, 비페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵타레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스피로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 페난트리디닐기, 페난트롤리닐기, 안트릴기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리스레닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 벤조이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 이미다조피리디닐기, 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 또는 테트라졸일기 등일 수 있다.

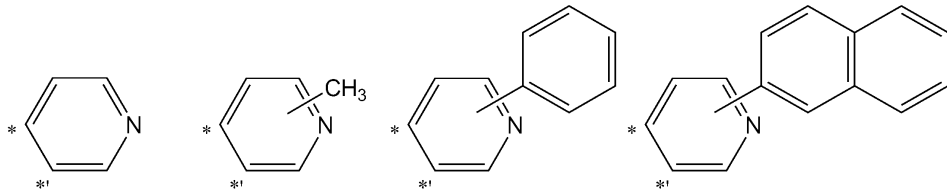
[0022] 한편, 복수 개의 R_{10} 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, p는 1 내지 3의 정수 중 하나이며, * 및 *'은 화학식 1의 백본에 융합되는 사이트를 나타낸다.

[0023] A_1 의 구체적인 예를 들면 하기 화학식 3A 내지 3P로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있다:

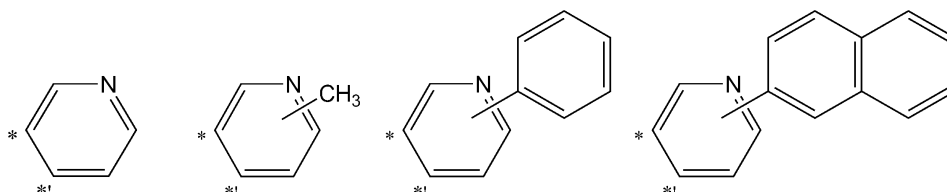
[0024] <화학식 3A> <화학식 3B> <화학식 3C> <화학식 3D>



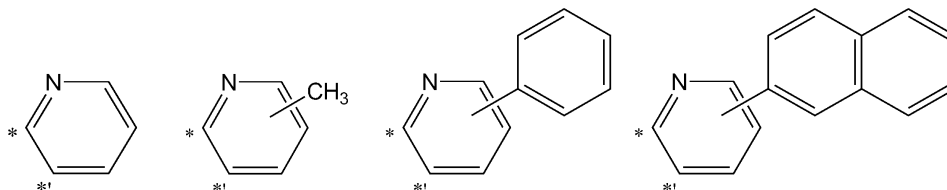
[0025] <화학식 3E> <화학식 3F> <화학식 3G> <화학식 3H>



[0026] <화학식 3I> <화학식 3J> <화학식 3K> <화학식 3L>



[0027] <화학식 3M> <화학식 3N> <화학식 3O> <화학식 3P>



[0028] 여기서, * 및 *'은 화학식 1의 백본에 융합되는 사이트를 나타낸다.

[0029] 상기 화학식 1 중, R_1 내지 R_9 는 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_6 - C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{30} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 헤테로아릴기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나이다. 여기서, Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 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_6 - C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{30} 아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 헤테로아릴기 중 하나를 나타낸다.

[0034]

R_1 내지 R_9 은, 예를 들면, 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 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 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 크리세닐기, 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 벤조이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 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 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 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 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있다. 여기서, Q_1 및 Q_2 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 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 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리디닐기 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0035]

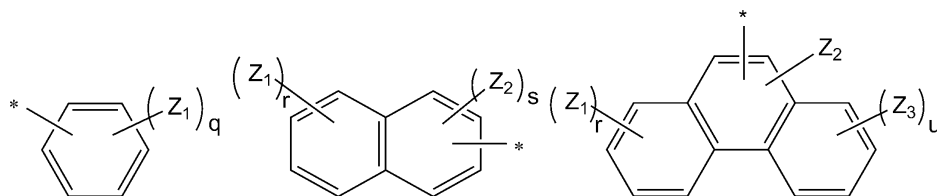
R_1 내지 R_9 의 구체적인 예로는 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 헥실기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 피리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 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 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 또는 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹을 들 수 있다. 여기서, Q_1 및

Q_2 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, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 또는 치환 또는 비치환된 피리디닐기를 나타낸다.

[0036] 상기 화학식 1 중에서 R_1 및 R_5 는 A_1 과 마찬가지로 상기 헤테로고리 화합물의 특성에 중요한 영향을 미친다. 상기 화학식 1 중, R_1 및 R_5 는 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, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 피리도인돌일기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 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 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기 및 $N(Q_1)(Q_2)$ 로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있으며, (여기서, Q_1 및 Q_2 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, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기 및 치환 또는 비치환된 피리디닐기 중 하나를 나타냄), 이때 R_2 , R_3 , R_4 , R_6 , R_7 , R_8 및 R_9 는 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 또는 치환 또는 비치환된 펜틸기일 수 있다.

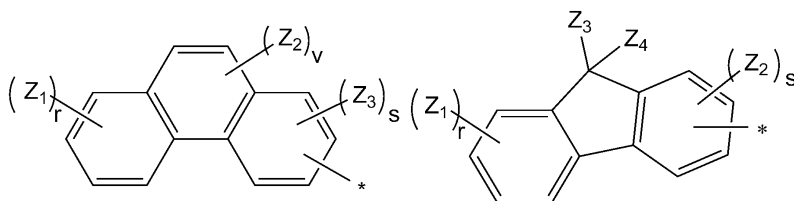
[0037] R_1 및 R_5 는 구체적인 예로는 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 이소부틸기, 및 하기 화학식 4A 내지 4V로 표시되는 그룹 중 하나를 들 수 있고, R_2 , R_3 , R_4 , R_6 , R_7 , R_8 및 R_9 의 구체적인 예로는 수소 원자를 들 수 있다:

[0038] <화학식 4A> <화학식 4B> <화학식 4C>



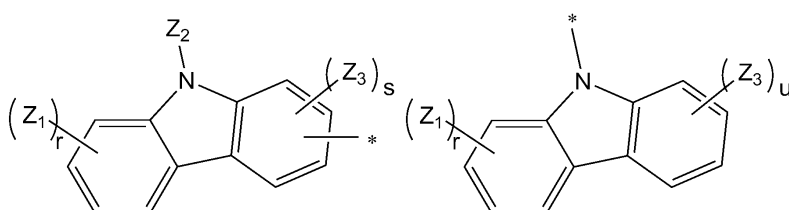
[0039]

[0040] <화학식 4D> <화학식 4E>



[0041]

[0042] <화학식 4F> <화학식 4G>

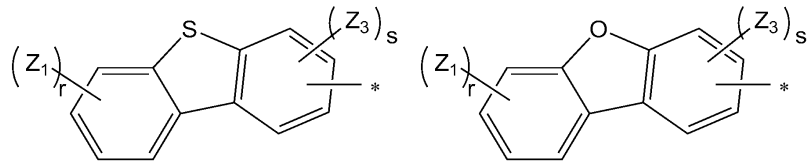


[0043]

[0044]

<화학식 4H>

<화학식 4I>

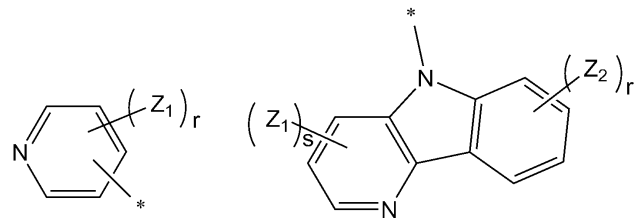


[0045]

[0046]

<화학식 4J>

<화학식 4K>

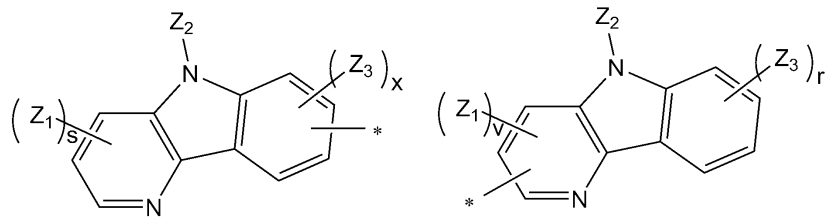


[0047]

[0048]

<화학식 4L>

<화학식 4M>

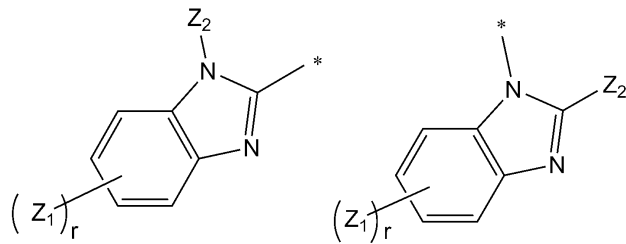


[0049]

[0050]

<화학식 4N>

<화학식 4O>



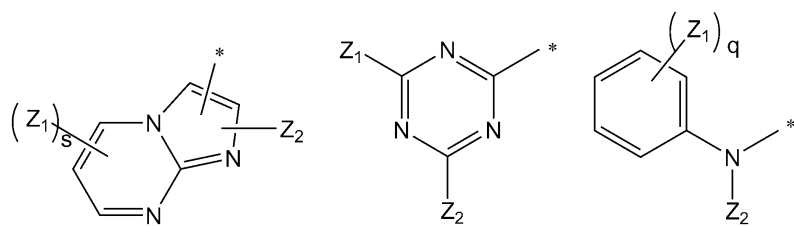
[0051]

[0052]

<화학식 4P>

<화학식 4Q>

<화학식 4R>

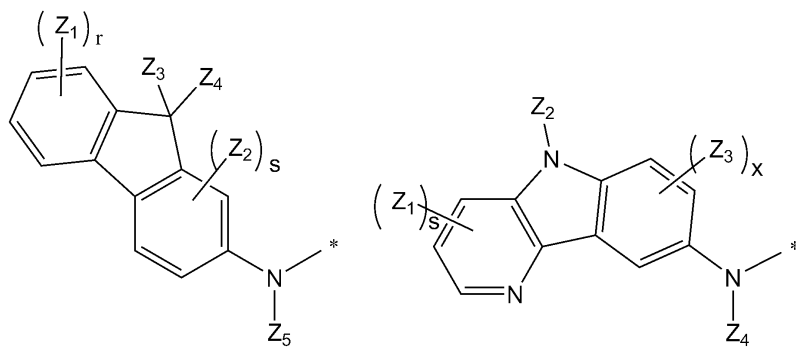


[0053]

[0054]

<화학식 4S>

<화학식 4T>

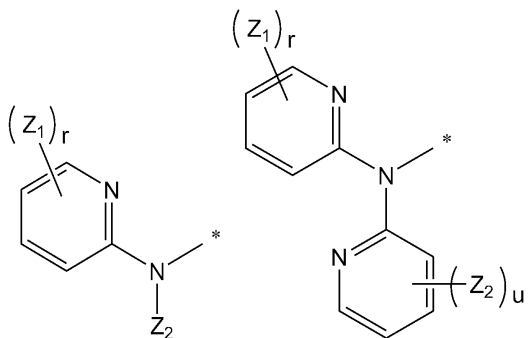


[0055]

[0056]

<화학식 4U>

<화학식 4V>



[0057]

[0058]

여기서, Z_1 , Z_2 , Z_3 , Z_4 및 Z_5 는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 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 피리디닐기 중 하나이고, 복수 개의 Z_1 , Z_2 , Z_3 , Z_4 및 Z_5 는 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있고, q 는 1 내지 5의 정수 중 하나이고 r 및 u 는 서로 독립적으로 1 내지 4의 정수 중 하나이고 s 및 x 는 서로 독립적으로 1 내지 3의 정수 중 하나이고 v 는 1 내지 2의 정수 중 하나이고, *은 결합 사이트를 나타낸다.

[0059]

상기 화학식 1 중, L_1 및 L_2 는 2가의 연결기로서 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{30} 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 헤테로아릴렌기 중 하나를 나타내고, a 및 b 는 이러한 2가의 연결기가 직렬적으로 연결된 개수를 나타내며 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수 중 하나이다.

[0060]

L_1 및 L_2 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크리세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일렌기일 수 있다.

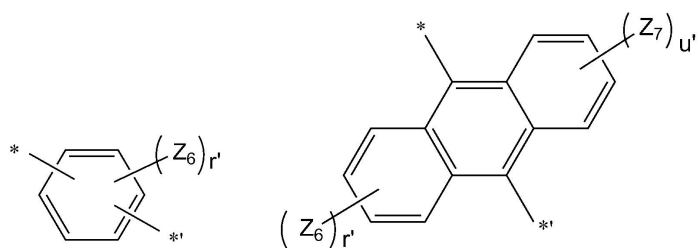
[0061]

L_1 및 L_2 의 예시로서 하기 화학식 5A 내지 5G로 표시되는 그룹 중 하나를 들 수 있으나 이에 한정되는 것이 아니다:

[0062]

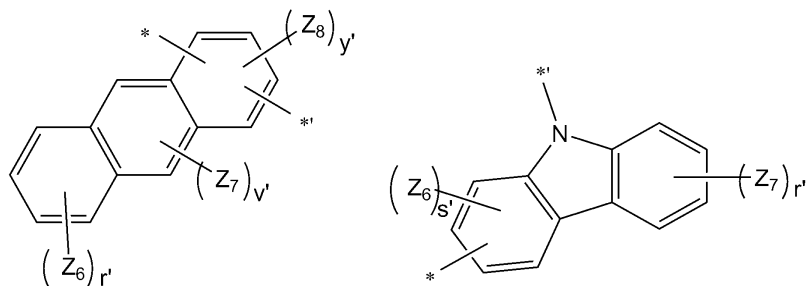
<화학식 5A>

<화학식 5B>



<화학식 5C>

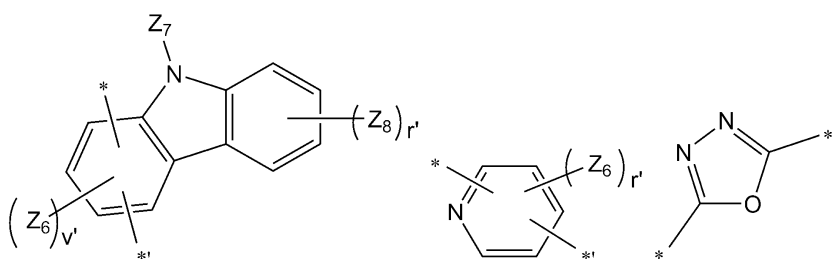
<화학식 5D>



<화학식 5E>

<화학식 5F>

<화학식 5G>



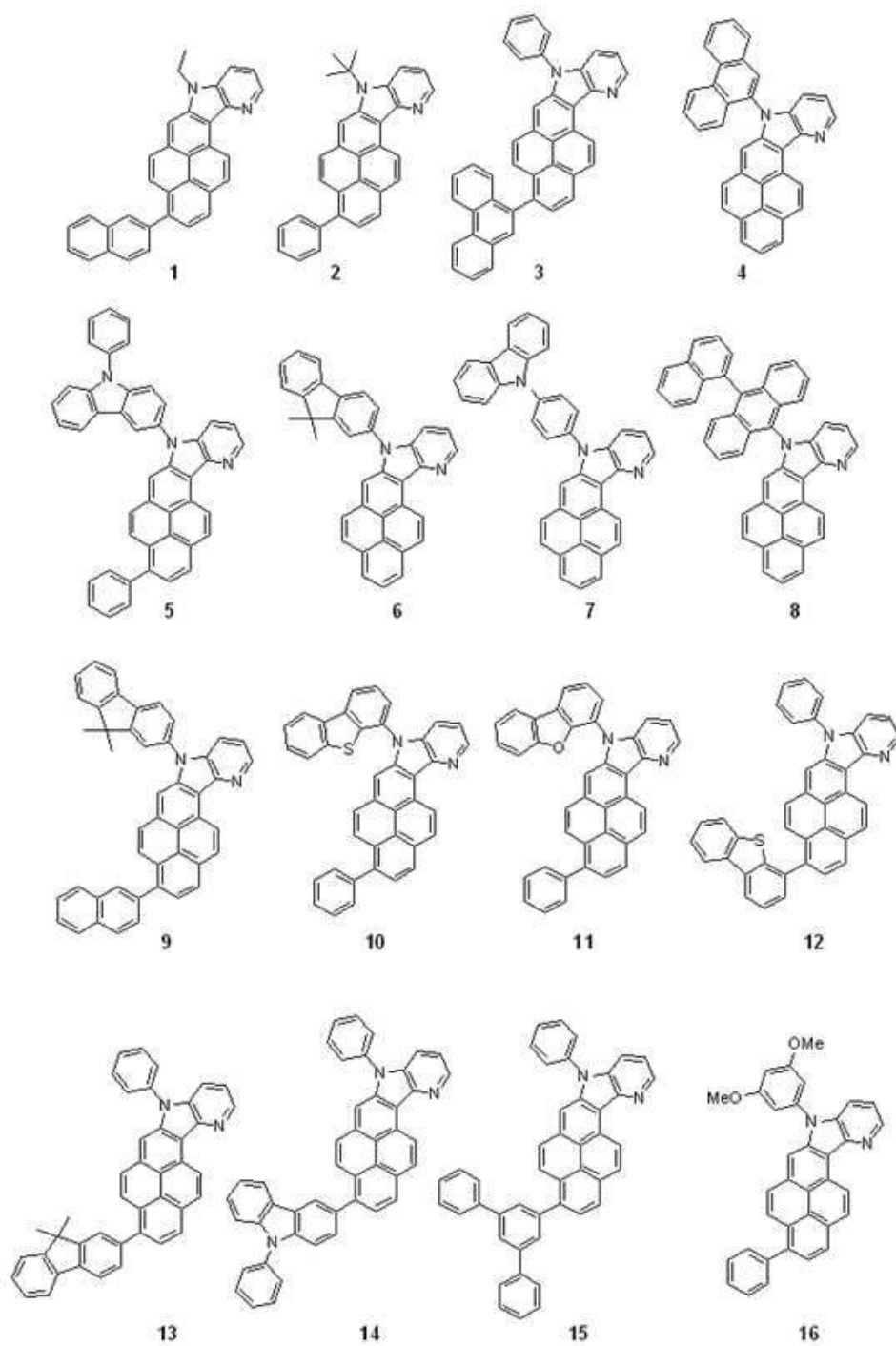
여기서, Z_6 , Z_7 및 Z_8 은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기 중 하나이고, 복수 개의 Z_6 , Z_7 및 Z_8 은 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, r' 및 u' 은 서로 독립적으로 1 내지 4의 정수 중 하나이고 s' 은 1 내지 3의 정수 중 하나이고 v' 및 y' 은 서로 독립적으로 1 내지 2의 정수 중 하나이고, * 및 *'은 각각 R_1 과 R_5 중 어느 하나와 결합하거나 또는 백본의 질소 원자와 탄소 원자 중 어느 하나와 결합하는 결합 사이트를 나타낸다.

상기 화학식 1의 구조에서 2가의 연결기 L_1 및 L_2 는 이 중 적어도 하나가 존재하지 않을 수 있으며, 또한 L_1 및 L_2 가 모두 존재하지 않을 수도 있다. L_1 및 L_2 가 모두 존재하지 않는 경우에는 화학식 1에서 a 및 b가 모두 0이 된다. 예를 들면, 상기 화학식 1에서 a 및 b는 서로 독립적으로 0 또는 1일 수 있다.

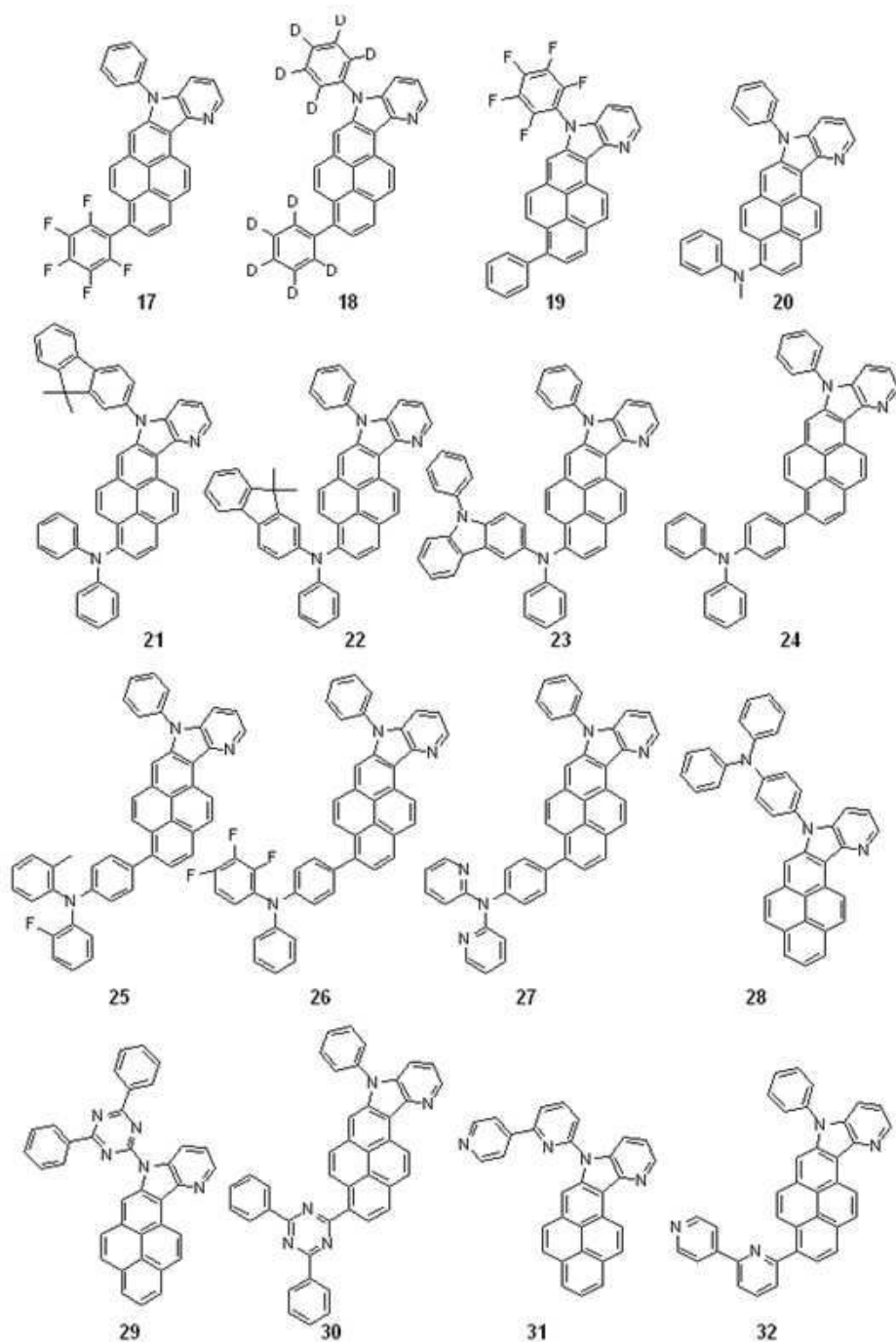
상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 분자 내에 헤테로고리가 도입되어 유리 전이 온도나 용점이 높은 특성을 가진다. 따라서 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 발광시에 유기층 중에서 발생하는 줄 열, 유기층 사이에서 발생하는 줄 열, 또는 유기층과 금속 전극 간에서 발생하는 줄 열에 대해 내열성을 가지고 고온 환경 하에서 내성이 증가된다. 또한 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 분자 내에 인돌 구조를 포함하여 유기 발광 소자의 보존 시 및 구동 시의 내구성이 높은 특성을 가진다. 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 R_1 내지 R_6 에 플루오렌기 등의 치환기가 도입되면 유기 발광 소자로 사용시 필름 상태의 분자막 상태가 개선되는 특성을 가진다. 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 신규한 헤테로고리 화합물은 유기 발광 소자에 사용시, 우수한 발광 특성 및 전하 수송 능력을 가지고 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 모든 컬러의 형광 및 인광 소자에 적합한 전자 주입 재료 또는 전자 수송 재료로 사용될 수 있으며 특히 녹색, 청색, 흰색 형광 소자의 발광 재료로 유용하게 사용될 수 있다.

상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물의 예로서 하기 화합물 1 내지 112 중 어느 하나를 들 수 있으나,

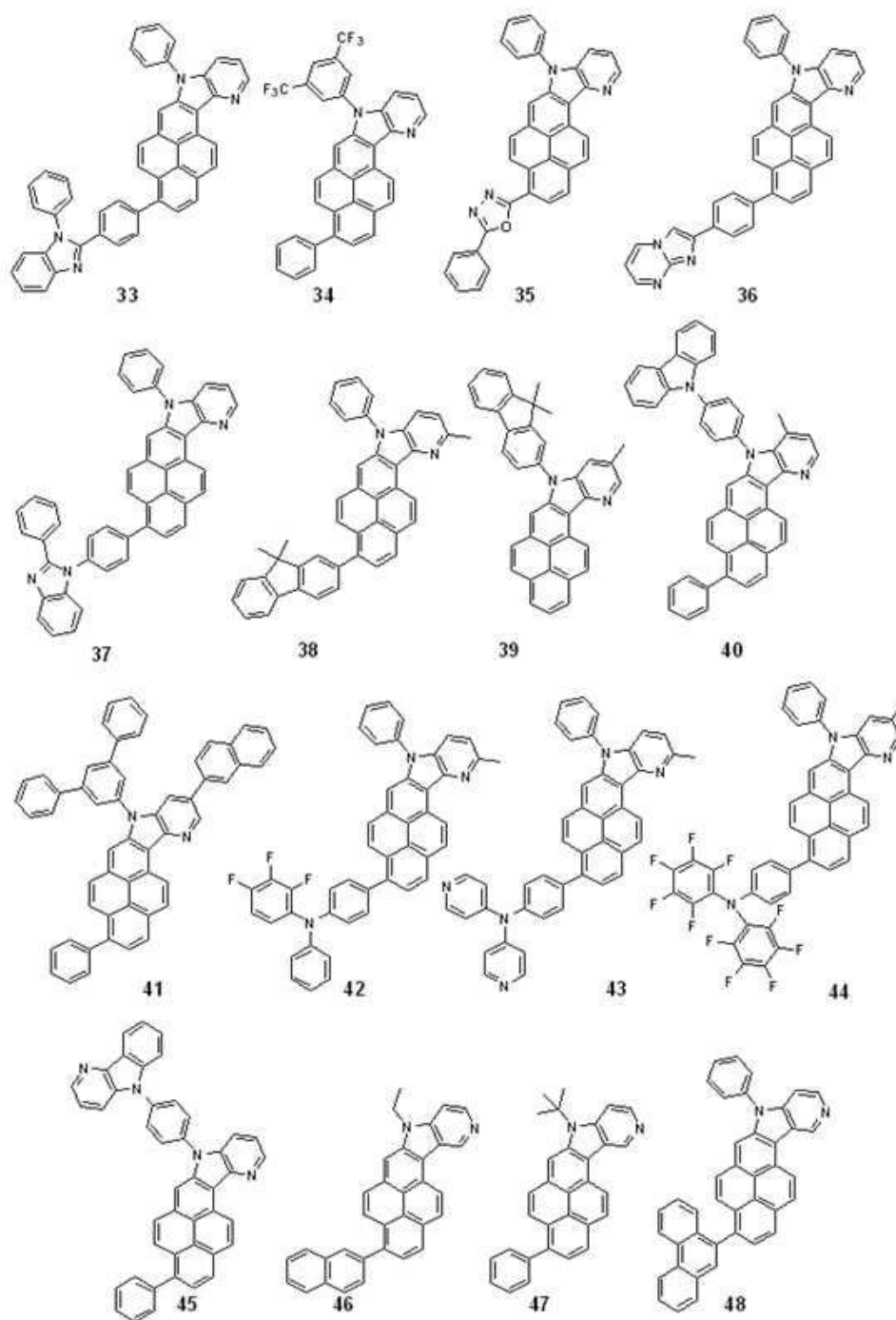
이에 한정되는 것은 아니다:



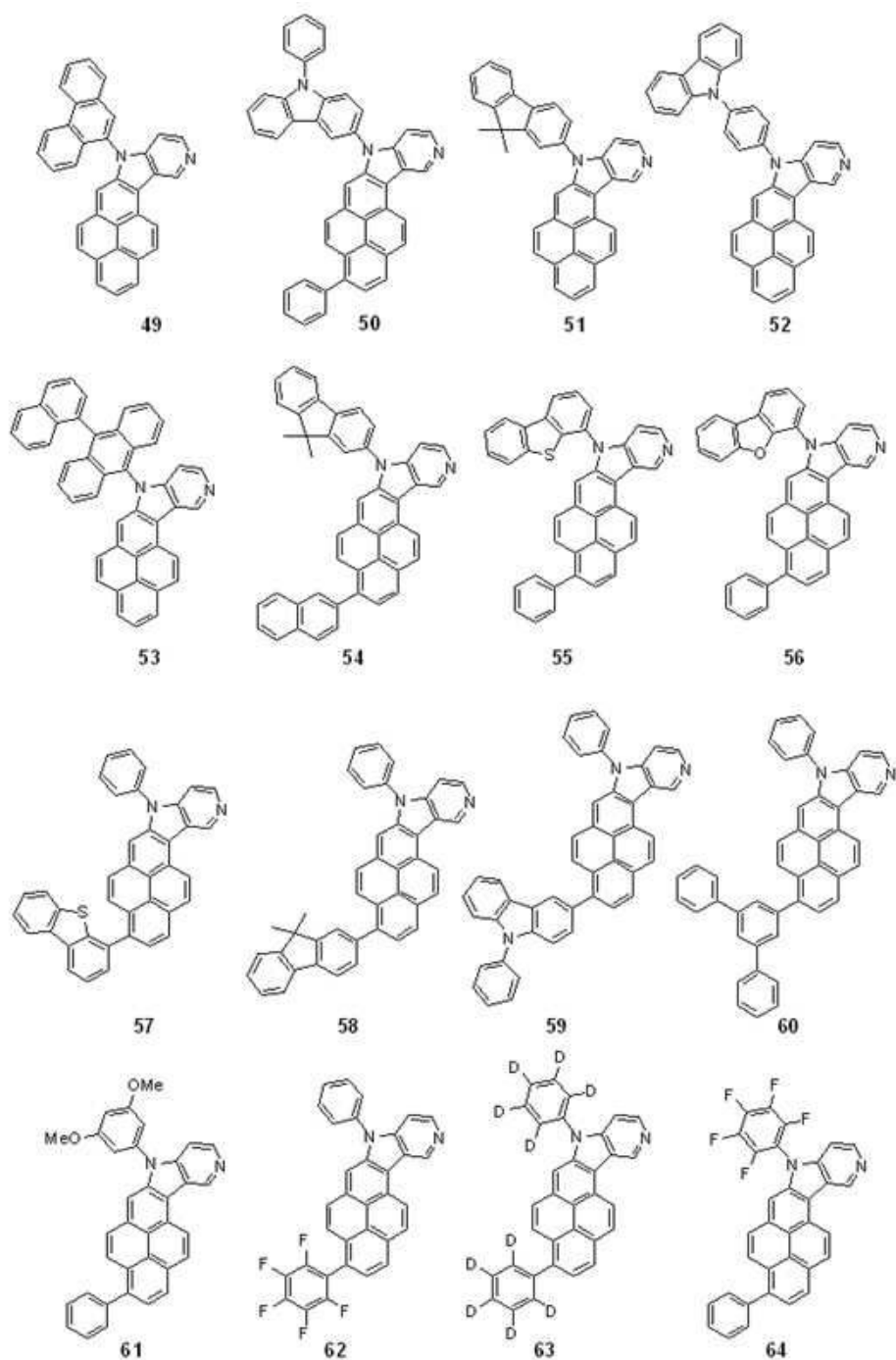
[0072]



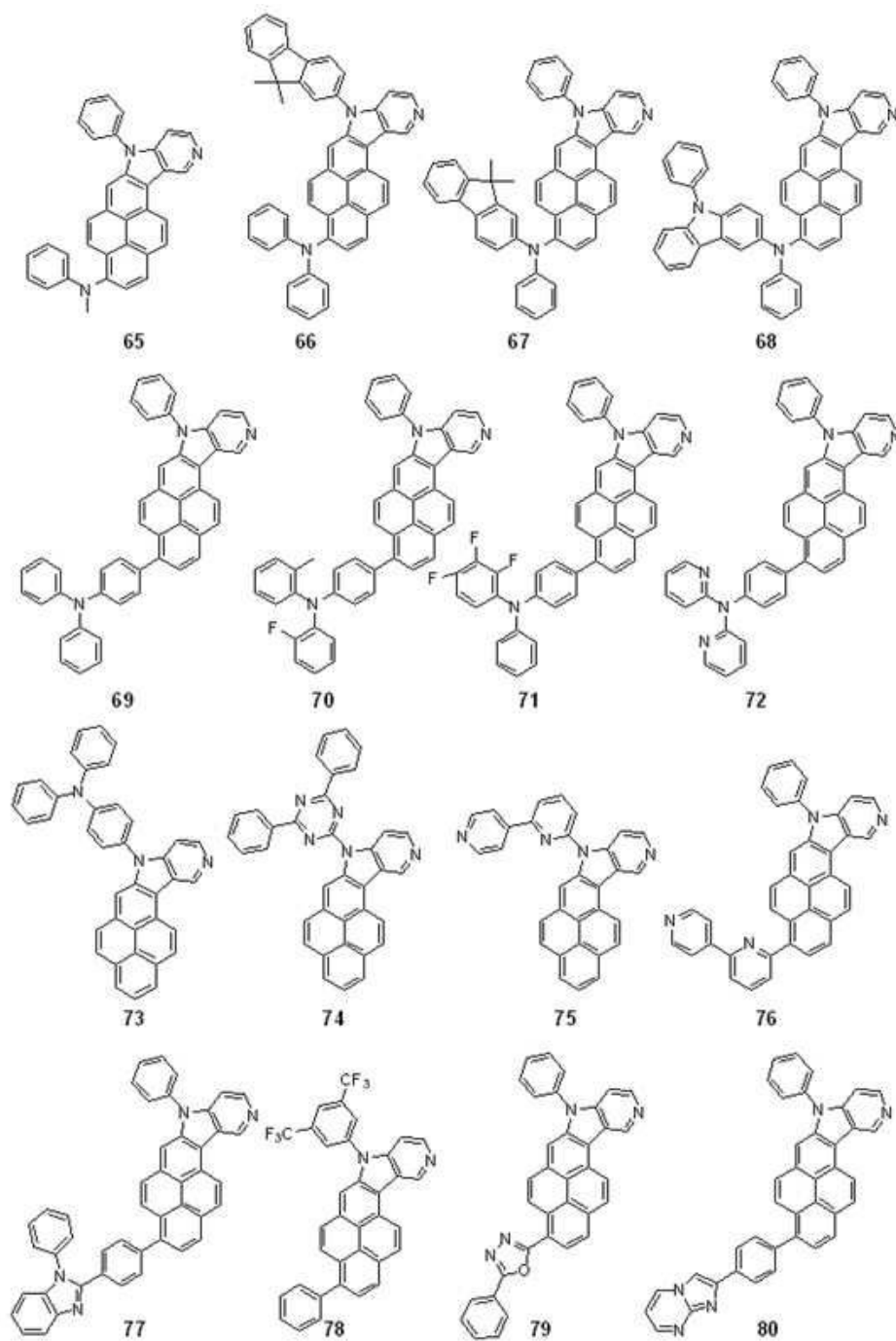
[0073]



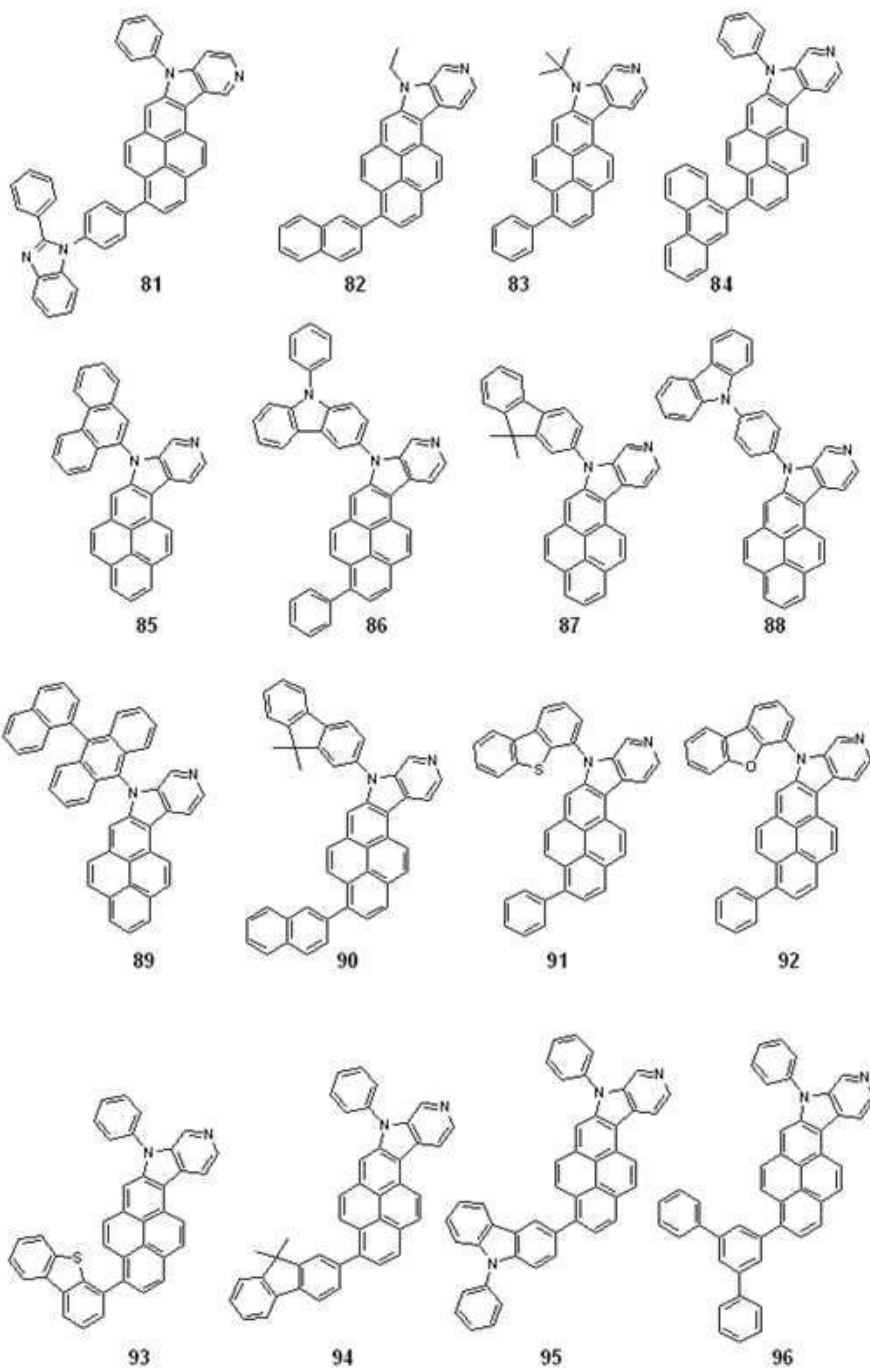
[0074]



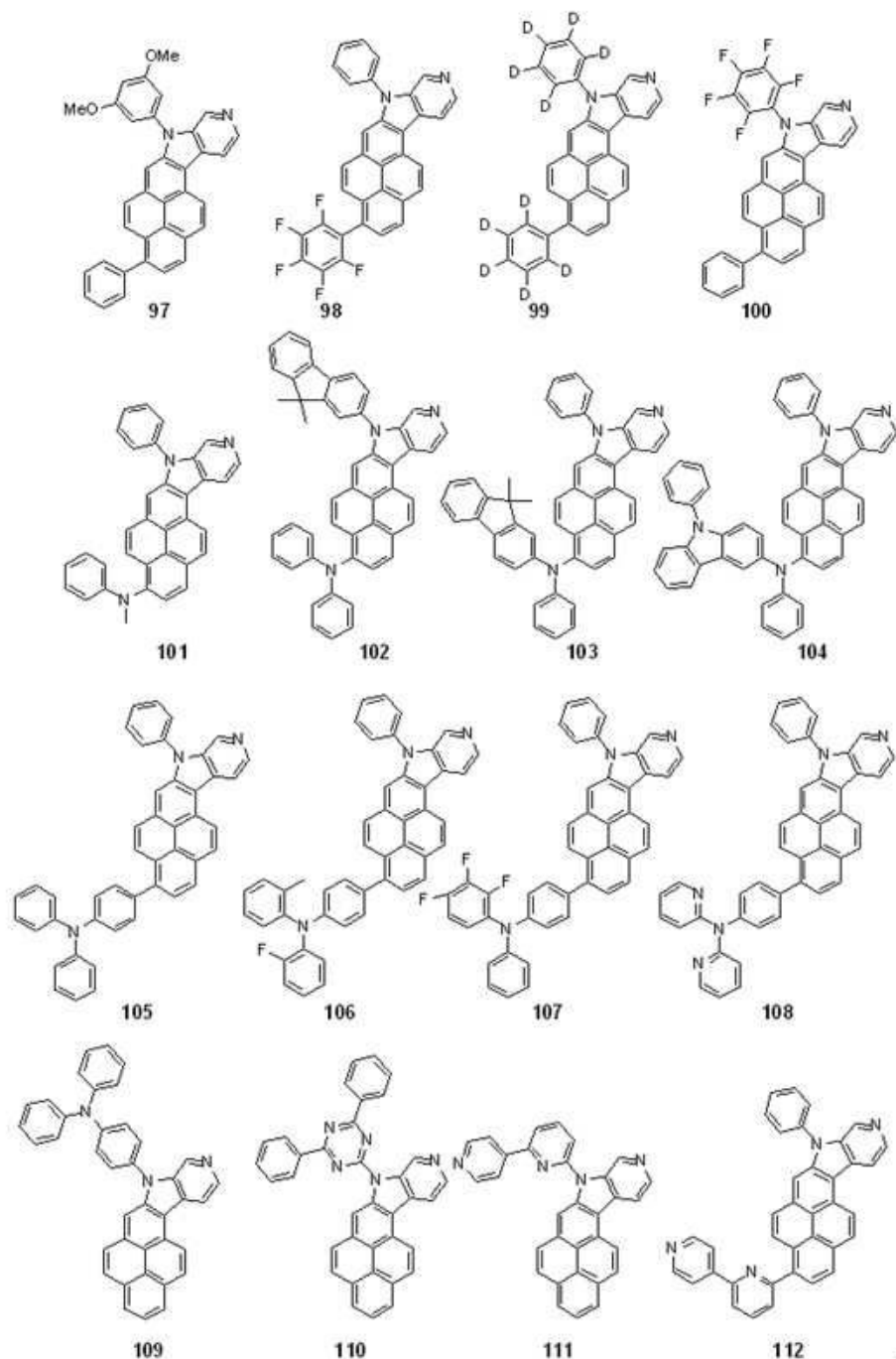
[0075]



[0076]



[0077]



[0078]

[0079]

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, 카르복실기 또는 이의 염 유도체, 술폰산기 또는 이의 염 유도체, 인산기 또는 이의 염 유도체, C₁-C₃₀알킬기, C₂-C₃₀알케닐기, C₂-C₃₀알키닐기, C₁-C₃₀알콕시기, C₃-C₃₀시클로알킬기, C₃-C₃₀시클로알케닐기, C₆-C₃₀아릴기, C₆-C₃₀아릴옥시기, C₆-C₃₀아릴티오기, C₃-C₃₀헤테로아릴기, 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-C₃₀알킬기, C₂-C₃₀알케닐기, C₂-C₃₀알키닐기, C₁-C₃₀알콕시기, C₃-C₃₀시클로알킬기, C₃-C₃₀시클로알케닐기, C₆-C₃₀아릴기, C₆-C₃₀아릴옥시기, C₆-C₃₀아릴티오기 및 C₃-C₃₀헤테로아릴기 중 하나일 수 있다.

[0080]

예를 들면, 상기 "치환된 A"란 "상기 A의 하나 이상의 수소 원자가 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시

아노기, 니트로기, 카르복실기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 페닐기, 비페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵타레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스피로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 페난트리디닐기, 페난트폴리닐기, 안트릴기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 벤조이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 이미다조피리디닐기, 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.

[0081] 본 명세서 중 비치환된 C₁-C₃₀알킬기는 알칸(alkane)에서 수소 원자 1 개가 결여된 선형 및 분지형 구조의 포화 탄화수소기를 의미한다. 비치환된 C₁-C₃₀알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있다. 치환된 C₁-C₃₀알킬기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0082] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기는 상기 비치환된 C₂-C₃₀알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 말단기를 의미한다. 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기의 예로는 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 헥세닐, 헵테닐, 옥테닐, 프로파디에닐(propadienyl), 이소프레닐(isoprenyl), 알릴(allyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C₂-C₃₀알케닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0083] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기는 상기 비치환된 C₂-C₆₀알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 말단기를 의미한다. 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기의 예로는 아세틸레닐(acetylenyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C₂-C₃₀알키닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0084] 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.

[0085] 본 명세서 중 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기는 고리형 포화 탄화수소기를 가리키는 것으로서, 이의 구체예로는 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로옥틸 등을 들 수 있다. 치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

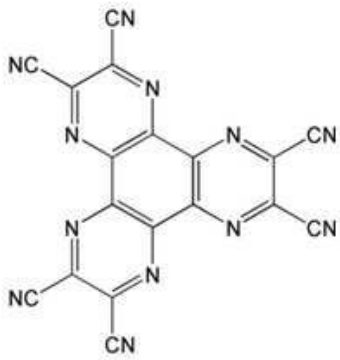
[0086] 본 명세서 중 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기는 하나 이상의 탄소 이중결합을 가지면서 방향족 고리가 아닌 고리형 불포화 탄화수소기를 의미한다. 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기의 예로는 시클로프로페닐(cyclopropenyl), 시클로부테닐(cyclobutenyl), 시클로펜테닐, 시클로헥세닐, 시클로헵테닐, 1,3-시클로헥사디에닐기, 1,4-시클로헥사디에닐기, 2,4-시클로헵타디에닐기, 1,5-히클로옥타디에닐기 등을 들 수 있다. 치환된 C₃-C₆₀시클로알케닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0087] 본 명세서 중 비치환된 C₆-C₃₀아릴기는 탄소 원자수 6 내지 30개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭(monocyclic) 또는 폴리시클릭(polycyclic) 그룹 등일 수 있다. 폴리시클릭 그룹인 경우, 이에 포함된 2 이상의 고리는 서로 융합될 수 있다. 비치환된 C₆-C₃₀아릴기의 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 C₆-C₃₀아릴기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

- [0088] 본 명세서 중 비치환된 C_6-C_{30} 아릴옥시기는 상기 C_6-C_{30} 아릴기의 탄소 원자가 산소 연결기(-O-)를 통하여 부착된 1가 그룹을 의미한다. 치환된 C_6-C_{30} 아릴옥시기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0089] 본 명세서 중 비치환된 C_6-C_{30} 아릴티오기는 상기 C_6-C_{30} 아릴기의 탄소 원자가 황 연결기(-S-)를 통하여 부착된 1가 그룹을 의미한다. 비치환된 C_6-C_{30} 아릴티오기의 예로는 페닐티오, 나프틸티오, 인다닐티오 및 인데닐티오 등을 들 수 있다. 치환된 C_6-C_{30} 아릴티오기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0090] 본 명세서 중 비치환된 C_3-C_{30} 헤테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하는 고리를 하나 이상 포함하는 탄소 원자수 6 내지 30개의 1가 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹 동일 수 있다. 폴리시클릭 그룹일 경우, 이에 포함된 2 이상의 고리는 서로 융합될 수 있다. 비치환된 C_3-C_{30} 헤테로아릴기의 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(quinoxaliny), 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 C_3-C_{30} 헤테로아릴기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0091] 본 명세서 중 비치환된 C_1-C_{30} 알킬렌기는 알칸에서 수소 원자 2 개가 결여된 선형 및 분지형 구조의 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 비치환된 C_1-C_{30} 알킬렌기의 예는 상기 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기의 예를 참조하여 이해될 수 있다. 치환된 C_1-C_{30} 알킬렌기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0092] 본 명세서 중 비치환된 C_6-C_{30} 아릴렌기는 탄소 원자수 6 내지 30개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다. 비치환된 C_6-C_{30} 아릴렌기의 구체예는 상기 비치환된 C_6-C_{30} 아릴기의 예를 참조하여 이해될 수 있다. 치환된 C_6-C_{30} 아릴렌기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0093] 본 명세서 중 비치환된 C_3-C_{30} 헤테로아릴렌기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하는 고리를 하나 이상 포함하는 탄소 원자수 3 내지 30개의 2가 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹 동일 수 있다. 비치환된 C_3-C_{30} 헤테로아릴렌기의 구체예는 상기 비치환된 C_3-C_{30} 헤테로아릴기의 예를 참조하여 이해될 수 있다. 치환된 C_3-C_{30} 헤테로아릴렌기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0094] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 헤테로고리 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자에게 용이하게 인식될 수 있다.
- [0095] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 유기 발광 소자에 사용될 수 있다.
- [0096] 일 구현예에 따라, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 적어도 제1층을 포함하고, 상기 제1층이 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 단일 물질 또는 서로 다른 물질의 혼합물의 형태로 포함하는 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0097] 상기 제1층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송 기능 및 전자 주입 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나일 수 있다.
- [0098] 예를 들면, 상기 유기 발광 소자는, 제1전극/정공 주입층/정공 수송층/상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함한 제1층(즉, 발광층의 역할을 하는 경우임)/전자 수송층/전자 주입층/제2전극의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0099] 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 포함되는 층들은 예를 들면 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 하나 이상의 층일 수 있고, 이러한 층들 중 하나 이상은 증착법 또는 습식 공정에 의하여 형성될 수 있다.
- [0100] 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.
- [0101] 예를 들면, 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.
- [0102] 한편, 베이스 필름에 상술한 바와 같은 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.
- [0103] 상기 제1층은 발광층일 수 있다. 상기 제1층이 발광층일 경우, 상기 발광층은 형광 호스트, 인광 호스트, 형광 도펀트 및 인광 도펀트 중 하나 이상을 포함할 수 있다.
- [0104] 예를 들면, 상기 제1층은 발광층이고, 상기 제1층에 포함된 화학식 1의 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 화학식 1의 헤테로고리 화합물과 형광 도펀트를 포함한 발광층이거나, 인광 호스트의 역할을 하는 화학식 1의 헤테로고리 화합물과 인광 도펀트를 포함한 발광층일 수 있다. 상기 발광층에 상기 헤테로고리 화합물이 포함되어 있고, i) 상기 형광 호스트가 상기 헤테로고리 화합물이거나, ii) 상기 형광 도펀트가 상기 헤테로고리 화합물이거나, iii) 상기 형광 호스트 및 형광 도펀트가 각각 상기 헤테로고리 화합물일 수 있다.
- [0105] 한편, 상기 제1층은 발광층이고, 상기 발광층은 안트라센계 화합물, 아릴아민계 화합물 및 스티릴계 화합물 중 하나 이상을 포함할 수 있다.
- [0106] 상기 발광층에는 상기 헤테로고리 화합물이 포함될 수 있다.
- [0107] 상기 제1층이 전자 수송층이고, 상기 전자 수송층에 상기 헤테로고리 화합물이 포함될 수 있다.
- [0108] 상기 제1층이 발광층 및 전자 수송층을 포함하고, 상기 발광층 및 전자 수송층에 각각 상기 헤테로고리 화합물이 포함될 수 있다.
- [0109] 예를 들면, 상기 유기 발광 소자 중 제1층은 전자 수송층이고, 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 발광층이 추가로 개재되며, 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.
- [0110] 상기 제1층이 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층에 금속 함유 화합물이 포함될 수 있다. 금속 함유 화합물은 상술한 바와 같다.
- [0111] 상기 제1층이 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나가 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 막의 도전성 등을 향상시킨다.
- [0112] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는 테트라시아노퀴노디메탄(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라시아노-1,4-벤조퀴노디메탄(F4TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 300 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0113] <화합물 300>



[0114]

[0115] 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 분포되어 있을 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.

[0116] 도 1은 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.

[0117] 유기 발광 소자(10)는 기판(11), 제1전극(12), 정공 주입층(13), 정공 수송층(14), 발광층(15), 전자 수송층(16), 전자 주입층(17) 및 제2전극(18)을 차례로 구비한다.

[0118] 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.

[0119] 상기 제1전극(12)은 기판 상부에 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(12)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록 제1전극용 물질은 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(12)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(12)을 반사형 전극으로 형성할 수도 있다. 상기 제1전극(12)은 서로 다른 2종의 물질을 포함할 수 있다. 예를 들면, 상기 제1전극(12)을 서로 다른 2종의 물질을 포함한 2층 구조로 형성할 수 있는 등 다양한 변형예가 가능하다.

[0120] 상기 제1전극(12) 상부로는 정공 주입층(13)이 구비되어 있다.

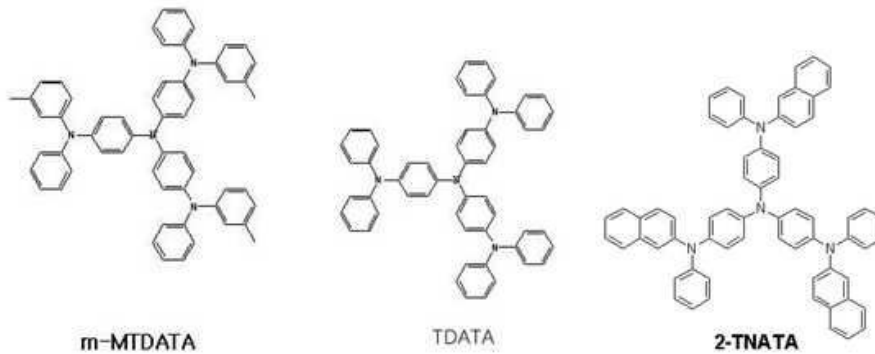
[0121] 정공 주입층(13)은 상기 제1전극(13) 상부에 상술한 바와 같은 진공증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

[0122] 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.

[0123] 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.

[0124] 정공 주입층 물질로는 공지된 정공 주입 재료를 사용할 수 있는데, 예를 들면, 구리프탈로시아닌 등과 같은 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA(하기 화학식 참조), TDATA(하기 화학식 참조), 2-TNATA(하기 화학식 참조), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠설폰산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설폰네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonicacid:폴리아닐린/캄페르설폰산) 또는 Pani/PSS

(Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린)/폴리(4-스티렌술포네이트))등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.



[0125]

[0126]

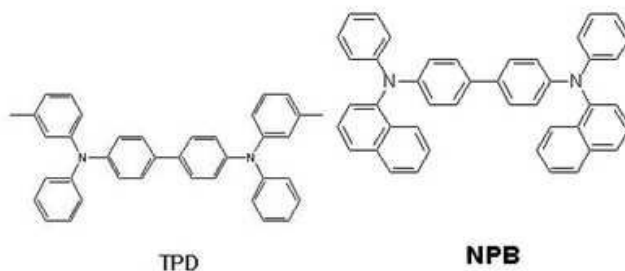
상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스러운 정도의 정공 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0127]

다음으로 상기 정공 주입층(13) 상부에 진공증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등을 이용하여 정공 수송층(14)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의하여 정공 수송층(14)을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0128]

정공 수송층 물질로는 공지된 정공 수송 재료를 이용할 수 있는데, 예를 들면, TPD(하기 화학식 참조), NPB(하기 화학식 참조) 등을 이용할 수 있다.



[0129]

[0130]

상기 정공 수송층(14)의 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.

[0131]

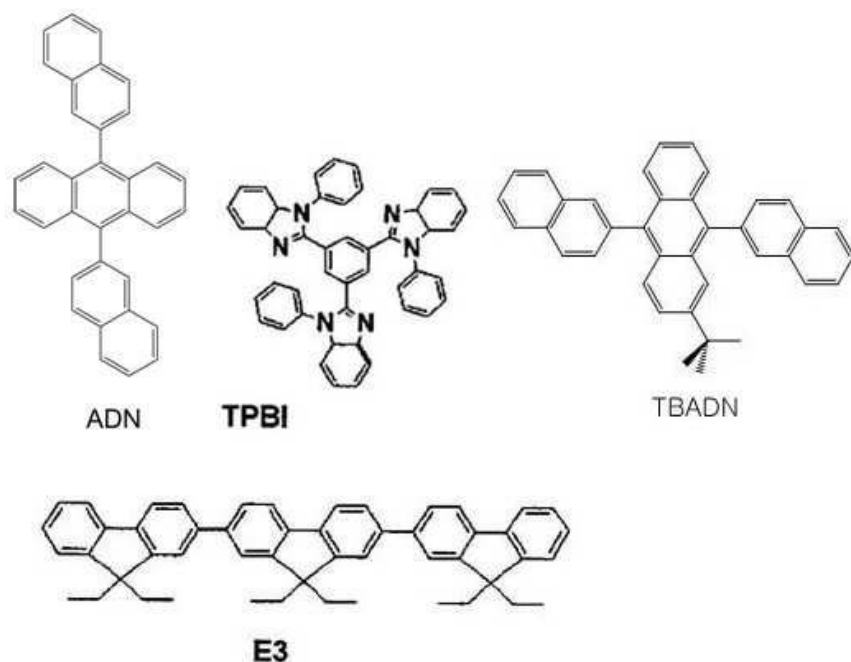
상기 정공 수송층 상부에 진공증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(15)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 발광층(15)을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0132]

상기 발광층(15)은 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함한 제1층일 수 있다. 상기 발광층(15)은 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 외에, 공지의 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도펀트 또는 형광 도펀트를 더 포함할 수 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도펀트 또는 형광 도펀트로서의 역할을 할 수 있다.

[0133]

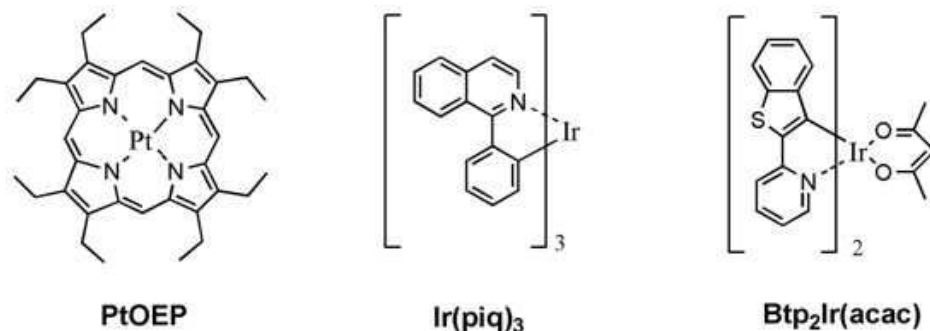
공지의 호스트로서는, 예를 들면 CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), ADN(9, 10-디-나프탈렌-2-일-안트라센, 하기 화학식 참조), TPBI(하기 화학식 참조), TBADN(하기 화학식 참조), E3(하기 화학식 참조) 또는 DSA(디스티릴아릴렌)등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0134]

[0135]

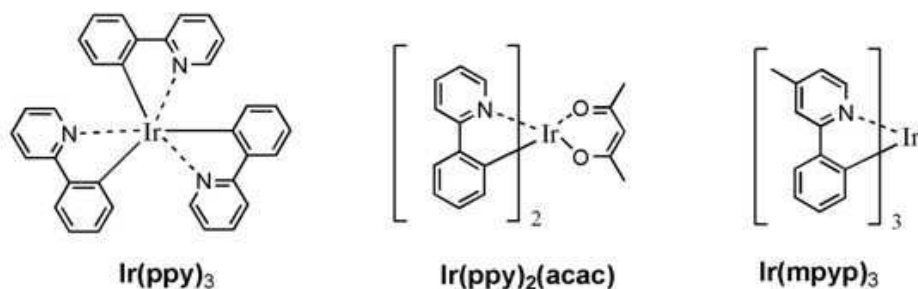
한편, 적색 도펀트로서 PtOEP(하기 화학식 참조), Ir(piq)₃(하기 화학식 참조) 또는 Btp₂Ir(acac)(하기 화학식 참조) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0136]

[0137]

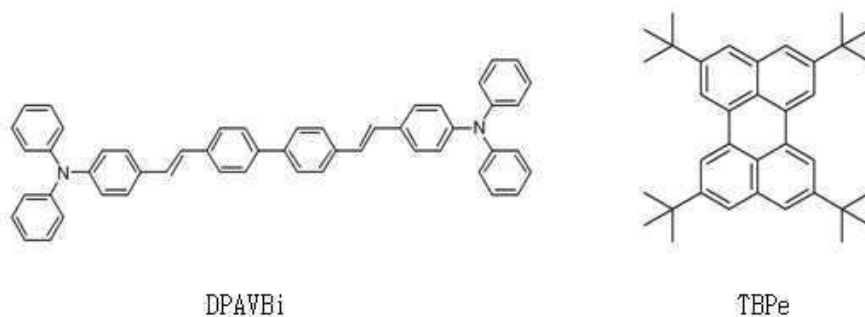
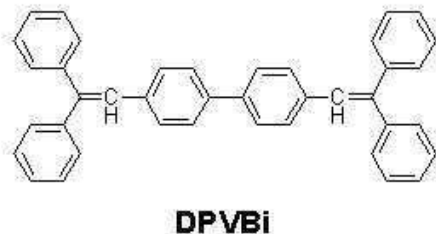
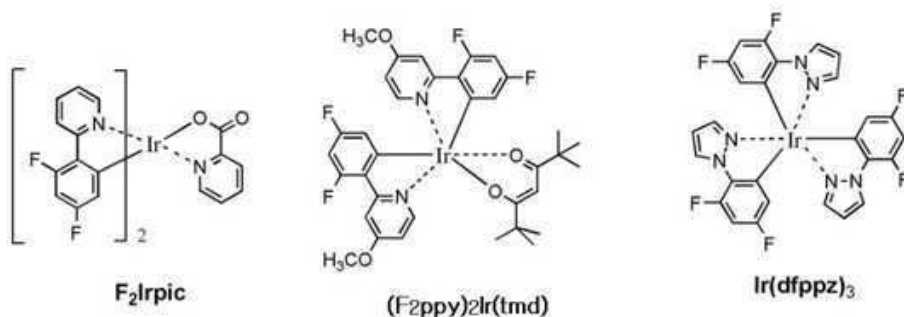
또한, 녹색 도펀트로서, Ir(ppy)₃ (ppy = 페닐피리딘, 하기 화학식 참조), Ir(ppy)₂(acac)(하기 화학식 참조) 또는 Ir(mpyp)₃(하기 화학식 참조) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0138]

[0139]

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



[0140]

[0141]

상기 발광층(15)이 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.

[0142]

상기 발광층(15)의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층(15)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

[0143]

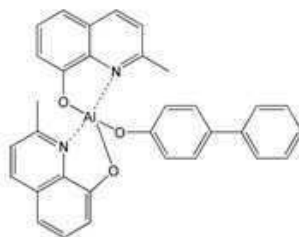
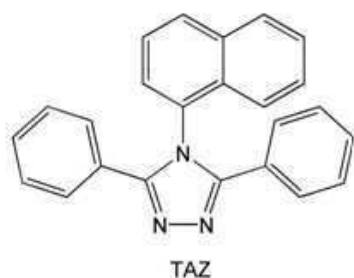
발광층(15)에 인광 도펀트가 포함될 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층(16)으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 정공 수송층(16)과 발광층(15) 사이에 진공증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등과 같은 방법을 이용하여 정공 저지층(HBL, 도 1에는 미도시함)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 정공 저지층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 될 수 있다. 공지의 정공 저지 재료도 사용할 수 있는데, 이의 예로는, 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체 등을 들 수 있다.

[0144]

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.

[0145]

다음으로 전자 수송층(16)을 진공증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 상기 전자 수송층 재료로는 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 사용할 수 있다. 또는, 공지된 전자 수송 재료를 사용할 수 있는데, 예를 들면 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq_3), TAZ(하기 화학식 참조), BALq (하기 화학식 참조), 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: Bebq_2) 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



BA1q

[0146]

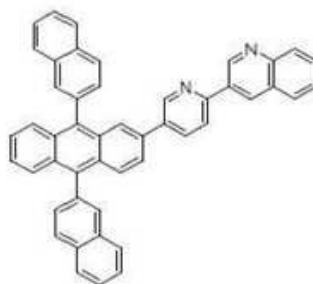
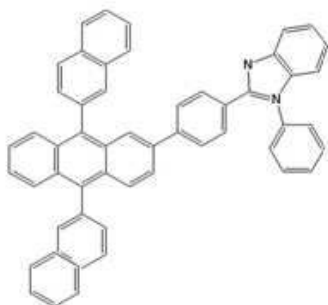
[0147]

상기 전자 수송층은 하기와 같은 전자 수송성 유기 화합물 및 금속 함유 화합물을 포함할 수 있다. 전자 수송성 유기 화합물의 비제한적인 예로는, ADN(9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센); 및 하기 화합물 201 및 202와 같은 안트라센계 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0148]

<화합물 201>

<화합물 202>



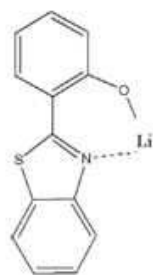
[0149]

[0150]

상기 금속 함유 화합물은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체의 비제한적인 예로는, 리튬 퀴놀레이트(LiQ) 또는 하기 화합물 203 등을 들 수 있다:

[0151]

<화합물 203>



[0152]

[0153]

전자 수송층(16)의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층(16)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다. 진공증착법 및 스퍼터링법에 의해 전자 수송층(16)을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0154]

전자 수송층(16) 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(17)이 적층될 수 있다. 상기 전자 주입층(17) 형성 재료로는 LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층(17)의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0155]

상기 전자 주입층(17)의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층(17)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

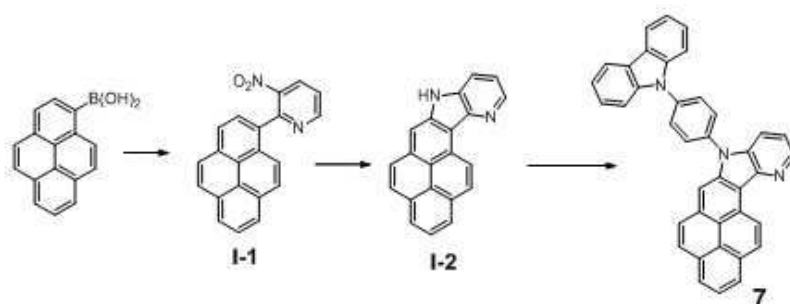
[0156] 상기 전자 주입층(17) 상부로는 투과형 전극인 제2전극(18)이 구비되어 있다. 상기 제2전극(18)은 전자 주입 전극인 캐소드(Cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극 형성용 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 박막으로 형성하여 투과형 전극을 얻을 수 있다. 한편, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용한 투과형 전극을 형성할 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0157] 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.

[0158] 이하에서, 본 발명을 화합물 7, 24, 26, 27, 30, 33, 39, 40, 43, 52, 58, 72, 81, 107, 110 및 111의 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.

[0159] 실시예

[0160] 화합물 7의 합성



[0161]

[0162] 합성예 1. 중간체 I-1의 합성

[0163] 파이렌보론산 4.93 g (20.0 mmol), 2-브로모-3-니트로피리딘 4.05 g (20.0 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.15 g (1.0 mmol) 그리고 K₂CO₃ 8.29g (60.0 mmol) 을 THF/H₂O (2/1) 혼합용액 60ml 에 녹인 후, 70 °C에서 5시간 동안 교반하였다. 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 I-1 5.38g (수율 83 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS 와 NMR을 통해 확인하였다. C₂₁H₁₂N₂O₂ : M+ 324.1

[0164] ¹H NMR (CDCl₃, 400MHz) δ (ppm) 8.61 (dd, 1H), 8.33 (dd, 1H), 8.25 (d, 1H), 8.22 (s, 1H), 8.20 (d, 1H), 8.11-7.97 (m, 6H), 7.34 (dd, 1H)

[0165] 합성예 2. 중간체 I-2의 합성

[0166] 중간체 I-1 3.24 g (10.0 mmol)과 트리페닐포스핀 (PPh₃) 5.77 g (22 mmol) 을 1,2-디클로로벤젠 30 ml에 녹인 후 170 °C 에서 12 시간 동안 교반하였다. 반응액을 상온으로 식힌 후, 용매를 진공하에서 제거하고 물 50 mL 와 디클로로메탄 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-2 2.31 g (수율 79 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS 와 NMR을 통해 확인하였다. C₂₁H₁₂N₂ : M+ 292.1

[0167] ¹H NMR (CDCl₃, 400MHz) δ (ppm) 11.38 (s, 1H), 9.14 (d, 1H), 8.70 (d, 1H), 8.47-8.44 (m, 2H), 8.17 (d, 1H), 8.10 (s, 1H), 8.00 (dt, 2H), 7.90-7.86 (m, 2H), 7.42-7.38 (m, 1H)

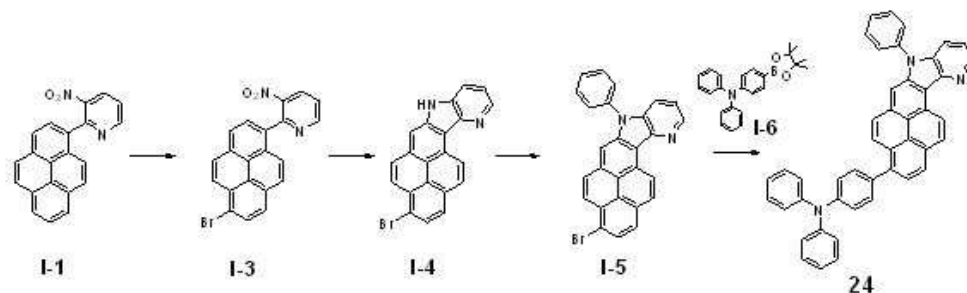
[0168] 합성예 3. 화합물 7의 합성

[0169] 중간체 I-2 2.92 g (10.0 mmol), 9-(4-브로모페닐)카바졸 4.83 g (15.0 mmol), CuI 0.19 g(1.0 mmol), 18-

Crown-6 0.05 g (0.2 mmol) 그리고 K_2CO_3 4.15 g (30.0 mmol) 을 DMPU (1,3-Dimethyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidinone) 30 ml 에 녹인 후 170 °C 에서 12 시간 동안 교반하였다. 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디클로로메탄 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 7 4.81 g (수율 90 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS 와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{39}H_{23}N_3$: M+ 533.2

[0170] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 9.13 (d, 1H), 8.65 (d, 1H), 8.52-8.49 (m, 2H), 8.21 (s, 1H), 8.14-8.05 (m, 4H), 7.98 (d, 1H), 7.90-7.84 (m, 5H), 7.69 (dd, 1H), 7.37-7.33 (m, 4H), 7.26-7.20 (m, 2H), 7.04 (dd, 1H)

[0171] **화합물 24의 합성**



[0172]

[0173] **합성예 4. 중간체 I-3의 합성**

[0174] 중간체 I-1 4.86 g (15.0 mmol) 을 디클로로메탄 100 ml 에 녹인 후, 0 °C 에서 브롬 (Br_2) 1.75 ml (15.0 mmol) 을 천천히 적가한다. 반응액을 상온에서 12 시간 동안 교반하였다. 반응액에 물 60 mL 와 티오황산나트륨 20 % 수용액 30 ml 를 가하고 디클로로메탄 80 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하고 디클로로메탄/헥산 용액으로 재결정하여 중간체 I-3 3.39 g (수율 59 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS 와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{21}H_{11}BrN_2O_2$: M+ 402.0

[0175] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.84 (d, 1H), 8.61 (dd, 1H), 8.35-8.31 (m, 2H), 8.27-8.22 (m, 3H), 8.10 (d, 1H), 7.95 (d, 1H), 7.90 (d, 1H), 7.34 (dd, 1H)

[0176] **합성예 5. 중간체 I-4의 합성**

[0177] 중간체 I-2의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-3과 트리페닐포스핀을 사용하여 중간체 I-4 2.78 g (수율 75 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{21}H_{11}BrN_2$: M+ 370.0

[0178] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 11.10 (s, 1H), 8.84 (d, 1H), 8.75 (d, 1H), 8.51-8.40 (m, 2H), 8.37 (d, 1H), 8.15 (s, 1H), 8.06 (d, 1H), 7.98 (d, 1H), 7.88 (d, 1H), 7.41-7.38 (m, 1H)

[0179] **합성예 6. 중간체 I-5의 합성**

[0180] 화합물 7의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-4와 요오도벤젠을 사용하여 중간체 I-5 4.11 g (수율 92 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{27}H_{15}BrN_2$: M+ 446.0

[0181] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.84 (d, 1H), 8.73 (d, 1H), 8.56-8.51 (m, 2H), 8.35 (d, 1H), 8.27 (s, 1H), 8.11 (d, 1H), 7.98 (d, 1H), 7.69 (dd, 1H), 7.65-7.55 (m, 4H), 7.39-7.32 (m, 1H), 7.06-7.02 (m, 1H)

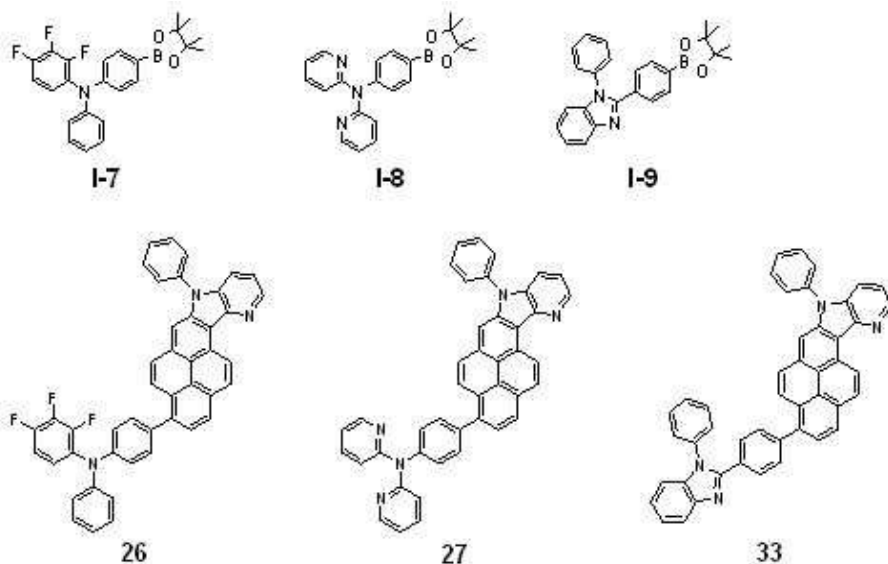
[0182] **합성예 7. 화합물 24의 합성**

[0183] 중간체 I-5 2.24 g (5.0 mmol), 문헌에서 알려진 중간체 I-6 1.86 g (5.0 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ 0.29 g(0.25 mmol), 그리고 K_2CO_3 2.07 g (15.0 mmol) 을 THF/ H_2O (2/1) 혼합용액 30 ml에 녹인 후 70 °C 에서 5 시간 동안

교반하였다. 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘술페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 24 2.20 g (수율 72 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{45}H_{29}N_3$: M^+ 611.2

[0184] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.71 (d, 1H), 8.52-8.45 (m, 2H), 8.19-8.16 (m, 2H), 8.01 (d, 1H), 7.95-7.88 (m, 2H), 7.70-7.56 (m, 5H), 7.38-7.29 (m, 7H), 7.06-7.01 (m 1H), 6.84-6.80 (m, 2H), 6.75-6.71 (m, 2H), 6.53-6.50 (m, 4H)

[0185] **화합물 26, 27 및 33의 합성**



[0186]

[0187] **합성예 8.** 화합물 26의 합성

[0188] 화합물 24의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-5와 문헌에서 알려진 중간체 I-7을 사용하여 화합물 26 2.83 g (수율 85 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{45}H_{26}F_3N_3$: M^+ 665.2

[0189] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.69 (d, 1H), 8.52 (d, 1H), 8.46 (d, 1H), 8.21-8.13 (m, 2H), 7.98-7.76 (m, 3H), 7.68-7.55 (m, 6H), 7.29-7.18 (m, 5H), 7.08-7.04 (m, 1H), 6.89-6.86 (m, 1H), 6.79-6.76 (m, 3H), 6.62-.60 (m, 2H)

[0190] **합성예 9.** 화합물 27의 합성

[0191] 화합물 24의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-5와 문헌에서 알려진 중간체 I-8을 사용하여 화합물 27 2.52 g (수율 82 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{43}H_{27}N_5$: M^+ 613.2

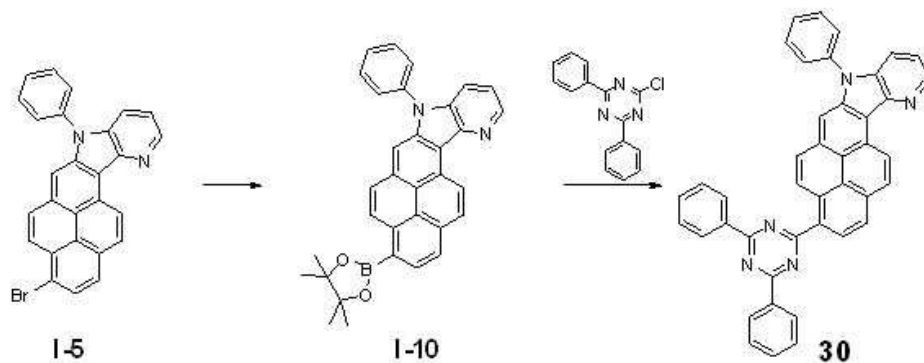
[0192] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.73 (d, 1H), 8.62-8.55 (m, 2H), 8.33-8.25 (m, 4H), 8.11-7.98 (m, 3H), 7.72 (dd, 1H), 7.68-7.53 (m, 8H), 7.42-7.34 (m, 3H), 7.06-6.98 (m, 3H), 6.90 (dt, 2H)

[0193] **합성예 10.** 화합물 33의 합성

[0194] 화합물 24의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-5와 문헌에서 알려진 중간체 I-9를 사용하여 화합물 33 2.83 g (수율 89 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{46}H_{28}N_4$: M^+ 636.2

[0195] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.66 (d, 1H), 8.51 (dd, 1H), 8.46 (d, 1H), 8.19-8.14 (m, 4H), 7.99 (d, 1H), 7.89 (d, 1H), 7.74-7.68 (m, 2H), 7.62-7.53 (m, 4H), 7.48-7.21 (m, 11H), 7.16-7.12 (m, 1H), 7.08-7.04 (m, 1H)

[0196] **화합물 30의 합성**



[0197]

[0198] **합성예 11. 중간체 I-10의 합성**

[0199] 중간체 I-5 4.47 g (10.0 mmol), Bis(pinacolato)diborone 2.54 g (10.0 mmol), $\text{PdCl}_2(\text{dppf})_2$ 0.36 g (0.5 mmol) 그리고 KOAc 2.94 g (30.0 mmol) 을 DMSO 40 ml 에 녹인 후 80 °C 에서 6 시간 동안 교반하였다. 반응액을 상온으로 식힌 후, 물 50 mL 와 디에틸에테르 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-10 3.76 g (수율 76 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $\text{C}_{33}\text{H}_{27}\text{BN}_2\text{O}_2$: M^+ 494.2

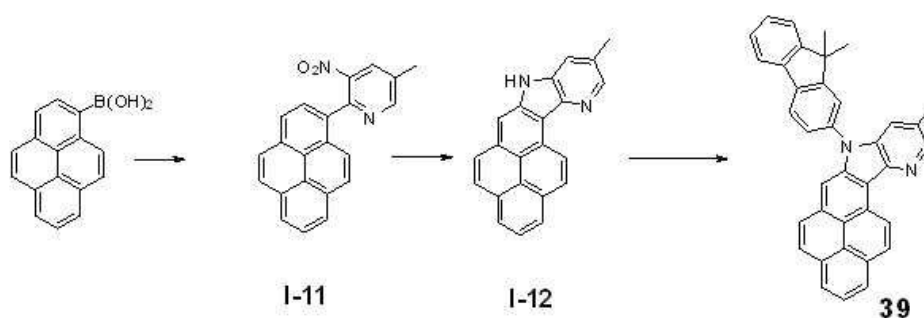
[0200] ^1H NMR (CDCl_3 , 400MHz) δ (ppm) 8.64 (d, 1H), 8.58 (d, 1H), 8.43-8.37 (m, 2H), 8.29 (d, 1H), 8.27-8.10 (m, 2H), 7.92 (d, 1H), 7.69-7.58 (m, 5H), 7.39-7.32 (m, 1H), 7.11-7.08 (m, 1H), 1.35 (s, 12H)

[0201] **합성예 12. 화합물 30의 합성**

[0202] 화합물 24의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-10과 2-chloro-4,6- diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하여 화합물 30 2.37 g (수율 79 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $\text{C}_{42}\text{H}_{23}\text{N}_5$: M^+ 599.2

[0203] ^1H NMR (CDCl_3 , 400MHz) δ (ppm) 8.69-8.64 (m, 5H), 8.57-8.49 (m, 2H), 8.39 (d, 1H), 8.25 (d, 1H), 8.18-8.10 (m, 3H), 7.82-7.66 (m, 5H), 7.45-7.32 (m, 7H), 7.10-7.05 (m, 1H)

[0204] **화합물 39의 합성**



[0205]

[0206] **합성예 13. 중간체 I-11의 합성**

[0207] 중간체 I-1의 합성과 동일한 방법으로 파이렌보론산과 2-bromo-5-methyl-3-nitropyridine 을 사용하여 중간체 I-11 5.21 g (수율 77 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $\text{C}_{22}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O}_2$: M^+ 338.1

[0208] ^1H NMR (CDCl_3 , 400MHz) δ (ppm) 8.46-8.45 (m, 1H), 8.33-8.32 (m, 1H), 8.27 (d, 1H), 8.23 (s, 1H), 8.19 (d, 1H), 8.09-8.02 (m, 5H), 7.98 (d, 1H), 2.43 (s, 3H)

[0209] **합성예 14. 중간체 I-12의 합성**

[0210] 중간체 I-2의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-11과 트리페닐포스핀을 사용하여 중간체 I-12 2.42 g (수율 79

%)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{22}H_{14}N_2$: M+ 306.1

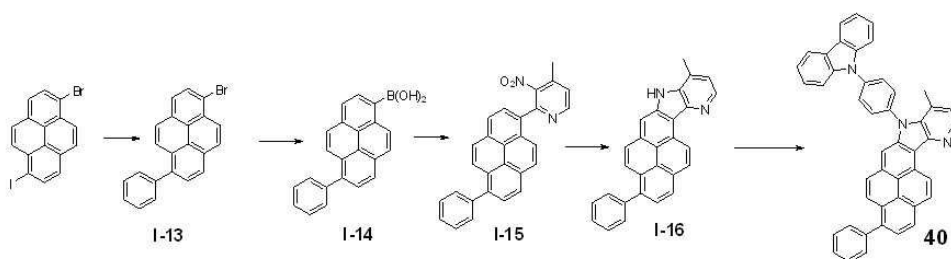
[0211] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 10.97 (s, 1H), 9.13 (d, 1H), 8.70 (d, 1H), 8.58 (d, 1H), 8.45 (d, 1H), 8.17 (d, 1H), 8.08 (s, 1H), 8.02-8.00 (m, 2H), 7.90-7.86 (m, 1H), 7.65 (d, 1H), 2.56 (s, 3H)

[0212] **합성예 15.** 화합물 39의 합성

[0213] 화합물 7의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-12와 2-브로모-9,9-디메틸플루오렌을 사용하여 화합물 39 2.12 g (수율 85 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{37}H_{26}N_2$: M+ 498.2

[0214] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 9.03 (d, 1H), 8.67-8.62 (m, 2H), 8.50 (d, 1H), 8.18 (s, 1H), 8.15-7.98 (m, 3H), 7.90-7.81 (m, 2H), 7.71-7.65 (m, 2H), 7.52 (dd, 1H), 7.24-7.21 (m, 1H), 6.97-6.93 (m, 1H), 6.80-6.79 (m, 1H), 6.72-6.70 (m, 1H), 2.54 (s, 3H), 1.86 (s, 6H)

[0215] **화합물 40의 합성**



[0216]

[0217] **합성예 16.** 중간체 I-13의 합성

[0218] 1-브로모-6-요오도파이렌 10.17 g (25.0 mmol), 페닐보론산 2.44 g (20.0 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ 1.15 g (1.0 mmol) 그리고 K_2CO_3 8.29g (60.0 mmol) 을 THF/ H_2O (2/1) 혼합용액 60ml 에 녹인 후, 70 °C에서 5시간 동안 교반하였다. 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 I-13 3.78 g (수율 53 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS 와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{22}H_{13}Br$: M+ 356.0

[0219] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.84 (d, 1H), 8.32 (d, 1H), 7.99-7.89 (m, 4H), 7.78 (d, 1H), 7.54-7.49 (m, 2H), 7.48-7.43 (m, 1H), 7.37-7.33 (m, 2H)

[0220] **합성예 17.** 중간체 I-14의 합성

[0221] 중간체 I-13 3.57 g (10.0 mmol) 을 THF 30 mL 에 녹인 후 -78 °C 에서 노말부틸리튬 4 mL (2.5M in Hexane, 10.0 mmol) 을 천천히 적가한다. 동일온도에서 1시간 동안 교반 한 후 $B(OiPr)_3$ 4.61 mL (20.0 mmol)를 천천히 첨가한다. 반응 용액을 3시간에 걸쳐 천천히 상온으로 온도를 올린 후, 물 40 mL를 가하고 에틸에테르 50 mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-14 5.03 g (수율 78 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS 와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{22}H_{15}BO_2$: M+ 322.1

[0222] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.21 (d, 1H), 8.06-8.02 (m, 2H), 7.94-7.77 (m, 5H), 7.55-7.51 (m, 2H), 7.49-7.43 (m, 1H), 7.39-7.33 (m, 4H)

[0223] **합성예 18.** 중간체 I-15의 합성

[0224] 중간체 I-1의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-14와 2-bromo-4-methyl-3-nitropyridine을 사용하여 중간체 I-15 3.36 g (수율 81 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{28}H_{18}N_2O_2$: M+ 414.1

[0225] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.43 (d, 1H), 8.33-8.28 (m, 2H), 8.15-8.05 (m, 3H), 7.89-7.84 (m, 2H),

7.78 (d, 1H), 7.55-7.51 (m, 2H), 7.47-7.42 (m, 1H), 7.37-7.32 (m, 2H), 7.14-7.11 (m, 1H), 2.41 (s, 3H)

[0226] **합성예 19.** 중간체 I-16의 합성

[0227] 중간체 I-2의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-15와 트리페닐포스핀을 사용하여 중간체 I-16 2.98g (수율 78 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{28}H_{18}N_2$: M+ 382.1

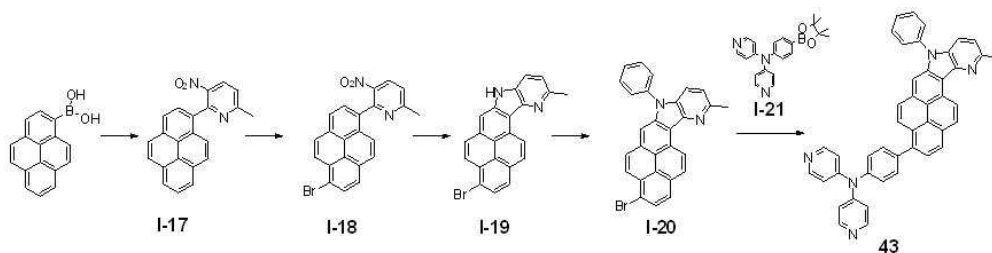
[0228] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 10.61 (s, 1H), 8.75 (d, 1H), 8.54 (d, 1H), 8.38 (d, 1H), 8.13 (d, 1H), 8.05-8.02 (m, 2H), 7.89 (d, 1H), 7.78 (d, 1H), 7.54-7.50 (m, 2H), 7.47-7.43 (m, 1H), 7.37-7.24 (m, 3H), 2.61 (s, 3H)

[0229] **합성예 20.** 화합물 40의 합성

[0230] 화합물 7의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-16을 사용하여 화합물 40 2.77 g (수율 89 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{46}H_{29}N_3$: M+ 623.2

[0231] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.71 (d, 1H), 8.59 (d, 1H), 8.43 (d, 1H), 8.17 (d, 1H), 8.14 (s, 1H), 8.09 (d, 2H), 7.99 (d, 1H), 7.87-7.77 (m, 5H), 7.55-7.51 (m, 2H), 7.47-7.43 (m, 1H), 7.37-7.31 (m, 6H), 7.26-7.20 (m, 2H), 6.95-6.93 (m, 1H), 2.66 (s, 3H)

[0232] **화합물 43의 합성**



[0233]

[0234] **합성예 21.** 중간체 I-17의 합성

[0235] 중간체 I-1의 합성과 동일한 방법으로 파이렌보론산과 2-bromo-6-methyl-3-nitropyridine을 사용하여 중간체 I-17 2.67 g (수율 79 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{22}H_{14}N_2O_2$: M+ 338.1

[0236] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.55 (d, 1H), 8.27 (d, 1H), 8.20-8.16 (m, 2H), 8.11-8.02 (m, 5H), 7.98 (d, 1H), 7.22 (d, 1H), 2.52 (s, 3H)

[0237] **합성예 22.** 중간체 I-18의 합성

[0238] 중간체 I-3의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-17을 사용하여 중간체 I-18 2.21 g (수율 53 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{22}H_{13}BrN_2O_2$: M+ 416.0

[0239] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.84 (d, 1H), 8.52 (d, 1H), 8.34 (d, 1H), 8.25-8.20 (m, 3H), 8.06 (d, 1H), 7.94 (d, 1H), 7.90 (d, 1H), 7.22 (d, 1H), 2.52 (s, 3H)

[0240] **합성예 23.** 중간체 I-19의 합성

[0241] 중간체 I-2의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-18을 사용하여 중간체 I-19 3.16 g (수율 82 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{22}H_{13}BrN_2$: M+ 384.0

[0242] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 11.21 (s, 1H), 8.76 (d, 1H), 8.63 (d, 1H), 8.49 (d, 1H), 8.39 (d, 1H), 8.12 (s, 1H), 8.06 (d, 1H), 7.98 (d, 1H), 7.66 (d, 1H), 7.17 (d, 1H), 2.64 (s, 3H)

[0243] **합성예 24.** 중간체 I-20의 합성

[0244] 화합물 7의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-19와 요오도벤젠을 사용하여 중간체 I-20 4.34 g (수율 94 %)을

얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{28}H_{17}BrN_2$: M^+ 460.1

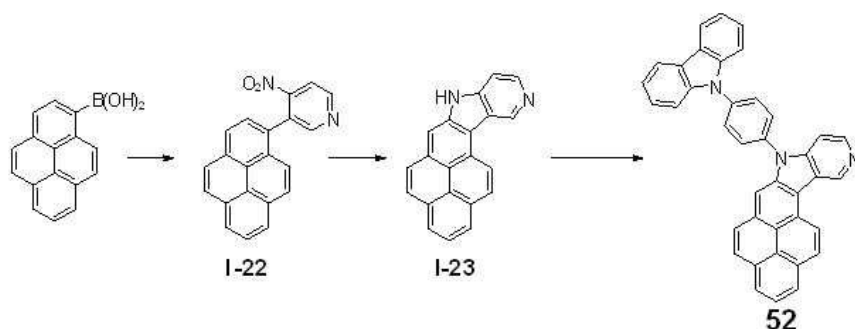
[0245] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.82 (d, 1H), 8.73 (d, 1H), 8.53 (d, 1H), 8.35 (d, 1H), 8.25 (d, 1H), 8.11(d, 1H), 7.86 (d, 1H), 7.81 (d, 1H), 7.63-7.55 (m, 4H), 7.39-7.32 (m, 1H), 7.02 (d, 1H), 2.63 (s, 3H)

[0246] **합성예 25.** 화합물 43의 합성

[0247] 화합물 24의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-20 과 알려진 중간체 I-21을 사용하여 화합물 43 2.51 g (수율 80 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{44}H_{29}N_5$: M^+ 627.2

[0248] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.71 (d, 1H), 8.44 (d, 1H), 8.16-8.13 (m, 6H), 8.00-7.90 (m, 3H), 7.80 (d, 1H), 7.62-7.56 (m, 4H), 7.36-7.27 (m, 3H), 7.02 (d, 1H), 6.72 (dd, 4H), 6.65 (d, 2H), 2.61 (s, 3H)

[0249] **화합물 52의 합성**



[0250]

[0251] **합성예 26.** 중간체 I-22의 합성

[0252] 중간체 I-1의 합성과 동일한 방법으로 파이렌보론산과 3-브로모-4-니트로피리딘을 사용하여 중간체 I-22 2.50 g (수율 77 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{21}H_{12}N_2O_2$: M^+ 324.1

[0253] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.56 (d, 1H), 8.50 (br-s, 1H), 8.40 (dd, 1H), 8.36 (d, 1H), 8.21 (d, 1H), 8.18 (s, 2H), 8.11-8.02 (m, 4H), 7.98 (d, 1H)

[0254] **합성예 27.** 중간체 I-23의 합성

[0255] 중간체 I-2의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-22와 트리페닐포스핀을 사용하여 중간체 I-23 2.48 g (수율 85 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{21}H_{12}N_2$: M^+ 292.1

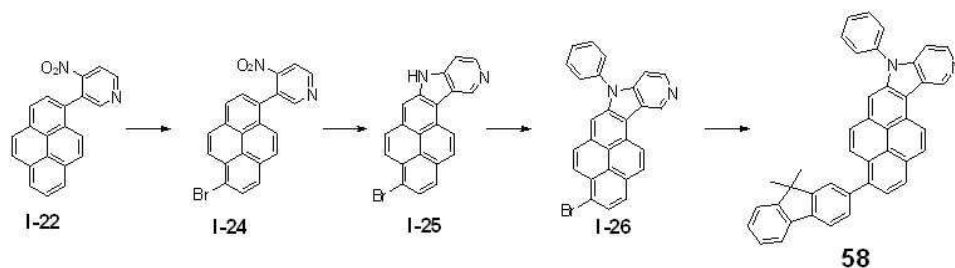
[0256] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 10.78 (s, 1H), 9.57 (s, 1H), 8.66 (d, 1H), 8.47-8.44 (m, 2H), 8.17 (d, 1H), 8.10 (s, 1H), 8.00 (dt, 2H), 7.90-7.86 (m, 2H), 7.42-7.38 (m, 1H)

[0257] **합성예 28.** 화합물 52의 합성

[0258] 화합물 7의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-23을 사용하여 화합물 52 2.40 g (수율 90 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{39}H_{23}N_3$: M^+ 533.2

[0259] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 9.42 (s, 1H), 9.13 (d, 1H), 8.91 (d, 1H), 8.46 (d, 1H), 8.25-8.22 (m, 2H), 8.14-8.08 (m, 3H), 8.00-7.96 (m, 2H), 7.90-7.83 (m, 3H), 7.77-7.74 (m, 2H), 7.56 (dd, 1H), 7.37-7.33 (m, 4H), 7.25-7.20 (m, 2H)

[0260] **화합물 58의 합성**



[0261]

[0262] **합성예 29.** 중간체 I-24의 합성

[0263] 중간체 I-3의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-22를 사용하여 중간체 I-24 2.14 g (수율 53 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{21}H_{11}BrN_2O_2$: M+ 402.2

[0264] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.85 (d, 1H), 8.58 (dd, 1H), 8.50 (s, 1H), 8.44-8.40 (m, 2H), 8.27-8.22 (m, 3H), 8.18 (d, 1H), 7.96 (d, 1H), 7.90 (d, 1H)

[0265] **합성예 30.** 중간체 I-25의 합성

[0266] 중간체 I-4의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-24와 트리페닐포스핀을 사용하여 중간체 I-25 2.93 g (수율 79 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{21}H_{11}BrN_2$: M+ 370.2

[0267] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 10.65 (s, 1H), 9.58 (s, 1H), 8.97 (d, 1H), 8.84 (d, 1H), 8.57 (d, 1H), 8.46 (d, 1H), 8.37 (d, 1H), 8.15 (s, 1H), 7.97 (dt, 2H), 7.53 (d, 1H)

[0268] **합성예 31.** 중간체 I-26의 합성

[0269] 중간체 I-5의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-25를 사용하여 중간체 I-26 4.16 g (수율 93 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{27}H_{15}BrN_2$: M+ 446.0

[0270] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 9.42 (s, 1H), 9.02 (d, 1H), 8.79 (d, 1H), 8.49 (d, 1H), 8.31 (d, 1H), 8.27-8.24 (m, 2H), 8.03-7.97 (m, 2H), 7.58-7.53 (m, 3H), 7.51-7.45 (m, 2H), 7.36-7.32 (m, 1H)

[0271] **합성예 32.** 화합물 58의 합성

[0272] 화합물 24의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-26과 9,9-디메틸-2-플루오렌보론산을 사용하여 화합물 58 2.21 g (수율 79 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{42}H_{28}N_2$: M+ 560.2

[0273] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 9.42 (s, 1H), 8.92 (d, 1H), 8.51 (d, 1H), 8.25 (d, 1H), 8.18 (s, 1H), 8.08 (d, 1H), 7.97 (d, 1H), 7.87 (d, 1H), 7.78 (d, 1H), 7.72 (d, 1H), 7.57-7.48 (m, 6H), 7.36-7.31 (m, 1H), 7.24-7.21 (m, 1H), 7.01-6.89 (m, 4H), 1.81 (s, 6H)

[0274] **화합물 72의 합성**

[0275] **합성예 33.** 화합물 72의 합성

[0276] 화합물 24의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-26과 중간체 I-8을 사용하여 화합물 72 2.30 g (수율 75 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{43}H_{27}N_5$: M+ 613.2

[0277] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 9.42 (d, 1H), 8.92 (d, 1H), 8.52 (d, 1H), 8.25-8.21 (m, 3H), 8.12 (s, 1H), 8.09 (d, 1H), 7.99 (d, 1H), 7.94-7.88 (m, 2H), 7.5-7.42 (m, 9H), 7.36-7.32 (m, 3H), 7.01-6.97 (m, 2H), 6.94-6.89 (m, 2H)

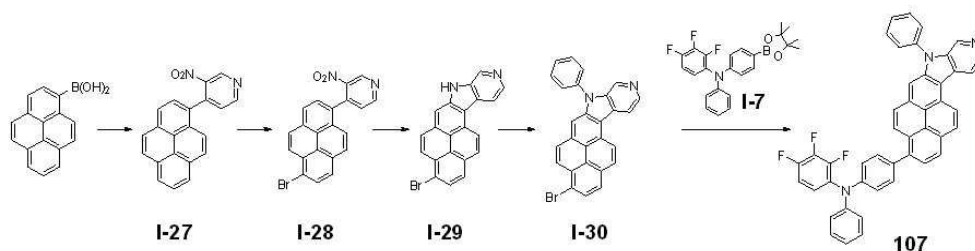
[0278] **화합물 81의 합성**

[0279] **합성예 34.** 화합물 81의 합성

[0280] 화합물 24의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-26과 중간체 I-9를 사용하여 화합물 81 2.51 g (수율 79 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{46}H_{28}N_4$: M+ 636.2

[0281] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 9.37 (s, 1H), 8.89 (d, 1H), 8.49 (d, 1H), 8.45 (d, 2H), 8.24 (dd, 1H), 8.17 (s, 1H), 8.09 (d, 1H), 7.99 (d, 1H), 7.89 (d, 1H), 7.76 (d, 1H), 7.61-7.43 (m, 11H), 7.37-7.28 (m, 3H), 7.16-7.12 (m, 1H), 6.97-6.93 (m, 2H)

[0282] **화합물 107의 합성**



[0283]

[0284] **합성예 35.** 중간체 I-27의 합성

[0285] 중간체 I-1의 합성과 동일한 방법으로 파이렌보론산과 4-브로모-3-니트로피리딘을 사용하여 중간체 I-27 2.59 g (수율 80 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{21}H_{12}N_2O_2$: M+ 324.1

[0286] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 9.05 (d, 1H), 8.54 (d, 1H), 8.27 (d, 1H), 8.17-8.13 (m, 2H), 8.09-7.97 (m, 6H), 7.02 (dd, 1H)

[0287] **합성예 36.** 중간체 I-28의 합성

[0288] 중간체 I-3의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-3을 사용하여 중간체 I-28 2.02 g (수율 50 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{21}H_{11}BrN_2O_2$: M+ 402.0

[0289] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 9.05 (s, 1H), 8.84 (d, 1H), 8.54 (d, 1H), 8.33 (d, 1H), 8.24-8.18 (m, 3H), 8.05 (d, 1H), 7.95-7.89 (m, 2H), 7.04-7.02 (m, 1H)

[0290] **합성예 37.** 중간체 I-29의 합성

[0291] 중간체 I-4의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-28과 트리페닐포스핀을 사용하여 중간체 I-29 3.01 g (수율 81 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{21}H_{11}BrN_2$: M+ 370.0

[0292] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 11.48 (s, 1H), 8.94 (d, 1H), 8.82 (d, 1H), 8.79 (s, 1H), 8.50 (d, 1H), 8.40-8.38 (m, 2H), 8.19 (s, 1H), 8.09 (d, 1H), 7.99-7.95 (m, 2H)

[0293] **합성예 38.** 중간체 I-30의 합성

[0294] 중간체 I-5의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-29를 사용하여 중간체 I-30 4.12 g (수율 92 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{27}H_{15}BrN_2$: M+ 446.0

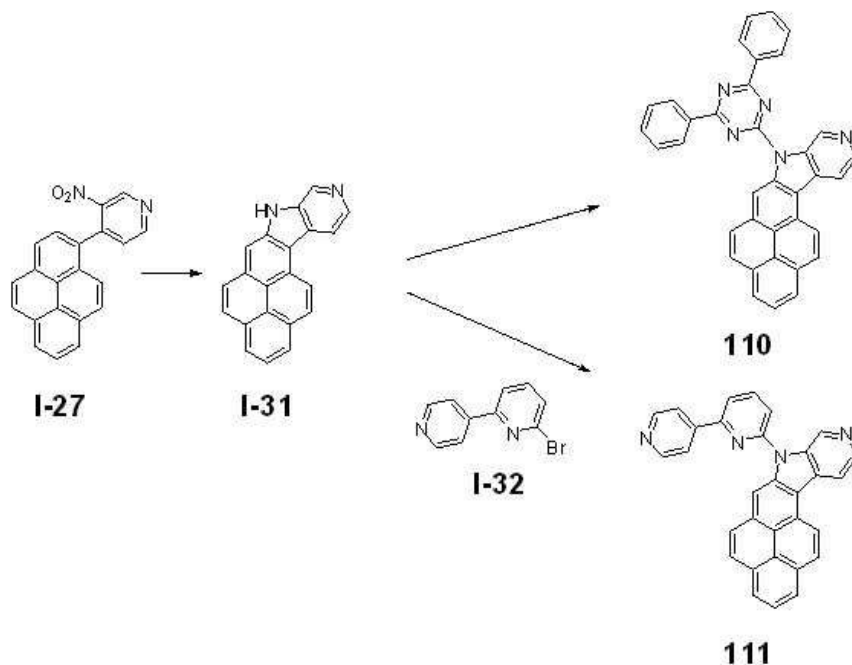
[0295] 1H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) δ (ppm) 8.98 (d, 1H), 8.84 (d, 1H), 8.76 (s, 1H), 8.47-8.44 (m, 2H), 8.34 (d, 1H), 8.27 (s, 1H), 8.03-7.97 (m, 2H), 7.84 (dd, 1H), 7.62-7.56 (m, 4H), 7.39-7.32 (m, 1H)

[0296] **합성예 39.** 화합물 107의 합성

[0297] 화합물 24의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-30과 중간체 I-7을 사용하여 화합물 107 2.59 g (수율 78 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $C_{45}H_{26}FN_3$: M+ 665.2

[0298] ^1H NMR (CDCl_3 , 400MHz) δ (ppm) 8.88 (d, 1H), 8.76 (s, 1H), 8.46-8.41 (m, 2H), 8.19 (s, 1H), 8.09 (d, 1H), 7.97 (d, 1H), 7.95-7.81 (m, 3H), 7.64-7.52 (m, 5H), 7.37-7.30 (m, 5H), 6.87-6.84 (m, 1H), 6.72-6.70 (m, 2H), 6.64 (d, 1H), 6.41 (dd, 2H)

[0299] **화합물 110 및 111의 합성**



[0300]

[0301] **합성예 40.** 중간체 I-31의 합성

[0302] 중간체 I-2의 합성과 동일한 중간체 I-27을 사용하여 중간체 I-31 2.66 g (수율 91 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $\text{C}_{21}\text{H}_{12}\text{N}_2$: M^+ 292.1

[0303] ^1H NMR (CDCl_3 , 400MHz) δ (ppm) 11.29 (s, 1H), 9.13 (d, 1H), 8.87 (d, 1H), 8.73 (s, 1H), 8.44-8.39 (m, 2H), 8.18-8.14 (m, 2H), 8.09 (d, 1H), 8.02 (d, 1H), 7.94-7.86 (m, 2H)

[0304] **합성예 41.** 화합물 110의 합성

[0305] 화합물 7의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-31과 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하여 화합물 110 1.81 g (수율 69 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $\text{C}_{36}\text{H}_{21}\text{N}_5$: M^+ 523.2

[0306] ^1H NMR (CDCl_3 , 400MHz) δ (ppm) 9.72 (s, 1H), 9.13 (d, 1H), 9.00 (s, 1H), 8.92 (d, 1H), 8.60-8.57 (m, 4H), 8.45 (d, 1H), 8.37 (d, 1H), 8.14 (d, 1H), 8.00-7.96 (m, 2H), 7.91-7.84 (m, 2H), 7.45-7.37 (m, 6H)

[0307] **합성예 42.** 화합물 111의 합성

[0308] 화합물 7의 합성과 동일한 방법으로 중간체 I-31과 알려진 중간체 I-32를 사용하여 화합물 111 1.85 g (수율 83 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 LC-MS와 NMR을 통해 확인하였다. $\text{C}_{31}\text{H}_{18}\text{N}_4$: M^+ 446.2

[0309] ^1H NMR (CDCl_3 , 400MHz) δ (ppm) 9.17 (s, 1H), 9.13 (d, 1H), 8.93 (d, 1H), 8.61-8.58 (m, 3H), 8.44 (d, 1H), 8.37 (d, 1H), 8.13 (d, 1H), 8.00-7.76 (m, 8H), 7.70 (dd, 1H)

[0310] **실시예 1**

[0311] 에노드로는 코닝사(Corning)의 $15\Omega/\text{cm}^2(1200\text{\AA})$ ITO 유리 기판을 $50\text{mm}\times 50\text{mm}\times 0.7\text{mm}$ 크기로 잘라 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각각 5분간 초음파 세정한 후 30분간 자외선을 조사하고, 오존에 노출시켜 세정한 후, 진공 증착 장치에 상기 ITO 유리 기판을 장착하였다. 상기 ITO 유리 상부에, 2-TNATA를 진공 증착하여 $600\text{\AA}$ 두

개의 정공 주입층을 형성한 다음, 상기 정공 주입층 상부에 NPB(4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐)를 진공 증착하여 600Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0312] 상기 정공 수송층 상부에 청색 형광 호스트로서 상기 화합물 7과 청색 형광 도펀트로서 DPVBi(1,4-비스-(2,2-디페닐비닐)비페닐)을 사용하여 98:2의 중량비로 동시 증착함으로써 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0313] 이어서, 상기 발광층 상부에 Alq₃를 진공 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성하였다. 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 진공 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성한 다음 Al을 3000Å 두께로 진공 증착하여 LiF/Al 전극을 형성함으로써, 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0314] **실시예 2**

[0315] 발광층 형성시 화합물 7 대신 화합물 39를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0316] **실시예 3**

[0317] 발광층 형성시 화합물 7 대신 화합물 40을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0318] **실시예 4**

[0319] 전자 수송층 형성시 화합물 7 대신 화합물 52를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0320] **실시예 5**

[0321] 발광층 형성시 화합물 7 대신 화합물 58을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0322] **실시예 6**

[0323] 발광층 형성시 청색 형광 호스트로서 화합물 7 대신 ADN를 사용하고 청색 형광 도펀트로서 DPVBi 대신 화합물 24를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0324] **실시예 7**

[0325] 발광층 형성시 화합물 24 대신 화합물 26을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 6과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0326] **실시예 8**

[0327] 발광층 형성시 화합물 24 대신 화합물 27을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 6과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0328] **실시예 9**

[0329] 발광층 형성시 화합물 24 대신 화합물 43을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 6과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0330] **실시예 10**

[0331] 발광층 형성시 화합물 24 대신 화합물 72를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 6과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0332] **실시예 11**

[0333] 발광층 형성시 화합물 24 대신 화합물 107을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 6과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0334] **실시예 12**

[0335] 발광층 형성시 청색 형광 호스트로서 화합물 7 대신 ADN를 사용하고 청색 형광 도펀트로서 DPVBi를 사용하여 발광층을 형성하고 상기 발광층 상부에 전자 수송층 형성시 Alq₃ 대신 화합물 30을 이용하였다는 점을 제외하고는,

실시에 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

실시예 13

전자 수송층 형성시 화합물 30 대신 화합물 33을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 12와 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

실시예 14

전자 수송층 형성시 화합물 30 대신 화합물 81을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 12와 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

실시예 15

전자 수송층 형성시 화합물 30 대신 화합물 110을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 12와 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

실시예 16

전자 수송층 형성시 화합물 30 대신 화합물 111을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 12와 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

실시예 17

발광층 형성시 청색 형광 호스트로서 화합물 7 대신 화합물 39를 사용하고 청색 형광 도펀트로서 DPVBi 대신 화합물 26을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

실시예 18

발광층 형성시 화합물 26 대신 화합물 43을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 17과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

실시예 19

발광층 형성시 화합물 26 대신 화합물 107을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 17과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

실시예 20

발광층 형성시 청색 형광 호스트로서 화합물 7 대신 화합물 39를 사용하고 청색 형광 도펀트로서 DPVBi 대신 화합물 26을 사용하여 발광층을 형성하고 상기 발광층 상부에 전자 수송층 형성시 Alq₃ 대신 화합물 33을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

실시예 21

전자 수송층 형성시 화합물 33 대신 화합물 111을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 20과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

비교예 1

발광층 형성시 청색 형광 호스트로서 화합물 7 대신 ADN를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

평가예

상기 실시예 1 내지 21의 유기 발광 소자 및 비교예 1의 유기 발광 소자에 대하여, PR650 (Spectroscan) Source Measurement Unit.(PhotoResearch사 제품)를 이용하여 전류밀도, 구동전압, 휘도, 발광효율, 발광색 및 반감수명(100mA/cm²의 전류 밀도에서 휘도가 50%로 저하되는데 걸리는 시간)을 평가하였고 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0358]

	발광재료 또는 전자수송재료	구동전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	발광효율 (cd/A)	발광색	수명(h)
실시예1	화합물 7	6.85	50	2,355	4.71	청색	198
실시예2	화합물 39	6.73	50	2,445	4.89	청색	212
실시예3	화합물 40	6.76	50	2,390	4.78	청색	218
실시예4	화합물 52	6.89	50	2,315	4.63	청색	186
실시예5	화합물 58	6.91	50	2,260	4.52	청색	165
실시예6	화합물 24	7.81	50	2,490	4.98	청록색	216
실시예7	화합물 26	7.78	50	2,625	5.25	청색	237
실시예8	화합물 27	7.68	50	2,635	5.27	청색	187
실시예9	화합물 43	7.81	50	2,615	5.23	청색	196
실시예10	화합물 72	7.76	50	2,535	5.07	청색	167
실시예11	화합물 107	7.80	50	2,565	5.13	청색	224
실시예12	화합물 30	5.71	50	2,355	4.71	청색	133
실시예13	화합물 33	6.02	50	2,335	4.67	청색	186
실시예14	화합물 81	6.23	50	2,325	4.65	청색	182
실시예15	화합물 110	5.65	50	2,415	4.83	청색	152
실시예16	화합물 111	5.83	50	2,395	4.79	청색	195
실시예17	화합물 39	6.57	50	3,230	6.46	청색	248
실시예18	화합물 26						
실시예18	화합물 39	6.62	50	3,135	6.27	청색	219
실시예18	화합물 43						
실시예19	화합물 39	6.62	50	3,065	6.13	청색	222
실시예19	화합물 107						
실시예20	화합물 39	5.62	50	3,360	6.72	청색	229
실시예20	화합물 26						
실시예20	화합물 33						
실시예21	화합물 39	5.65	50	3,475	6.95	청색	263
실시예21	화합물 26						
실시예21	화합물 111						
비교예1	DPVBi	7.85	50	1,560	3.12	청색	113

[0359]

상기 표 1을 참조하면, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 유기 발광 소자의 발광층 재료(호스트, 도펀트) 또는 전자 수송층 재료로 사용한 경우에는 각각 공지 물질인 ADN, DPVBi 또는 Alq₃를 사용한 경우와 비교하여 유기 발광 소자의 구동전압이 1V 이상 낮아졌으며 효율이 대폭 향상된 것을 알 수 있다.

[0360]

구체적으로, 실시예 1 내지 5의 유기 발광 소자는 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 호스트로 사용한 경우로서 비교예 1 대비 구동전압은 1V 개선되고, 효율 및 수명이 개선된 것을 확인할 수 있고, 실시예 6 내지 11의 유기 발광 소자는 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 도펀트로 사용한 경우로서 비교예 1 대비 효율이 150% 이상 개선되고 수명 증가의 효과를 보이는 것을 확인할 수 있으며, 실시예 12 내지 16의 유기 발광 소자는 화학식 1로 표시되는 화합물을 전자 수송 재료로 사용한 경우로서 비교예 1 대비 구동 전압이 2V 이상 감소하는 결과를 확인하였다. 또한, 실시예 17 내지 21의 유기 발광 소자는 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 발광층의 호스트 및 도펀트로 사용하거나 또는 발광층의 호스트, 도펀트 및 전자 수송 재료로 사용한 경우로서 비교예 1 대비 구동전압이 2V 감소하고, 효율은 약 200% 증가하며, 수명이 100% 이상 향상되는 결과를 확인하였다.

[0361]

이로부터, 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함하는 발광 소자는 구동 전압이 낮고 발광효율이 높으며 보다 긴 수명을 가져 우수한 성능을 가질 수 있음을 확인할 수 있다.

[0362]

본 발명에 대하여 상기 합성에 및 실시예를 참조하여 설명하였으나, 이는 예시적인 것에 불과하며, 본 발명에 속하는 기술 분야의 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서, 본 발명의 진정한 기술적 보호 범위는 첨부된 특허청구범위의 기술적 사항에 의하여 정해져야 할 것이다.

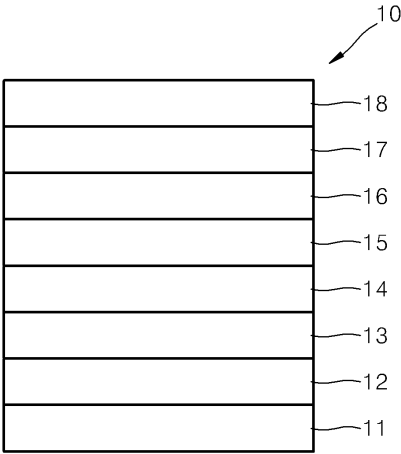
부호의 설명

[0363]

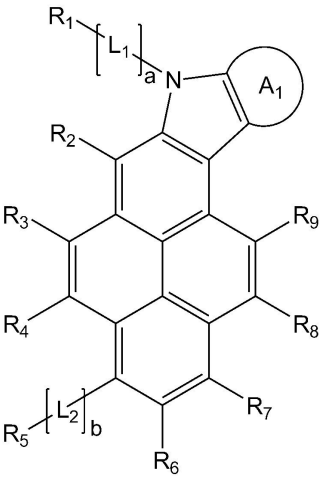
- 10: 유기 발광 소자
- 11: 기판
- 12: 제1전극
- 13: 정공 주입층
- 14: 정공 수송층
- 15: 발광층
- 16: 전자 수송층
- 17: 전자 주입층
- 18: 제2전극

도면

도면1



도면2



【심사관 직권보정사항】

【직권보정 1】

【보정항목】 청구범위

【보정세부항목】 청구항 제 12항

【변경전】

제1항 내지 제 11항

【변경후】

제1항 내지 제5항 및 제7항 내지 제11항

专利名称(译)	杂环化合物，有机发光器件和包含其的平板显示器		
公开(公告)号	KR101872407B1	公开(公告)日	2018-08-01
申请号	KR1020110060806	申请日	2011-06-22
[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	KIM YOUNG KOOK 김영국 HWANG SEOK HWAN 황석환 JUNG HYE JIN 정혜진 LIM JIN O 임진오 HAN SANG HYUN 한상현 KWAK YOON HYUN 박윤현 LEE SUN YOUNG 이선영 KO HEE JOO 고희주 LEE JONG HYUK 이종혁 KIM SUNG CHUL 김성철		
发明人	김영국 황석환 정혜진 임진오 한상현 박윤현 이선영 고희주 이종혁 김성철		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0072 H01L51/0061 H01L51/0067 H01L51/0081 H01L51/5016 H01L51/0059 C07D471/04 H01L51/5072		
其他公开文献	KR1020130000228A		

摘要(译)

提供具有下式 (1) 的杂环化合物，以及有机发光器件和包括该有机发光器件的平板显示器：在该式中，A1是取代或未取代的稠合吡啶环，R1-R9，L1，L2，a和b是指本发明的详细说明。具有包含杂环化合物的有机层的有机发光器件具有低驱动电压，高光效率和长寿命的特性。

