



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2014-0087996
(43) 공개일자 2014년07월09일

- | | |
|---|---|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07D 401/10 (2006.01)
C07D 401/14 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2013-0128702</p> <p>(22) 출원일자 2013년10월28일
심사청구일자 없음</p> <p>(30) 우선권주장
1020120158172 2012년12월31일 대한민국(KR)</p> | <p>(71) 출원인
제일모직주식회사
경상북도 구미시 구미대로 58 (공단동)</p> <p>(72) 발명자
신창주
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)
강동민
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)
(뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인
팬코리아특허법인</p> |
|---|---|

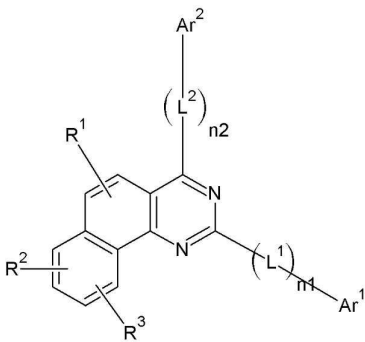
전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 유기광전자소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치

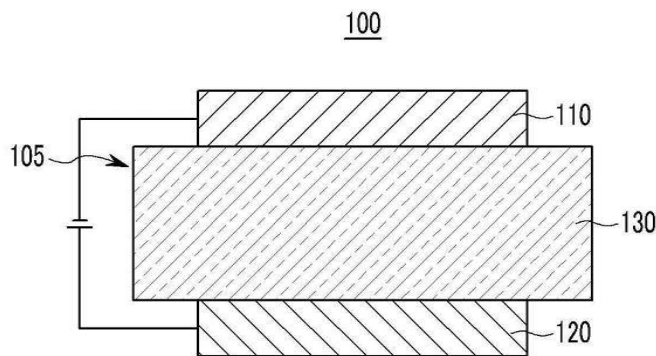
(57) 요약

유기광전자소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것으로, 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[화학식 1]



대표도 - 도1



(72) 발명자

원종우

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

이남현

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

정수영

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

정호국

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

채미영

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

김현정

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

정우석

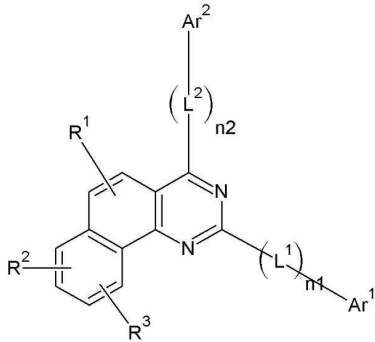
경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기광전자소자용 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고,

L¹ 및 L²은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

n1 및 n2는 서로 독립적으로 0 내지 5 중 어느 하나의 정수이고,

Ar¹ 또는 Ar² 중 적어도 어느 하나가 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이거나; L¹ 또는 L² 중 적어도 어느 하나가 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

R¹ 내지 R³은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 페로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술폰아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술폰기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 Ar²는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고, 상기 Ar¹은 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 3

제2항에 있어서,

상기 L¹은 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, n1은 1 내지 5 중 어느 하나의 정수인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 Ar¹은 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기 또는 치환 또는 비치환된 페난트레닐기인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 융합 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 융합 헤테로아릴기인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 6

제2항에 있어서,

상기 L¹은 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 Ar¹ 및 Ar² 중 적어도 어느 하나는, 전자 특성을 가지는, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 8

제7항에 있어서,

상기 전자 특성을 가지는, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기는, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 테트라졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사디아아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 싸이아트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 퓨리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프피리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페나지닐기인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 9

제7항에 있어서,

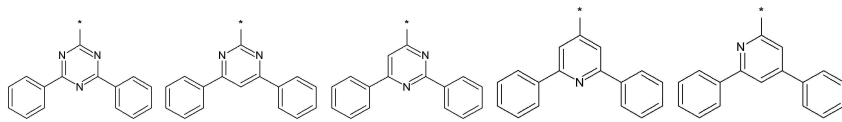
상기 전자 특성을 가지는, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기는, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 또는 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 10

제7항에 있어서,

상기 전자 특성을 가지는, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기는 하기 화학식 E-1 내지 E-5 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기광전자소자용 화합물:

[화학식 E-1] [화학식 E-2] [화학식 E-3] [화학식 E-4] [화학식 E-5]



청구항 11

제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자는, 유기광전소자, 유기발광소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 및 유기메모리소자로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 12

양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서,

상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 제1항에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자.

청구항 13

제12항에 있어서,

상기 유기박막층은 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나인 것인 유기발광소자.

청구항 14

제13항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 전자주입층 또는 전자수송층 내에 포함되는 것인 유기발광소자.

청구항 15

제12항의 유기발광소자를 포함하는 표시장치.

명세서

기술분야

[0001] 유기광전자소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것이다.

배경기술

[0002] 유기광전자소자(organic optoelectric device)라 함은 정공 또는 전자를 이용한 전극과 유기물 사이에서의 전하 교류를 필요로 하는 소자를 의미한다.

[0003] 유기광전자소자는 동작 원리에 따라 하기와 같이 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 첫째는 외부의 광원으로부터 소자로 유입된 광자에 의하여 유기물층에서 엑시톤(exciton)이 형성되고 이 엑시톤이 전자와 정공으로 분리되고, 이 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되어 전류원(전압원)으로 사용되는 형태의 전자소자이다.

[0004] 둘째는 2 개 이상의 전극에 전압 또는 전류를 가하여 전극과 계면을 이루는 유기물 반도체에 정공 또는 전자를 주입하고, 주입된 전자와 정공에 의하여 동작하는 형태의 전자소자이다.

[0005] 유기광전자소자의 예로는 유기광전소자, 유기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체 드럼(organic photo conductor drum), 유기트랜지스터 등이 있으며, 이들은 모두 소자의 구동을 위하여 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질을 필요로 한다.

[0006] 특히, 유기발광소자(organic light emitting diode, OLED)는 최근 평판 디스플레이(flat panel display)의 수요가 증가함에 따라 주목받고 있다. 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다.

[0007] 이러한 유기발광소자는 유기발광재료에 전류를 가하여 전기에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서 통상 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 기능성 유기물 층이 삽입된 구조로 이루어져 있다. 여기서 유기물층은 유기발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

[0008] 이러한 유기발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공(hole)이, 음극에서는 전자(electron)가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만나 재결합(recombination)에 의해 에너지가 높은 여기자를 형성하게 된다. 이때 형성된 여기자가 다시 바닥상태(ground state)로 이동하면서 특정한 파장을 갖는 빛이 발생하게 된다.

[0009] 최근에는, 형광 발광물질뿐 아니라 인광 발광물질도 유기발광소자의 발광물질로 사용될 수 있음이 알려졌으며, 이러한 인광 발광은 바닥상태에서 여기상태(excited state)로 전자가 전이한 후, 계간 전이(intersystem crossing)를 통해 단일항 여기자가 삼중항 여기자로 비발광 전이된 다음, 삼중항 여기자가 바닥상태로 전이하면서 발광하는 메카니즘으로 이루어진다.

[0010] 상기한 바와 같이 유기발광소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.

[0011] 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.

[0012] 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율과 안정성을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.

[0013] 유기발광소자가 우수한 특성을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질, 발광 재료 중 호스트 및/또는 도판트 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하며, 아직까지 안정하고 효율적인 유기발

광소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다. 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기광전자소자에서도 마찬가지이다.

[0014] 또한, 저분자 유기발광소자는 진공 증착법에 의해 박막의 형태로 소자를 제조하므로 효율 및 수명성능이 좋으며, 고분자 유기발광소자는 잉크젯(inkjet) 또는 스핀코팅(spin coating)법을 사용하여 초기 투자비가 적고 대면적화가 유리한 장점이 있다.

[0015] 저분자 유기발광소자 및 고분자 유기발광소자는 모두 자체발광, 고속응답, 광시야각, 초박형, 고화질, 내구성, 넓은 구동온도범위 등의 장점을 가지고 있어 차세대 디스플레이로 주목을 받고 있다. 특히 기존의 LCD(liquid crystal display)와 비교하여 자체발광형으로서 어두운 곳이나 외부의 빛이 들어와도 시안성이 좋으며, 백라이트가 필요 없어 LCD의 1/3수준으로 두께 및 무게를 줄일 수 있다.

[0016] 또한, 응답속도가 LCD에 비해 1000배 이상 빠른 마이크로 초 단위여서 잔상이 없는 완벽한 동영상 구현할 수 있다. 따라서, 최근 본격적인 멀티미디어 시대에 맞춰 최적의 디스플레이로 각광받을 것으로 기대되며, 이러한 장점을 바탕으로 1980년대 후반 최초 개발 이후 효율 80배, 수명 100배 이상에 이르는 급격한 기술발전을 이루어 왔고, 최근에는 40인치 유기발광소자 패널이 발표되는 등 대형화가 급속히 진행되고 있다.

[0017] 대형화를 위해서는 발광 효율의 증대 및 소자의 수명 향상이 수반되어야 한다. 이를 위해 안정하고 효율적인 유기발광소자용 유기물층 재료의 개발이 필요하다.

발명의 내용

해결하려는 과제

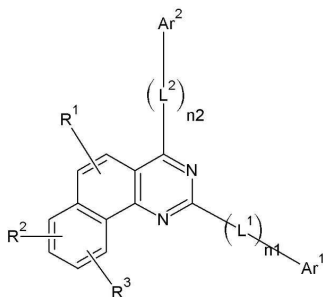
[0018] 고효율, 장수명 등의 특성을 가지는 유기광전자소자를 제공할 수 있는 유기광전자소자용 화합물을 제공하는 것이다.

[0019] 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0020] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[0021] [화학식 1]



[0022] 상기 화학식 1에서, Ar¹, Ar², L¹, L², n1, n2 및 R¹ 내지 R³은 하기 상세한 설명에서 정의한 바와 같다.

[0024] 본 발명의 다른 일 구현예에서는, 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기 박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자를 제공한다.

[0025] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

발명의 효과

[0026] 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 유기광전자소자는 우수한 전기화학적 및 열적 안정성을 가지고 수명 특성이 우수하며, 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가질 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0027] 도 1 및 도 2는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물을 이용하여 제조될 수 있는 유기발광소자에 대한 다양한 구현예들을 나타내는 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0028] 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

[0029] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

[0030] 또한 상기 치환된 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 고리를 형성할 수도 있다.

[0031] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

[0032] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"이란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다. 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.

[0033] 알킬기는 C1 내지 C20인 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다. 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자가 포함되는 것을 의미하며, 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.

[0034] 상기 알킬기는 구체적인 예를 들어 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.

[0035] "아릴(aryl)기"는 환형인 치환기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 치환기를 의미하며, 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

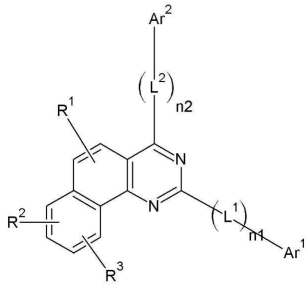
[0036] "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.

[0037] 본 명세서에서, 정공 특성이란, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다. 보다 구체적으로, 전자를 밀어내는 특성에도 유사할 수 있다.

[0038] 또한 전자 특성이란, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다. 보다 구체적으로 전자를 당기는 특성에도 유사할 수 있다.

[0039] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공할 수 있다.

[0040] [화학식 1]



[0041]

[0042]

상기 화학식 1에서, Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L¹ 및 L²은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C6 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고, n₁ 및 n₂는 서로 독립적으로 0 내지 5 중 어느 하나의 정수이고, Ar¹ 또는 Ar² 중 적어도 어느 하나가 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이거나; L¹ 또는 L² 중 적어도 어느 하나가 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, R¹ 내지 R³은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 페로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 우레이드기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 또는 이들의 조합이다.

[0043]

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 헤테로 원자를 포함하는 세 개의 융합 고리를 포함하는 코어 구조를 가질 수 있다. 이러한 코어 구조의 경우, 높은 내열성을 가질 수 있으며, 전자 이동도가 개선될 수 있다.

[0044]

또한, 상기 화학식 1로 표시되는 유기광전자소자용 화합물은 코어 부분과 코어 부분에 치환된 치환기에 다양한 또 다른 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드 갭을 갖는 화합물이 될 수 있다.

[0045]

상기 화합물의 치환기에 따라 적절한 에너지 준위를 가지는 화합물을 유기광전자소자에 사용함으로써, 정공전달 능력 또는 전자전달 능력이 강화되어 효율 및 구동전압 면에서 우수한 효과를 가지고, 전기화학적 및 열적 안정성이 뛰어나 유기광전자소자 구동시 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

[0046]

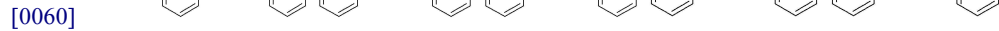
보다 구체적으로, 본 발명의 일 구현예에서, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및/또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기는, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐일기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸일기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기,

치환 또는 비치환된 페녹사진일기 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

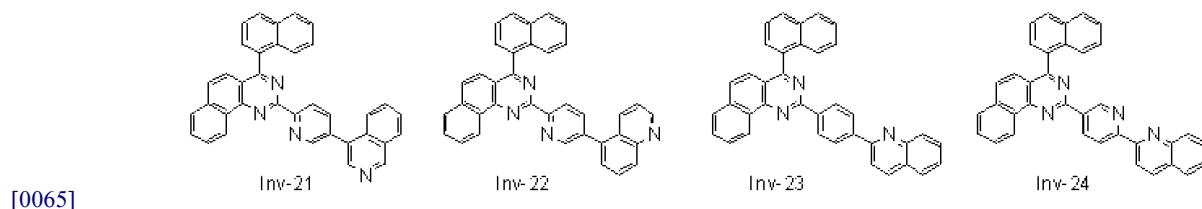
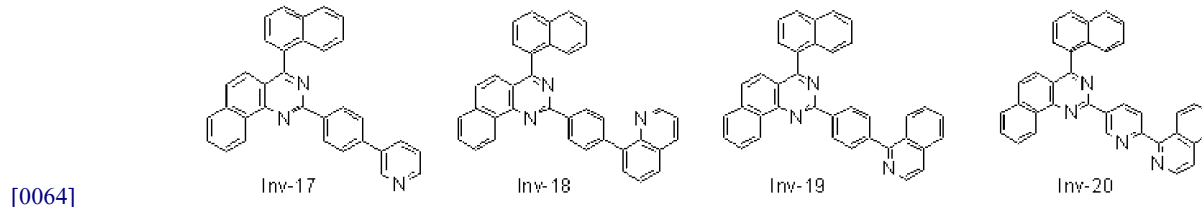
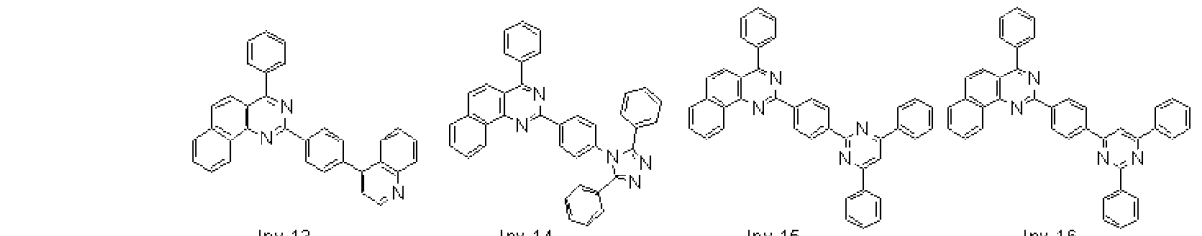
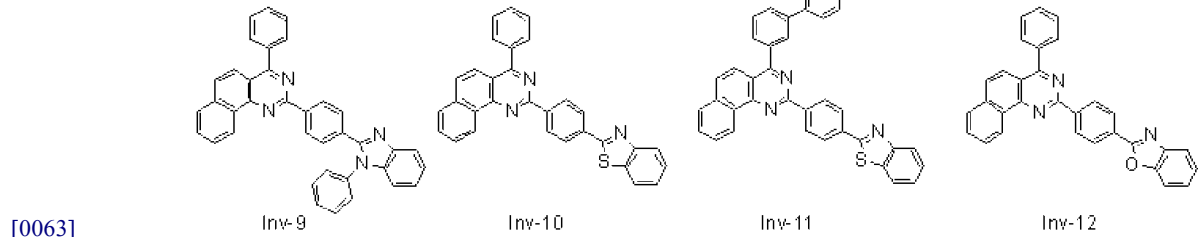
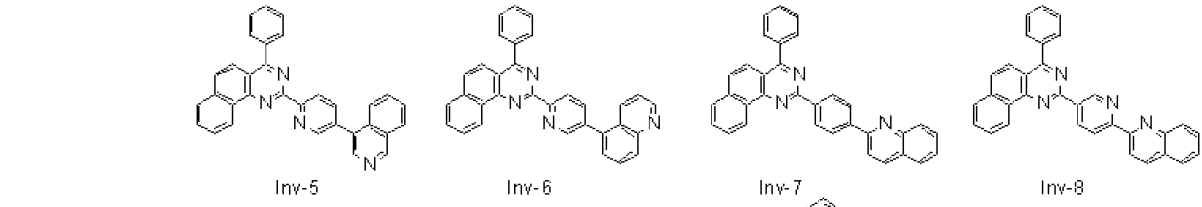
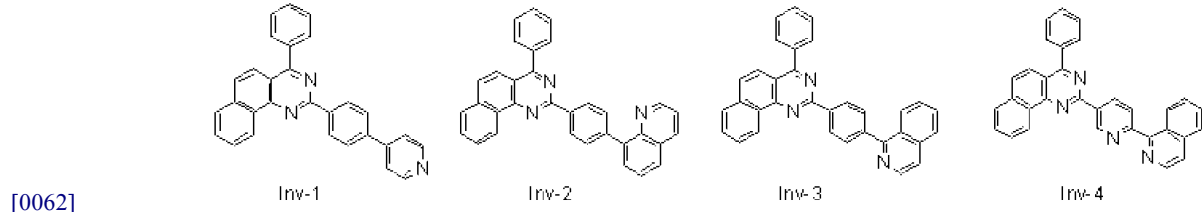
- [0047] 또한, 상기 L^1 및 L^2 를 선택적으로 조절하여 화합물 전체의 공액(conjugation) 길이를 결정할 수 있으며, 이로부 터 삼중항(triplet) 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다. 이를 통해 유기광전자소자에서 필요로 하는 재료의 특성을 구현해 낼 수 있다. 또한, 올소, 파라, 메타의 결합위치 변경을 통해서도 삼중항 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다.
- [0048] 상기 L^1 및 L^2 의 구체적인 예로는 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 테페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트릴렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 p-테페닐기, 치환 또는 비치환된 m-테페닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기 등이다.
- [0049] 보다 구체적으로, 상기 L^1 및 L^2 은 서로 독립적으로, 페닐렌기일 수 있다. 상기 L^1 내지 L^3 가 페닐렌기인 경우, 상기 페닐렌기를 기준으로 양측 코어 부분은 오쏘, 메타 또는 파라로 결합될 수 있다.
- [0050] 보다 구체적으로, 상기 L^1 및 L^2 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기일 수 있다. 상기 L^1 및 L^2 가 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기인 경우, 높은 내열성을 가질 수 있으며, 전자 이동도가 개선될 수 있다.
- [0051] 보다 구체적으로, 상기 L^1 은 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, n1은 1 내지 5 중 어느 하나의 정수일 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.
- [0052] 상기 Ar^2 는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고, 상기 Ar^1 은 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다. 즉, Ar^1 및 Ar^2 의 치환기를 조절하여 전체 화합물의 전자 특성을 제어할 수 있다. 보다 구체적으로 전체 화합물의 HOMO 및 LUMO 에너지 및 다이폴 모먼트(dipole moment), 분자량 등을 조절하여 인접한 층과의 에너지 차이를 줄여 소자내 구동전압을 개선시킬 수 있다.
- [0053] 보다 구체적으로, 상기 Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 융합 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 융합 헤테로아릴기일 수 있다. 이러한 경우, 융합 고리로 인해 분자의 내열성이 개선될 수 있으며, 이와 동시에 전자 이동도도 개선될 수 있다.
- [0054] 보다 구체적인 예를 들어, 상기 Ar^1 은 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기 또는 치환 또는 비치환된 페난트레닐기일 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.
- [0055] 상기 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 어느 하나는, 전자 특성을 가지는, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.
- [0056] 보다 구체적인 예를 들어, 상기 전자 특성을 가지는, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기는, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 테트라졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사다리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 싸이아트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 퓨리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프피리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴리닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페나지닐기일 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.
- [0057] 다만, 보다 구체적인 예를 들어, 상기 전자 특성을 가지는, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기는, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 또는 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기일 수 있다. 이러한 경우, 적절한 에너지 밴드갭(energy band gap)을 가지면서 전자 이동도가 향상되어 소자의 효율 및 수명이 개선될 수 있다.
- [0058] 보다 구체적인 예를 들어, 상기 전자 특성을 가지는, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기는 하기 화

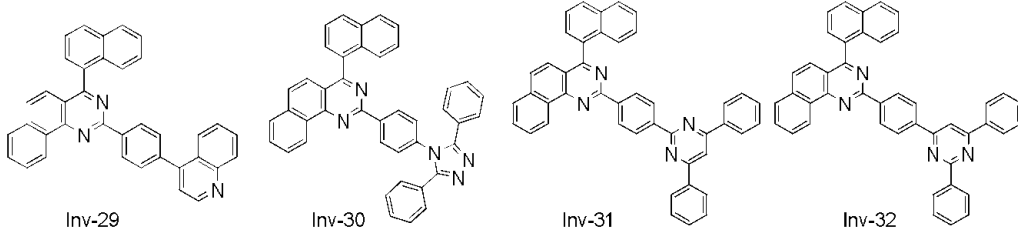
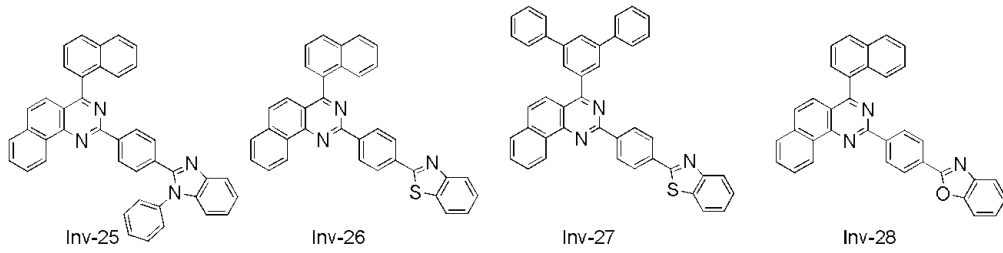
학식 E-1 내지 E-5 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0059] [화학식 E-1] [화학식 E-2] [화학식 E-3] [화학식 E-4] [화학식 E-5]

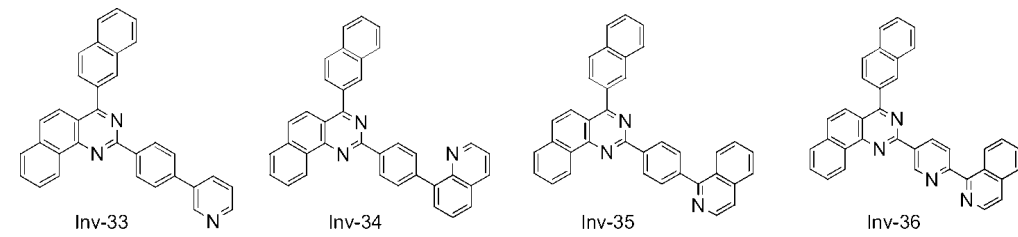


[0061] 구체적인 예를 들어, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화합물 중 어느 하나일 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

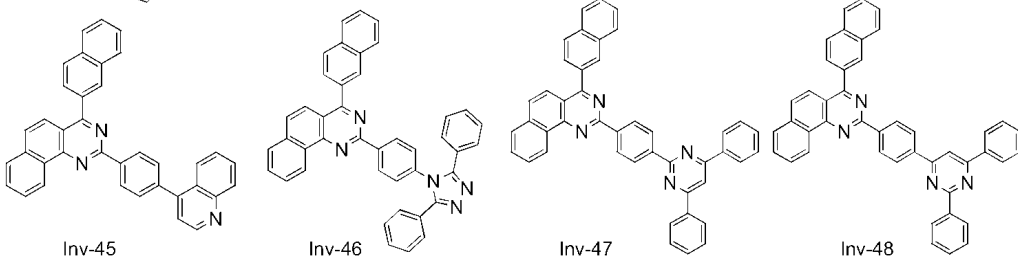
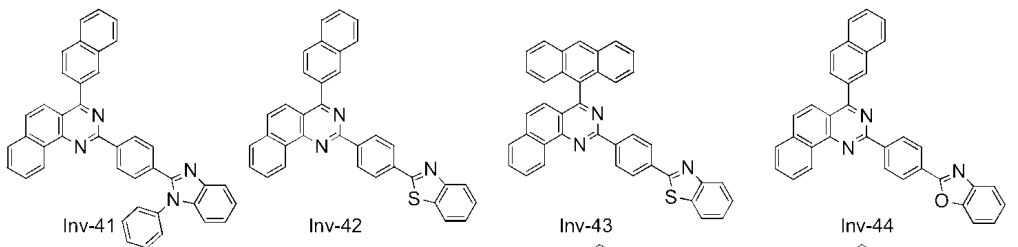
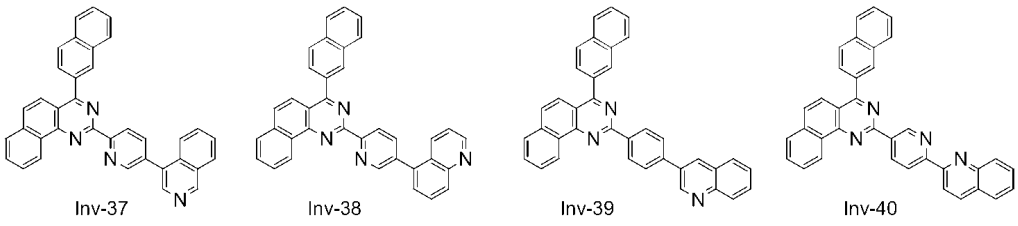




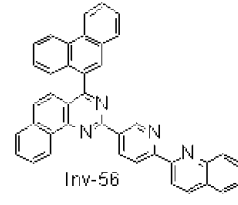
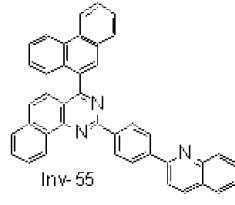
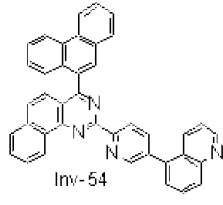
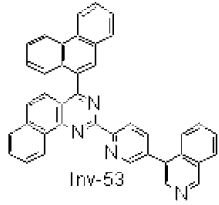
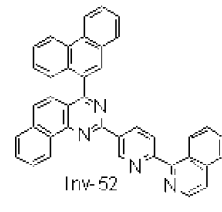
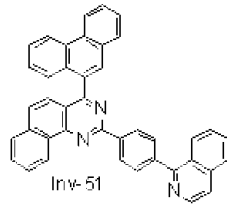
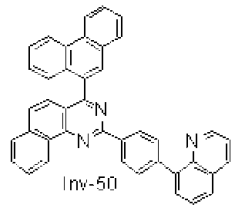
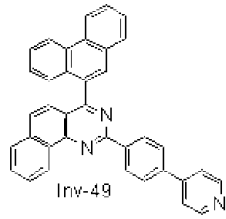
[0066]



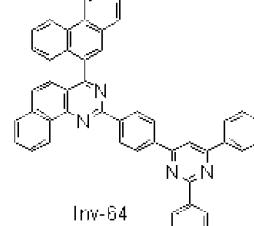
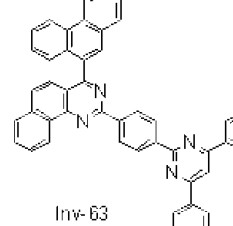
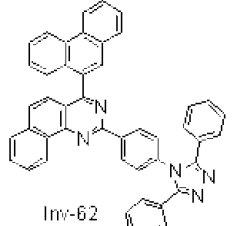
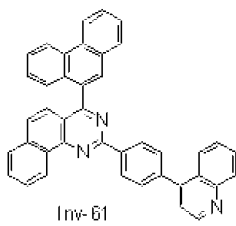
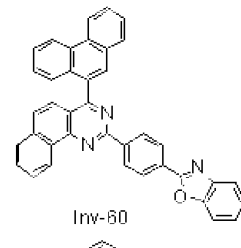
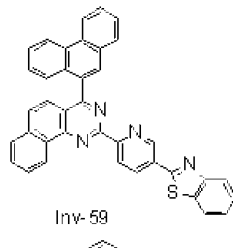
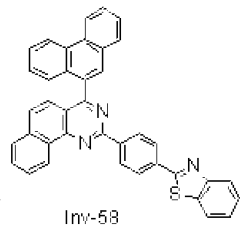
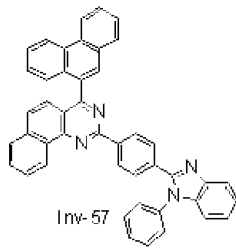
[0067]



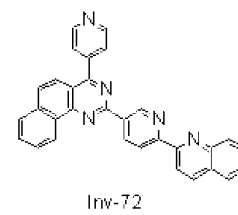
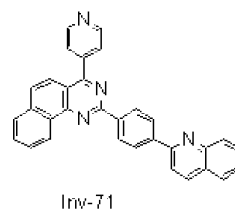
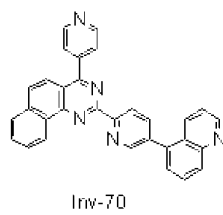
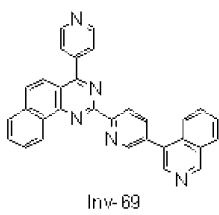
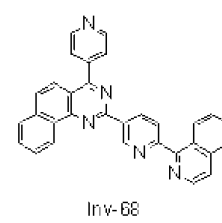
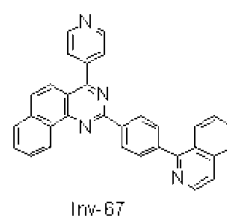
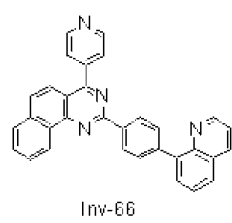
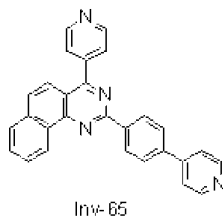
[0068]



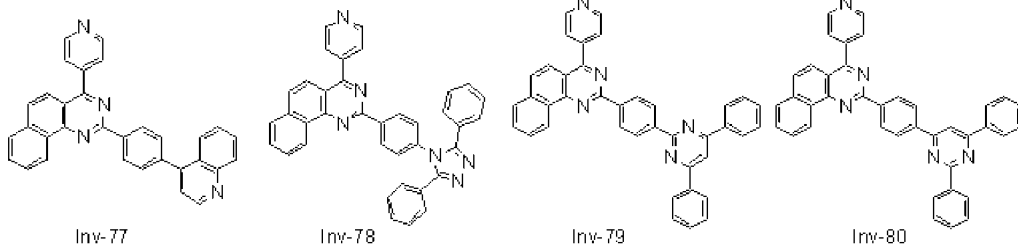
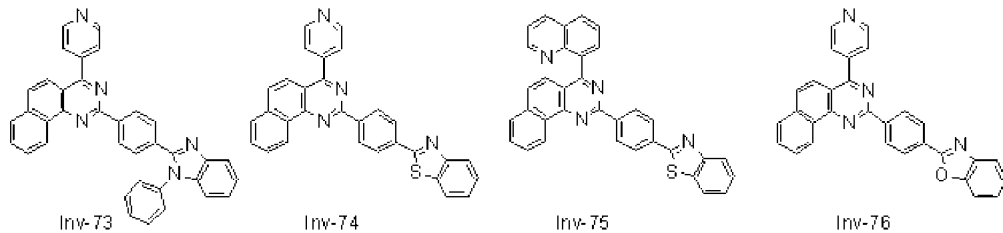
[0069]



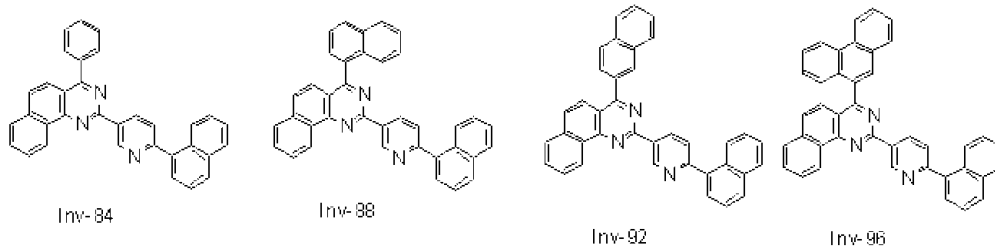
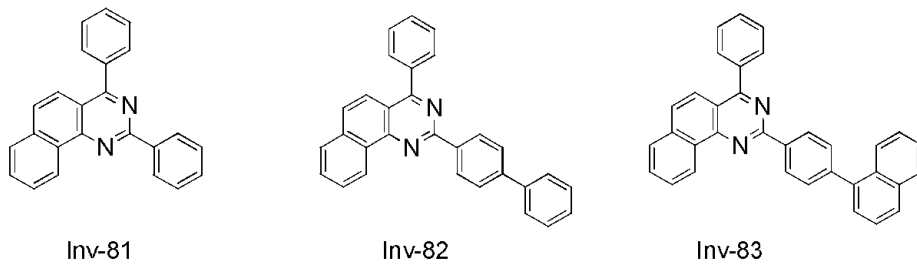
[0070]



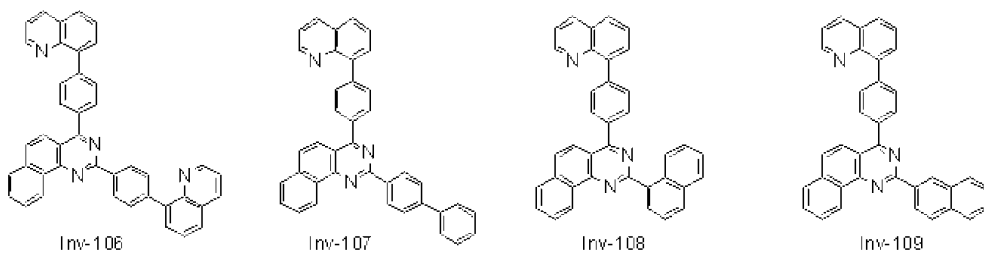
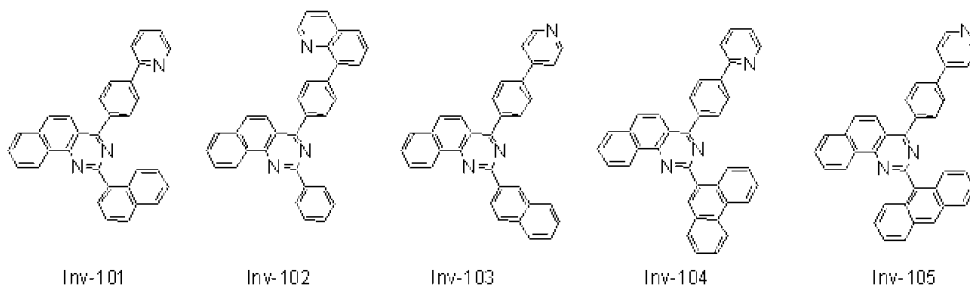
[0071]



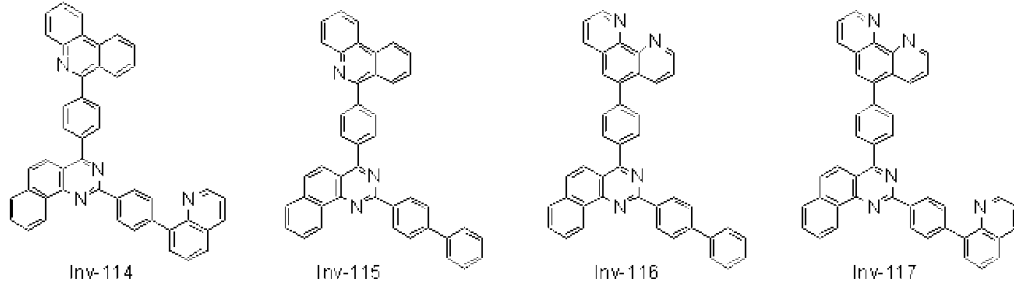
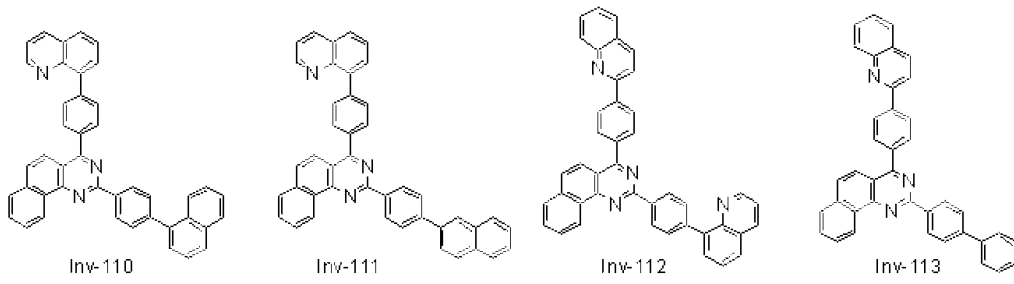
[0072]



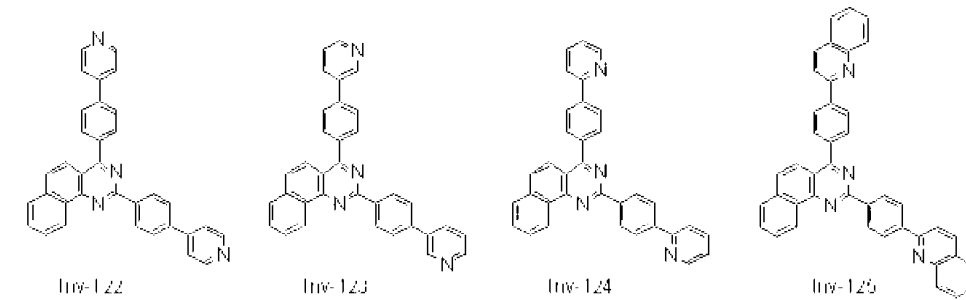
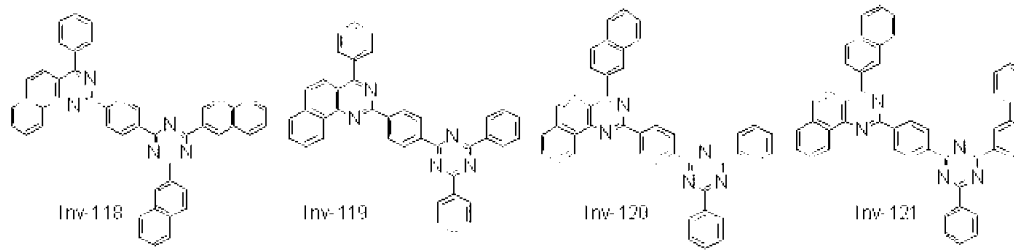
[0073]



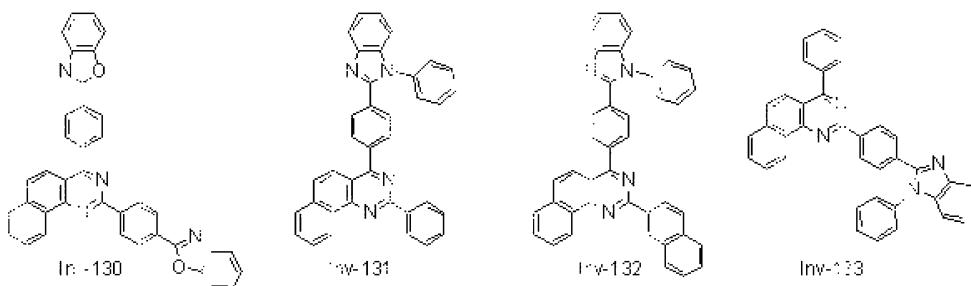
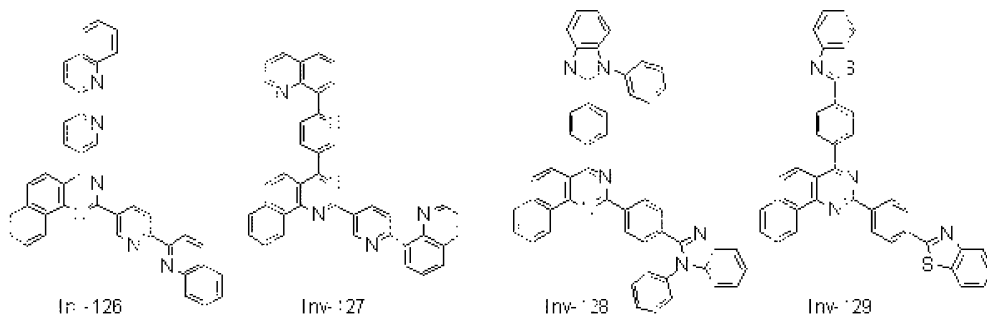
[0074]



[0075]



[0076]



[0077]

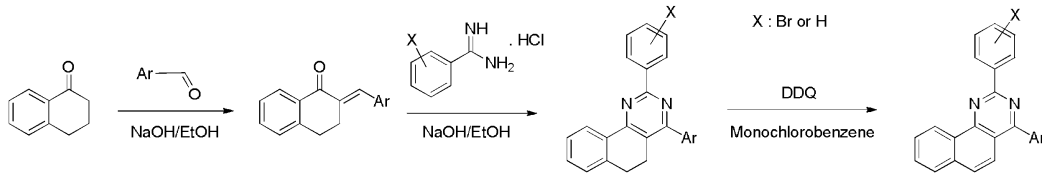
- [0078] 본 발명의 다른 일 구현예에서는, 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 한 층 이상의 유기박막층을 포함하고, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 것인 유기광전자소자를 제공한다.
- [0079] 상기 유기광전자소자용 화합물은 유기박막층에 사용되어 유기광전자소자의 수명 특성, 효율 특성, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성을 향상시키며, 구동전압을 낮출 수 있다.
- [0080] 상기 유기박막층은 구체적으로, 전자주입층 또는 전자수송층일 수 있다.
- [0081] 상기 유기광전자소자는 유기발광소자, 유기광전소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 또는 유기메모리소자일 수 있다.
- [0082] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자는 유기발광소자일 수 있다. 도 1 내지 도 5는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 유기발광소자의 단면도이다.
- [0083] 도 1 및 도 2를 참조하면, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기발광소자(100 및 200)는 양극(120), 음극(110) 및 이 양극과 음극 사이에 개재된 적어도 1층의 유기박막층(105)을 포함하는 구조를 갖는다.
- [0084] 상기 양극(120)은 양극 물질을 포함하며, 이 양극 물질로는 통상 유기박막층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일 함수가 큰 물질이 바람직하다. 상기 양극 물질의 구체적인 예로는 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금을 들 수 있고, 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물을 들 수 있고, ZnO와 Al 또는 SnO₂와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합을 들 수 있고, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리(3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜)(polyethylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 보다 구체적으로, 상기 양극으로 ITO(indium tin oxide)를 포함하는 투명전극을 사용할 수 있다.
- [0085] 상기 음극(110)은 음극 물질을 포함하여, 이 음극 물질로는 통상 유기박막층으로 전자주입이 용이하도록 일 함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금을 들 수 있고, LiF/Al, LiO₂/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF₂/Ca과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 보다 구체적으로, 상기 음극으로 알루미늄 등과 같은 금속전극을 사용할 수 있다.
- [0086] 먼저 도 1을 참조하면, 도 1은 유기박막층(105)으로서 발광층(130)만이 존재하는 유기발광소자(100)를 나타낸 것으로, 상기 유기박막층(105)은 발광층(130)만으로 존재할 수 있다.
- [0087] 도 2를 참조하면, 도 2는 유기박막층(105)으로서 전자수송층을 포함하는 발광층(230)과 정공수송층(140)이 존재하는 2층형 유기발광소자(200)를 나타낸 것으로, 도 2에 나타난 바와 같이, 유기박막층(105)은 발광층(230) 및 정공 수송층(140)을 포함하는 2층형일 수 있다. 이 경우 발광층(130)은 전자 수송층의 기능을 하며, 정공 수송층(140)은 ITO와 같은 투명전극과의 접합성 및 정공수송성을 향상시키는 기능을 한다.
- [0088] 도 1 및 도2의 유기박막층(105)는 도시하지는 않았지만 전자주입층, 보조전자수송층, 전자수송층, 정공수송층, 보조정공수송층, 정공주입층 및 이들의 조합층을 추가로 더 포함할 수 있다.
- [0089] 상기 도 1 및 도 2에서 상기 유기박막층(105)을 이루는), 발광층(130, 230), 정공 수송층(140), 도시하지는 않았지만 추가로 포함할 수 있는 전자주입층, 보조전자수송층, 전자수송층, 정공주입층, 보조정공수송층, 정공 수송층 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나는 상기 유기광전자소자용 재료를 포함한다.
- [0090] 상기에서 설명한 유기발광소자는, 기판에 양극을 형성한 후, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금 및 이온도금과 같은 건식성막법; 또는 스핀코팅(spin coating), 침지법(dipping), 유동코팅법(flow coating)과 같은 습식성막법 등으로 유기박막층을 형성한 후, 그 위에 음극을 형성하여 제조할 수 있다.
- [0091] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 상기 유기광전자소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

[0092] **실시예**

[0093] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

[0094] 본 발명의 실시예에 따른 화합물에서, 출발물질(예를 들어, 화학식 A 내지 D)의 합성 반응식은 하기 반응식 1과 같다.

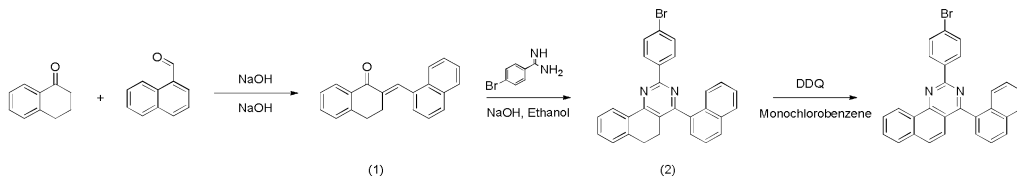
[0095] [반응식 1]



[0096]

[0097] **[합성예 1] 화학식(A)의 합성**

[0098] [반응식 2]



[0099]

[0100] 둥근 바닥 플라스크에 테라론(tetralone) 50 g (342.0206 mmol) 과 1-나프탈알데히드(1-naphthaldehyde) 53.41 g (342.0206 mmol), 수산화나트륨(sodium hydroxide) 20.52 g (513.0309 mmol) 을 에탄올 1000 ml에 넣은 후 12시간 상온에서 교반 한다. 반응 종료 후 생성된 고체를 분리하고 에탄올로 세척/건조 하여 화학식(1) 71 g (Yield 73%) 을 수득하였다.

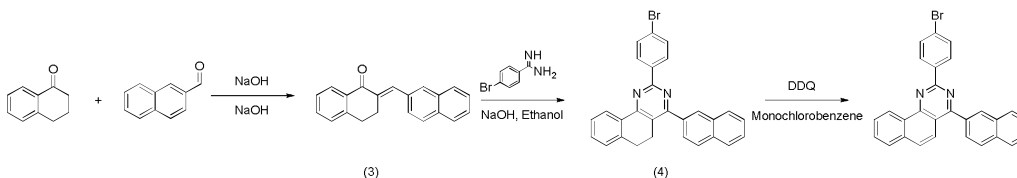
[0101] 둥근 바닥 플라스크에 화학식 (1) 71 g (249.69 mmol) 과 4-브로모벤즈아미딘 하이드로클로라이드(4-bromobenzamide hydrochloride) 58.8 g (249.69 mmol), 수산화나트륨(sodium hydroxide) 29.96 g (709.07 mmol)을 에탄올 1L 에 넣은 후 12시간 동안 환류 교반 한다. 반응 종료 후 생성된 고체를 분리한 후 에탄올로 세척/건조 하여 화학식(2) 50 g (43% yield)을 수득하였다.

[0102] 상기 합성에서 얻어진 화학식 (2) 50 g (107.907 mmol) 과 2,3-디클로로-5,6-디시아노-p-벤조퀴논(2,3-dichloro-5,6-dicyano-p-benzoquinone) 73.5 g (323.72 mmol)을 넣은 후 모노클로로벤젠(monochlorobenzene) 500 ml에 현탁 시킨 후 12시간 동안 환류 교반 한다. 반응 종료 후 상온으로 냉각 시키고 실리카겔을 이용하여 분리한 후 여액을 농축 하고 톨루엔에 재결정 하여 목적 화합물인 화합물(A) 43 g (yield 86%)을 수득하였다.

[0103] calcd. C₆₂H₄₀N₆: C, 72.89; H, 3.71; N, 6.07; found: C, 72.78; H, 3.57; N, 5.91

[0104] **[합성예 2] 화학식(B)의 합성**

[0105] [반응식 3]



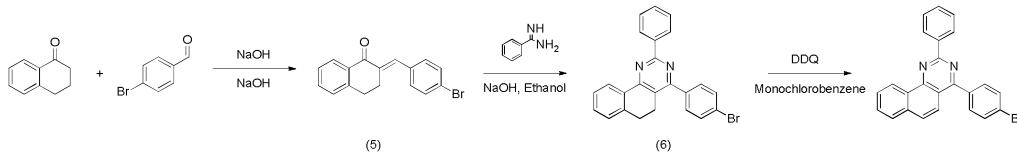
[0106]

[0107] 합성예 1에서 합성한 화학식 (A)의 합성에서 1-나프탈알데히드(1-naphthaldehyde) 대신 2-나프탈알데히드(2-naphthaldehyde)를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 합성을 진행 하여 목적 화합물인 화학식 (B) 41 g 을 수득 하였다.

[0108] calcd. C₆₂H₄₀N₆: C, 72.89; H, 3.71; N, 6.07; found: C, 72.51; H, 3.94; N, 6.21

[0109] **[합성예3] 화학식(C)의 합성**

[0110] [반응식 4]



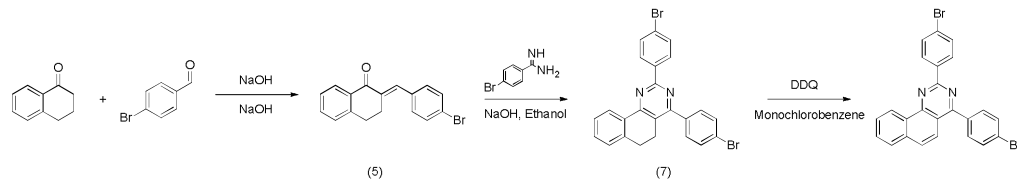
[0111]

[0112] 합성예 1에서 합성한 화학식 (A)의 합성에서 1-나프탈알데히드(1-naphthaldehyde) 대신 4-브로모벤즈알데히드(4-bromobenzaldehyde) 및 4-브로모벤즈아미딘(4-bromobenzamidine) 대신 벤즈아미딘(benzamidine)을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 합성을 진행 하여 목적 화합물인 화학식 (C) 23 g 을 수득하였다.

[0113] calcd. C₆₂H₄₀N₆: C, 70.09; H, 3.68; N, 6.81; found: C, 69.89; H, 3.72; N, 6.86

[0114] **[합성예4] 화학식(D)의 합성**

[0115] [반응식 5]



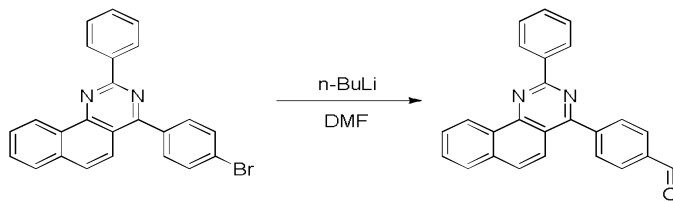
[0116]

[0117] 합성예 3에서 합성한 화학식 (C)의 합성에서 벤즈아미딘(benzamidine) 대신 4-브로모벤즈아미딘(4-bromobenzamidine)을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 합성을 진행 하여 목적 화합물인 화학식 (D) 25 g 을 수득하였다.

[0118] calcd. C₆₂H₄₀N₆: C, 58.81; H, 2.88; N, 5.71; found: C, 58.62; H, 2.76; N, 5.93

[0119] **[합성예5] 화학식(E)의 합성**

[0120] [반응식 6]



[0121]

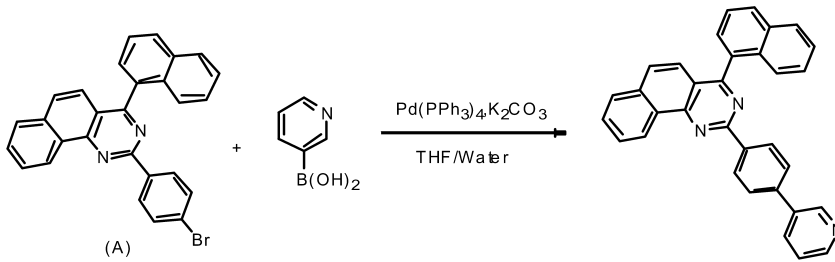
[0122] 합성예 3에서 합성한 화합물 (C) 20 g (48.62 mmol) 을 테트라하이드로퓨란(tetrahydrofuran) 400 ml에 현탁 시킨 후 -78℃를 유지 시킨다. 상기 온도에서 n-BuLi(2.5M in Hex) 3.73 g (58.35 mmol)을 천천히 반응액에 적하 시킨 후 -78℃ 에서 1시간 및 상온에서 1시간 동안 교반한다. 다시 -78℃ 로 유지 시킨 후 N,N-디메틸포름아미드(N,N-dimethylformamide) 10.66 g (145.86 mmol)을 첨가 한 후 상온에서 12시간 교반한다. 반응 종료 후 증류수 200 ml를 첨가 하여 1시간 교반 하고 추출 및 유기층을 농축 하고 실리카겔 칼럼 크로마토그래피로 분리 하여 목적 화합물인 화합물 (E) 11 g (Yield : 63%) 을 수득하였다.

[0123] calcd. C₆₂H₄₀N₆: C, 83.31; H, 4.47; N, 7.77; found: C, 83.18; H, 4.53; N, 7.39

[0124] (유기광전자소자용 화합물의 제조)

[0125] 실시예 1: Inv-17로 표시되는 화합물의 합성

[0126] [반응식 7]



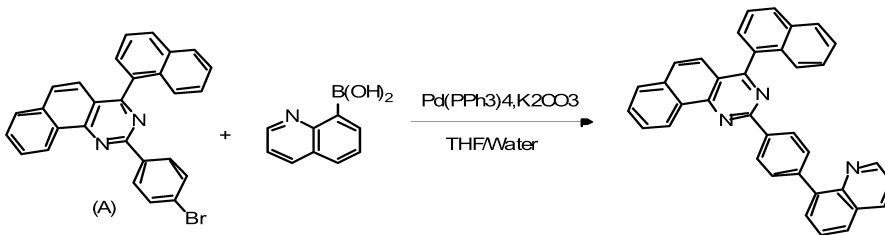
[0127]

[0128] 화학식 (A) 14.49 g (31.4078 mmol), 3-피리딘 보론산(pyridine boronic acid(Aldrich 社) 4.63 g (37.6894 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 1.09 g (0.9422 mmol), 포타슘 카보네이트(potassium carbonate) 8.68 g (62.8156 mmol) 을 THF 160 ml 증류수 80 ml에 현탁시킨 후 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 생성물을 추출 및 농축하고 실리카겔 컬럼 크로마토그래프로 분리한 후 톨루엔으로 재결정하여 목적 화합물인 Inv-17 11 g (76% yield) 을 획득 하였다.

[0129] calcd. C₆₂H₄₀N₆: C, 86.25; H, 4.61; N, 9.14; found: C, 85.93; H, 4.82; N, 9.55

[0130] 실시예 2: Inv-18로 표시되는 화합물의 합성

[0131] [반응식 8]



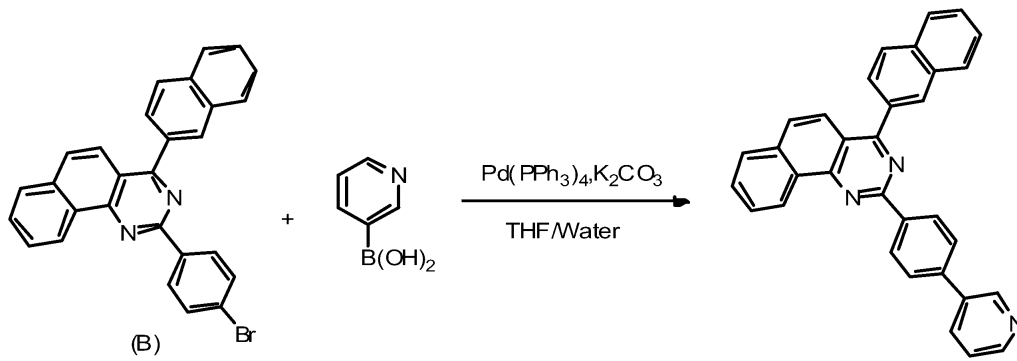
[0132]

[0133] 화학식 (A) 7.35 g (15.9315 mmol), 8-퀴놀린 보론산(quinoline boronic acid) 3.31 g (19.1178 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 0.55 g (0.4779 mmol), 포타슘 카보네이트(potassium carbonate) 4.40 g (31.8630 mmol) 을 THF 150 ml 증류수 70 ml에 현탁시킨 후 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 생성물을 추출 및 농축하고 실리카겔 컬럼 크로마토그래프로 분리한 후 톨루엔으로 재결정하여 목적 화합물인 Inv-18 4.5 g (55% yield)을 획득 하였다.

[0134] calcd. C₆₂H₄₀N₆: C, 87.21; H, 4.55; N, 8.25; found: C, 87.11; H, 4.63; N, 8.17

[0135] 실시예 3: Inv-33으로 표시되는 화합물의 합성

[0136] [반응식 9]



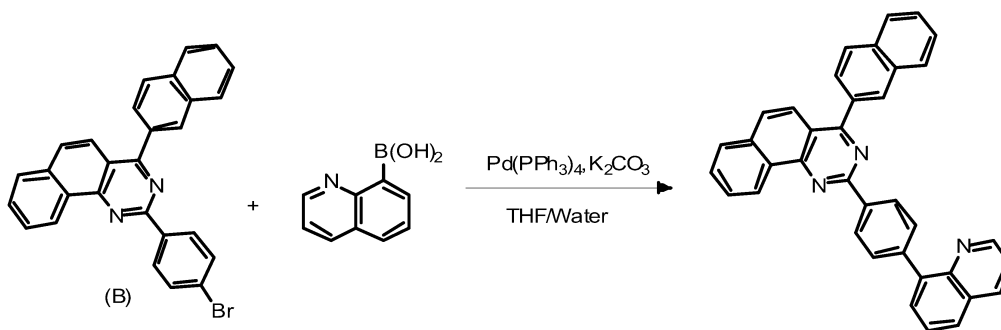
[0137]

[0138] 화학식 (B) 14.49 g (31.4078 mmol), 3-피리딘 보론산(pyridine boronic acid) 4.63 g (37.6894 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 1.09 g (0.9422 mmol), 포타슘 카보네이트(potassium carbonate) 8.68 g (62.8156 mmol) 을 THF 160 ml 증류수 80 ml에 현탁 시킨 후 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 상온으로 냉각시킨 후 생성된 고체를 분리하고 증류수 및 메틸알코올로 세척 하였다. 상기 고체를 모노클로로벤젠 130 ml에 가열 용해 시킨 후 숯(charcoal)을 첨가 시킨 후 30분간 가열 교반 하였다. 상기 반응액을 실리카겔로 고온 분리하여, 여액에서 생성된 고체를 분리하고 메틸알코올로 세척하여 목적 화합물인 Inv-33 6.12 g (42% yield)을 획득 하였다.

[0139] calcd. C₆₂H₄₀N₆: C, 86.25; H, 4.61; N, 9.14; found: C, 85.98; H, 4.49; N, 9.35

[0140] 실시예 4: Inv-34로 표시되는 화합물의 합성

[0141] [반응식 10]



[0142]

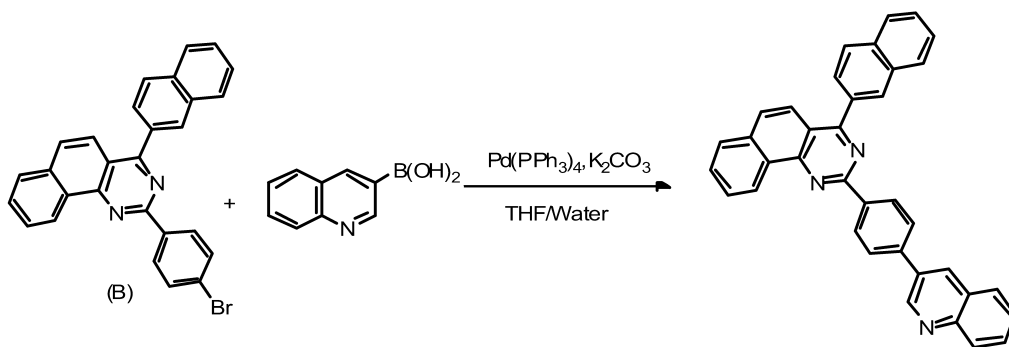
[0143] 화학식 (B) 10 g (21.6755 mmol), 8-퀴놀린 보론산(quinoline boronic acid) 4.12 g (23.8431 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 1.25 g (1.0838 mmol), 포타슘 카보네이트(potassium carbonate) 6.00 g (43.3510 mmol) 을 THF 200 ml 증류수 100 ml에 현탁 시킨 후 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 상온으로 냉각시킨 후 생성된 고체를 분리하고 증류수 및 메틸알코올로 세척 하였다. 상기 고체를 모노클로로벤젠 100 ml에 가열 용해 시킨 후 숯(charcoal)을 첨가 하여 30분간 가열 교반 하였다. 상기 반응액을 실리카겔로 고온 분리한 후, 메틸 알코올 400 ml를 첨가하여 1 시간 교반 한 후, 생성된 고체를 분리하고 메틸알코올로 세척하여 목적 화합물인 Inv-34 7.1 g (64% yield)을 획득 하였다.

[0144] calcd. C₆₂H₄₀N₆: C, 87.21; H, 4.55; N, 8.25; found: C, 87.63; H, 4.79; N, 8.04

[0145]

[0146] 실시예 5: Inv39로 표시되는 화합물의 합성

[0147] [반응식 11]



[0148]

[0149] 화학식 (B) 8.7 g (18.8577 mmol), 3-퀴놀린 보론산(quinoline boronic acid, Ruiyuan Group), 3.91 g (22.6292 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 0.65 g (0.5657 mmol), 포타슘 카보네이트(potassium carbonate) 5.21 g (37.7154 mmol)을 THF 170 ml 증류수 80 ml에 현탁 시킨 후 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 상온으로 냉각시킨 후 생성된 고체를 분리하고 증류수 및 메틸알코올로 세척 하였다. 상기 고체를

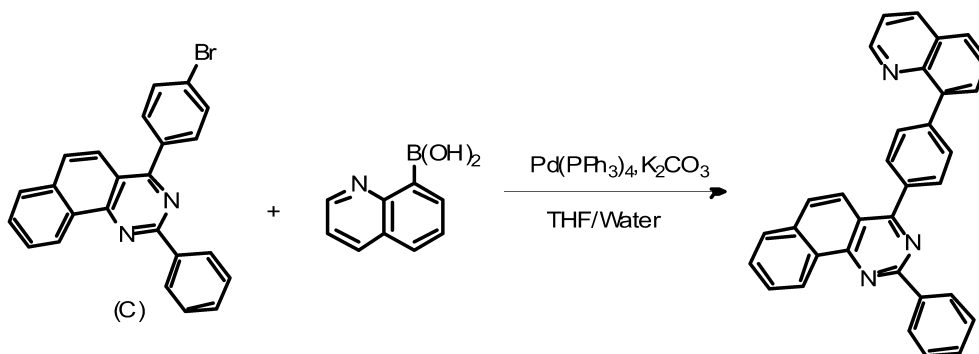
[0150] o-디클로로벤젠(dichlorobenzene) 240 ml에 가열 용해 시킨 후 숯(charcoal)을 첨가 하여 30분간 가열 교반 하였다. 상기 반응액을 실리카겔로 고온 분리하여, 상온으로 냉각 시킨 후 생성된 고체를 분리한 후 메틸알코올로 세척하여 목적 화합물인 Inv-39 7.1 g (74% yield)을 획득 하였다.

[0151] calcd. C₂₂H₁₄N₆: C, 87.21; H, 4.55; N, 8.25; found: C, 87.52; H, 4.36; N, 8.12

[0152]

[0153] **실시예 6: Inv-102로 표시되는 화합물의 합성**

[0154] [반응식 12]



[0155]

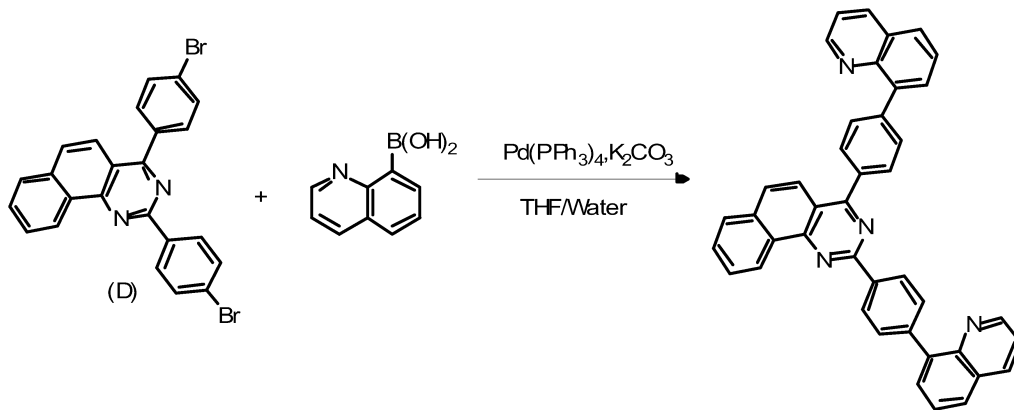
[0156] 화학식 (C) 20 g (48.6275 mmol), 8-퀴놀린 보론산(quinoline boronic acid) 10.09 g (58.3530 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 1.7 g (1.4588 mmol), 포타슘 카보네이트(potassium carbonate) 13.44 g (97.2550 mmol)을 THF 250 ml 증류수 80 ml에 현탁 시킨 후 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 상온으로 냉각시킨 후 생성된 고체를 분리하고 증류수 및 메틸알코올로 세척 하였다. 상기 고체를 모노클로로벤젠 300 ml에 가열 용해 시킨 후 숯(charcoal)을 첨가 하여 30분간 가열 교반 하였다. 상기 반응액을 실리카겔로 고온 분리한 뒤 상온으로 냉각 시킨 후 생성된 고체를 분리한 후 메틸알코올로 세척하여 목적 화합물인 Inv-102 17.89 g (80% yield)을 획득 하였다.

[0157] calcd. C₂₂H₁₄N₆: C, 86.25; H, 4.61; N, 9.14; found: C, 86.17; H, 4.34; N, 9.02

[0158]

[0159] **실시예 7: Inv-106로 표시되는 화합물의 합성**

[0160] [반응식 13]



[0161]

[0162] 화학식 (D) 10 g (20.4003 mmol), 8-퀴놀린 보론산(quinoline boronic acid) 8.47 g (48.9606 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) 2.36 g (2.0400 mmol), 포타슘 카보네이트(potassium carbonate) 11.3 g (81.6012 mmol) 을 THF 200 ml 증류수 100 ml에 현탁 시킨 후 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 상온으로 냉각시킨 후 생성된 고체를 분리하고 증류수 및 메틸알코올로 세척 하였다. 상기 고체를

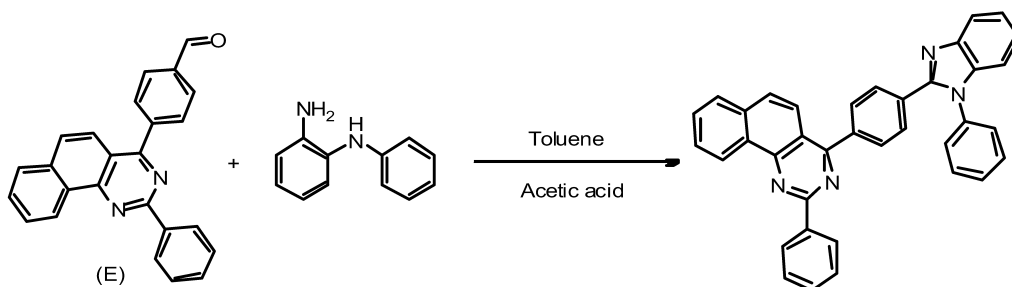
[0163] o-디클로로벤젠 300 ml에 가열 용해 시킨 후 숯(charcoal)을 첨가 하여 30분간 가열 교반 하였다. 상기 반응액을 실리카겔로 고온 분리한 뒤 상온으로 냉각 시킨 후 생성된 고체를 분리한 후 메틸알코올로 세척하여 목적 화합물인 Inv-106 9.65 g (81% yield)을 획득 하였다.

[0164] calcd. C₆₂H₄₀N₆: C, 85.98; H, 4.47; N, 9.55; found: C, 85.81; H, 4.35; N, 9.62

[0165]

[0166] 실시예 8: Inv-131로 표시되는 화합물의 합성

[0167] [반응식 14]



[0168]

[0169] 화학식 (E) 8.31 g (23.0570 mmol), N-페닐-o-페닐렌디아민 4.25 g (23.0570 mmol) 을 톨루엔 120 ml 및 아세트산 30 ml에 현탁 시킨 후 48시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 농축 하고 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 목적 화합물인 Inv-131 5.1 g (42% Yield)을 획득 하였다.

[0170] calcd. C₆₂H₄₀N₆: C, 84.71; H, 4.61; N, 10.68; found: C, 84.69; H, 4.67; N, 10.47

[0171] (유기발광소자의 제조)

[0172] 실시예 9

[0173] 양극으로는 ITO를 1000 Å의 두께로 사용하였고, 음극으로는 알루미늄 (Al) 을 1000 Å의 두께로 사용하였다.

[0174] 구체적으로, 유기발광소자의 제조방법을 설명하면, 양극은 15 Ω/cm²의 면저항 값을 가진 ITO 유리 기판을 50 mm × 50 mm × 0.7 mm의 크기로 잘라서 아세톤과 이소프로필알코올과 순수 물 속에서 각 5 분 동안 초음파 세정

한 후, 30 분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다.

[0175] 상기 유리 기판 상부에 정공주입층으로서 N1,N1'-(비페닐-4,4'-디일)비스(N1-(나프탈렌-2-일)-N4,N4-다이페닐벤젠-1,4-다이아민) 65 nm을 증착하였고, 이어서 정공수송층으로 N,N'-다이(1-나프틸)-N,N'-다이페닐벤지딘 40 nm을 증착하였다.

[0176] 발광층으로서 N,N,N',N'-테트라키스(3,4-다이메틸페닐)크라이센-6,12-다이아민 4 % 및 9-(3-(나프탈렌-1-일)페닐)-10-(나프탈렌-2-일)안트라센 96 %를 25 nm의 두께로 증착하였다.

[0177] 이어서, 전자수송층으로서 상기 실시예 1에서 제조된 화합물 30 nm을 증착하였다.

[0178] 상기 전자수송층 상부에 전자주입층으로서 Liq를 0.5 nm의 두께로 진공 증착하고, Al를 100 nm의 두께로 진공 증착하여, Liq/Al 전극을 형성하였다.

[0179]

[0180] **실시예 10**

[0181] 전자수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 2에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 9와 동일하게 실시하여 유기발광소자를 제작하였다.

[0182]

[0183] **실시예 11**

[0184] 전자수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 3에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 9와 동일하게 실시하여 유기발광소자를 제작하였다.

[0185] **실시예 12**

[0186] 전자수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 4에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 9와 동일하게 실시하여 유기발광소자를 제작하였다.

[0187] **실시예 13**

[0188] 전자수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 5에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 9와 동일하게 실시하여 유기발광소자를 제작하였다.

[0189] **실시예 14**

[0190] 전자수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 6에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 9와 동일하게 실시하여 유기발광소자를 제작하였다.

[0191] **실시예 15**

[0192] 전자수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 7에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 9와 동일하게 실시하여 유기발광소자를 제작하였다.

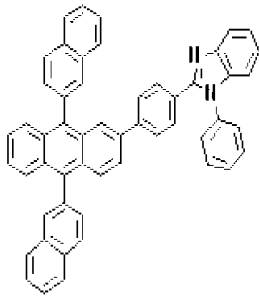
[0193] **실시예 16**

[0194] 전자수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 8에서 제조된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 9와 동일하게 실시하여 유기발광소자를 제작하였다.

[0195] **비교예 1**

[0196] 전자수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 하기의 화학식 R-1의 화합물을 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 9과 동일하게 실시하여 유기발광소자를 제작하였다.

[0197] [화학식 R-1]



[0198]

[0199] (유기발광소자의 성능 측정)

[0200] 상기 실시예 9 내지 16 및 비교예 1에서 제조된 각각의 유기발광소자에 대하여 압에 따른 전류밀도 변화, 휘도 변화 및 발광효율을 측정하였다. 구체적인 측정방법은 다음과 같고, 그 결과는 하기 표 1에 나타내었다

[0201] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[0202] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0 V 부터 10 V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[0203] (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

[0204] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0 V 부터 10 V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

[0205] (3) 발광효율 측정

[0206] 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 밝기(1000 cd/m²)의 전류 효율(cd/A) 및 전력 효율(lm/W)을 계산하였다.

표 1

[0207]

	휘도 500 cd/m ²				
	구동전압 (V)	발광 효율 (cd/A)	전력 효율 (lm/W)	CIE 색도도	
				x	y
실시예 9	4.2	5.0	3.8	0.14	0.05
실시예 10	4.0	5.7	4.5	0.14	0.05
실시예 11	4.2	5.4	4.1	0.14	0.05
실시예 12	4.0	5.4	4.1	0.14	0.05
실시예 13	3.9	5.7	4.5	0.14	0.05
실시예 14	4.4	4.8	3.8	0.14	0.04
실시예 15	4.0	5.7	4.5	0.14	0.04
실시예 16	4.2	5.0	3.8	0.14	0.04
비교예 1	4.4	4.8	3.7	0.14	0.04

[0208] 상기 표 1에서 알 수 있듯이, 본 발명의 실시예의 유기발광소자의 경우 비교예 1에 비해 구동전압은 낮으면서 발광 효율 및 전력 효율이 우수한 것을 알 수 있었다.

[0209]

[0210] 본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하

는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

[0211]

100, 200 : 유기발광소자 110 : 음극

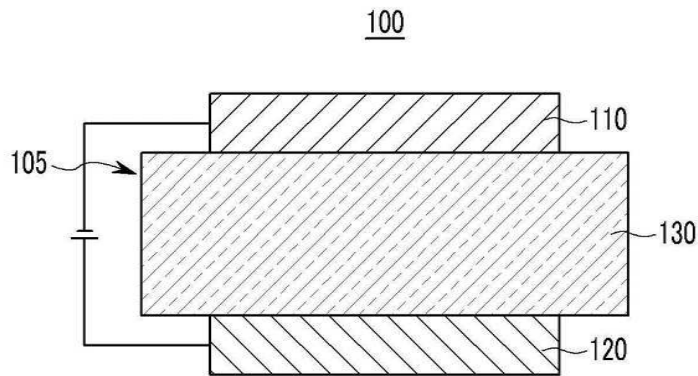
120 : 양극 105 : 유기박막층

130 : 발광층 140 : 정공 수송층

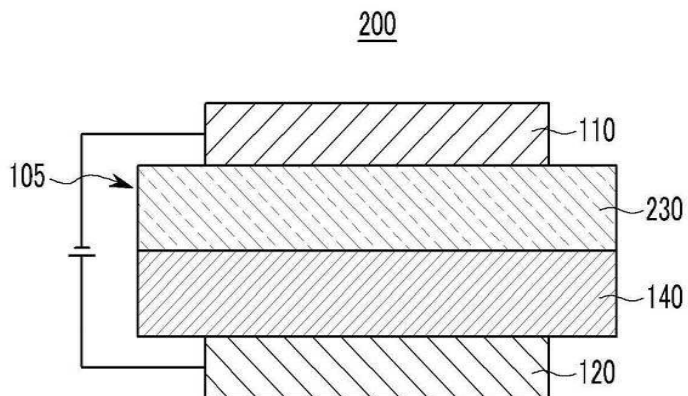
230 : 발광층

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	标题：用于有机光电子器件的化合物，包括其的有机发光器件，以及包含有机发光器件的表		
公开(公告)号	KR1020140087996A	公开(公告)日	2014-07-09
申请号	KR1020130128702	申请日	2013-10-28
[标]申请(专利权)人(译)	第一毛织株式会社		
申请(专利权)人(译)	第一毛织有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	第一毛织有限公司		
[标]发明人	SHIN CHANG JU 신창주 KANG DONG MIN 강동민 WON JONG WOO 원종우 LEE NAM HEON 이남헌 JEONG SOO YOUNG 정수영 JUNG HO KUK 정호국 CHAE MI YOUNG 채미영 KIM HYUN JUNG 김현정 JEONG WOO SEOK 정우석		
发明人	신창주 강동민 원종우 이남헌 정수영 정호국 채미영 김현정 정우석		
IPC分类号	C09K11/06 C07D401/10 C07D401/14 H01L51/50		
CPC分类号	C09K2211/1011 H01L51/5012 C09K2211/1033 C09K2211/1029 C09K2211/1059 C09K2211/1037 C09K2211/1044 C09K11/06 H01L51/0072 H01L51/5072 C07D401/14 C07D401/10 H01L27/3209 H01L51/0058 H01L51/0071 H01L51/5092		
优先权	1020120158172 2012-12-31 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及用于有机光电子器件的化合物，包括该化合物的有机发光器件，以及包括该有机发光器件的显示器件。 [化学式1]

100

