



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2016-0102142
(43) 공개일자 2016년08월29일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) C07D 405/04 (2006.01)
H01L 27/32 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
H01L 51/0069 (2013.01)
C07D 405/04 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2016-0104346(분할)
(22) 출원일자 2016년08월17일
심사청구일자 2016년08월17일
(62) 원출원 특허 10-2013-0067951
원출원일자 2013년06월13일
심사청구일자 2014년09월03일

(71) 출원인
제일모직주식회사
경상북도 구미시 구미대로 58 (공단동)
(72) 발명자
유동규
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)
유은선
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
팬코리아특허법인

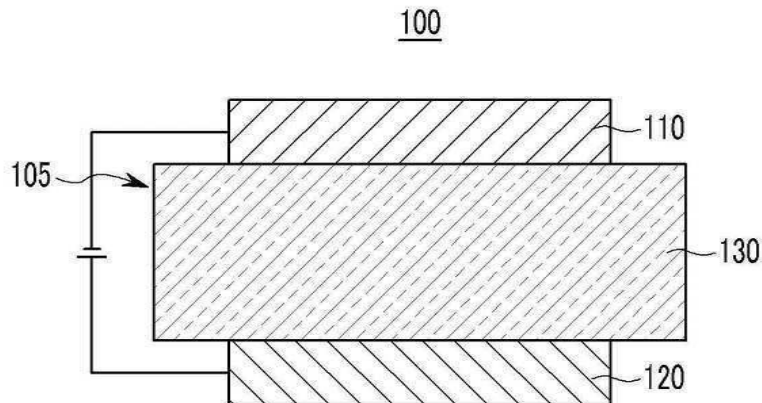
전체 청구항 수 : 총 15 항

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

(57) 요약

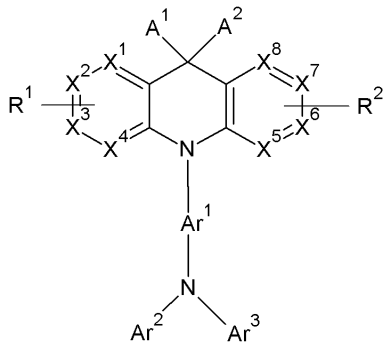
화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것으로, 하기 화학식 1 (뒷면에 계속)

대표도 - 도1



로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[화학식 1]



(52) CPC특허분류

H01L 27/3209 (2013.01)

H01L 51/0059 (2013.01)

H01L 51/0062 (2013.01)

H01L 51/0067 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

(72) 발명자

이한일

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

정성현

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

허달호

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

홍진석

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

류동완

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

채미영

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

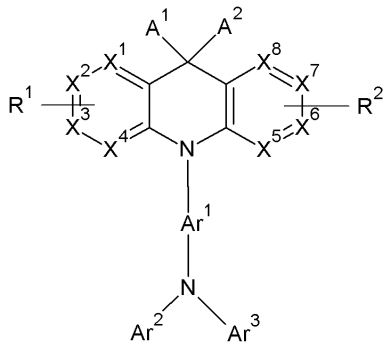
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X^1 내지 X^8 는 서로 독립적으로 CR^1 이고,

R^1 은 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 헤테로아릴기이고,

R^1 및 R^2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기이고,

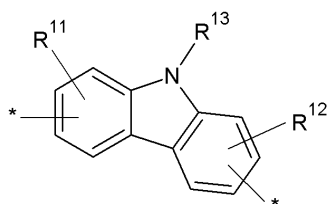
A^1 및 A^2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고,

A^1 및 A^2 는 서로 독립적으로 존재하거나, 인접한 치환기와 융합고리를 형성하고,

Ar^1 은 하기 화학식 d로 표시되고,

Ar^2 및 Ar^3 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[화학식 d]



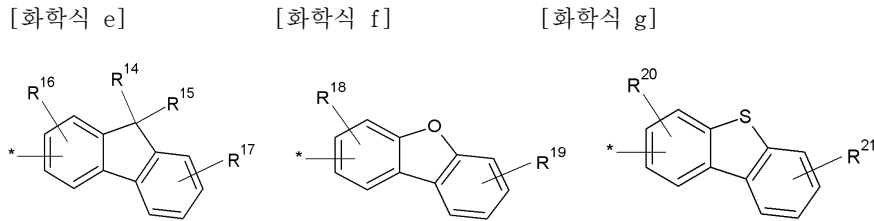
상기 화학식 d에서,

R¹¹ 내지 R¹³은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C10 트리플루오로 알킬기, 및 시아노기로 이루어진 군에서 선택된다.

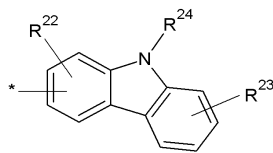
청구항 2

제1항에 있어서,

상기 Ar² 및 Ar³ 중 적어도 하나는 하기 화학식 e 내지 화학식 h로 이루어진 군에서 선택되는 화합물:



[화학식 h]



상기 화학식 e 내지 h에서,

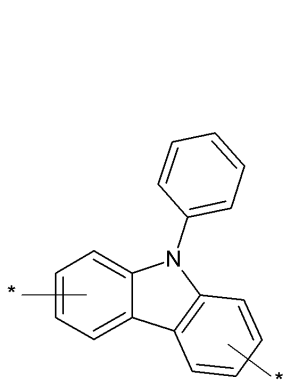
R¹⁴ 내지 R²⁴는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C10 트리플루오로 알킬기, 및 시아노기로 이루어진 군에서 선택된다.

청구항 3

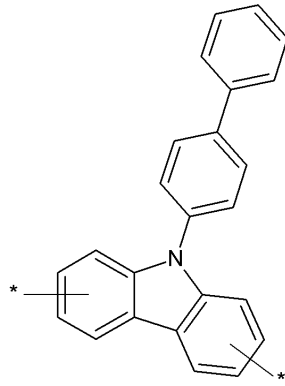
제1항 또는 제2항에 있어서,

상기 화학식 d는 하기 화학식 6 또는 화학식 7로 표시되고, 상기 화학식 e는 하기 화학식 8 또는 화학식 9로 표시되고, 상기 화학식 f는 하기 화학식 10으로 표시되고, 상기 화학식 g는 하기 화학식 11로 표시되고, 상기 화학식 h는 하기 화학식 12 또는 화학식 13으로 표시되는 화합물.



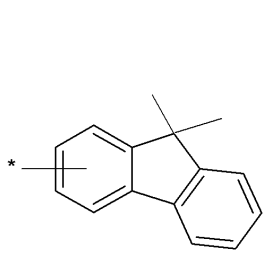


[화학식 8]

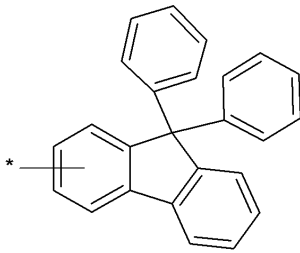


[화학식 9]

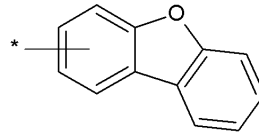
[화학식 10]



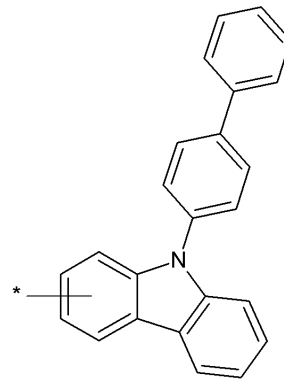
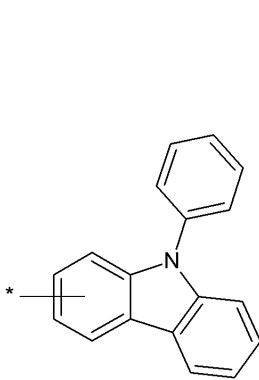
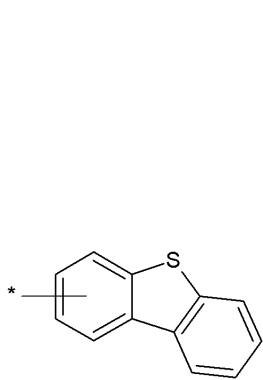
[화학식 11]



[화학식 12]



[화학식 13]



청구항 4

제1항에 있어서,

상기 화합물의 분자량은 500 내지 700인 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 R^1 및 R^2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기인 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 R¹¹ 내지 R¹³은 서로 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, C1 내지 C30 알킬기, 및 C6 내지 C30 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 R'은 수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기인 화합물.

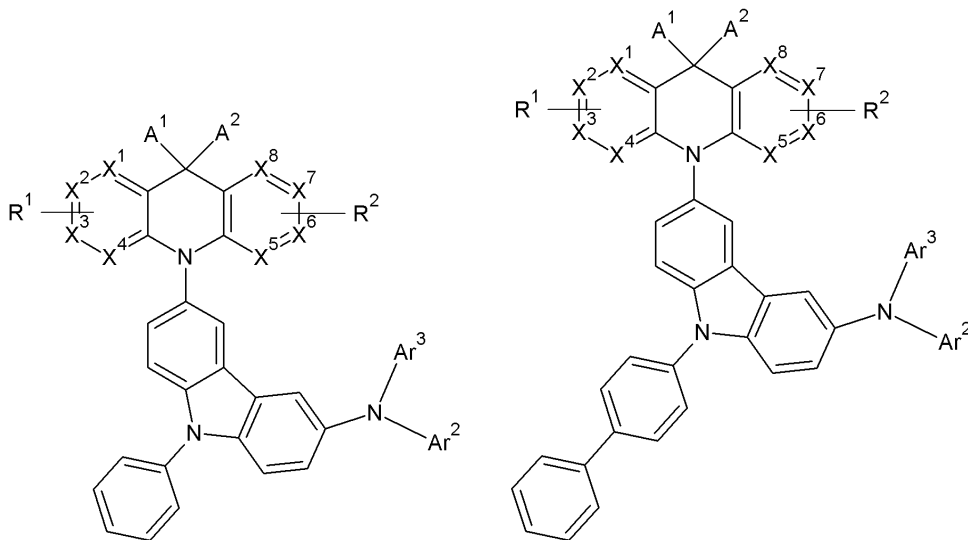
청구항 8

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 18 및 화학식 19로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 화합물.

[화학식 18]

[화학식 19]



청구항 9

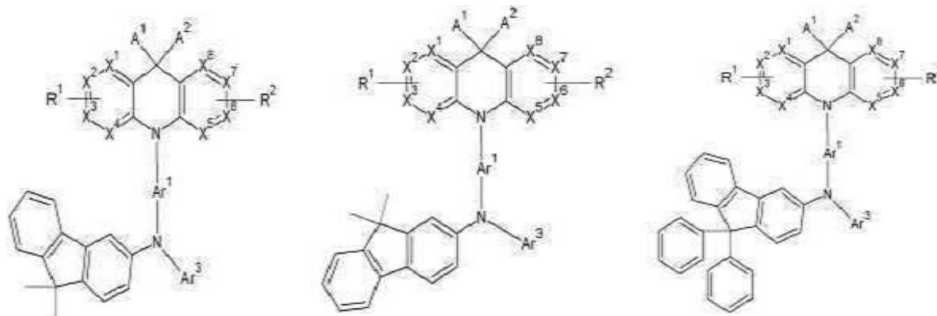
제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 20 내지 화학식 31로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 화합물.

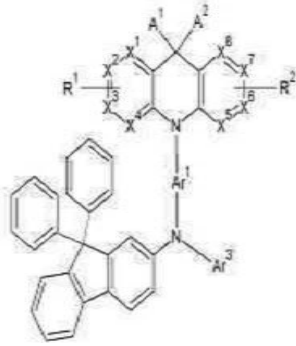
[화학식 20]

[화학식 21]

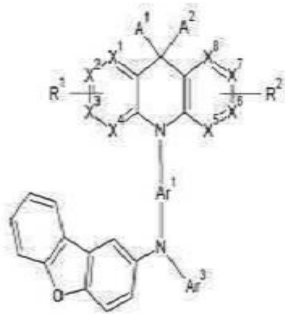
[화학식 22]



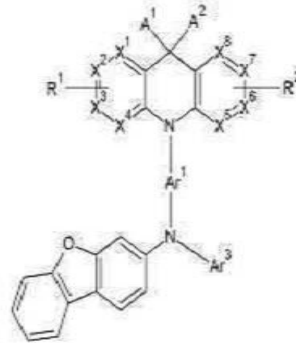
[화학식 23]



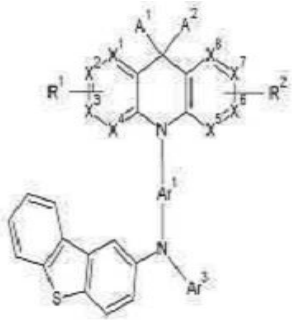
[화학식 24]



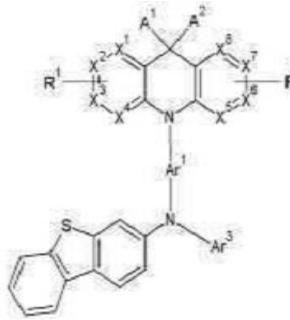
[화학식 25]



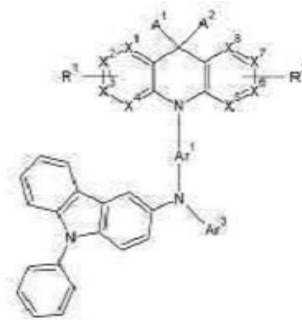
[화학식 26]



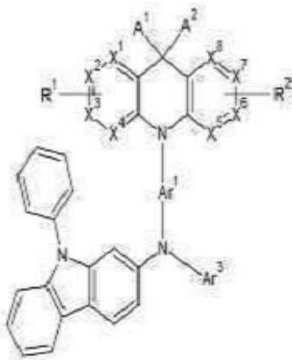
[화학식 27]



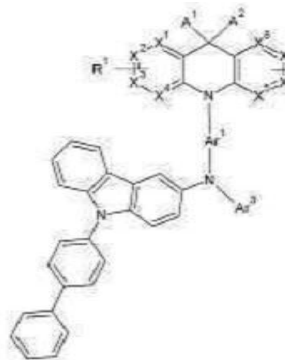
[화학식 28]



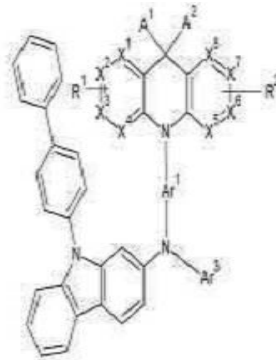
[화학식 29]



[화학식 30]



[화학식 31]

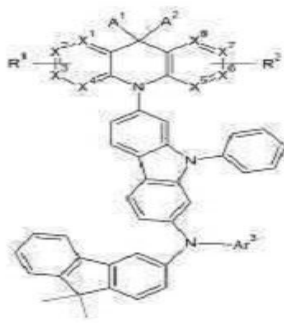


청구항 10

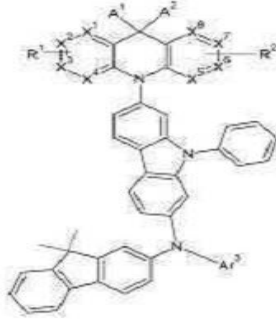
제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 80 내지 화학식 91로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 화합물.

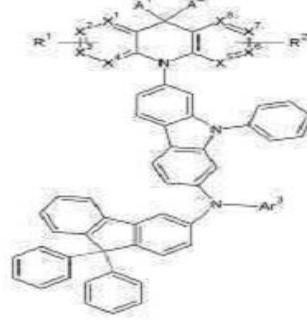
[화학식 80]



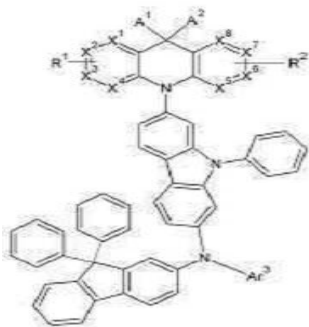
[화학식 81]



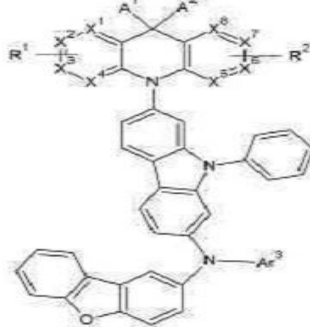
[화학식 82]



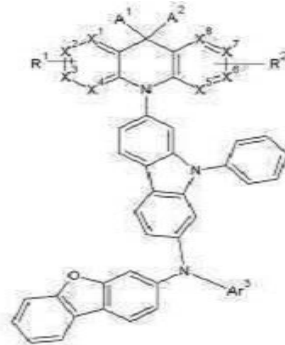
[화학식 83]



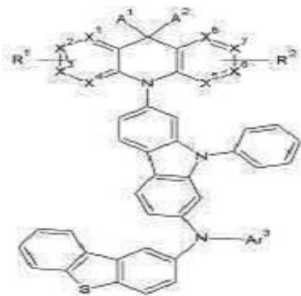
[화학식 84]



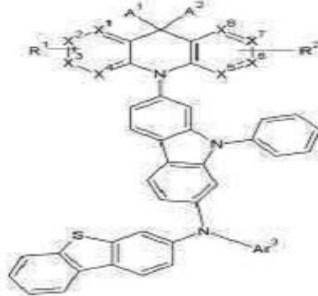
[화학식 85]



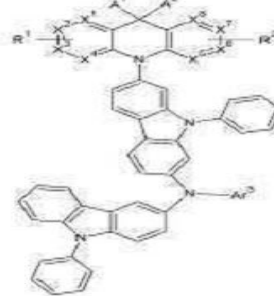
[화학식 86]



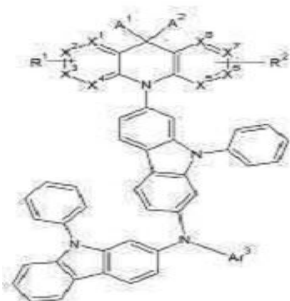
[화학식 87]



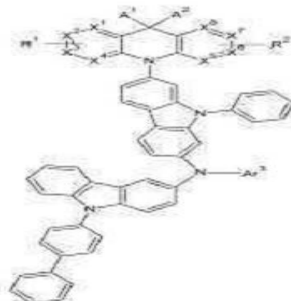
[화학식 88]



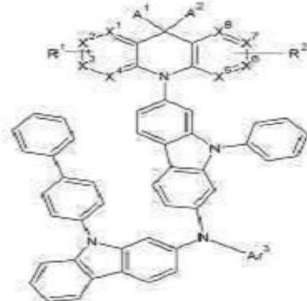
[화학식 89]



[화학식 90]



[화학식 91]

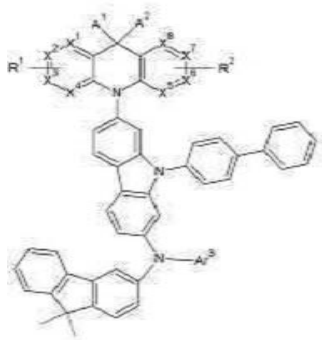


청구항 11

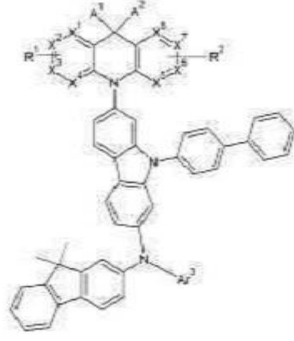
제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 92 내지 화학식 103으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나인 화합물.

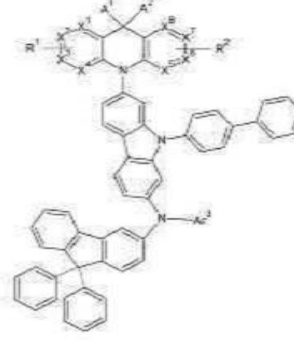
[화학식 92]



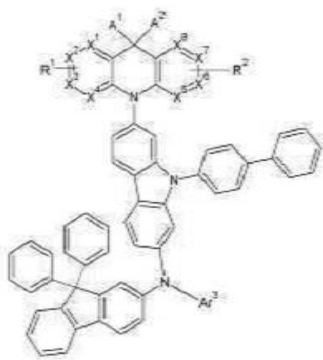
[화학식 93]



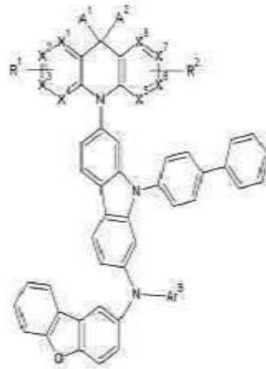
[화학식 94]



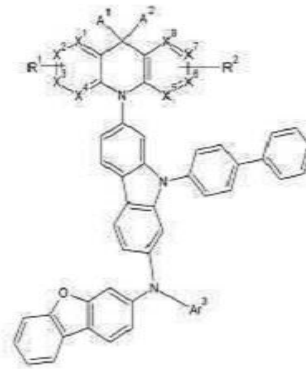
[화학식 95]



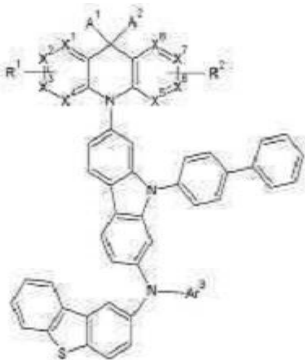
[화학식 96]



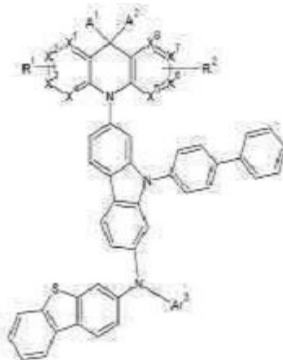
[화학식 97]



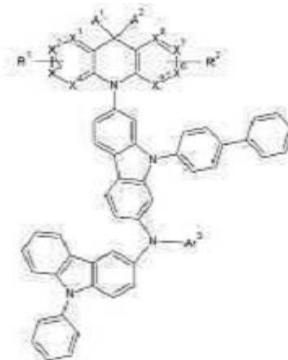
[화학식 98]



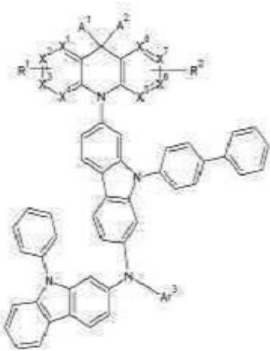
[화학식 99]



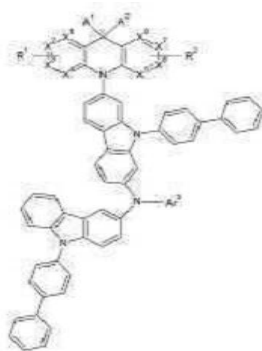
[화학식 100]



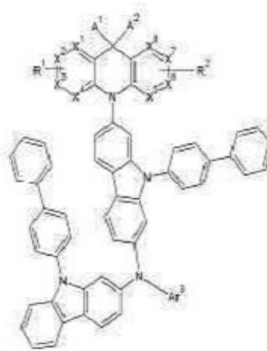
[화학식 101]



[화학식 102]



[화학식 103]



청구항 12

양극, 음극 및

상기 양극과 음극 사이에 게재되는 한 층 이상의 유기박막층을 포함하고,

상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 제1항, 제2항 및 제4항 내지 제11항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자.

청구항 13

제12항에 있어서,

상기 유기박막층은 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 주입층, 정공 수송층 또는 발광층인 것인 유기발광소자.

청구항 14

제12항에 있어서,

상기 유기박막층은 정공 주입층 또는 정공 수송층인 것인 유기발광소자.

청구항 15

제12항의 유기발광소자를 포함하는 표시장치.

발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

[0003] 유기광전자소자(organic optoelectric device)라 함은 정공 또는 전자를 이용한 전극과 유기물 사이에서의 전하 교류를 필요로 하는 소자를 의미한다.

[0004] 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.

[0005] 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.

[0006] 유기광전자소자의 예로는 유기 광전 소자, 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.

[0007] 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.

[0008] 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, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

- [0009] 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.
- [0010] 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.
- [0011] 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.
- [0012] 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.
- [0013] 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.
- [0014] 유기발광소자가 전술한 우수한 특징들을 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 유기발광소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다. 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기발광소자에서도 마찬가지이다.
- [0015] 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.
- [0016] 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.
- [0017] 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.
- [0018] 대형화를 위해서는 발광 효율의 증대 및 소자의 수명 향상이 수반되어야 한다. 이를 위해 안정하고 효율적인 유기발광소자용 유기물층 재료의 개발이 필요하다.

발명의 내용

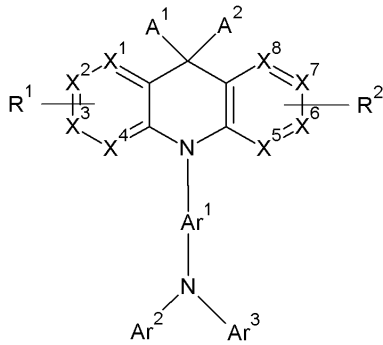
해결하려는 과제

- [0020] 고효율, 장수명 등의 특성을 가지는 유기발광소자를 제공할 수 있는 화합물을 제공하는 것이다.
- [0021] 상기 화합물을 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

- [0023] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0024] [화학식 1]



[0025]

[0026]

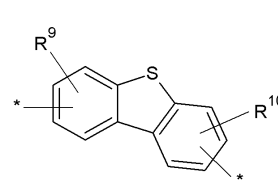
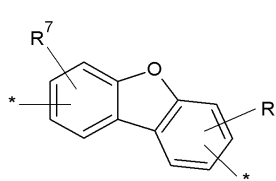
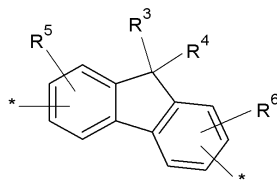
상기 화학식 1에서, X^1 내지 X^8 는 서로 독립적으로, N 또는 CR'이고, R'은 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 헤테로아릴기이고, R^1 및 R^2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기이고, A^1 및 A^2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, A^1 및 A^2 는 서로 독립적으로 존재하거나, 인접한 치환기와 융합고리를 형성하고, Ar^1 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, Ar^2 및 Ar^3 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, 단, Ar^1 은 하기 화학식 a 내지 화학식 d로 이루어진 군에서 선택되거나, Ar^2 및 Ar^3 중 적어도 하나는 하기 화학식 e 내지 화학식 h로 이루어진 군에서 선택되고,

[0027]

[화학식 a]

[화학식 b]

[화학식 c]



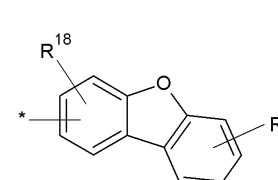
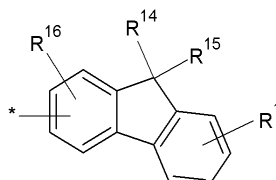
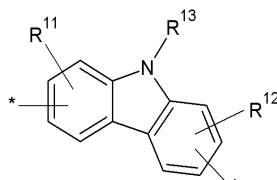
[0028]

[0029]

[화학식 d]

[화학식 e]

[화학식 f]

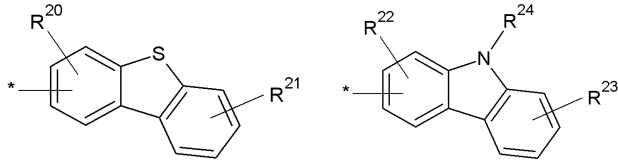


[0030]

[0031]

[화학식 g]

[화학식 h]



[0032]

[0033]

[0034]

[0035]

[0036]

상기 화학식 a 내지 화학식 h에서,

R³ 내지 R²⁴는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 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, 및 시아노기로 이루어진 군에서 선택된다.

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 전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물을 포함하는 것 인 유기발광소자를 제공한다.

본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 전술한 본 발명의 일 구현예인 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

발명의 효과

[0038]

본 발명의 일 구현예에 따른 화합물을 포함하는 유기광전자소자는 우수한 전기화학적 및 열적 안정성을 가지고 수명 특성이 우수하며, 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가질 수 있다. 또한, 상기 화합물은 용액 공정에 적합할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0040]

도 1 및 도 2는 각각 독립적으로 본 발명의 일 구현예에 따른 유기발광소자에 대한 다양한 구현예들을 나타내는 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0041]

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.

[0042]

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 C1 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.

[0043]

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. 구체적으로, 상기 치환된 C6 내지 C30 아릴기는 인접한 또다른 치환된 C6 내지 C30 아릴기와 융합되어 치환 또는 비치환된 플루오렌 고리를 형성할 수 있다.

[0044]

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

[0045]

본 명세서에서 *는 탄소 원자 또는 탄소 이외의 원자와 연결되는 부분을 의미한다.

[0046]

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.

[0047] 상기 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 1개 내지 4개의 탄소원자가 포함되는 것을 의미하며, 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.

[0048] 상기 알킬기는 구체적인 예를 들어 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.

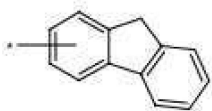
[0049] 본 명세서에서 "아릴(aryl)기"는 환형인 치환기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 치환기를 의미하며, 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

[0050] 본 명세서에서 "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1개 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1개 내지 3개 포함할 수 있다.

[0051] 보다 구체적으로, 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 페틸레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 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 벤조티오펜일기, 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.

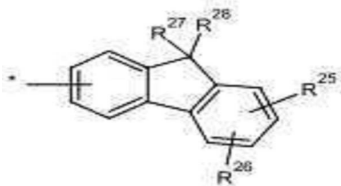
[0052] 보다 구체적인 예를 들어, 상기 치환된 C6 내지 C30 아릴기에 포함되는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기는 하기 화학식 200 또는 화학식 201일 수 있고, 상기 치환된 C6 내지 C30 아릴렌기에 포함되는 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 하기 화학식 202 또는 화학식 203일 수 있다.

[0053] [화학식 200]



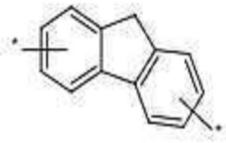
[0054]

[0055] [화학식 201]



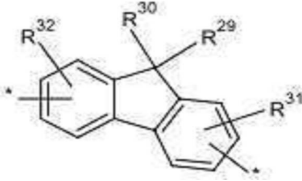
[0056]

[0057] [화학식 202]



[0058]

[0059] [화학식 203]



[0060]

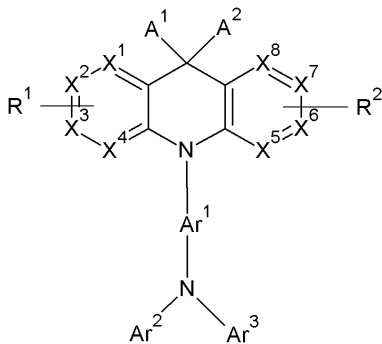
[0061] 상기 화학식 200 내지 화학식 203에서, R²⁵ 내지 R³²는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 및 시아노기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0062] 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 특성과도 유사할 수 있다.

[0063] 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 특성과도 유사할 수 있다.

[0065] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공할 수 있다.

[0066] [화학식 1]



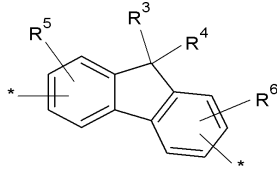
[0067]

[0068] 상기 화학식 1에서, X¹ 내지 X⁸는 서로 독립적으로, N 또는 CR'이고, R'은 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 헤테로아릴기이고, R¹ 및 R²는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기이고, A¹ 및 A²는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, A¹ 및 A²는 서로 독립적으로 존재

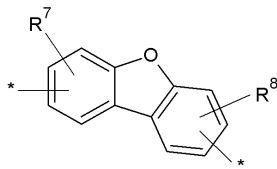
하거나, 인접한 치환기와 융합고리를 형성하고, Ar¹은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, Ar² 및 Ar³는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, 단, Ar¹은 하기 화학식 a 내지 d로 이루어진 군에서 선택되거나, Ar² 및 Ar³ 중 적어도 하나는 하기 화학식 e 내지 h로 이루어진 군에서 선택되고,

[0069]

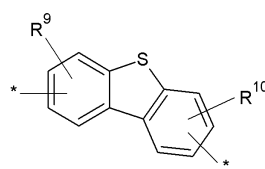
[화학식 a]



[화학식 b]



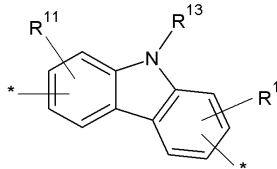
[화학식 c]



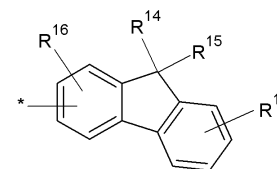
[0070]

[0071]

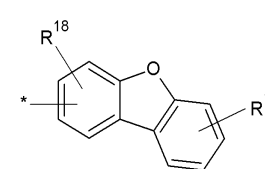
[화학식 d]



[화학식 e]



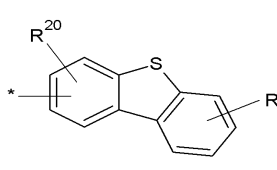
[화학식 f]



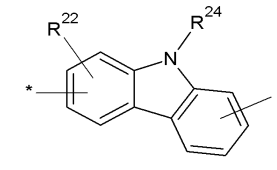
[0072]

[0073]

[화학식 g]



[화학식 h]



[0074]

[0075]

상기 화학식 a 내지 화학식 h에서, R³ 내지 R²⁴는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 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, 및 시아노기로 이루어진 군에서 선택된다.

[0076]

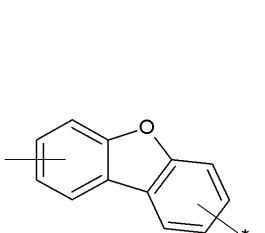
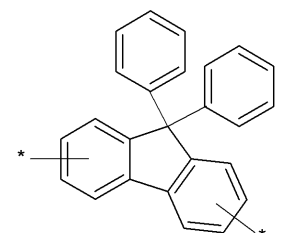
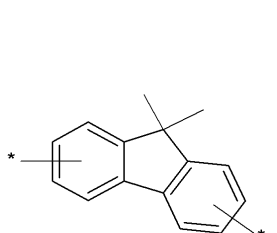
구체적으로, 상기 화학식 a는 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시될 수 있고, 상기 화학식 b는 하기 화학식 4로 표시될 수 있고, 상기 화학식 c는 하기 화학식 5로 표시될 수 있고, 상기 화학식 d는 하기 화학식 6 또는 화학식 7로 표시될 수 있고, 상기 화학식 e는 하기 화학식 8 또는 화학식 9로 표시될 수 있고, 상기 화학식 f는 하기 화학식 10으로 표시될 수 있고, 상기 화학식 g는 하기 화학식 11로 표시될 수 있고, 상기 화학식 h는 하기 화학식 12 또는 화학식 13으로 표시될 수 있다.

[0077]

[화학식 2]

[화학식 3]

[화학식 4]



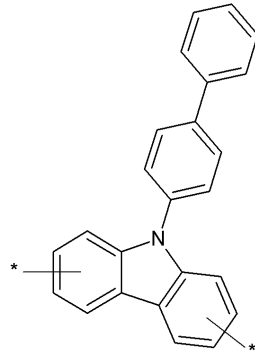
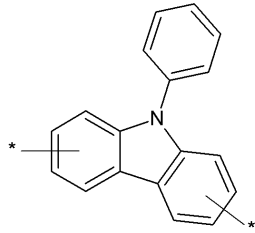
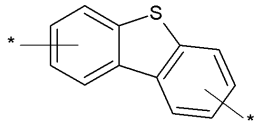
[0078]

[0079]

[화학식 5]

[화학식 6]

[화학식 7]



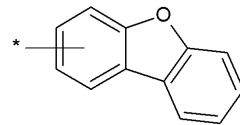
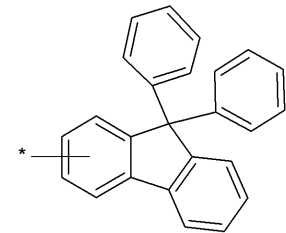
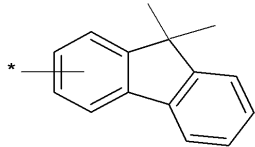
[0080]

[0081]

[화학식 8]

[화학식 9]

[화학식 10]



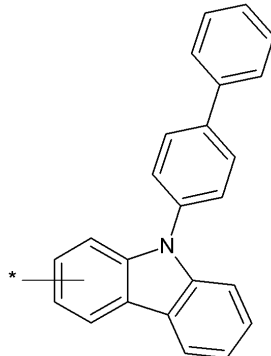
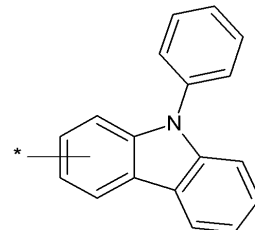
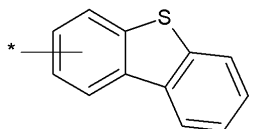
[0082]

[0083]

[화학식 11]

[화학식 12]

[화학식 13]



[0084]

[0085]

상기 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물은 Ar¹이 상기 화학식 a 내지 화학식 d로 이루어진 군에서 선택되거나, Ar² 및 Ar³ 중 적어도 하나가 상기 화학식 e 내지 화학식 h로 이루어진 군에서 선택되어 적절한 정공 특성을 가질 수 있다. 즉, 상기 화학식 a 내지 화학식 h로 표시되는 화합물은 모두 카바졸, 디벤조퓨란, 디벤조티오펜, 또는 플루오렌의 구조를 포함하는 바 정공수송 능력이 탁월하며, 각 구조간의 정공수송 능력의 차이로 인해 적절한 정공수송 능력을 가질 수 있다.

[0086]

보다 구체적으로 상기 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물은 Ar¹이 상기 화학식 2 내지 화학식 7로 이루어진 군에서 선택되거나, Ar² 및 Ar³ 중 적어도 하나가 상기 화학식 8 내지 화학식 13로 이루어진 군에서 선택되어 적절한 정공 특성을 가질 수 있다. 즉, 화학식 2, 화학식 3, 화학식 6 내지 화학식 9, 화학식 12, 및 화학식 13의 경우, 플루오렌 또는 카바졸 구조를 포함하여 매우 우수한 정공 수송 능력을 가질 수 있으며, 화학식 4, 화학식 5, 화학식 10, 및 화학식 11의 경우, 디벤조티오펜 또는 디벤조퓨란의 구조를 포함하여 전자밀도가 높아지고 비공유전자쌍의 역할을 못하기 때문에 정공특성이 좋아지며, 이동성(mobility)이 향상되어 효율은 좋아지고 구동 전압은 낮아지게 된다.

[0087]

또한, 상기 Ar¹을 선택적으로 조절하여 화합물 전체의 공액(conjugation) 길이를 결정할 수 있으며, 이로부터 삼중항(triplet) 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다. 이를 통해 유기광전자소자에서 필요로 하는 재료의 특성을

구현해 낼 수 있다. 또한, 올소, 파라, 메타 등의 결합위치 변경을 통해서도 삼중항 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다.

[0088] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 다양한 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드 갭을 갖는 화합물이 될 수 있다.

[0089] 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 구동 시 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

[0090] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 분자량은 500 내지 700일 수 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 상기 범위 내의 분자량을 가짐으로써, 증착 및 소자평가 공정 시 발생하는 압력 및 열에 대한 안정성을 확보할 수 있다.

[0091] 구체적으로, 상기 R^1 및 R^2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기일 수 있다. 보다 구체적으로, 상기 R^1 및 R^2 는 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 헵틸기, 치환 또는 비치환된 옥실기, 치환 또는 비치환된 노닐기, 치환 또는 비치환된 데킬기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트레닐기일 수 있다. 이러한 경우, 물질의 용해도(Solubility)가 향상되어, 같은 분자량의 화합물보다 승화성이 좋아져 증착에 용이하며 열안정성을 확보할 수 있다. 또한, 화합물의 정공 특성을 적절하게 조절할 수 있다.

[0092] 구체적으로, 상기 X^2 또는 X^7 은 N일 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0093] 구체적으로, 상기 X^2 또는 X^7 은 CR'이고, 상기 R'은 수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기일 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

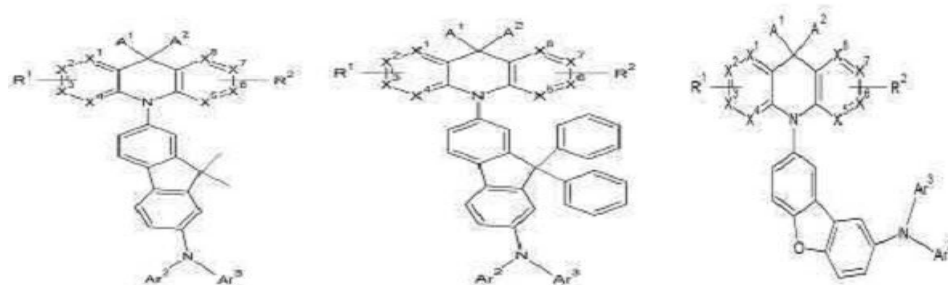
[0094] 보다 구체적으로, 상기 X^1 내지 X^8 은 CH일 수 있다.

[0095] 보다 구체적으로, 상기 X^1 내지 X^6 , 및 X^8 은 CH이고, X^7 은 N일 수 있다.

[0096] 상기 X^1 내지 X^8 중 어느 하나가 N(질소)로 치환됨으로써, 적당한 정공수송 특성을 갖게 할 수 있으며, 이로 인해 T1 값의 상승을 기대할 수 있다.

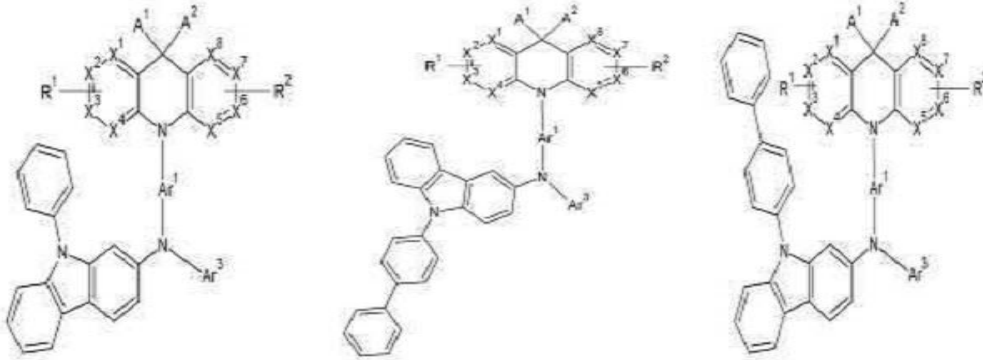
[0097] 구체적으로, 상기 화학식 1은 하기 화학식 14 내지 화학식 103으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0098] [화학식 14] [화학식 15] [화학식 16]

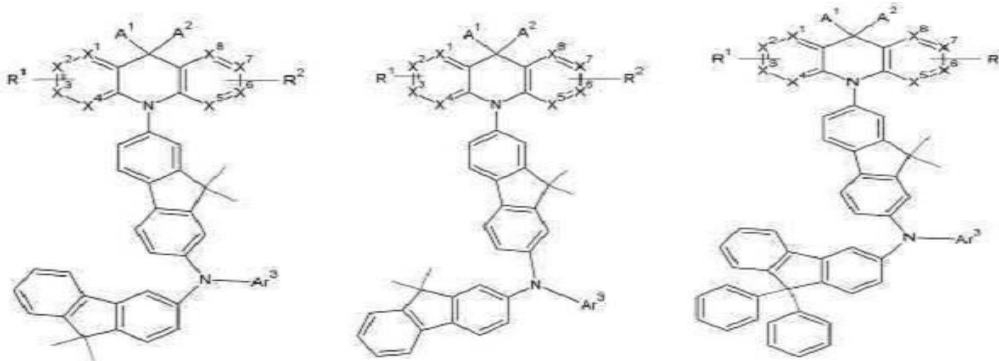


[0099]

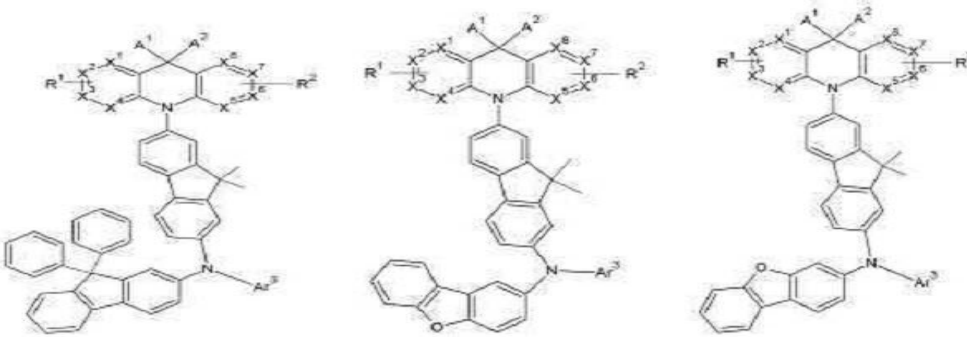
[0108] [화학식 29] [화학식 30] [화학식 31]



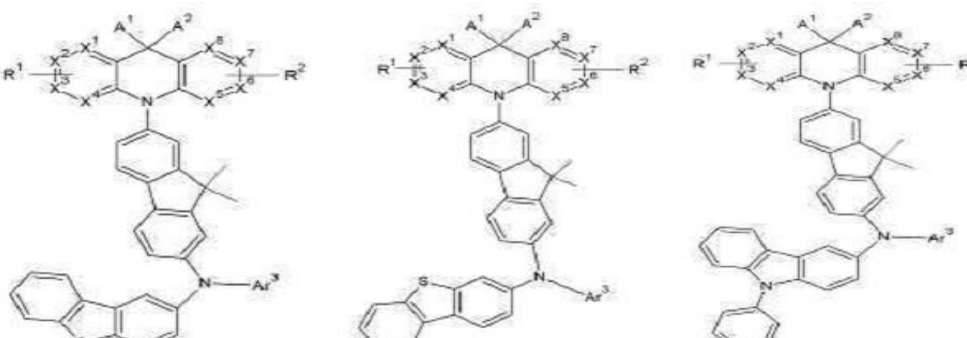
[0109]
[0110] [화학식 32] [화학식 33] [화학식 34]



[0111]
[0112] [화학식 35] [화학식 36] [화학식 37]

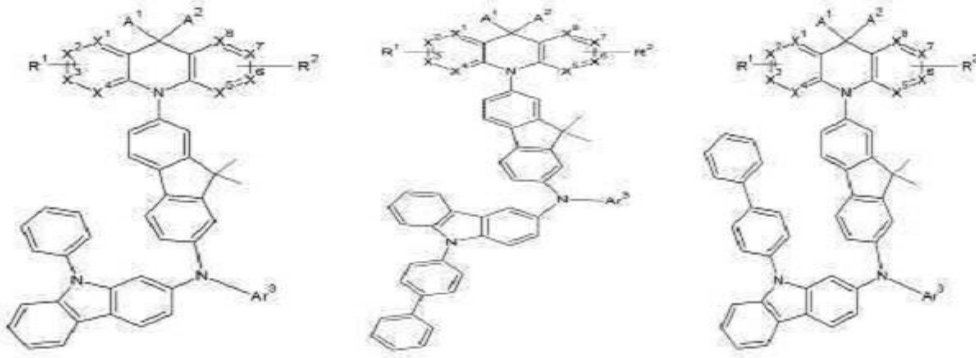


[0113]
[0114] [화학식 38] [화학식 39] [화학식 40]

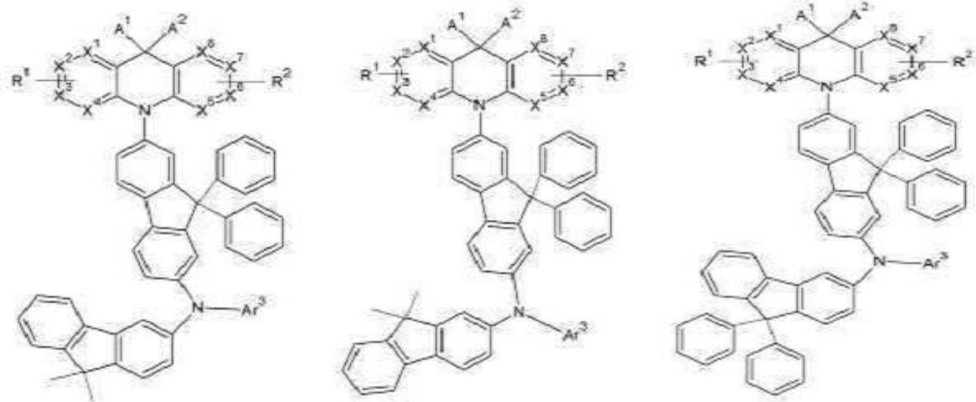


[0115]

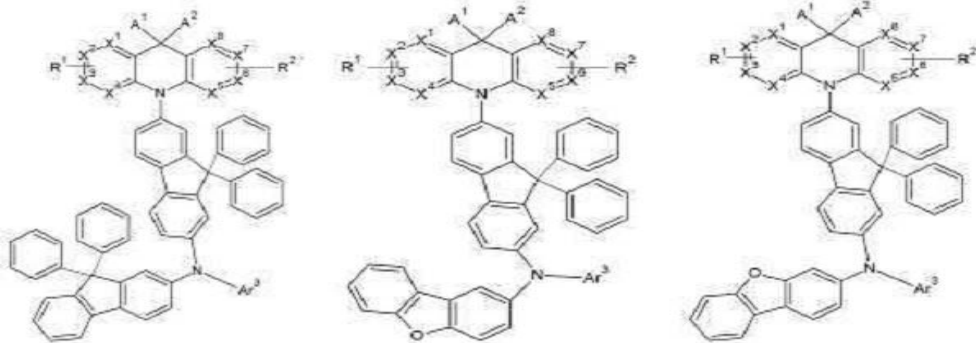
[0116] [화학식 41] [화학식 42] [화학식 43]



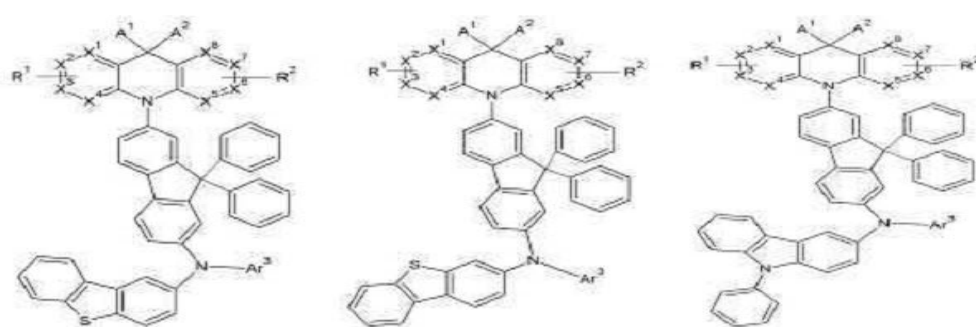
[0117]
[0118] [화학식 44] [화학식 45] [화학식 46]



[0119]
[0120] [화학식 47] [화학식 48] [화학식 49]

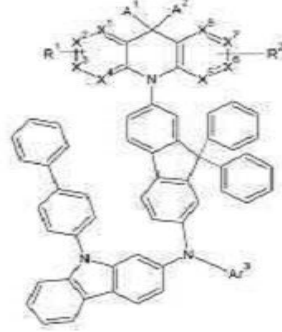
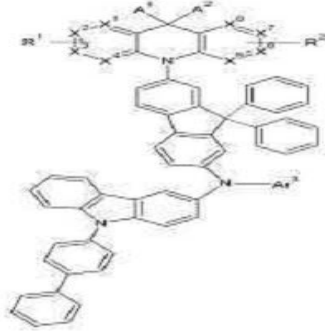
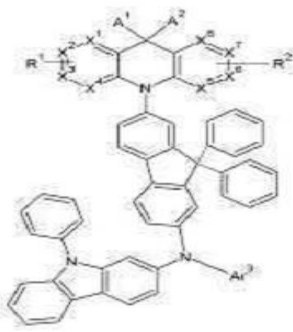


[0121]
[0122] [화학식 50] [화학식 51] [화학식 52]

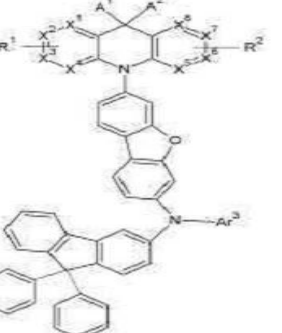
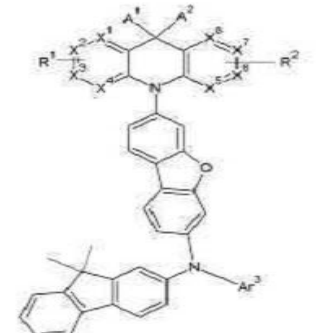
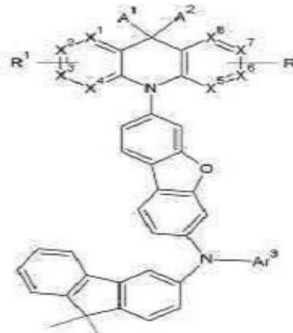


[0123]

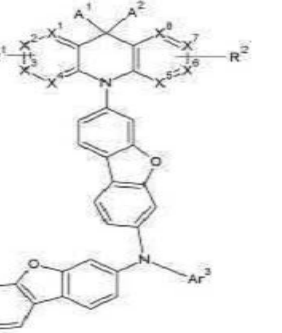
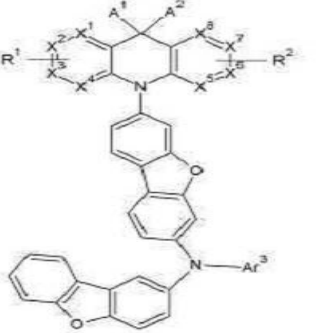
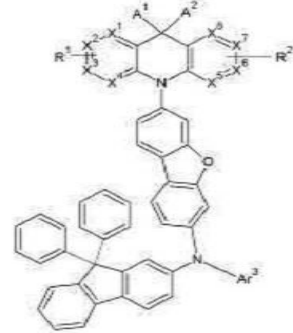
[0124] [화학식 53] [화학식 54] [화학식 55]



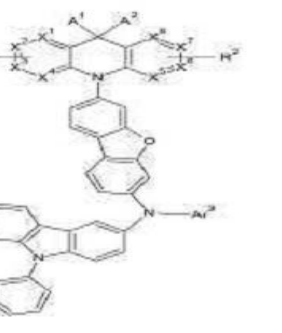
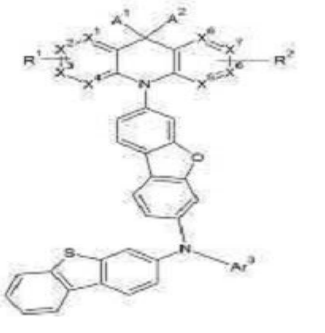
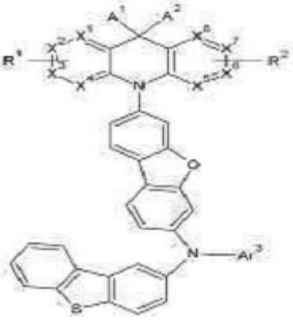
[0125]
[0126] [화학식 56] [화학식 57] [화학식 58]



[0127]
[0128] [화학식 59] [화학식 60] [화학식 61]



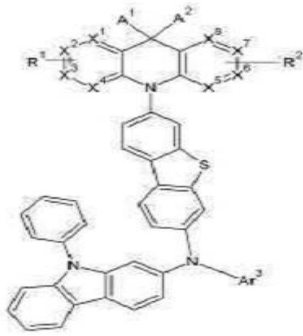
[0129]
[0130] [화학식 62] [화학식 63] [화학식 64]



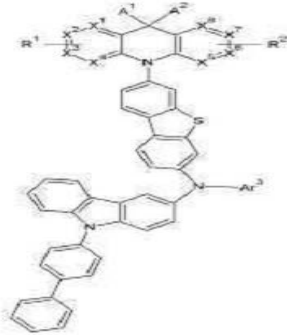
[0131]

[0140]

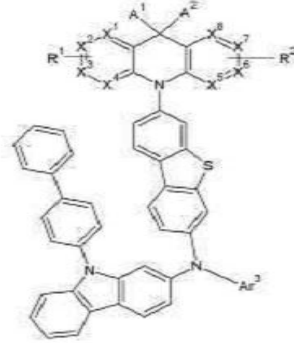
[화학식 77]



[화학식 78]



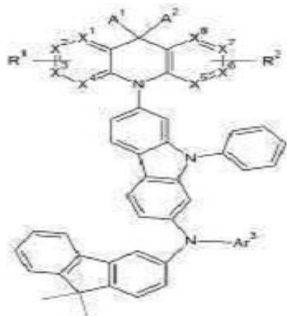
[화학식 79]



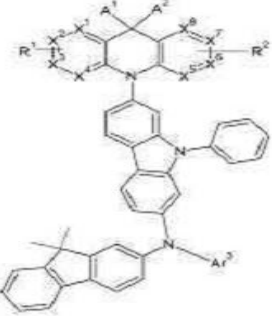
[0141]

[0142]

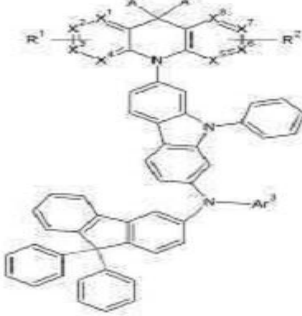
[화학식 80]



[화학식 81]



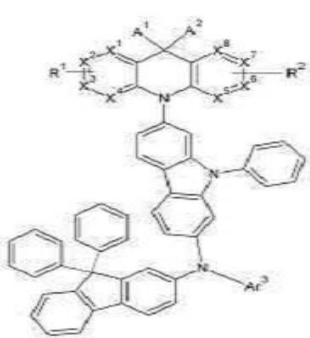
[화학식 82]



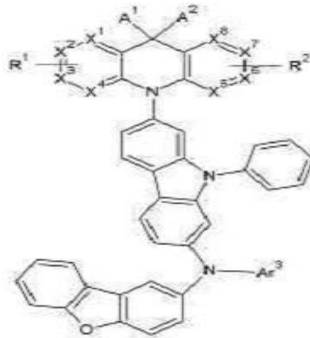
[0143]

[0144]

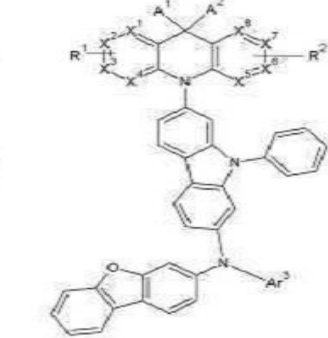
[화학식 83]



[화학식 84]



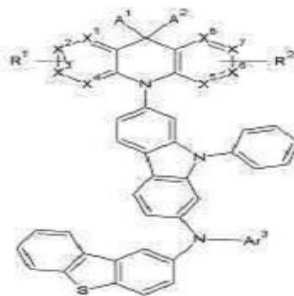
[화학식 85]



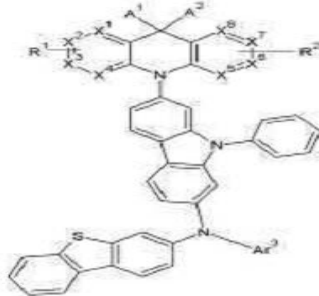
[0145]

[0146]

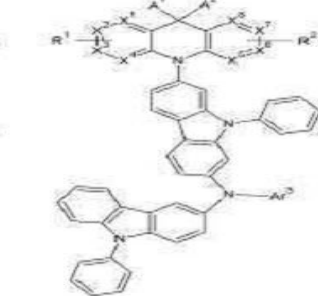
[화학식 86]



[화학식 87]

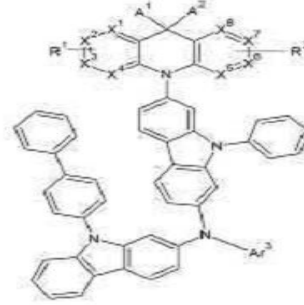
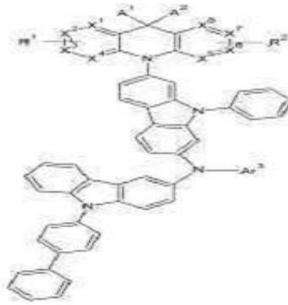
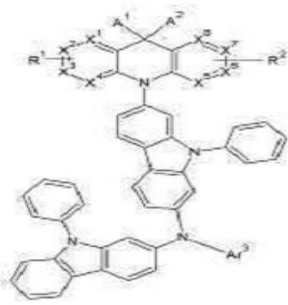


[화학식 88]

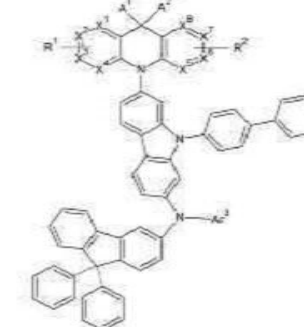
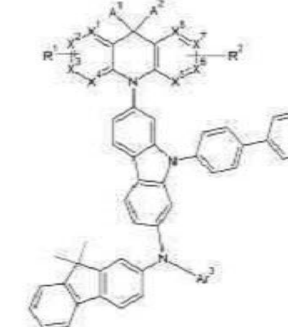
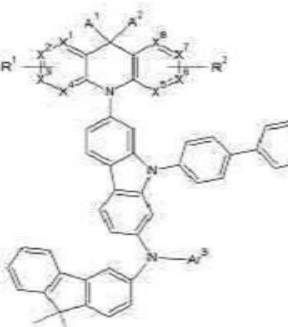


[0147]

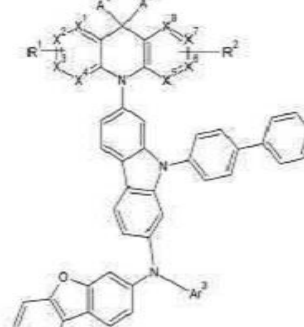
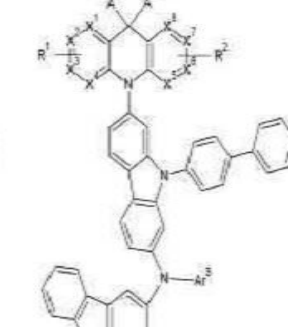
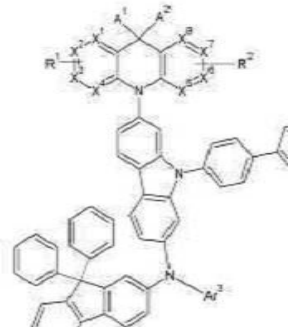
[0148] [화학식 89] [화학식 90] [화학식 91]



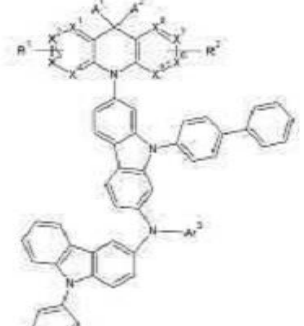
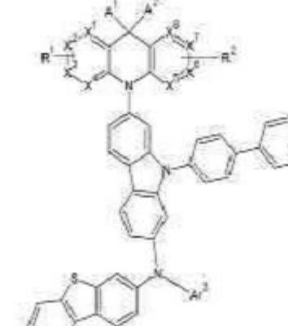
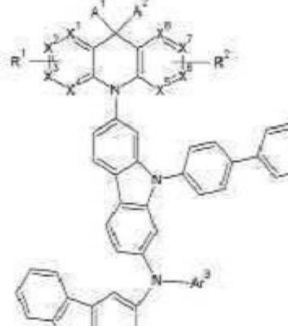
[0149] [0150] [화학식 92] [화학식 93] [화학식 94]



[0151] [0152] [화학식 95] [화학식 96] [화학식 97]



[0153] [0154] [화학식 98] [화학식 99] [화학식 100]



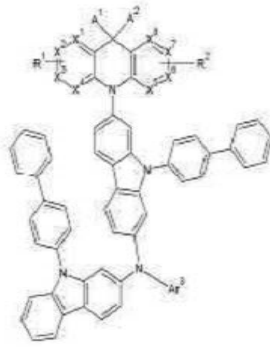
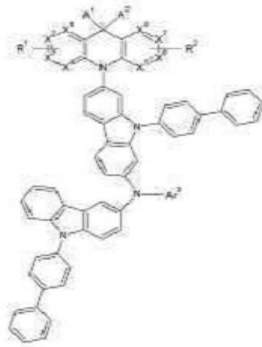
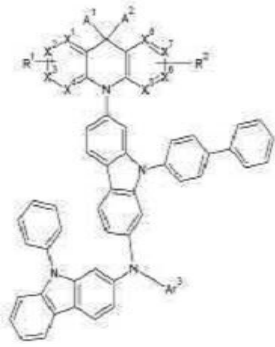
[0155]

[0156]

[화학식 101]

[화학식 102]

[화학식 103]



[0157]

[0158]

상기 화학식 14 내지 화학식 31로 표시되는 화합물은 Ar¹이 상기 화학식 2 내지 화학식 7로 이루어진 군에서 선택되거나, Ar² 및 Ar³ 중 적어도 하나가 상기 화학식 8 내지 화학식 13로 이루어진 군에서 선택되어, 화합물 내에서의 전자 및 정공의 이동성이 우수해져 소자의 수명 특성이 개선될 수 있다.

[0159]

또한, 플루오렌, 디페닐퓨란, 디페틸티오펜, 또는 카바졸을 포함하는 한 개의 치환기가 질소(N)에 직접 결합되는 바, 화합물의 HOMO값을 크게 낮추어 화합물의 밴드갭이 증가되고, 이로 인해 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물을 다양한 소자에 적용할 수 있다.

[0160]

또한, 상기 화학식 32 내지 화학식 103으로 표시되는 화합물은 Ar¹이 상기 화학식 2 내지 화학식 7로 이루어진 군에서 선택되고, Ar² 및 Ar³ 중 적어도 하나가 상기 화학식 8 내지 화학식 13로 이루어진 군에서 선택되어, 화합물 내에서의 전자 및 정공의 이동성이 극대화되어 소자의 수명 특성이 개선될 수 있을 뿐만 아니라, 플루오렌, 디페닐퓨란, 디페틸티오펜, 또는 카바졸을 포함하는 두 개의 치환기가 질소(N)에 직접 결합됨으로써 소자의 효율을 상승시키고, 구동전압을 저하시킨다.

[0161]

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 플루오레닐 모이어티(상기 화학식 1에서, X², X¹, C, C(A¹)(A²), C, X⁸, X⁷의 순서로 차례로 연결되는 부분)를 가져 소자 효율 특성을 개선시킬 수 있고, 동시에 카바졸 모이어티(상기 화학식 1에서, X³, X⁴, C, N(Ar¹), C, X⁵, X⁶의 순서로 차례로 연결되는 부분)를 가져 정공 특성을 개선시킬 수 있다.

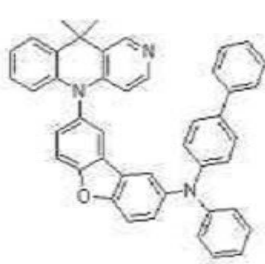
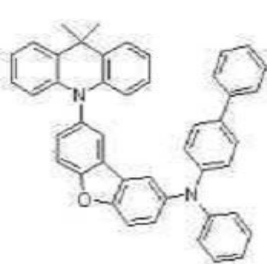
[0162]

본 발명의 일 구현예에 따른 화합물의 구체적인 예는 다음과 같으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[E-1]

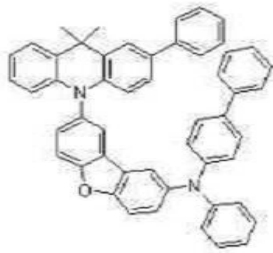
[E-2]

[E-3]



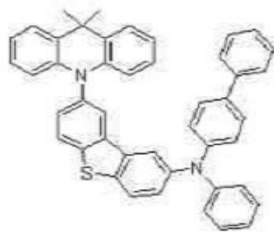
[0163]

[E-4]

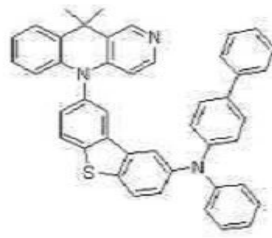


[0164]

[E-5]



[E-6]

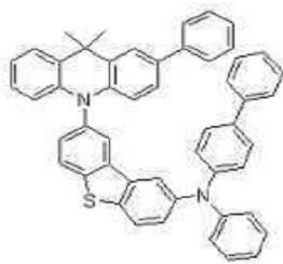


[E-7]

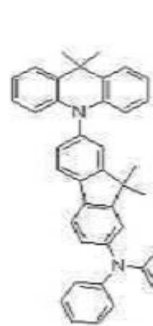


[0165]

[E-8]

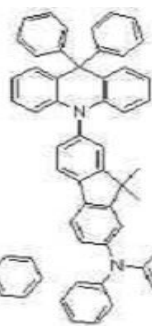


[E-9]

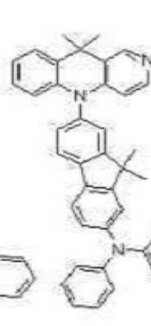


[0167]

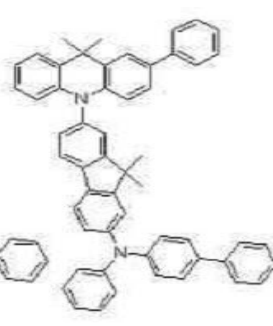
[E-10]



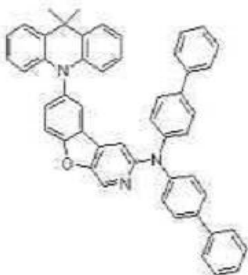
[E-11]



[E-12]



[E-13]



[0168]

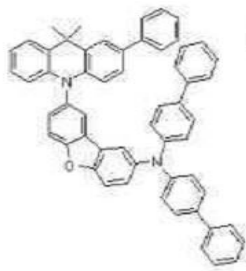
[E-14]



[E-15]



[E-16]



[E-17]



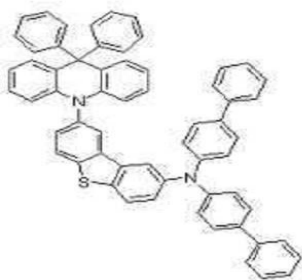
[E-18]



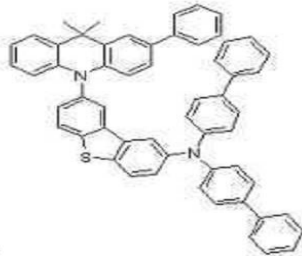
[0169]

[0170]

[E-19]

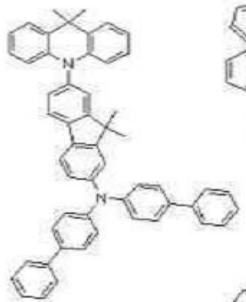


[E-20]

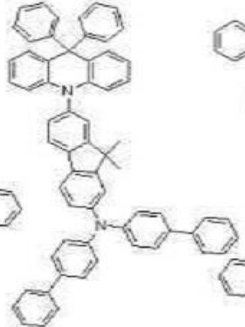


[0171]

[E-21]



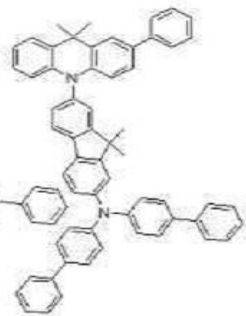
[E-22]



[E-23]



[E-24]

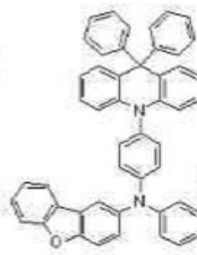


[0172]

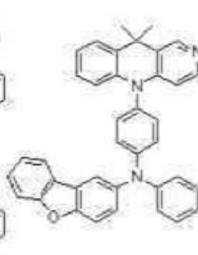
[E-25]



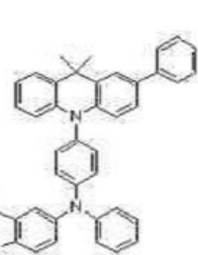
[E-26]



[E-27]



[E-28]



[0173]

[0174]

[E-29]



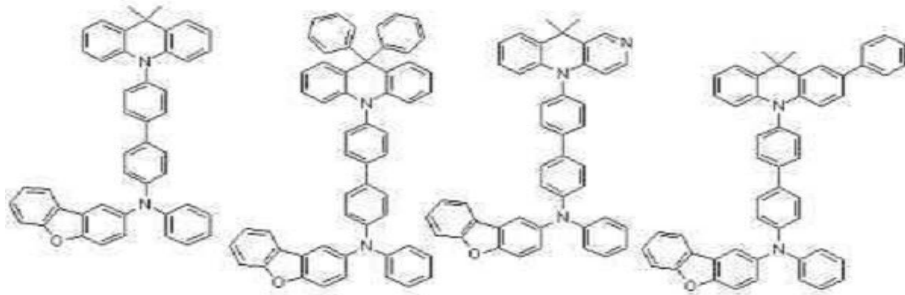
[E-30]



[E-31]

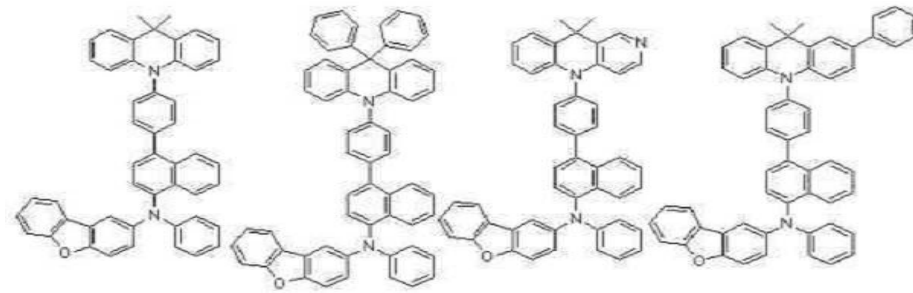


[E-32]



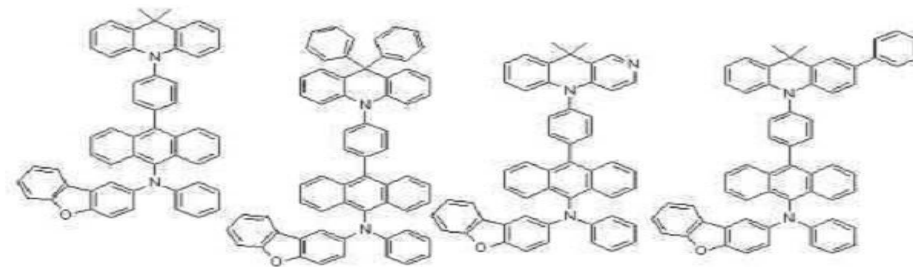
[0175]

[E-33] [E-34] [E-35] [E-36]



[0176]

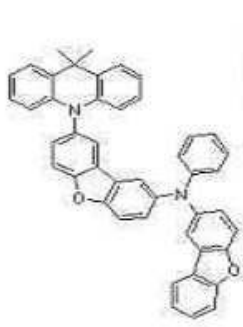
[E-37] [E-38] [E-39] [E-40]



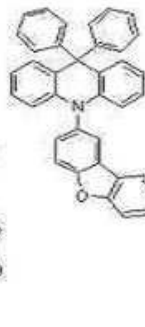
[0177]

[0178]

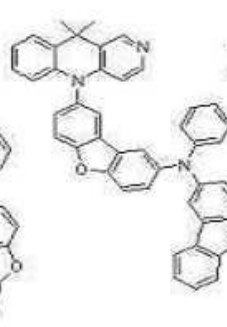
[E-41] [E-42] [E-43] [E-44]



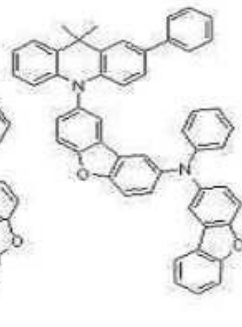
[E-45]



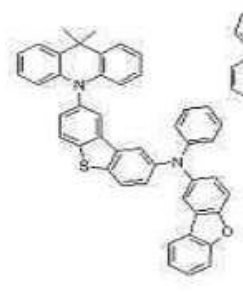
[E-46]



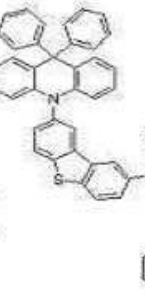
[E-47]



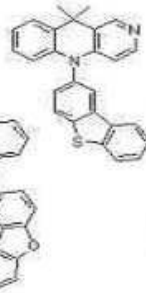
[E-48]



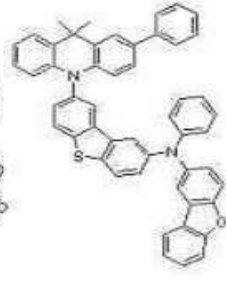
[E-49]



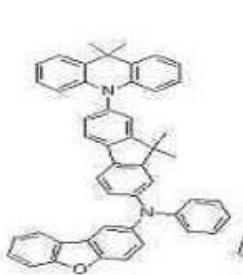
[E-50]



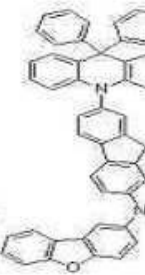
[E-51]



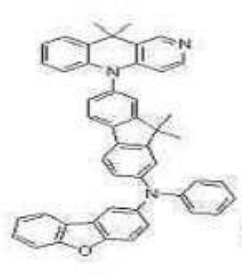
[E-52]



[E-53]



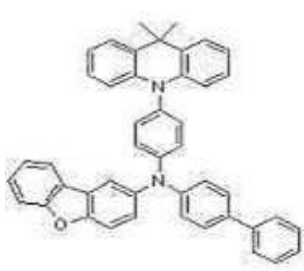
[E-54]



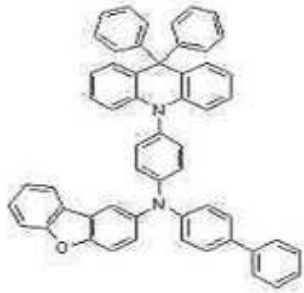
[E-55]

[0179]

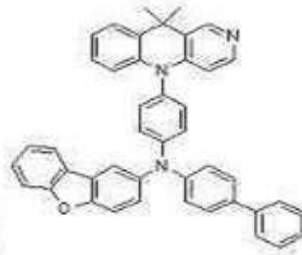
[0180]



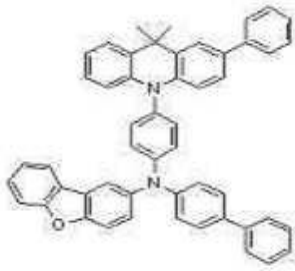
[E-56]



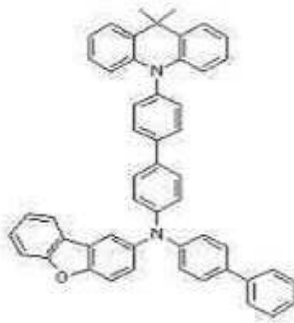
[E-57]



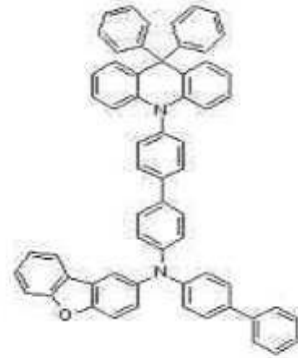
[E-58]



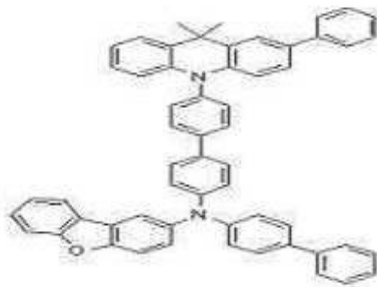
[E-59]



[E-60]



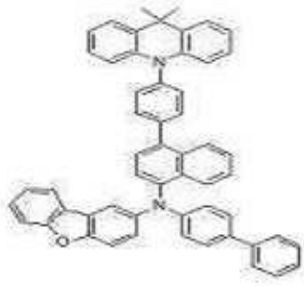
[E-61]



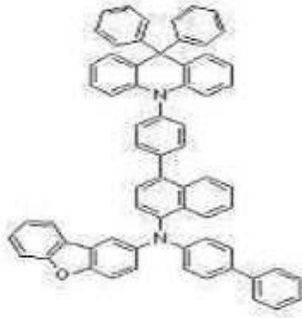
[E-62]

[E-63]

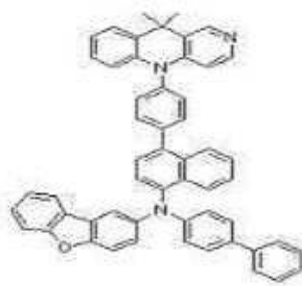
[0181]



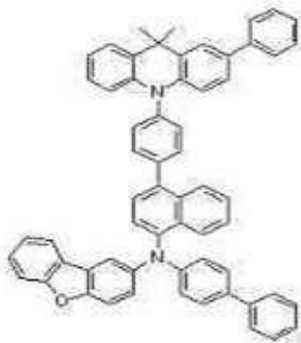
[E-64]



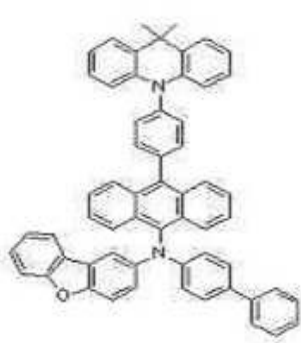
[E-65]



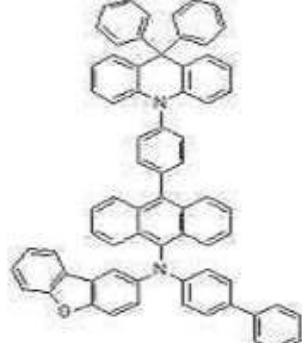
[E-66]



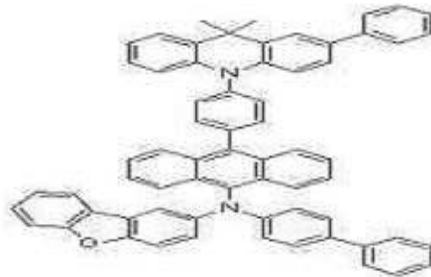
[E-67]



[E-68]



[E-69]

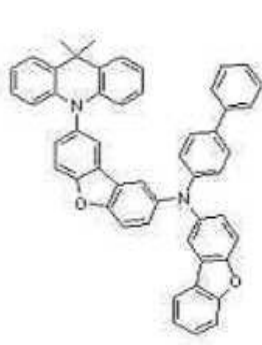


[E-70]

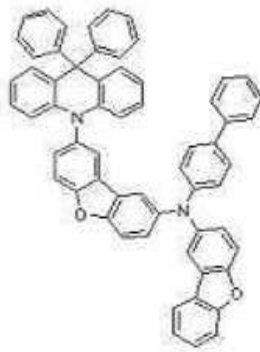


[E-71]

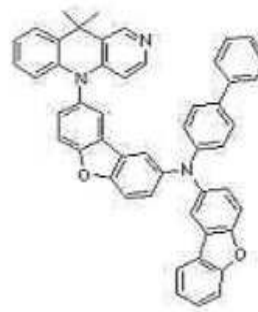
[0182]



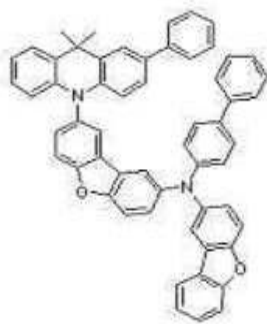
[E-72]



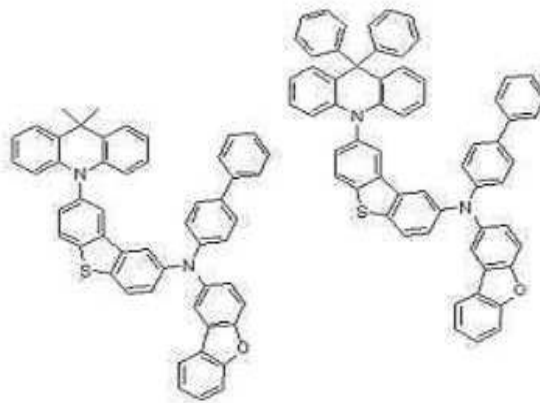
[E-73]



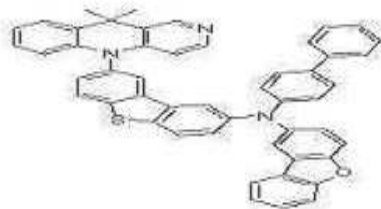
[E-74]



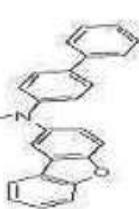
[E-75]



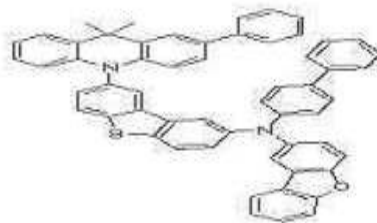
[E-76]



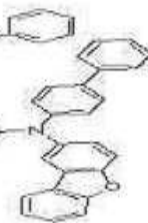
[E-77]



[E-78]

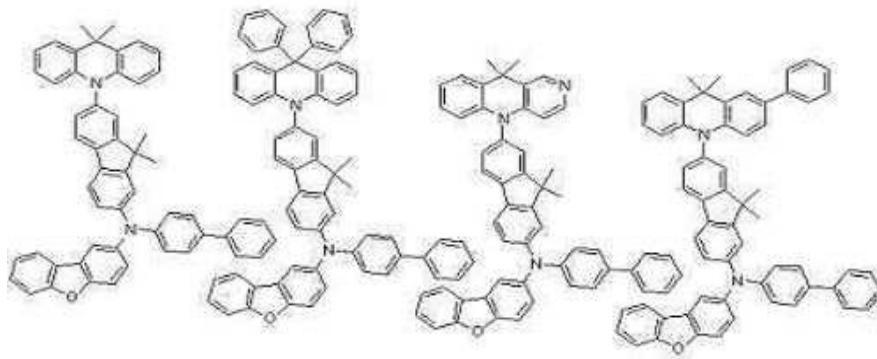


[E-79]



[E-80]

[0183]

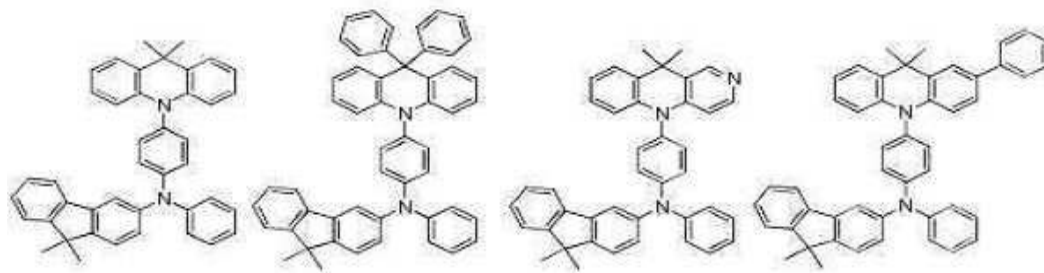


[E-81]

[E-82]

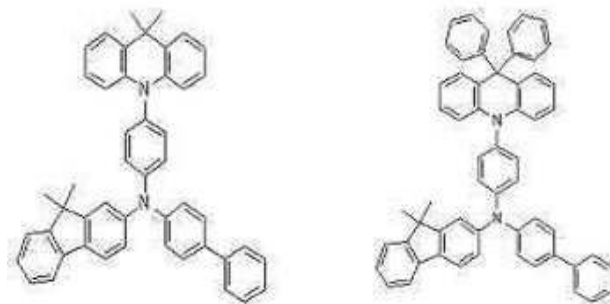
[E-83]

[E-84]



[E-85]

[E-86]



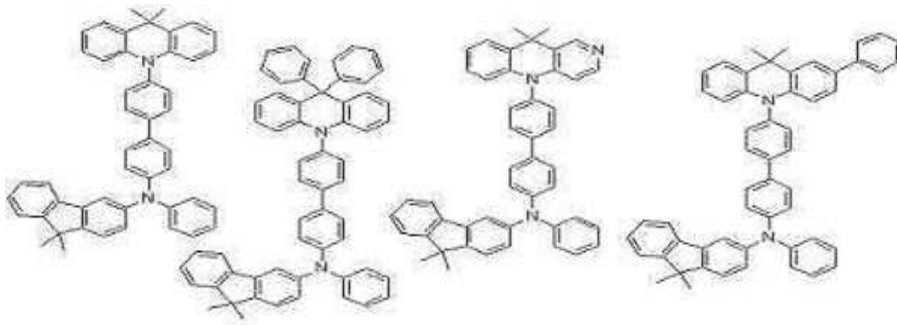
[E-87]

[E-88]

[E-89]

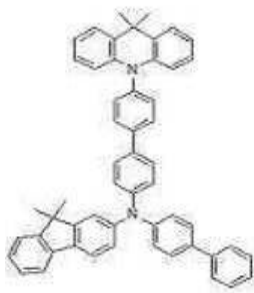
[E-90]

[0184]

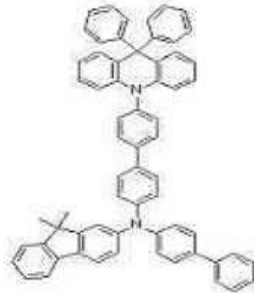


[E-91]

[E-92]



[E-93]



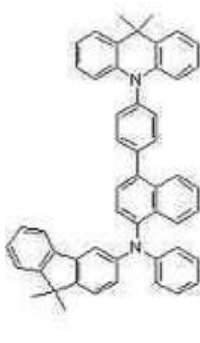
[E-94]



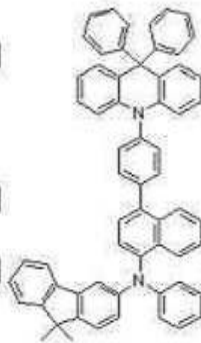
[E-95]



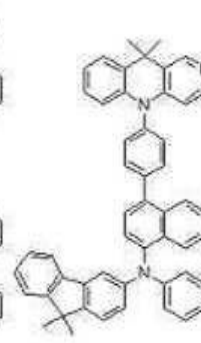
[E-96]



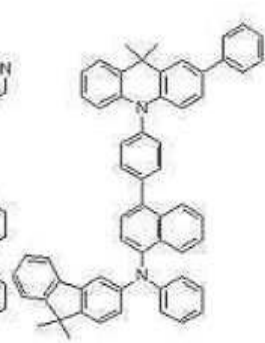
[E-97]



[E-98]

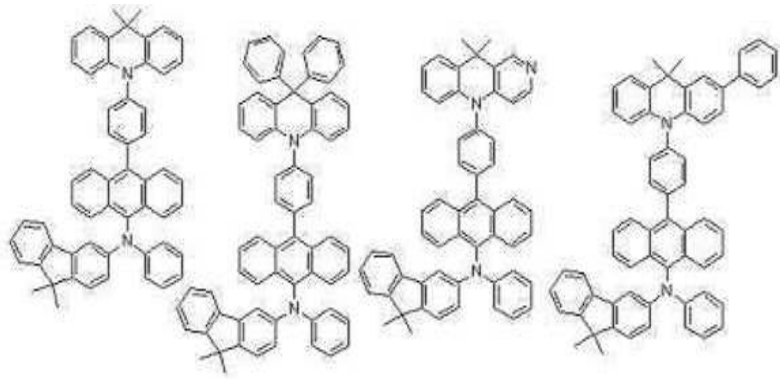


[E-99]



[E-100]

[0185]



[E-101]

[E-102]

[E-103]

[E-104]

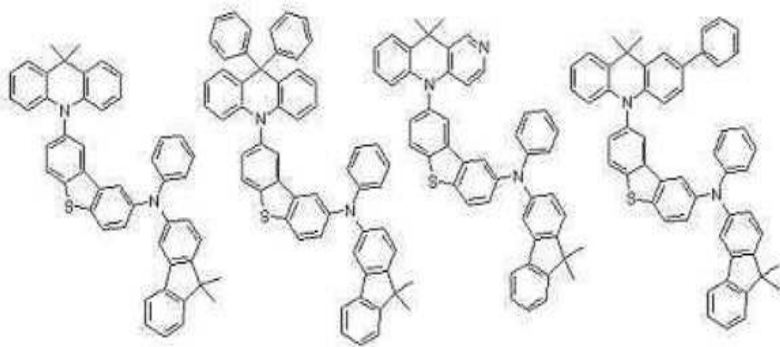


[E-105]

[E-106]

[E-107]

[E-108]



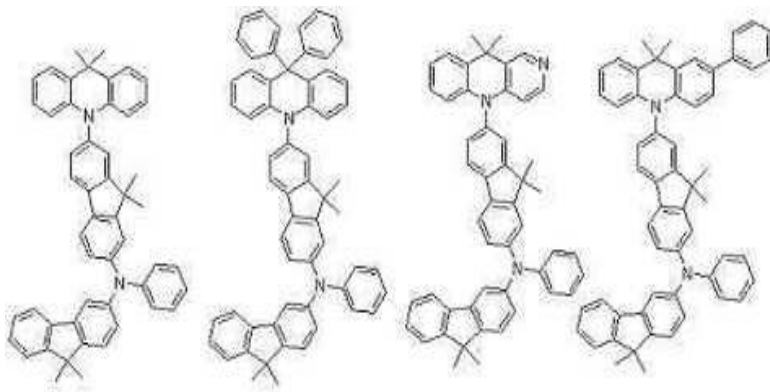
[E-109]

[E-110]

[E-111]

[E-112]

[0186]

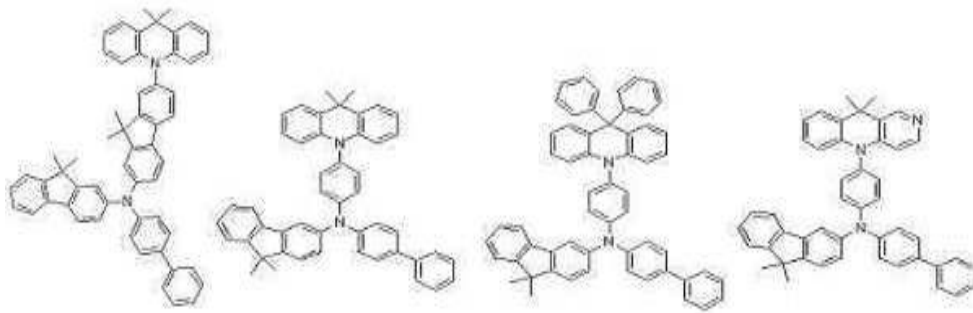


[E-113]

[E-114]

[E-115]

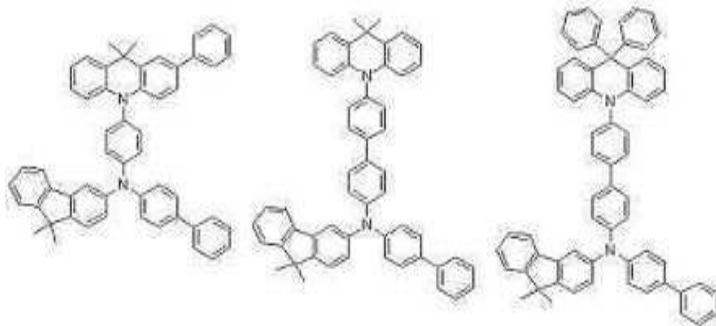
[E-116]



[E-117]

[E-118]

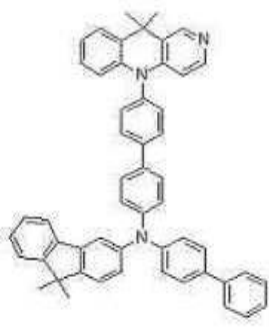
[E-119]



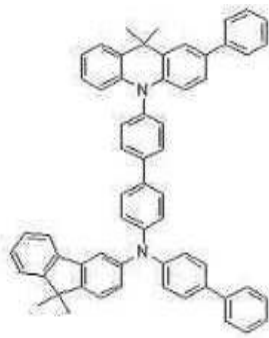
[E-120]

[E-121]

[0187]

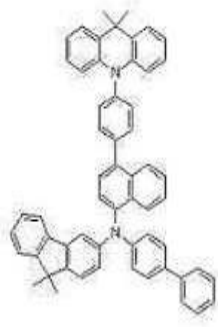


[E-122]

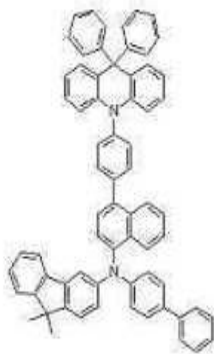


[E-123]

[E-124]

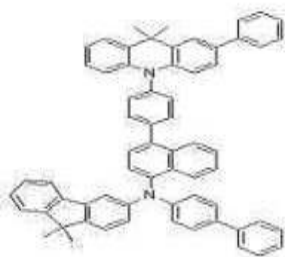


[E-125]

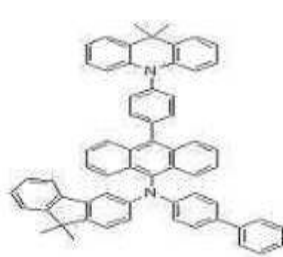


[E-126]

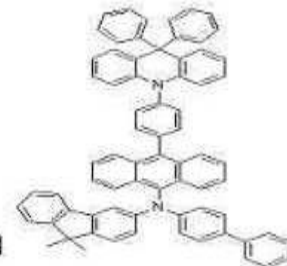
[E-127]



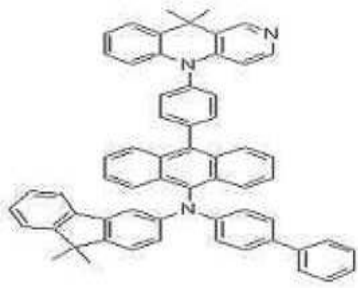
[E-128]



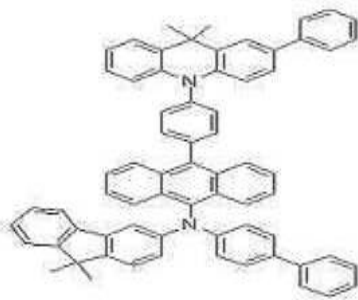
[E-129]



[0188]

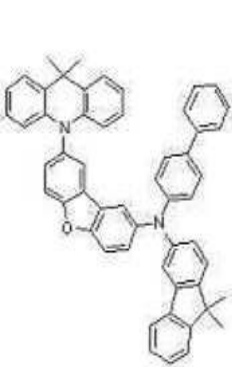


[E-130]

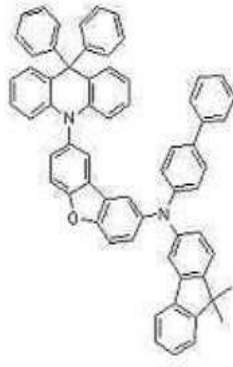


[E-131]

[E-132]



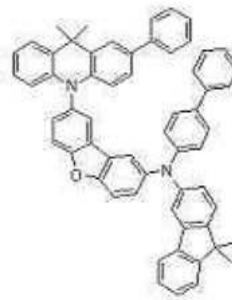
[E-133]



[E-134]



[E-135]

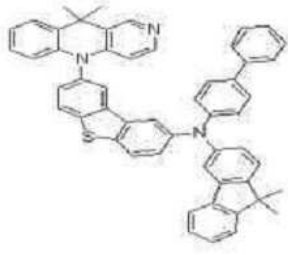


[E-136]

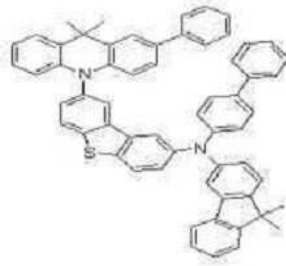


[E-137]

[0189]



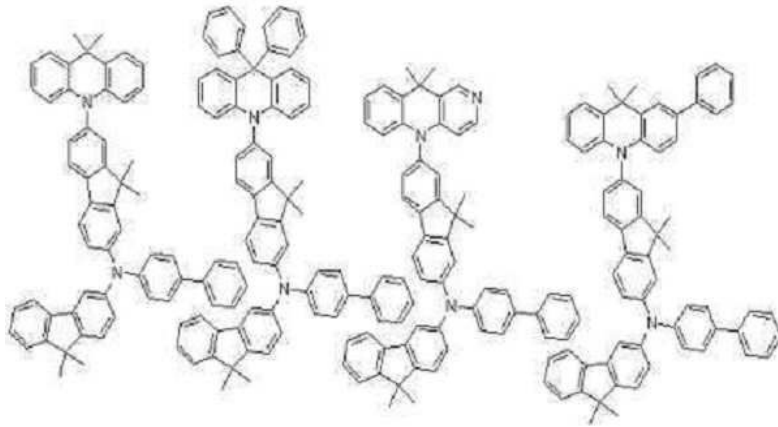
[E-138]



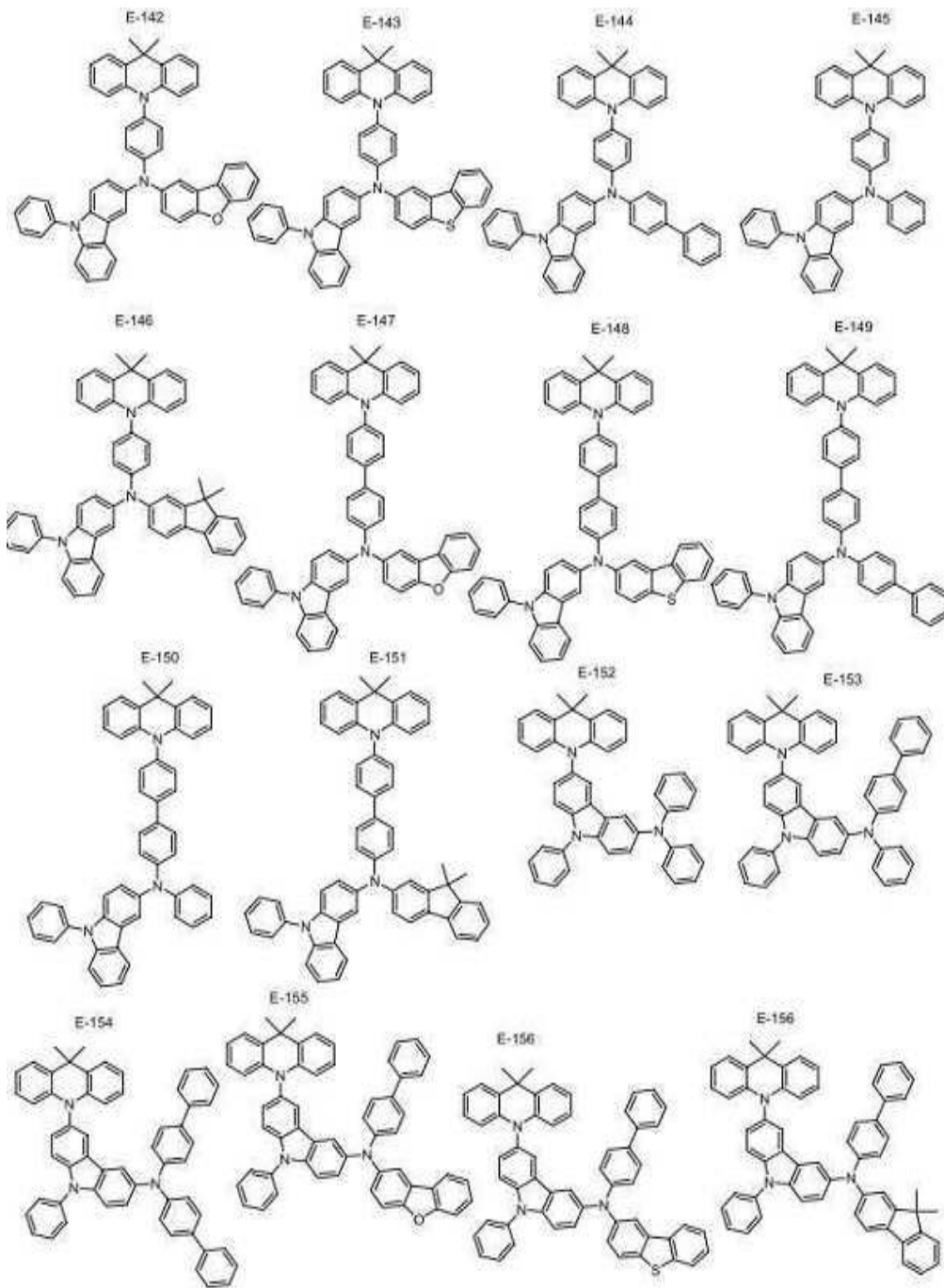
[E-139]

[E-140]

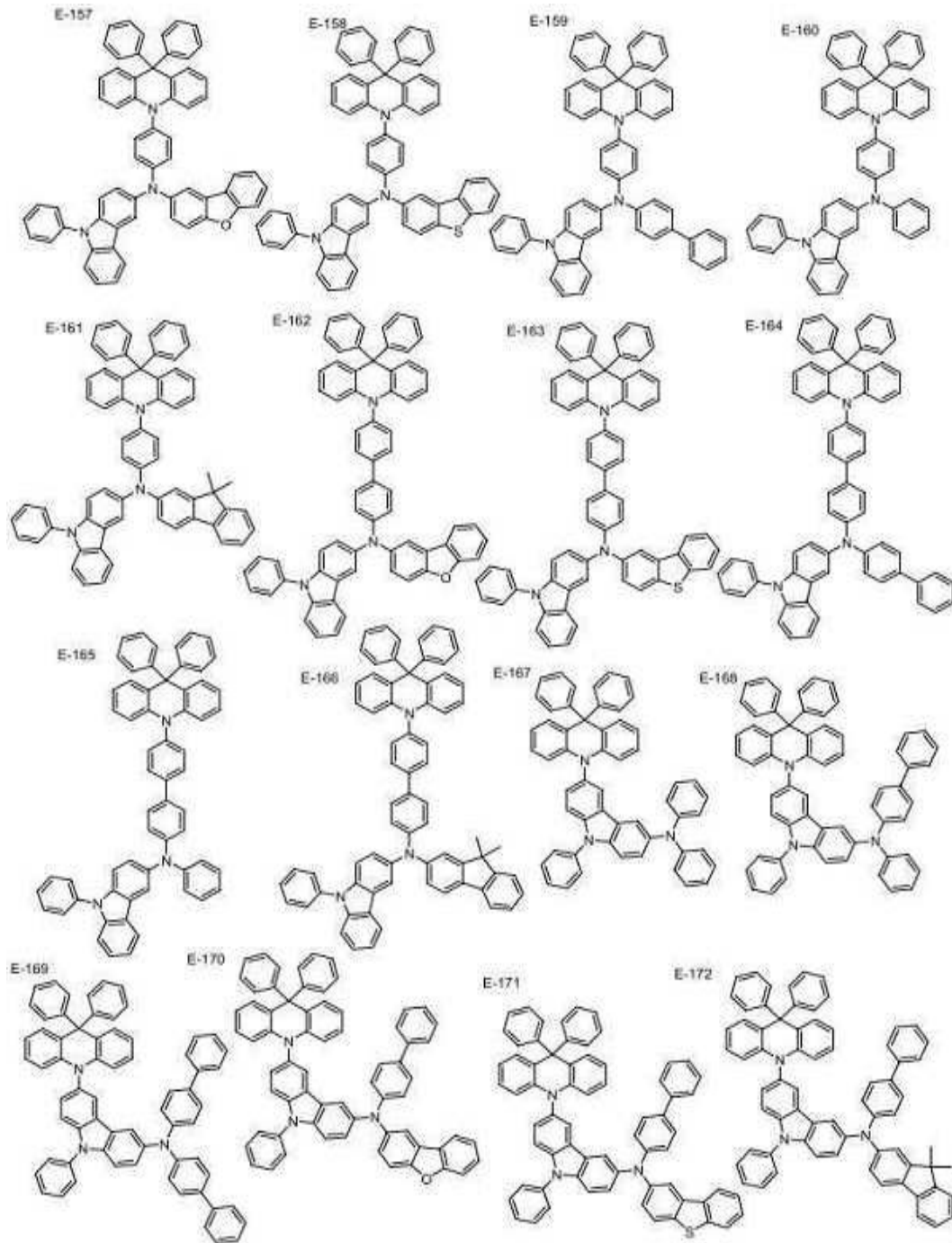
[E-141]



[0190]



[0191]



[0192]

[0194] 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 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물을 포함하는 것인 유기광전자소자를 제공한다.

[0195] 상기 유기광전자소자용 화합물은 유기박막층에 사용되어 유기광전자소자의 수명 특성, 효율 특성, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성을 향상시키며, 구동전압을 낮출 수 있다.

[0196] 상기 유기박막층은 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 주입층, 정공 수송층 또는 발광층일 수 있다.

[0197] 상기 유기박막층은 구체적으로, 정공 주입층 또는 정공 수송층일 수 있다.

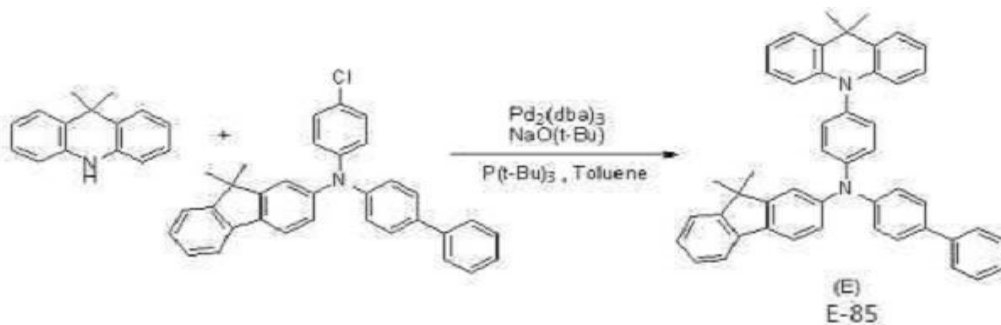
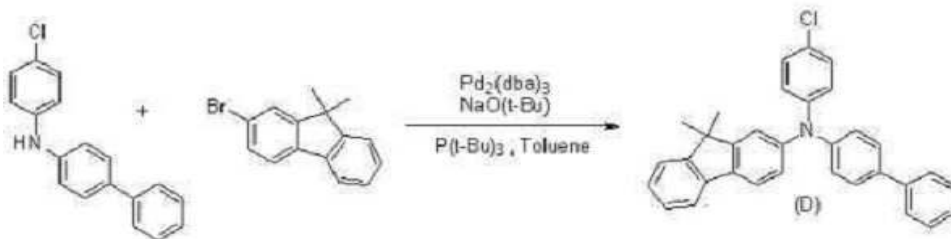
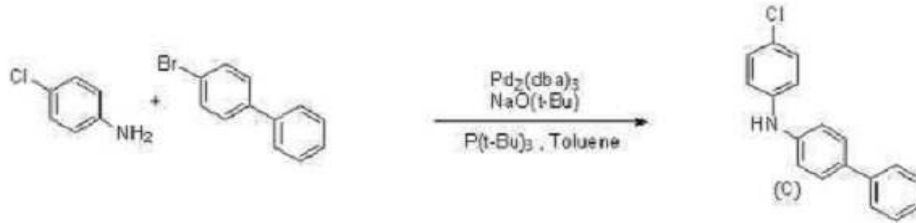
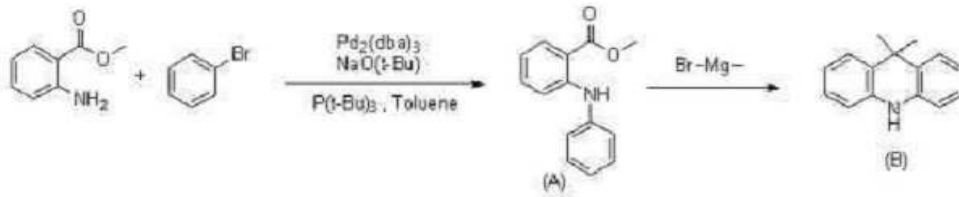
[0198] 상기 유기광전자소자는 유기발광소자, 유기 광전 소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 또는 유기메모리소자일 수 있다.

[0199] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자는 유기발광소자일 수 있다. 도 1 및 도 2는 각각 독립적으로 본 발명의

일 구현예에 따른 화합물을 포함하는 유기발광소자의 단면도이다.

- [0200] 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.
- [0201] 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, 마나뎀, 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. 바람직하게는 상기 양극으로 ITO(indium tin oxide)를 포함하는 투명전극을 사용할 수 있다.
- [0202] 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. 바람직하게는 상기 음극으로 알루미늄 등과 같은 금속전극을 사용할 수 있다.
- [0203] 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.
- [0204] 도 2를 참조하면, 도 2는 유기박막층(105)으로서 전자수송층을 포함하는 발광층(230)과 정공 수송층(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 전자수송층의 기능을 하며, 정공수송층(140)은 ITO와 같은 투명전극과의 접합성 및 정공수송성을 향상시키는 기능을 한다. 또한, 도 1 또는 도 2에서 유기박막층(105)은 도시하지는 않았지만, 전자주입층, 보조 전자수송층, 전자수송층, 보조 정공수송층, 정공수송층, 또는 정공주입층 등을 추가로 더 포함할 수 있다.
- [0205] 상기 도 1 및 도 2에서 상기 유기박막층(105)을 이루는 발광층(130, 230), 정공수송층(140), 도시하지는 않았지만 더 추가될 수 있는 전자주입층, 보조 전자수송층, 전자수송층, 보조 정공수송층, 정공주입층, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나는 상기 화합물을 포함한다.
- [0206] 특히 상기 화합물은 상기 정공주입층, 보조 정공수송층, 또는 정공수송층에 사용될 수 있다.
- [0207] 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.
- [0208] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.
- [0210] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.
- [0212] **(유기광전자소자용 화합물의 제조)**
- [0213] **실시예 1: 화합물 E-85의 합성**
- [0214] 상기 화합물 E-85를 하기 반응식 1과 같은 5단계 경로를 통해 합성하였다.

[0215] [반응식 1]



[0216]

[0217]

[0218] 단계 1 : 중간체 생성물 (A)의 합성

[0219] 브로모벤젠 85g (541.37 mmol), 메틸 2-아미노벤조에이트 98.2g (649.64 mmol), 소듐 tert-부톡사이드 78.0g (812.05 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) 9.9g (10.83 mmol)을 톨루엔 1803 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 10.3mL (43.31 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 헥산 : 디클로로메탄 = 7 : 3(v/v)으로 실리카겔 컬럼 하여 중간체 생성물 (A) 80.0g (수율: 65%)을 얻었다.

[0220] 분자식: C₁₄H₁₃NO₂

[0221] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(227.09), 측정값(227)

[0222]

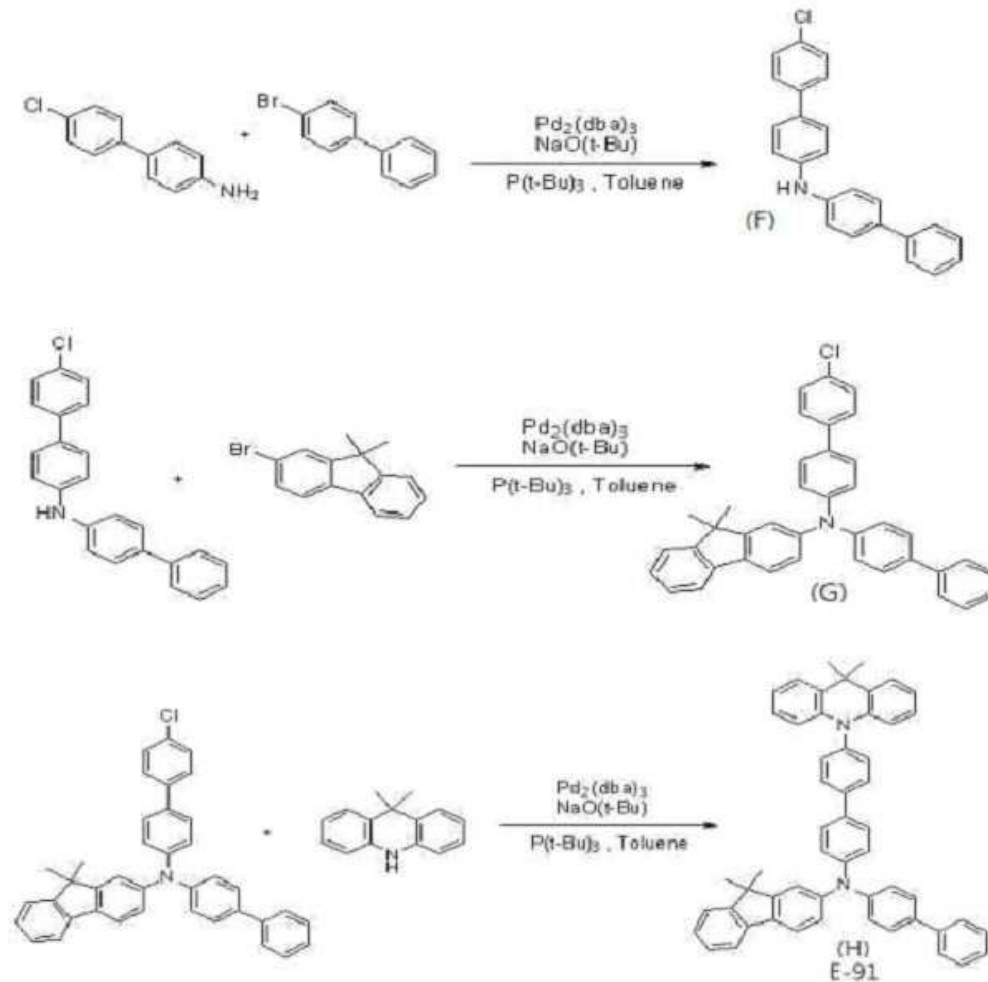
[0223] 단계 2 : 중간체 생성물 (B)의 합성

[0224] 상기 단계 1에서 합성한 중간체 (A) 20.0g (88.00mmol)을 테트라히드로퓨란(293ml)에 현탁시킨 후 0°C에서 메틸 마그네슘브로마이드(3M) 102.7ml 를 천천히 적가하였다. 반응 종료후 반응액을 디클로로메탄으로 추출하고 감압 증류하였다. 감압증류한 생성물에 증류수에 10%로 희석시킨 황산 100ml를 넣고 12시간 동안 실온에서 교반하였다. 반응 종료후 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 중간체 생성물 (B) 15.0g (수율: 81%)을 얻었다.

[0225] 분자식: C₁₅H₁₅N

- [0226] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(209.12), 측정값(209)
- [0227]
- [0228] 단계 3 : 중간체 생성물 (C)의 합성
- [0229] 4-클로로 아닐린 50.0g (391.94mmol), 4-브로모-1,1'-비페닐 100.5 g(431.14mmol)을 소듐 tert-부톡사이드 56.5g (587.91 mmol), 트리스(디벤질리텐아세톤)디팔라듐(0) 7.2g (7.84 mmmol)을 톨루엔 1306 ml에 현탁 시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 7.5mL (31.36 mmol) 를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 중간체 생성물 (C) 86.0g (수율: 79%)을 얻었다.
- [0230] 분자식: C₁₈H₁₄ClN
- [0231] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(279.08), 측정값(279)
- [0232]
- [0233] 단계 4 : 중간체 생성물 (D)의 합성
- [0234] 상기 단계 3에서 합성한 중간체(C) 15.0g (56.62mmol), 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 16.1g (58.98mmol), 소듐 tert-부톡사이드 7.7 g (80.43mmol), 트리스(디벤질리텐아세톤)디팔라듐(0) 1.0g (1.07 mmmol)을 톨루엔 178 ml에 현탁 시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 1.0mL (4.29 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 중간체 생성물 (D) 20.0g (수율: 75%)을 얻었다.
- [0235] 분자식: C₃₃H₂₆ClN
- [0236] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(471.18), 측정값(471)
- [0237]
- [0238] 단계 5 : 최종 생성물 (E)(E-85)의 합성
- [0239] 상기 단계 4에서 합성한 중간체(D) 20.0g (42.37mmol), 단계 2에서 합성한 중간체(B) 9.8g (46.61mmol), 소듐 tert-부톡사이드 6.10 g (63.56mmol), 트리스(디벤질리텐아세톤)디팔라듐(0) 0.8g (0.85 mmmol)을 톨루엔 141 ml에 현탁 시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 0.8mL (3.39 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 최종 생성물 (E)(E-85) 20.1 g (수율: 74%)을 수득하였다.
- [0240] 분자식: C₄₈H₄₀N₂
- [0241] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(644.32), 측정값(644)
- [0243] 실시예 2: 화합물 E-91의 합성
- [0244] 상기 화합물 E-91을 하기 반응식 2와 같은 3단계 경로를 통해 합성하였다.

[0245] [반응식 2]



[0246]

[0247] 단계 1 : 중간체 생성물 (F)의 합성

[0248] 4'-클로로-[1,1'-비페닐]-4-아민 50g 과 4-브로모-1,1'-비페닐 63g을 실시예 1의 단계 3과 같은 방법을 이용하여 중간체 생성물 (A) 59.5g (수율: 68%)를 얻었다.

[0249] 분자식: C₂₄H₁₈ClN

[0250] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(355.11), 측정값(355)

[0251]

[0252] 단계 2 : 중간체 생성물 (G)의 합성

[0253] 상기 단계 1에서 합성한 중간체 (A) 59g과 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 54g을 실시예 1의 단계 4와 같은 방법을 이용하여 중간체 생성물 (G) 72g (수율: 82%)를 얻었다.

[0254] 분자식: C₃₉H₃₀ClN

[0255] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(547.21), 측정값(547)

[0257] 단계 3 : 최종 생성물 (H)(E-91)의 합성

[0258] 상기 단계 2에서 합성한 중간체(B) 20g 과 상기 실시예 1 단계 2에서 합성한 중간체 (B) 9.15g을 상기 실시예 1의 단계 5와 같은 방법을 이용하여 최종 생성물 (H)(E-91) 18.4 g (수율: 71 %)을 수득하였다.

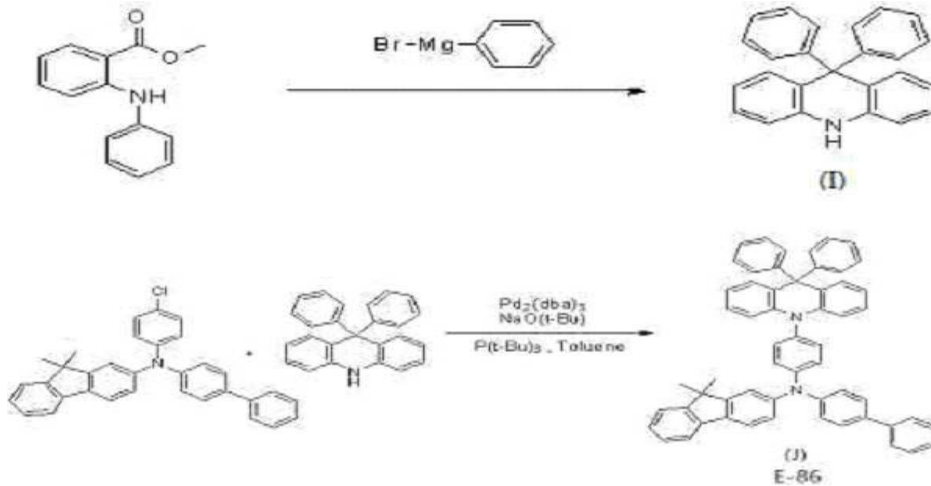
[0259] 분자식: C₅₄H₄₄N₂

[0260] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(720.35), 측정값(720)

[0262] **실시예 3: 화합물 E-86의 합성**

[0263] 상기 화합물 E-86을 하기 반응식 3과 같은 2단계 경로를 통해 합성하였다.

[0264] [반응식 3]



[0265]

[0266] 단계 1 : 중간체 생성물 (I)의 합성

[0267] 상기 실시예 1의 단계 1에서 합성한 중간체 (A) 40.0g과 페닐마그네슘브로마이드 205ml를 상기 실시예 1의 단계 2와 같은 방법을 이용하여 중간체 생성물 (I) 42.0g (수율 72%, HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₅H₁₉N : 333.15, found: 333)을 얻었다.

[0268] 분자식: C₂₅H₁₉N

[0269] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(333.15), 측정값(333)

[0271] 단계 2 : 최종 생성물 (J)(E-86)의 합성

[0272] 상기 실시예 1의 단계 4에서 합성한 중간체(D) 20g과 상기 단계 1에서 합성한 중간체 (A) 16.9g을 상기 실시예 1의 단계 5와 같은 방법을 이용하여 최종 생성물 (J)(E-86) 21.4 g (수율: 63%)을 수득하였다.

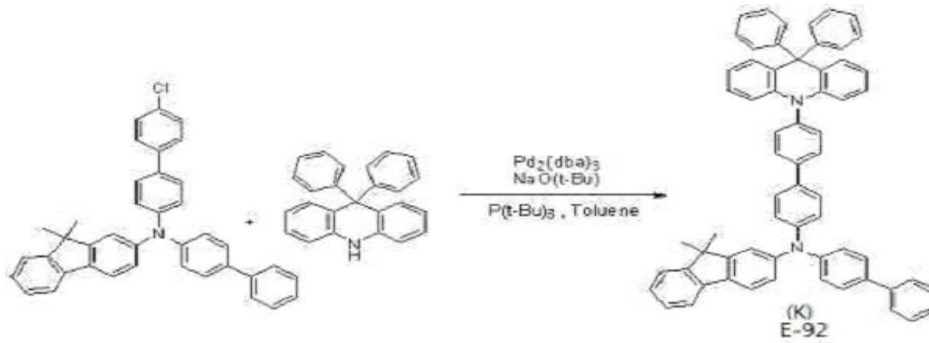
[0273] 분자식: C₅₈H₄₄N₂

[0274] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(768.35), 측정값(768)

[0276] **실시예 4: 화합물 E-92의 합성**

[0277] 상기 화합물 E-92를 하기 반응식 4와 같은 1단계 경로를 통해 합성하였다.

[0278] [반응식 4]



[0279]

[0280] 단계 1 : 최종 생성물 (K)(E-92)의 합성

[0281] 상기 실시예 2의 단계 2에서 합성한 중간체(G) 20g과 상기 실시예 3의 단계 1에서 합성한 중간체 (I) 14.6g을 상기 실시예의 1 단계 5와 같은 방법을 이용하여 최종 생성물 (K)(E-92) 21.2 g (수율: 68%)을 수득하였다.

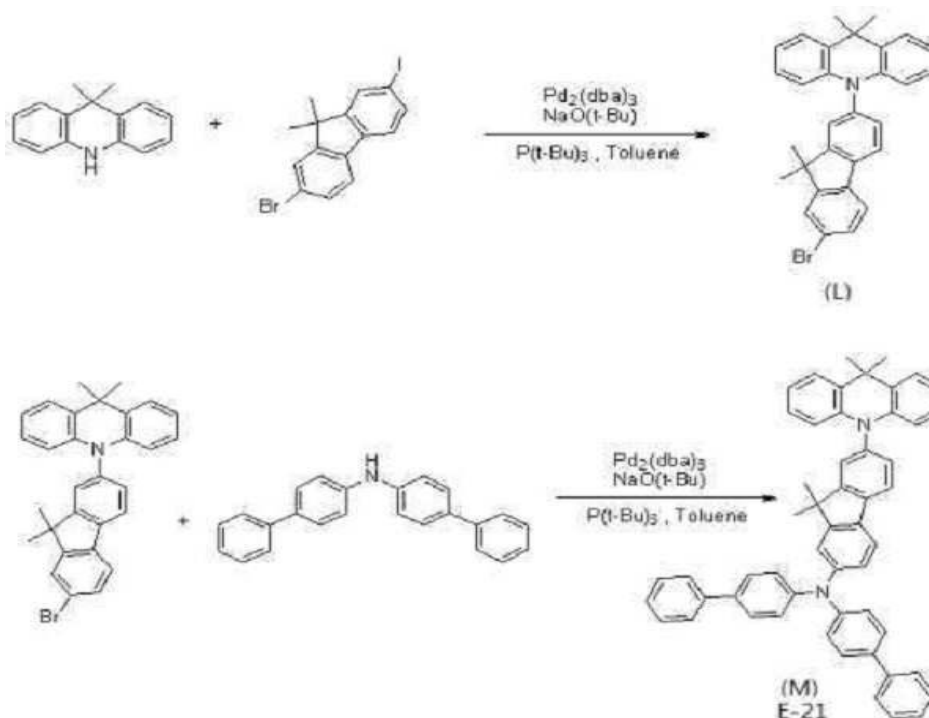
[0282] 분자식: C₆₈H₄₈N₂

[0283] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(844.38), 측정값(844)

[0285] 실시예 5: 화합물 E-21의 합성

[0286] 상기 화합물 E-21을 하기 반응식 5와 같은 2단계 경로를 통해 합성하였다.

[0287] [반응식 5]



[0288]

[0289] 단계 1 : 중간체 생성물 (L)의 합성

[0290] 상기 실시예 1의 단계 2에서 합성한 중간체(B) 50.0g (238.90mmol), 2-브로모-7-아이오도-9,9-디메틸-9 H-플루오렌 104.9g (262.79mmol), 소듐 tert-부톡사이드 34.4 g (358.35mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) 4.4g (4.78 mmol)을 톨루엔 796 ml에 현탁시킨 후, 트리-tert-부틸포스핀 4.5mL (19.11 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 중간체 생성물 (L) 102.3g (수율: 89%)을 얻었다.

[0291] 분자식: C₃₀H₂₆BrN

[0292] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(479.12), 측정값(479)

[0294] 단계 2 : 최종 생성물 (M)(E-21)의 합성

[0295] 상기 단계 1에서 합성한 중간체(L) 20.0g (41.63mmol), 디([1,1'-비페닐]-4-일)아민 14.7g (45.79mmol), 소듐 tert-부톡사이드 6.00 g (62.44mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) 0.8g (0.83 mmol)을 톨루엔 139 ml에 현탁 시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 0.8mL (3.33 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 최종 생성물 (M)(E-21) 22.7 g (수율: 75%)을 수득하였다.

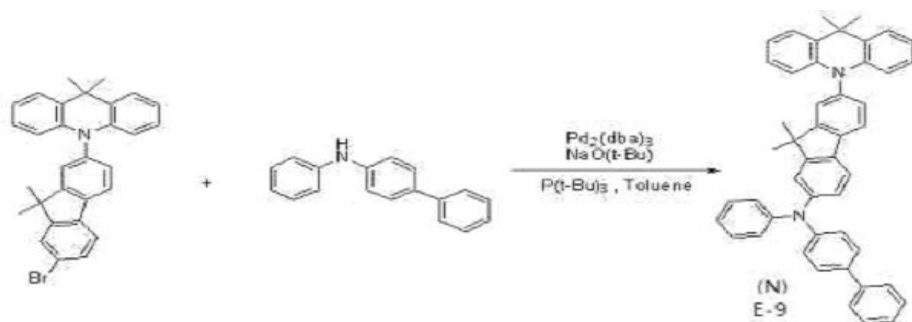
[0296] 분자식: C₅₄H₄₄N₂

[0297] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(720.35), 측정값(720)

[0299] 실시예 6: 화합물 E-9의 합성

[0300] 상기 화합물 E-9를 하기 반응식 6과 같은 1단계 경로를 통해 합성하였다.

[0301] [반응식 6]



[0302]

[0303] 단계 1 : 최종 생성물 (N)(E-9)의 합성

[0304] 상기 실시예 5의 단계 1에서 합성한 중간체(L) 20.0g과 N-페닐-[1,1'-비페닐]-4-아민 11.2g을 상기 실시예 5의 단계 2와 같은 방법을 이용하여 최종 생성물 (N)(E-9) 17.5 g (수율: 65%)을 수득하였다.

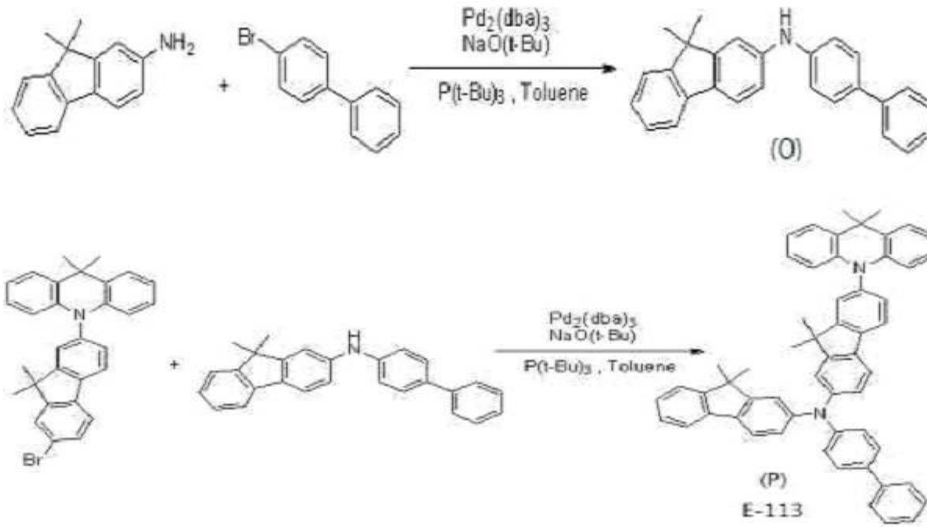
[0305] 분자식: C₄₈H₄₀N₂

[0306] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(644.32), 측정값(644)

[0308] 실시예 7: 화합물 E-113의 합성

[0309] 상기 화합물 E-113을 하기 반응식 7과 같은 2단계 경로를 통해 합성하였다.

[0310] [반응식 7]



[0311]

[0312] 단계 1 : 중간체 생성물 (O)의 합성

[0313] 9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민 15.0g (71.67mmol), 4-브로모-1,1'-비페닐 18.4g (78.84mmol), 소듐 tert-부톡사이드 10.3 g (107.51mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(O) 1.3g (1.43 mmol)을 톨루엔 239 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 1.4mL (5.73 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 중간체 생성물 (O) 18.6g (수율: 72%)을 얻었다.

[0314] 분자식: C₂₇H₂₃N

[0315] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(361.18), 측정값(361)

[0317] 단계 2 : 최종 생성물 (P)(E-113)의 합성

[0318] 상기 실시예 5의 단계 1에서 합성한 중간체(L) 22.0g (45.79mmol), 상기 단계 1에서 합성한 중간체 (O) 18.2g (50.37mmol), 소듐 tert-부톡사이드 6.6 g (68.69mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(O) 0.8g (0.92 mmol)을 톨루엔 153 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 0.9mL (3.66 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 최종 생성물 (P)(E-113) 25.3 g (수율: 73%)을 수득하였다.

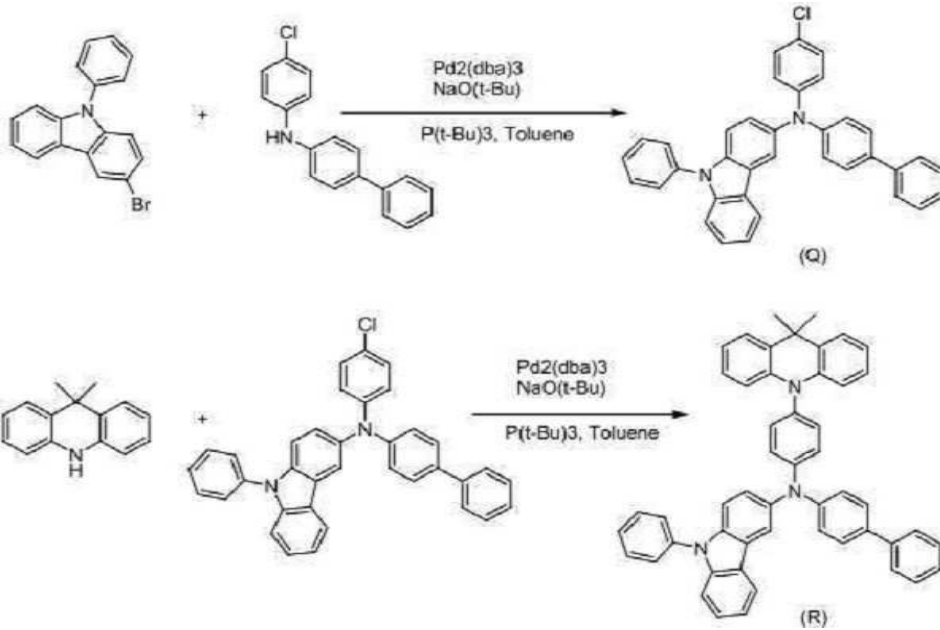
[0319] 분자식: C₅₇H₄₈N₂

[0320] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(760.38), 측정값(760)

[0322] 실시예 8: 화합물 E-144의 합성

[0323] 상기 화합물 E-144을 하기 반응식 8과 같은 2단계 경로를 통해 합성하였다.

[0324] [반응식 8]



[0325]

[0326] 단계 1 : 중간체 생성물 (Q)의 합성

[0327] 3-브로모-9-페닐-9H-카바졸 15g (46.55mmol), 상기 실시예 1 단계 3 에서 합성된 화합물(C) 13g (46.55mmol), 소듐 tert-부톡사이드 6.7 g (69.83mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) 0.9g (0.93 mmmol)을 톨루엔 155 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 0.9mL (3.72 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 디클로로메탄과 헥산으로 재결정 하여 중간체 생성물 (Q) 25.7g (수율: 76%)을 얻었다.

[0328] 분자식: $C_{36}H_{25}ClN_2$

[0329] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(520.17), 측정값(520)

[0331] 단계 2 : 최종 생성물 (R)(E-144)의 합성

[0332] 상기 실시예 1의 단계 2에서 합성한 중간체(B) 10.0g (47.78mmol), 상기 단계 1에서 합성한 중간체 (Q) 24.9g (47.78mmol), 소듐 tert-부톡사이드 6.9 g (71.67mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) 0.9g (0.96 mmmol)을 톨루엔 159 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 0.9mL (3.82 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교 반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 디클로로메탄 과 헥산으로 재결정하여 최종 생성물 (R)(E-144) 20.9 g (수율: 60%)을 수득하였다.

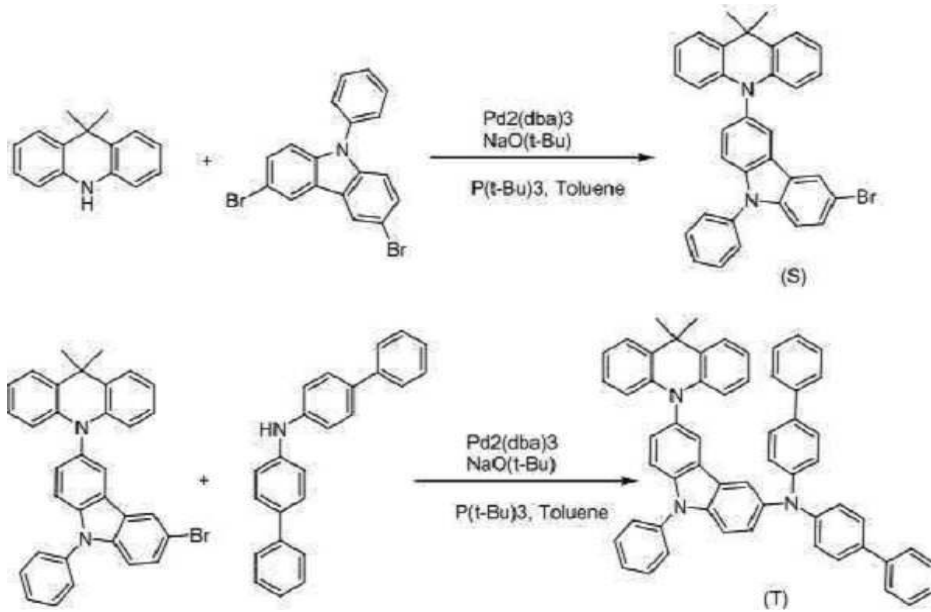
[0333] 분자식: $C_{51}H_{39}N_3$

[0334] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(693.31), 측정값(693)

[0336] 실시예 9: 화합물 E-154의 합성

[0337] 상기 화합물 E-154을 하기 반응식 8과 같은 2단계 경로를 통해 합성하였다.

[0338] [반응식 9]



[0339]

[0340] 단계 1 : 중간체 생성물 (S)의 합성

[0341] 상기 실시예 1 단계 2에서 합성된 화합물(B) 10.0g (47.78mmol), 3,6-디브로모-9-페닐-9H-카바졸 19.2g (47.48mmol), 소듐 tert-부톡사이드 6.9 g (71.67mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) 0.9g (0.96 mmol)을 톨루엔 159 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 0.9mL (3.82 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 중간체 생성물 (S) 20.2g (수율: 80%)을 얻었다.

[0342] 분자식: C₃₃H₂₅BrN₂

[0343] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(528.12), 측정값(528)

[0345] 단계 2 : 최종 생성물 (T)(E-154)의 합성

[0346] 상기 단계 1에서 합성한 중간체(S) 20.0g (37.77mmol), 디([1,1'-비페닐]-4-일)아민 12.1g (37.77mmol), 소듐 tert-부톡사이드 5.4 g (56.66mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) 0.7g (0.76 mmol)을 톨루엔 126 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 0.7mL (3.02 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 최종 생성물 (T)(E-154) 18.3 g (수율: 62%)을 수득하였다.

[0347] 분자식: C₅₇H₄₃N₃

[0348] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(769.35), 측정값(769)

[0350] (유기발광소자의 제조)

[0351] 실시예 10

[0352] ITO(Indium tinoxide)가 1500 Å의 두께가 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상부에 4,4'-bis[N-[4-(N,N-bis(3-methylphenyl)amino)-phenyl]-N-phenylamino]biphenyl (DNTPD)를 진공 증착하여 600 Å 두께의 정공주입층을 형성하였다. 이어서 실시예 1에서 제조된 화합물 E-85를 사용하여 진공 증착으로 300 Å 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 9,10-di-(2-naphthyl)anthracene(AND)을 호스트로 사용하고 도판트로

2,5,8,11-tetra(tert-butyl)perylene(TBPe)를 3 중량%로 도핑하여 진공 증착으로 250 Å 두께의 발광층을 형성하였다. 그 후 상기 발광층 상부에 Alq3를 진공 증착하여 250 Å 두께의 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 10 Å과 Al 1000 Å을 순차적으로 진공 증착하여 음극을 형성함으로써 유기발광소자를 제조하였다.

[0353] 상기 유기발광소자는 5층의 유기박막층을 가지는 구조로 되어 있으며, 구체적으로 Al (1000 Å) / LiF (10 Å) / Alq3 (250 Å) / EML [AND : TBPe = 97 : 3] (250 Å) / HTL (300 Å) / DNTPD (600 Å) / ITO (1500 Å)의 구조로 제작하였다.

[0355] **실시예 11**

[0356] 정공수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 2에서 제조된 화합물(E-91)을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 10과 동일하게 실시하여 유기광전소자를 제작하였다.

[0357] **실시예 12**

[0358] 정공수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 3에서 제조된 화합물(E-86)을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 10과 동일하게 실시하여 유기광전소자를 제작하였다.

[0360] **실시예 13**

[0361] 정공수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 4에서 제조된 화합물(E-92)을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 10과 동일하게 실시하여 유기광전소자를 제작하였다.

[0362] **실시예 14**

[0363] 정공수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 5에서 제조된 화합물(E-21)을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 10과 동일하게 실시하여 유기광전소자를 제작하였다.

[0364] **실시예 15**

[0365] 정공수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 6에서 제조된 화합물(E-9)을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 10과 동일하게 실시하여 유기광전소자를 제작하였다.

[0366] **실시예 16**

[0367] 정공수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 7에서 제조된 화합물(E-113)을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 10과 동일하게 실시하여 유기광전소자를 제작하였다.

[0368] **실시예 17**

[0369] 정공수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 8에서 제조된 화합물(E-144)을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 10과 동일하게 실시하여 유기광전소자를 제작하였다.

[0370] **실시예 18**

[0371] 정공수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 9에서 제조된 화합물(E-154)을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 10과 동일하게 실시하여 유기광전소자를 제작하였다.

[0372] **실시예 19**

[0373] 정공수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 10에서 제조된 화합물(E-144)을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 10과 동일하게 실시하여 유기광전소자를 제작하였다.

[0374] **실시예 20**

[0375] 정공수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 11에서 제조된 화합물(E-154)을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 10과 동일하게 실시하여 유기광전소자를 제작하였다.

[0376] **실시예 21**

[0377] 정공수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, 실시예 12에서 제조된 화합물(E-154)을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 10과 동일하게 실시하여 유기광전소자를 제작하였다.

[0379] **비교예 1**

[0380] 정공수송층으로 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용한 것을 대신하여, N,N'-다이(1-나프틸)-N,N'-다이페닐벤지딘을 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 8과 동일하게 실시하여 유기발광소자를 제작하였다.

[0382] **(유기발광소자의 성능 측정)**

[0383] 상기 실시예 10 내지 18과 비교예 1에서 제조된 각각의 유기발광소자에 대하여 전압에 따른 전류밀도 변화, 휘도 변화 및 발광효율을 측정하였다. 구체적인 측정방법은 다음과 같고, 그 결과는 하기 표 1에 나타내었다

[0385] 1) 전압 변화에 따른 전류 밀도의 변화 측정

[0386] 상기 실시예 10 내지 18, 비교예 1에서 제조된 각각의 유기발광소자에 대해, 전압을 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 전류 밀도를 측정하였다.

[0388] 2) 전압 변화에 따른 휘도 변화 측정

[0389] 상기 실시예 10 내지 18, 비교예 1에서 제조된 각각의 유기발광소자에 대해, 전압을 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 휘도를 측정하였다.

[0391] 3) 발광효율 측정

[0392] 상기 1) 및 2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm²)의 전류 효율(cd/A)을 계산하였다. 그 결과를 각각 표 1에 정리하였다.

표 1

[0394]

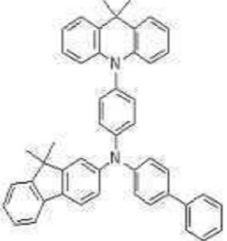
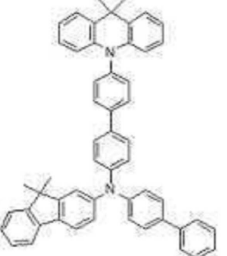
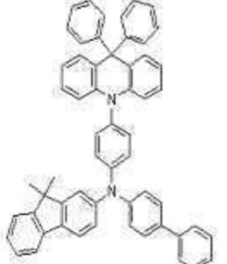
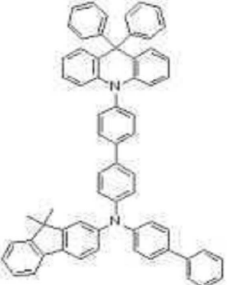
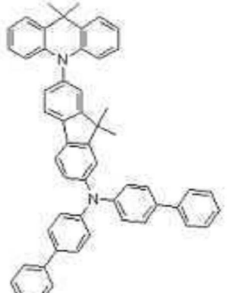
	휘도 1000 cd/m ²			
	화합물	구동전압 (V)	발광 효율 (cd/A)	색 (EL color)
실시예 10	E-85	6.5	5.8	Blue
실시예 11	E-91	6.7	6.1	Blue
실시예 12	E-86	6.6	5.7	Blue
실시예 13	E-92	6.9	6.0	Blue
실시예 14	E-21	6.5	6.0	Blue
실시예 15	E-9	6.4	5.8	Blue
실시예 16	E-113	6.8	5.9	Blue
실시예 17	E-144	7.0	6.0	Blue
실시예 18	E-154	7.0	6.2	Blue
비교예 1	NPB	7.1	5.7	Blue

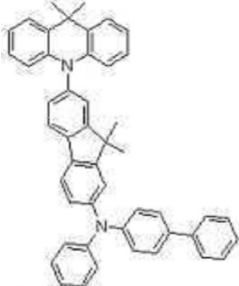
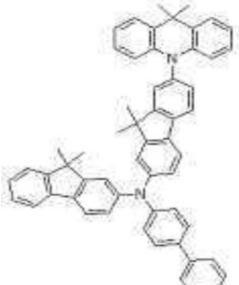
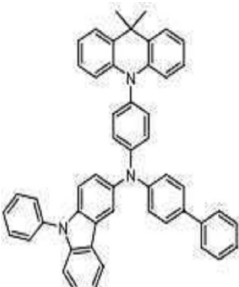

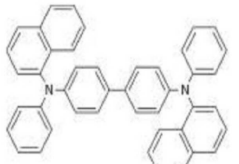
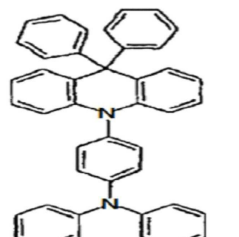
[0396] 상기 표 1에서 알 수 있듯이, 실시예 10 내지 18의 유기발광소자가 비교예 1에 비해 구동전압 및 발광효율 측면에서 개선된 특성을 보이는 것을 알 수 있다. 이를 바탕으로 우수한 정공 주입 및 정공 전달 능력을 가지는 저전압, 고효율의 유기발광소자를 제작할 수 있다.

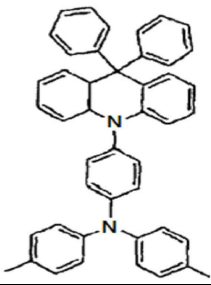
[0398] **(Gaussian 틀을 이용한 에너지 준위 계)**

[0399] 슈퍼컴퓨터 GAIA (IBM power 6)를 사용하여 Gaussian 09 방법으로 상기 실시예 1 내지 9에서 합성한 화합물, 상기 비교예 1에서 사용한 NPB, G-1로 표시되는 화합물, 및 G-2로 표시되는 화합물의 에너지 준위를 계산하여, 하기 표 2에 나타내었다.

표 2

화합물	화합물 구조	Dipole moment (DM)	HOMO(eV)	LUMO(eV)	$\Delta E(T1)$	$\Delta E(S1)$
E-85 (실시예 1)		1.2439	-7.165	2.413	2.6542	3.1912
E-91 (실시예 2)		2.0807	-4.827	-6.031	2.6502	3.1686
E-86 (실시예 3)		2.0376	-4.979	-1.045	2.6985	3.4532
E-92 (실시예 4)		2.4596	-4.619	-5.914	2.6266	3.2882
E-21 (실시예 5)		2.1631	-4.807	-1.159	2.5993	3.0927

<p>E-9 (실시예 6)</p>		<p>2.257</p>	<p>-4.800</p>	<p>-1.125</p>	<p>2.6161</p>	<p>3.1122</p>
<p>E-113 (실시예 7)</p>		<p>2.1272</p>	<p>-4.799</p>	<p>-1.148</p>	<p>2.558</p>	<p>3.1072</p>
<p>E-144 (실시예 8)</p>		<p>3.81756</p>	<p>-4.759</p>	<p>-0.956</p>	<p>2.8354</p>	<p>3.3577</p>
<p>E-154 (실시예 9)</p>		<p>3.7798</p>	<p>-4.766</p>	<p>-1.099</p>	<p>2.7348</p>	<p>3.1121</p>
<p>NPB (비교예 1)</p>		<p>1.3507</p>	<p>-7.644</p>	<p>2.125</p>	<p>2.4121</p>	<p>3.1036</p>
<p>G-1</p>		<p>2.4139</p>	<p>-5.004</p>	<p>-0.578</p>	<p>3.1004</p>	<p>3.7475</p>

G-2		3.1537	-4.963	-0.499	3.0725	3.8048
-----	---	--------	--------	--------	--------	--------

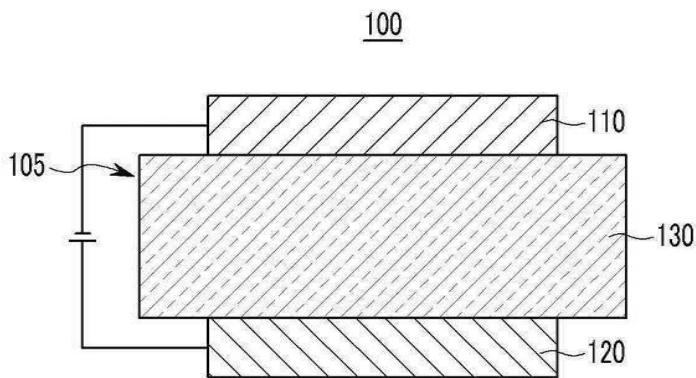
[0403] 본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

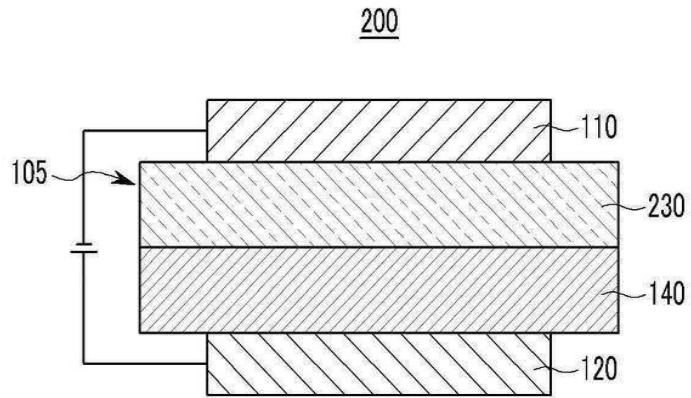
- [0405] 100 : 유기발광소자 110 : 음극
 120 : 양극 105 : 유기박막층
 130 : 발광층 140 : 정공수송층
 230 : 전자수송층을 포함하는 발광층

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	化合物，包括其的有机发光装置，以及包括有机发光装置的显示装置		
公开(公告)号	KR1020160102142A	公开(公告)日	2016-08-29
申请号	KR1020160104346	申请日	2016-08-17
[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	RYU DONGKYU 유동규 YU EUN SUN 유은선 LEE HANILL 이한일 JUNG SUNG HYUN 정성현 HUH DALHO 허달호 HONG JINSEOK 홍진석 RYU DONG WAN 류동완 CHAE MIYOUNG 채미영		
发明人	유동규 유은선 이한일 정성현 허달호 홍진석 류동완 채미영		
IPC分类号	H01L51/00 C07D405/04 H01L27/32 H01L51/50		
CPC分类号	C07D405/04 H01L51/0067 H01L51/0059 H01L51/0062 H01L27/3209 H01L51/5012 H01L51/0069		
其他公开文献	KR101684975B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及一种化合物，包括该化合物的有机发光装置以及包括该有机发光装置的显示装置，并且提供了一种由以下化学式1表示的用于有机光电子装置的化合物。[公式1]

