(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2012-0076314
(43) 공개일자 2012년07월09일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *C07C 211/57* (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2011-0144010
(22) 출원일자 2011년12월27일
심사청구일자 2011년12월27일
(30) 우선권주장
1020100138130 2010년12월29일 대한민국(KR)

(71) 출원인
주식회사 엘지화학
서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)
(72) 발명자
허정오
서울특별시 강서구 강서로47길 80 (내발산동)
홍성길
대전광역시 유성구 가정로 295, 9동 204호 (도룡동, LG사원아파트)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
정순성

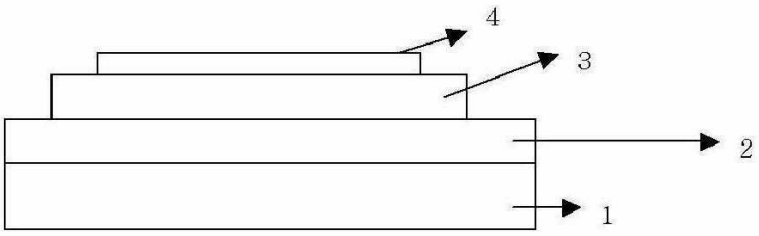
전체 청구항 수 : 총 12 항

(54) 발명의 명칭 **새로운 화합물 및 이를 이용한 유기 발광 소자**

(57) 요 약

본 발명은 유기 발광 소자의 수명, 효율, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성을 크게 향상시킬 수 있는 신규 화합물, 및 상기 화합물을 포함하는 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

대 표 도 - 도1



(72) 발명자

김연환

서울특별시 양천구 목5동 목동6단지아파트 610동 1801호

박태윤

대전광역시 유성구 관평동 테크노밸리 쌍용아파트 408동 1402호

장혜영

대전광역시 서구 청사로 148, 1210호 (둔산동, 매그놀리아)

김공겸

대전광역시 유성구 용산동 대덕테크노밸리12단지 1210동 101호

김성소

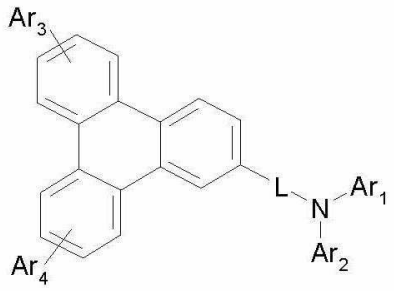
경기도 파주시 조리읍 동문그린씨티아파트 511동 902호

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

Ar_1 및 Ar_2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알킬기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알콕시기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로 고리기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴티오기; 및 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알콕시카르보닐기로 이루어진 군에서 선택되고,

L은 직접결합; 니트로, 니트릴, 할로겐, 알킬기 및 알콕시기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴렌기; 니트로, 니트릴, 할로겐, 알킬기 및 알콕시기로 이

루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 2가의 헤테로 고리기; 또는 니트로, 니트릴, 할로겐, 알킬기 및 알콕시기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기이고, 단, L이 직접결합이고 Ar_1 및 Ar_2가 동시에 탄소수 6의 페닐기 또는 탄소수 7의 톨릴기인 경우는 제외하고,

Ar_3 및 Ar_4는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알케닐기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로 고리기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 및 니트릴기로 이루어진 군에서 선택된다.

청구항 2

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 Ar_1 및 Ar_2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로 고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 3

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 L은 직접결합; 또는 니트로, 니트릴, 할로겐, 알킬기 및 알콕시기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴렌기인 것을 특징으로 하는 화합물.

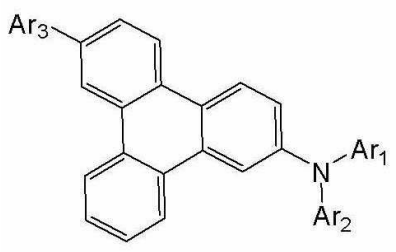
청구항 4

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 Ar_3 및 Ar_4는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로 고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

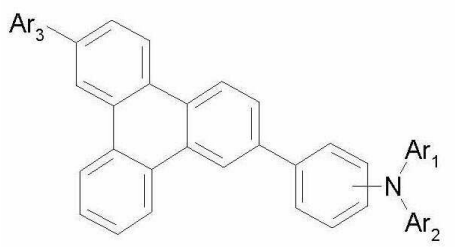
청구항 5

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 2]



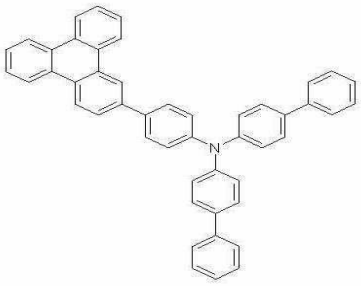
[화학식 3]



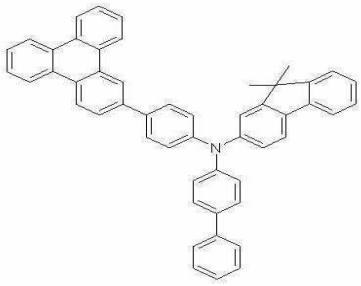
상기 화학식 2 및 3에서, Ar_1 내지 Ar_3은 상기 화학식 1에 정의된 바와 같다.

청구항 6

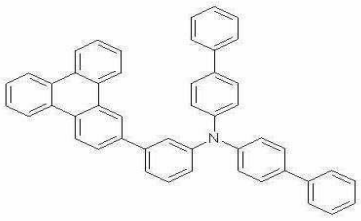
청구항 1에 있어서, 상기 화합물은 하기 화학식으로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 화합물:



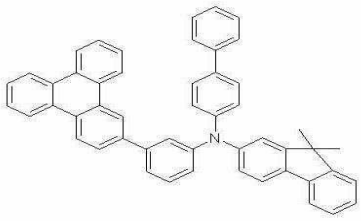
[화학식 1-1]



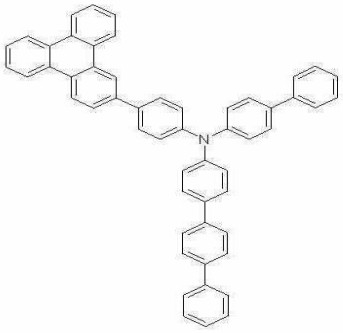
[화학식 1-2]



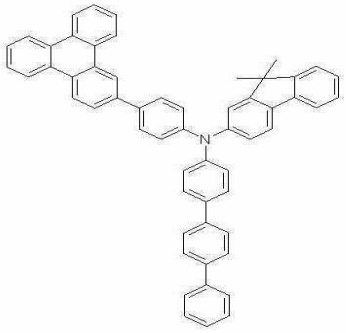
[화학식 1-3]



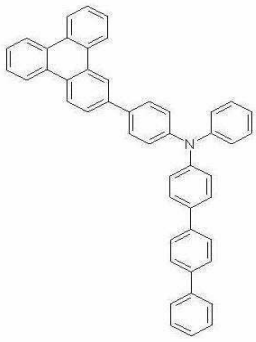
[화학식 1-4]



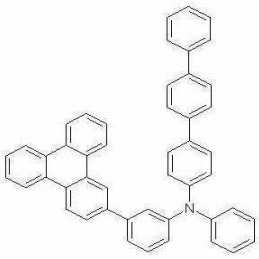
[화학식 1-5]



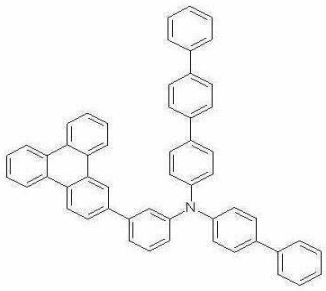
[화학식 1-6]



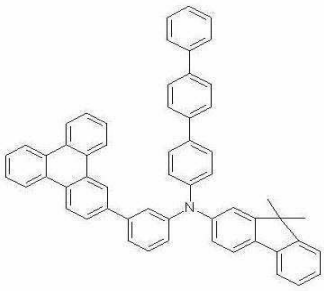
[화학식 1-7]



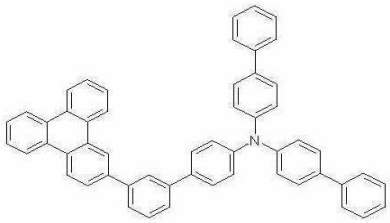
[화학식 1-8]



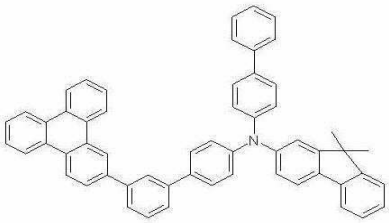
[화학식 1-9]



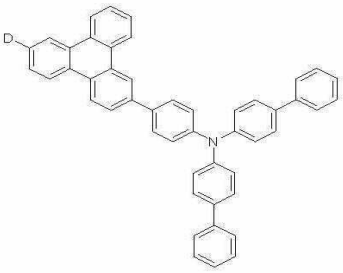
[화학식 1-10]



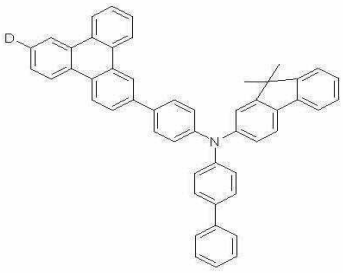
[화학식 1-11]



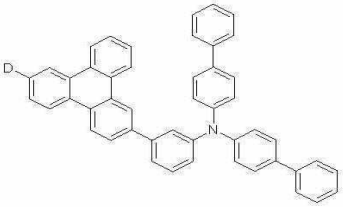
[화학식 1-12]



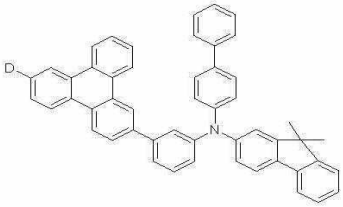
[화학식 1-13]



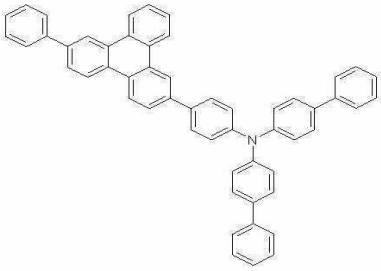
[화학식 1-14]



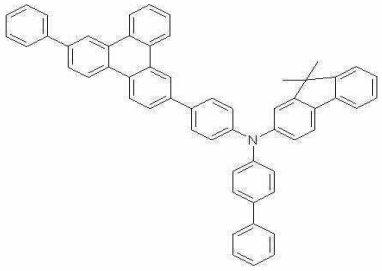
[화학식 1-15]



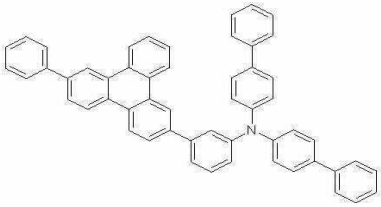
[화학식 1-16]



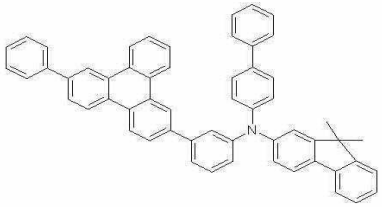
[화학식 1-17]



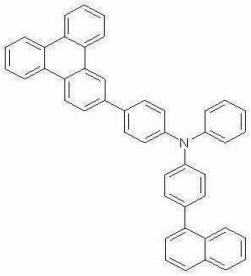
[화학식 1-18]



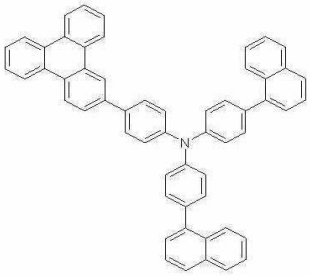
[화학식 1-19]



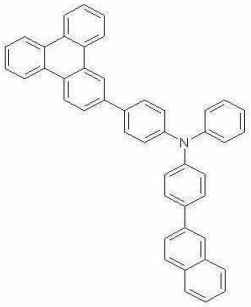
[화학식 1-20]



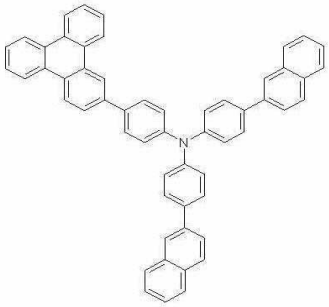
[화학식 1-21]



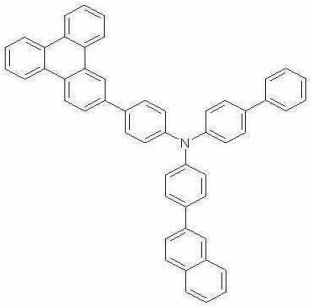
[화학식 1-22]



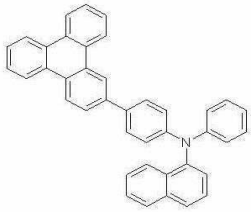
[화학식 1-23]



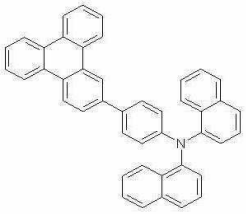
[화학식 1-24]



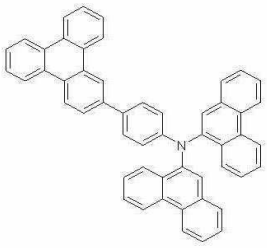
[화학식 1-25]



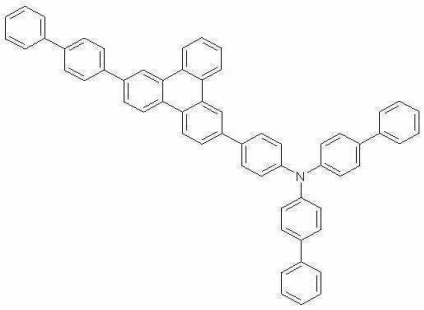
[화학식 1-26]



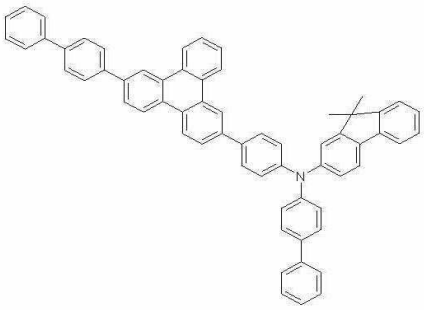
[화학식 1-27]



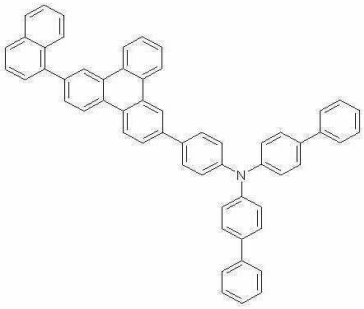
[화학식 1-28]



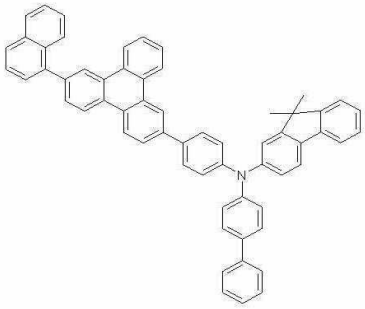
[화학식 1-29]



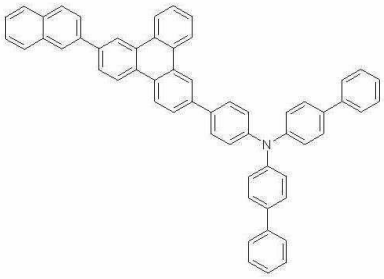
[화학식 1-30]



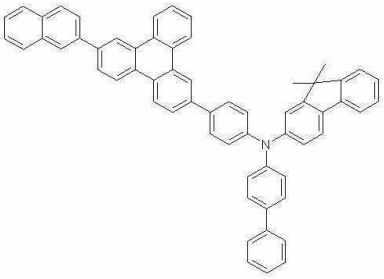
[화학식 1-31]



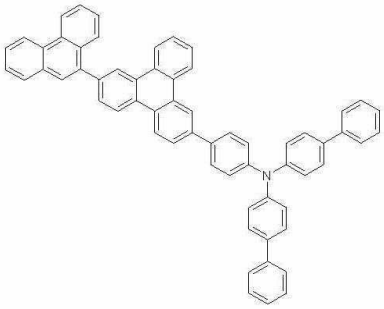
[화학식 1-32]



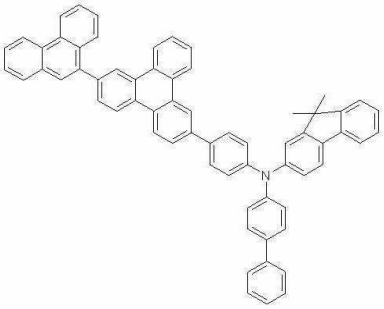
[화학식 1-33]



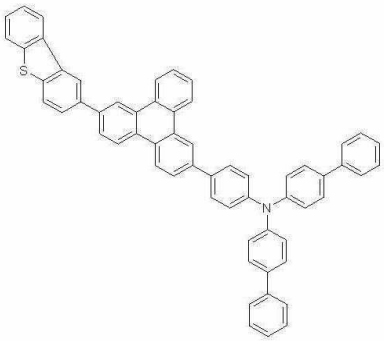
[화학식 1-34]



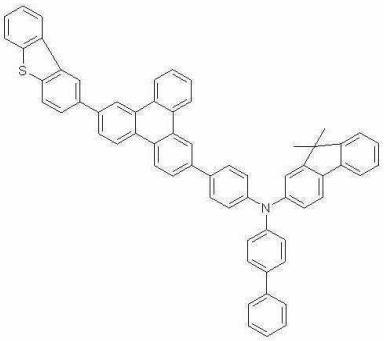
[화학식 1-35]



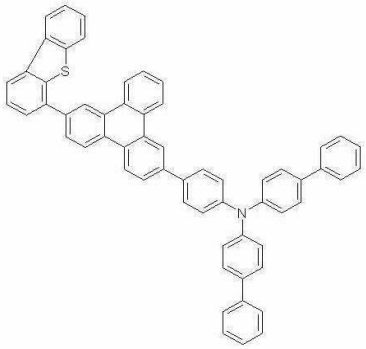
[화학식 1-36]



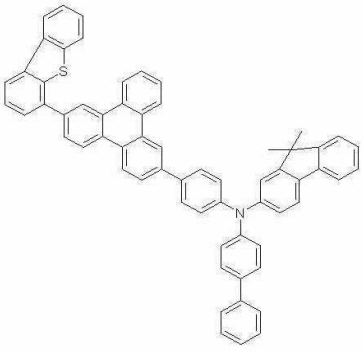
[화학식 1-37]



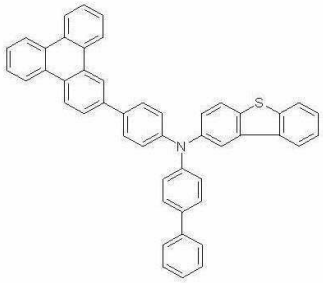
[화학식 1-38]



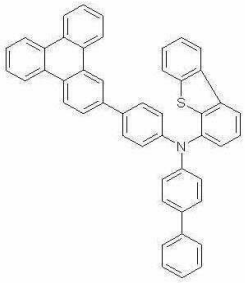
[화학식 1-39]



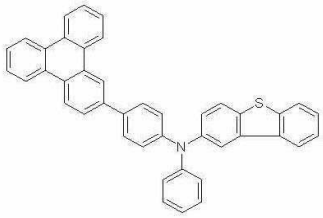
[화학식 1-40]



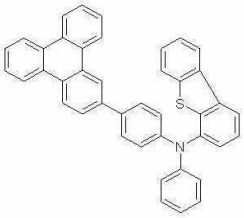
[화학식 1-41]



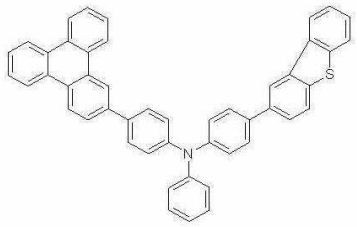
[화학식 1-42]



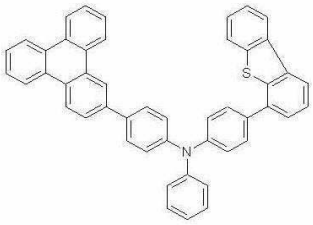
[화학식 1-43]



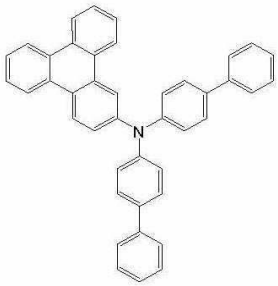
[화학식 1-44]



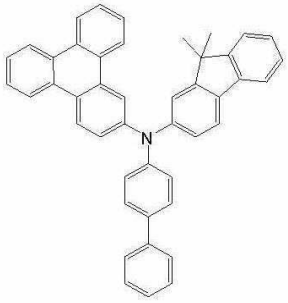
[화학식 1-45]



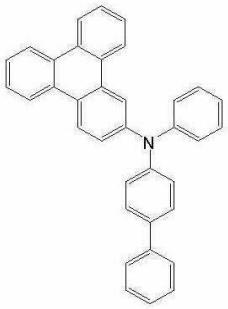
[화학식 1-46]



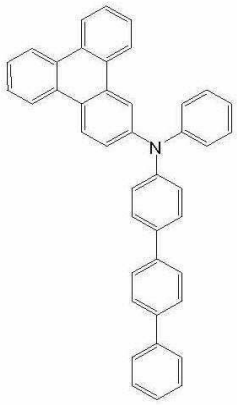
[화학식 1-47]



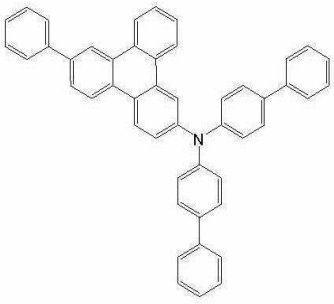
[화학식 1-48]



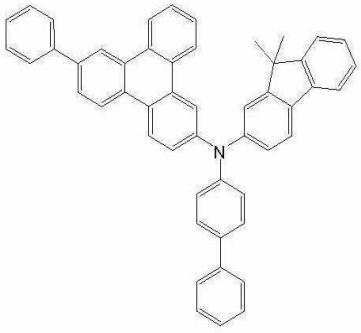
[화학식 1-49]



[화학식 1-50]



[화학식 1-51]



[화학식 1-52]

청구항 7

제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 청구항 1 내지 청구항 6 중 어느 한 항의 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 8

청구항 7에 있어서, 상기 유기물층은 정공 수송층을 포함하고, 이 정공 수송층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 9

청구항 7에 있어서, 상기 유기물층은 정공 주입층을 포함하고, 이 정공 주입층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 10

청구항 7에 있어서, 상기 유기물층은 정공 주입과 정공 수송을 동시에 포함하는 층을 포함하고, 이 층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 11

청구항 7에 있어서, 상기 유기물층은 전자 주입 및 전자 수송층을 포함하고, 이 전자 주입 또는 전자 수송층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 12

청구항 7에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 이 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

명 세 서

기 술 분 야

[0001] 본 출원은 2010년 12월 29일에 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제10-2010-0138130호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.

[0002] 본 발명은 유기 발광 소자의 수명, 효율, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성을 크게 향상시킬 수 있는 신규 화합물이 유기 화합물층에 함유되어 있는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0003] 유기 발광 현상은 특정 유기 분자의 내부 프로세스에 의하여 전류가 가시광으로 전환되는 예의 하나이다. 유기 발광 현상의 원리는 다음과 같다. 양극과 음극 사이에 유기물 층을 위치시켰을 때 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 음극과 양극으로부터 각각 전자와 정공이 유기물층으로 주입된다. 유기물층으로 주입된 전자와 정공은 재결합하여 엑시톤(exciton)을 형성하고, 이 엑시톤이 다시 바닥 상태로 떨어지면서 빛이 나게 된다. 이러한 원리를 이용하는 유기 발광 소자는 일반적으로 음극과 양극 및 그 사이에 위치한 유기물층, 예컨대 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층을 포함하는 유기물층으로 구성될 수 있다.

[0004] 유기 발광 소자에서 사용되는 물질로는 순수 유기 물질 또는 유기 물질과 금속이 착물을 이루는 착화합물이 대부분을 차지하고 있으며, 용도에 따라 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 발광 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 구분될 수 있다. 여기서, 정공 주입 물질이나 정공 수송 물질로는 p-타입의 성질을 가지는 유기 물질, 즉 쉽게 산화가 되고 산화시에 전기화학적으로 안정한 상태를 가지는 유기물이 주로 사용되고 있다. 한편, 전자 주입 물질이나 전자 수송 물질로는 n-타입 성질을 가지는 유기 물질, 즉 쉽게 환원이 되고 환원시에 전기화학적으로 안정한 상태를 가지는 유기물이 주로 사용되고 있다. 발광층 물질로는 p-타입 성질과 n-타입 성질을 동시에 가진 물질, 즉 산화와 환원 상태에서 모두 안정한 형태를 갖는 물질이 바람직하며, 엑시톤이 형성되었을 때 이를 빛으로 전환하는 발광 효율이 높은 물질이 바람직하다.

[0005] 위에서 언급한 외에, 유기 발광 소자에서 사용되는 물질은 다음과 같은 성질을 추가적으로 갖는 것이 바람직하다.

[0006] 첫째로 유기 발광 소자에서 사용되는 물질은 열적 안정성이 우수한 것이 바람직하다. 유기 발광 소자 내에서는 전하들의 이동에 의한 줄열(joule heating)이 발생하기 때문이다. 현재, 정공 수송층 물질로 주로 사용되는 NPB는 유리 전이 온도가 100℃ 이하의 값을 가지므로, 높은 전류를 필요로 하는 유기 발광 소자에서는 사용하기 힘든 문제가 있다.

[0007] 둘째로 저전압 구동 가능한 고효율의 유기 발광 소자를 얻기 위해서는 유기 발광 소자 내로 주입된 정공 또는 전자들이 원활하게 발광층으로 전달되는 동시에, 주입된 정공과 전자들이 발광층 밖으로 빠져나가지 않도록 하여야 한다. 이를 위해서 유기 발광 소자에 사용되는 물질은 적절한 밴드갭(band gap)과 HOMO 또는 LUMO 에너지 준위를 가져야 한다. 현재, 용액 도포법에 의해 제조되는 유기 발광 소자에서 정공 수송 물질로 사용되는 PEDOT : PSS의 경우, 발광층 물질로 사용되는 유기물의 LUMO 에너지 준위에 비하여 LUMO 에너지 준위가 낮기 때문에 고효율 장수명의 유기 발광 소자 제조에 어려움이 있다.

[0008] 이외에도 유기 발광 소자에서 사용되는 물질은 화학적 안정성, 전하이동도, 전극이나 인접한 층과의 계면 특성 등이 우수하여야 한다. 즉, 유기 발광 소자에서 사용되는 물질은 수분이나 산소에 의한 물질의 변형이 적어야 한다. 또한, 적절한 정공 또는 전자 이동도를 가짐으로써 유기 발광 소자의 발광층에서 정공과 전자의 밀도가 균형을 이루도록 하여 엑시톤 형성을 극대화할 수 있어야 한다. 그리고, 소자의 안정성을 위해 금속 또는 금속 산화물을 포함한 전극과의 계면을 좋게 할 수 있어야 한다.

[0009] 따라서, 당 기술분야에서는 상기와 같은 요건을 갖춘 유기물의 개발이 요구되고 있다.

발명의 내용

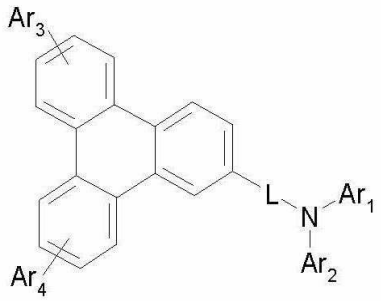
해결하려는 과제

[0010] 이에 본 발명자들은 유기 발광 소자에서 사용 가능한 물질에 요구되는 조건, 예컨대 적절한 에너지 준위, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성 등을 만족시킬 수 있으며, 치환기에 따라 유기 발광 소자에서 요구되는 다양한 역할을 할 수 있는 화학 구조를 갖는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0011] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0012] [화학식 1]

[0013] 

[0014] 상기 화학식 1에 있어서,

[0015] Ar_1 및 Ar_2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알킬기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알콕시기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로 고리기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐

기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴티오기; 및 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알콕시카르보닐기로 이루어진 군에서 선택되고,

[0016] L은 직접결합; 니트로, 니트릴, 할로겐, 알킬기 및 알콕시기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴렌기; 니트로, 니트릴, 할로겐, 알킬기 및 알콕시기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 2가의 헤테로 고리기; 또는 니트로, 니트릴, 할로겐, 알킬기 및 알콕시기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기이고, 단, L이 직접결합이고 Ar_1 및 Ar_2가 동시에 탄소수 6의 페닐기 또는 탄소수 7의 톨릴기인 경우는 제외하고,

[0017] Ar_3 및 Ar_4는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알케닐기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로 고리기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 및 니트릴기로 이루어진 군에서 선택된다.

[0018] 또한, 본 발명은 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

[0019] 본 발명의 화합물은 유기 발광 소자에서 유기물층 물질, 특히 정공 주입 물질 및/또는 정공 수송 물질로 사용될 수 있으며, 이 화합물을 유기 발광 소자에 사용하는 경우 소자의 구동전압을 낮추고, 광효율을 향상시키며, 화합물의 열적 안정성에 의하여 소자의 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0020] 도 1은 기판(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

도 2는 기판(1), 양극(2), 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7), 전자 수송층(8) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0021] 이하 본 발명을 더욱 구체적으로 설명한다.

[0022] 본 발명에 따른 신규한 화합물은 상기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다.

[0023] 본 발명에 따른 화합물에 있어서, 상기 화학식 1의 치환기들을 보다 구체적으로 설명하면 하기와 같다.

[0024] 상기 할로겐기로는 불소, 염소, 브롬, 요오드 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[0025] 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 12인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기 등이 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

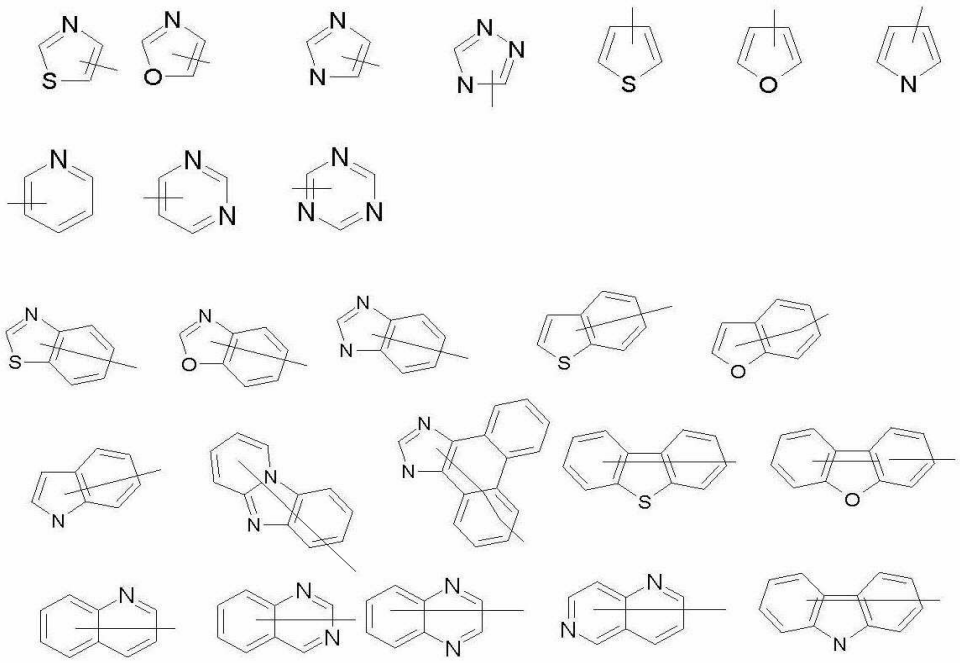
[0026] 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있으며, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 2 내지 12인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 스틸베닐기(stylbenyl), 스티레닐기(styrenyl) 등의 아릴기가 연결된 알케닐기가 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[0027] 상기 시클로알킬기는 탄소수 3 내지 12의 입체적 방해를 주지 않는 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등이 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[0028] 상기 알콕시기는 탄소수 1 내지 12인 것이 바람직하고, 보다 구체적으로 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[0029] 상기 아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 6 내지 40인 것이 바람직하다. 단환식 아릴기의 예로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 스틸벤 등을 들 수 있고, 다환식 아릴기의 예로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페나트렌기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[0030] 상기 헤테로아릴기는 이종 원자로 O, N, S 또는 P를 포함하는 고리기로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 3 내지 30인 것이 바람직하다. 헤테로고리기의 예로는 카바졸기, 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딜기, 피라다진기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀린기, 아크리딜기 등이 있으며, 하기 구조식과 같은 화합물들이 바람직하나, 이에만 한정되는 것은 아니다.



[0031]

[0032] 또한, 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소, 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 실릴기, 아릴알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 카바졸기, 아릴기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 및 니트릴기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되었거나 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다.

[0033] 상기 화학식 1의 Ar_1 내지 Ar_4, 및 L에 추가적으로 치환될 수 있는 치환기로는 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 실릴기, 아릴알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 카바졸기, 아릴기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[0034] 상기 화학식 1의 Ar_1 및 Ar_2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로 고리기; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기; 및 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.

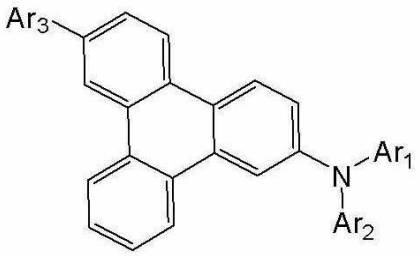
[0035] 상기 화학식 1의 L은 직접결합; 또는 니트로, 니트릴, 할로겐, 알킬기 및 알콕시기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴렌기인 것이 바람직하다. 단, L이 직접결합이고 Ar_1 및 Ar_2가 동시에 탄소수 6의 페닐기 또는 탄수소 7의 톨릴기인 경우는 제외한다.

[0036] 상기 화학식 1의 Ar_3 및 Ar_4는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 아릴알킬기, 치

환 또는 비치환된 아릴알케닐기, 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N 또는 S를 포함하는 헤테로 고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.

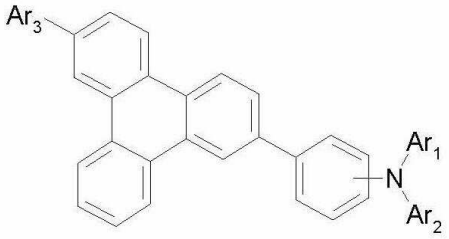
[0037] 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 3으로 표시될 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[0038] [화학식 2]



[0039]

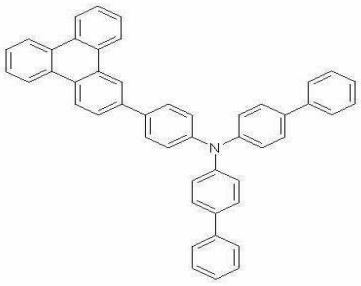
[0040] [화학식 3]



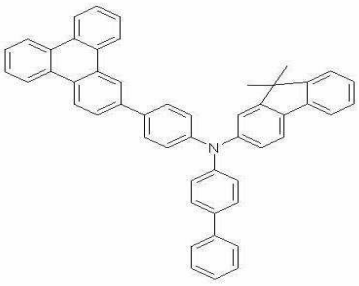
[0041]

[0042] 상기 화학식 2 및 3에서, Ar_1 내지 Ar_3은 상기 화학식 1에 정의된 바와 같다.

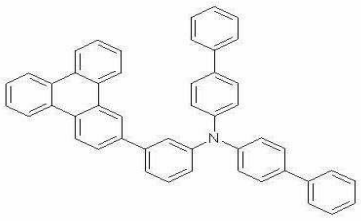
[0043] 본 발명에 따른 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 하기 화합물이 본 발명을 한정하는 것은 아니다.



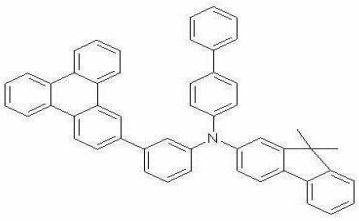
[화학식 1-1]



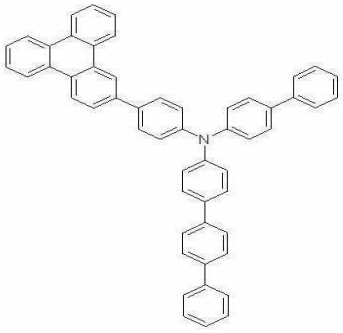
[화학식 1-2]



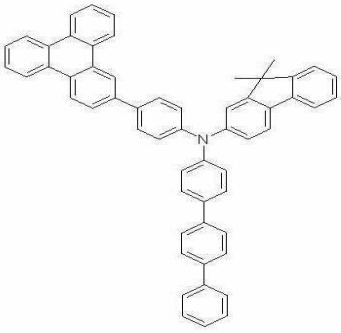
[화학식 1-3]



[화학식 1-4]

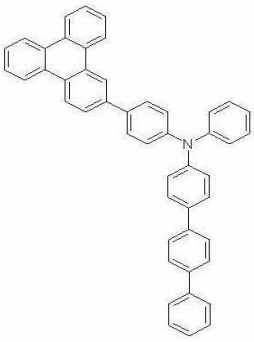


[화학식 1-5]

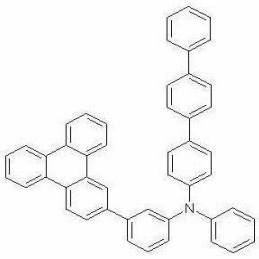


[화학식 1-6]

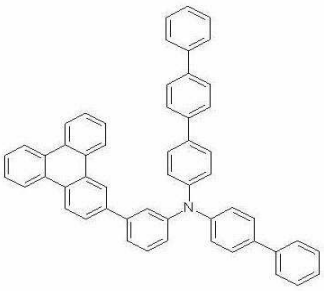
[0044]



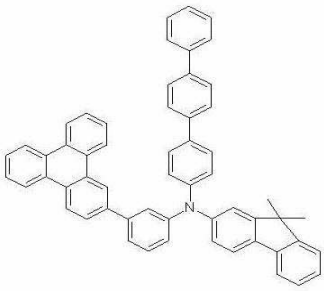
[화학식 1-7]



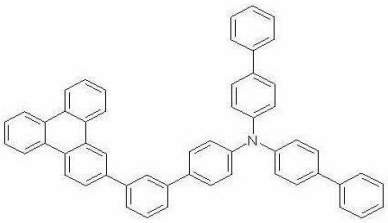
[화학식 1-8]



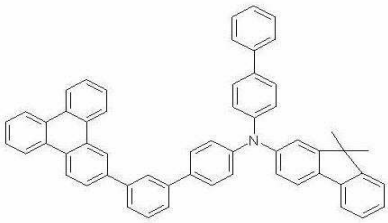
[화학식 1-9]



[화학식 1-10]

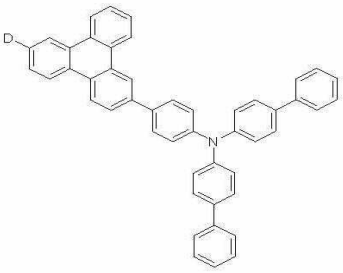


[화학식 1-11]

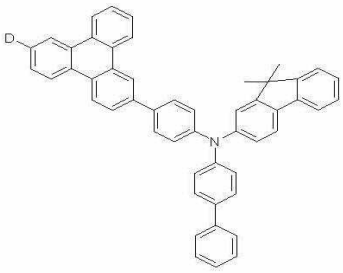


[화학식 1-12]

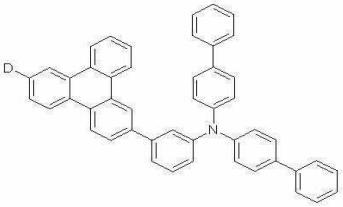
[0045]



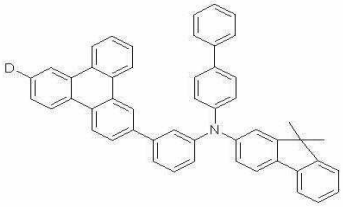
[화학식 1-13]



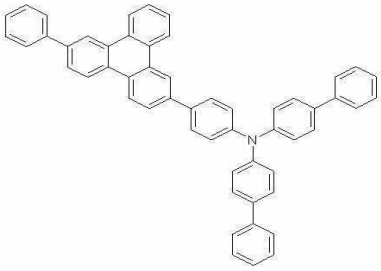
[화학식 1-14]



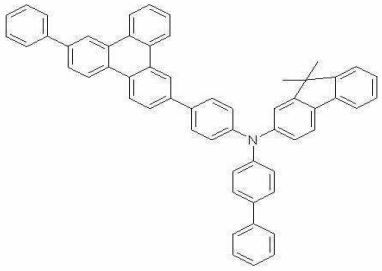
[화학식 1-15]



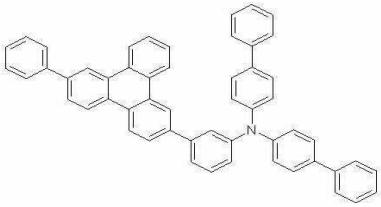
[화학식 1-16]



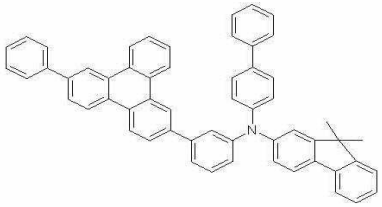
[화학식 1-17]



[화학식 1-18]

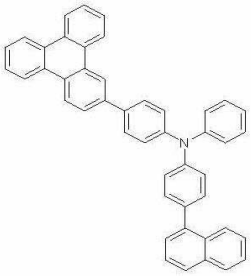


[화학식 1-19]

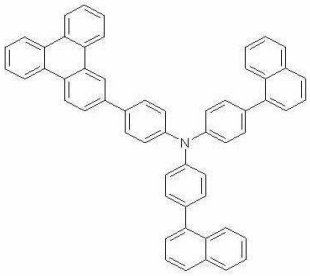


[화학식 1-20]

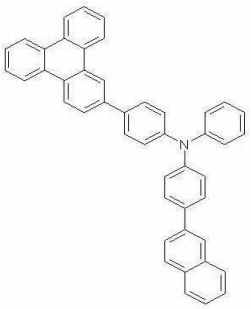
[0046]



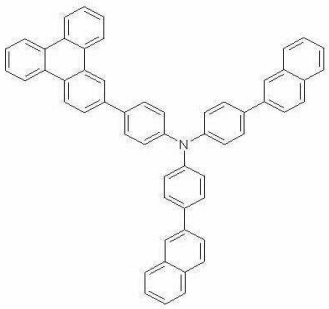
[화학식 1-21]



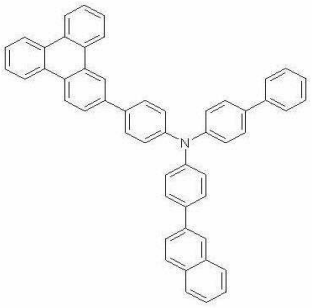
[화학식 1-22]



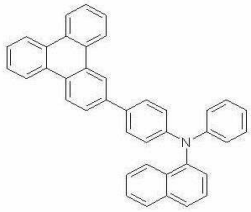
[화학식 1-23]



[화학식 1-24]

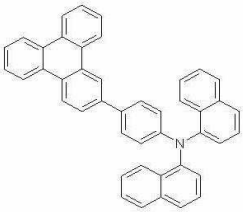


[화학식 1-25]

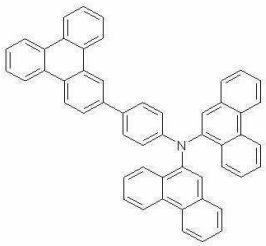


[화학식 1-26]

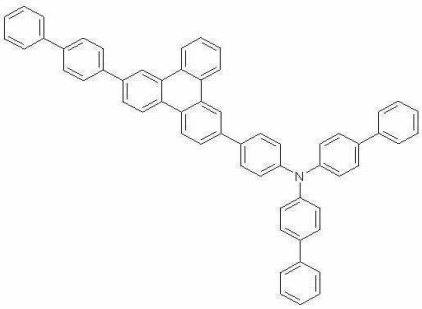
[0047]



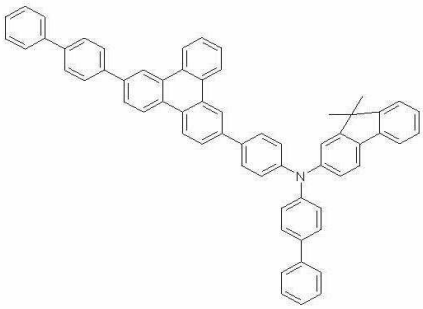
[화학식 1-27]



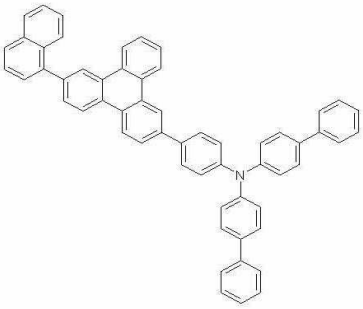
[화학식 1-28]



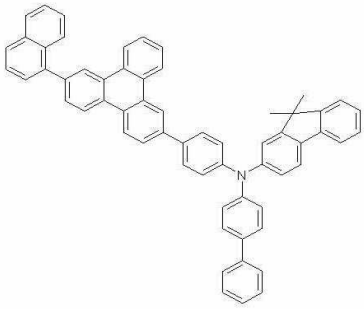
[화학식 1-29]



[화학식 1-30]

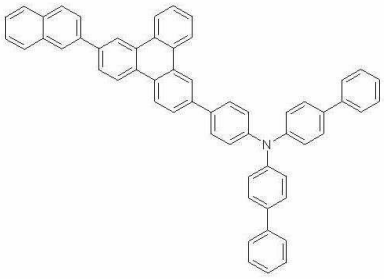


[화학식 1-31]

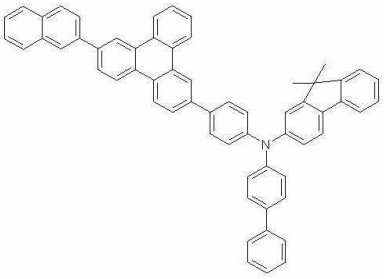


[화학식 1-32]

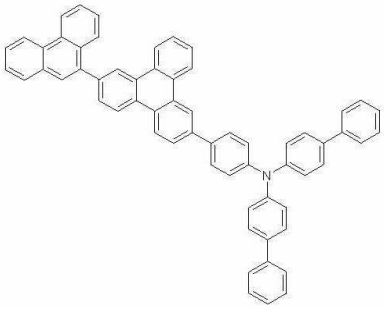
[0048]



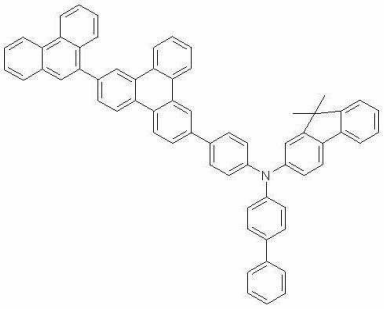
[화학식 1-33]



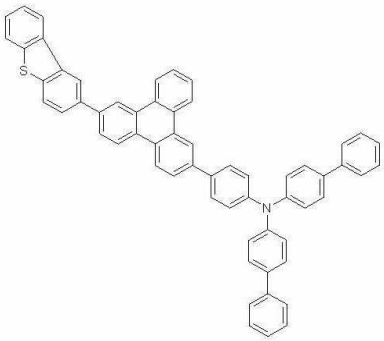
[화학식 1-34]



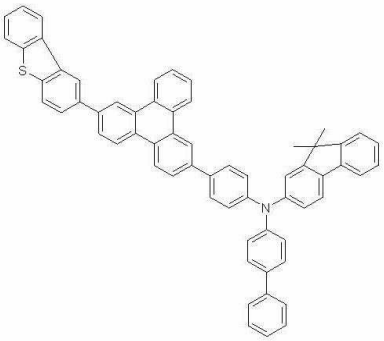
[화학식 1-35]



[화학식 1-36]

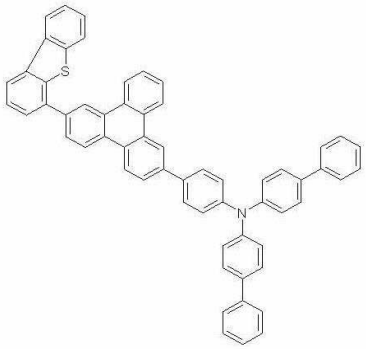


[화학식 1-37]

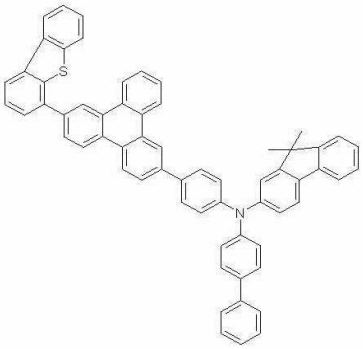


[화학식 1-38]

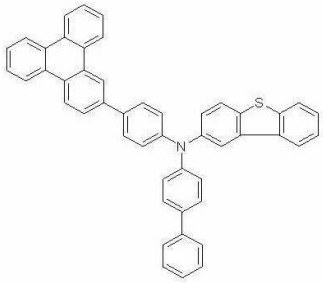
[0049]



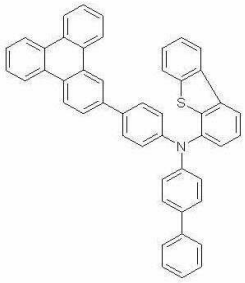
[화학식 1-39]



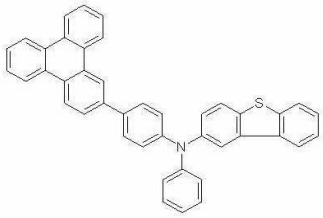
[화학식 1-40]



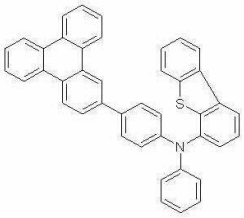
[화학식 1-41]



[화학식 1-42]

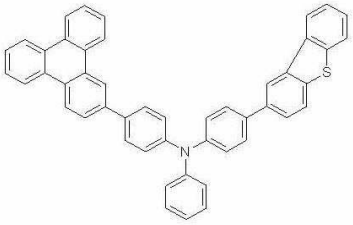


[화학식 1-43]

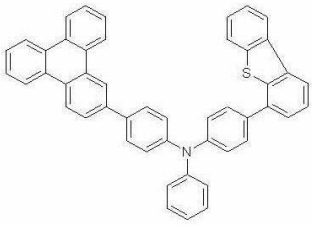


[화학식 1-44]

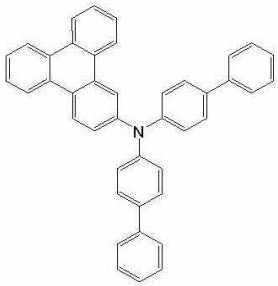
[0050]



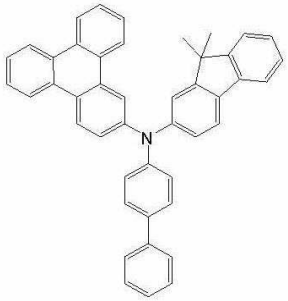
[화학식 1-45]



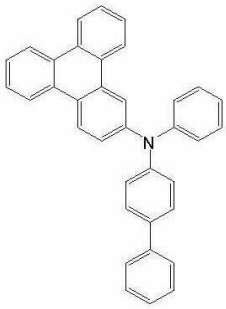
[화학식 1-46]



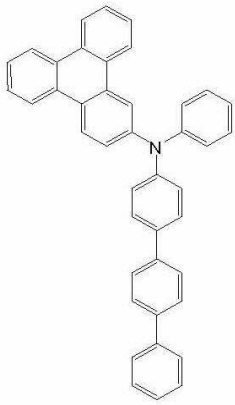
[화학식 1-47]



[화학식 1-48]

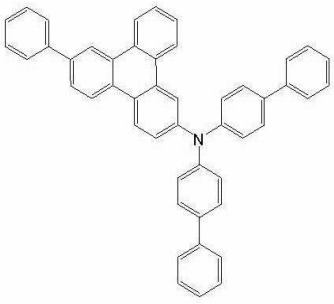


[화학식 1-49]

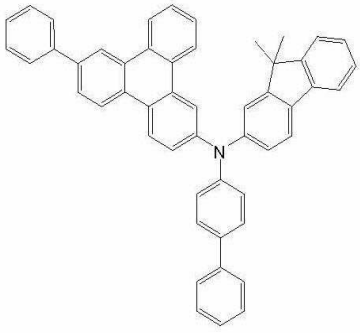


[화학식 1-50]

[0051]



[화학식 1-51]

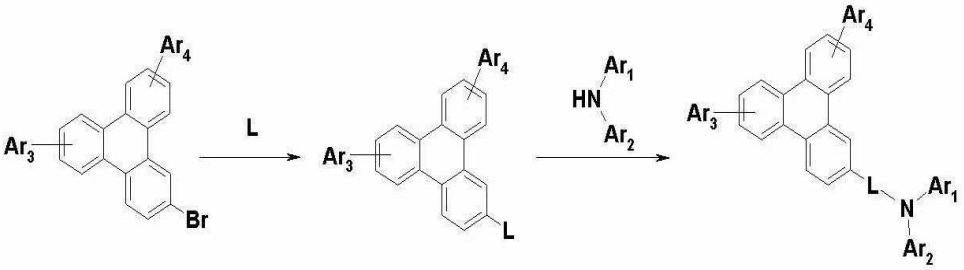


[화학식 1-52]

[0052]

[0053] 또한, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유도체의 제조방법을 제공한다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 축합반응, 스즈끼 결합 반응 등의 당 기술분야에 알려져 있는 일반적인 방법을 이용하여 제조될 수 있다.

[0054] [반응식 1]



[0055]

[0056] 상기 반응식 1에서, L, Ar_1 내지 Ar_4는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

[0057] 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은 다단계 화학 반응으로 제조할 수 있다. 상기 화합물들의 제조는 하기 제조예에 의해 기술된다. 제조예에 나타난 바와 같이, 일부 중간체 화합물이 먼저 제조되고, 그 중간체 화합물들로부터 화학식 1의 화합물들이 제조된다.

[0058] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물들은 상기 화학식에 표시된 코어 구조에 다양한 치환체를 도입함으로써 유기 발광 소자에서 사용되는 유기물층으로 사용되기에 적합한 특성을 가질 수 있다.

[0059] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유리 전이 온도(Tg)가 높아 열적 안정성이 우수하다. 이러한 열적 안정성의 증가는 소자에 구동 안정성을 제공하는 중요한 요인이 된다.

[0060] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.

[0061] 본 발명의 유기 발광 소자는 전술한 화합물을 이용하여 한 층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기 발광 소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.

[0062] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥 코팅, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.

[0063] 본 발명의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층을 포함할 수 있다.

[0064] 따라서, 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 정공 수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0065] 또한, 상기 유기물층은 발광층을 포함할 수 있고, 상기 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0066] 또한, 상기 유기물층은 전자 수송층, 전자 주입층, 및 전자 수송 및 전자 주입을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0067] 이와 같은 다층 구조의 유기물층에서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층, 정공 주입/정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 또는 전자 수송과 발광을 동시에 하는 층 등에 포함될 수 있다.

[0068] 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 도 2에 나타낸 것과 같은 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[0069] 도 1에는 기판(1) 위에 양극(2), 발광층(3) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 발광층(3)에 포함될 수 있다.

[0070] 도 2에는 기판(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7), 전자 수송층(8) 및 음극(4)이

순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7) 또는 전자 수송층(8)에 포함될 수 있다.

[0071] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수도 있다.

[0072] 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용매 공정(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.

[0073] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO : Al 또는 SnO_2 : Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸화합물의), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)화합물의](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0074] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO_2/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0075] 상기 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입 받을 수 있는 물질로서, 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리화합물의 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0076] 상기 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0077] 상기 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq_3); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAlq; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0078] 상기 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq_3를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0079] 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

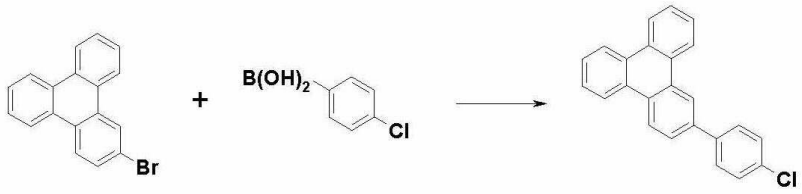
[0080] 본 발명에 따른 화합물은 유기 태양 전지, 유기 감광체, 유기 트랜지스터 등을 비롯한 유기 전자 소자에서도 유기 발광 소자에 적용되는 것과 유사한 원리로 작용할 수 있다.

[0081] 상기 화학식 1의 화합물의 제조방법 및 이들을 이용한 유기 발광 소자의 제조는 이하의 제조예 및 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나, 하기 제조예 및 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가

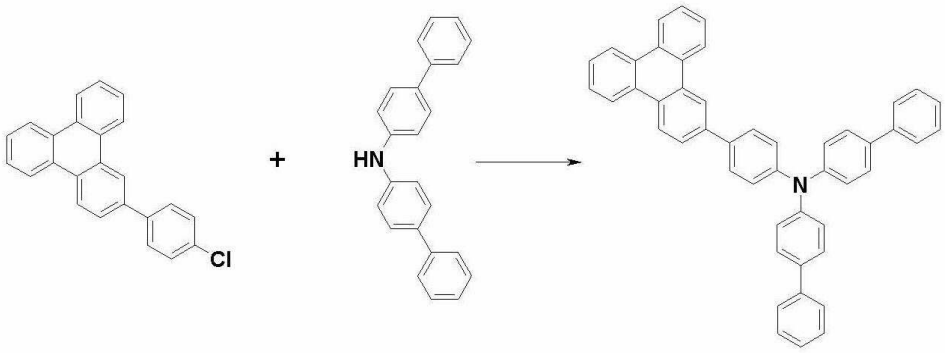
이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0082] **<실시예>**

[0083] **<합성예 1> 화학식 1-1로 표시되는 화합물의 제조**



[화학식 1A]



[화학식 1-1]

[0084]

[0085] **1) 화학식 1A의 제조**

[0086] 2-브로모트라이페닐렌(30g, 97.7mmol)과 4-클로로페닐보론산(16.7g, 107mmol)을 테트라하이드로퓨란(150ml)에 녹인 후 탄산칼륨(K_2CO_3, potassium carbonate, 40.4g, 292.8mmol)을 물과 함께 반응 용액에 첨가한 뒤 한 시간 정도 질소 상태에서 가열 교반을 시켰다. 한 시간 가열 교반 후 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(2.3g, 1.95mmol)을 첨가한 뒤 4시간 동안 교반하면서 가열하였다. 반응 종료 후 상온으로 온도를 낮추고 테트라하이드로퓨란을 감압증류하여 제거한 후 클로로포름에 녹이고 무수 황산 마그네슘으로 건조하였다. 상기 용액을 감압 증류시키고 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화학식 1A(27g, 수율 82%)을 얻었다.

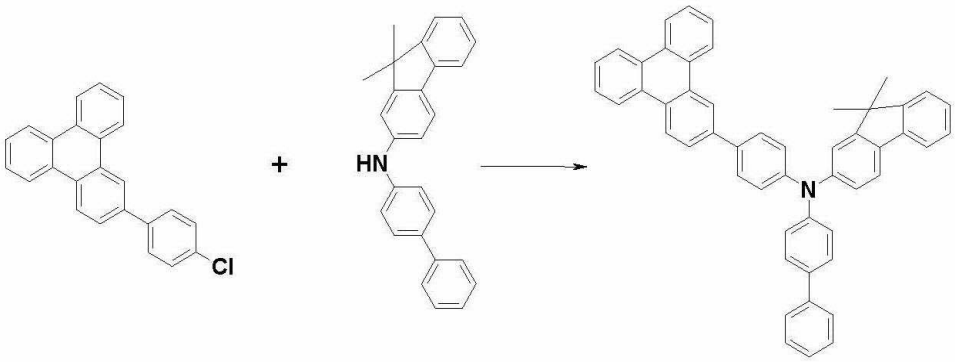
[0087] MS: $[M+H]^+$ = 339

[0088] **2) 화학식 1-1의 제조**

[0089] 화학식 1A(10g, 29.5mmol)와 비스디페닐기아민(9.96g, 31mmol)을 자일렌 150ml에 용해시키고, 나트륨-터셔리-부톡사이드(5.67g, 59mmol), 비스[(트라이-터셔리-부틸)포스핀]팔라듐($Pd[P(t\text{-}Bu)_3]_2$) 0.45g(0.89mmol)을 첨가한 후, 3시간 동안 질소 기류 하에서 환류하였다. 반응 종료 후 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름에 녹인 후 감압 증류시키고 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화학식 1-1(8g, 44%)을 얻었다.

[0090] MS: $[M+H]^+$ = 624

[0091] **<합성예 2> 화학식 1-2로 표시되는 화합물의 제조**



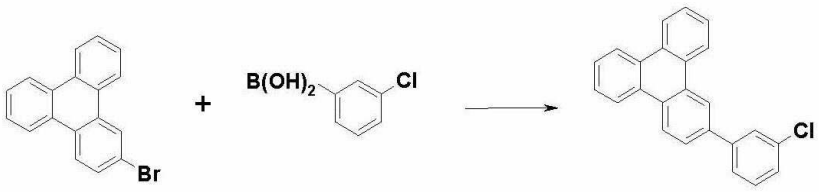
[화학식 1A] [화학식 1-2]

[0092]

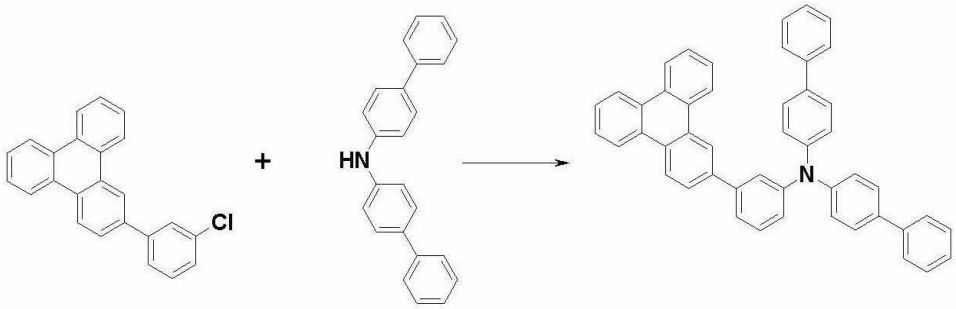
[0093] 상기 합성예 1의 화합물 1-1의 제조에 있어서, 화합물 비스디페닐기아민 대신, 화합물 디페닐-플루오렌기아민(11.2g, 31mmol)을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 1-2(9g, 46%)을 얻었다.

[0094] MS: $[M+H]^+$ = 664

[0095] **<합성예 3> 화학식 1-3으로 표시되는 화합물의 제조**



[화학식 1B]



[화학식 1-3]

[0096]

[0097] **1) 화학식 1B의 제조**

[0098] 상기 합성예 1의 화합물 1A의 제조에 있어서, 화합물 4-클로로페닐보론산 대신, 화합물 3-클로로페닐보론산(16.7g, 107mmol)을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화학식 1B(25g, 수율 76%)를 얻었다.

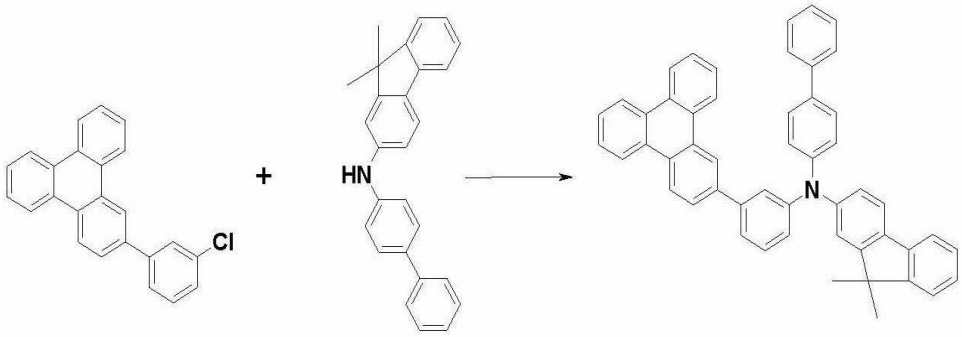
[0099] MS: $[M+H]^+$ = 339

[0100] **2) 화학식 1-3의 제조**

[0101] 상기 합성예 1의 화합물 1-1의 제조에 있어서, 화합물 1A 대신, 화합물 1B(10g, 29.5mmol)를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화학식 1-3(7.9g, 수율 43%)을 얻었다.

[0102] MS: $[M+H]^+$ = 624

[0103] **<합성예 4> 화학식 1-4로 표시되는 화합물의 제조**



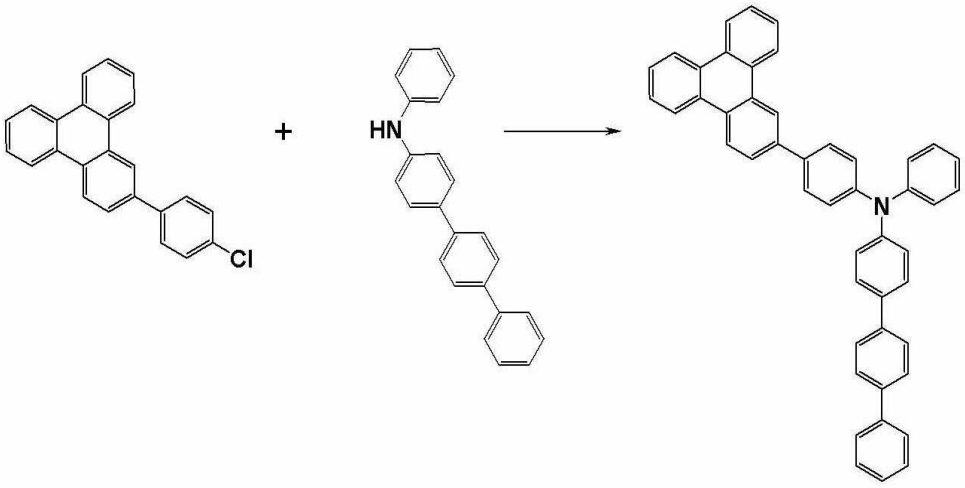
[화학식 1B] [화학식 1-4]

[0104]

[0105] 상기 합성예 3의 화합물 1-3의 제조에 있어서, 화합물 비스디페닐기아민 대신, 화합물 디페닐-플루오렌기아민(11.2g, 31mmol)을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 1-4(12g, 61%)를 얻었다.

[0106] MS: $[M+H]^+$ = 664

[0107] **<합성예 5> 화학식 1-7로 표시되는 화합물의 제조**



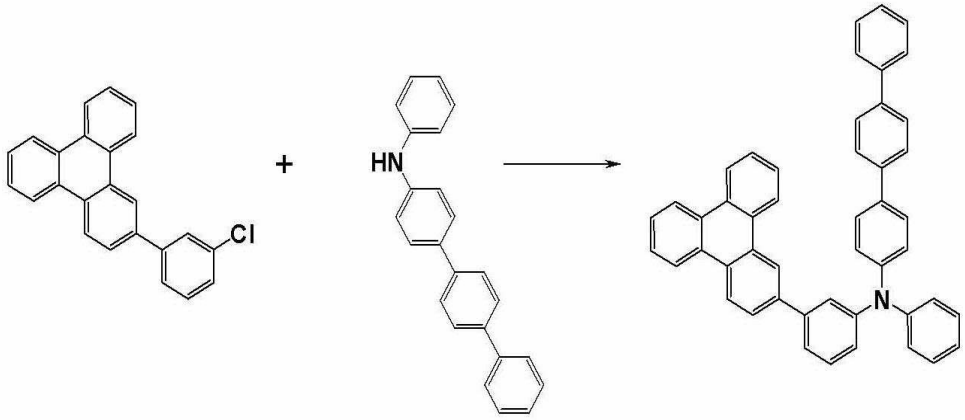
[화학식 1A] [화학식 1-7]

[0108]

[0109] 상기 합성예 1의 화합물 1-1의 제조에 있어서, 화합물 비스디페닐기아민 대신, 화합물 터페닐-페닐기아민(9.96g, 31mmol)을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 1-7(13g, 70.6%)을 얻었다.

[0110] MS: $[M+H]^+$ = 624

[0111] **<합성예 6> 화학식 1-8로 표시되는 화합물의 제조**



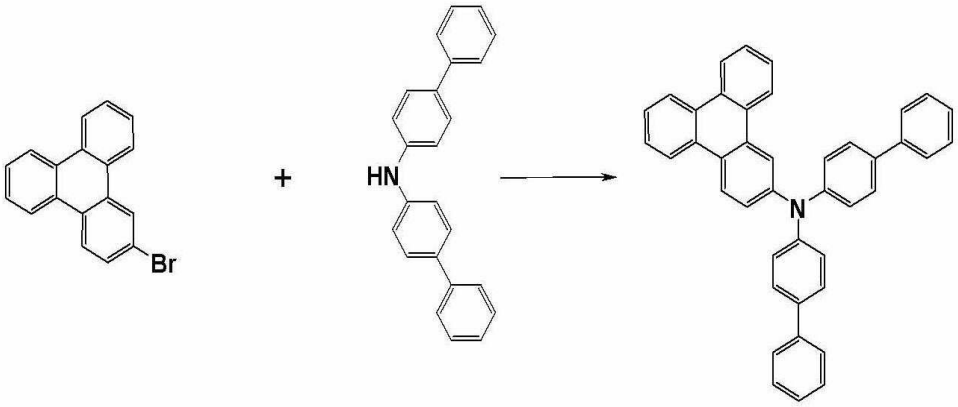
[화학식 1B] [화학식 1-8]

[0112]

[0113] 상기 합성예 3의 화합물 1-3의 제조에 있어서, 화합물 비스디페닐기아민 대신, 화합물 터페닐-페닐기아민(9.96g, 31mmol)을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 1-8(11g, 60%)을 얻었다.

[0114] MS: $[M+H]^+$ = 624

[0115] **<합성예 7> 화학식 1-47로 표시되는 화합물의 제조**



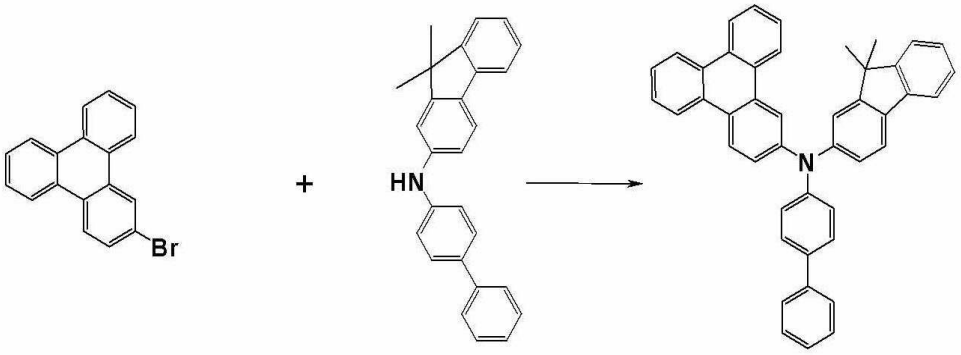
[화학식 1-47]

[0116]

[0117] 2-브로모트라이페닐렌(10g, 32.6mmol)과 비스디페닐기아민(11g, 34.2mmol)을 톨루엔 150ml에 용해시키고, 나트륨-터셔리-부톡사이드(6.26g, 65.2mmol), 비스[(트라이-터셔리-부틸)포스핀]팔라듐(Pd[P(t-Bu)$_3$]$_2$) 0.5g(0.98mmol)을 첨가한 후, 3시간 동안 질소 기류 하에서 환류하였다. 반응 종류 후 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 클로로포름에 녹인 후 감압 증류시키고 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화학식 1-47(12g, 67%)을 얻었다.

[0118] MS: $[M+H]^+$ = 547

[0119] **<합성예 8> 화학식 1-48로 표시되는 화합물의 제조**



[화학식 1-48]

[0120]

[0121] 상기 합성예 7의 화합물 1-47의 제조에 있어서, 화합물 비스디페닐기아민 대신, 화합물 디페닐-플루오렌기아민(11.8g, 34.2mmol)을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하여 화합물 1-48(11g, 57%)을 얻었다.

[0122] MS: $[M+H]^+$ = 587

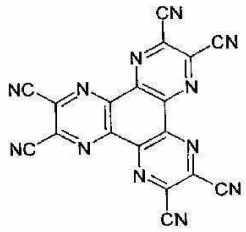
[0123] **<실시예 1>**

[0124] ITO(인듐 주석 산화물)가 1,000Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판(corning 7059 glass)을, 분산제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 세제는 Fischer Co.의 제품을 사용하였으며, 증류수는 Millipore Co. 제품의 필터(Filter)로 2차 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후, 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올 용제 순서로 초음파 세척을 하고 건조시켰다.

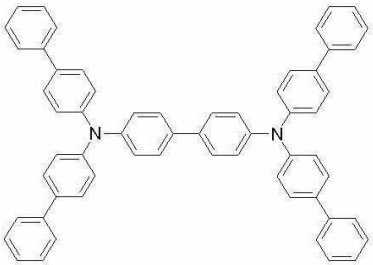
[0125] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 헥사니트릴 헥사아자트리페닐기렌(hexanitrile hexaazatriphenylene)를 500Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다. 그 위에 정공을 수송하는 물질인 위 제조예 1에서 합성한 화학식 1-1(400Å)을 진공증착한 후 발광층으로 호스트 H1과 도판트 D1 화합물을 300Å의 두께로 진공 증착하였다. 그 다음에 E1 화합물(300Å)을 전자주입 및 수송층으로 순차적으로 열 진공 증착하였다. 상기 전자 수송층 위에 순차적으로 12Å 두께의 리튬 플루오라이드(LiF)와 2,000Å 두께의 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하여, 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0126] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 1 Å/sec를 유지하였고, 리튬플루라이드는 0.2 Å/sec, 알루미늄은 3 ~ 7 Å/sec의 증착속도를 유지하였다.

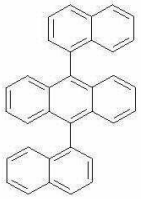
[헥사니트릴 헥사아자트리페닐기렌]



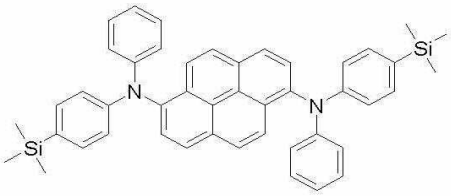
[HT1]



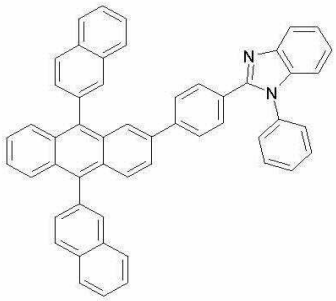
[H1]



[D1]



[E1]



[0127]

[0128] **<실시예 2>**

[0129] 상기 실시예 1에서 정공 수송층으로 제조예 1에서 합성한 화학식 1-1 대신 화학식 1-2를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0130] **<실시예 3>**

[0131] 상기 실시예 1에서 정공 수송층으로 제조예 1에서 합성한 화학식 1-1 대신 화학식 1-3를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0132] **<실시예 4>**

[0133] 상기 실시예 1에서 정공 수송층으로 제조예 1에서 합성한 화학식 1-1 대신 화학식 1-4를 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0134] **<실시예 5>**

[0135] 상기 실시예 1에서 정공 수송층으로 제조예 1에서 합성한 화학식 1-1 대신 화학식 1-7을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0136] **<실시예 6>**

[0137] 상기 실시예 1에서 정공 수송층으로 제조예 1에서 합성한 화학식 1-1 대신 화학식 1-8을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0138] **<실시예 7>**

[0139] 상기 실시예 1에서 정공 수송층으로 제조예 1에서 합성한 화학식 1-1 대신 화학식 1-47을 사용한 것을 제외하

고는 동일하게 실험하였다.

[0140] **<실시예 8>**

[0141] 상기 실시예 1에서 정공 수송층으로 제조예 1에서 합성한 화학식 1-1 대신 화학식 1-48을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0142] **<비교예 1>**

[0143] 상기 실시예 1에서 정공 수송층으로 제조예 1에서 합성한 화학식 1-1 대신 HT1을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0144] 상기 실시예 1 ~ 8 및 비교예 1과 같이 각각의 화합물을 정공 수송층 물질로 사용하여 제조한 유기 발광 소자를 실험한 결과를 표 1에 나타내었다.

[0145] [표 1]

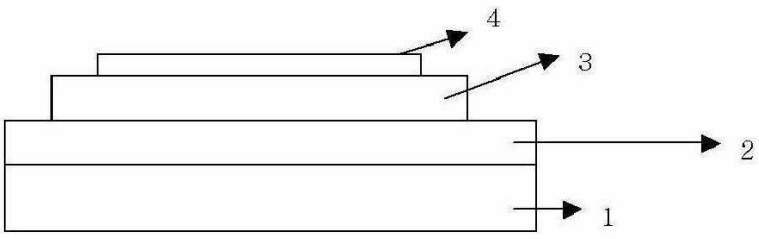
실험예 50mA/㎠	HTL물질	전압(V)	전류효율(cd/A)
비교예 1	HT1	6.14	5.87
실시예 1	화학식 1-1	6.25	6.46
실시예 2	화학식 1-2	6.14	6.75
실시예 3	화학식 1-3	6.28	6.62
실시예 4	화학식 1-4	6.16	6.91
실시예 5	화학식 1-7	6.23	7.12
실시예 6	화학식 1-8	6.23	7.20
실시예 7	화학식 1-47	6.15	7.02
실시예 8	화학식 1-48	6.10	7.12

[0146]

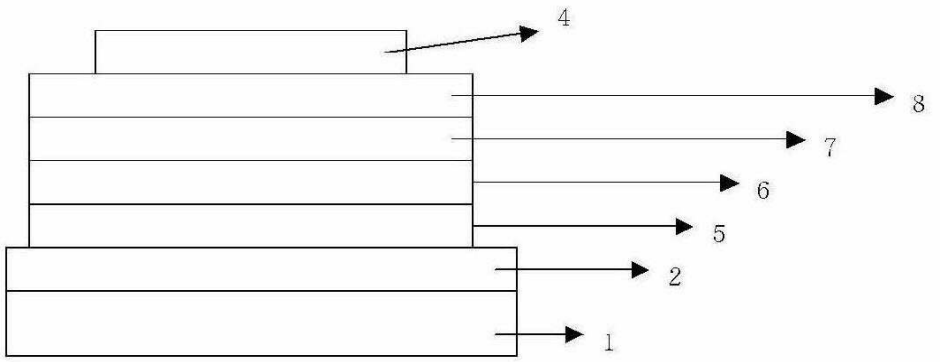
[0147] 본 발명에 따른 화학식의 화합물 유도체는 유기 발광 소자를 비롯한 유기 전자 소자에서 정공 주입, 정공 수송 역할을 할 수 있으며, 본 발명에 따른 소자는 효율, 구동전압, 안정성 면에서 우수한 특성을 나타낸다.

도면

도면1



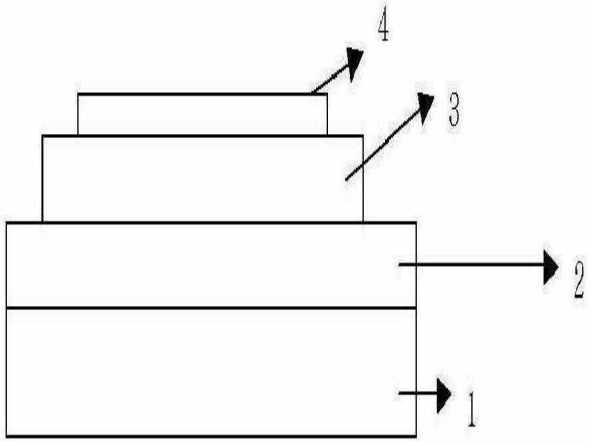
도면2



专利名称(译)	标题：新化合物和使用其的有机发光器件		
公开(公告)号	KR1020120076314A	公开(公告)日	2012-07-09
申请号	KR1020110144010	申请日	2011-12-27
[标]申请(专利权)人(译)	乐金化学股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	LG化学有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	LG化学有限公司		
[标]发明人	HUH JUNGOH 허정오 HONG SUNG KIL 홍성길 KIM YUN HWAN 김연환 PARK TAE YOON 박태윤 JANG HYE YOUNG 장혜영 KIM KONGKYEOM 김공겸 KIM SEONG SO 김성소		
发明人	허정오 홍성길 김연환 박태윤 장혜영 김공겸 김성소		
IPC分类号	C09K11/06 C07C211/57 H01L51/50		
CPC分类号	C09K2211/1011 H01L51/006 H01L51/0059 C09K2211/1092 C07C211/54 H01L51/0054 H01L51/0072 C07C211/58 C07D333/76 C07C211/61 C09K2211/1007 C09K11/06 C09K2211/1014 C07C2103/42 C07C2103/18 C07C2603/18 C07C2603/42 H01L51/5056		
优先权	1020100138130 2010-12-29 KR		
其他公开文献	KR101350581B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明提供了一种有机发光装置，其包括含有新化合物的有机层和改善有机发光装置寿命的化合物，效率，电化学稳定性和热稳定性。


4
3
2
1