



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2013-0091542
(43) 공개일자 2013년08월19일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) C07D 495/04 (2006.01)

C07D 209/82 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2012-0012915

(22) 출원일자 2012년02월08일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

삼성디스플레이 주식회사

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

(72) 발명자

이정섭

경기도 용인시 기흥구 농서동 산24

양승각

경기도 용인시 기흥구 농서동 산24

(74) 대리인

리엔텍특허법인

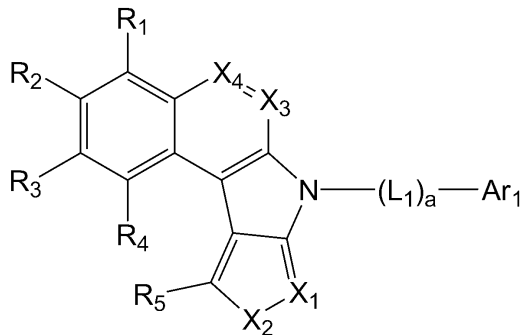
전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 **헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자**

(57) 요약

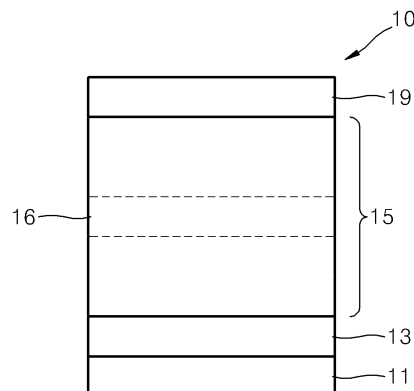
하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물이 제공된다:

<화학식 1>



상기 식 중, X₁, X₂, X₃, X₄, R₁ 내지 R₅, Ar₁, L₁ 및 a는 발명의 상세한 설명을 참조한다.

대표도 - 도1

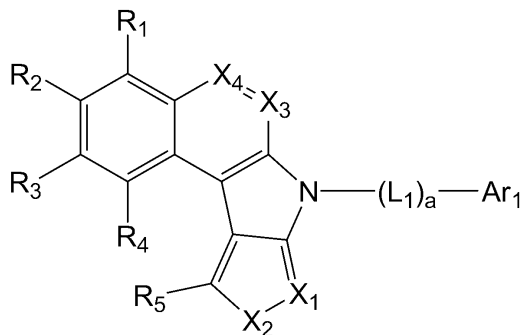


특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물:

<화학식 1>



상기 식 중,

X_1 는 CR_{11} 및 N 중 1종이고,

X_2 는 CR_{12} , R_{13} , NR_{14} , S 및 O 중 1종이고,

X_3 및 X_4 는 서로 독립적으로 CR_{15} 및 N 중 1종이고,

R_1 내지 R_5 및 R_{11} 내지 R_{15} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 헤테로아릴기 중 1종이고,

Ar_1 은 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 헤테로아릴기, $-N(Q_1)(Q_2)$ 및 $Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)(Q_6)$ -로 표시되는 그룹 중 1종이고, 상기 Q_1 내지 Q_6 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴티오기, 및 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 헤테로아릴기 중 1종이고,

L_1 은 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 헤테로아릴렌기 중 1종이고,

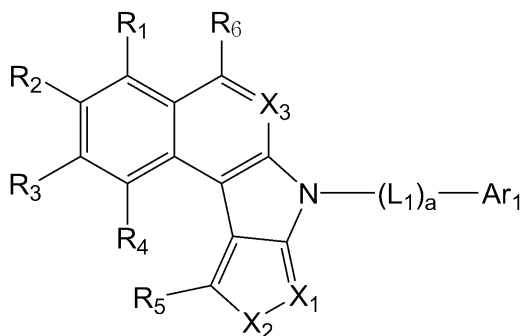
a 는 0 내지 3의 정수 중 하나이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

하기 화학식 2로 표시되는 헤테로고리 화합물:

<화학식 2>



상기 식 중,

R₁ 내지 R₆는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로아릴기 중 1종이고,

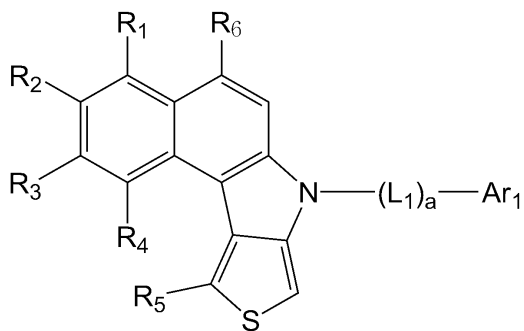
X₁, X₂, X₃, Ar₁, L₁ 및 a는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

청구항 3

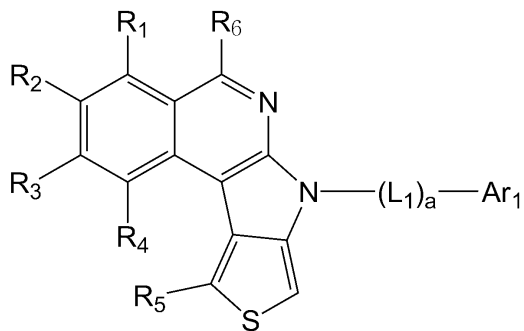
제1항에 있어서,

하기 화학식 3 내지 6 중 1종으로 표시되는 헤테로고리 화합물:

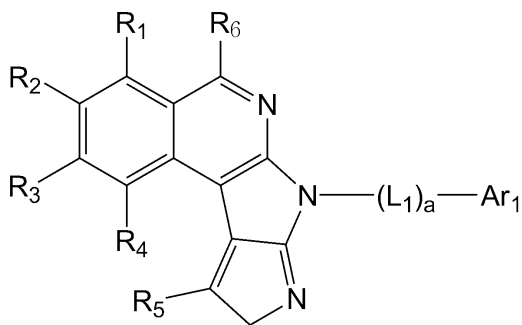
<화학식 3>



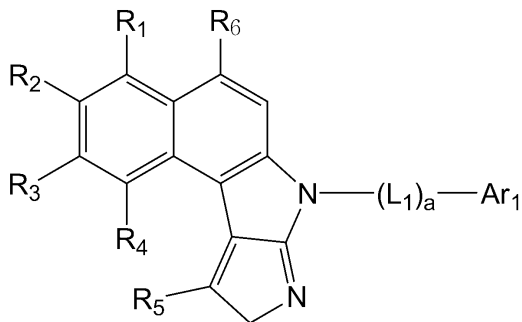
<화학식 4>



<화학식 5>



<화학식 6>



상기 식들 중,

R_1 내지 R_6 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 헤테로아릴기 중 1종이고,

Ar_1 , L_1 및 a 는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 R_1 내지 R_5 및 R_{11} 내지 R_{15} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 헤테로아릴기 중 1종인 헤테로고리 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 R_1 내지 R_5 및 R_{11} 내지 R_{15} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 인테닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 및 치환 또는 비치환된 카바졸일기 중 1종인 유기 발광 소자.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 Ar_1 은 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 헤테로아릴기, $-N(Q_1)(Q_2)$ 및 $Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)(Q_6)$ -로 표시되는 그룹 중 1종이

고, 상기 Q₁ 내지 Q₆는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로아릴기 중 1종인 헤테로고리 화합물.

청구항 7

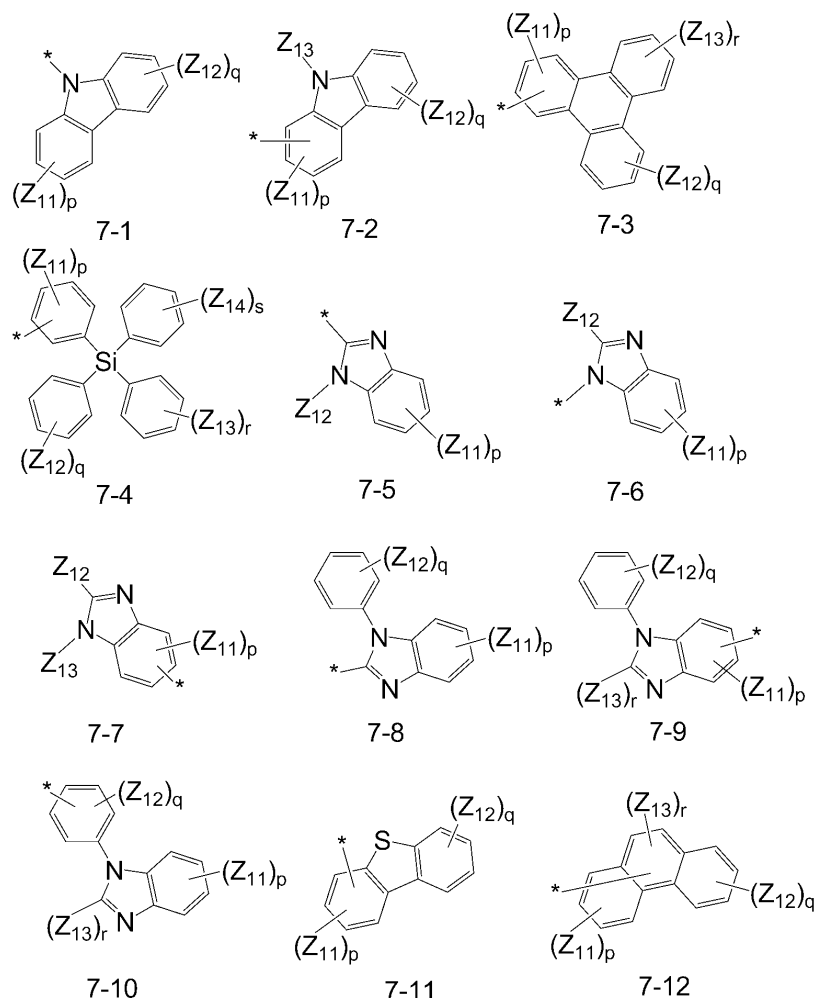
제1항에 있어서,

상기 Ar₁은 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 페닐기(phenyl), 치환 또는 비치환된 펜타레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인데닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphtyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐기(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵타레닐기(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐기(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphtyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 파이레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크라이세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 나프타세닐기(naphthacenyl), 치환 또는 비치환된 피세닐기(picenyl), 치환 또는 비치환된 페릴레닐기(perylene), 치환 또는 비치환된 펜타페닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl), 치환 또는 비치환된 피롤일기(pyrrolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸일기(imidazolyl), 치환 또는 비치환된 피라졸일기(pyrazolyl), 치환 또는 비치환된 피리디닐기(pyridinyl), 치환 또는 비치환된 피라지닐기(pyrazinyl), 치환 또는 비치환된 피리미디닐기(pyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 피리다지닐기(pyridazinyl), 치환 또는 비치환된 이소인돌일기(isoindolyl), 치환 또는 비치환된 인돌일기(indolyl), 치환 또는 비치환된 인다졸일기(indazolyl), 치환 또는 비치환된 푸리닐기(purinyl), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기(quinolinyl), 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기(benzoquinolinyl), 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기(phthalazinyl), 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기(quinoxaliny), 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기(quinazolinyl), 치환 또는 비치환된 시놀리닐기(cinnolinyl), 치환 또는 비치환된 카바졸일기(carbazolyl), 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 치환 또는 비치환된 아크리디닐기(acridinyl), 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기(phenanthrolinyl), 치환 또는 비치환된 페나지닐기(phenazinyl), 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기(benzoimidazolyl), 치환 또는 비치환된 푸라닐기(furanyl), 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기(benzofuranyl), 치환 또는 비치환된 티오펜일기(thiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기(benzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 티아졸일기(thiazolyl), 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기(isothiazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기(benzothiazolyl), 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기(isoxazolyl), 치환 또는 비치환된 옥사졸일기(oxazolyl), 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기(oxadiazolyl), 치환 또는 비치환된 트리아지닐기(triazinyl), 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기(dibenzopuranyl), 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기(dibenzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조카바졸일기, 테트라페닐실란일기(tetraphenylsilanyl) 중 1종인 헤테로고리 화합물.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 Ar₁은 하기 화학식 7-1 내지 7-12 중 1종으로 표시되는 헤테로고리 화합물:



상기 식들 중,

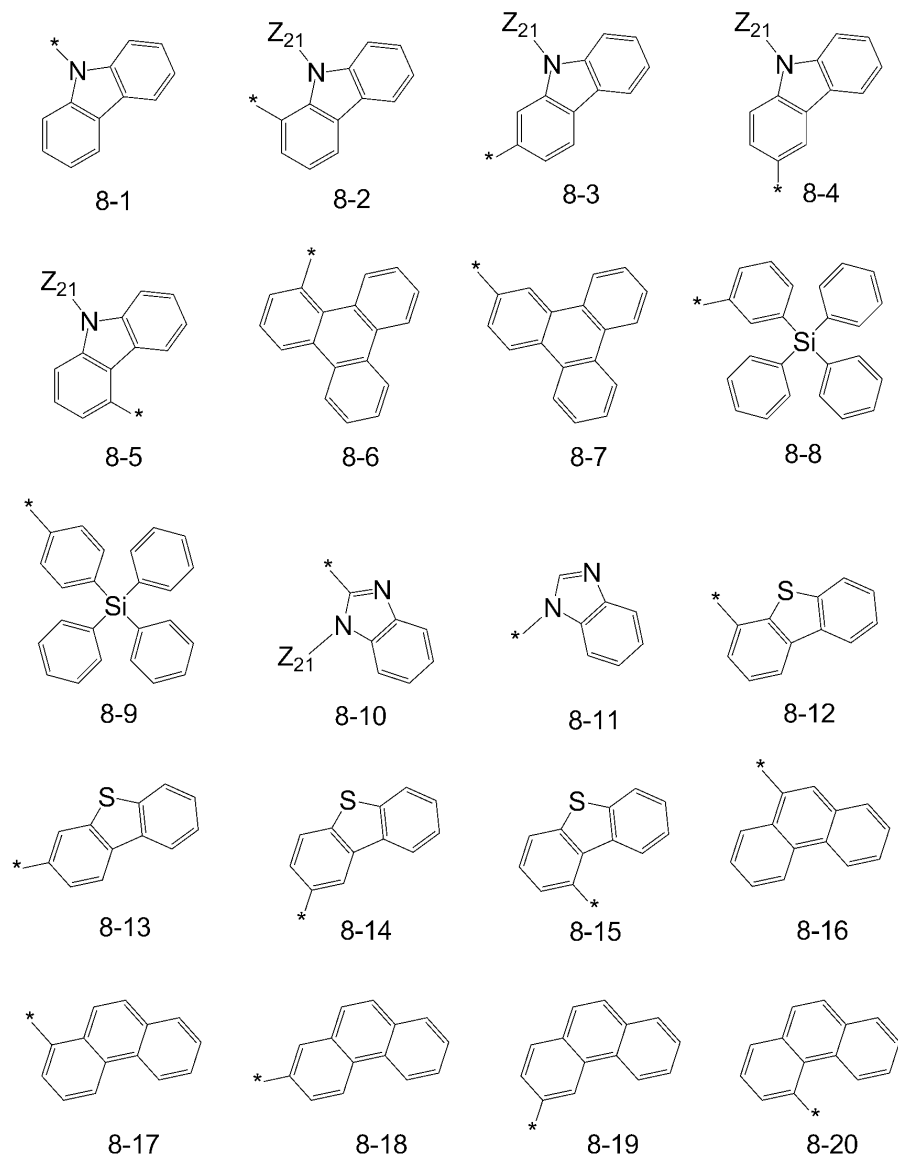
Z₁₁ 내지 Z₁₄는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C₁-C₁₀알킬기; C₁-C₁₀알콕시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 1종 이상으로 치환된 C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기; 페닐기; 나프틸기; 플루오레닐기; 페난트레닐기; 안트릴기; 피레닐기; 크리세닐기; 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기 중 1종 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 피레닐기 및 크리세닐기; 인돌일기; 벤조이미다졸일기; 카바졸일기; 이미다졸일기; 이미다졸리닐기; 이미다조피리디닐기; 이미다조피리미디닐기; 피리디닐기; 피리미디닐기; 트리아지닐기; 퀴놀리닐기; 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기 및 나프틸기 중 하나 이상으로 치환된 인돌일기, 벤조이미다졸일기, 카바졸일기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기 및 퀴놀리닐기 중 1종이고;

p, q, r 및 s는 서로 독립적으로 1 내지 5의 정수 중 하나이다.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 Ar₁은 하기 화학식 8-1 내지 8-20 중 1종으로 표시되는 헤테로고리 화합물:



상기 식들 중,

Z₂₁은 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 피레닐기, 크리세닐기, 인돌일기, 벤조이미다졸일기, 카바졸일기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기 및 퀴놀리닐기 중 1종이다.

청구항 10

제1항에 있어서,

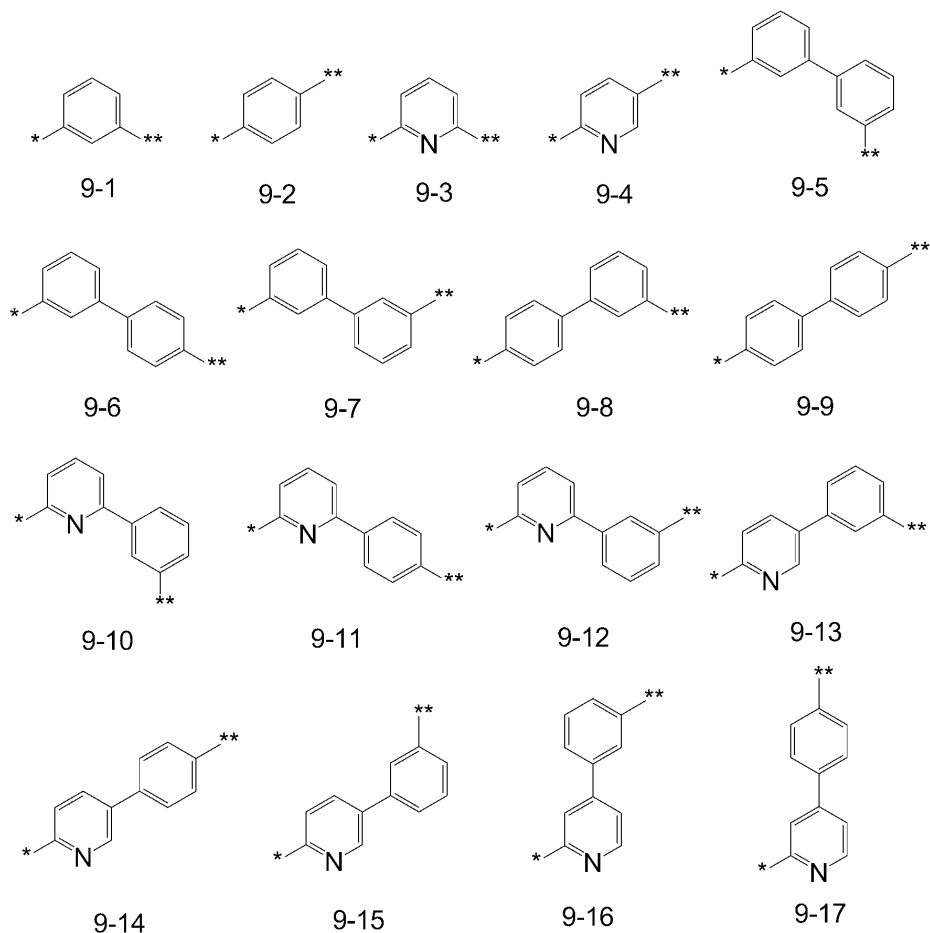
상기 L₁은 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기(pentalenylene), 치환 또는 비치환된 인덴일렌기(indenylene), 치환 또는 비치환된 나프틸렌기(naphthylene), 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기(azulenylene), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐렌기(heptalenylene), 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기(indacenylene), 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기(acenaphthylene), 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기(fluorenylene), 치환 또는 비치환된 페나레닐렌기(phenalenylene), 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기(phenanthrenylene), 치환 또는 비치환된 안트릴렌기(anthrylene), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기(fluoranthenylene), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기(triphenylenylene), 치환 또는 비치환된 피레닐렌

기(pyrenylene), 치환 또는 비치환된 크리세닐렌기(chrysenylene), 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기(naphthacenylene), 치환 또는 비치환된 피세닐렌기(picenylene), 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기(perylenylene), 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기(pentaphenylene), 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기(hexacenylene), 치환 또는 비치환된 피롤일렌기(pyrrolylene), 치환 또는 비치환된 피라졸일렌기(pyrazolylene), 치환 또는 비치환된 이미다졸일렌기(imidazolylene), 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐렌기(imidazolinylene), 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐렌기(imidazopyridinylene), 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐렌기(imidazopyrimidinylene), 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기(pyridinylene), 치환 또는 비치환된 피라지닐렌기(pyrazinylene), 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기(pyrimidinylene), 치환 또는 비치환된 인돌일렌기(indolylene), 치환 또는 비치환된 푸리닐렌기(purinylene), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐렌기(quinolinylene), 치환 또는 비치환된 프탈라지닐렌기(phthalazinylene), 치환 또는 비치환된 인돌리지닐렌기(indolizinylene), 치환 또는 비치환된 나프티리디닐렌기(naphthyridinylene), 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐렌기(quinazolinylene), 치환 또는 비치환된 시놀리닐렌기(cinnolinylene), 치환 또는 비치환된 인다졸일렌기(indazolylene), 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기(carbazolylene), 치환 또는 비치환된 페나지닐렌기(phenazinylene), 치환 또는 비치환된 페난트리디닐렌기(phenanthridinylene), 치환 또는 비치환된 피라닐렌기(pyranylene), 치환 또는 비치환된 크로메닐렌기(chromenylene), 치환 또는 비치환된 푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐렌기(benzofuranylene), 치환 또는 비치환된 티오펜일렌기(thiophenylene), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일렌기(benzothiophenylene), 치환 또는 비치환된 이소티아졸일렌기(isothiazolylene), 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일렌기(benzoimidazolylene), 치환 또는 비치환된 이소사졸일렌기(isoxazolylene), 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일렌기(dibenzothiophenylene), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐렌기(dibenzopuranylene), 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기(triazinylene), 및 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일렌기(oxadiazolylene) 중 1종인 헤테로고리 화합물.

청구항 11

제1항에 있어서,

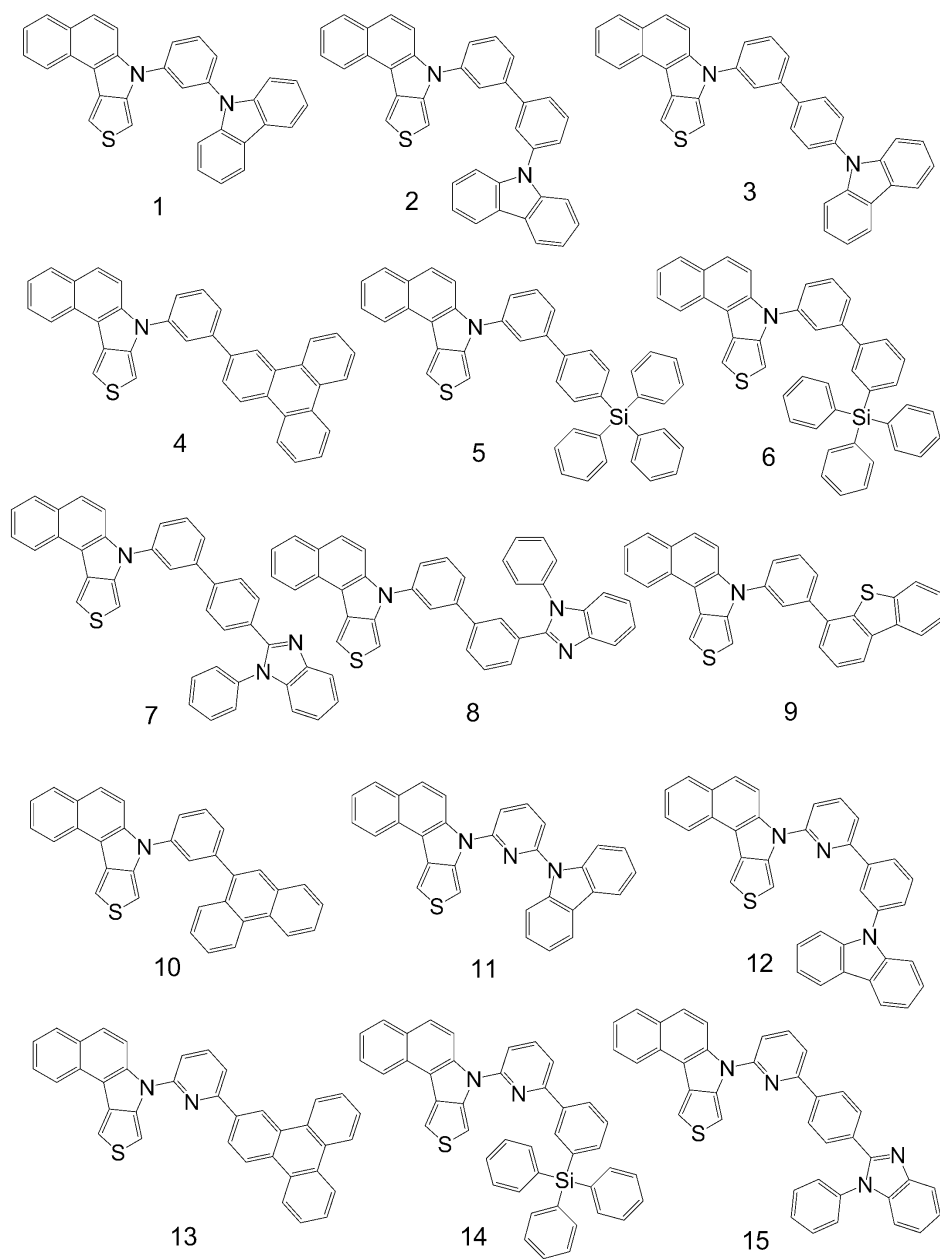
상기 L₁은 하기 화학식 9-1 내지 9-17 중 1종으로 표시되는 헤테로고리 화합물:

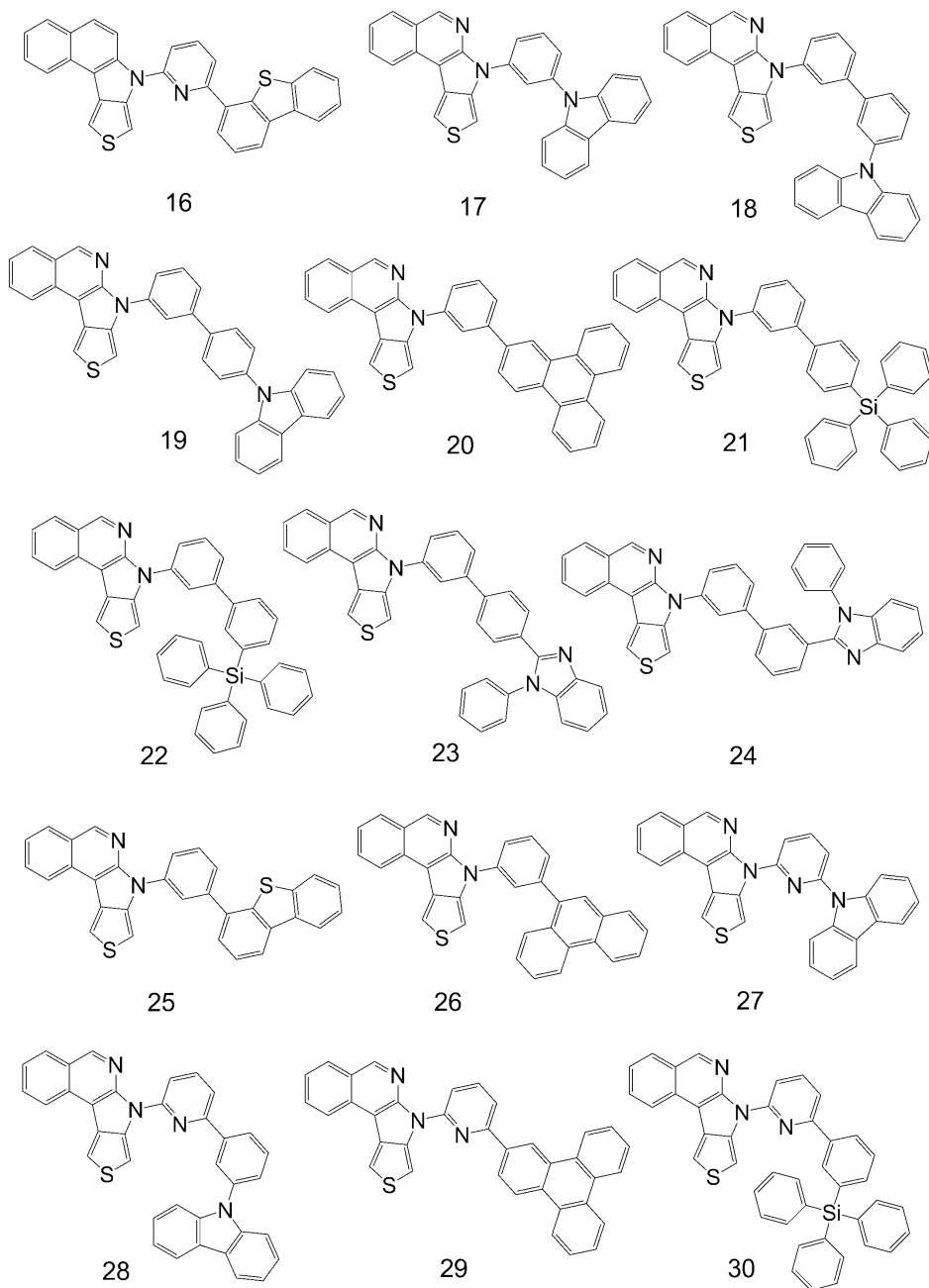


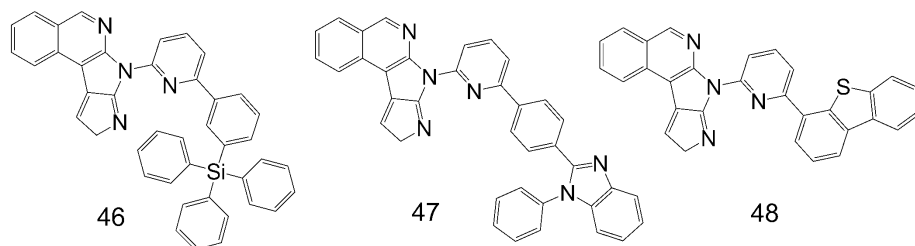
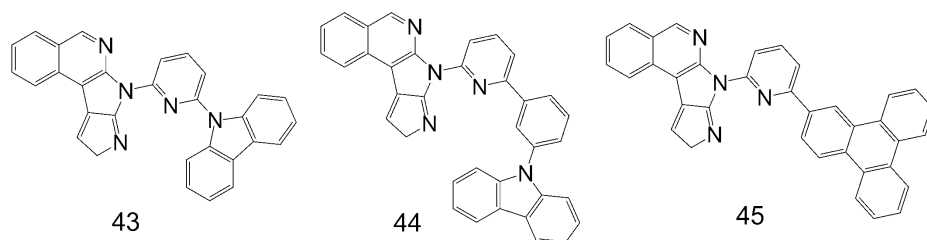
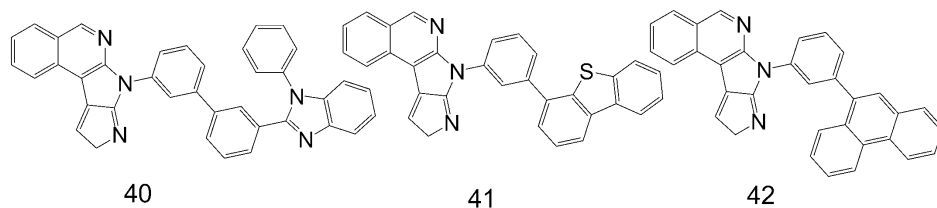
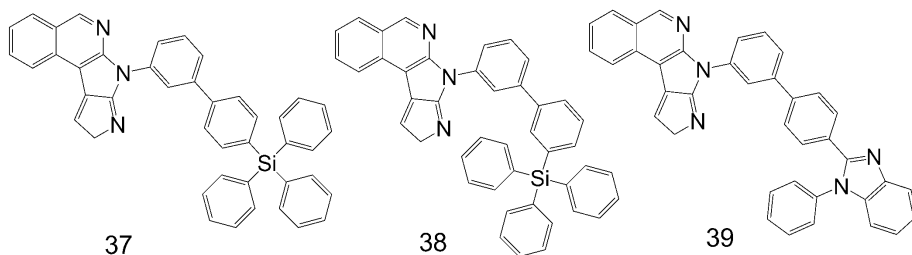
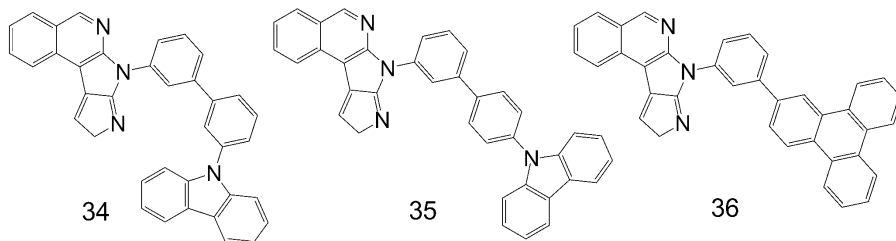
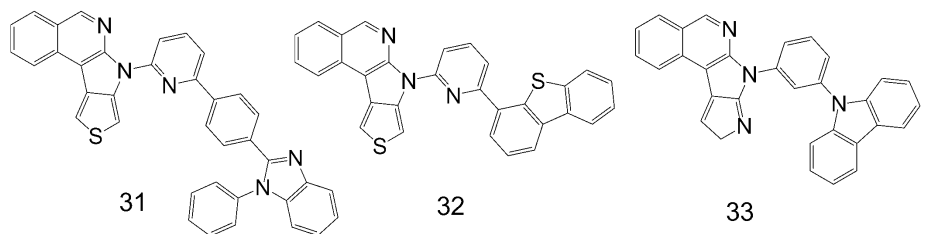
청구항 12

제1항에 있어서,

하기 화합물 1 내지 48 중 1종인 헤테로고리 화합물:







청구항 13

제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 제1항 내지 제12항 중 어느 한 항의 헤테로고리 화합물을 포함한 유기 발광 소자.

청구항 14

제13항에 있어서,

상기 유기층이 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적

어도 하나를 포함하고, 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나가 상기 헤테로고리 화합물을 포함한 유기 발광 소자.

청구항 15

제13항에 있어서,

상기 유기층이 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나가 상기 헤테로고리 화합물을 포함한 유기 발광 소자.

청구항 16

제13항에 있어서,

상기 유기층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 헤테로고리 화합물을 포함한 유기 발광 소자.

청구항 17

제16항에 있어서,

상기 발광층에 포함된 상기 헤테로고리 화합물이 인광 호스트의 역할을 하는 유기 발광 소자.

청구항 18

제13항에 있어서,

상기 유기층이 발광층; 및 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나;를 포함하고, 상기 발광층이 아릴아민 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 19

제13항에 있어서,

상기 유기층이 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층이 전자 수송성 재료 및 금속 착체를 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 20

소스, 드레인, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 제13항 내지 제19항 중 어느 한 항의 유기 발광 소자를 구비하고,

상기 유기 발광 소자의 제1전극이 상기 소스 및 드레인 중 하나와 전기적으로 연결된 평판 표시 장치.

명세서

기술분야

[0001] 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 신규한 헤테로고리 화합물, 이를 발광 재료로 사용한 수명이 향상된 유기 발광 소자, 및 상기 유기 발광 소자를 사용한 평판 표시 장치에 관한 것이다.

배경기술

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

[0003] 일반적인 유기 발광 소자는 기판 상부에 애노드가 형성되어 있고, 애노드 상부에 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 여기에서 정공수송층, 발광층 및 전자수송층은 주로 유기화합물로 이루어진다. 애노드 및 캐소드 간에 전압을 인가하면, 애노드로부터 주입된 정공은 정공수송층을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자수송층을 경유하여 발광층으로 이동한다.

캐리어들(정공 및 전자)은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exciton)을 생성하고 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

[0004] 유기 발광 소자의 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 전기발광 메커니즘상 이론적으로 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있는 인광 재료가 가장 좋은 재료로 알려져 있다.

[0005] 인광 발광체의 호스트 재료로는 현재까지 CBP가 가장 널리 알려져 있으며, BCP 및 BAlq 등의 정공차단층 재료나 BAlq 유도체를 호스트로 이용하여 고효율 또는 고성능을 가지는 유기 발광 소자를 제조할 수 있다.

[0006] 일본 공개특허 제2009-076835호에는 인돌계 유도체를 사용하여 제조한 내구성 및 효율이 우수하고 경시의 색변화가 적은 유기 발광 소자가 개시되어 있다. 그러나 이러한 호스트 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 좋지 않아서, 진공 하에서 고온 증착 공정을 거칠 때, 물질이 변하는 등 단점을 가진다.

[0007] 유기 발광 소자의 소비 전력을 낮추려면 전력 효율을 높여야 하는데, “전력 효율 = (π /전압)×전류 효율”인 관계에 있어 전력 효율을 높이려면 전압을 낮춰야 한다. 실제 인광 발광 재료를 사용한 유기 발광 소자는 형광 발광 재료를 사용한 유기 발광 소자에 비해 전류 효율은 상당히 높으나, 예를 들면 인광 발광 재료의 호스트로서 BAlq 나 CBP 등 종래의 재료를 사용한 경우에 형광재료를 사용한 경우보다 구동 전압이 높아져 결국 전력 효율 면에서 별다른 이점이 없게 된다.

[0008] 또한, 이러한 호스트 재료들을 사용한 유기 발광 소자는 수명 측면에서도 결코 만족할만한 수준이 되지 못하여 더욱 안정되고 더욱 성능이 뛰어난 호스트 재료의 개발이 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0009] 상기한 문제점들을 해결하기 위하여 기존의 호스트 재료보다 발광 효율 및 소자 수명이 우수하고 적절한 색좌표를 갖는 우수한 골격의 유기 발광 화합물을 제공하고자 한다.

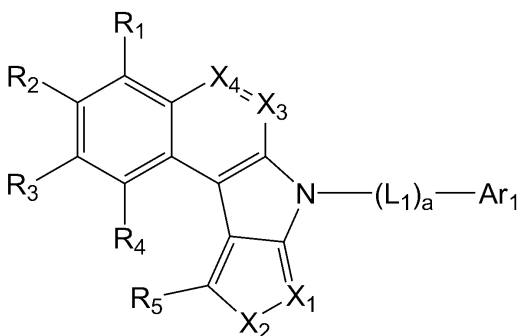
[0010] 상기 유기 발광 화합물을 발광 재료로서 채용하는 고효율 및 장수명의 유기 발광 소자를 제공하고자 한다.

[0011] 상기 유기 발광 소자를 포함한 평판 표시 장치를 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0012] 한 측면에 따라, 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물이 제공된다:

[0013] <화학식 1>



[0014]

[0015] 상기 식 중, X_1 는 CR_{11} 및 N 중 1종이고, X_2 는 CR_{12} , R_{13} , NR_{14} , S 및 O 중 1종이고, X_3 및 X_4 는 서로 독립적으로 CR_{15} 및 N 중 1종이고, R_1 내지 R_5 및 R_{11} 내지 R_{15} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3 - C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{30} 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{30} 헤테

로아릴기 중 1종이고, Ar_1 은 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 헤테로아릴기, $-N(Q_1)(Q_2)$ 및 $Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)(Q_6)-$ 로 표시되는 그룹 중 1종이고, 상기 Q_1 내지 Q_6 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴티오기, 및 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 헤테로아릴기 중 1종이고, L_1 은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 헤테로아릴렌기 중 1종이고, a 는 0 내지 3의 정수 중 하나이다.

[0016] 다른 한 측면에 따라, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.

[0017] 또 다른 한 측면에 따라, 소스, 드레인, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함한 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 상기 소스 및 드레인 중 하나와 전기적으로 연결된 평판 표시 장치가 제공된다.

발명의 효과

[0018] 한 측면에 따른 헤테로고리 화합물은 유리전이온도가 높고 열적 안정성이 우수하여 유기 발광 소자의 호스트 재료로 사용시 기존 호스트 재료에 비해 발광 효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나다.

[0019] 다른 한 측면에 따른 유기 발광 소자는 상기 헤테로고리 화합물을 포함하여 구동 전압이 낮고 발광 효율이 우수하며 수명이 크게 향상될 뿐만 아니라 전력 효율의 상승을 유도하여 소비 전력이 개선된다.

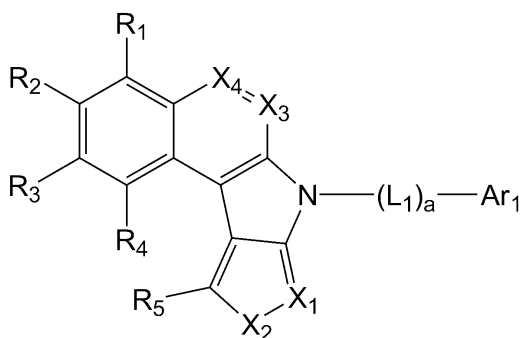
도면의 간단한 설명

[0020] 도 1은 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 단면도를 개략적으로 나타낸 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0021] 한 측면에 따라, 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물이 제공된다:

[0022] <화학식 1>



[0023]

[0024] 상기 화학식 1 중, X_1 는 CR_{11} 및 N 중 1종이고, X_2 는 CR_{12} , R_{13} , NR_{14} , S 및 O 중 1종이고, X_3 및 X_4 는 서로 독립적으로 CR_{15} 및 N 중 1종이고, R_1 내지 R_5 및 R_{11} 내지 R_{15} 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알

킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 헤테로아릴기 중 1종이고, Ar_1 은 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 헤테로아릴기, $-N(Q_1)(Q_2)$ 및 $Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)(Q_6)-$ 로 표시되는 그룹 중 1종이고, L_1 은 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 헤테로아릴렌기 중 1종이고, a 는 0 내지 3의 정수 중 하나이다.

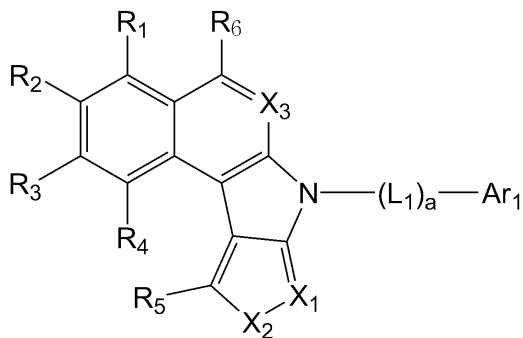
[0025] 단, R_{15} 가 복수개 존재하는 경우 복수개의 R_{15} 는 서로 동일하거나 상이할 수 있으며, a 가 2 또는 3이어서 L_1 이 복수개 존재하는 경우 복수개의 L_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 한편, a 가 0인 경우 L_1 은 단일 결합을 나타낸다.

[0026] 상기 $-N(Q_1)(Q_2)$ 및 $Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)(Q_6)-$ 중에서, Q_1 내지 Q_6 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴티오기, 및 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 헤테로아릴기 중 1종이다.

[0027] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 유리전이온도와 용점이 높아 열적 안정성이 우수한 특성을 가진다.

[0028] 상기 헤테로고리 화합물은 화학식 1에서 X_4 가 CR_6 인 경우로서 하기 화학식 2로 표시되는 헤테로고리 화합물일 수 있다.

[0029] <화학식 2>

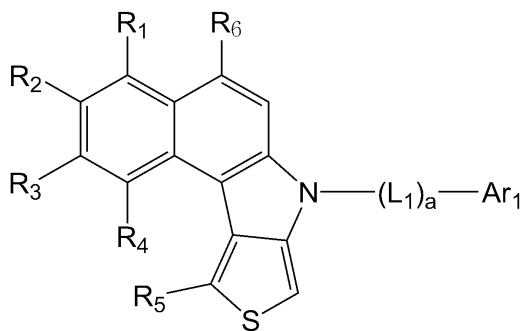


[0030]

[0031] 상기 화학식 2 중, R_1 내지 R_6 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30} 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30} 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30} 헤테로아릴기 중 1종이고, X_1 , X_2 , X_3 , Ar_1 , L_1 및 a 는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

[0032] 상기 헤테로고리 화합물은 X_1 및 X_3 가 CH이고 X_2 가 S이고 X_4 가 CR_6 인 경우로서 하기 화학식 3으로 표시되는 헤테로고리 화합물일 수 있다.

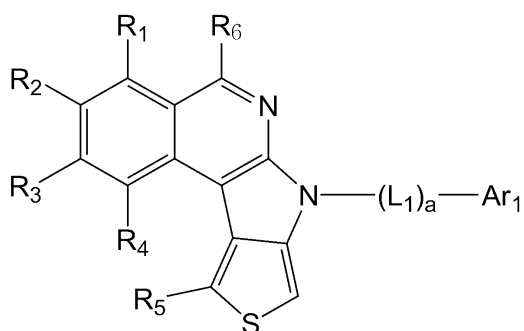
[0033] <화학식 3>



[0034]

[0035] 상기 헤테로고리 화합물은 X_1 이 CH이고 X_2 가 S이고 X_3 가 N이고 및 X_4 가 CR₆인 경우로서 하기 화학식 4로 표시되는 헤테로고리 화합물일 수 있다.

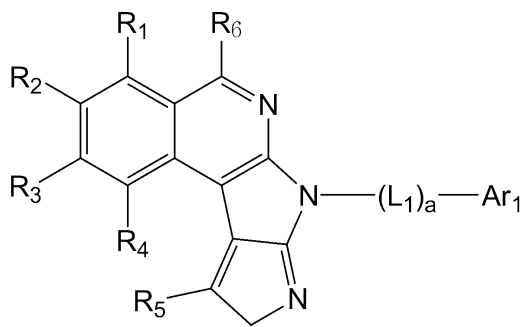
[0036] <화학식 4>



[0037]

[0038] 상기 헤테로고리 화합물은 X_1 이 N이고 X_2 가 CH₂이고 X_3 가 N이고 및 X_4 가 CR₆인 경우로서 하기 화학식 5로 표시되는 헤테로고리 화합물일 수 있다.

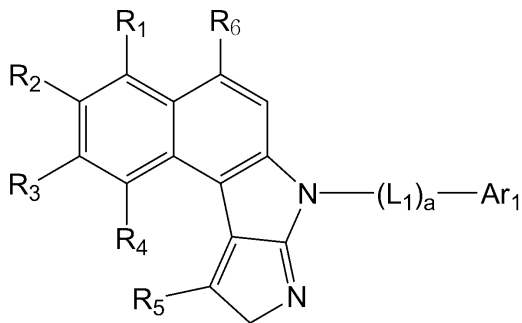
[0039] <화학식 5>



[0040]

[0041] 상기 헤테로고리 화합물은 X_1 이 N이고 X_2 가 CH₂이고 X_3 가 N이고 및 X_4 가 CR₆인 경우로서 하기 화학식 6으로 표시되는 헤테로고리 화합물일 수 있다.

[0042] <화학식 6>



[0043]

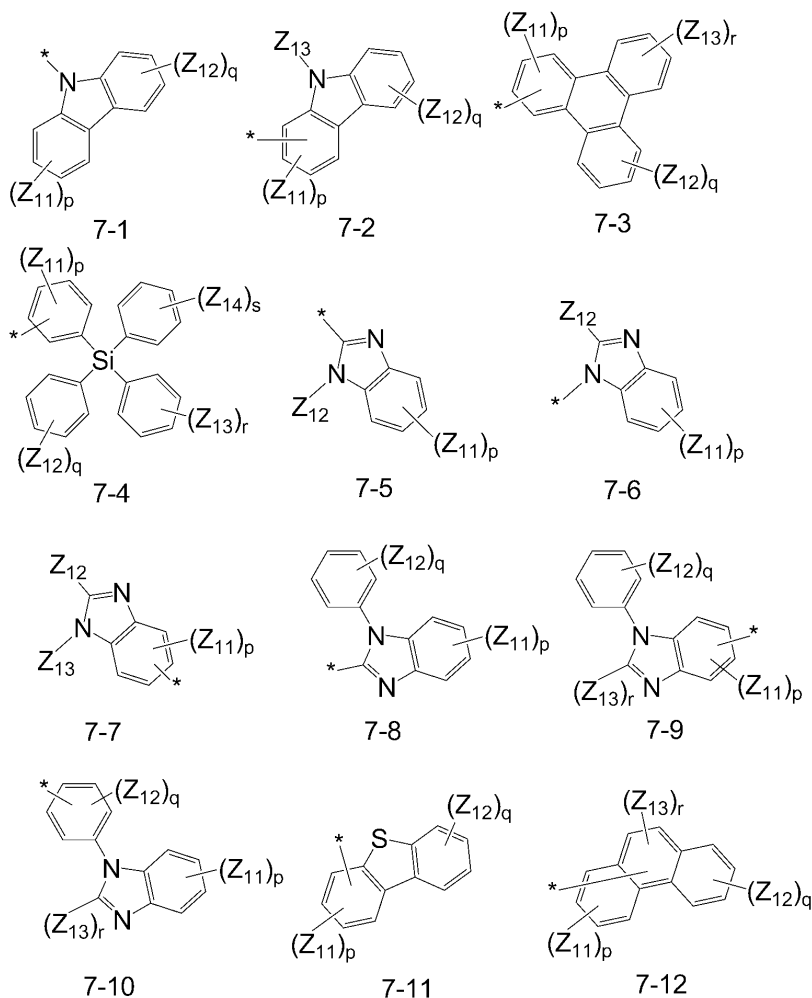
[0044] 상기 화학식 3 내지 6 중, R₁ 내지 R₆는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로아릴기 중 1종이고, Ar₁, L₁ 및 a는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

[0045] 상기 화학식 1 중, 헤테로고리 화합물의 골격에 결합된 R₁ 내지 R₅ 및 R₁₁ 내지 R₁₅는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로아릴기 중 1종일 수 있다. 예를 들면, 상기 R₁ 내지 R₅ 및 R₁₁ 내지 R₁₅는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 인테닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 및 치환 또는 비치환된 카바졸일기 중 1종일 수 있다.

[0046] 상기 화학식 1 중, 헤테로고리 화합물의 골격에 연결기(L₁)를 거쳐 결합된 Ar₁은 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로아릴기, -N(Q₁)(Q₂) 및 Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)(Q₆)-로 표시되는 그룹 중 1종일 수 있다. 여기서 Q₁ 내지 Q₆는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로아릴기 중 1종일 수 있다. 예를 들면, 상기 Ar₁은 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₂₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 페닐기(phenyl), 치환 또는 비치환된 펜타레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인테닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphtyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐기(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵타레닐기(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐기(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphtyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트라닐기(anthryl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 파이레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크라이세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 나프타세닐기(naphthacenyl), 치환 또는 비치환된 피세닐기(picenyl), 치환 또는 비치환된 페릴레닐기(perylene), 치환 또는 비치환된 펜타페닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl), 치환 또는 비치환된 피롤일기(pyrrolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸일기(imidazolyl), 치환 또는 비치환된 피라졸일기(pyrazolyl), 치환 또는 비치환된 피리디닐기(pyridinyl), 치환 또는 비치환된 피라지닐기(pyrazinyl), 치환 또는 비치환된 피리미디닐기(pyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 피리다지닐기(pyridazinyl), 치환 또는 비치환된 이소인돌일기(isoindolyl), 치환 또는 비치환된 인돌일기(indolyl), 치환 또는 비치환된 인다졸일기(indazolyl), 치환 또는 비치환된 푸리닐기(purinyl), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기(quinolinyl), 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기(benzoquinolinyl), 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기(phthalazinyl), 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기(quinoxaliny), 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기

(quinazolinyl), 치환 또는 비치환된 시놀리닐기(cinnolinyl), 치환 또는 비치환된 카바졸일기(carbazolyl), 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 치환 또는 비치환된 아크리디닐기(acridinyl), 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기(phenanthrolinyl), 치환 또는 비치환된 페나지닐기(phenazinyl), 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기(benzoimidazolyl), 치환 또는 비치환된 푸라닐기(furanyl), 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기(benzofuranyl), 치환 또는 비치환된 티오펜일기(thiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기(benzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 티아졸일기(thiazolyl), 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기(isothiazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기(benzothiazolyl), 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기(isoxazolyl), 치환 또는 비치환된 옥사졸일기(oxazolyl), 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기(oxadiazolyl), 치환 또는 비치환된 트리아지닐기(triazinyl), 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기(dibenzopuranyl), 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기(dibenzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조카바졸일기, 테트라페닐실란일기(tetraphenylsilanyl) 중 1종일 수 있다.

[0047] 상기 화학식 1 중, Ar₁은 하기 화학식 7-1 내지 7-12 중 1종으로 표시될 수 있다:



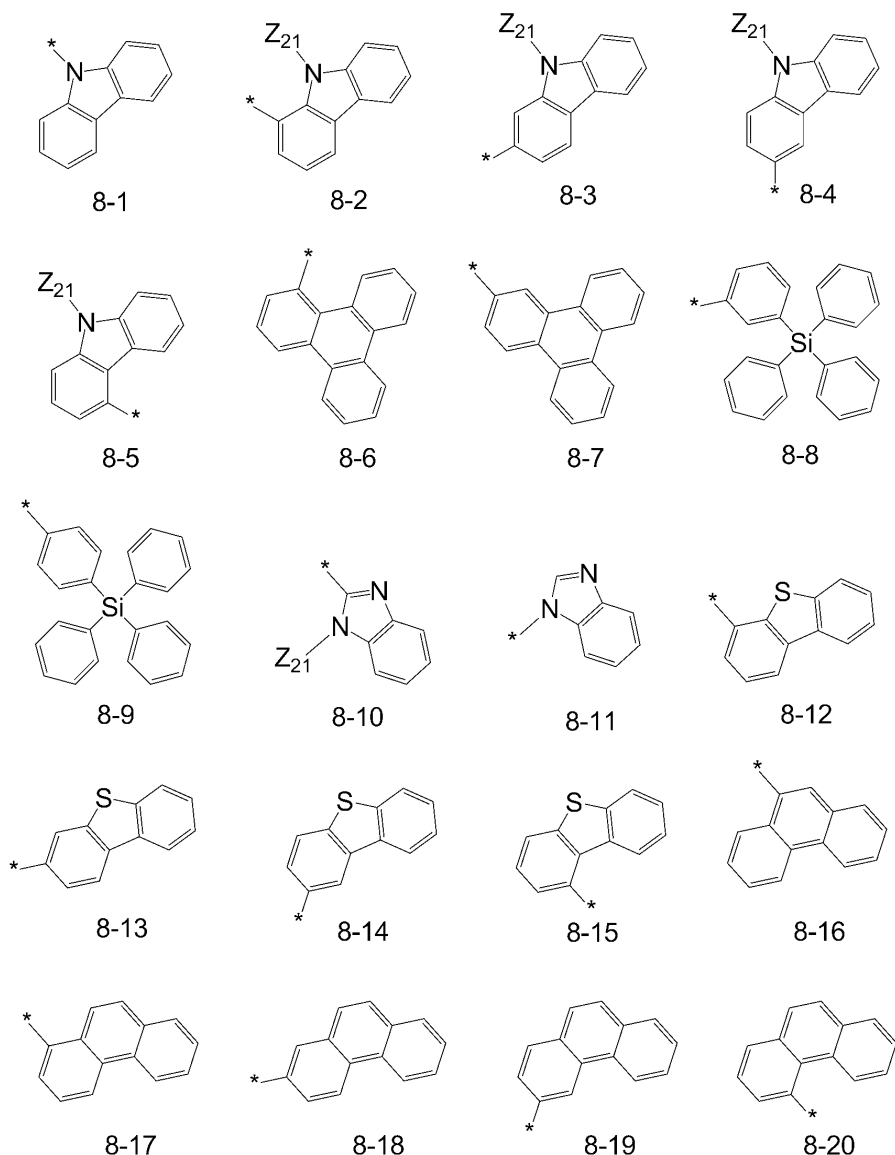
[0048]

[0049] 상기 화학식 7-1 내지 7-12 중, Z₁₁ 내지 Z₁₄는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C₁-C₁₀알킬기; C₁-C₁₀알콕시기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 1종 이상으로 치환된 C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기; 페닐기; 나프틸기; 플루오레닐기; 페난트레닐기; 안트릴기; 피레닐기; 크리세닐기; 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₁₀알킬기 및 C₁-C₁₀알콕시기 중 1종 이상으로

치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 피레닐기 및 크리스세닐기; 인돌일기; 벤조이미다졸일기; 카바졸일기; 이미다졸일기; 이미다졸리닐기; 이미다조피리디닐기; 이미다조피리미디닐기; 피리디닐기; 피리미디닐기; 트리아지닐기; 퀴놀리닐기; 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기 및 나프틸기 중 하나 이상으로 치환된 인돌일기, 벤조이미다졸일기, 카바졸일기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기 및 퀴놀리닐기 중 1종이고; p, q, r 및 s는 서로 독립적으로 1 내지 5의 정수 중 하나이다.

[0050] 단, Z₁₁ 내지 Z₁₄ 중 복수개 존재하는 것은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며, 기호 *는 화학식 1의 잔여 부분에 대한 Ar₁의 결합점을 나타낸다.

[0051] 예를 들면, 상기 화학식 1 중, Ar₁은 하기 화학식 8-1 내지 8-20 중 1종으로 표시될 수 있다:



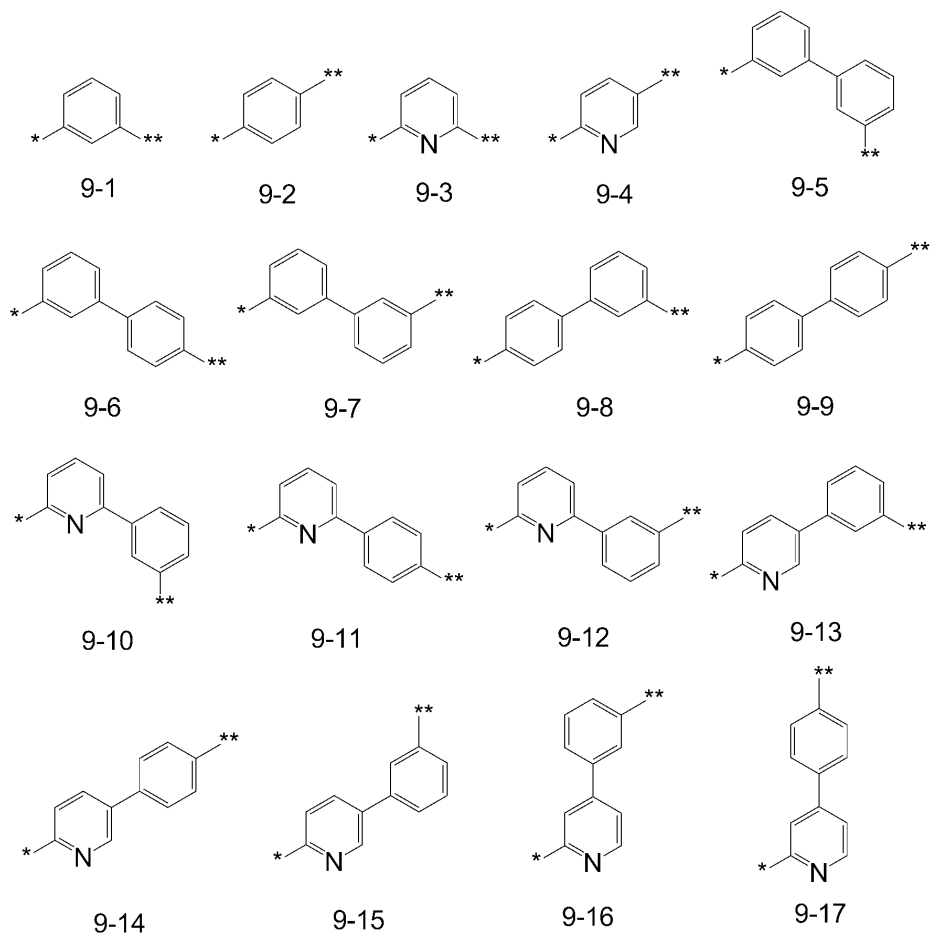
[0052]

[0053] 상기 화학식 8-1 내지 8-20 중, Z₂₁은 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₁₀알킬기, C₁-C₁₀알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 피레닐기, 크리스세닐기, 인돌일기, 벤조이미다졸일기, 카바졸일기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기 및 퀴놀리닐기 중 1종일 수 있다. 단, 기호 *는 화학식 1의 잔여 부분에 대

한 Ar₁의 결합점을 나타낸다.

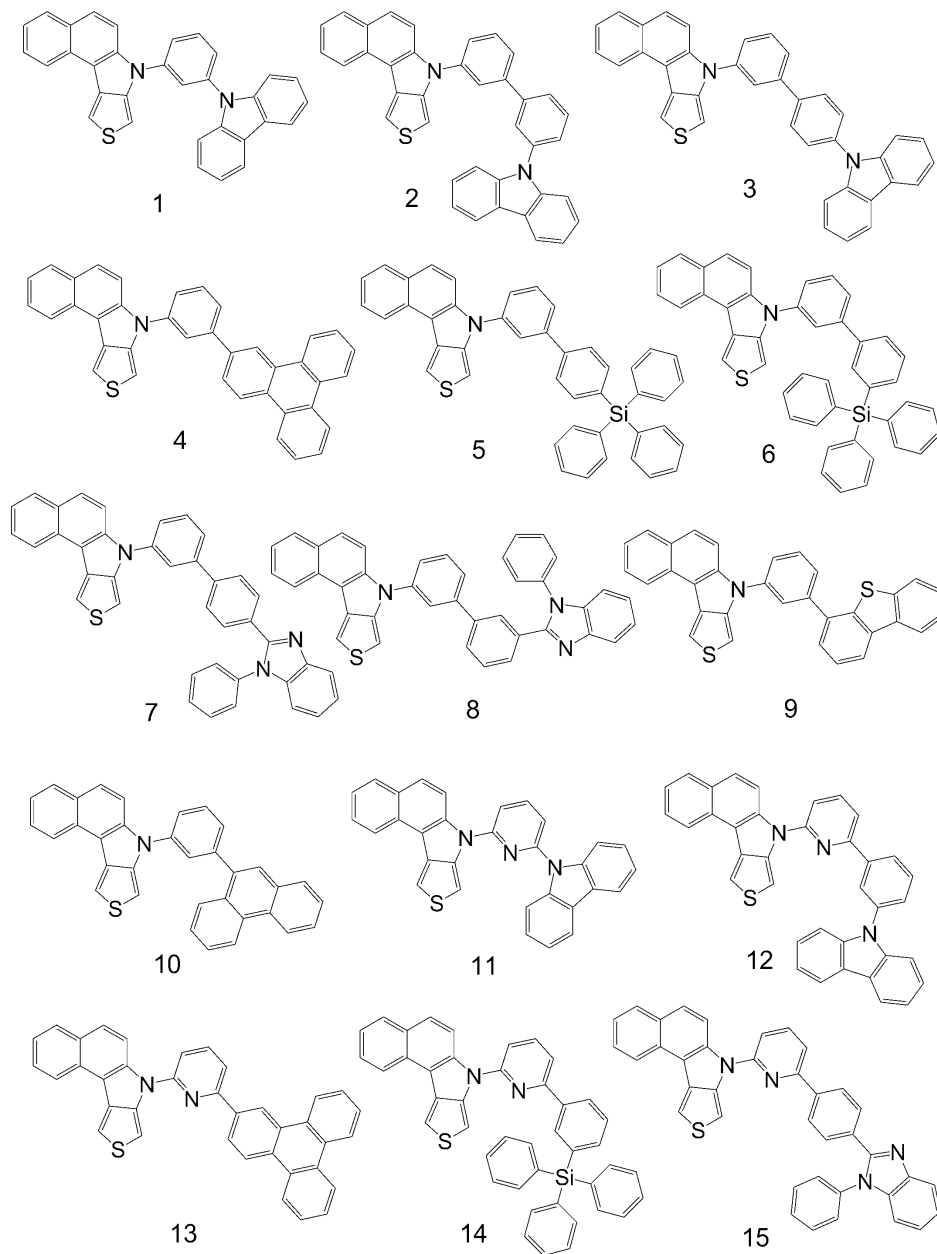
[0054] 상기 화학식 1 중, 헤테로고리 화합물의 골격과 Ar₁은 연결기(L₁)를 거쳐 결합된다. 상기 L₁은 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기(pentalenylene), 치환 또는 비치환된 인데닐렌기(indenylene), 치환 또는 비치환된 나프틸렌기(naphthylene), 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기(azulenylene), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐렌기(heptalenylene), 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기(indacenylene), 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기(acenaphthylene), 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기(fluorenylene), 치환 또는 비치환된 페나레닐렌기(phenalenylene), 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기(phenanthrenylene), 치환 또는 비치환된 안트릴렌기(anthrylene), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기(fluoranthenylene), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기(triphenylenylene), 치환 또는 비치환된 피레닐렌기(pyrenylene), 치환 또는 비치환된 크리스세닐렌기(chrysenylene), 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기(naphthacenylene), 치환 또는 비치환된 피세닐렌기(picenylene), 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기(peryleneylene), 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기(pentaphenylene), 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기(hexacenylene), 치환 또는 비치환된 피롤일렌기(pyrrolylene), 치환 또는 비치환된 피라졸일렌기(pyrazolylenylene), 치환 또는 비치환된 이미다졸일렌기(imidazolylenylene), 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐렌기(imidazolinylene), 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐렌기(imidazopyridinylene), 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐렌기(imidazopyrimidinylene), 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기(pyridinylene), 치환 또는 비치환된 피라지닐렌기(pyrazinylene), 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기(pyrimidinylene), 치환 또는 비치환된 인돌일렌기(indolylene), 치환 또는 비치환된 푸리닐렌기(purinylene), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐렌기(quinolinylene), 치환 또는 비치환된 프탈라지닐렌기(phthalazinylene), 치환 또는 비치환된 인돌리지닐렌기(indolizinylenylene), 치환 또는 비치환된 나프티리디닐렌기(naphthyridinylene), 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐렌기(quinazolinylene), 치환 또는 비치환된 시놀리닐렌기(cinnolinylene), 치환 또는 비치환된 인다졸일렌기(indazolylenylene), 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기(carbazolylenylene), 치환 또는 비치환된 페나지닐렌기(phenazinylene), 치환 또는 비치환된 페난트리디닐렌기(phenanthridinylene), 치환 또는 비치환된 피라닐렌기(pyranylene), 치환 또는 비치환된 크로메닐렌기(chromenylene), 치환 또는 비치환된 푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐렌기(benzofuranylenylene), 치환 또는 비치환된 티오펜일렌기(thiophenylene), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일렌기(benzothiophenylene), 치환 또는 비치환된 이소티아졸일렌기(isothiazolylenylene), 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일렌기(benzoimidazolylenylene), 치환 또는 비치환된 이소사졸일렌기(isoxazolylenylene), 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일렌기(dibenzothiophenylene), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐렌기(dibenzopuranylenylene), 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기(triazinylene), 및 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일렌기(oxadiazolylenylene) 중 1종일 수 있다.

[0055] 예를 들면, 상기 화학식 1 중, L₁은 하기 화학식 9-1 내지 9-17 중 1종으로 표시될 수 있다:

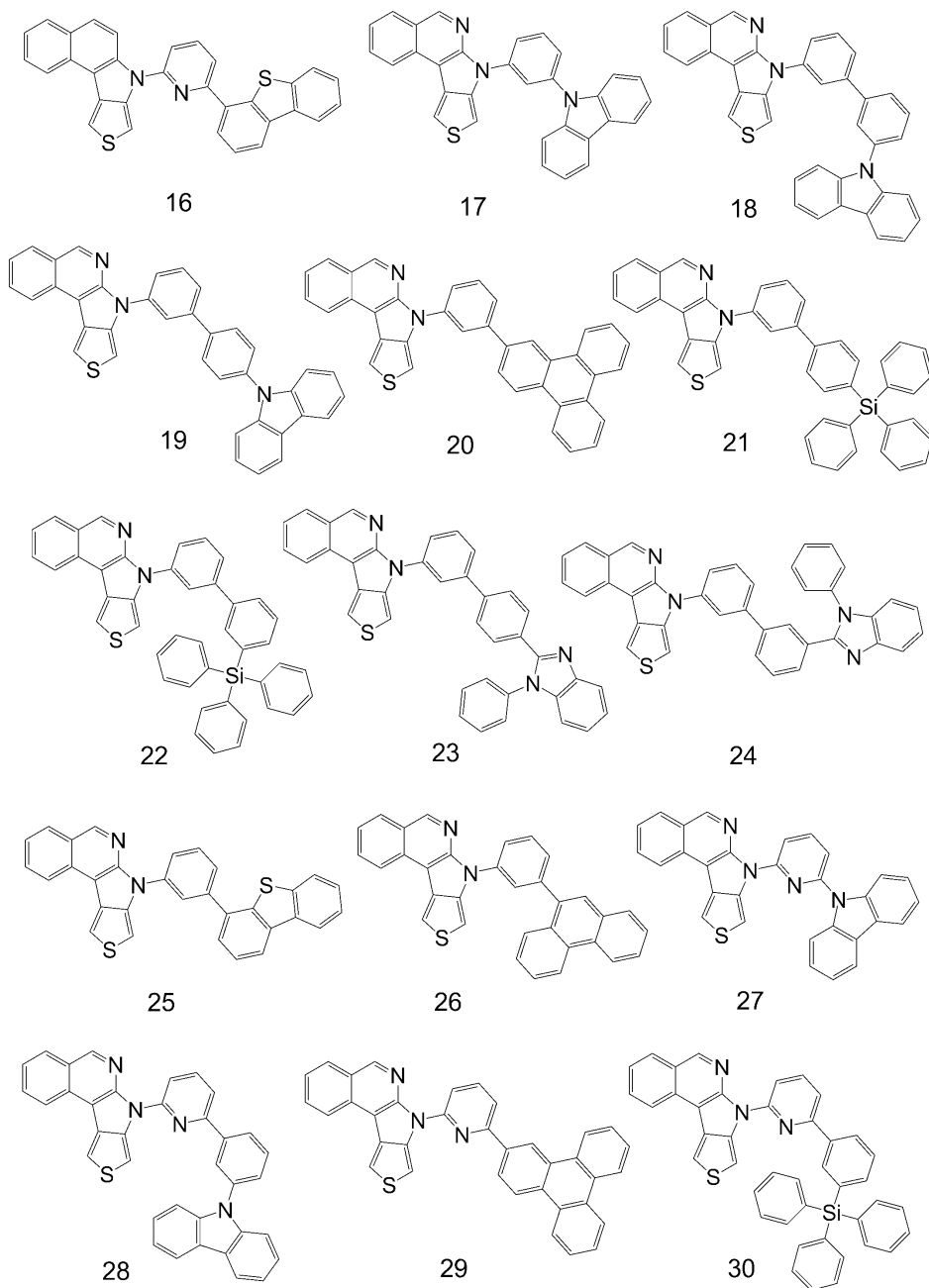


[0056]

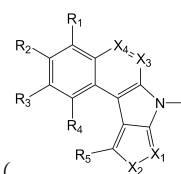
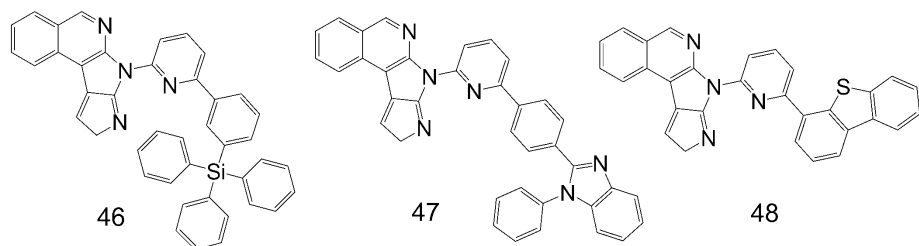
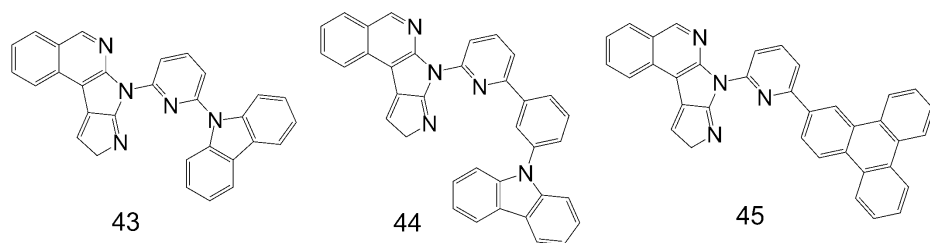
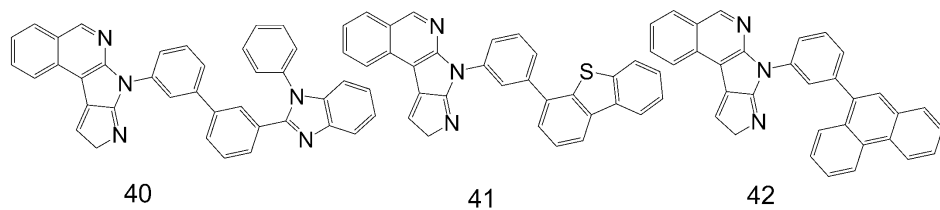
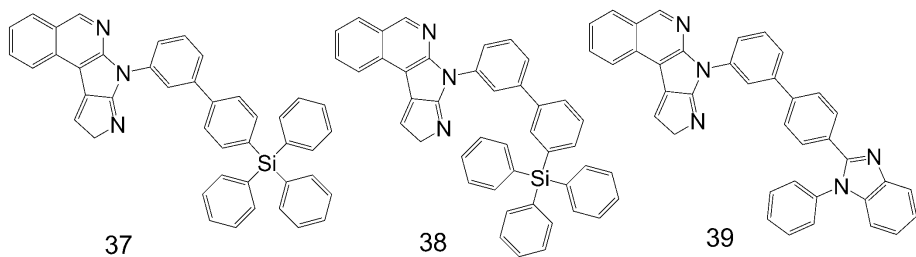
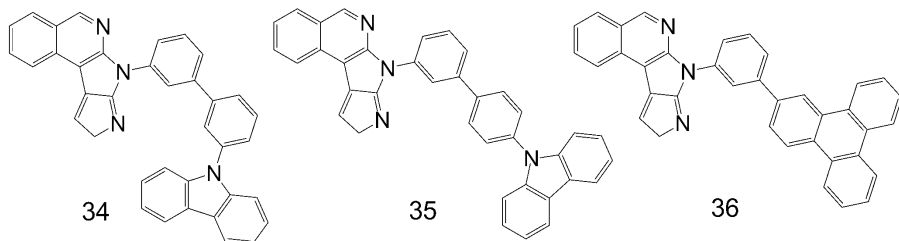
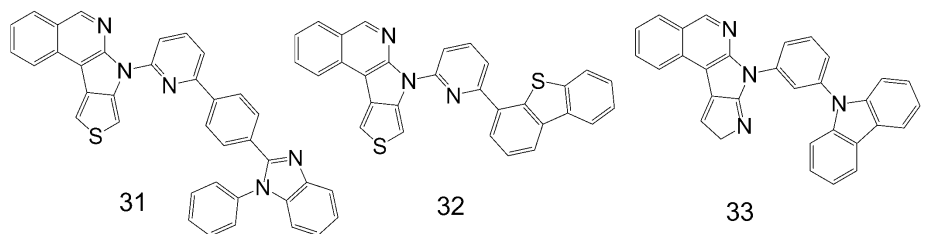
[0057] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 예를 들면 하기 화합물 1 내지 48 중 1종일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0058]



[0059]



상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 헤테로고리를 포함하는 강직한 4환 구조()가 골격을 이루고, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 카바졸일기, 벤조이미다졸일기, 디벤조티오펜일기 또는 테트라페닐실란일기 등의 관능기(Ar₁)가 연결기(L₁)를 통하여 상기 골격에 결합한 구조를 가지며, 이러한 구조로 인해 높

은 유리전이온도와 융점을 가진다.

- [0063] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 보관 및/또는 구동시에 유기층들 사이에서, 유기층 내부에서, 및/또는 발광층과 금속 전극 사이에서, 발생하는 줄 열에 대하여 우수한 내열성을 가진다. 따라서, 상기 헤테로고리 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 시간이 지나도 고온 환경하에서 열적 안정성이 유지되어 높은 내구성과 장수명을 가진다.
- [0064] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 헤테로고리 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자에게 용이하게 인식될 수 있다.
- [0065] 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들면, 상기 헤테로고리 화합물은 발광층, 애노드와 발광층 사이의 층(예를 들면, 정공 주입층, 정공 수송층, 또는 정공 주입 및 정공 수송 기능을 동시에 하는 기능층), 및/또는 캐소드와 발광층 사이의 층(예를 들면, 전자 주입층, 전자 수송층, 또는 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 하는 기능층)에 사용될 수 있다.
- [0066] 다른 한 측면에 따라, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층을 포함하고, 상기 유기층이 상기 화학식 1로 표시된 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0067] 본 명세서 중 "유기층"은 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 층을 가리키는 것으로 해석될 수 있다.
- [0068] 본 명세서 중, "(유기층이) 상기 화학식 1로 표시된 헤테로고리 화합물을 포함한다"는 것은 "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 헤테로고리 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 헤테로고리 화합물을 포함한다"는 것으로 해석될 수 있다.
- [0069] 상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 버퍼층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송 기능 및 전자 주입 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0070] 상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나에는 상기 헤테로고리 화합물이 포함될 수 있다.
- [0071] 상기 유기층은 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나에는 상기 헤테로고리 화합물이 포함될 수 있다.
- [0072] 상기 유기층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층에는 상기 헤테로고리 화합물이 포함될 수 있다.
- [0073] 상기 발광층에 포함된 상기 헤테로고리 화합물은 인광 호스트로 사용될 수 있다. 상기 발광층에 포함된 상기 헤테로고리 화합물은 적색광, 녹색광 또는 청색광을 방출하는 인광 호스트의 역할을 할 수 있으며, 특히 녹색광의 인광 호스트에 유용할 수 있다.
- [0074] 이하, 도 1을 참조하여 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하나, 상기 유기 발광 소자가 도 1에 한정되는 것은 아니다.
- [0075] 도 1은 일 구현예를 따른 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다.
- [0076] 기관(11)으로는, 통상적인 유기 발광 소자에 사용되는 기관을 사용할 수 있으며, 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기관 또는 투명 플라스틱 기관을 사용할 수 있다.
- [0077] 제1전극(13)은 기관 상부에 제1전극 형성 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 형성될 수 있다. 제1전극(13)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록 제1전극 형성 물질은 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 제1전극(13)은 반사형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극 형성 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂) 또는 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 은(Ag), 알루미늄(Al), 알루미늄:리튬(Al:Li), 칼슘(Ca), 은:산화인듐주석(Ag:ITO), 마그네슘:인듐(Mg:In) 또는 마그네슘:은(Mg:Ag)등을 이용하여 제1전극(13)을 반사형 전극으로 형성할 수도 있다. 제

1전극(13)은 단일층 또는 2 이상의 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들면, 제1전극(13)은 ITO:Ag:ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0078] 제1전극(13) 상부에는 유기층(15)이 구비되어 있다. 유기층(15)은 정공 주입층(미도시), 정공 수송층(미도시), 버퍼층(미도시), 발광층(16), 전자 수송층(미도시) 및 전자 주입층(미도시)을 포함할 수 있다.

[0079] 정공 주입층(HIL)은 제1전극(13) 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다. 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500℃, 진공도 약 10^{-8} 내지 약 10^{-3} torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다. 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80℃ 내지 200℃의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다. 정공 주입층 형성 재료로는 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 및 공지된 정공 주입층 형성 재료 중 적어도 1종을 사용할 수 있다. 공지된 정공 주입층 형성 재료는, 예를 들면, N,N'-디페닐-N,N'-비스-[4-(페닐-m-톨릴-아미노)-페닐]-비페닐-4,4'-디아민(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine: DNTPD), 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA [4,4',4''-tris (3-methylphenylphenylamino) triphenylamine], NPB(N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)), TDATA, 2-TNATA, Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid: 폴리아닐린/캄페르술포산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트)) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 정공 주입층의 두께는 약 100 Å 내지 약 10000 Å, 예를 들면, 약 100 Å 내지 약 1000 Å일 수 있다. 정공 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스러운 정도의 정공 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0080] 다음으로 정공 주입층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공 수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀코팅법에 의하여 정공 수송층을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 정공 수송층 형성 재료로는 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 및 공지된 정공 수송층 형성 재료 중 적어도 1종을 사용할 수 있다. 공지된 정공 수송층 형성 재료로는, 예를 들면, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), TCTA(4,4',4''-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4''-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)) 또는 NPB(N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 정공 수송층의 두께는 약 50 Å 내지 약 2000 Å, 예를 들면 약 100 Å 내지 약 1500 Å일 수 있다. 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0081] 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층에는 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물, 정공 주입층 형성 재료, 및 정공 수송층 형성 재료 중에서 적어도 1종이 포함될 수 있으며, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층의 두께는 약 500 Å 내지 약 10000 Å, 예를 들면, 약 100 Å 내지 약 1000 Å일 수 있다. 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스러운 정도의 정공 주입 및 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0082] 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나는 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물, 공지된 정공 주입층 형성 재료, 및 공지된 정공 수송층 형성 재료 중 적어도 1종 이외에, 상기 층의 도전성 등을 향상시키기 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.

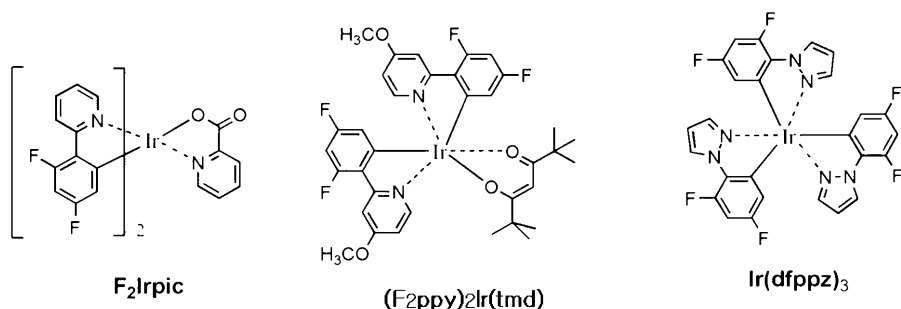
[0083] 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나와 발광층(16) 사이에는 버퍼층이 개재될 수 있다. 버퍼층은 발광층(16)에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 효율을 증가시키는 역할을 할 수 있다. 버퍼층은 공지된 정공 주입층 형성 재료, 정공 수송층 형성 재료를 포함할 수 있다.

[0084] 이어서, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 또는 버퍼층 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(16)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 발광층(16)을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

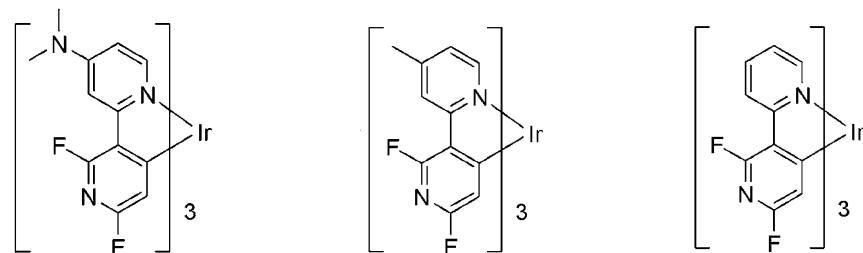
[0085] 발광층(16)의 호스트 재료로는 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 사용할 수 있다. 또는 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 외에 공지된 호스트 재료를 더 사용할 수 있다. 공지된 호스트 재료로는 Alq₃, CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), PVK(폴리(n-비닐카바졸)), 9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센(ADN), TCTA, TPBI(1,3,5-트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene)), TBADN(3-tert-부틸-9,10-디(나프트-2-일) 안트라센), E3, DSA(디스티릴아릴렌) 또는 dmCBP 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0086] 유기 발광 소자(10)가 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 중 적어도 하나를 포함하는 경우에, 발광층(16)에는 하기 도펀트를 사용할 수 있다(ppy = 페닐피리딘).

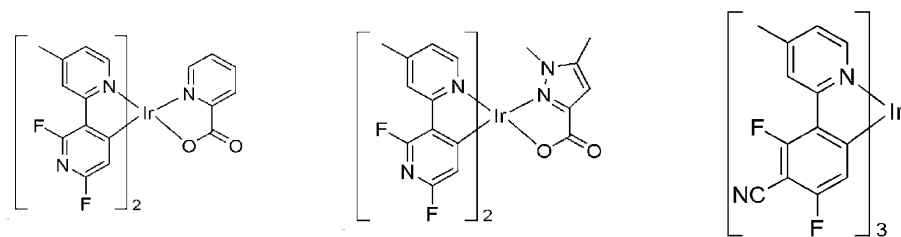
[0087] 청색 도펀트로서는 공지된 하기 화합물들 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



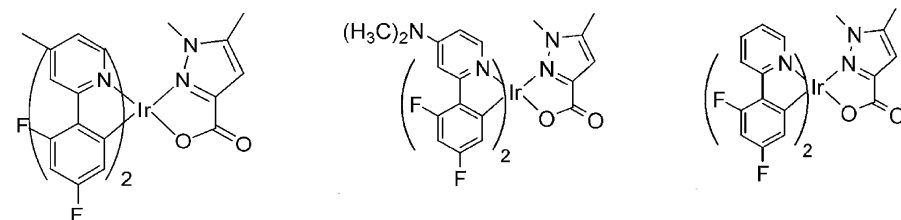
[0088]



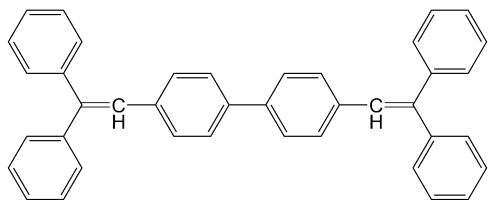
[0089]



[0090]

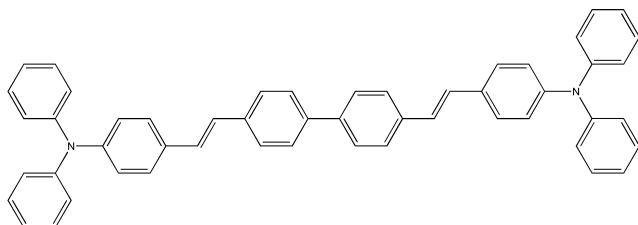


[0091]



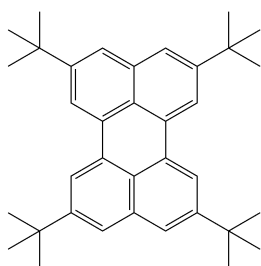
DPVBi

[0092]



DPAVB

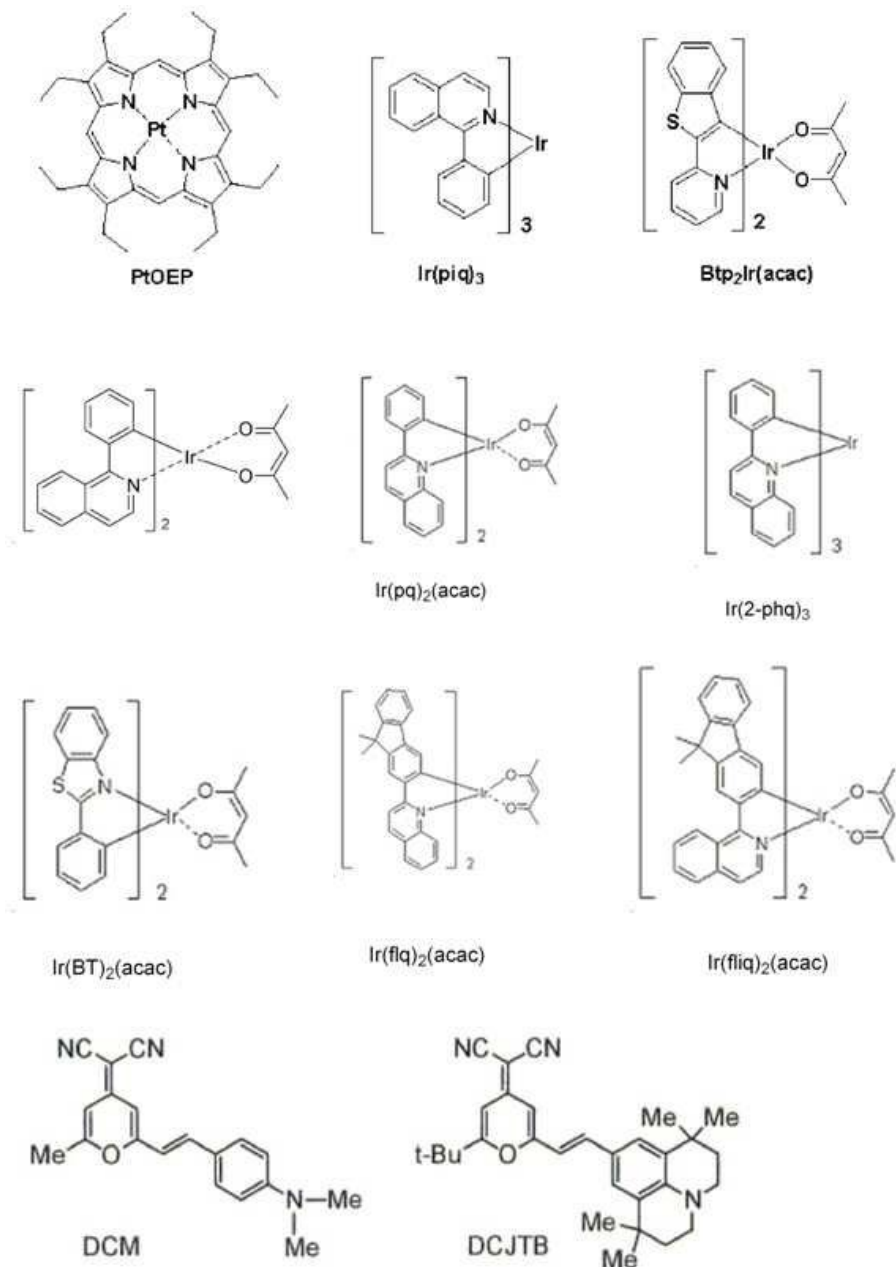
[0093]



TBPe

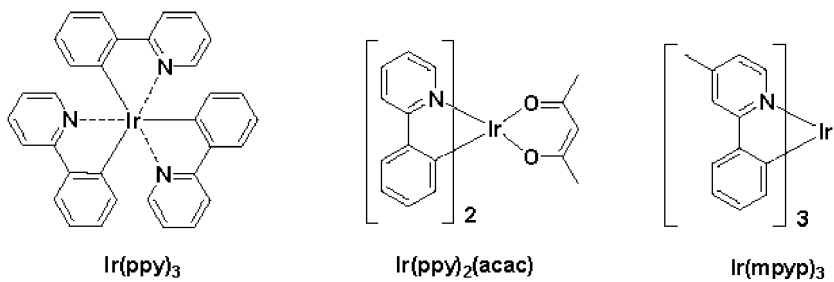
[0094]

[0095] 적색 도펀트로서는 하기 화합물들 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

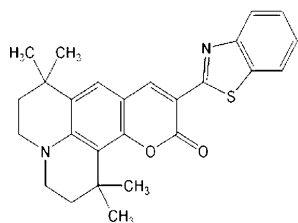


[0096]

[0097] 녹색 도펀트로서는 하기 화합물들 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0098]



C545T

[0099]

[0100]

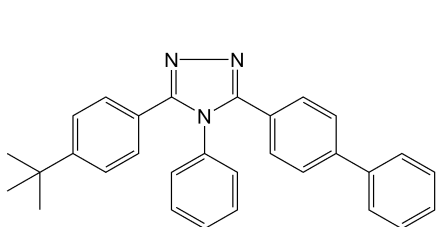
[0101]

[0102]

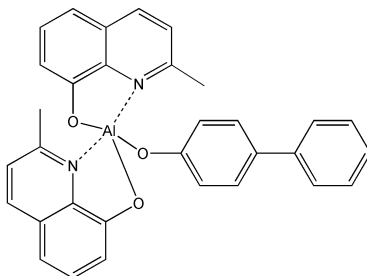
[0103]

[0104]

- 또한, 발광층(16)의 도펀트로는 공지된 Pt-착체, Os-착체 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- 유기 발광 소자(10)의 발광층(16); 및 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나;가 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함하는 경우, 발광층(16)은 공지의 아릴아민 화합물을 포함할 수 있다.
- 발광층(16)이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- 발광층(16)의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 발광층(16)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.
- 다음으로 발광층(16) 상부에 전자 수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스핀코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 전자 수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 전자 수송층 형성 재료로는 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 및 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 공지의 전자 수송층 형성 재료 중 적어도 1종을 사용할 수 있다. 공지의 전자 수송층 형성 재료로는, 예를 들면, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq3), TAZ, Balq, 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: Bebq₂), ADN, 화합물 201, 또는 화합물 202 등과 같은 재료를 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

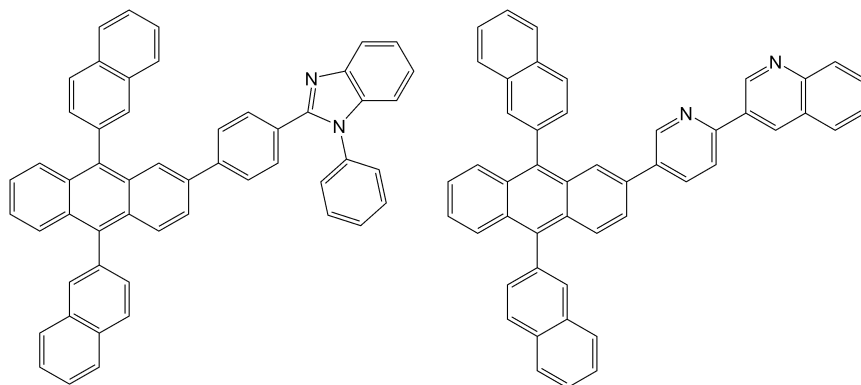


TAZ



BAlq

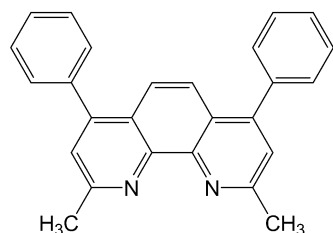
[0105]



201

202

[0106]



BCP

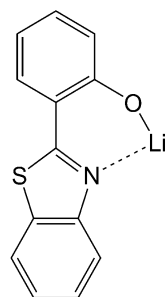
[0107]

[0108]

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

[0109]

전자 수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 및 공지의 전자 수송층 형성 재료 중 적어도 1종 이외에, 금속 착체를 더 포함할 수 있다. 상기 금속 착체는 Li 착체를 포함할 수 있다. Li 착체로는 예를 들면 리튬 퀴놀레이트(LiQ) 또는 하기 화합물 203 등을 들 수 있다:



203

[0110]

[0111]

전자 수송층 상부에 캐소드로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 전자 주입층(EIL)이 적층될 수 있다. 전자 주입층 형성 재료로는 예를 들면 LiF, NaCl, CsF, Li₂O 또는 BaO 등과 같은 공지된 전자 주입층 형성 재료를 사용할 수 있다. 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0112]

유기층(15) 상부에는 제2전극(19)이 구비되어 있다. 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드(Cathode)일 수 있으며, 이 때 제2전극 형성 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 또는 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 예를 들면, 제2전극은 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄:리튬(Al:Li), 칼슘(Ca), 마그네슘:인듐(Mg:In) 또는 마그네슘:은(Mg:Ag) 등을 박막으로 형성하여 투과형 전극을 얻을 수 있다. 한편, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO 또는 IZO를 이용하여 투과형 전극을 형성할 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

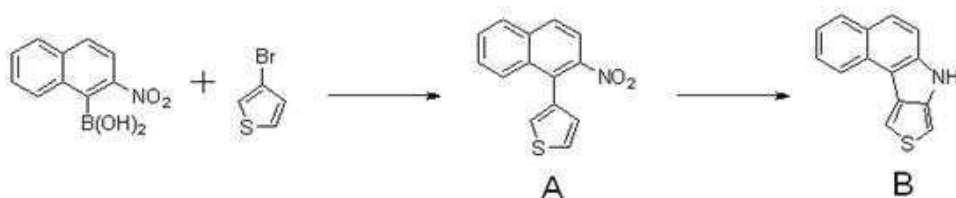
- [0113] 한편, 발광층(16)에 인광 도펀트를 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 정공 수송층과 발광층(16) 사이에 또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 가지는 기능층과 발광층 사이에, 진공증착법, 스퍼코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공 저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스퍼코팅법에 의해 정공 저지층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 될 수 있다. 정공 저지층은 공지의 정공 저지층 형성 재료를 사용하여 형성할 수 있으며, 옥사디아졸 유도체, 트리아졸 유도체 또는 페난트롤린 유도체 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들면, 하기와 같은 BCP를 사용하여 정공 저지층을 형성할 수 있다.
- [0114] 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 정공저지층의 두께가 적절한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.
- [0115] 다른 한 측면에 따라, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 포함하는 평판 표시 장치가 제공된다. 상기 평판 표시 장치는 소스, 드레인, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 상기 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 상기 소스 및 드레인 중 하나와 전기적으로 연결되어 있다. 트랜지스터의 활성층은 비정질 실리콘층, 결정질 실리콘층, 유기 반도체층 또는 산화물 반도체층 등으로 다양한 변형이 가능하다.
- [0116] 본 명세서 중, 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기(또는 C_1-C_{30} 알킬기)의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등과 같은 탄소수 1 내지 30의 선형 또는 분지형 알킬기를 들 수 있고, 치환된 C_1-C_{30} 알킬기는 상기 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기 중 하나 이상의 수소가 중수소, 할로젠, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염, 또는 C_1-C_{30} 알킬기, C_2-C_{30} 알케닐기, C_2-C_{30} 알키닐기, C_6-C_{30} 아릴기, C_2-C_{30} 헤테로아릴기, $-N(Q_{11})(Q_{12})$, 및 $Si(Q_{13})(Q_{14})(Q_{15})(Q_{16})-$ (여기서, Q_{11} 내지 Q_{16} 은 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{30} 알킬기, C_2-C_{30} 알케닐기, C_2-C_{30} 알키닐기, C_5-C_{30} 아릴기, 및 C_2-C_{30} 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택됨)로 치환된 것이다.
- [0117] 본 명세서 중, 비치환된 C_1-C_{30} 알콕시기(또는 C_1-C_{30} 알콕시기)는 $-OA$ (단, A는 상술한 바와 같은 비치환된 C_1-C_{30} 알킬기임)의 화학식을 가지며, 이의 구체적인 예로서, 메톡시, 에톡시 또는 이소프로필옥시 등이 있다. 치환된 C_1-C_{30} 알콕시기는 C_1-C_{30} 알콕시기 중 적어도 하나 이상의 수소가 상술한 치환된 C_1-C_{30} 알킬기 경우의 치환기로 치환된 것이다.
- [0118] 본 명세서 중 비치환된 C_2-C_{30} 알케닐기(또는 C_2-C_{30} 알케닐기)는 상기 비치환된 C_2-C_{30} 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 것을 의미하며, 예로서는 에테닐, 프로페닐 또는 부테닐 등이 있다. 치환된 C_2-C_{30} 알케닐기는 C_2-C_{30} 알케닐기 중 적어도 하나 이상의 수소가 상술한 치환된 C_1-C_{30} 알킬기 경우의 치환기로 치환된 것이다.
- [0119] 본 명세서 중 비치환된 C_2-C_{30} 알키닐기(또는 C_2-C_{30} 알키닐기)는 상기 정의된 바와 같은 C_2-C_{30} 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 것을 의미하며, 예로서는 에티닐(ethynyl) 또는 프로피닐(propynyl) 등이 있다. 치환된 C_2-C_{30} 알키닐기는 C_2-C_{30} 알키닐기 중 적어도 하나 이상의 수소가 상술한 치환된 C_1-C_{30} 알킬기 경우의 치환기로 치환된 것이다.
- [0120] 본 명세서 중 비치환된 C_5-C_{30} 아릴기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 5 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 비치환된 C_5-C_{30} 아릴렌기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 5 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 아릴기 및 아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 치환된 C_5-C_{30} 아릴기는 C_5-C_{30} 아릴기 중 적어도 하나 이상의 수소가 상술한 치환된 C_1-C_{30} 알킬기 경우의 치환기로 치환된 것이고, 치환된 C_5-C_{30} 아릴렌기는 C_5-C_{30} 아릴렌기 중 적어도 하나 이상의 수소가 상술한 치환된 C_1-C_{30} 알킬기 경우의 치환기로 치환된 것이다.

[0121] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₃₀헤테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하고 나머지 고리원자가 C인 하나 이상의 방향족 고리로 이루어진 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, 비치환된 C₂-C₃₀헤테로아릴렌기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하고 나머지 고리원자가 C인 하나 이상의 방향족 고리로 이루어진 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 여기서, 헤테로아릴기 및 헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리는 서로 융합될 수 있다. 치환된 C₂-C₃₀헤테로아릴기는 C₂-C₃₀헤테로아릴기 중 적어도 하나 이상의 수소가 상술한 치환된 C₁-C₃₀알킬기 경우의 치환기로 치환된 것이고, 치환된 C₂-C₃₀헤테로아릴렌기는 C₂-C₃₀헤테로아릴렌기 중 적어도 하나 이상의 수소가 상술한 치환된 C₁-C₃₀알킬기 경우의 치환기로 치환된 것이다.

[0122] 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기는 -OA₂(여기서, A₂는 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기임)를 가리키고, 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기는 -SA₃(여기서, A₃는 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기임)를 가리킨다.

[0123] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명한다. 그러나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0124] 먼저, 하기 반응 메커니즘에 의해 중간체 A 및 B를 합성하였다:



[0125]

[0126] **중간체 A 합성**

[0127] 2-니트로나프탈렌-1-일 보론산(2-nitronaphthalen-1-yl boronic acid) 20g (1eq, 0.092mol) 및 3-브로모티오펜(3-bromothiophene) 18.3g (1.2eq, 0.11mol)를 플라스크에 넣고 Pd(PPh₃)₄ 2.12g (0.02eq, 0.00184mol)를 첨가하였다. 톨루엔 550 ml 및 2M K₂CO₃ 포화용액 100ml를 첨가한 다음 5시간 동안 환류 교반하였다.

[0128] 반응이 종결된 후 MC 500 ml와 증류수 200 ml로 세척 및 추출한 다음, 용매를 제거한 후 생성된 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 원하는 중간체 A 18.81g (수율 80.1%)를 수득하였다.

[0129] ¹H NMR: 7.22(d, 1H), 7.73 (m, 3H), 8.02(m, 4H), 9.05 (s, 1H)

[0130] **중간체 B 합성**

[0131] 화합물 B 20g (1eq, 0.078mol), SnCl₂ 2H₂O 120g (800mmol), 아세트산 600mL 및 1N HCl 70mL를 넣고 80℃에서 밤새 교반하였다. 반응용매를 감압증류한 후, THF와 EA에 반응 혼합물을 녹이고, NaHCO₃수용액과 브린(brine)으로 씻어주었다. 무수의 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. MeOH로 재결정하여 중간체 B 8.2g (수율 47%)을 얻었다.

[0132] ¹H NMR: 7.2(s, 2H), 7.67 (m, 4H), 8.16(t, 1H), 8.54(t, 1H), 10.1 (S, 1H NH)

[0133] **화합물 1 합성**

[0134] 중간체 B 10g (1eq, 0.044mol)과 9-(3-브로모페닐)-9H-카바졸(9-(3-bromophenyl)-9H-carbazole) 15.87g (1.1eq, 0.049mol) 각각 플라스크에 넣고, 1200ml의 톨루엔과 용해시켰다. 여기에 Pd₂(dba)₃ 0.86g (0.02eq, 0.0008mmol), Na(t-bu)O 6.75g (1.2eq, 0.0528mol), P(t-Bu)₃ 0.28g (0.08ea, 0.0035mmol)을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다. 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트(celite)를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그

래피를 통하여 최종 화합물 1을 14.7g (수율 = 72%)을 얻었다.

[0135] Elemental Analysis for C₃₂H₂₀N₂S: calcd C, 82.73; H, 4.34; N, 6.03; S, 6.90

[0136] HRMS for C₃₂H₂₀N₂S [M]⁺: calcd 464, found 463.

[0137] 화합물 3 합성

[0138] 중간체 B 10g (1eq, 0.044mol)과 9-(4'-브로모비페닐-3-일)-9H-카바졸(9-(4'-bromobiphenyl-3-yl)-9H-carbazole) 19.51g (1.1eq, 0.049mol)을 각각 플라스크에 넣고, 1200ml의 톨루엔과 용해시켰다. 여기에 Pd₂(dba)₃ 0.86g (0.02eq, 0.0008mmol), Na(t-bu)O 6.75g (1.2eq, 0.0528mol), P(t-Bu)₃ 0.28g (0.08ea, 0.0035mmol)을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다. 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 최종 화합물 3을 16.77g (수율 = 70.5%)을 얻었다.

[0139] Elemental Analysis for C₃₈H₂₄N₂S: calcd C, 84.41; H, 4.47; N, 5.18; S, 5.93;

[0140] HRMS for C₃₈H₂₄N₂S [M]⁺: calcd 540, found 539.

[0141] 화합물 5 합성

[0142] 중간체 B 10g (1eq, 0.044mol)과 (3'-브로모비페닐-3-일)트리페닐실란((3'-bromobiphenyl-3-yl)triphenylsilane) 21.62g (1.1eq, 0.049mol)을 각각 플라스크에 넣고, 1200ml의 톨루엔과 용해시켰다. 여기에 Pd₂(dba)₃ 0.86g (0.02eq, 0.0008mmol), Na(t-bu)O 6.75g (1.2eq, 0.0528mol) 및 P(t-Bu)₃ 0.28g (0.08ea, 0.0035mmol)을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다. 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 최종 화합물 5을 21.14g (수율 = 75.8%)을 얻었다.

[0143] Elemental Analysis for C₄₄H₃₁NSSi : calcd C, 83.37; H, 4.93; N, 2.21; S, 5.06; Si, 4.43

[0144] HRMS for C₄₄H₃₁NSSi [M]⁺: calcd 633, found 632.

[0145] 화합물 8 합성

[0146] 중간체 B 10g (1eq, 0.044mol)과 2-(3'-브로모비페닐-3-일)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸(2-(3'-bromobiphenyl-3-yl)-1-phenyl-1H-benzo[d]imidazole) 20.84g (1.1eq, 0.049mol)을 각각 플라스크에 넣고, 1200ml의 톨루엔과 용해시켰다. 여기에 Pd₂(dba)₃ 0.86g (0.02eq, 0.0008mmol), Na(t-bu)O 6.75g (1.2eq, 0.0528mol) 및 P(t-Bu)₃ 0.28g (0.08ea, 0.0035mmol)을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다. 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 최종 화합물 8을 20.0g (수율 = 80.1%)을 얻었다.

[0147] Elemental Analysis for C₃₉H₂₅N₃S: calcd C, 82.51; H, 4.44; N, 7.40; S, 5.65

[0148] HRMS for C₃₉H₂₅N₃S [M]⁺: calcd 567, found 566.

[0149] 화합물 12 합성

[0150] 중간체 B 10g (1eq, 0.044mol)과 9-(3-(6-브로모피리딘-2-일)페닐)-9H-카바졸 (9-(3-(6-bromopyridin-2-yl)phenyl)-9H-carbazole) 17.56g (1.1eq, 0.049mol)을 각각 플라스크에 넣고, 1200ml의 톨루엔과 용해시켰다. 여기에 Pd₂(dba)₃ 0.86g (0.02eq, 0.0008mmol), Na(t-bu)O 6.75g (1.2eq, 0.0528mol) 및 P(t-Bu)₃ 0.28g (0.08ea, 0.0035mmol)을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다. 반응이 종료된 반응용액을 Celite를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 최종 화합물 12을 18.49g (수율 = 77.6%)을 얻었다.

[0151] Elemental Analysis for C₃₇H₂₃N₃S: calcd C, 82.04; H, 4.28; N, 7.76; S, 5.92

[0152] HRMS for C₃₇H₂₃N₃S [M]⁺: calcd 541, found 540.

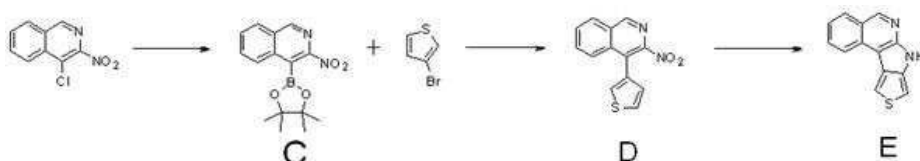
[0153] 화합물 16 합성

[0154] 중간체 B 10g (1eq, 0.044mol)과 2-브로모-6-(디벤조[b,d]티오펜-4-일)피리딘 (2-bromo-6-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)pyridine) 16.67g (1.1eq, 0.049mol)을 각각 플라스크에 넣고, 1200ml의 톨루엔과 용해시켰다. 여기에 Pd₂(dba)₃ 0.86g (0.02eq, 0.0008mmol), Na(t-bu)O 6.75g (1.2eq, 0.0528mol) 및 P(t-Bu)₃ 0.28g (0.08eq, 0.0035mmol)을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다. 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 최종 화합물 16을 15.86g (수율 = 74.7%)을 얻었다.

[0155] Elemental Analysis for C₃₁H₁₈N₂S₂: calcd C, 77.15; H, 3.76; N, 5.80; S, 13.29

[0156] HRMS for C₃₁H₁₈N₂S₂ [M]⁺: calcd 482, found 481.

[0157] 하기 반응 메커니즘에 의해 중간체 C, D 및 E를 합성하였다:



[0158]

[0159] 중간체 C 합성

[0160] 4-클로로-3-니트로이소퀴놀린 (4-chloro-3-nitroisoquinoline) 50g (1eq, 0.239mol), Pd(dppf)Cl₂ 4.2 g, Bis(pinacolate)diboron 64.2g (1.2eq, 0.287mol) 및 포타슘 아세테이트 38.8g (4eq 0.95mol)을 1,4-다이옥산(dioxane) 500ml에 용해시켰다. 반응물을 6시간 동안 환류 교반 한 후, 디클로로 메탄과 증류수로 3회 추출하였다. 컬럼 크로마토 그래피 (Hex: EA = 9: 1 (v: v))로 정제하여 중간체 C 57.3g (수율= 86%)을 얻었다.

[0161] ¹H NMR: 8.56 (d, 1H), 7.81 (d, 1H) 7.55 (m, 5H), 7.30 (m, 3H), 7.28 (t, 1H), 7.21(m, 2H), 1.26 (s, 12H)

[0162] 중간체 D 합성

[0163] 중간체 C 20g (1eq, 0.066mol) 및 3-브로모티오펜(3-bromothiophene) 13g (1.2eq, 0.0799mol)를 플라스크에 넣고 Pd(PPh₃)₄ 1.52g (0.02eq, 0.0013mol)를 첨가하였다. 톨루엔 400 ml 및 2M K₂CO₃ 포화용액 70ml를 첨가한 다음 5시간 동안 환류 교반하였다.

[0164] 반응이 종결된 후 MC 400ml와 증류수 150ml로 세척 및 추출한 다음, 용매를 제거한 후 생성된 고체를 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 원하는 중간체 D 14.2g (수율 84.5%)를 수득하였다.

[0165] ¹H NMR: 7.22(d, 1H), 7.78 (m, 3H), 8.12(m, 3H), 9.07 (s, 1H)

[0166] 중간체 E 합성

[0167] 중간체 D 30g (1eq, 0.117mol), SnCl₂ 2H₂O 150g (0.1mol), 아세트산 800mL 및 1N HCl 80mL를 넣고 80℃에서 밤새 교반하였다. 반응용매를 감압증류한 후, THF와 EA에 반응 혼합물을 녹이고, NaHCO₃수용액과 브린(brine)으로 씻어주었다. 무수의 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. MeOH로 재결정하여 중간체 B 9.45g (수율 36%)을 얻었다.

[0168] ¹H NMR : 7.27(s, 2H), 7.67 (m, 5H), 8.91(d, 1H)

[0169] **화합물 19 합성**

[0170] 중간체 E 10g (1eq, 0.044mol)과 9-(3'-브로모비페닐-4-일)-9H-카바졸 (9-(3'-bromobiphenyl-4-yl)-9H-carbazole) 17.75g (1.1eq, 0.049mol)을 각각 플라스크에 넣고, 900ml의 톨루엔과 용해시켰다. 여기에 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.86g (0.02eq, 0.0008mmol), $\text{Na}(\text{t-bu})\text{O}$ 6.75g (1.2eq, 0.0528mol) 및 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ 0.28g (0.08ea, 0.0035mmol)을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다. 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 최종 화합물 19를 19.7g (수율 = 82.8%)을 얻었다.

[0171] Elemental Analysis for $\text{C}_{37}\text{H}_{23}\text{N}_3\text{S}$: calcd C, 82.04; H, 4.28; N, 7.76; S, 5.92

[0172] HRMS for $\text{C}_{37}\text{H}_{23}\text{N}_3\text{S}$ $[\text{M}]^+$: calcd 541, found 540.

[0173] **화합물 24 합성**

[0174] 중간체 E 10g (1eq, 0.044mol)과 2-(3'-브로모비페닐-3-일)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸 (2-(3'-bromobiphenyl-3-yl)-1-phenyl-1H-benzo[d]imidazole) 20.8g (1.1eq, 0.049mol)을 각각 플라스크에 넣고, 900ml의 톨루엔과 용해시켰다. 여기에 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.86g (0.02eq, 0.0008mmol), $\text{Na}(\text{t-bu})\text{O}$ 6.75g (1.2eq, 0.0528mol) 및 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ 0.28g (0.08ea, 0.0035mmol)을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다. 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 최종 화합물 24를 21.9 g (수율 = 87.8%)을 얻었다.

[0175] Elemental Analysis for $\text{C}_{38}\text{H}_{24}\text{N}_4\text{S}$: calcd C, 80.26; H, 4.25; N, 9.85; S, 5.64

[0176] HRMS for $\text{C}_{38}\text{H}_{24}\text{N}_4\text{S}$ $[\text{M}]^+$: calcd 568, found 567.

[0177] **화합물 28 합성**

[0178] 중간체 E 10g (1eq, 0.044mol)과 9-(3-(6-브로모피리딘-2-일)페닐)-9H-카바졸 (9-(3-(6-bromopyridin-2-yl)phenyl)-9H-carbazole) 19.5g (1.1eq, 0.049mol)을 각각 플라스크에 넣고, 900ml의 톨루엔과 용해시켰다. 여기에 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.86g (0.02eq, 0.0008mmol), $\text{Na}(\text{t-bu})\text{O}$ 6.75g (1.2eq, 0.0528mol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ 0.28g (0.08ea, 0.0035mmol)을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다. 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 최종 화합물 28를 19.3g (수율 = 81.1%)을 얻었다.

[0179] Elemental Analysis for $\text{C}_{36}\text{H}_{22}\text{N}_4\text{S}$: calcd C, 79.68; H, 4.09; N, 10.32; S, 5.91

[0180] HRMS for $\text{C}_{36}\text{H}_{22}\text{N}_4\text{S}$ $[\text{M}]^+$: calcd 542, found 541.

[0181] **화합물 30 합성**

[0182] 중간체 E 10g (1eq, 0.044mol)과 2-브로모-6-(3-(트리페닐실릴)페닐)피리딘 (2-bromo-6-(3-(triphenylsilyl)phenyl)pyridine) 21.6g (1.1eq, 0.049mol)을 각각 플라스크에 넣고, 900ml의 톨루엔과 용해시켰다. 여기에 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.86g (0.02eq, 0.0008mmol), $\text{Na}(\text{t-bu})\text{O}$ 6.75g (1.2eq, 0.0528mol) 및 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ 0.28g (0.08ea, 0.0035mmol)을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다. 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 최종 화합물 30를 22.1g (수율 = 79.4%)을 얻었다.

[0183] Elemental Analysis for $\text{C}_{42}\text{H}_{29}\text{N}_3\text{SSi}$: calcd C, 79.33; H, 4.60; N, 6.61; S, 5.04; Si, 4.42

[0184] HRMS for $\text{C}_{42}\text{H}_{29}\text{N}_3\text{SSi}$ $[\text{M}]^+$: calcd 635, found 634.

[0185] **실시예 1**

[0186] 애노드로는 코닝(corning)사의 $15\Omega/\text{cm}^2$ (500Å) ITO 유리 기판을 $50\text{mm} \times 50\text{mm} \times 0.5\text{mm}$ 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각각 10분 동안 초음파 세정한 후 10분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세

정한 다음, 진공 증착 장치에 장착하였다.

[0187] 상기 유리 상부에 2-TNATA를 진공 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성한 다음, 상기 정공 주입층 상부에 NPB를 진공 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0188] 상기 정공 수송층 상부에 녹색 인광 도펀트로서 Ir(ppy)₃와 호스트로서 상기 화합물 1을 87:13의 중량비로 동시 증착함으로써 300Å 두께의 녹색 발광층을 형성하였다.

[0189] 이어서, 상기 발광층 상부에 Alq₃를 진공 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성하였다.

[0190] 상기 전자 수송층 상부에 Al를 진공 증착하여 1200Å 두께의 캐소드를 형성하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0191] 실시예 2

[0192] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 3을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0193] 실시예 3

[0194] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 5를 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0195] 실시예 4

[0196] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 8을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0197] 실시예 5

[0198] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 12를 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0199] 실시예 6

[0200] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 16을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0201] 실시예 7

[0202] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 19를 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0203] 실시예 8

[0204] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 24를 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0205] 실시예 9

[0206] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 28을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0207] **실시예 10**

[0208] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 30을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0209]

[0210] **비교예 1**

[0211] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 공지의 물질 CBP를 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0212] **평가예**

[0213] 실시예 1~10 및 비교예 1의 유기 발광 소자에 대하여, PR650(Spectroscan) Source Measurement Unit(PhotoResearch사 제품)을 이용하여 구동 전압, 발광 효율, 색좌표, 발광 휘도 및 수명을 평가하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0214]

구분	구동 전압(V)	발광효율(cd/A)	색좌표	발광휘도 (cd/m ²)	T95수명 (hr @100mA/cm ²)
실시예 1	3.6	70.5	(0.32, 0.62)	3,500	397
실시예 2	4.1	67.9	(0.32, 0.63)	3,500	332
실시예 3	4.5	67.7	(0.33, 0.62)	3,500	275
실시예 4	3.9	65.3	(0.34, 0.61)	3,500	259
실시예 5	3.7	68.7	(0.33, 0.62)	3,500	264
실시예 6	4.1	66.6	(0.31, 0.60)	3,500	247
실시예 7	3.8	72.4	(0.32, 0.60)	3,500	219
실시예 8	3.7	65.5	(0.32, 0.62)	3,500	337
실시예 9	3.7	60.7	(0.30, 0.62)	3,500	356
실시예 10	4.2	62.9	(0.31, 0.65)	3,500	287
비교예 1	5.1	51.2	(0.32, 0.62)	3,500	175

[0215] 상기 표 1을 참조하면, 실시예 1~10에 따른 유기 발광 소자는 비교예 1에 따른 유기 발광 소자에 비해 구동 전압이 낮아지고, 발광 효율이 향상되었으며, 수명이 크게 증가하였음을 알 수 있다.

[0216] 정량적으로 살펴보면, 실시예 1~10에 따른 유기 발광 소자는 비교예 1에 따른 유기 발광 소자에 비해 구동 전압이 약 20% 가량 낮아졌고 발광 효율은 약 20% 이상 상승하였다. 특히, 수명 특성에 있어서, 실시예 1~10에 따른 유기 발광 소자는 비교예 1에 따른 유기 발광 소자에 비해 T95 수명이 약 50% 이상 증가하였다. 이것은 실시예 1~10에 따른 유기 발광 소자에 사용된 상기 화학식 1로 표시되는 헥테로 화합물이 우수한 열적 안정성을 가진 것에서 기인한 것으로 볼 수 있다.

부호의 설명

[0217] 10: 유기 발광 소자

11: 기판

13: 제1전극

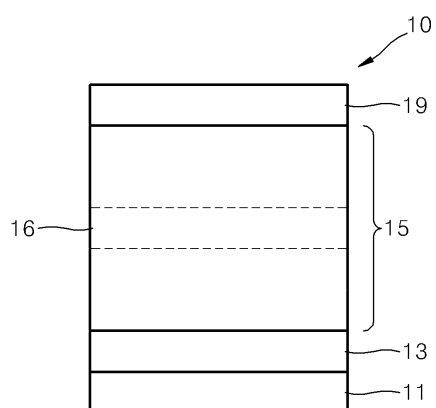
15: 유기층

16: 발광층

19: 제2전극

도면

도면1



专利名称(译)	杂环化合物和含有它的有机发光器件		
公开(公告)号	KR1020130091542A	公开(公告)日	2013-08-19
申请号	KR1020120012915	申请日	2012-02-08
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
[标]发明人	LEE JUNG SUB 이정섭 YANG SEUNG GAK 양승각		
发明人	이정섭 양승각		
IPC分类号	C09K11/06 C07D495/04 C07D209/82 H01L51/50		
CPC分类号	C07D495/04 C07D495/14 C07F7/0812 H01L51/0067 H01L51/0072 H01L51/0054 H01L51/0071 C07F7/10 H01L51/0085 H01L27/32 C07D471/14 H01L51/0081 H01L51/5016 H01L51/0049		
其他公开文献	KR101944917B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

提供由下式 (1) 表示的杂环化合物：$\text{Ar}^1\text{--X}_1\text{--X}_2\text{--X}_3\text{--X}_4\text{--Ar}^1\text{--L}_1\text{--a}$；在上式中，X₁，X₂，X₃，X₄，R₁至R₅，Ar₁，L₁和a是指本发明的详细描述。 专利文献10-2013-0091542

