



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2013-0128322
(43) 공개일자 2013년11월26일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 401/14 (2006.01) C07D 401/04 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2013-0051506
(22) 출원일자 2013년05월07일
심사청구일자 없음
(30) 우선권주장
1020120052086 2012년05월16일 대한민국(KR)

(71) 출원인
주식회사 엘지화학
서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)
(72) 발명자
이상빈
대전광역시 유성구 관평동 1342번지 디티비안 A동 316호
이동훈
대전광역시 중구 문화1동 센트럴파크3단지아파트 302동 2202호
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
정순성

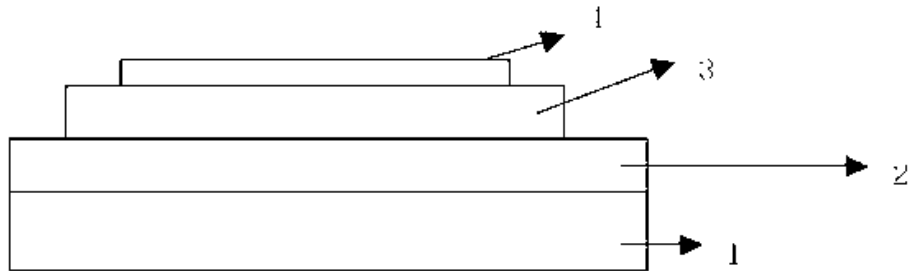
전체 청구항 수 : 총 14 항

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

(57) 요약

본 명세서는 유기 전자 소자의 수명, 효율, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성을 크게 향상시킬 수 있는 헤테로환 화합물 및 상기 헤테로환 화합물을 유기물층에 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

김공겸

대전광역시 유성구 도룡동 LG사원아파트 9동 302호

전상영

대전광역시 유성구 관평동 대덕테크노밸리10단지아파트 1002동 1102호

홍성길

대전광역시 유성구 도룡동 LG사원아파트 9동 204호

김성소

경기도 과주시 조리읍 동문그린씨티아파트 511동 902호

장분재

대전광역시 대덕구 범2동 선비마을1단지아파트 103동 1001호

김동식

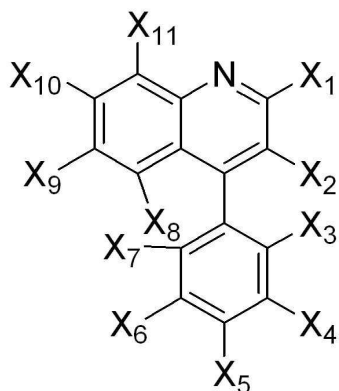
대전광역시 대덕구 범동 유원아파트 4동 601호

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1의 헤테로환 화합물:

[화학식 1]

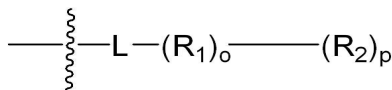


상기 화학식 1에 있어서,

X_1 내지 X_{11} 은 각각 독립적으로 수소; 중수소, 할로젠기, 니트로기, 니트릴기, 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기; 또는 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기이고,

X_1 내지 X_{11} 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되고,

[화학식 2]



상기 화학식 2에 있어서,

o 는 1 내지 6의 정수이고,

p 는 1 내지 6의 정수이며,

o 가 2 내지 6의 정수인 경우, R_1 은 서로 동일하거나 상이하고,

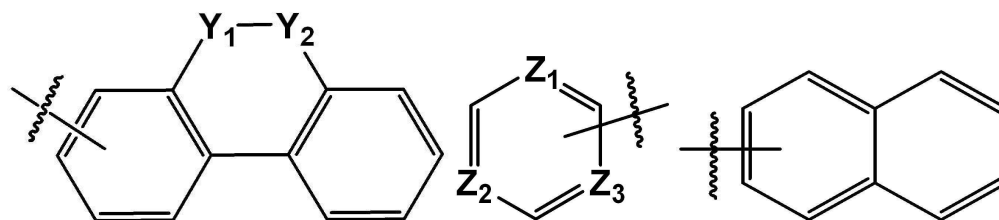
p 가 2 내지 6의 정수인 경우, R_2 는 서로 동일하거나 상이하며,

L 은 직접 결합; 또는 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된

시클로알킬기, O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 피리딜렌기이고,

R₁은 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 나프틸렌기; 또는 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기이며,

R₂는 하기 화학식 중 선택되고,



상기 화학식에 있어서,

Y₁ 및 Y₂는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로, 직접 결합; S; O; CR₁₀R₁₁이고,

Z₁ 내지 Z₃는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR₁₂; 또는 N이며,

Z₁ 내지 Z₃ 중 적어도 하나는 N이고,

R₁₀ 내지 R₁₂는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 니트로기; 니트릴기; 할로젠기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 알킬티오기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티오기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 인접하는 기와 이중결합을 형성하며,

상기 화학식은 수소; 중수소; 니트로기; 니트릴기; 할로젠기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된

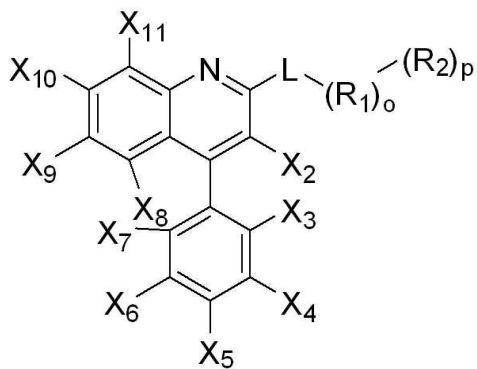
시클로알킬기; O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 알킬티오기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티오기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소가; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 추가로 치환될 수 있다.

청구항 2

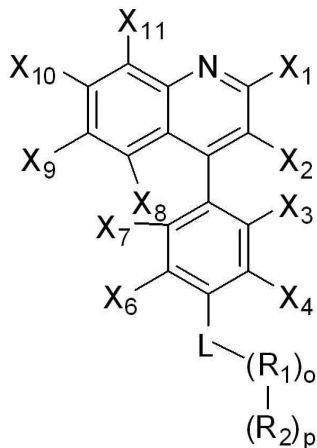
청구항 1에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물은 하기 화학식 3 내지 5 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 헤테로환 화합물:

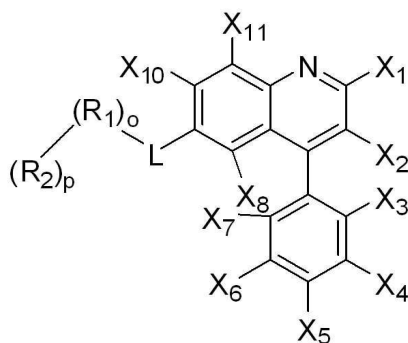
[화학식 3]



[화학식 4]



[화학식 5]



상기 화학식 3 내지 5에 있어서,

X_1 내지 X_{11} , L, R_1 , R_2 , o 및 p는 화학식 1 및 2에서 정의한 바와 같다.

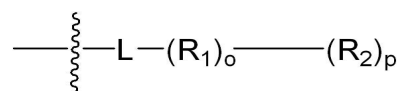
청구항 3

청구항 1에 있어서,

상기 X_1 내지 X_{11} 은 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기이고,

X_1 내지 X_{11} 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되고,

[화학식 2]



o, p, L, R_1 및 R_2 는 화학식 2에서 정의한 바와 동일한 헤테로환 화합물.

청구항 4

청구항 1에 있어서,

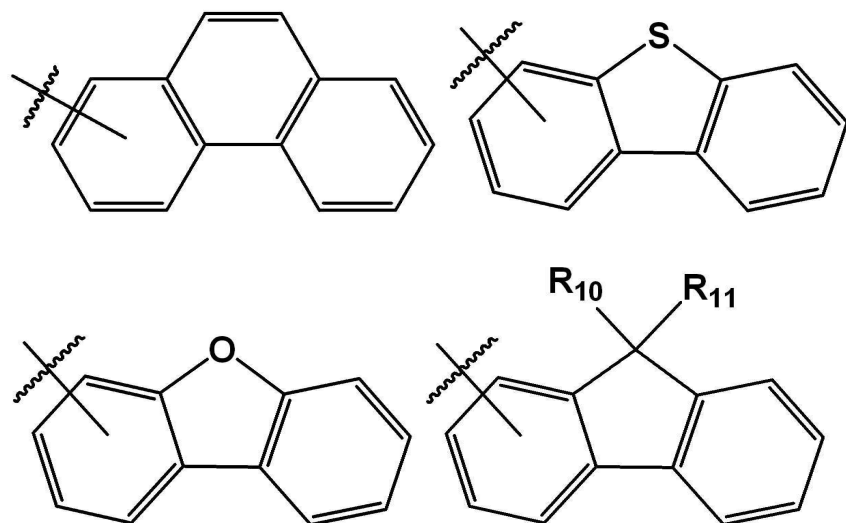
상기 X_1 내지 X_{11} 은 각각 독립적으로 수소; 나프틸기; 또는 피리딘기이고,

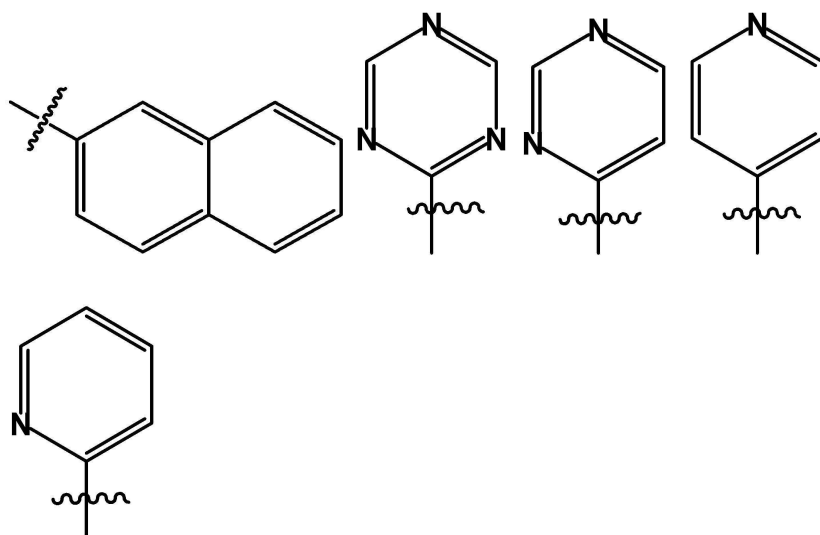
상기 나프틸기; 또는 피리딘기는 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 추가로 치환될 수 있는 헤테로환 화합물.

청구항 5

청구항 1에 있어서,

상기 R_2 는 하기 화학식 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로환 화합물:





상기 화학식에 있어서,

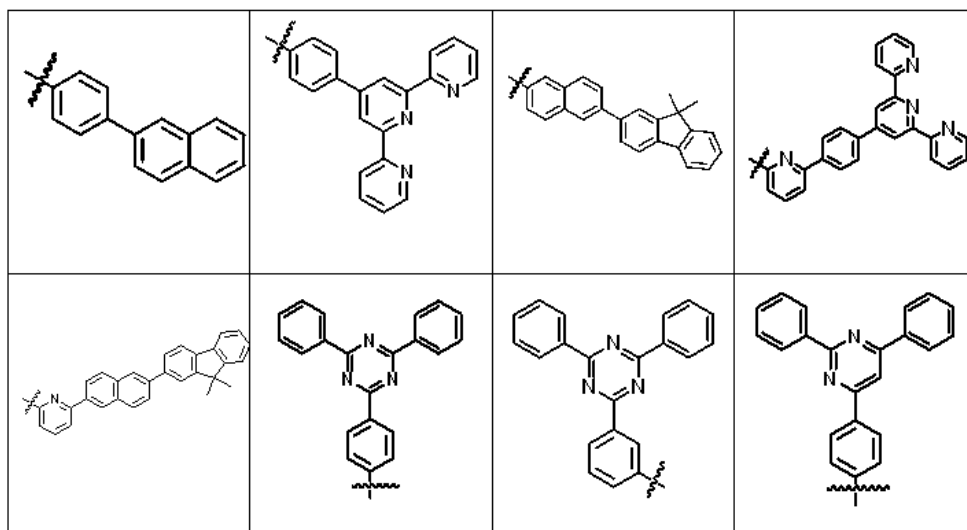
R_{10} 및 R_{11} 는 상기 화학식 2에서 정의한 바와 동일하고,

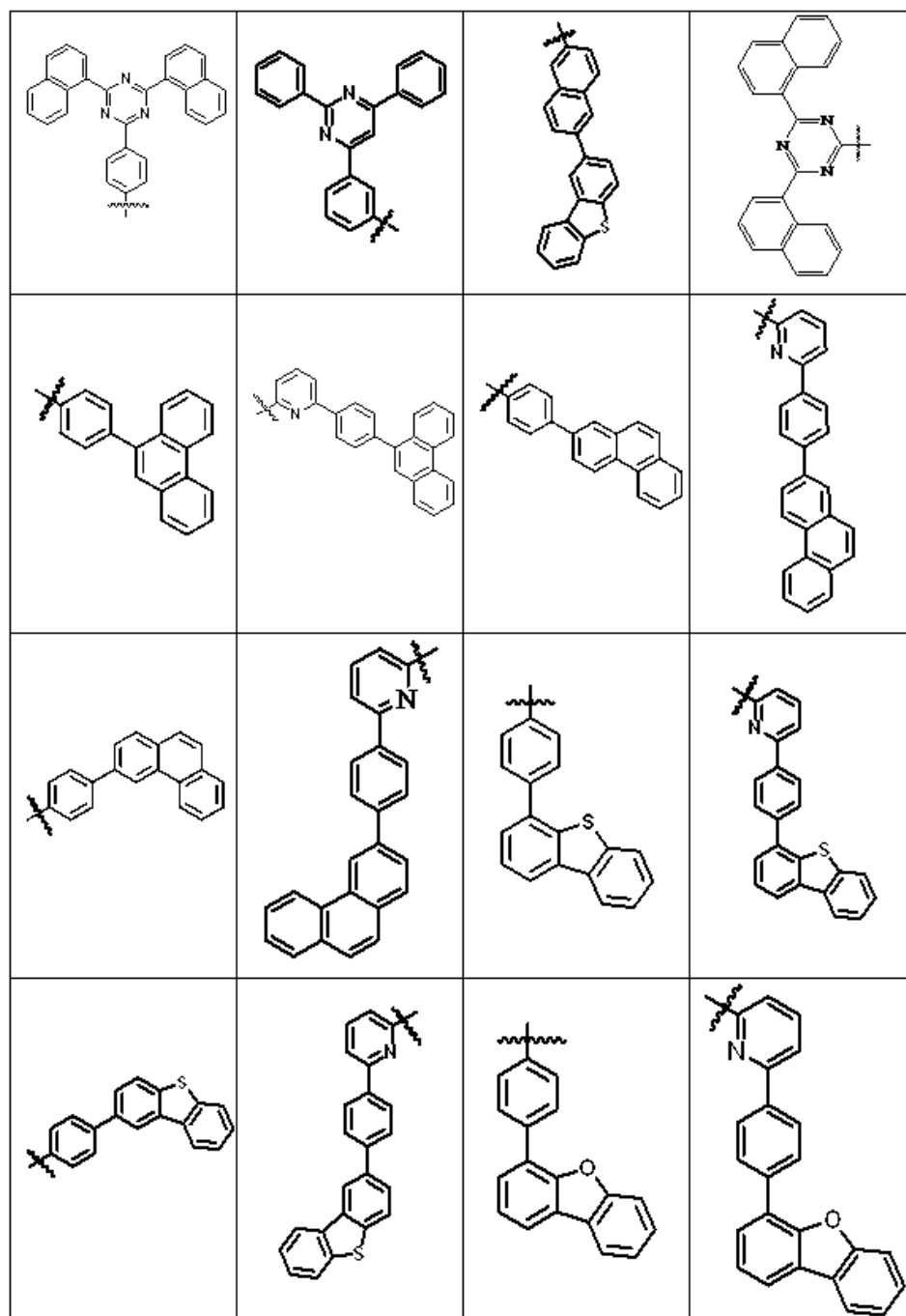
상기 화학식은 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 추가로 치환될 수 있다.

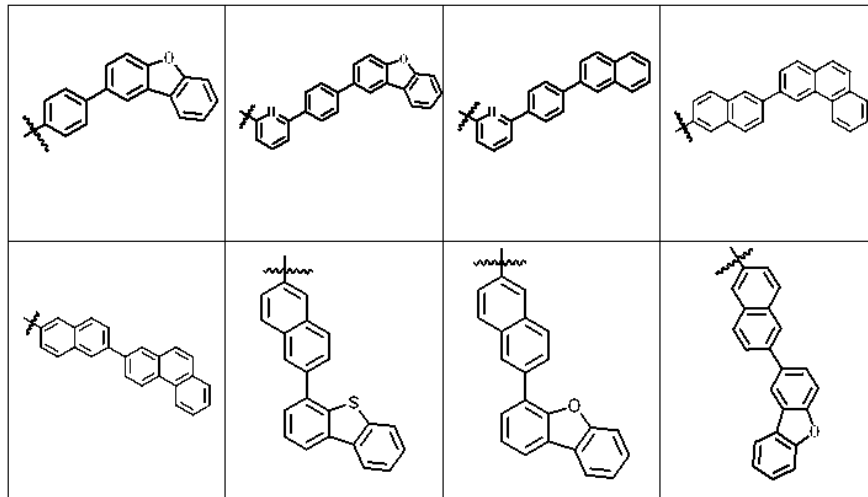
청구항 6

청구항 1에 있어서,

상기 화학식 2로 표시되는 화학식은 하기 화학식 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로환 화합물:



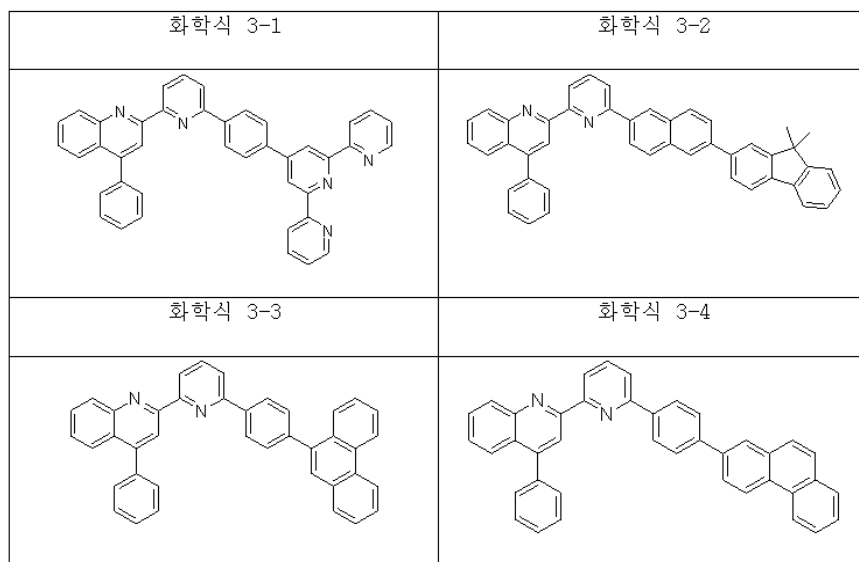


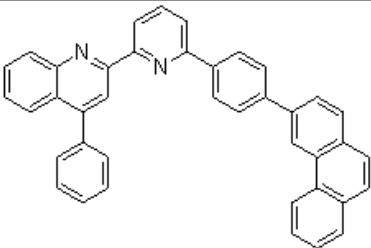
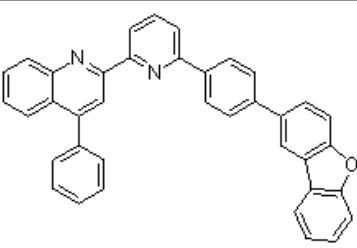
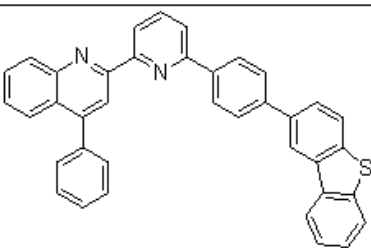
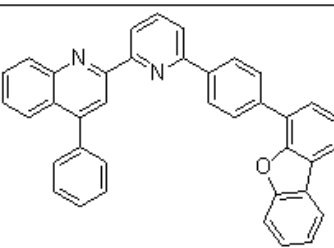
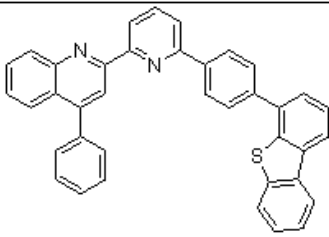
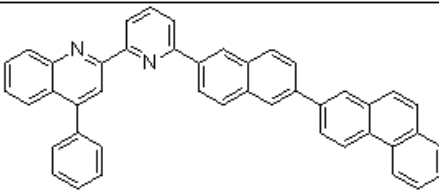
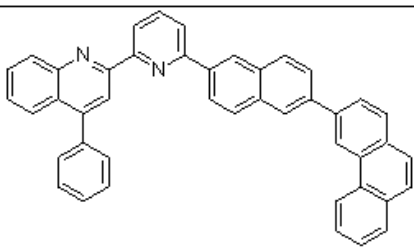
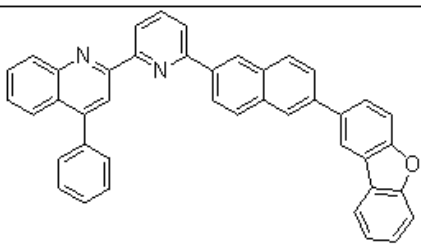


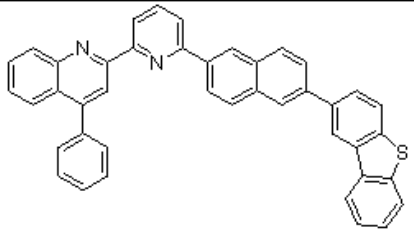
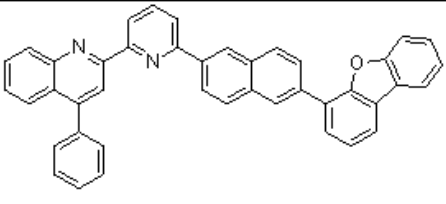
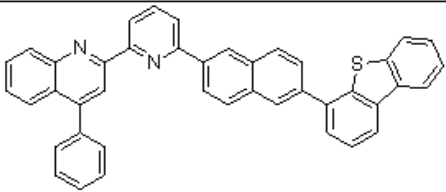
청구항 7

청구항 1에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물은 하기 화학식 3-1 내지 3-15 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로환 화합물:



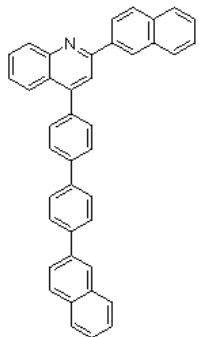
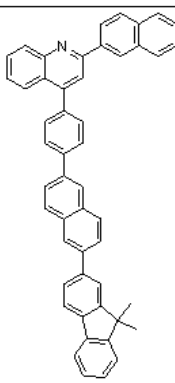
화학식 3-5	화학식 3-6
	
화학식 3-7	화학식 3-8
	
화학식 3-9	화학식 3-10
	
화학식 3-11	화학식 3-12
	

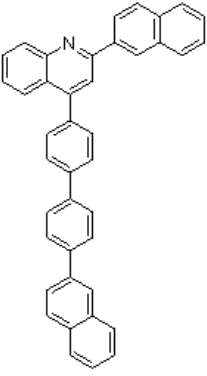
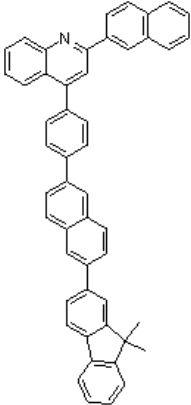
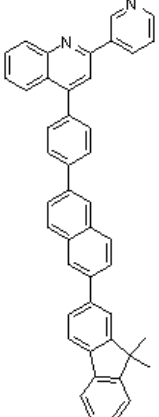
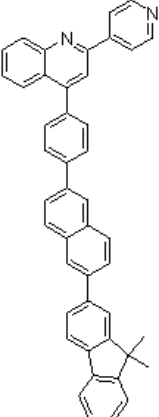
화학식 3-13	화학식 3-14
	
화학식 3-15	
	

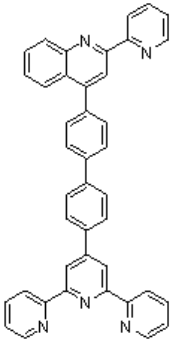
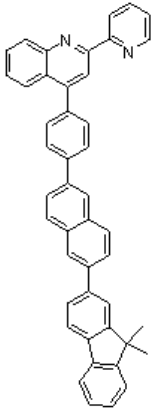
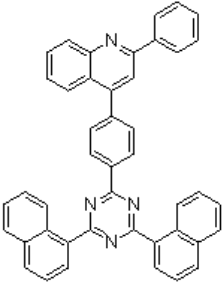
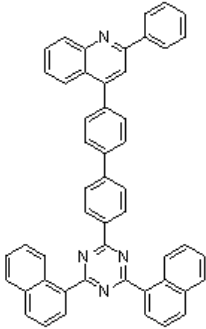
청구항 8

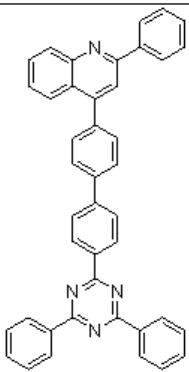
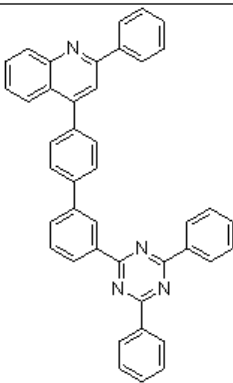
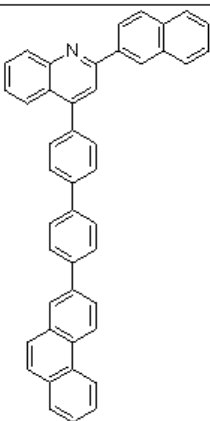
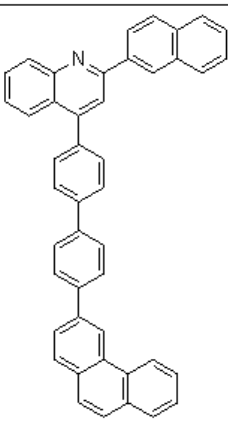
청구항 1에 있어서,

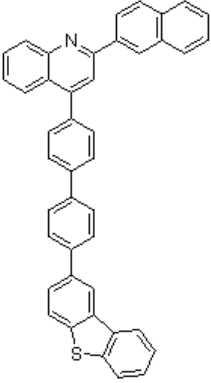
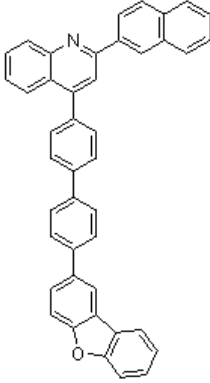
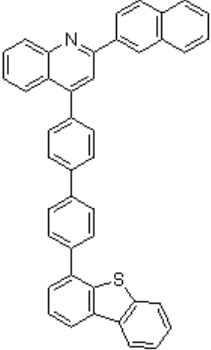
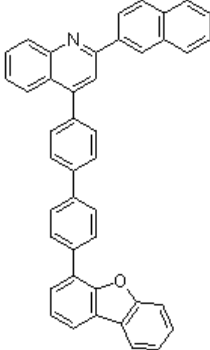
상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물은 하기 화학식 4-1 내지 4-30 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로환 화합물:

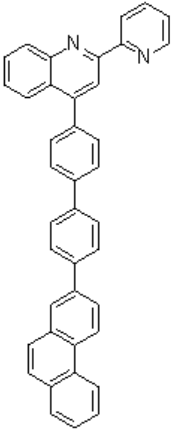
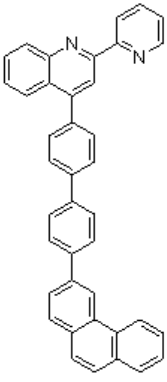
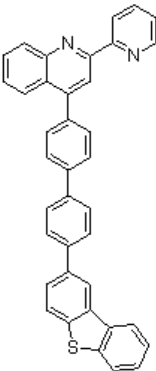
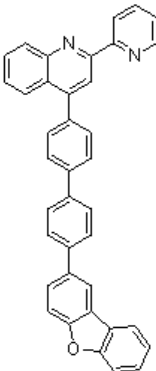
화학식 4-1	화학식 4-2
	

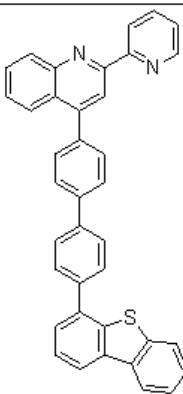
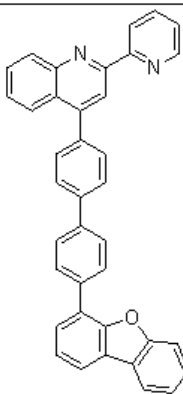
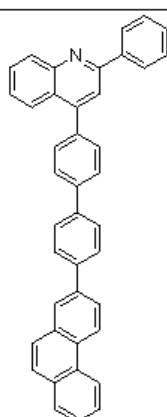
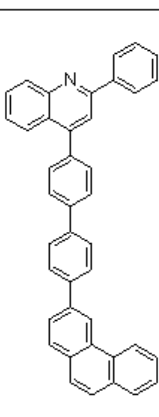
화학식 4-3	화학식 4-4
	
화학식 4-5	화학식 4-6
	

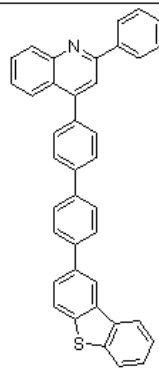
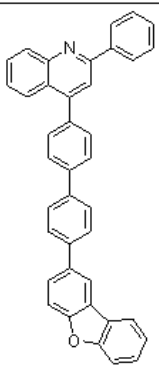
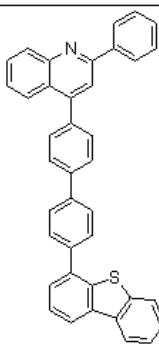
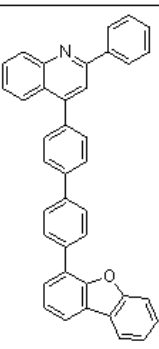
화학식 4-7	화학식 4-8
	
화학식 4-9	화학식 4-10
	

화학식 4-11	화학식 4-12
	
화학식 4-13	화학식 4-14
	

화학식 4-15	화학식 4-16
	
화학식 4-17	화학식 4-18
	

화학식 4-19	화학식 4-20
	
화학식 4-21	화학식 4-22
	

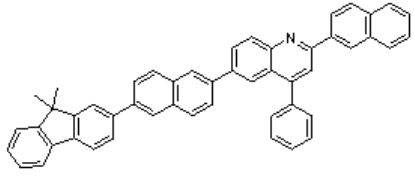
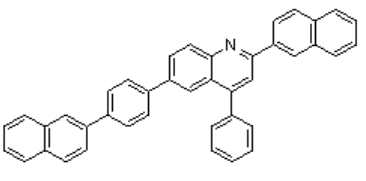
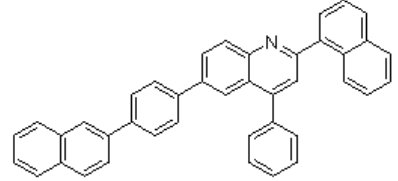
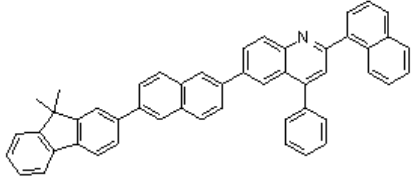
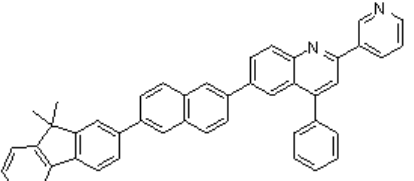
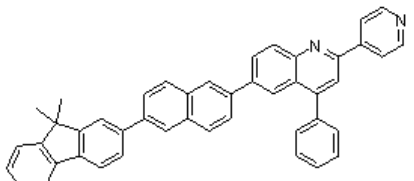
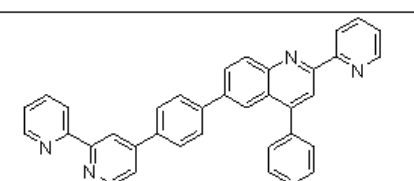
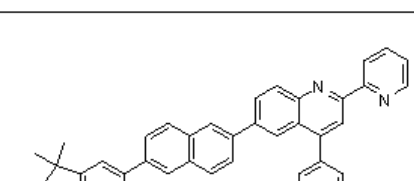
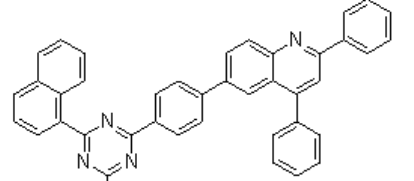
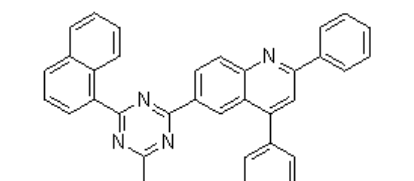
화학식 4-23	화학식 4-24
	
화학식 4-25	화학식 4-26
	

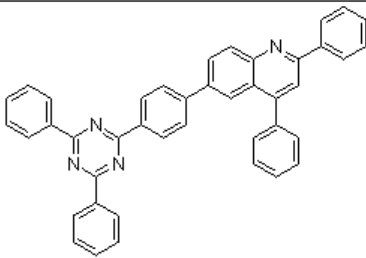
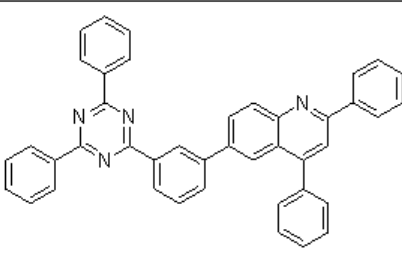
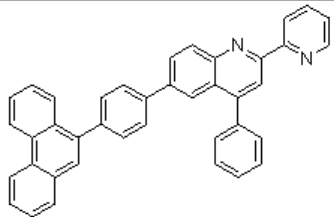
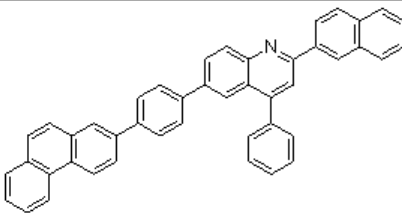
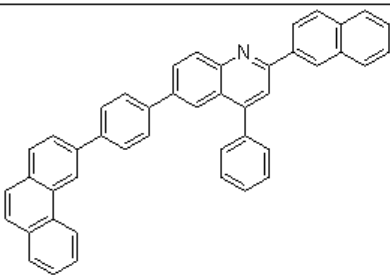
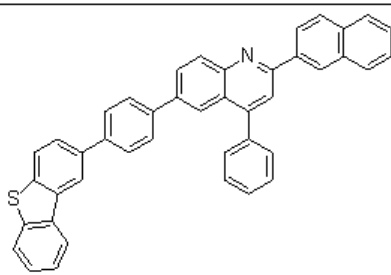
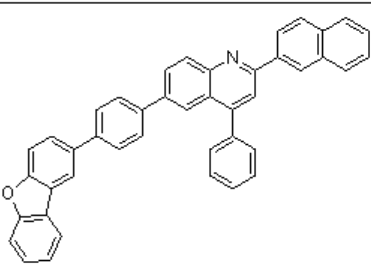
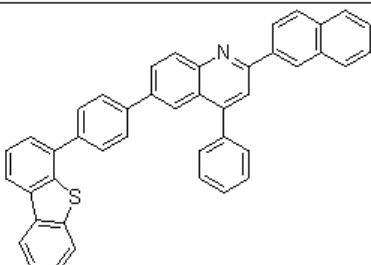
화학식 4-27	화학식 4-28
	
화학식 4-29	화학식 4-30
	

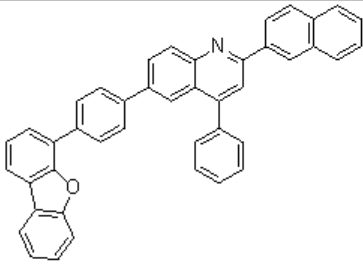
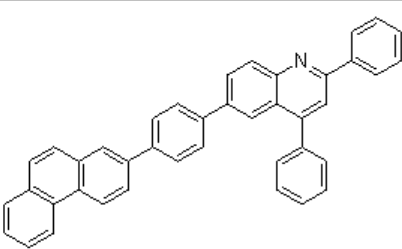
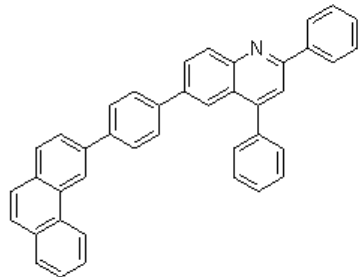
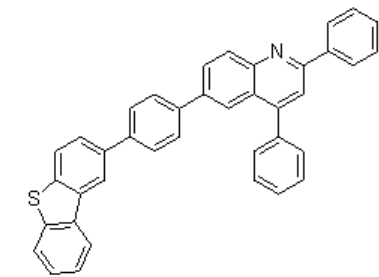
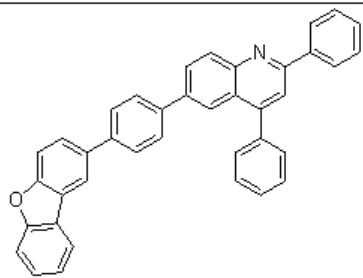
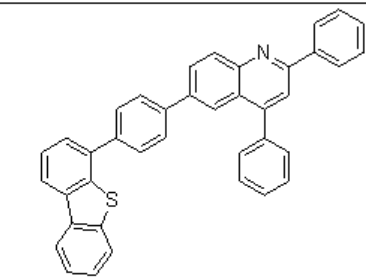
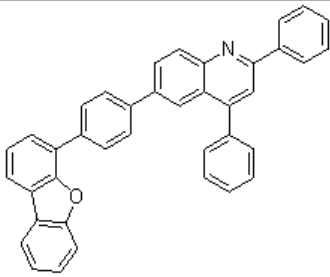
청구항 9

청구항 1에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물은 하기 화학식 5-1 내지 5-25 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 헤테로환 화합물:

화학식 5-1	화학식 5-2
	
화학식 5-3	화학식 5-4
	
화학식 5-5	화학식 5-6
	
화학식 5-7	화학식 5-8
	
화학식 5-9	화학식 5-10
	

화학식 5-11	화학식 5-12
	
화학식 5-13	화학식 5-14
	
화학식 5-15	화학식 5-16
	
화학식 5-17	화학식 5-18
	

화학식 5-19	화학식 5-20
	
화학식 5-21	화학식 5-22
	
화학식 5-23	화학식 5-24
	
화학식 5-25	
	

청구항 10

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 9 중 어느 한 항에 기재된 헤테로환 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 11

청구항 10에 있어서,

상기 유기물층은 정공 주입층 및 정공 수송층 중 적어도 한 층을 포함하고, 상기 정공 주입층 및 정공 수송층 중 적어도 한 층이 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 12

청구항 10에 있어서,

상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 13

청구항 12에 있어서,

상기 발광층은 상기 헤테로환 화합물을 인광 발광층 물질로 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 14

청구항 10에 있어서,

상기 유기물층은 전자 주입층 및 전자 수송층 중 적어도 한 층을 포함하고, 상기 전자 주입층 및 전자 수송층 중 적어도 한 층이 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

명세서

기술분야

- [0001] 본 명세서는 유기 발광 소자의 수명, 효율, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성을 크게 향상시킬 수 있는 신규한 헤테로환 화합물 및 상기 헤테로환 화합물이 유기물층에 함유되어 있는 유기 발광 소자에 관한 것이다.
- [0002] 본 명세서는 2012년 5월 16일에 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제 10-2012-0052086호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용은 전부 본 명세서에 포함된다.

배경기술

- [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 걸어 주게 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 때문

에 고효율 장수명의 유기 발광 소자 제조에 어려움이 있다.

[0008] 특히, 유기 발광 소자의 발광 효율을 높이기 위하여, 형광 발광이 아니라 인광 발광을 사용하는 방안이 검토되고 있다. 기존의 많은 소자가 형광 발광을 이용한 것이었지만, 삼중항 여기 상태에서부터의 인광 발광을 이용하면, 기존의 일중항 여기 상태에서부터의 인광 발광을 이용한 유기 발광 소자에 비하여 3배 정도의 발광 효율 향상이 기대된다.

[0009] 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.

[0010] 그러나, 기존의 인광 발광 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 점이 있으나, 유리 전이 온도(T_g)가 낮아서 열적 안정성이 낮으므로, 진공 하에서 고온 증착 공정을 거치는 경우, 물질이 변성되는 등의 단점을 가지고 있다. 기존의 BAlq나 CBP 등의 인광 호스트 물질을 사용하는 유기 발광 소자는 형광 발광 재료를 사용하는 유기 발광 소자에 비하여, 구동 전압이 높아서 전력 효율(lm/w)면에서 큰 이점이 없었다.

[0011] 따라서, 당 기술분야에서는 상기와 같은 요건을 갖춘 유기물의 개발이 요구되고 있다.

발명의 내용

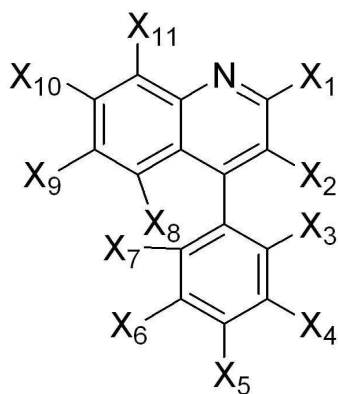
해결하려는 과제

[0012] 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 헤테로환 화합물 및 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0013] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 하기 화학식 1의 헤테로환 화합물을 제공한다.

[0014] [화학식 1]



[0015]

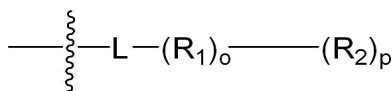
[0016] 상기 화학식 1에 있어서,

[0017] X₁ 내지 X₁₁은 각각 독립적으로 수소; 중수소, 할로젠기, 니트로기, 니트릴기, 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 탄소 수 6 내지 60의 아릴기; 또는 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는

비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기이고,

[0018] X_1 내지 X_{11} 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되고,

[0019] [화학식 2]



[0020]

[0021] 상기 화학식 2에 있어서,

[0022] o는 1 내지 6의 정수이고,

[0023] p는 1 내지 6의 정수이며,

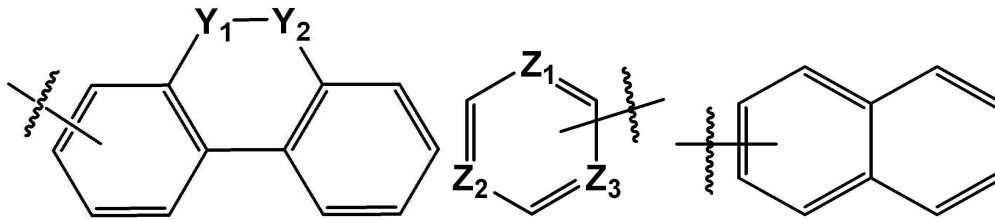
[0024] o이 2 내지 6의 정수인 경우, R_1 은 서로 동일하거나 상이하고,

[0025] p가 2 내지 6의 정수인 경우, R_2 는 서로 동일하거나 상이하며,

[0026] L은 직접 결합; 또는 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 피리딜렌기이고,

[0027] R_1 은 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 나프틸렌기; 또는 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기이며,

[0028] R_2 는 하기 화학식 중 선택되고,



[0029]

[0030] 상기 화학식에 있어서,

[0031] Y_1 및 Y_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로, 직접 결합; S; O; $CR_{10}R_{11}$ 이고,

[0032] Z_1 내지 Z_3 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR_{12} ; 또는 N이며,

[0033] Z_1 내지 Z_3 중 적어도 하나는 N이고,

[0034] R_{10} 내지 R_{12} 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 니트로기; 니트릴기; 할로젠기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 알킬티오기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티오기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 인접하는 기와 이중결합을 형성하며,

[0035] 상기 화학식은 수소; 중수소; 니트로기; 니트릴기; 할로젠기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 알킬티오기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티오기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 추가로 치환될 수 있다.

[0036] 또한, 본 명세서는 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 1의 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

[0037] 본 발명의 화합물은 유기 발광 소자에서 유기물층 물질, 예컨대 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 발광 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등에 사용될 수 있으며, 특히 본 발명의 화합물을 전자 수송 물질 또는 인광 발광 물질로 유기 발광 소자에 사용하는 경우 소자의 구동전압을 낮추고, 광효율을 향상시키며, 화합물의 열적 안정성에 의하여 소자의 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0038] 도 1은 기관(1), 제1 전극(2), 발광층(3) 및 제2 전극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

도 2는 기관(1), 제1 전극(2), 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(3), 전자 수송층(8) 및 제2 전극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0039] 이하에서 본 명세서에 대하여 상세히 설명한다.



[0040] 본 명세서에 있어서,  는 다른 치환기 또는 결합부에 결합되는 부위를 의미한다.

[0041] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 제공한다.

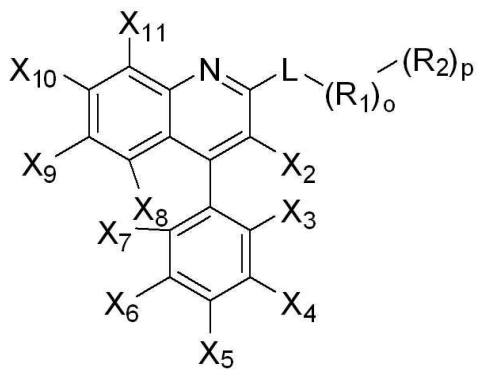
[0042] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 은 상기 화학식 2이다.

[0043] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_5 는 상기 화학식 2이다.

[0044] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_9 는 상기 화학식 2이다.

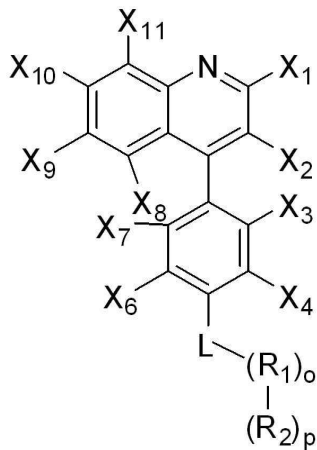
[0045] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환화합물은 하기 화학식 3 내지 5 중 어느 하나로 표시된다.

[0046] [화학식 3]



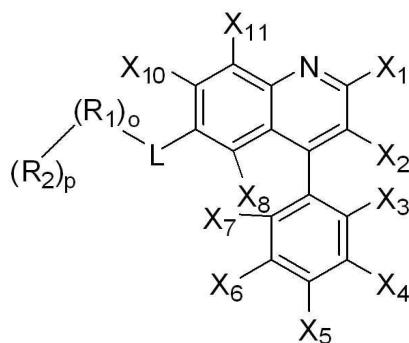
[0047]

[0048] [화학식 4]



[0049]

[0050] [화학식 5]



[0051]

[0052] 상기 화학식 3 내지 5에 있어서,

[0053] X_1 내지 X_{11} , L, R_1 , R_2 , o 및 p는 화학식 1 및 2에서 정의한 바와 같다.

[0054] 상기 치환기들의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0055] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 수소; 중수소; 니트로기; 니트릴기; 할로젠기; 알킬기; 시클로알킬기; O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 헤테로시클로알킬기; 알콕시기; 알킬티오기; 아릴옥시기; 아릴티오기; 알케닐기; 시클로알케닐기; 실릴기; 붕소기; 플루오레닐기; 아릴아민기; 아릴기; 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되었거나 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다.

[0056] 본 명세서에 있어서, 할로젠기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.

[0057] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 50인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, n-프로필, 이소프로필, 부틸, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, sec-부틸, 1-메틸-부틸, 1-에틸-부틸, 펜틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, 헥실, n-헥실, 1-메틸헥틸, 2-메틸헥틸, 4-메틸-2-헥틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 1-메틸헵틸, 시클로헵틸메틸, 시클로헵틸메틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헵틸, 2-프로필헵틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸-프로필, 1,1-디메틸-프로필, 이소헵틸, 2-메틸헵틸, 4-메틸헵틸, 5-메틸헵틸 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0058] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 구체적으로 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 3-메틸시클로펜틸, 2,3-디메틸시클로펜틸, 시클로헥실, 3-메틸시클로헥실, 4-메틸시클로헥실, 2,3-디메틸시클로헥실, 3,4,5-트리메틸시클로헥실, 4-tert-부틸시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0059] 본 명세서에 있어서, 상기 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 20인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, i-프로필옥시, n-부톡시, 이소부톡시, tert-부톡시, sec-부톡시, n-펜틸옥시, 네오펜틸옥시, 이소펜틸옥시, n-헥실옥시, 3,3-디메틸부틸옥시, 2-에틸부틸옥시, n-옥틸옥시, n-노닐옥시, n-데실옥시, 벤질옥시, p-메틸벤질옥시 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0060] 본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 비닐, 1-프로페닐, 이소프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-펜테닐, 2-펜테닐, 3-펜테닐, 3-메틸-1-부테닐, 1,3-부타디에닐, 알릴, 1-페닐비닐-1-일, 2-페닐비닐-1-일, 2,2-디페닐비닐-1-일, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일, 스티베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.

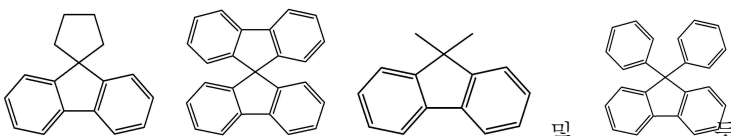
[0061] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있으며, 탄소수 1 내지 25의 알킬기 또는 탄소수 1 내지 25의 알콕시기가 치환되는 경우를 포함한다. 또한, 본 명세서 내에서의 아릴기는 방향족고리를 의미할 수 있다.

[0062] 상기 아릴기가 단환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 6 내지 25인 것이 바람직하다. 구체적으로 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0063] 상기 아릴기가 다환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 10 내지 24인 것이 바람직하다. 구체적으로 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트릴기, 페난트릴기, 파이레닐기, 페틸레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0064] 본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 2개의 고리 유기화합물이 1개의 원자를 통하여 연결된 구조이다.

[0065] 상기 플루오레닐기는 열린 플루오레닐기의 구조를 포함하며, 여기서 열린 플루오레닐기는 2개의 고리 유기화합물이 1개의 원자를 통하여 연결된 구조에서 한쪽 고리 화합물의 연결이 끊어진 상태의 구조이다.

[0066] 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우,  등이 될 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0067] 본 명세서에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

[0068] 본 명세서에 있어서, 아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노아릴아민기, 치환 또는 비치환된 디아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리아릴아민기가 있다. 상기 아릴아민기 중의 아릴기는 단환식 아릴기일 수 있고, 다환식 아릴기일 수 있다. 상기 아릴기가 2 이상을 포함하는 아릴아민기는 단환식 아릴기, 다환식 아릴기, 또는 단환식아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다.

[0069] 아릴 아민기의 구체적인 예로는 페닐아민, 나프틸아민, 비페닐아민, 안트라세닐아민, 3-메틸-페닐아민, 4-메틸-나프틸아민, 2-메틸-비페닐아민, 9-메틸-안트라세닐아민, 디페닐 아민기, 페닐 나프틸 아민기, 디톨릴 아민기, 페닐 톨릴 아민기, 카바졸 및 트리페닐 아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0070] 본 명세서에 있어서, 헤테로 고리기는 이종원자로 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하며, 헤테로시클로알킬기 및 헤테로아릴기가 있다.

[0071] 상기 헤테로고리기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 헤테로 고리기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딘기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴놀라지닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난쓰롤린기(phenanthroline), 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0072] 본 명세서에 있어서, 아릴옥시기, 아릴티오기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 구체적으로 아릴옥시기로는 페녹시, p-토릴옥시, m-토릴옥시, 3,5-디메틸-페녹시, 2,4,6-트리메틸페녹시, p-tert-부틸페녹시, 3-비페닐옥시, 4-비페닐옥시, 1-나프틸옥시, 2-나프틸옥시, 4-메틸-1-나프틸옥시, 5-메틸-2-나프틸옥시, 1-안트릴옥시, 2-안트릴옥시, 9-안트릴옥시, 1-페난트릴옥시, 3-페난트릴옥시, 9-페난트릴옥시 등이 있고, 아릴티옥시기로는 페닐티옥시기, 2-메틸페닐티옥시기, 4-tert-부틸페닐티옥시기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

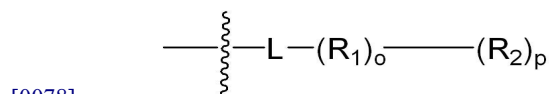
[0073] 본 명세서에 있어서, 알킬티오기 중의 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 구체적으로 알킬티옥시기로는 메틸티옥시기, 에틸티옥시기, tert-부틸티옥시기, 헥실티옥시기, 옥틸티옥시기 등이 있고, 알킬술포시기로는 메실, 에틸술포시기, 프로필술포시기, 부틸술포시기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0074] 본 명세서에 있어서, 상기 피리딘렌기; 페닐렌기; 트리아지닐렌기 및 나프틸렌기는 각각 피리딘기; 페닐기; 트라이진기; 나프틸기의 2가기로서, 2가기라면 어떠한 위치에 치환될 수 있다.

[0075] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 내지 X_{11} 은 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기이고,

[0076] X_1 내지 X_{11} 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되고,

[0077] [화학식 2]



[0079] o, p, L, R_1 및 R_2 는 화학식 2에서 정의한 바와 동일하다.

[0080] 상기 화학식 1의 X_1 내지 X_{11} , L, R_1 및 R_2 에 추가적으로 치환될 수 있는 치환기로는 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 실릴기, 아릴알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 카바졸기, 아릴아민기, 아릴기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 니트릴기 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[0081] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 내지 X_{11} 은 각각 독립적으로 수소; 나프틸기; 또는 피리딘기이고, 상기 나프틸기; 또는 피리딘기는 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 추가로 치환될 수 있다.

[0082] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y_1 은 $CR_{10}R_{11}$ 이다.

[0083] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y_1 은 S이다.

[0084] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y_1 은 O이다.

[0085] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y_1 은 직접결합이다.

[0086] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y_2 는 $CR_{10}R_{11}$ 이다.

[0087] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y_2 는 S이다.

[0088] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y_2 는 O이다.

[0089] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y_2 는 직접결합이다.

[0090] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y_1 및 Y_2 는 $CR_{10}R_{11}$ 이고, 상기 Y_1 및 Y_2 의 R_{10} 및 R_{11} 중 적어도 하나는 Y_1 과 Y_2 와 이중결합을 형성한다.

[0091] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y_1 및 Y_2 중 적어도 하나는 직접 결합이고, 나머지 다른 하나는 $CR_{10}R_{11}$, S 또는 O이다.

[0092] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y_1 및 Y_2 중 적어도 하나는 직접 결합이고, 나머지 다른 하나는 $CR_{10}R_{11}$, S 또는 O이고, 상기 R_{10} 및 R_{11} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기이다.

[0093] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 , Z_2 및 Z_3 는 N이다.

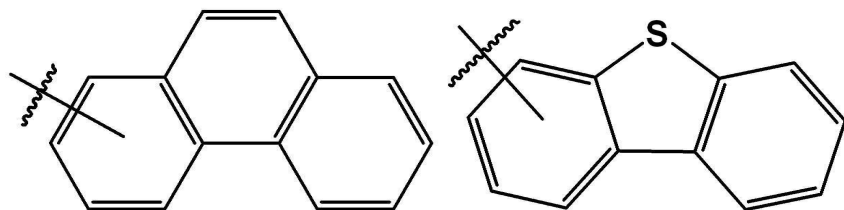
[0094] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 및 Z_2 는 N이고, Z_3 는 CR_{12} 이다.

[0095] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_2 및 Z_3 는 N이고, Z_1 는 CR_{12} 이다.

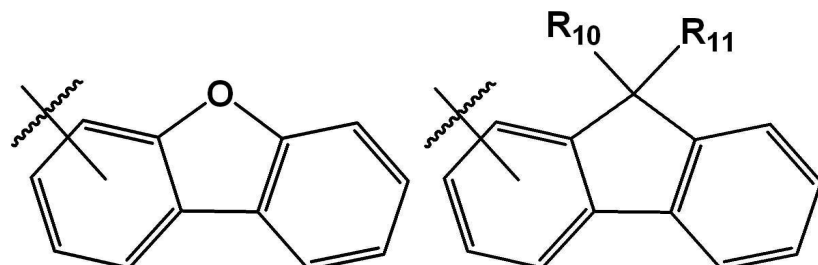
[0096] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 은 N이고, Z_2 및 Z_3 는 각각 CR_{12} 이다.

[0097] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_2 는 N이고, Z_1 및 Z_3 는 각각 CR_{12} 이다.

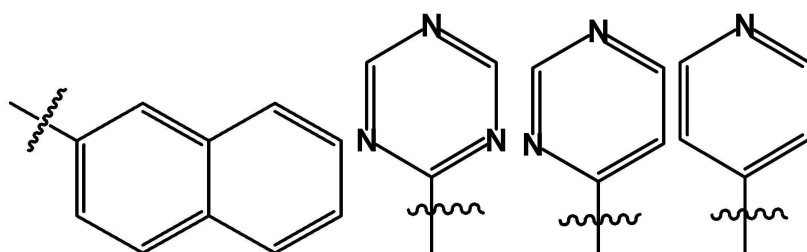
[0098] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R_2 는 하기 화학식 중 어느 하나이다.



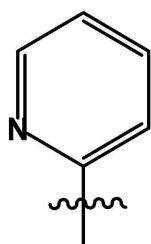
[0099]



[0100]



[0101]



[0102]

[0103] 상기 화학식에 있어서, R_{10} 및 R_{11} 는 상기 화학식 2에서 정의한 바와 동일하고, 상기 화학식은 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 추가로 치환될 수 있다.

[0104] 상기 화학식 1 내지 5에 있어서, R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 15의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 10의 헤테로아릴기가 바람직하며, 페닐기, 나프틸기, 9,9-다이메틸-플루오렌기, 2-피리딜기, 4-피리딜기가 더욱 바람직하나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[0105] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, o는 1 내지 6의 정수이다.

[0106] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, o는 1이다.

[0107] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, o는 2이다.

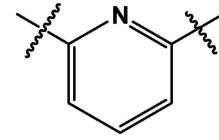
[0108] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, p는 1 내지 6의 정수이다.

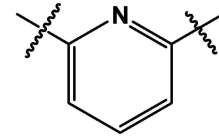
[0109] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, p는 1이다.

[0110] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, p는 2이다.

[0111] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 직접결합이다.

[0112] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 피리딜렌기이다.

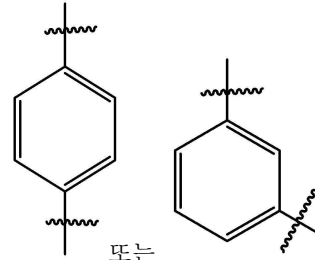


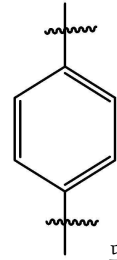
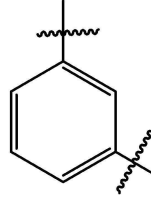
[0113] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 피리딜렌기이고, 구체적으로  이다. 상기



중 적어도 하나는 R_1 과 연결되고, 나머지 하나는 화학식 1과 연결된다.

[0114] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R_1 은 페닐렌기이다.

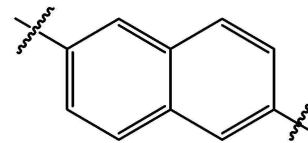


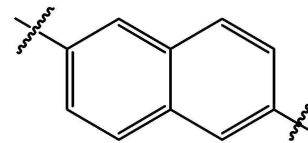
[0115] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R_1 은 페닐렌기이고, 구체적으로  또는 이며,



중 적어도 하나는 L 또는 화학식 1과 연결되고, 나머지 하나는 R_2 와 연결된다.

[0116] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R_1 은 나프틸렌기이다.

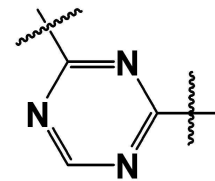


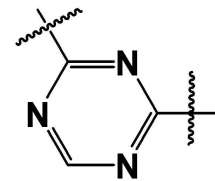
[0117] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R_1 은 나프틸렌기이고, 구체적으로 이며,



중 적어도 하나는 L 또는 화학식 1과 연결되고, 나머지 하나는 R_2 와 연결된다.

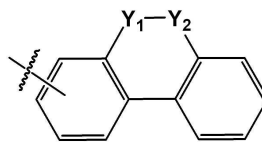
[0118] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R_1 은 트라이지닐렌기이다.

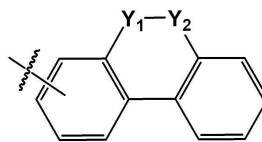


[0119] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R_1 은 트라이지닐렌기이고, 구체적으로 이며,



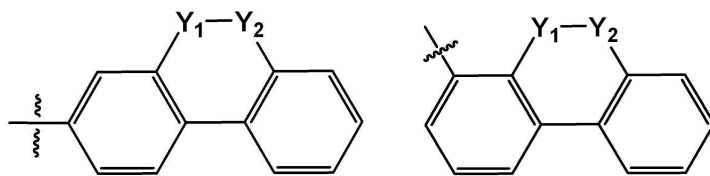
중 적어도 하나는 L 또는 화학식 1과 연결되고, 나머지 하나는 R_2 와 연결된다.



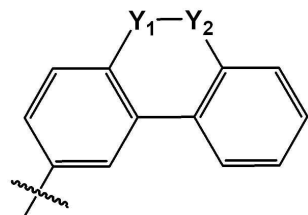
[0120] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R_2 는  이다. 상기 화학식의 R_2 의 벤젠고리와 R_1 이 연결된다. 상기와 같은 벤젠 고리에 R_1 이 연결되는 경우, Y_1 또는 Y_2 에 R_1 이 연결되는 경우보다, 전자 주개의 효과가 더 크게 되어, 발광층에 전자 주입 및 전달의 효율을 높일 수 있다. 이로 인하여 전압 및 효율 면에서 더 우수한 특성을 가질 수 있다.

[0121]

구체적으로 상기 화학식의 R_2 는



또는



이다. 상기 Y_1 및 Y_2 는 상기에서 정의한 바와 동일하다.

[0122]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R_2 는 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 추가로 치환된다.

[0123]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R_2 는 수소; 알킬기; 피리딘기; 페닐기 또는 나프틸기로 추가로 치환된다.

[0124]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 , Z_2 및 Z_3 중 적어도 하나는 N이다. 상기와 같이 구조 내에 N을 적어도 하나 포함함으로써, 전자 주개의 효과가 더 크게 되어 전자 수송 및 전달 효율을 높일 수 있다.

[0125]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 , Z_2 및 Z_3 는 N이고, 상기 R_2 는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 추가로 치환된다.

[0126]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 , Z_2 및 Z_3 는 N이고, 상기 R_2 는 피리딘기로 추가로 치환된다.

[0127]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 , Z_2 및 Z_3 는 N이고, 상기 R_2 는 치환 또는 비치환된 아릴기로 추가로 치환된다.

[0128]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 , Z_2 및 Z_3 는 N이고, 상기 R_2 는 페닐기로 추가로 치환된다.

[0129]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 , Z_2 및 Z_3 는 N이고, 상기 R_2 는 나프틸기로 추가로 치환된다.

[0130]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 및 Z_2 는 N이고, Z_3 는 CR_{12} 이며, R_{12} 는 수소이다.

[0131]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 및 Z_2 는 N이고, Z_3 는 CR_{12} 이며, R_{12} 는 수소이며, 상기 R_2 는 치환 또는 비치환된 아릴기로 추가로 치환된다.

[0132]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 및 Z_2 는 N이고, Z_3 는 CR_{12} 이며, R_{12} 는 수소이며, 상기 R_2 는 페닐기로 추가로 치환된다.

[0133]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_2 및 Z_3 는 N이고, Z_1 는 CR_{12} 이다.

[0134]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 은 N이고, Z_2 및 Z_3 는 각각 CR_{12} 이다.

[0135]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 은 N이고, Z_2 및 Z_3 는 각각 CR_{12} 이며, R_{12} 는 수소이다.

[0136]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 은 N이고, Z_2 및 Z_3 는 각각 CR_{12} 이며, R_{12} 는 수소이고, 상기 R_2 는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 추가로 치환된다.

[0137]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Z_1 은 N이고, Z_2 및 Z_3 는 각각 CR_{12} 이며, R_{12} 는 수소이고, 상기 R_2 는 피리딘기로 추가로 치환된다.

[0138]

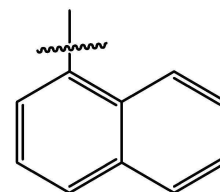
본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 은 중수소, 할로젠기, 니트로기, 니트릴기, 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, O, N, S 및 P 원자 중 1개 이

상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기이다.

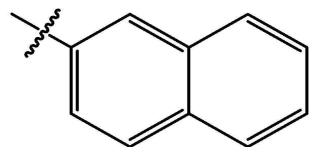
[0139] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 은 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기이다.

[0140] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 은 나프틸기이다.

[0141] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 은 나프틸기이고,



또는



이다.

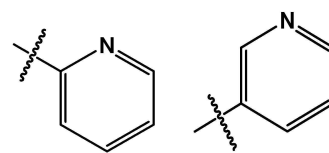
[0142] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 은 페닐기이다.

[0143] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 은 중수소, 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 알케닐기, 치환 또는 비치환된 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상으로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기이다.

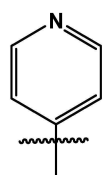
[0144] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 은 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 O, N, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기이다.

[0145] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 은 치환 또는 비치환된 피리딘기이다.

[0146] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 은 피리딘기이다.



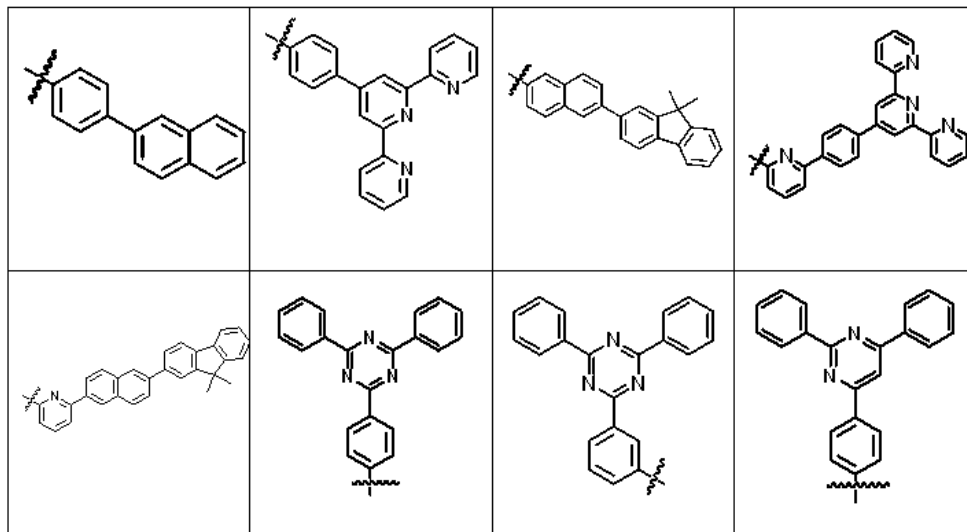
또는



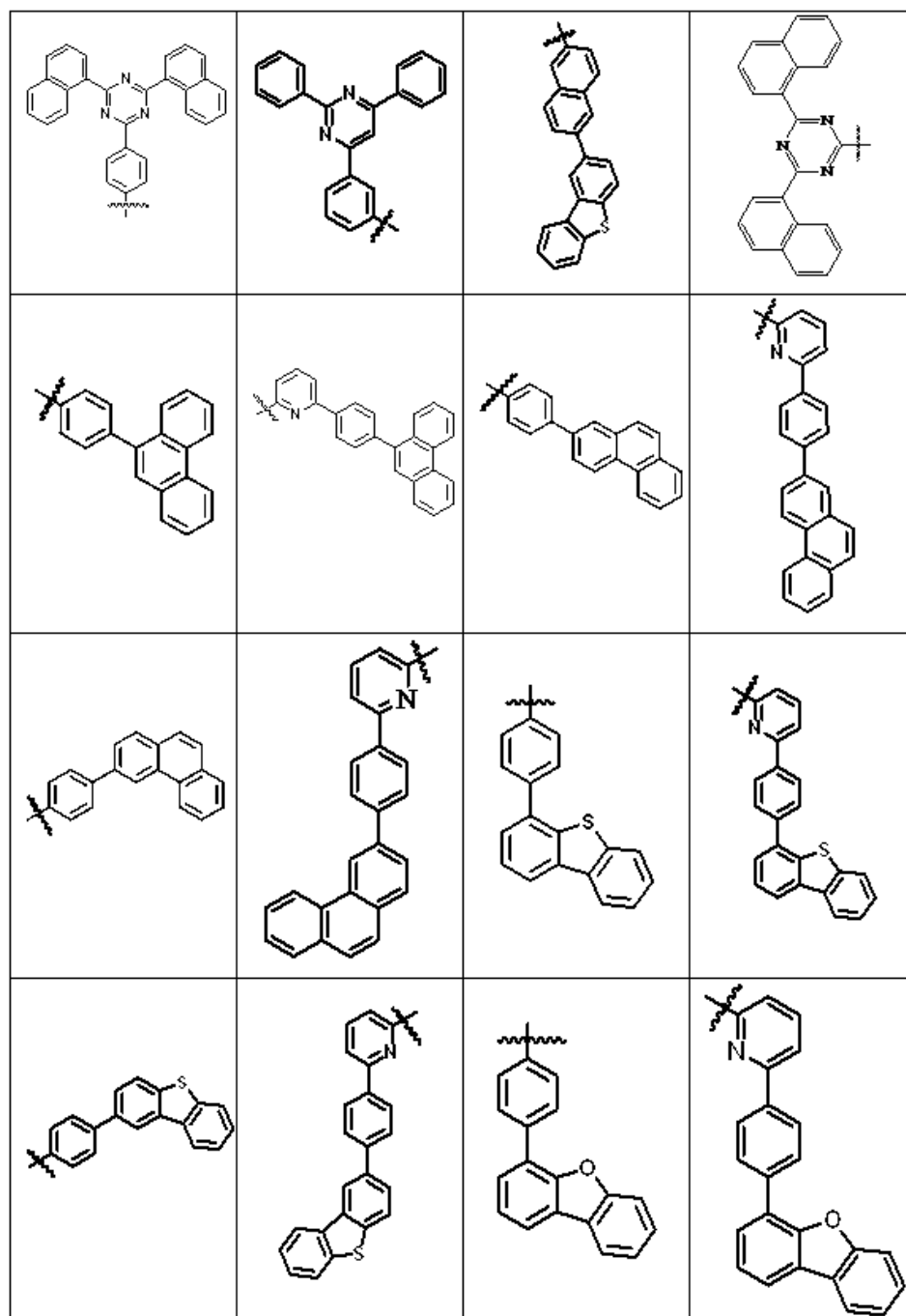
이다.

[0147] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 은 피리딘기이고, 구체적으로

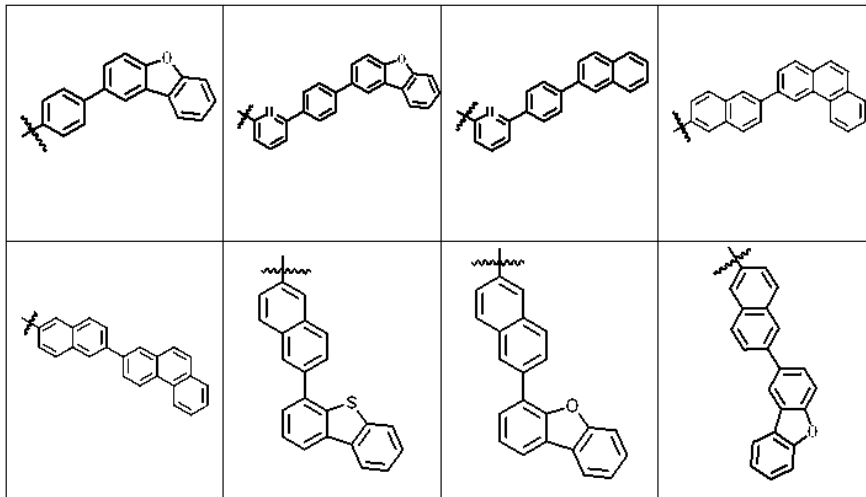
[0148] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 2로 표시되는 화학식은 하기 화학식 중 어느 하나이다.



[0149]



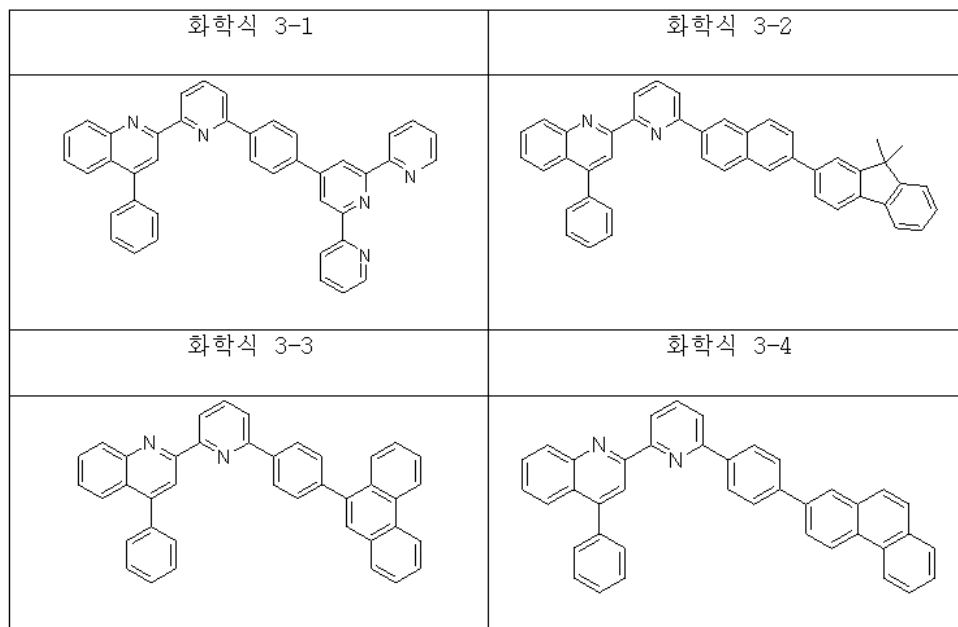
[0150]



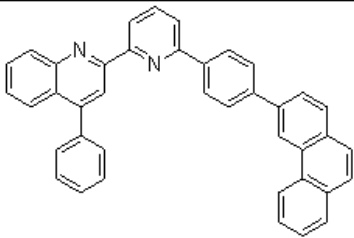
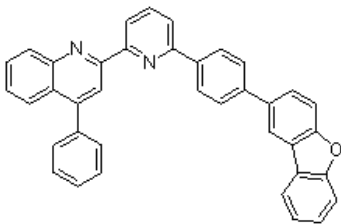
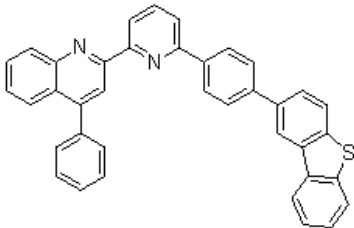
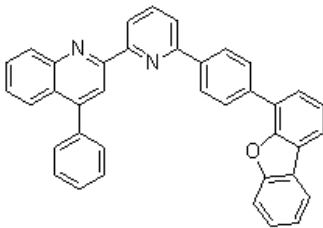
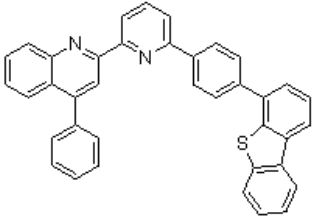
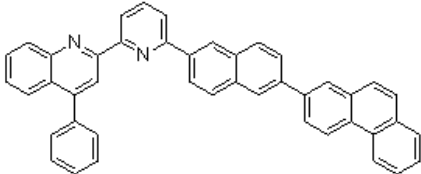
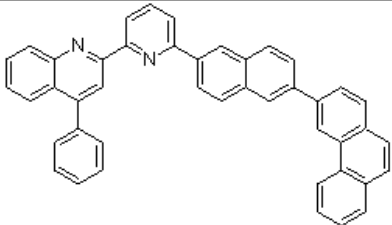
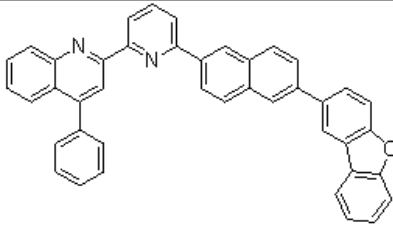
[0151]

[0152]

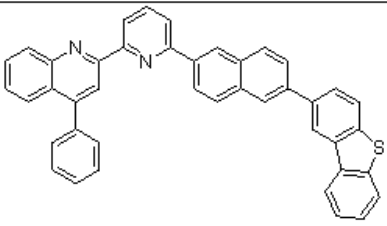
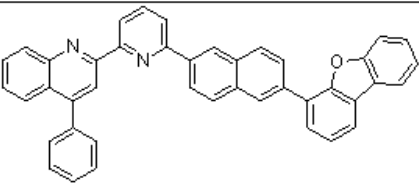
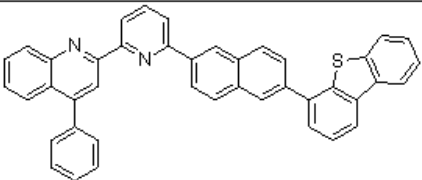
본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물은 하기 3-1 내지 3-15 중 어느 하나이다.



[0153]

화학식 3-5	화학식 3-6
	
화학식 3-7	화학식 3-8
	
화학식 3-9	화학식 3-10
	
화학식 3-11	화학식 3-12
	

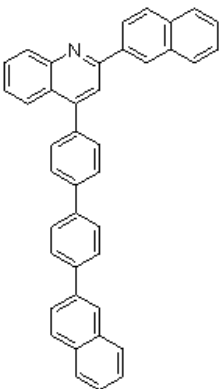
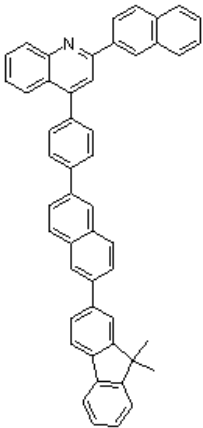
[0154]

화학식 3-13	화학식 3-14
	
화학식 3-15	
	

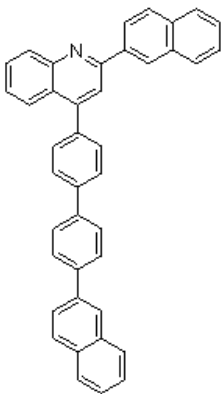
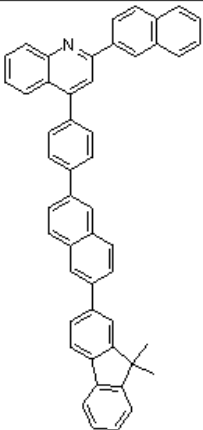
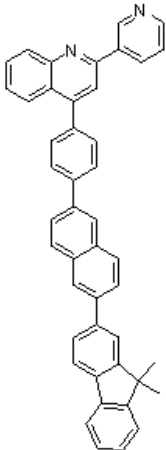
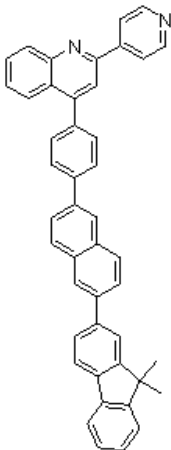
[0155]

[0156]

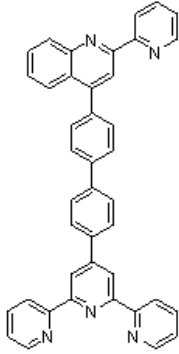
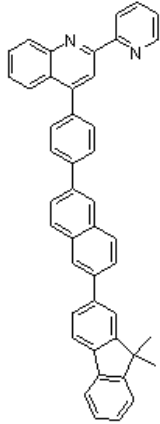
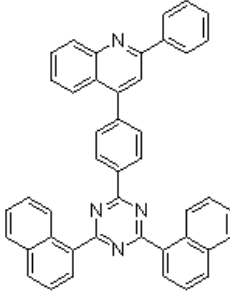
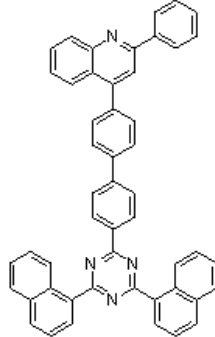
본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물은 하기 화학식 4-1 내지 4-30 중 어느 하나이다.

화학식 4-1	화학식 4-2
	

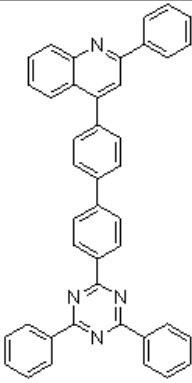
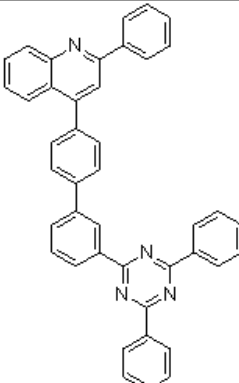
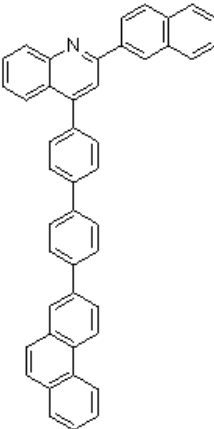
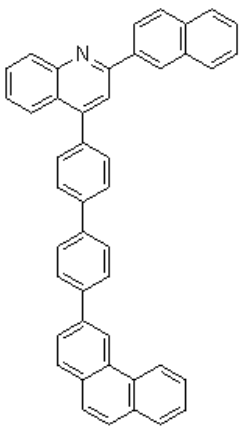
[0157]

화학식 4-3	화학식 4-4
	
화학식 4-5	화학식 4-6
	

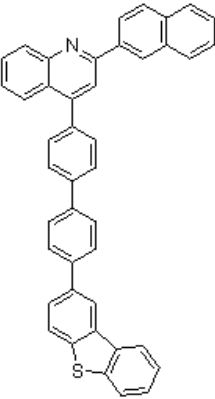
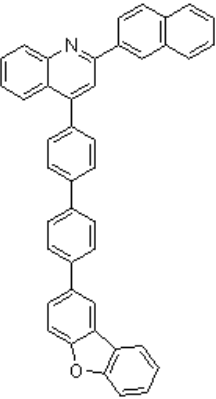
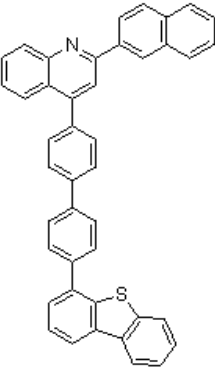
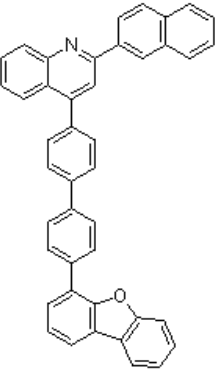
[0158]

화학식 4-7	화학식 4-8
	
화학식 4-9	화학식 4-10
	

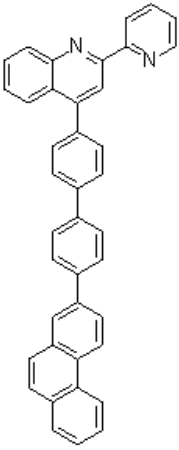
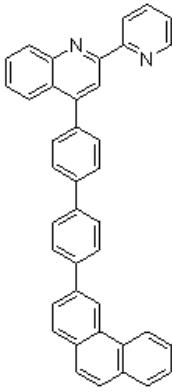
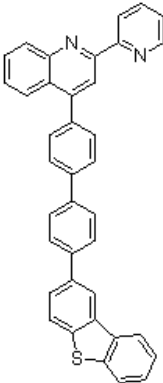
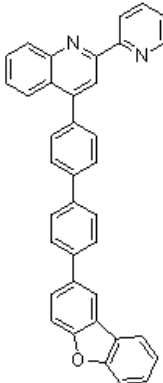
[0159]

화학식 4-11	화학식 4-12
	
화학식 4-13	화학식 4-14
	

[0160]

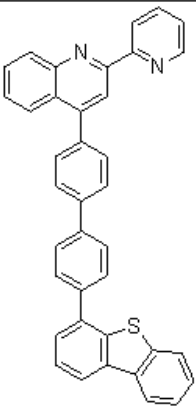
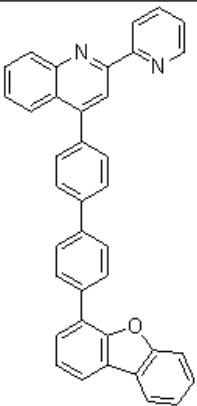
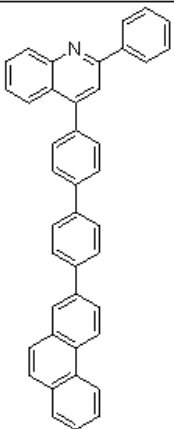
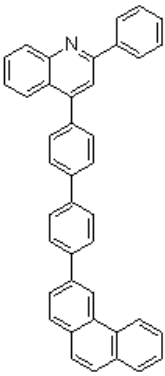
화학식 4-15	화학식 4-16
	
화학식 4-17	화학식 4-18
	

[0161]

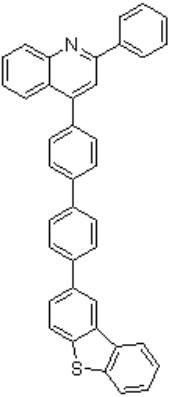
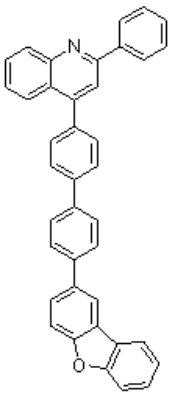
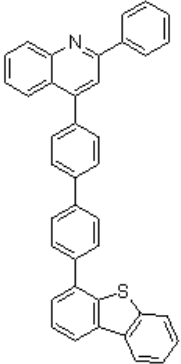
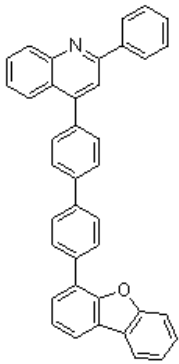
화학식 4-19	화학식 4-20
	
화학식 4-21	화학식 4-22
	

[0162]

[0163]

화학식 4-23	화학식 4-24
	
화학식 4-25	화학식 4-26
	

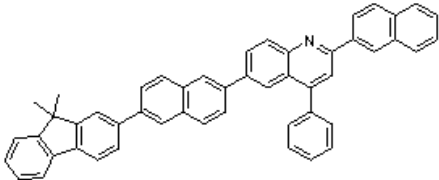
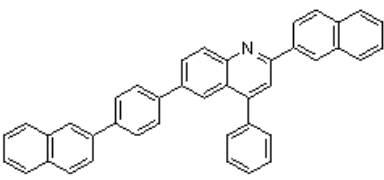
[0164]

화학식 4-27	화학식 4-28
	
화학식 4-29	화학식 4-30
	

[0165]

[0166]

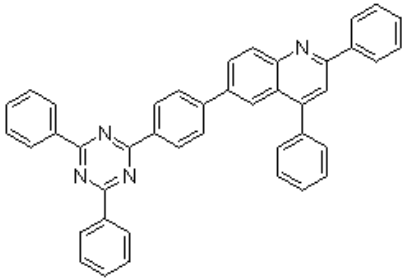
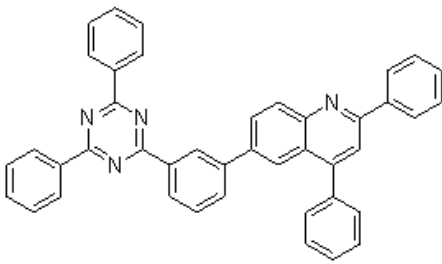
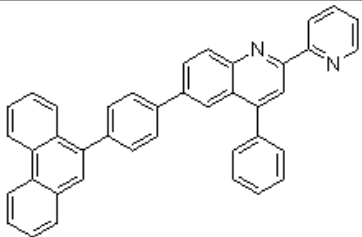
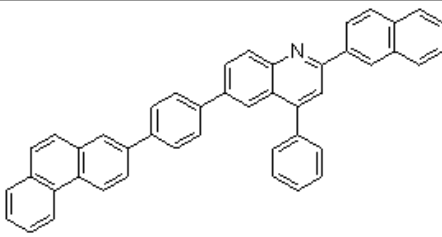
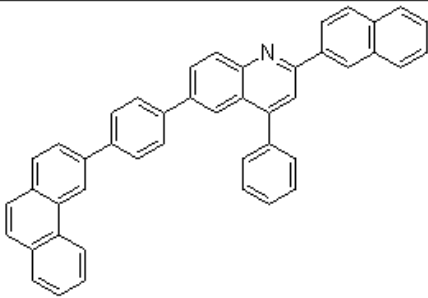
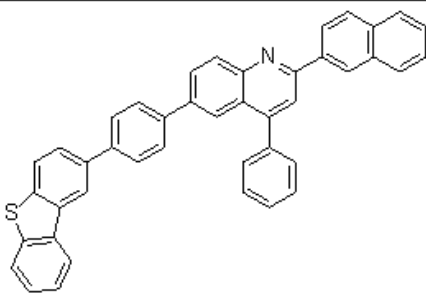
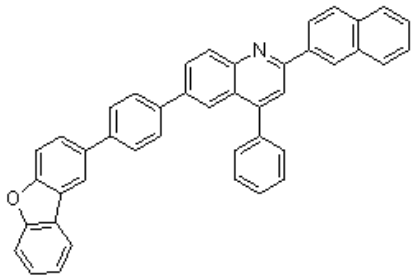
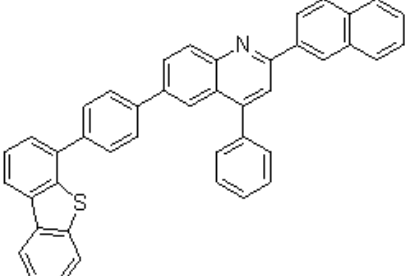
본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물은 하기 화학식 5-1 내지 5-25 중 어느 하나이다.

화학식 5-1	화학식 5-2
	

[0167]

화학식 5-3	화학식 5-4
화학식 5-5	화학식 5-6
화학식 5-7	화학식 5-8
화학식 5-9	화학식 5-10

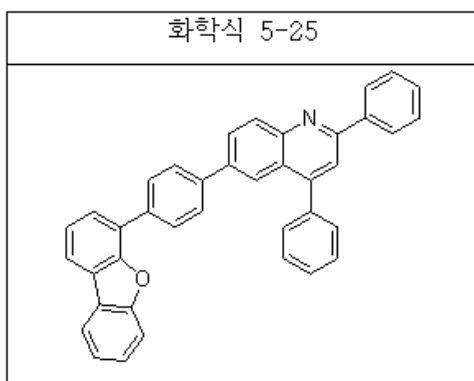
[0168]

화학식 5-11	화학식 5-12
	
화학식 5-13	화학식 5-14
	
화학식 5-15	화학식 5-16
	
화학식 5-17	화학식 5-18
	

[0169]

화학식 5-19	화학식 5-20
화학식 5-21	화학식 5-22
화학식 5-23	화학식 5-24

[0170]



[0171]

[0172]

본 명세서의 일 실시상태에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 다단계 화학반응으로 제조할 수 있다. 하기와 같이 일부 중간체 화합물이 먼저 제조되고, 그 중간체 화합물들로부터 화학식 1의 화합물들이 제조된다.

[0173]

화합물의 컨쥬게이션 길이와 에너지 밴드갭은 밀접한 관계가 있다. 구체적으로, 화합물의 컨쥬게이션 길이가 길수록 에너지 밴드갭이 작아진다. 전술한 바와 같이, 상기 화학식 1의 화합물의 코어는 제한된 컨쥬게이션을 포함하고 있으므로, 이는 에너지 밴드 갭이 큰 성질을 갖는다.

[0174]

본 명세서에서는 상기와 같이 에너지 밴드 갭이 큰 코어 구조의 X_1 내지 X_{11} 위치에 다양한 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드 갭을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 통상 에너지 밴드 갭이 큰 코어 구조에 치환기를

도입하여 에너지 밴드 갭을 조절하는 것은 용이하나, 코어 구조가 에너지 밴드 갭이 작은 경우에는 치환기를 도입하여 에너지 밴드 갭을 크게 조절하기 어렵다.

- [0175] 또한, 본 명세서에서는 상기와 같은 구조의 코어 구조의 X_I 내지 X_{II} 위치에 다양한 치환기를 도입함으로써 화합물의 HOMO 및 LUMO 에너지 준위도 조절할 수 있으며, 한편으로 유기물 사이에서의 계면에서의 특성을 향상되게 하며 물질의 용도를 다양하게 할 수 있다.
- [0176] 또한, 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기 발광 소자 제조시 사용되는 정공 주입층 물질, 정공 수송층 물질, 발광층 물질, 및 전자 수송층 물질에 줄 사용되는 치환기를 상기 코어 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 합성할 수 있다.
- [0177] 본 명세서에서는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 중 치환기에 따라 적절한 에너지 준위를 갖는 화합물을 선택하여 유기 발광 소자에 사용함으로써 구동 전압이 낮고 광효율이 높은 소자를 구현할 수 있다. 또한, 상기 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 에너지 밴드 갭을 미세하게 조절이 가능하게 하며, 한편으로 유기물 사이에서의 계면에서의 특성을 향상되게 하며 물질의 용도를 다양하게 할 수 있다.
- [0178] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 은 유리 전이 온도(Tg)가 높아 열적 안정성이 우수하다. 이러한 열적 안정성의 증가는 소자에 구동 안정성을 제공하는 중요한 요인이 된다.
- [0179] 본 명세서의 두 번째 측면은 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 하는, 유기 발광 소자에 관한 것이다.
- [0180] 도 1 및 2는 본 명세서에 따른 유기 발광 소자의 일 예이며, 도 1은 기판(1), 제1전극(2), 발광층(3) 및 제2 전극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이고, 도 2는 기판(1), 제1 전극(2), 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(3), 전자 수송층(8) 및 제2 전극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.
- [0181] 본 명세서의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다.
- [0182] 예컨대, 본 명세서의 유기 전기 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.
- [0183] 즉, 상기 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 정공 주입층 및 정공 수송층 중 적어도 하나의 층을 포함하고, 이 정공 주입층 또는 정공 수송층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 이 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0184] 상기 유기 발광 소자에서, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 인광 발광 물질로 포함할 수 있다.
- [0185] 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.
- [0186] 본 명세서의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 본 명세서의 화합물, 즉 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.
- [0187] 본 명세서의 유기 발광 소자는 예컨대 기판 상에 제1 전극, 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층시킴으로써 제조할 수 있다. 이 때, 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 PVD(Physical Vapor Deposition) 방법 등을 이용할 수 있으나, 이들 방법에만 한정되는 것은 아니다.
- [0188] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 명세서에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리

피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0189] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0190] 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입 받을 수 있는 물질로서, 정공주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0191] 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송 받아 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.

[0192] 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물 (Alq₃); 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.

[0193] 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; Alq₃를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

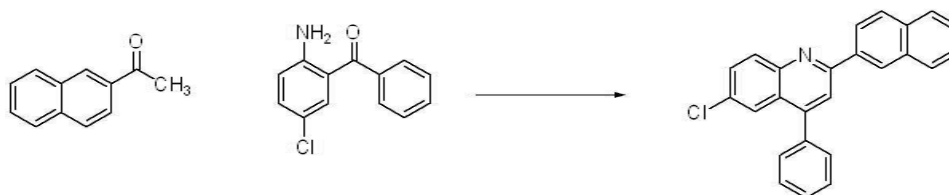
[0194] 본 명세서에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0195] 상기 화학식 1의 화합물의 제조방법 및 이들을 이용한 유기 발광 소자의 제조는 이하의 제조예 및 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나, 하기 제조예 및 실시예는 본 명세서를 예시하기 위한 것이며, 본 명세서의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0196] <실시예>

[0197] <제조예 1> 화학식 5-2의 화합물 합성

[0198] 1) 하기 화학식 2-A의 화합물 합성

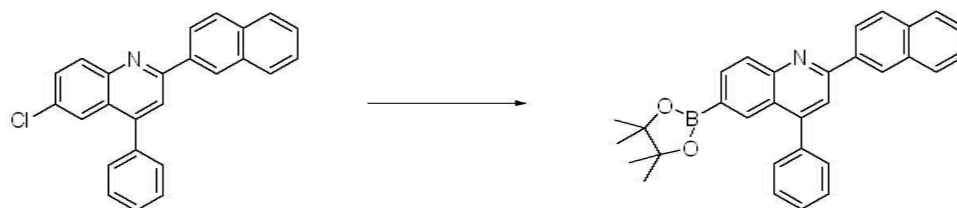


[화학식 2-A]

[0201] 질소 분위기에서 2-아세토나프톤(2-acetonaphthone, 34.0g, 146mmol), 2-아미노-5-클로로벤조페논(2-amino-5-chlorobenzophenone, 25.0g, 146mmol)을 아세트산 150ml 용매에 녹인 후, 무수 황산을 3ml 넣어주고, 6시간 가열 교반 환류시켰다. 반응이 종료 후 상온으로 식힌 후, 클로로포름으로 추출하여, 물로 세척하였다. 이 후, 무수황산마그네슘으로 반응물의 수분을 제거하고 거른 후, 유기용매를 감압 하에서 증류하여 제거하고, 에탄올로 세정하여, 화학식 2-A(36g, 68.0%)를 수득했다.

[0202] MS [M+H]⁺ = 366

[0203] 2) 하기 화학식 2-B의 화합물 합성



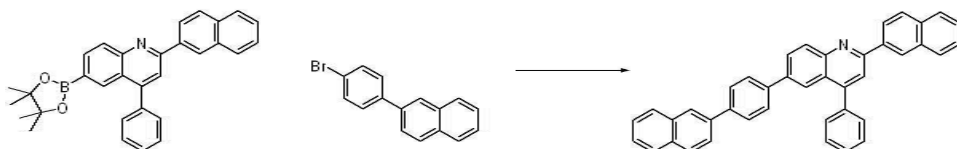
[0204]

[0205] [화학식 2-B]

[0206] 질소 분위기에서 상기 화학식 2-A(36g, 98.4mmol), 비스(피나콜라토)다이보론(27.5g, 108.2mmol) 및 아세트산 칼륨(29.1g, 296mmol)을 섞고 디옥산 100ml에 첨가하고 교반하면서 가열하였다. 환류되는 상태에서 비스(디벤질 리딘아세톤)팔라듐(1.7g, 2.94mmol)과 트리사이클로헥실포스핀(1.6g, 5.9mmol)을 넣고 8시간 동안 가열, 교반하였다. 반응 종료 후 상온으로 온도를 낮춘 후 여과하였다. 여과액을 물에 붓고 클로로포름으로 추출하고 유기층을 무수 황산 마그네슘으로 건조하였다. 감압 증류 후 에탄올로 세정하여 상기 화학식 2-B의 화합물(35g, 77%)을 제조하였다.

[0207] MS $[M+H]^+ = 458$

[0208] 3) 화학식 5-2의 화합물 합성



[0209]

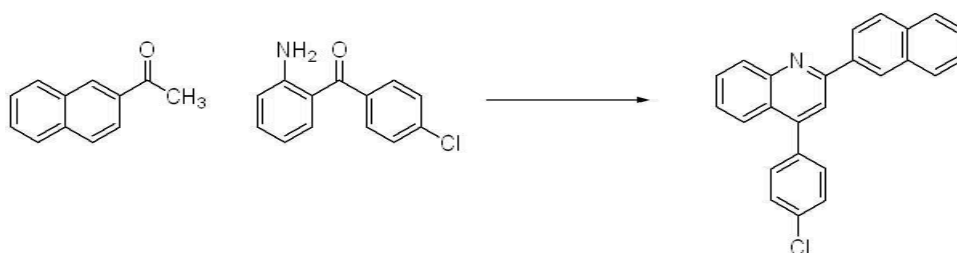
[0210] [화학식 5-2]

[0211] 상기 화학식 2-B의 화합물(18.0g, 39.35mmol)과 2-(4-브로모페닐)나프탈렌(11.1g, 39.35mmol)을 테트라하이드로퓨란(50ml)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(30ml)을 첨가하고 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(909mg, 0.78mmol)을 넣은 후 4시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 반응을 종결한 후, 탄산칼륨 용액을 제거하여 상기의 고체를 걸렀다. 걸러진 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 각각 1번씩 세척하여 상기 화학식 5-2의 화합물(14.0g, 70%)을 제조하였다.

[0212] MS $[M+H]^+ = 534$

[0213] <제조예 2> 화학식 4-1의 화합물 합성

[0214] 1) 하기 화학식 3-A의 화합물 합성



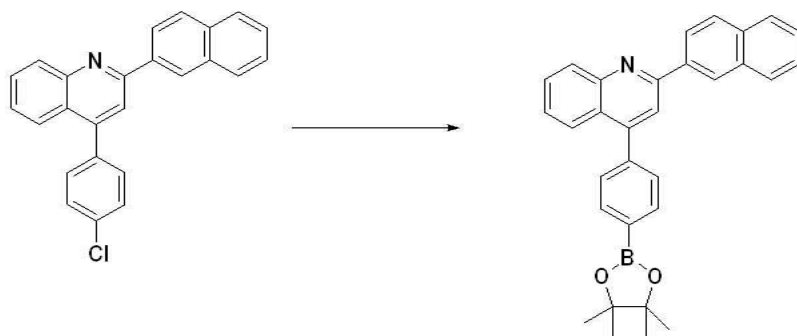
[0215]

[0216] [화학식 3-A]

[0217] 상기 제조예 1에서 2-아미노-5-클로로벤조페논 대신 2-아미노-4'-클로로벤조페논을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 2-A를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 3-A(36.2g, 91%)의 화합물을 제조하였다.

[0218] MS $[M+H]^+ = 366$

[0219] 2) 하기 화학식 3-B의 화합물 합성



[0220]

[0221]

[화학식 3-B]

[0222]

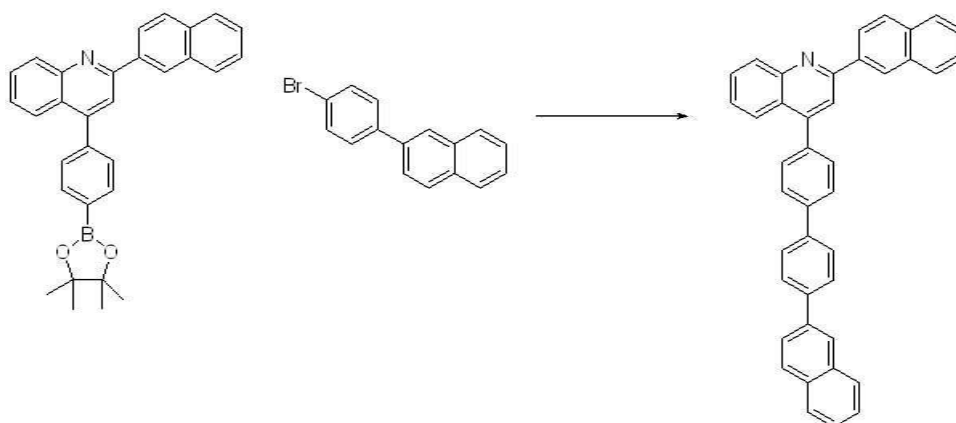
상기 제조예 1에서 화학식 2-A 대신 상기 화학식 3-A를 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 2-B를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 3-B(24.0g, 77%)의 화합물을 제조하였다.

[0223]

MS $[M+H]^+ = 458$

[0224]

3) 화학식 4-1의 화합물 합성



[0225]

[0226]

[화학식 4-1]

[0227]

상기 제조예 1에서 화학식 2-B 대신 상기 화학식 3-B를 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 5-2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 4-1(10.0g, 81%)의 화합물을 제조하였다.

[0228]

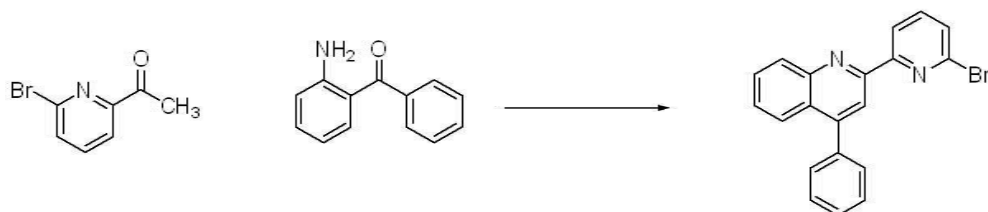
MS $[M+H]^+ = 534$

[0229]

<제조예 3> 화학식 3-2의 화합물 합성

[0230]

1) 하기 화학식 15-A의 화합물 합성



[0231]

[0232]

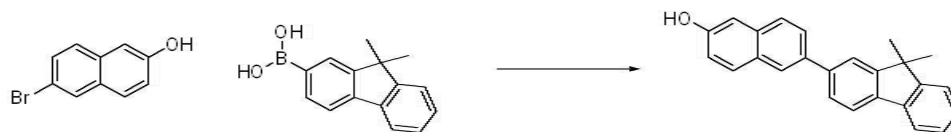
[화학식 15-A]

[0233]

상기 제조예 1에서 2'-아세토나프톤 대신 2-아세틸-6'-브로모피리딘 (2-acetyl-6'-bromopyridine)을 사용하고, 2-아미노-5-클로로벤조페논 대신 2-아미노벤조페논(2-aminobenzophenone)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 화학식 2-A를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 15-A(16.0g, 87%)의 화합물을 제조하였다.

MS $[M+H]^+ = 362$

2) 하기 화학식 15-B의 화합물 합성

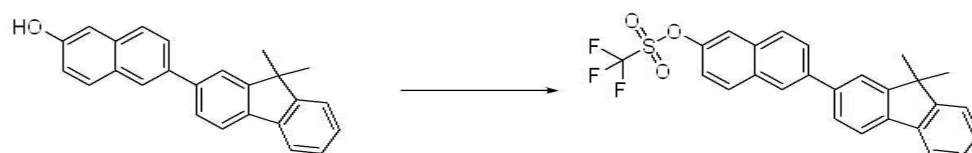


[화학식 15-B]

9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-보론산(9,9-dimethyl-9H-fluorene-2-boronic acid, 20.0g, 84.0 mmol)과 2-브로모-6-나프톨(2-bromo-6-naphthol, 17.0g, 76.3 mmol)을 테트라하이드로 퓨란(150ml)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨 수용액(100ml)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스포노팔라듐(1.76g, 1.52mmol)을 넣은 후 5시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고, 무수황산마그네슘으로 건조한 후 여과하였다. 여과액을 감압농축시키고 헥산으로 재결정하여 화학식 15-B(21.0g, 82%)을 제조하였다.

MS $[M+H]^+ = 337$

3) 하기 화학식 15-C의 화합물 합성

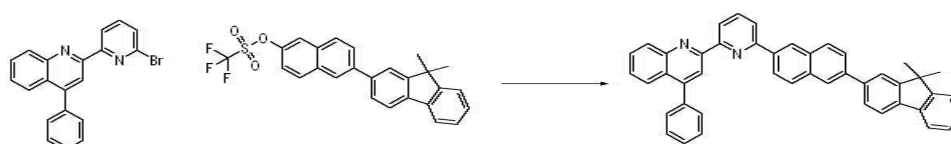


[화학식 16-C]

상기 화학식 15-B(20.0g, 59.4 mmol)을 디클로로메탄에 녹인 후 트리에틸아민(16.4ml, 118mmol)을 첨가한 후 1시간 동안 교반하였다. 그 후, 트리플루오로메탄술포산 무수물($(CF_3SO_2)_2O$, 14.9ml, 40.1mmol)을 천천히 첨가한 후 2시간 동안 교반하였다. 탄산수소나트륨 수용액을 첨가한 후 물층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 수분을 제거하였다. 여과한 후 감압 농축하고 헥산으로 재결정하여 화학식 15-C(22.0g, 81%)을 제조하였다.

MS $[M+H]^+ = 469$

4) 화학식 3-2의 화합물 합성



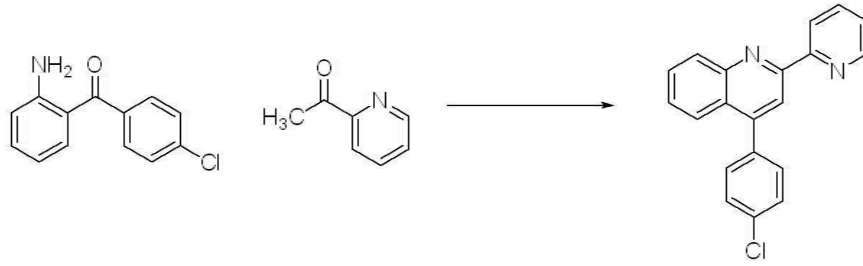
[화학식 3-2]

상기 제조예 1에서 화학식 2-B 대신 상기 화학식 15-A를 사용하고, 2-(4-브로모페닐)나프탈렌 대신 상기 화학식 15-C를 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 5-2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 3-2(12.1g, 83%)의 화합물을 제조하였다.

MS $[M+H]^+ = 601$

<제조예 4> 화학식 4-8의 화합물 합성

[0251] 1) 하기 화학식 18-A의 화합물 합성



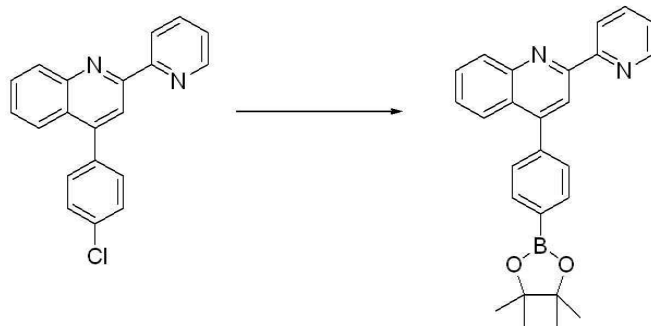
[0252]

[0253] [화학식 18-A]

[0254] 상기 제조예 1에서 2'-아세토나프톤 대신 2-아세틸피리딘을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 2-A를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 18-A(14.0g, 70%)의 화합물을 제조하였다.

[0255] MS $[M+H]^+ = 317$

[0256] 2) 하기 화학식 18-B의 화합물 합성



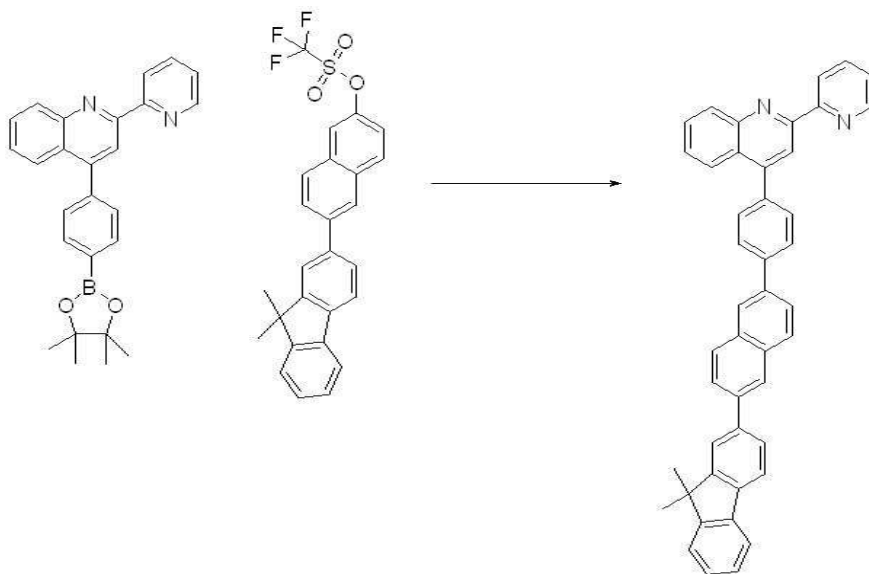
[0257]

[0258] [화학식 18-B]

[0259] 상기 제조예 1에서 화학식 2-A 대신 상기 화학식 18-A를 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 2-B를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 18-B(14.0g, 70%)의 화합물을 제조하였다.

[0260] MS $[M+H]^+ = 409$

[0261] 3) 화학식 4-8의 화합물 합성



[0262]

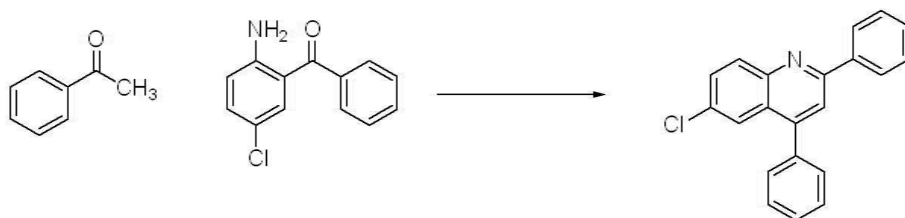
[0263] [화학식 4-8]

[0264] 상기 제조예 1에서 화학식 2-B 대신 상기 화학식 18-B을 사용하고, 2-(4-브로모페닐)나프탈렌 대신 상기 화학식 15-C을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 5-2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 4-8(8.1g, 81%)의 화합물을 제조하였다.

[0265] MS $[M+H]^+ = 601$

[0266] <제조예 5> 화학식 5-10의 화합물 합성

[0267] 1) 하기 화학식 20-A의 화합물 합성



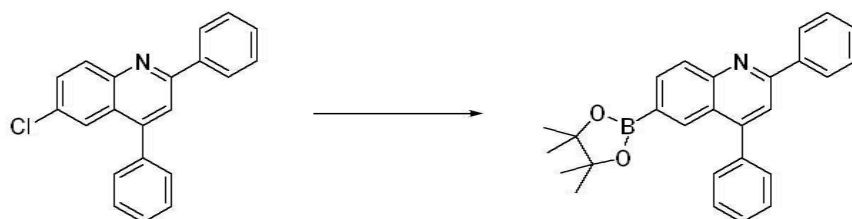
[0268]

[0269] [화학식 20-A]

[0270] 상기 제조예 1에서 2'-아세토나프톤 대신 아세토페논을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 2-A를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 20-A(14.0g, 70%)의 화합물을 제조하였다.

[0271] MS $[M+H]^+ = 317$

[0272] 2) 하기 화학식 20-B의 화합물 합성



[0273]

[0274] [화학식 20-B]

[0275] 상기 제조예 1에서 화학식 2-A 대신 상기 화학식 20-A를 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 2-B를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 20-B(22.0g, 77%)의 화합물을 제조하였다.

[0276] MS $[M+H]^+ = 408$

[0277] 3) 하기 화학식 20-C의 화합물 합성



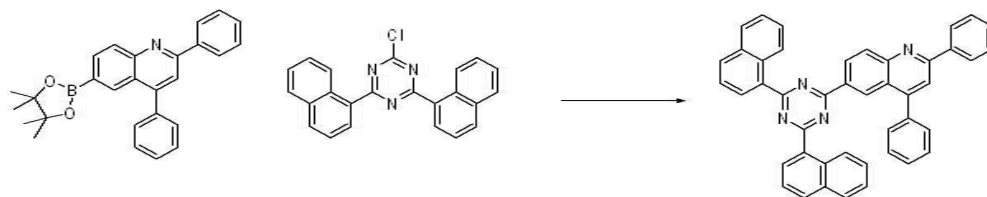
[0278]

[0279] [화학식 20-C]

[0280] 질소 분위기에서 마그네슘(9.7g, 400mmol), 요오드(1.02g, 8mmol)을 무수 테트라하이드로퓨란 80ml 용매에 현탁하여 현탁액을 제조하고, 1-브로모나프탈렌(82.8g, 400mmol)을 무수 테트라하이드로퓨란 150ml에 희석한 용액을 이 현탁액에 1시간에 걸쳐 천천히 적가하고, 이 혼합물을 3시간 가열 환류하였다. 이 혼합물을 상온으로 식힌 후, 1,3,5-트리클로로트리아진(27.6g, 150mmol)을 무수 테트라하이드로퓨란 150ml에 용해한 용액을 이 혼합물에 천천히 적가하고, 약 5시간 환류 교반하였다. 반응이 끝난 후, 반응 유체의 유기용매를 감압 증류 후 에탄올로 재결정하여, 화합물 20-C(43.0g, 78%)을 수득했다.

[0281] MS $[M+H]^+ = 368$

4) 화학식 5-10의 화합물 합성

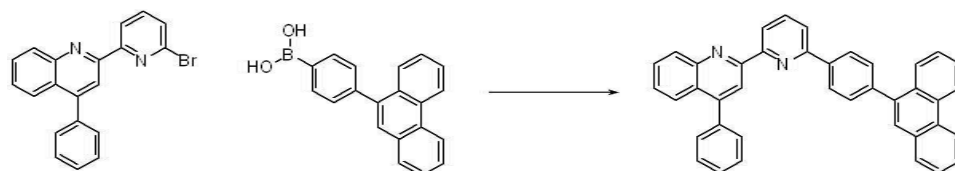


[화학식 5-10]

상기 제조예 1에서 화학식 2-B 대신 상기 화학식 20-B을 사용하고, 2-(4-브로모페닐)나프탈렌 대신 상기 화학식 20-C을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 5-2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 5-10(9.3g, 76%)의 화합물을 제조하였다.

MS $[M+H]^+ = 613$

<제조예 6> 화학식 3-3의 화합물 합성

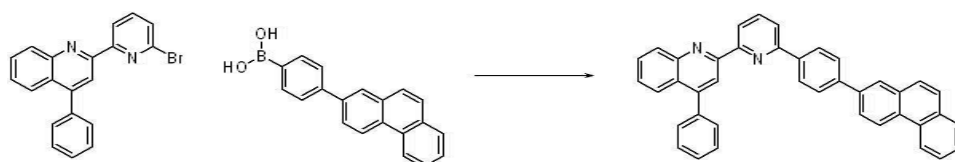


[화학식 3-3]

상기 제조예 1에서 화학식 2-B 대신 상기 화학식 15-A을 사용하고, 2-(4-브로모페닐)나프탈렌 대신 4-(페난트렌-9-닐)페닐보론산(4-(phenanthren-9-yl)phenylboronic acid)을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 5-2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 3-3(13.3g, 85%)의 화합물을 제조하였다.

MS $[M+H]^+ = 535$

<제조예 7> 화학식 3-4의 화합물 합성



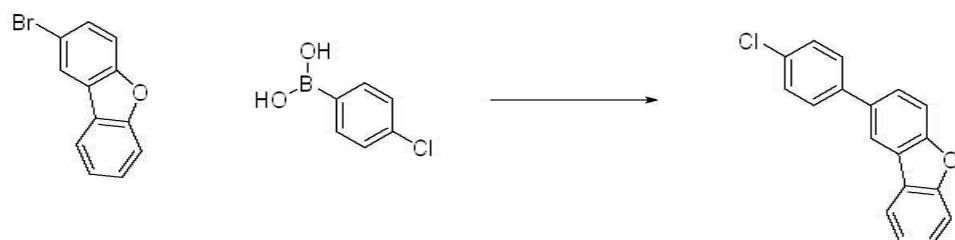
[화학식 3-4]

상기 제조예 1에서 화학식 2-B 대신 상기 화학식 15-A을 사용하고, 2-(4-브로모페닐)나프탈렌 대신 4-(페난트렌-2-닐)페닐보론산(4-(phenanthren-9-yl)phenylboronic acid)을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 5-2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 3-4(11.7g, 82%)의 화합물을 제조하였다.

MS $[M+H]^+ = 535$

<제조예 8> 화학식 3-6의 화합물 합성

1) 하기 화학식 31-A의 화합물 합성

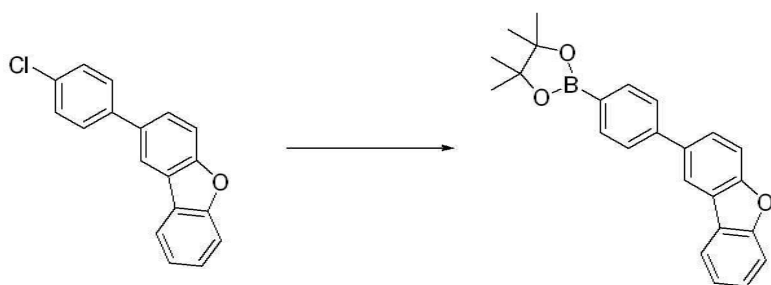


[0300] [화학식 31-A]

[0301] 2-브로모디벤조퓨란(2-bromodibenzofuran, 23.0g, 93.08mmol)과 4-클로로페닐보론산(4-chlorophenylboronic acid, 16.0g, 102.39mmol)을 테트라하이드로퓨란(100ml)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(50ml)을 첨가하고 테트라키스트리페닐-포스포노팔라듐(2.1g, 1.86mmol)을 넣은 후 6시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 반응을 종결한 후, 탄산칼륨 용액을 제거하여 상기의 고체를 걸렀다. 걸러진 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 각각 1번씩 세척하여 상기 화학식 31-A의 화합물(22.6g, 87%)을 제조하였다.

[0302] MS $[M+H]^+ = 279$

[0303] 2) 하기 화학식 31-B의 화합물 합성



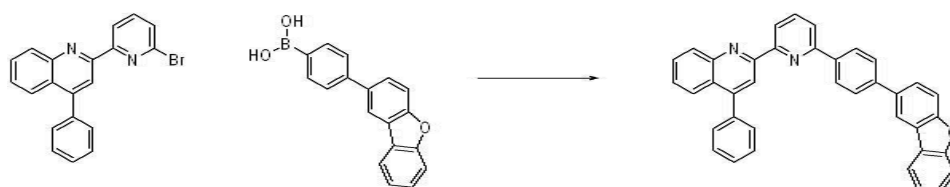
[0304]

[0305] [화학식 31-B]

[0306] 질소 분위기에서 상기 화학식 31-A(20g, 71.75mmol), 비스(피나콜라토)다이보론(23.6g, 86.1mmol) 및 아세트산 칼륨(21.1g, 215.25mmol)을 섞고 디옥산 100ml에 첨가하고 교반하면서 가열하였다, 환류되는 상태에서 비스(디벤질리딘아세톤)팔라듐(1.3g, 2.15mmol)과 트리사이클로헥실포스핀(1.2g, 4.3mmol)을 넣고 8시간 동안 가열, 교반하였다. 반응 종료 후 상온으로 온도를 낮춘 후 여과하였다. 여과액을 물에 붓고 클로로포름으로 추출하고 유기층을 무수 황산 마그네슘으로 건조하였다. 감압 증류 후 에탄올로 세정하여 상기 화학식 31-B의 화합물(21g, 80%)을 제조하였다.

[0307] MS $[M+H]^+ = 371$

[0308] 3) 하기 화학식 3-6의 화합물 합성



[0309]

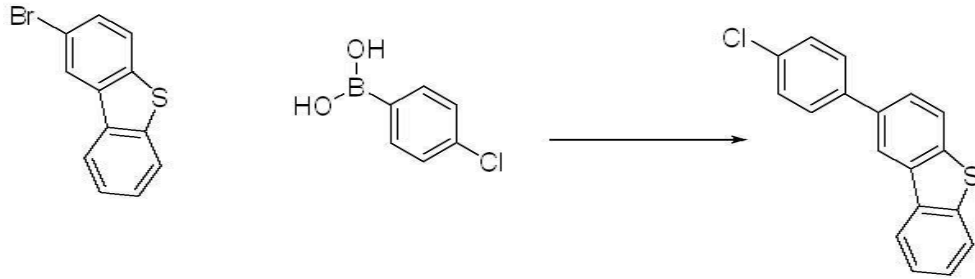
[0310] [화학식 3-6]

[0311] 상기 제조예 1에서 화학식 2-B 대신 상기 화학식 15-A를 사용하고, 2-(4-브로모페닐)나프탈렌 대신 상기 화학식 31-B를 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 5-2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 3-6(14.9g, 79%)의 화합물을 제조하였다.

[0312] MS $[M+H]^+ = 525$

[0313] <제조예 9> 화학식 3-7의 화합물 합성

[0314] 1) 하기 화학식 32-A의 화합물 합성



[0315]

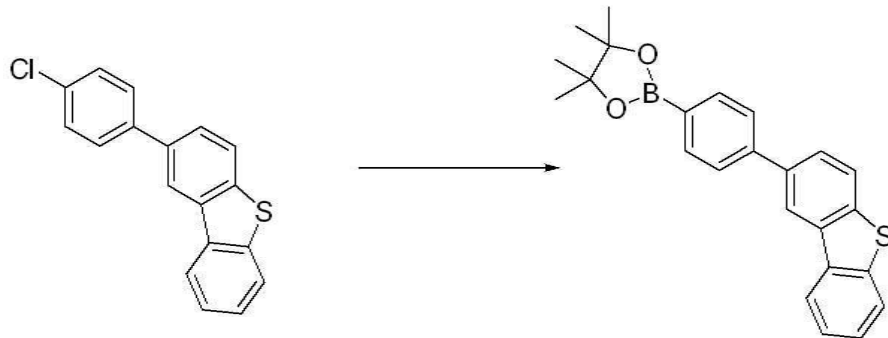
[0316]

[화학식 32-A]

[0317] 상기 제조예 8에서 2-브로모디벤조퓨란 대신 2-브로모디벤조싸이오펜(2-bromodibenzothiophene)을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 31-A를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 32-A(26.4g, 81%)의 화합물을 제조하였다.

[0318] MS $[M+H]^+ = 295$

[0319] 2) 하기 화학식 32-B의 화합물 합성



[0320]

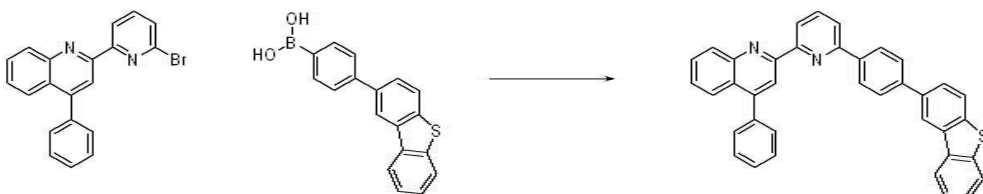
[0321]

[화학식 32-B]

[0322] 상기 제조예 8에서 상기 화학식 31-A 대신 상기 화학식 32-A를 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 31-B를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 32-B(21.9g, 86%)의 화합물을 제조하였다.

[0323] MS $[M+H]^+ = 387$

[0324] 3) 화학식 3-7의 화합물 합성



[0325]

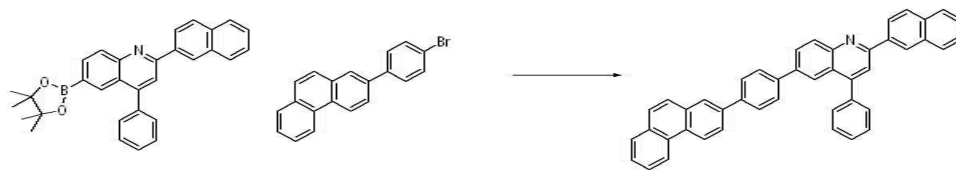
[0326]

[화학식 3-7]

[0327] 상기 제조예 1에서 화학식 2-B 대신 상기 화학식 15-A를 사용하고, 2-(4-브로모페닐)나프탈렌 대신 상기 화학식 32-B를 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 5-2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 3-7(11.6g, 83%)의 화합물을 제조하였다.

[0328] MS $[M+H]^+ = 541$

[0329] <제조예 10> 화학식 5-14의 화합물 합성



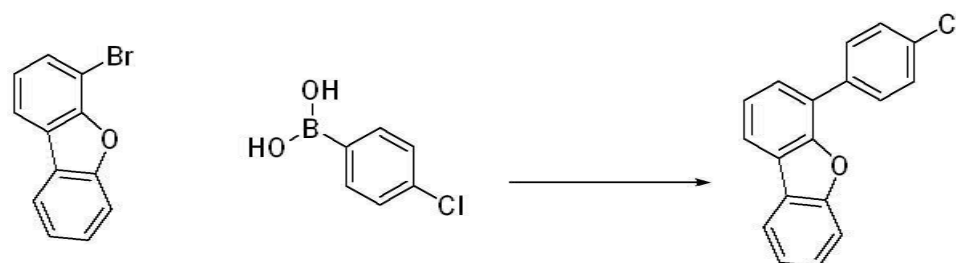
[0330]
[0331] [화학식 5-14]

[0332] 상기 제조예 1에서 화학식 2-B 대신 상기 화학식 20-B을 사용하고, 2-(4-브로모페닐)나프탈렌 대신 2-(4-브로모페닐)페난트렌(2-(4-bromophenyl)phenanthrene)을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 5-2를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 5-14(8.8g, 79%)의 화합물을 제조하였다.

[0333] MS $[M+H]^+ = 584$

[0334] <제조예 11> 화학식 5-19의 화합물 합성

[0335] 1) 하기 화학식 46-A의 화합물 합성

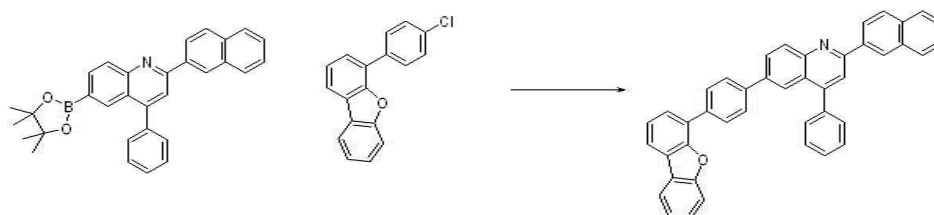


[0336]
[0337] [화학식 46-A]

[0338] 상기 제조예 8에서 2-브로모디벤조퓨란 대신 4-브로모디벤조퓨란(4-bromodibenzofuran)을 사용하여 상기 화학식 31-A를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 46-A(22.8g, 83%)의 화합물을 제조하였다.

[0339] MS $[M+H]^+ = 279$

[0340] 2) 하기 화학식 5-19의 화합물 합성



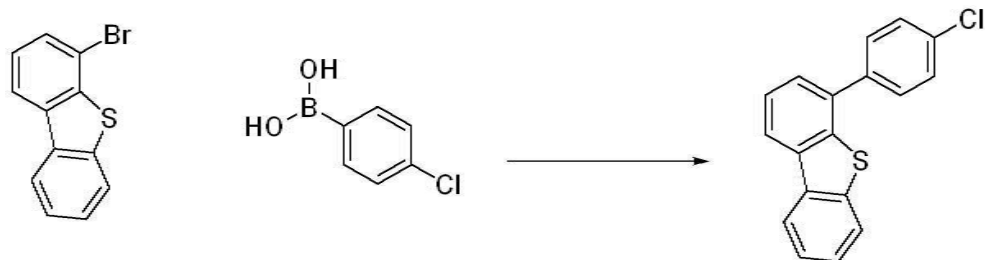
[0341]
[0342] [화학식 5-19]

[0343] 상기 제조예 1에서 제조한 화학식 2-B의 화합물(12.0g, 26.23mmol)과 상기 화학식 46-A를 1,4-다이옥산(60ml)에 분산시킨 후, 2M 인산칼륨수용액(30ml)을 첨가하고 비스(디벤질리딘아세톤)팔라듐(450mg, 0.78mmol)과 트리사이클로헥실포스핀(437mg, 1.56mmol)을 넣은 후 10시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 반응을 종결한 후, 인산칼륨 용액을 제거하여 상기의 고체를 걸렀다. 걸러진 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 각각 1번씩 세척하여 상기 화학식 5-19의 화합물(11.7g, 78%)을 제조하였다.

[0344] MS $[M+H]^+ = 574$

[0345] <제조예 12> 화학식 4-17의 화합물 합성

[0346] 1) 하기 화학식 57-A의 화합물 합성



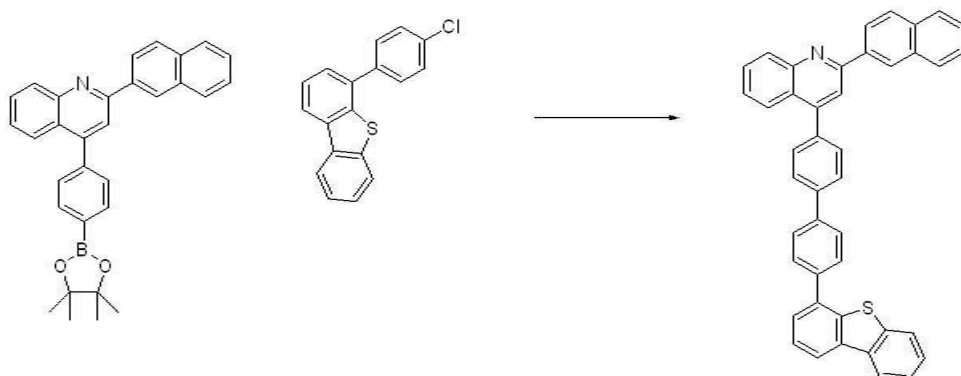
[0347]

[0348] [화학식 57-A]

[0349] 상기 제조예 8에서 2-브로모디벤조퓨란 대신 4-브로모디벤조싸이오펜(4-bromodibenzothiophene)을 사용하여 상기 화학식 31-A를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 57-A(23.7g, 87%)의 화합물을 제조하였다.

[0350] MS $[M+H]^+ = 295$

[0351] 2) 하기 화학식 4-17의 화합물 합성



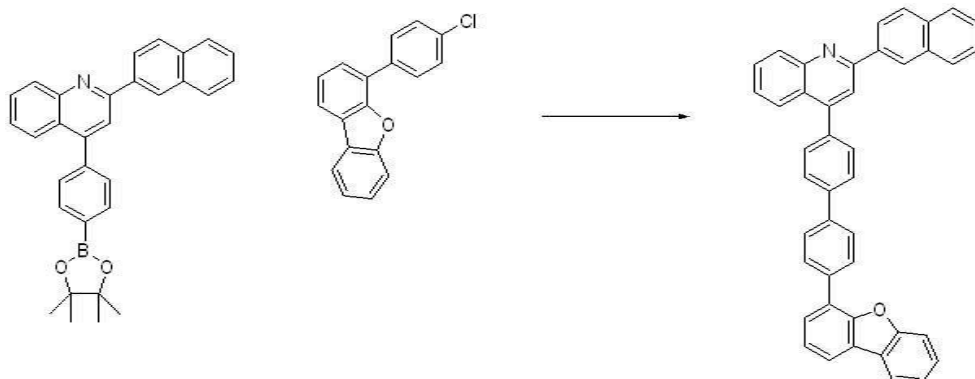
[0352]

[0353] [화학식 4-17]

[0354] 상기 제조예 11에서 화학식 2-B 대신 상기 화학식 3-B을 사용하고, 상기 화학식 46-A 대신 상기 화학식 57-A를 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 5-19을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 4-17(13.3g, 76%)의 화합물을 제조하였다.

[0355] MS $[M+H]^+ = 590$

[0356] <제조예 13> 화학식 4-18의 화합물 합성



[0357]

[0358] [화학식 4-18]

[0359] 상기 제조예 11에서 화학식 2-B 대신 상기 화학식 3-B을 사용한 것을 제외하고는, 상기 화학식 5-19을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 하여 상기 화학식 4-18(9.8g, 79%)의 화합물을 제조하였다.

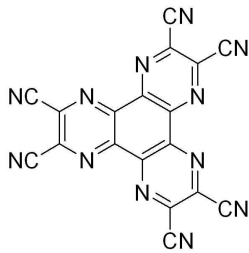
[0360] MS $[M+H]^+ = 574$

[0361] <실험예 1>

[0362] ITO(indium tin oxide)가 1,000Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이 때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀리포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

[0363] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 화학식의 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(hexaazatriphenylene; HAT)를 500Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공 주입층을 형성하였다.

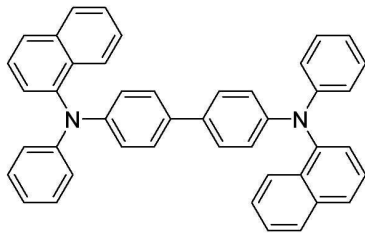
[0364] [HAT]



[0365]

[0366] 상기 정공 주입층 위에 정공을 수송하는 물질인 하기 화학식의 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB)(400Å)를 진공증착하여 정공 수송층을 형성하였다.

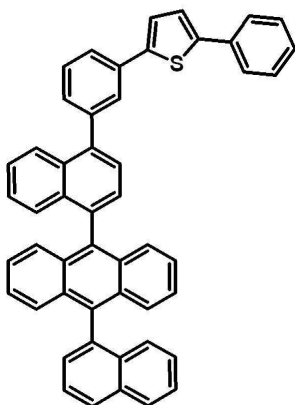
[0367] [NPB]



[0368]

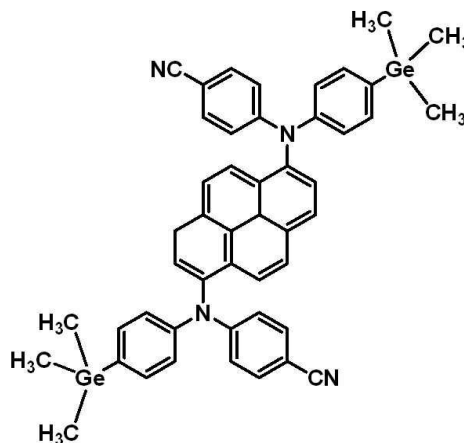
[0369] 이어서, 상기 정공 수송층 위에 막 두께 300Å으로 아래와 같은 BH와 BD를 25 : 1의 중량비로 진공증착하여 발광층을 형성하였다.

[0370] [BH]



[0371]

[BD]



[0372] 상기 발광층 위에 제조예 1에서 제조된 화학식 5-2의 화합물을 200Å의 두께로 진공 증착하여 전자 주입 및 수송층을 형성하였다.

[0373] 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 12Å 두께로 리튬플루라이드(LiF)와 2,000Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

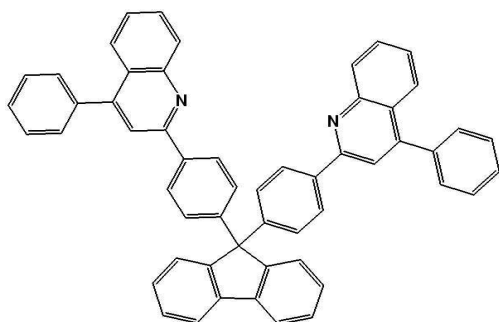
[0374] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4 ~ 0.7 Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플루라이드는 0.3 Å/sec, 알루미늄은 2 Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 $2 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-8}$ torr를 유지하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0375] <실험예 2 ~ 13>

[0376] 상기 실험예 1에서, 화학식 5-2의 화합물 대신 표 1에 나타난 각각의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0377] <비교예 1>

[0378] [ET1]

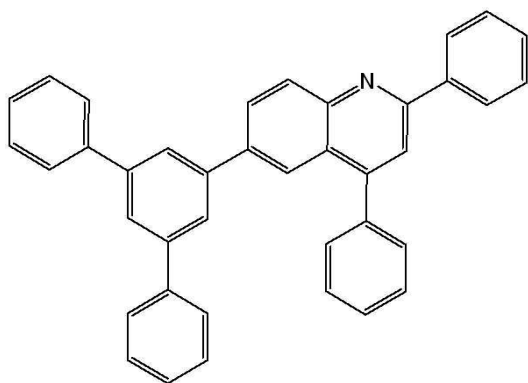


[0379]

[0380] 상기 실험예 1에서 화학식 5-2의 화합물 대신 상기 [ET1] 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0381] <비교예 2>

[0382] [ET2]



[0383]

[0384] 상기 실험예 1에서 화학식 5-2의 화합물 대신 상기 [ET2] 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0385] 상기 실험예 1 내지 13, 비교예 1 및 비교예 2의 방법에 따라 제작된 유기 발광 소자에 전류를 인가하였을 때, 표 1의 결과를 얻었다.

표 1

	화합물	전압(V@10mA/cm ²)	효율(cd/A@10mA/cm ²)	색좌표(x, y)
실험예 1	화학식 5-2	4.02	5.32	(0.138, 0.123)
실험예 2	화학식 4-1	4.11	5.20	(0.139, 0.121)
실험예 3	화학식 3-2	3.98	5.42	(0.138, 0.122)
실험예 4	화학식 4-8	3.85	5.51	(0.138, 0.121)
실험예 5	화학식 5-10	4.13	5.28	(0.139, 0.121)

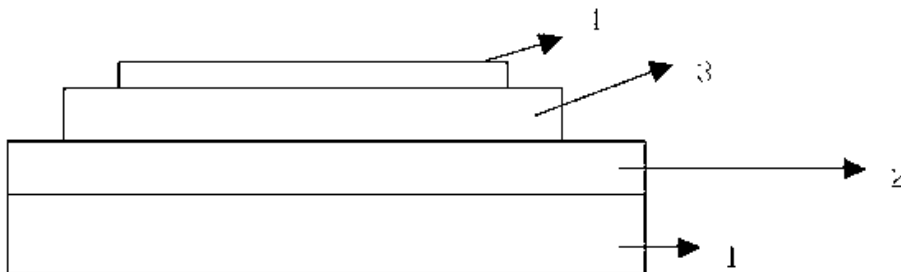
[0386]

실험예 6	화학식 3-3	3.75	5.58	(0.138, 0.122)
실험예 7	화학식 3-4	4.01	5.41	(0.138, 0.123)
실험예 8	화학식 3-6	4.04	5.38	(0.138, 0.120)
실험예 9	화학식 3-7	3.89	5.48	(0.139, 0.121)
실험예 10	화학식 5-14	3.88	5.45	(0.137, 0.122)
실험예 11	화학식 5-19	4.03	5.27	(0.138, 0.121)
실험예 12	화학식 4-17	4.11	5.17	(0.139, 0.122)
실험예 13	화학식 4-18	4.15	5.06	(0.138, 0.122)
비교예 1	ET1	4.34	4.91	(0.137, 0.121)
비교예 2	ET2	4.42	4.97	(0.139, 0.120)

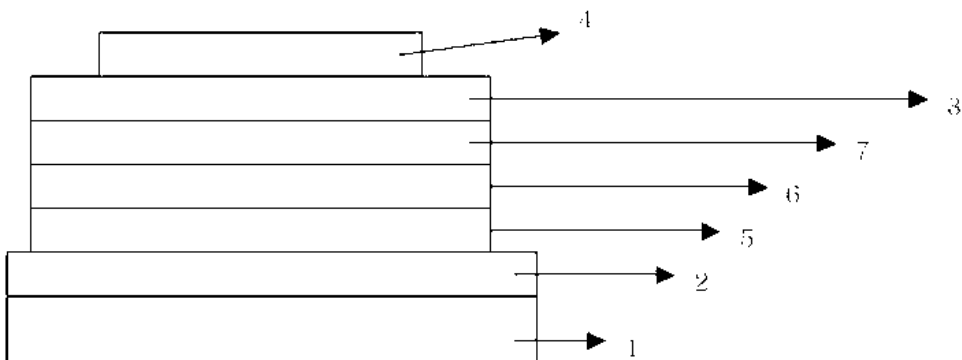
[0387] 상기 표 1의 결과와 같이, 본 발명에 따른 화합물은 전자 수송 및 주입 능력이 우수하여 유기 발광 소자에 적용 가능함을 확인할 수 있었다.

도면

도면1



도면2



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	KR1020130128322A	公开(公告)日	2013-11-26
申请号	KR1020130051506	申请日	2013-05-07
[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	LEE SANGBIN 이상빈 LEE DONG HOON 이동훈 KIM KONGKYEOM 김공겸 JEON SANG YOUNG 전상영 HONG SUNG KIL 홍성길 KIM SEONG SO 김성소 JANG BOONJAE 장분재 KIM DONG SIK 김동식		
发明人	이상빈 이동훈 김공겸 전상영 홍성길 김성소 장분재 김동식		
IPC分类号	C09K11/06 C07D401/14 C07D C09K H01L C07D401/04 H01L51/50		
CPC分类号	C07D401/04 C07D401/14 C09K11/06 H01L51/0058 H01L51/0062 H01L51/0069 H01L51/0071 H01L51/5016 H01L51/5056 H01L51/5072		
优先权	1020120052086 2012-05-16 KR		
其他公开文献	KR101566584B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本说明书提供了暗示杂环化合物和杂环化合物的有机发光器件，其改善了有机电子器件的寿命，效率，以及对有机层的电化学稳定性和热稳定性。

