



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2019년12월10일  
(11) 등록번호 10-2054069  
(24) 등록일자 2019년12월03일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07D 498/04 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)  
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)  
(52) CPC특허분류  
C07D 498/04 (2013.01)  
C09K 11/06 (2013.01)  
(21) 출원번호 10-2018-0049354  
(22) 출원일자 2018년04월27일  
심사청구일자 2018년04월27일  
(65) 공개번호 10-2018-0120620  
(43) 공개일자 2018년11월06일  
(30) 우선권주장  
1020170054504 2017년04월27일 대한민국(KR)  
(56) 선행기술조사문헌  
KR1020150130206 A\*  
\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자  
주식회사 엘지화학  
서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)  
(72) 발명자  
정경석  
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
천민승  
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
정순성

전체 청구항 수 : 총 9 항

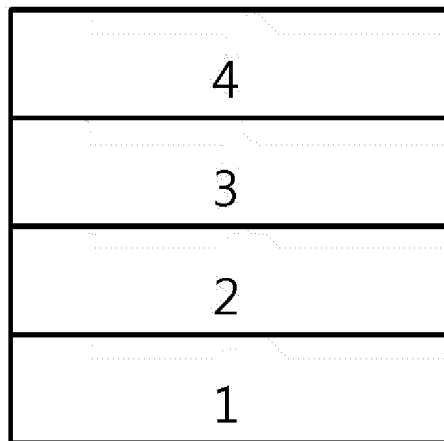
심사관 : 김용원

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

**(57) 요약**

본 명세서에는 화학식 1의 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

**대표도** - 도1



(52) CPC특허분류

*H01L 51/0059* (2013.01)  
*H01L 51/0069* (2013.01)  
*H01L 51/5012* (2013.01)  
*H01L 51/5056* (2013.01)  
*H01L 51/5072* (2013.01)  
*H01L 51/5088* (2013.01)  
*H01L 51/5092* (2013.01)  
*C09K 2211/1033* (2013.01)

(72) 발명자

**홍완표**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**김진주**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**윤홍식**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**오중석**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

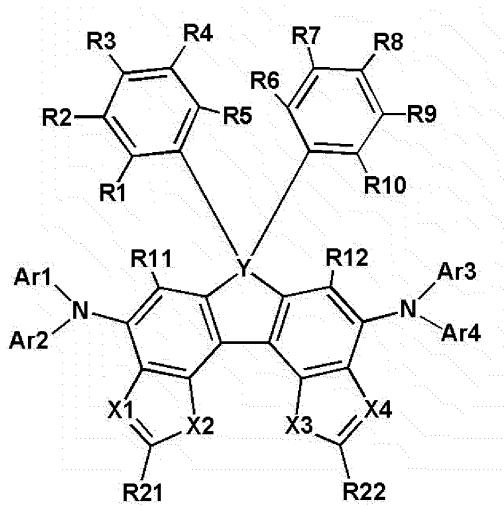
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

Y는 C 또는 Si이고,

R11 및 R12는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 시아노기; 할로젠기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

X1 및 X4는 각각 N이고,

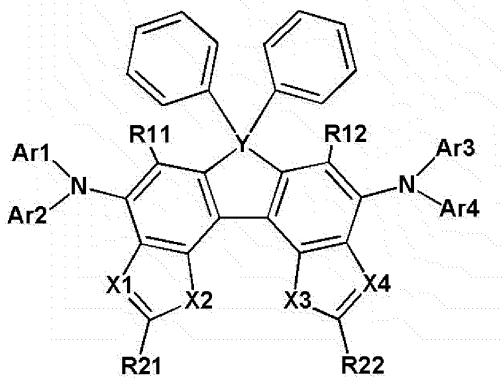
X2 및 X3는 각각 O이며,

R21, R22, Ar1 내지 Ar4 및 R1 내지 R10은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 시아노기; 할로젠기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이거나, 인접한 치환기는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.

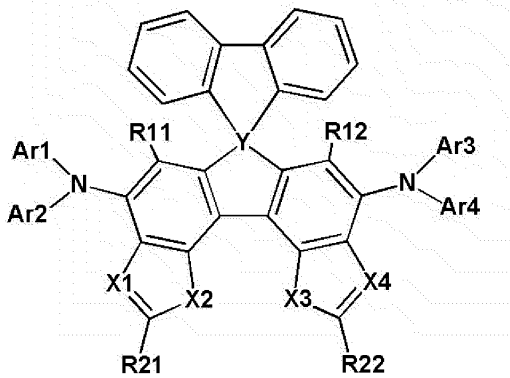
청구항 2

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시되는 것인 헤테로고리 화합물:

[화학식 2]



[화학식 3]



상기 화학식 2 및 3에 있어서,

Ar1 내지 Ar4, R11, R12, X1 내지 X4, Y, R21 및 R22는 상기 화학식 1에서의 정의와 같다.

**청구항 3**

청구항 1에 있어서, 상기 Ar1 내지 Ar4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기인 것인 헤테로고리 화합물.

**청구항 4**

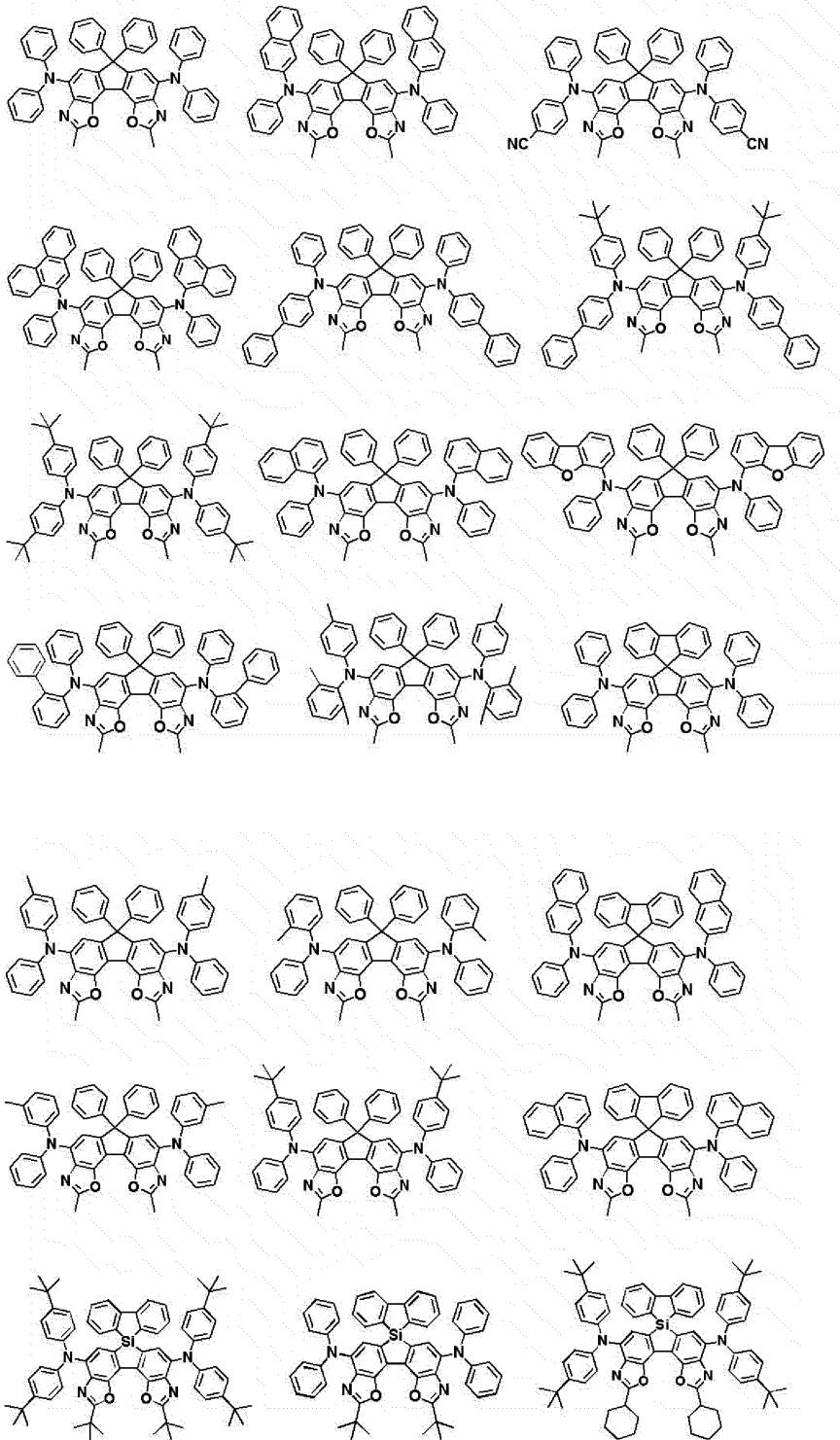
삭제

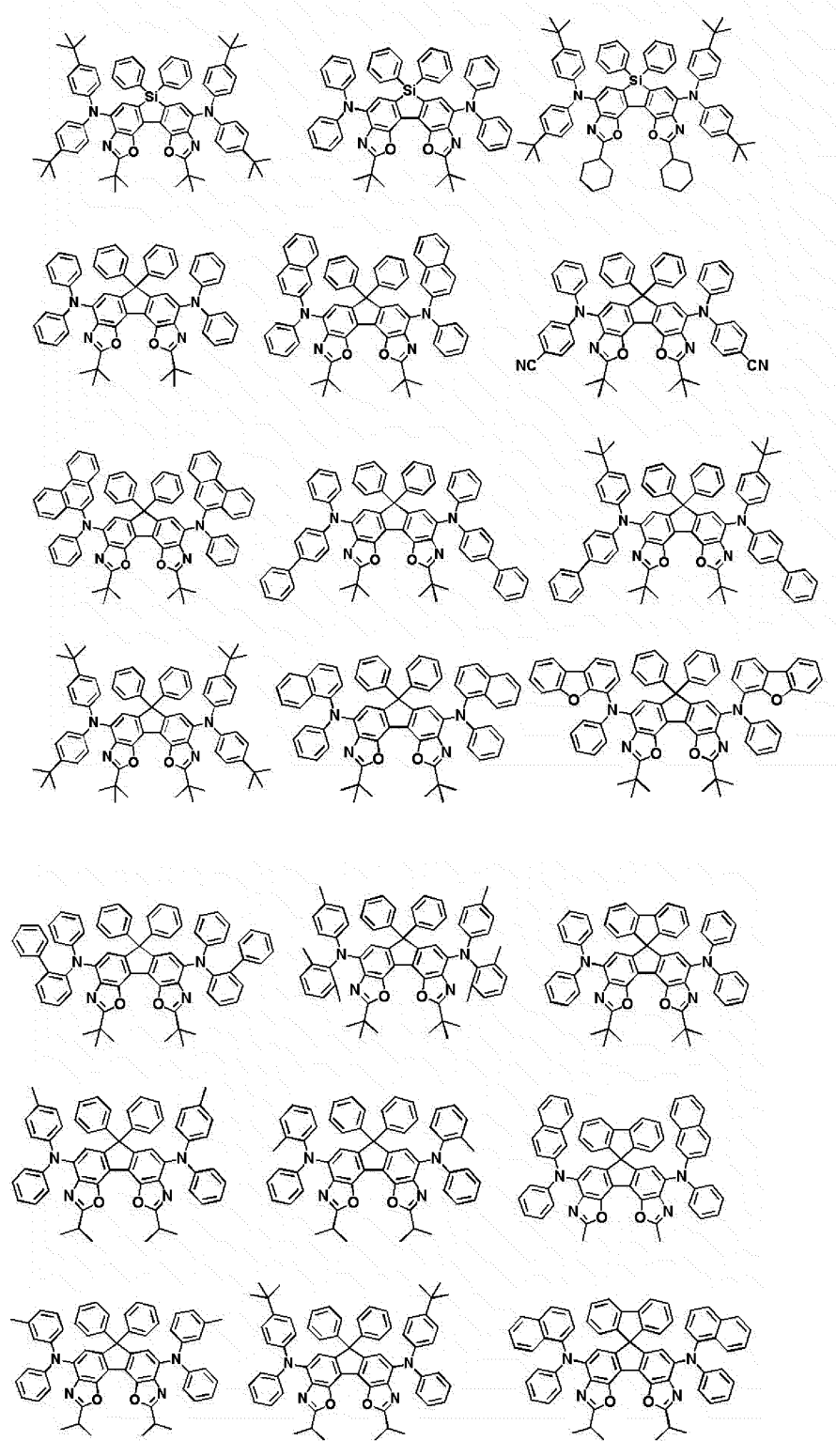
**청구항 5**

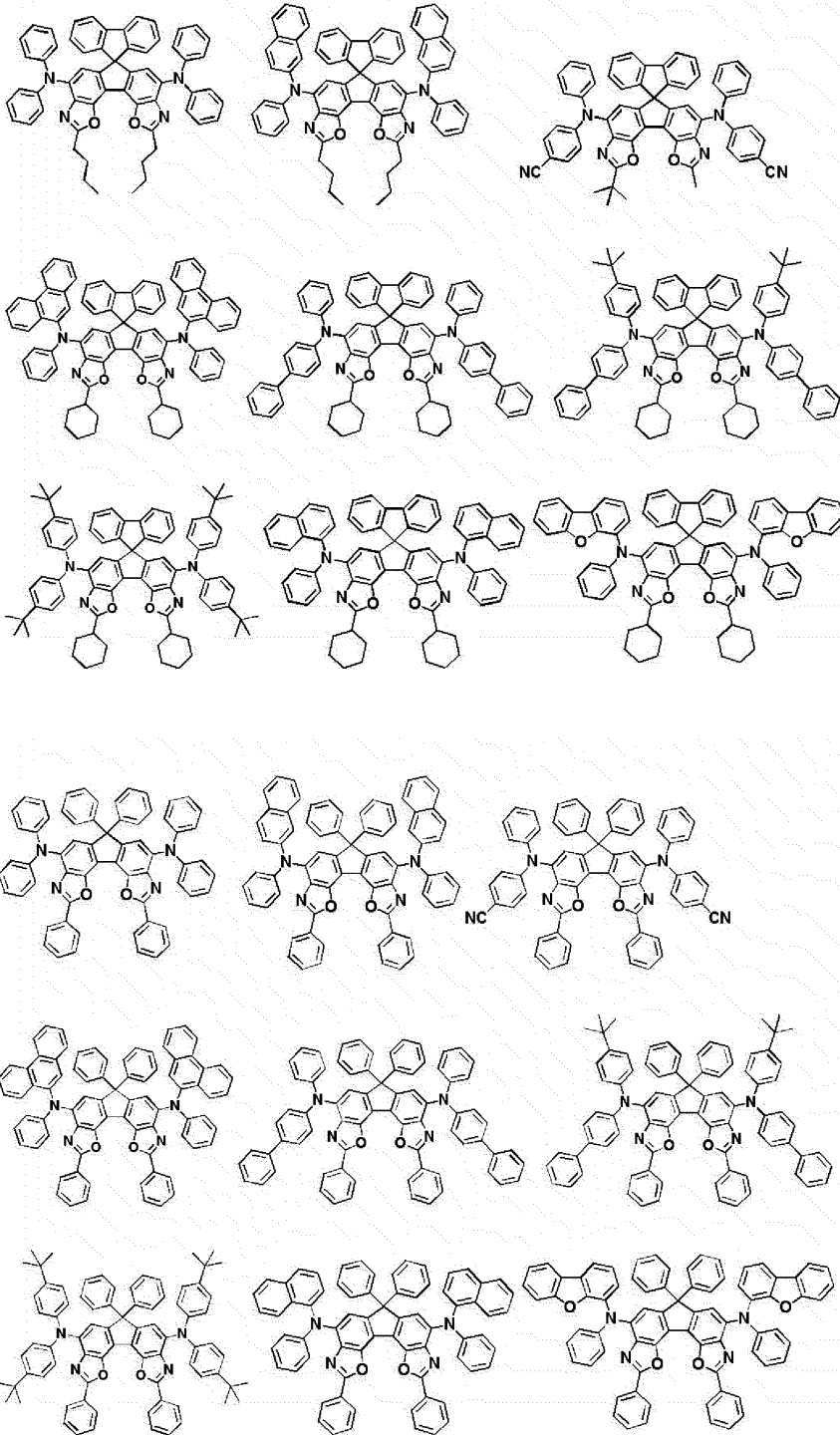
청구항 1에 있어서, 상기 R21 및 R22는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 10의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기인 것인 헤테로고리 화합물.

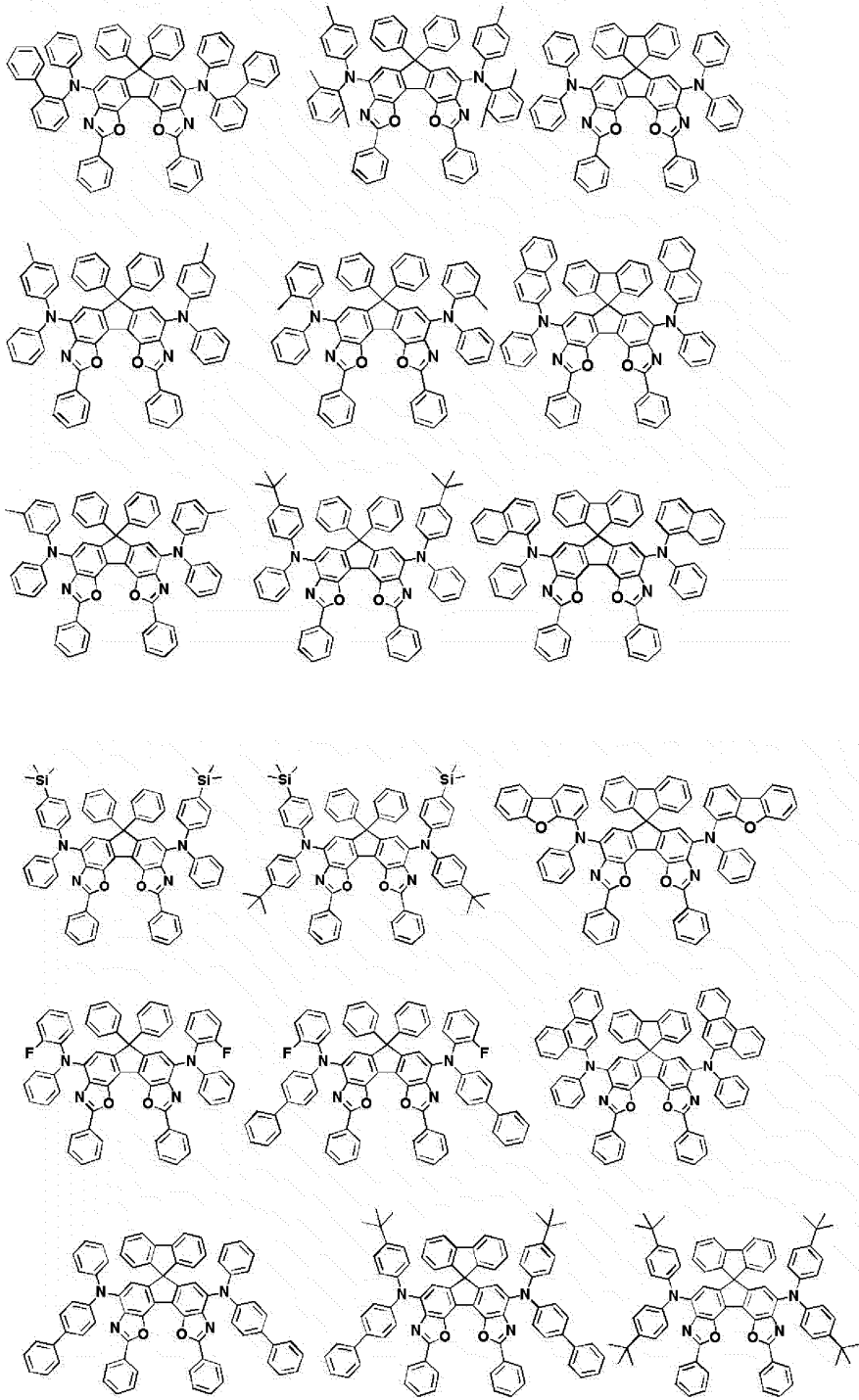
청구항 6

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 헤테로고리 화합물:

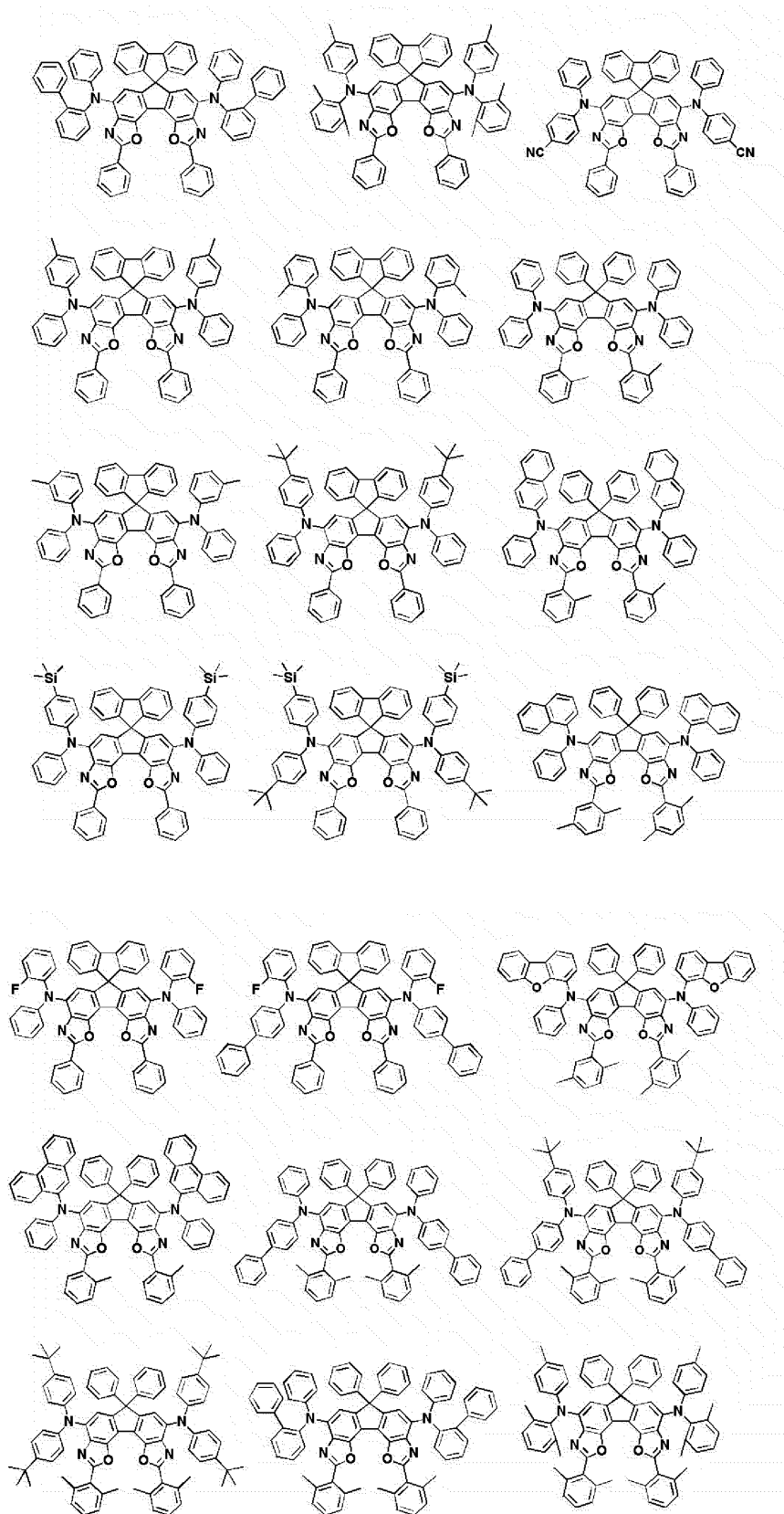


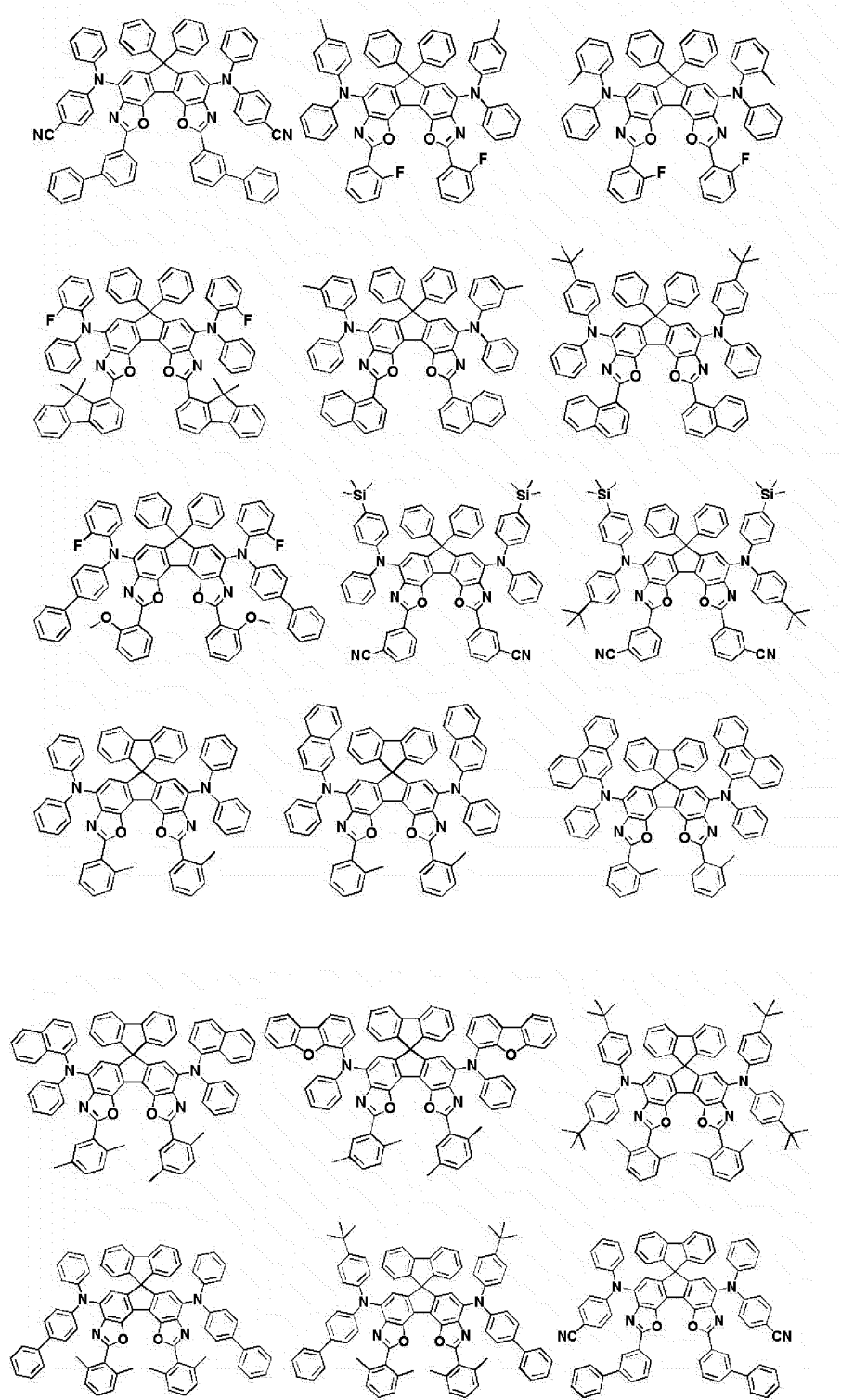


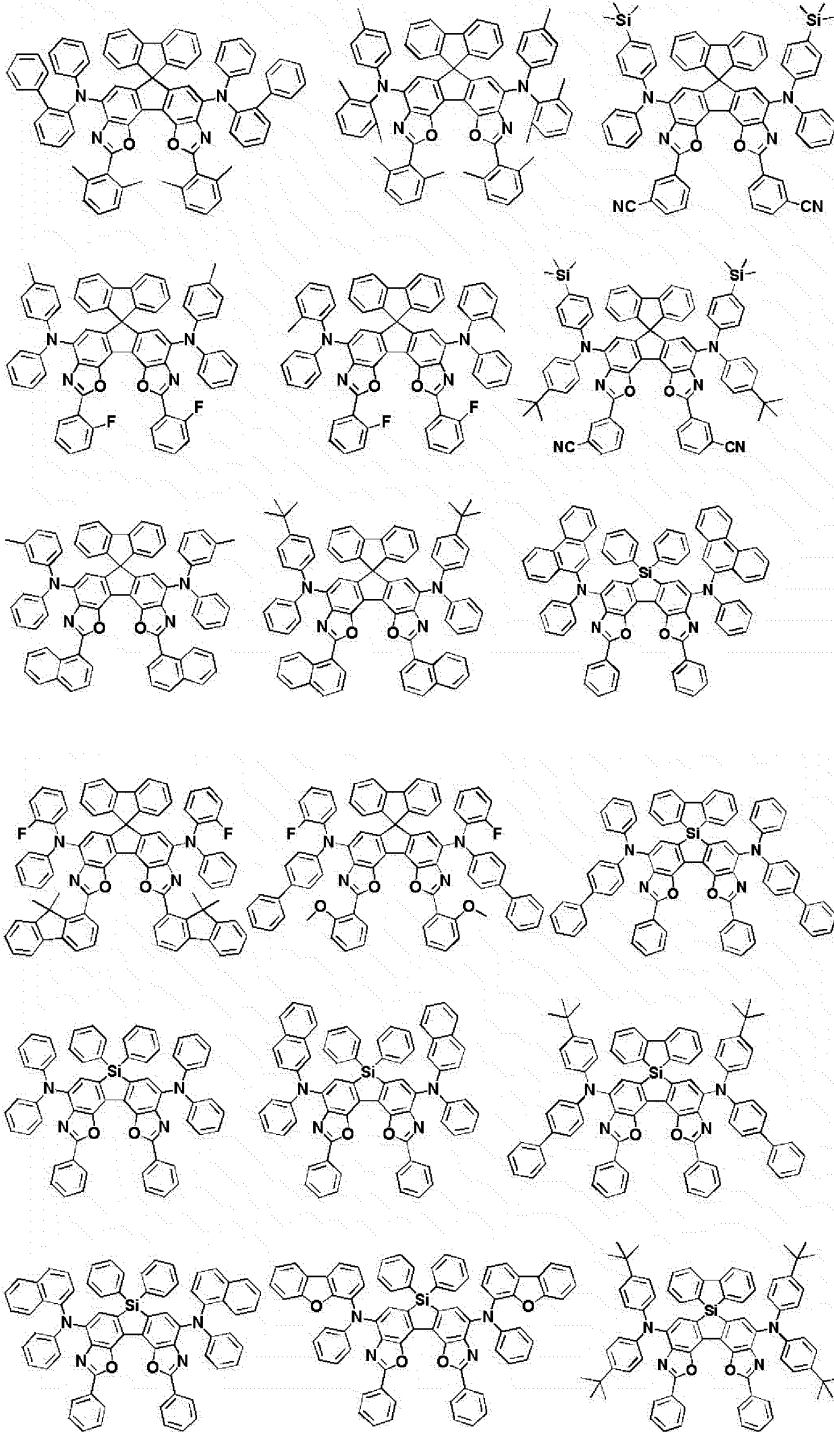


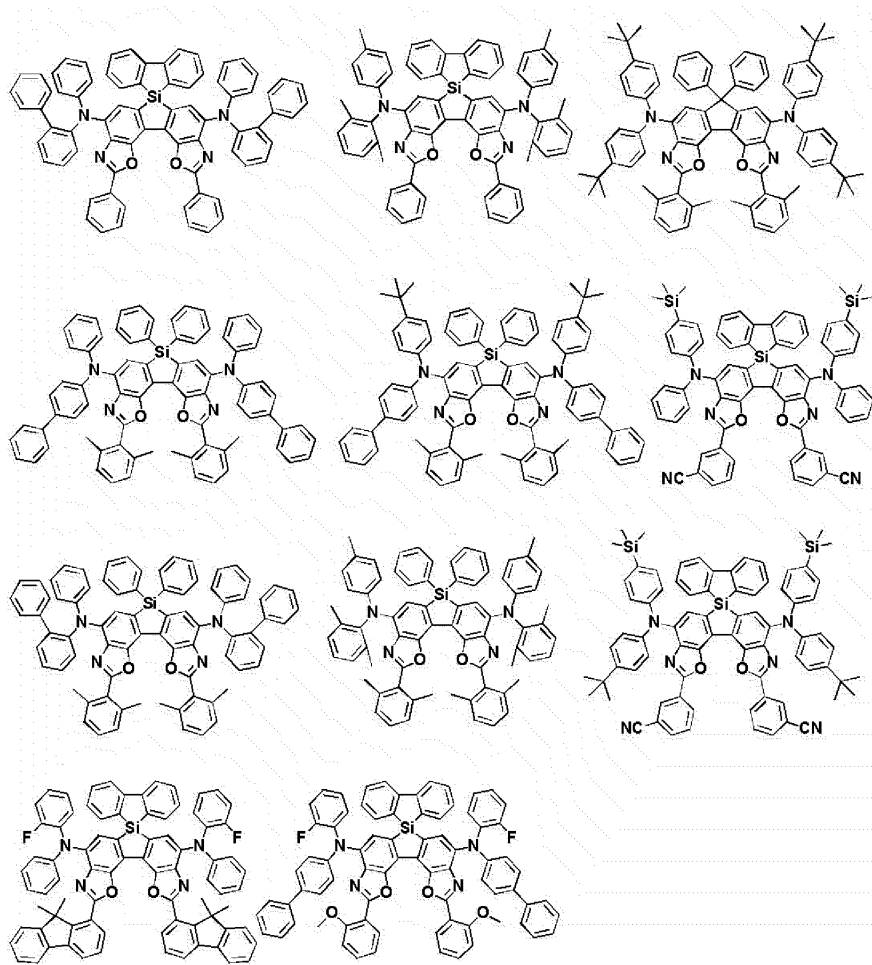












**청구항 7**

제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상이 청구항 1 내지 3, 5 및 6 중 어느 한 항에 따른 헤테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

**청구항 8**

청구항 7에 있어서,

상기 유기물층은 정공주입층 또는 정공수송층을 포함하고, 상기 정공주입층 또는 정공수송층은 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

**청구항 9**

청구항 7에 있어서,

상기 유기물층은 전자수송층 또는 전자주입층을 포함하고, 상기 전자수송층 또는 전자주입층은 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

**청구항 10**

청구항 7에 있어서,

상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

**발명의 설명**

**기술분야**

[0001] 본 명세서는 2017년 4월 27일 한국 특허청에 제출된 한국 특허 출원 제10-2017-0054504호의 출원일 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.

[0002] 본 명세서는 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0003] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.

[0004] 상기와 같은 유기 발광 소자를 위한 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0005] (특허문헌 0001) 한국 특허공개공보 제2000-0051826호

**발명의 내용**

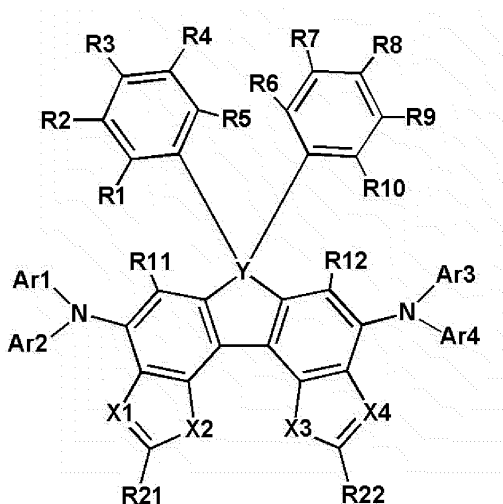
**해결하려는 과제**

[0006] 본 명세서에는 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자가 기재된다.

**과제의 해결 수단**

[0007] 본 명세서의 일 실시상태는 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 제공한다.

[0008] [화학식 1]



[0009] 상기 화학식 1에 있어서,  
 [0010] Y는 C 또는 Si이고,  
 [0011] R11 및 R12는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 시아노기; 할로겐기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환

된 아틸기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아틸아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아틸아민기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

[0013] X1 및 X4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR, P 또는 N이고,

[0014] X2 및 X3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR'R", O, S, PRa, PORb 또는 NRc이며,

[0015] R, R', R", Ra, Rb, Rc, R21, R22, Ar1 내지 Ar4 및 R1 내지 R10은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 시아노기; 할로젠기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아틸기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아틸아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아틸아민기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이거나, 인접한 치환기는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있다.

[0016] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

**발명의 효과**

[0017] 본 명세서에 기재된 헤테로고리 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있다. 적어도 하나의 실시상태에 따른 헤테로고리 화합물은 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동전압 및/또는 수명 특성을 향상시킬 수 있다. 특히, 본 명세서에 기재된 화합물은 정공주입, 정공수송, 정공주입과 정공수송, 전자억제, 발광, 정공억제, 전자수송, 또는 전자주입 재료로 사용될 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

[0018] 도 1은 기관(1), 양극(2), 발광층(3) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

도 2는 기관 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자수송층(8) 및 음극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0019] 이하 본 명세서에 대하여 더욱 상세히 설명한다.

[0020] 본 명세서는 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 제공한다. 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 유기 발광 소자의 유기물층에 사용하는 경우, 유기 발광 소자의 효율이 향상될 뿐만 아니라, 낮은 구동전압을 가지고, 우수한 수명특성을 갖는다.

[0021] 본 명세서에 있어서, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함" 한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성 요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.

[0022] 본 명세서에 있어서, 어떤 부재가 다른 부재 "상에" 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부재가 다른 부재에 접해 있는 경우뿐 아니라 두 부재 사이에 또 다른 부재가 존재하는 경우도 포함한다.

[0023] 본 명세서에서 치환기의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0024] 상기 "치환" 이라는 용어는 화합물의 탄소 원자에 결합된 수소 원자가 다른 치환기로 바뀌는 것을 의미하며, 치환되는 위치는 수소 원자가 치환되는 위치 즉, 치환기가 치환 가능한 위치라면 한정하지 않으며, 2 이상 치환되는 경우, 2 이상의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

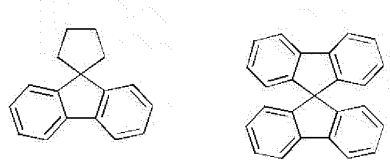
[0025] 상기 치환기들의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0026] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된" 이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 시아노기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아틸아민기; 치환 또는 비치환된 아틸아민기; 치환 또는 비치환된 아틸기; 및 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1 또는 2 이상의 치환기로 치환되었거나 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환되거나, 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 바이페닐기일 수 있다. 즉, 바이페닐기는 아틸기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수도 있다.

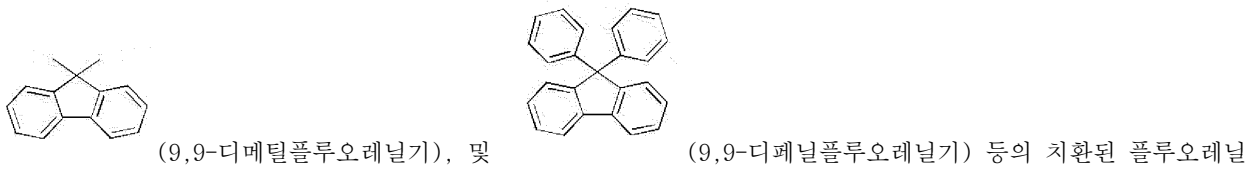
- [0027] 본 명세서에 있어서, 할로겐기의 예로는 불소(F), 염소(Cl), 브롬(Br) 또는 요오드(I)가 있다.
- [0028] 본 명세서에 있어서, 실릴기는  $-SiR_aR_bR_c$ 의 화학식으로 표시될 수 있고, 상기  $R_a$ ,  $R_b$  및  $R_c$ 는 각각 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다. 상기 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.
- [0029] 본 명세서에 있어서, 붕소기는  $-BR_aR_b$ 의 화학식으로 표시될 수 있고, 상기  $R_a$  및  $R_b$ 는 각각 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다. 상기 붕소기는 구체적으로 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.
- [0030] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 6이다. 알킬기의 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-프로필기, 이소프로필기, 부틸기, n-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, sec-부틸기, 1-메틸-부틸기, 1-에틸-부틸기, 펜틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, 네오펜틸기, tert-펜틸기, 헥실기, n-헥실기, 1-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, 3,3-디메틸부틸기, 2-에틸부틸기, 헵틸기, n-헵틸기, 1-메틸헥실기, 시클로헵틸메틸기, 시클로헥실메틸기, 옥틸기, n-옥틸기, tert-옥틸기, 1-메틸헵틸기, 2-에틸헥실기, 2-프로필헵틸기, n-노닐기, 2,2-디메틸헵틸기, 1-에틸-프로필기, 1,1-디메틸-프로필기, 이소헥실기, 4-메틸헥실기, 5-메틸헥실기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0031] 본 명세서에 있어서, 상기 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 40인 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 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0032] 본 명세서에 기재된 알킬기, 알콕시기 및 그 외 알킬기 부분을 포함하는 치환체는 직쇄 또는 분쇄 형태를 모두 포함한다.
- [0033] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 일 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 40이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 6이다. 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.
- [0034] 본 명세서에 있어서, 알킬아민기는 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 내지 40인 것이 바람직하다. 알킬아민기의 구체적인 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 에틸아민기, 디에틸아민기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0035] 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 2 이상의 아릴기를 포함하는 아릴아민기는 단환식 아릴기, 다환식 아릴기, 또는 단환식 아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다.
- [0036] 아릴아민기의 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.
- [0037] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 디헤테로아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리헤테로아릴아민기가 있다. 상기 헤테로아릴아민기 중의 헤테로아릴기는 단환식 헤테로 고리기일 수 있고, 다환식 헤테로 고리기일 수 있다. 상기 2 이상의 헤테로 고리를 포함하는 헤테로아릴아민기는 단환식 헤테로 고리기, 다환식 헤테로 고리기, 또는 단환식 헤테로 고리와 다환식 헤테로 고리를 동시에 포함할 수 있다.

[0038] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 60인 것이 바람직하며, 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 20이다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기로는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 피아레닐기, 페틸레닐기, 트리페닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0039] 본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있다.



[0040] 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우, , 등의 스피로플루오레닐기,



기가 될 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0041] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리기는 이종원자로 N, O, P, S, Si 및 Se 중 1개 이상을 포함하는 헤테로고리기로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 헤테로고리기의 탄소수는 2 내지 30이다. 헤테로고리기의 예로는 예로는 피리딘기, 피롤기, 피리미딘기, 피리다지닐기, 퓨라닐기, 티오펜기, 이미다졸기, 피라졸기, 옥사졸기, 이소옥사졸기, 티아졸기, 이소티아졸기, 트리아졸기, 옥사디아졸기, 티아디아졸기, 디티아졸기, 테트라졸기, 피라닐기, 티오피라닐기, 피라지닐기, 옥사지닐기, 티아지닐기, 디옥시닐기, 트리아지닐기, 테트라지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴놀릴기, 퀴나졸리닐기, 퀴녹살리닐기, 나프티리디닐기, 아크리디닐기, 크산테닐기, 페난트리디닐기, 디아자나프탈레닐기, 트리아자인테닐기, 인돌기, 인돌리닐기, 인돌리지닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 벤조티아졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈이미다졸기, 벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 카바졸기, 벤조카바졸기, 디벤조카바졸기, 인돌로카바졸기, 인데노카바졸기, 페나지닐기, 이미다조피리딘기, 페녹사지닐기, 페난트리딘기, 페난트롤린(phenanthroline)기, 페노티아진(phenothiazine)기, 이미다조피리딘기, 이미다조페난트리딘기, 벤조이미다조퀴나졸리닐기, 또는 벤조이미다조페난트리딘기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0042] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴기는 방향족인 것을 제외하고는 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0043] 본 명세서에 있어서, "인접한" 기는 해당 치환기가 치환된 원자와 직접 연결된 원자에 치환된 치환기, 해당 치환기와 입체구조적으로 가장 가깝게 위치한 치환기, 또는 해당 치환기가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기를 의미할 수 있다. 예컨대, 벤젠고리에서 오쏘(ortho)위치로 치환된 2개의 치환기 및 지방족 고리에서 동일 탄소에 치환된 2개의 치환기는 서로 "인접한"기로 해석될 수 있다.

[0044] 본 명세서에 있어서, 인접한 기가 서로 결합하여 형성되는 치환 또는 비치환된 고리에서, "고리"는 치환 또는 비치환된 탄화수소고리; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리를 의미한다.

[0045] 본 명세서에 있어서, 탄화수소고리는 방향족, 지방족 또는 방향족과 지방족의 축합고리일 수 있으며, 상기 1가가 아닌 것을 제외하고 상기 시클로알킬기 또는 아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.

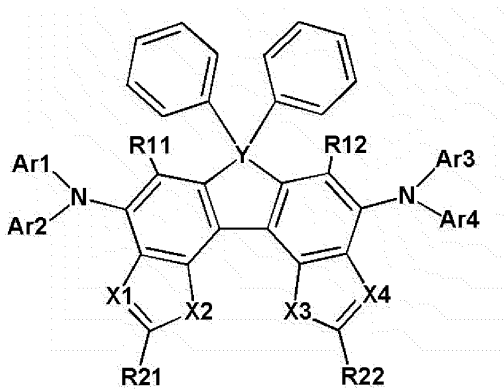
[0046] 본 명세서에 있어서, 방향족 탄화수소고리는 2가인 것을 제외하고는 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0047] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리는 탄소가 아닌 원자, 이종원자를 1 이상 포함하는 것으로서, 구체적으로 상기 이종 원자는 O, N, Se 및 S, Si 등으로 이루어진 군에서 선택되는 원자를 1 이상 포함할 수 있다. 상기 헤테로고리는 단환 또는 다환일 수 있으며, 방향족, 지방족 또는 방향족과 지방족의 축합고리일 수 있으며, 1가가 아



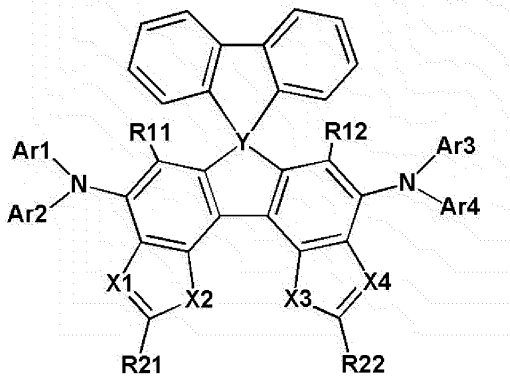
닌 것을 제외하고 상기 헤테로아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.

- [0048] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1 내지 R10은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이거나 인접한 치환기는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.
- [0049] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1 내지 R10은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴기이거나, 인접한 치환기는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.
- [0050] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1 내지 R10은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 메틸기; 치환 또는 비치환된 에틸기; 치환 또는 비치환된 프로필기; 치환 또는 비치환된 페닐기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기이거나, 인접한 치환기는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.
- [0051] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1 내지 R10은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 메틸기; 에틸기; 프로필기; 페닐기; 또는 나프틸기이거나, 인접한 치환기는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.
- [0052] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1 내지 R10은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 메틸기; 에틸기; 프로필기; 페닐기; 또는 나프틸기이거나, 상기 R5 및 R6는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.
- [0053] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R4 및 R7 내지 R10은 수소이고, 상기 R5 및 R6는 서로 결합하여 5각의 고리를 형성한다.
- [0054] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R5 및 R6는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.
- [0055] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R5 및 R6는 서로 결합하여 5각의 고리를 형성한다.
- [0056] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시될 수 있다.
- [0057] [화학식 2]



[0058]

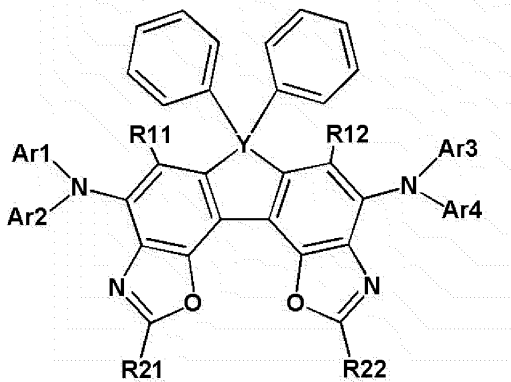
[0059] [화학식 3]



- [0060]
- [0061] 상기 화학식 2 및 3에 있어서,
- [0062] Ar1 내지 Ar4, R11, R12, X1 내지 X4, Y, R21 및 R22는 상기 화학식 1에서의 정의와 같다.
- [0063] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 내지 Ar4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이다.
- [0064] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 내지 Ar4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이다.
- [0065] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1 내지 Ar4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이다.
- [0066] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 내지 Ar4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 이종원소로 O, S 및 N 중 1 이상을 포함하는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이다.
- [0067] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 내지 Ar4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 페난트레닐기; 또는 치환 또는 비치환된 디벤조플라닐기이다.
- [0068] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1 내지 Ar4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 할로겐기, 시아노기, 실릴기 또는 알킬기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 할로겐기, 시아노기, 실릴기 또는 알킬기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 할로겐기, 시아노기, 실릴기 또는 알킬기로 치환 또는 비치환된 나프틸기; 할로겐기, 시아노기, 실릴기 또는 알킬기로 치환 또는 비치환된 페난트레닐기; 또는 할로겐기, 시아노기, 실릴기 또는 알킬기로 치환 또는 비치환된 디벤조플라닐기이다.
- [0069] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 내지 Ar4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 불소(F), 시아노기, 트리메틸실릴기, 메틸기 또는 부틸기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 불소(F), 시아노기, 트리메틸실릴기, 메틸기 또는 부틸기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 불소(F), 시아노기, 트리메틸실릴기, 메틸기 또는 부틸기로 치환 또는 비치환된 나프틸기; 불소(F), 시아노기, 트리메틸실릴기, 메틸기 또는 부틸기로 치환 또는 비치환된 페난트레닐기; 또는 불소(F), 시아노기, 트리메틸실릴기, 메틸기 또는 부틸기로 치환 또는 비치환된 디벤조플라닐기이다.
- [0070] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R11 및 R12는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 알킬기이다.
- [0071] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R11 및 R12는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기이다.
- [0072] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R11 및 R12는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 메틸기; 치환 또는 비치환된 에틸기; 또는 치환 또는 비치환된 부틸기이다.
- [0073] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R11 및 R12는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 메

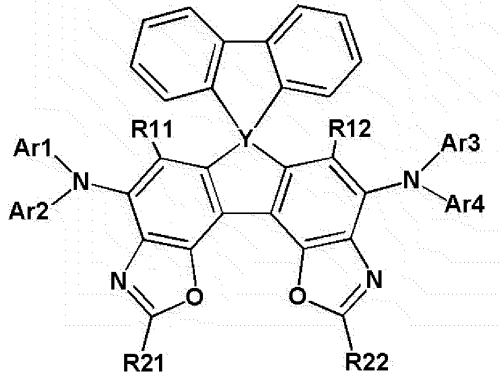
틸기; 에틸기; 또는 t-부틸기이다.

- [0074] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R11 및 R12는 수소이다.
- [0075] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X1 및 X4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR, P 또는 N이다.
- [0076] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X2 및 X3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR'R", O, S, PRa, PORb 또는 NRc이다.
- [0077] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R, R', R", Ra, Rb 및 Rc는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이다.
- [0078] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R, R', R", Ra, Rb 및 Rc는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이다.
- [0079] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R, R', R", Ra, Rb 및 Rc는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 메틸기; 치환 또는 비치환된 에틸기; 치환 또는 비치환된 부틸기; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [0080] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R, R', R", Ra, Rb 및 Rc는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 메틸기; 에틸기; 부틸기; 페닐기; 바이페닐기; 또는 나프틸기이다.
- [0081] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X1 및 X4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR 또는 N이다.
- [0082] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 X1 및 X4는 N이다.
- [0083] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X2 및 X3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 O 또는 S이다.
- [0084] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 X2 및 X3은 O이다.
- [0085] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 X1 및 X4는 N이고, X2 및 X3는 O이다.
- [0086] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 4 또는 화학식 5로 표시될 수 있다.
- [0087] [화학식 4]



[0088]

[0089] [화학식 5]



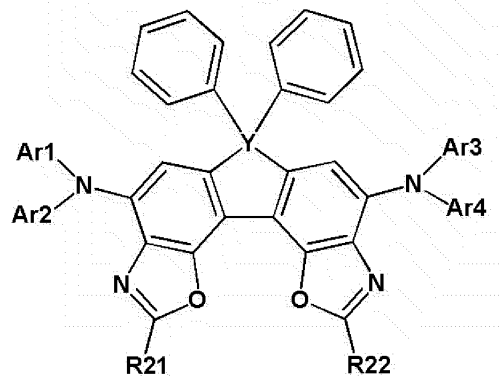
[0090]

[0091] 상기 화학식 4 및 5에 있어서,

[0092] Ar1 내지 Ar4, R11, R12, Y, R21 및 R22는 상기 화학식 1에서의 정의와 같다.

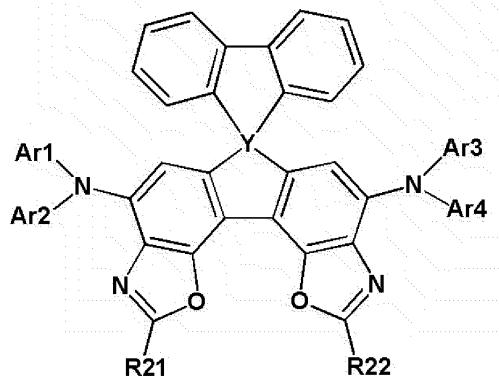
[0093] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 6 또는 화학식 7로 표시될 수 있다.

[0094] [화학식 6]



[0095]

[0096] [화학식 7]



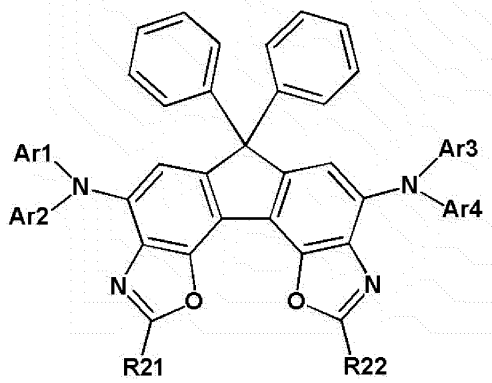
[0097]

[0098] 상기 화학식 6 및 7에 있어서,

[0099] Ar1 내지 Ar4, R21, R22 및 Y는 상기 화학식 1에서의 정의와 같다.

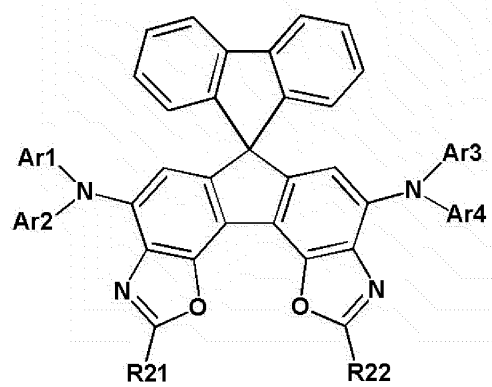
[0100] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 8 내지 화학식 11 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0101] [화학식 8]



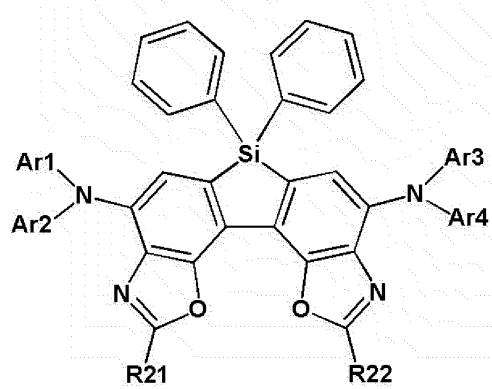
[0102]

[0103] [화학식 9]



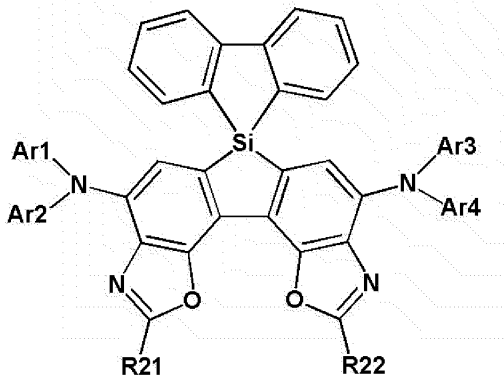
[0104]

[0105] [화학식 10]



[0106]

[0107] [화학식 11]



[0108]

[0109] 상기 화학식 8 내지 11에 있어서,

[0110] Ar1 내지 Ar4, R21 및 R22는 상기 화학식 1에서의 정의와 같다.

[0111] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R21 및 R22는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

[0112] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R21 및 R22는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이다.

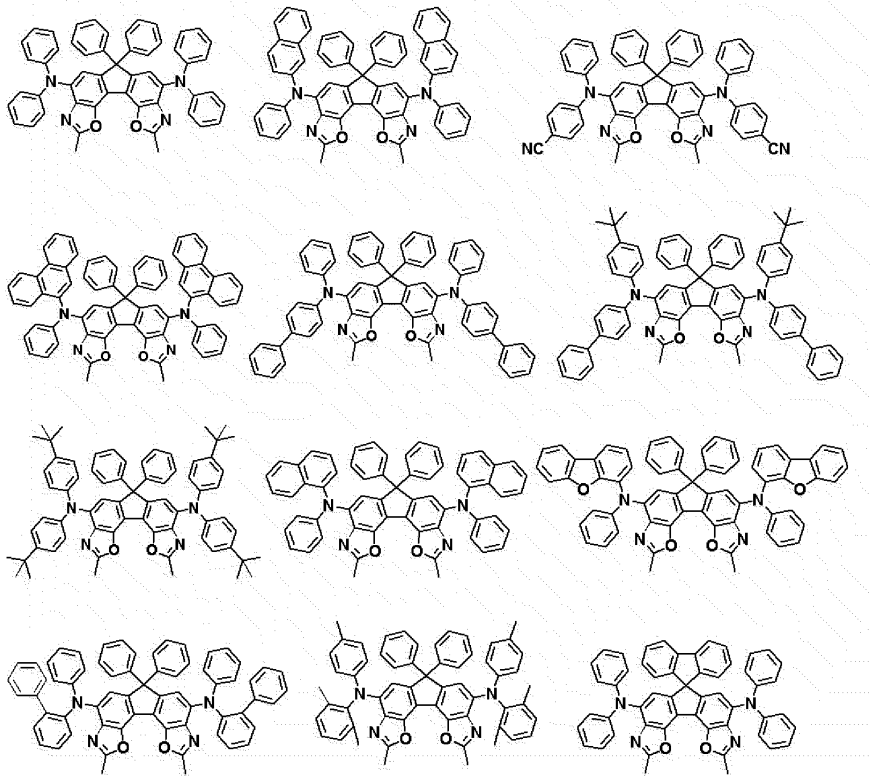
[0113] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R21 및 R22는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 10의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이다.

[0114] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R21 및 R22는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 메틸기; 치환 또는 비치환된 프로필기; 치환 또는 비치환된 부틸기; 치환 또는 비치환된 사이클로헥실기; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.

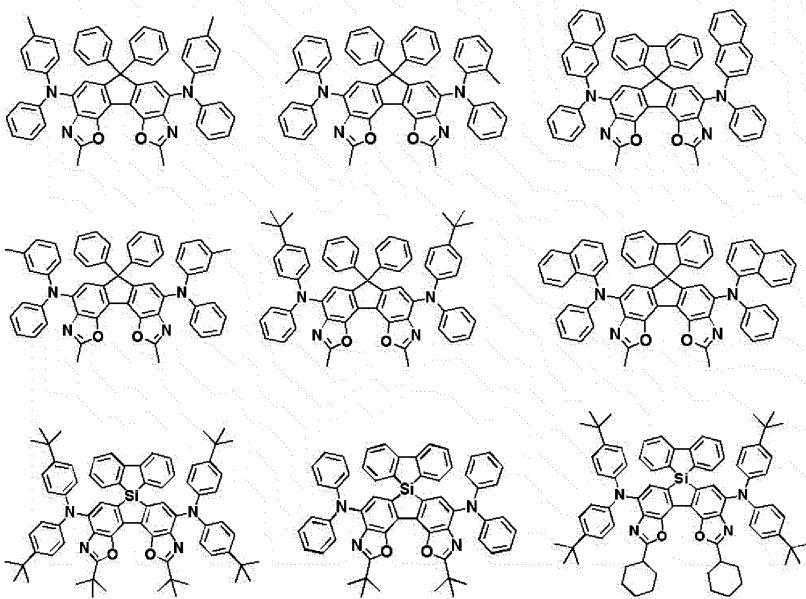
[0115] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R21 및 R22는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 할로젠기, 시아노기, 알킬기, 또는 알콕시기로 치환 또는 비치환된 메틸기; 할로젠기, 시아노기, 알킬기, 또는 알콕시기로 치환 또는 비치환된 프로필기; 할로젠기, 시아노기, 알킬기, 또는 알콕시기로 치환 또는 비치환된 부틸기; 할로젠기, 시아노기, 알킬기, 또는 알콕시기로 치환 또는 비치환된 사이클로헥실기; 할로젠기, 시아노기, 알킬기, 또는 알콕시기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 할로젠기, 시아노기, 알킬기, 또는 알콕시기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 할로젠기, 시아노기, 알킬기, 또는 알콕시기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 또는 할로젠기, 시아노기, 알킬기, 또는 알콕시기로 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.

[0116] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R21 및 R22는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 메틸기; 이소프로필기; tert-부틸기; 사이클로헥실기; 불소(F), 시아노기, 메틸기, 또는 메톡시기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 불소(F), 시아노기, 메틸기, 또는 메톡시기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 불소(F), 시아노기, 메틸기, 또는 메톡시기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 또는 불소(F), 시아노기, 메틸기, 또는 메톡시기로 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.

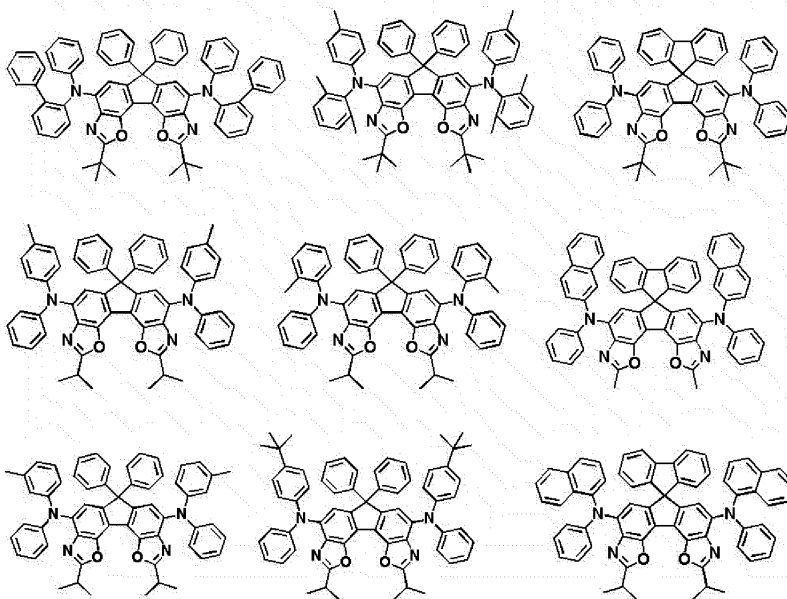
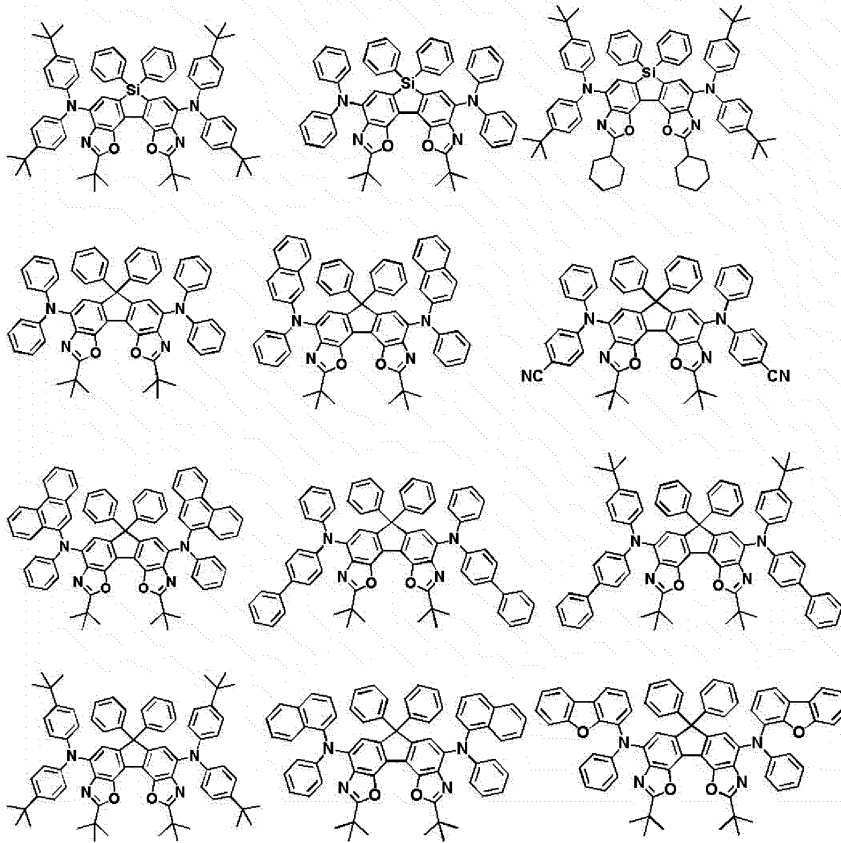
[0117] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 구조들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.



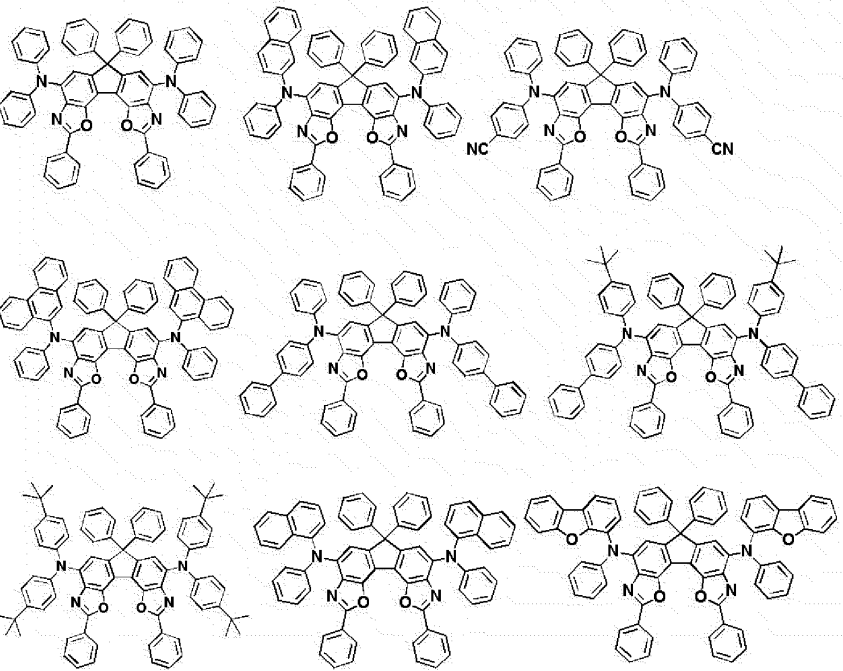
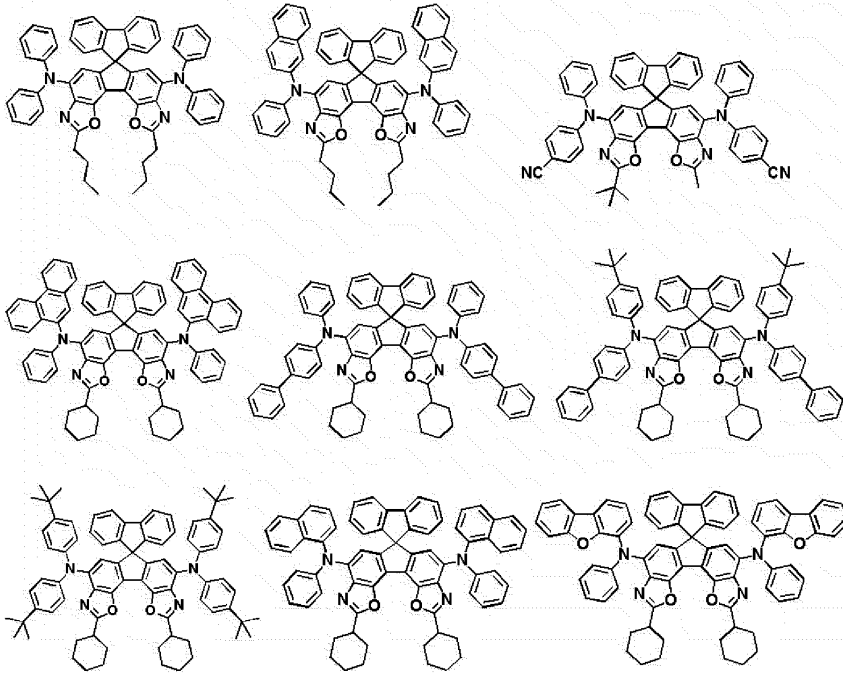
[0118]

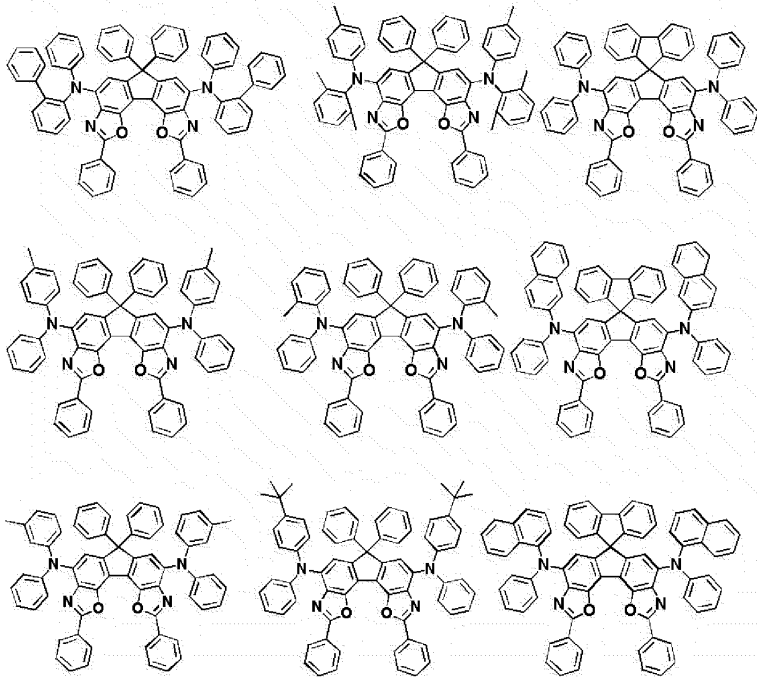


[0119]

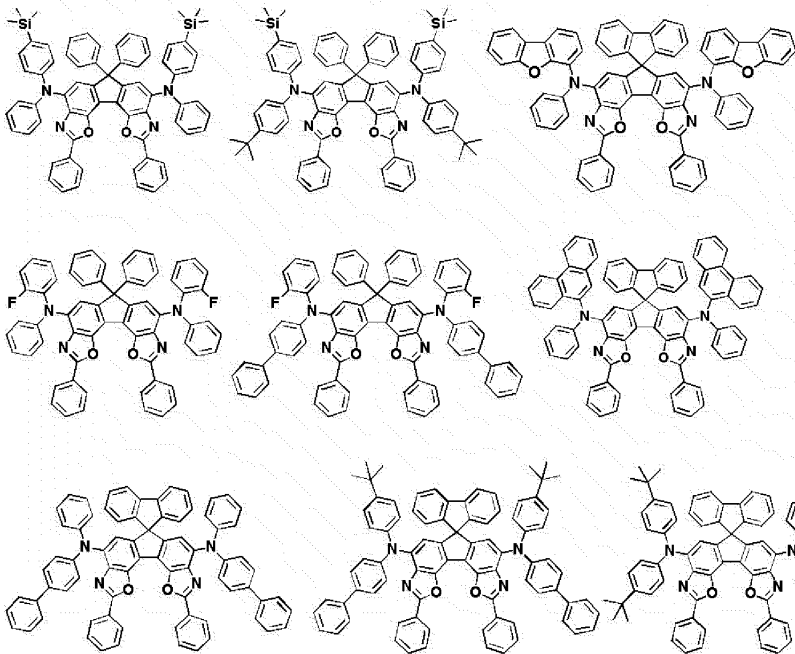




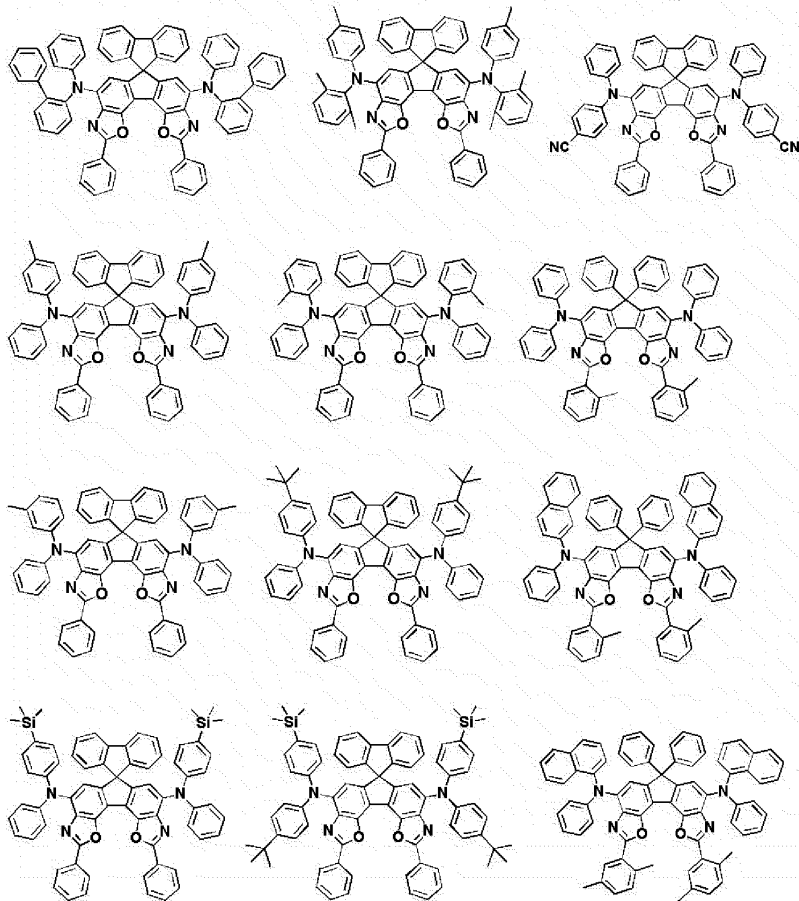




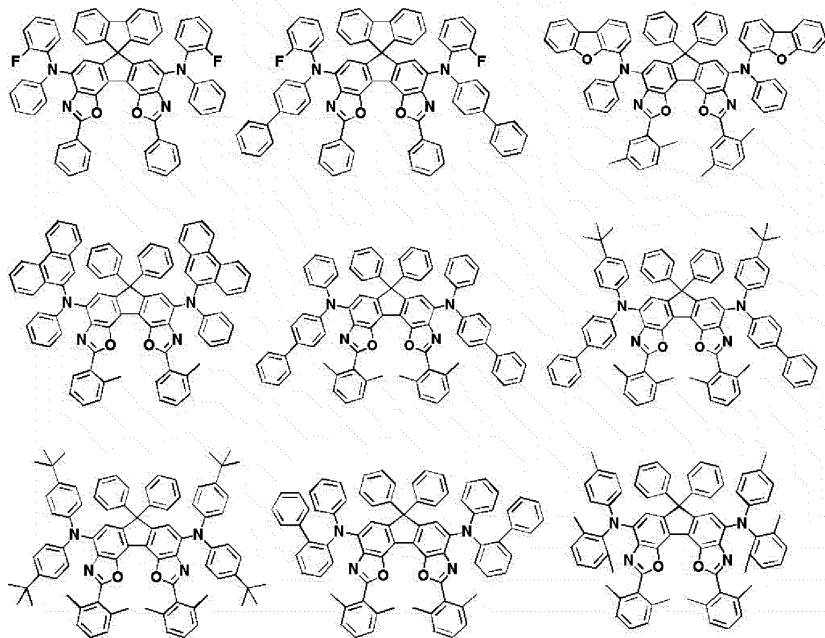
[0124]



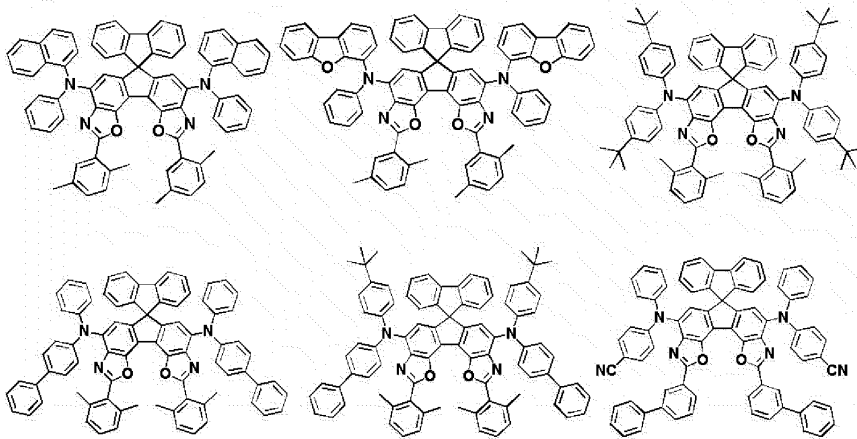
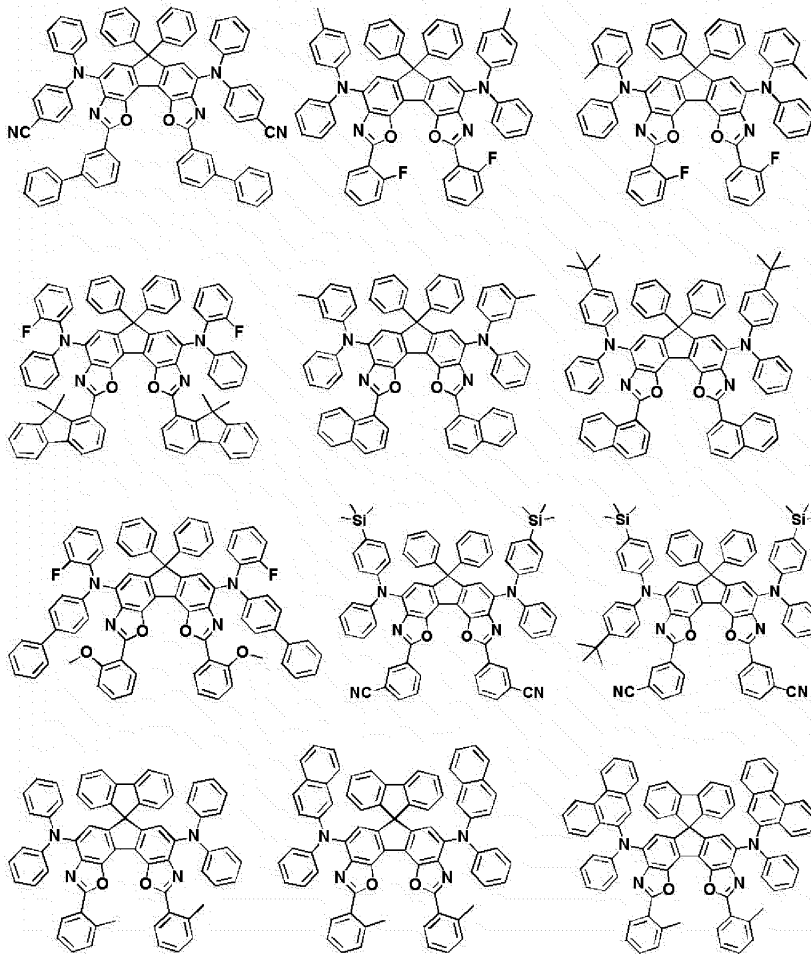
[0125]

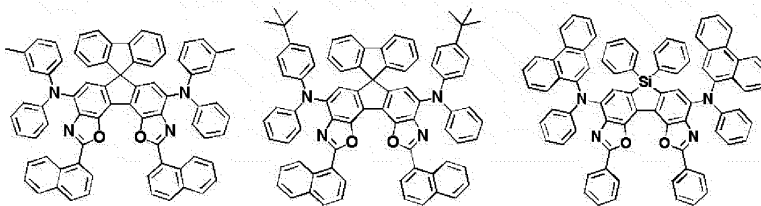
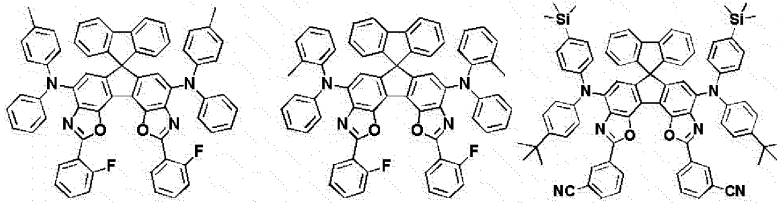
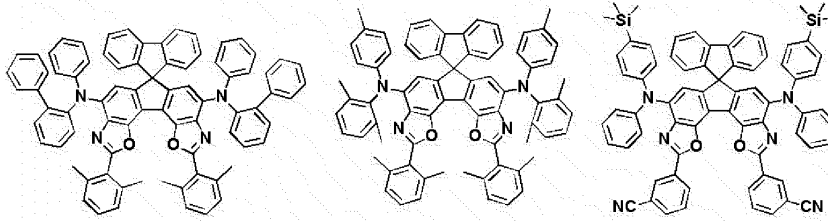


[0126]

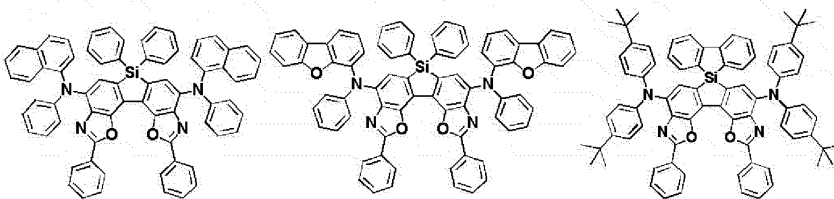
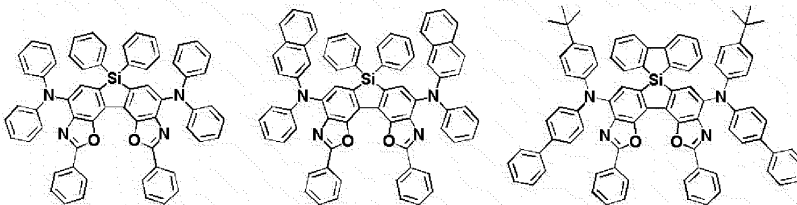
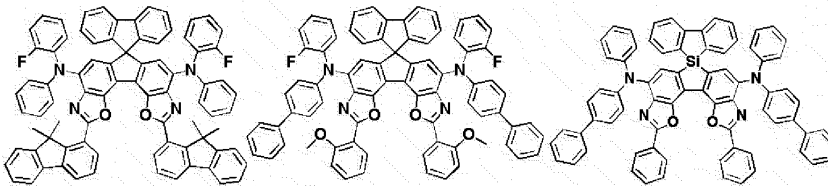


[0127]

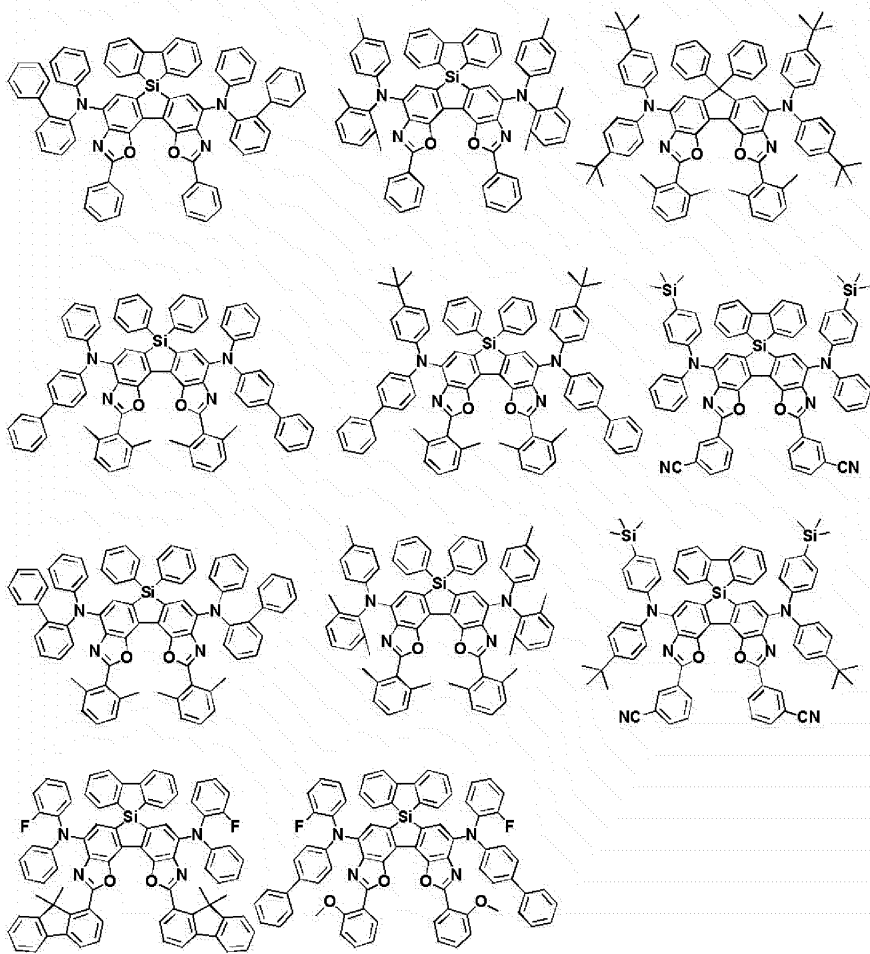




[0130]



[0131]



- [0132]
- [0133] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화학식 1의 코어구조는 후술하는 구체 화합물들의 합성방법과 같은 방법으로 제조될 수 있다.
- [0134] 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물의 치환기는 당 기술분야에 알려져 있는 방법에 의하여 결합될 수 있으며, 치환기의 종류, 위치 또는 개수는 당 기술분야에 알려져 있는 기술에 따라 변경될 수 있다.
- [0135] 화합물의 컨쥬게이션 길이와 에너지 밴드갭은 밀접한 관계가 있다. 구체적으로, 화합물의 컨쥬게이션 길이가 길수록 에너지 밴드갭이 작아진다.
- [0136] 본 발명에서는 상기와 같이 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드갭을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 또한, 본 발명에서는 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 화합물의 HOMO 및 LUMO 에너지 준위도 조절할 수 있다.
- [0137] 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 주로 사용되는 치환기를 상기 코어 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 합성할 수 있다.
- [0138] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [0139] 본 발명의 유기 발광 소자는 전술한 화합물을 이용하여 한 층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기 발광 소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- [0140] 상기 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, 물

코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.

- [0141] 본 발명의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층을 포함할 수 있다.
- [0142] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 전자수송층 또는 전자주입층을 포함할 수 있고, 상기 전자수송층 또는 전자주입층은 상기 화학식 1로 표시되는 헥테로고리 화합물을 포함할 수 있다.
- [0143] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 정공주입층 또는 정공수송층을 포함할 수 있고, 상기 정공주입층 또는 정공수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 헥테로고리 화합물을 포함할 수 있다.
- [0144] 또 하나의 실시 상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 헥테로고리 화합물을 포함한다. 하나의 예로서, 상기 화학식 1로 표시되는 헥테로고리 화합물은 발광층의 도펀트로서 포함될 수 있다.
- [0145] 또 하나의 실시 상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 헥테로고리 화합물을 도펀트로서 포함하고, 다른 유기 화합물을 호스트로 포함할 수 있다. 이 경우, 발광층 내에 호스트 100 중량부를 기준으로, 도펀트 0.1 내지 10 중량부로 포함할 수 있고, 바람직하게는 1 내지 5 중량부로 포함할 수 있다.
- [0146] 또 하나의 예로서, 상기 화학식 1로 표시되는 헥테로고리 화합물을 포함하는 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 헥테로고리 화합물을 도펀트로서 포함하고, 형광 호스트 또는 인광 호스트를 포함할 수 있다.
- [0147] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 헥테로고리 화합물을 포함하는 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 헥테로고리 화합물을 도펀트로서 포함하고, 형광 호스트 또는 인광 호스트를 포함하며, 다른 유기화합물, 금속 또는 금속화합물을 도펀트로 포함할 수 있다.
- [0148] 또 하나의 예로서, 상기 화학식 1로 표시되는 헥테로고리 화합물을 포함하는 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 헥테로고리 화합물을 도펀트로서 포함하고, 형광 호스트 또는 인광 호스트를 포함하며, 이리듐계(Ir) 도펀트와 함께 사용할 수 있다.
- [0149] 본 발명의 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 도 2에 나타난 것과 같은 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [0150] 도 1에는 기판(1) 위에 양극(2), 발광층(3) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 헥테로고리 화합물은 상기 발광층(3)에 포함될 수 있다.
- [0151] 도 2에는 기판(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7), 전자 수송층(8) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 헥테로고리 화합물은 상기 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7) 또는 전자 수송층(8)에 포함될 수 있다.
- [0152] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수도 있다.
- [0153] 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용매 공정(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.
- [0154] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO : Al 또는 SnO<sub>2</sub> : Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오

펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0155] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

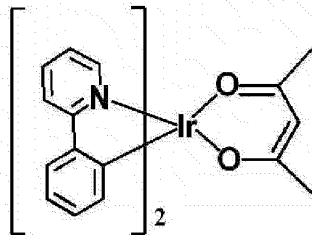
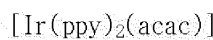
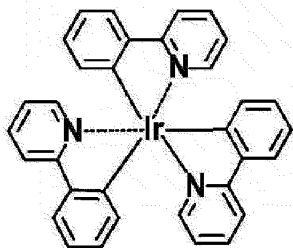
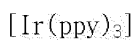
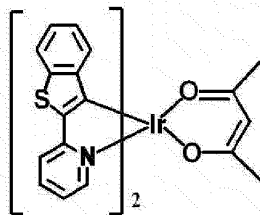
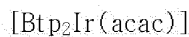
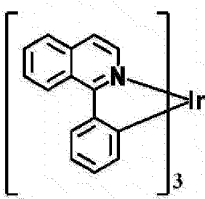
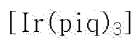
[0156] 상기 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입 받을 수 있는 물질로서, 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 핵사니트릴핵사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0157] 상기 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니며, 1층 이상의 층으로 형성될 수 있다.

[0158] 상기 발광층은 적색, 녹색 또는 청색을 발광할 수 있으며, 인광 물질 또는 형광 물질로 이루어질 수 있다. 상기 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq<sub>3</sub>); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BA1q; 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.

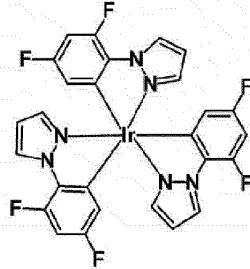
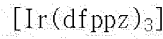
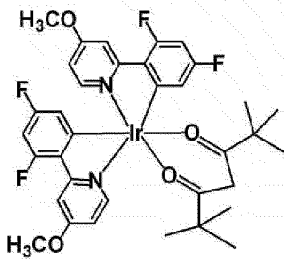
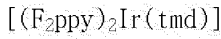
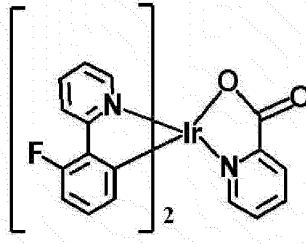
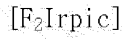
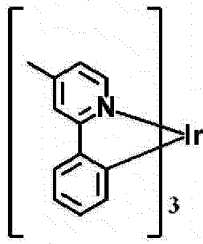
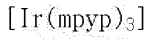
[0159] 발광층의 호스트 재료로는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0160] 발광층의 도펀트로 사용되는 이리듐계 착물은 하기와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0161]





[0162]

[0163]

상기 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq<sub>3</sub>를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0164]

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

[0165]

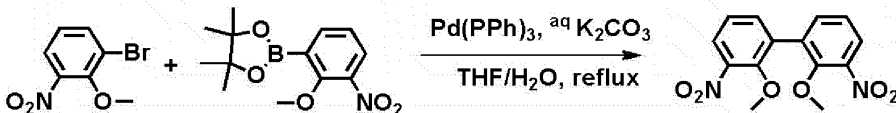
<합성예>

[0166]

합성예 1. 화합물 1의 합성

[0167]

1) 2,2'-다이메톡시-3,3'-디니트로-1,1'-바이페닐의 합성



화합물 1-1

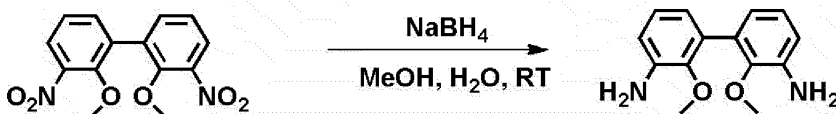
[0168]

[0169]

1-브로모-2-메톡시-3-니트로벤젠 (0.43 mol, 100.0 g)을 테트라하이드로퓨란(THF) 1L에 완전히 녹이고, 여기에 2-(2-메톡시-3-니트로페닐)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥사보로레인 (0.45 mol, 126 g), 칼륨 카보네이트 2 M 용액 200mL, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)[tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)](0.021 mol, 25 g)을 넣고 15시간 환류시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고, 농축한 후 컬럼 크로마토그래피를 통해(헥산:에틸아세테이트=Hex:EA=20:1) 화합물 1-1(104.7 g, 80 %)을 얻었다. MS [M] = 304

[0171]

2) 2,2'-다이메톡시-[1,1'-바이페닐]-3,3'-디아민의 합성



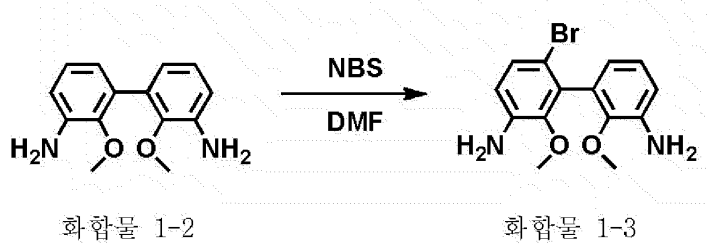
화합물 1-1

화합물 1-2

[0172]

[0173] 화합물 1-1 (0.3 mol, 91.0 g)을 MeOH/H<sub>2</sub>O 1L에 녹이고, NaBH<sub>4</sub> 4g을 천천히 넣어 주었다. 실온에서 5시간 교반 후 농축하고 컬럼 크로마토그래피를 통해(Hex:EA=10:1) 화합물 1-2(51.3 g,70 %)를 얻었다. MS [M] = 244

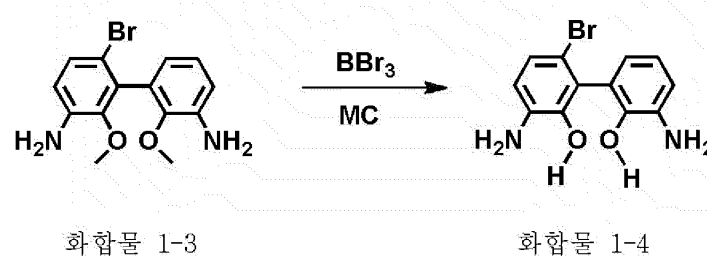
[0175] 2) 2,2'-다이메톡시-[1,1'-바이페닐]-3,3'-디아민의 합성



[0176]

[0177] 화합물 1-2 (0.2 mol, 49.0 g)을 다이메틸포름아마이드(DMF) 0.5L (0℃)에 녹이고, N-브로모숙신이미드(NBS)(0.2 mol, 35.6g)을 천천히 DMF 0.1L에 녹여 천천히 넣어 주었다. 실온에서 2시간 교반 후 H<sub>2</sub>O를 적가하여 고체화 시킨 후 여과하였다. 고체를 에틸아세티트(EA)에 녹인 후 Na<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 수용액으로 처리 후 MgSO<sub>4</sub>로 수분 제거 및 농축하고 컬럼 크로마토그래피를 통해(Hex:EA=10:1) 화합물 1-3 (58.1 g,90 %)를 얻었다. MS [M] = 323.19

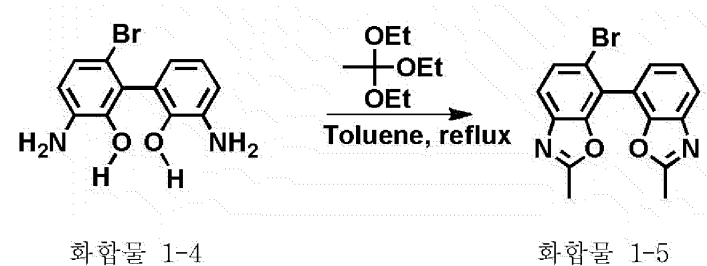
[0179] 4) 3,3'-디아미노-6-브로모-[1,1'-바이페닐]-2,2'-디올 의 합성



[0180]

[0181] 화합물 1-3 (0.5 mol, 161.6 g)을 메틸렌 클로라이드(MC) 1L (0℃)에 녹이고, BBr<sub>3</sub> (0.6 mol, 37 mL)를 천천히 천천히 넣어 주었다. 실온에서 1시간 교반 후 H<sub>2</sub>O를 적가하여 반응종결 후 농축하고 컬럼 크로마토그래피를 통해(Hex:EA=3:1) 화합물 1-4(113 g,77 %)를 얻었다. MS [M] = 295

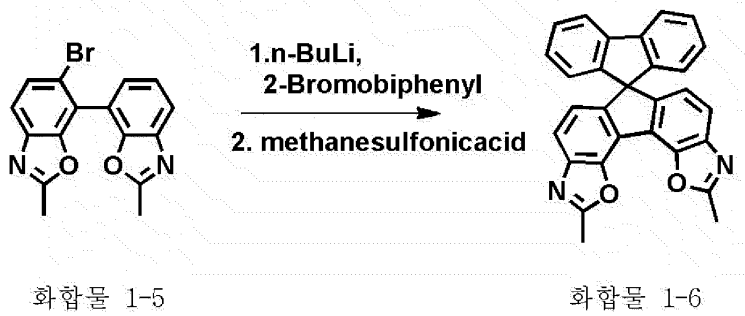
[0183] 5) 3,3'-디아미노-6-브로모-[1,1'-비페닐]-2,2'-디올 의 합성



[0184]

[0185] 화합물 1-4 (0.4 mol, 118 g)을 톨루엔 0.5L에 녹이고, 트리에틸 오쏘아세테이트(triethyl orthoacetate) (0.4 mol, 73 mL)를 넣은 후 딘-스톡(dean-stock) 반응기에서 12시간 동안 환류하여 반응시킨다. 반응종결 후 농축하고 컬럼 크로마토그래피를 통해(Hex:EA=10:1) 화합물 1-5(76.9 g, 56 %)를 얻었다. MS [M] = 343

[0187] 6) 2',10'-디메틸스피로[플루오렌-9,6'-플루오레노[3,4-d:6,5-d']비스(옥사졸)] 의 합성

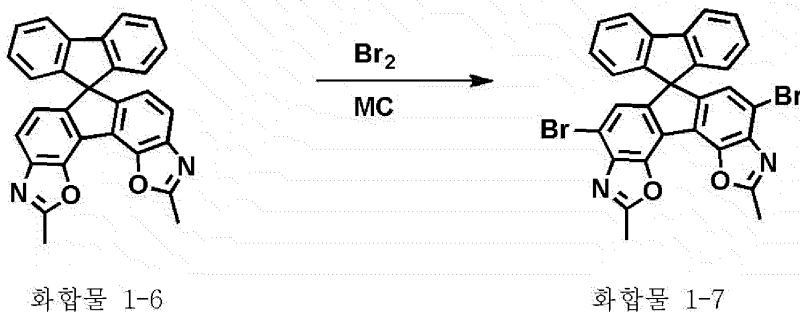


[0188]

[0189] 화합물 1-5 (0.3 mol, 103 g)을 N<sub>2</sub>하에서 테트라하이드로퓨란(THF) 0.5L에 녹이고, 온도를 -78℃로 내린 후 1M n-BuLi 0.3L를 천천히 적가하였다. 플로레논 (0.31 mol, 55.8 g)을 반응기에 넣고 온도를 실온으로 올렸다. H<sub>2</sub>O 로 반응을 종결시키고 MgSO<sub>4</sub>로 수분제거 및 농축 후 메탄술폰산 0.5L를 넣고 온도를 80℃로 올린 뒤 1h 동안 반응시켰다. H<sub>2</sub>O 2L에 반응물을 천천히 넣은 뒤 0.5h동안 교반하고 고체를 여과하였다. 생성된 고체를 컬럼 크로마토그래피를 통해(Hex:EA=10:1) 화합물 1-6(86g, 62 %)을 얻었다. MS [M] = 462

[0191]

7) 4',8'-디브로모-2',10'-디메틸스피로[플루오렌-9,6'-플루오레노[3,4-d:6,5-d']비스(옥사졸)] 의 합성

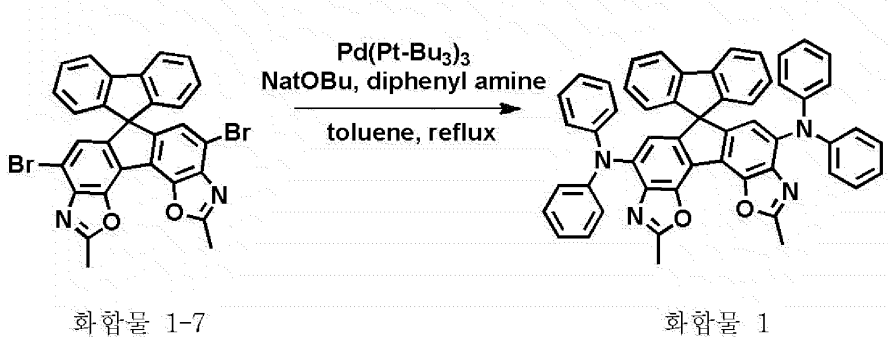


[0192]

[0193] 화합물 1-6 (0.2 mol, 46.2 g)을 메틸렌 클로라이드(MC) 0.5L (0℃)에 녹이고, 온도를 0℃로 내린 뒤 Br<sub>2</sub> (0.4 mol, 20.5 mL)를 천천히 천천히 넣고 실온으로 온도를 올렸다. 반응용액을 Na<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 수용액으로 처리 후 MgSO<sub>4</sub>로 수분제거 및 농축하고 컬럼 크로마토그래피를 통해(Hex:EA=10:1) 화합물 1-7 (99.3 g,85 %)를 얻었다. MS [M] = 584

[0195]

8) 4',8'-디브로모-2',10'-디메틸스피로[플루오렌-9,6'-플루오레노[3,4-d:6,5-d']비스(옥사졸)] 의 합성



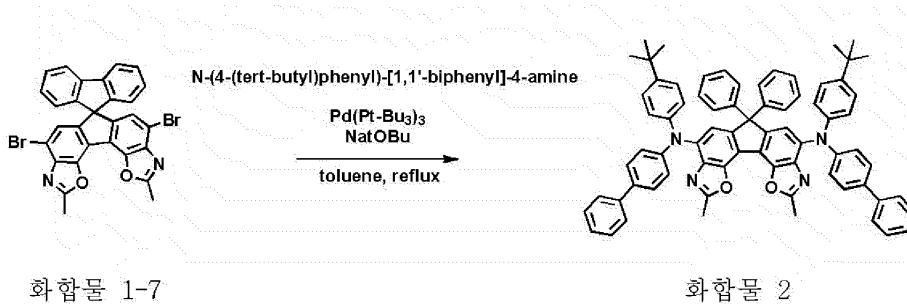
[0196]

[0197] 화합물 1-7 (0.01 mol, 5.8 g), 디페닐 아민 (0.025 mol, 4.23g), NaOtBu(0.03 mol, 2.9g)을 50mL 톨루엔에 녹인 후 환류 시키고, 비스[트리-tert-부틸포스핀]팔라듐 (0.0001mol, 0.05g)을 천천히 적가하였다. 반응종결 후 H<sub>2</sub>O 처리로 NaOtBu를 제거하고, MgSO<sub>4</sub>로 수분제거 및 농축한 후, 컬럼 크로마토그래피를 통해(Hex:EA=7:1) 화합

물 1 (5.32 g, 70 %)를 얻었다. MS [M] = 761

[0199] **합성예 2. 화합물 2의 합성**

[0200] N4,N8-디([1,1'-비페닐]-4-일)-N4,N8-비스(4-(tert-부틸)페닐)-2,10-디메틸-6,6-디페닐-6H-플루오레노[3,4-d:6,5-d']비스(옥사졸)-4,8-디아민의 합성



[0201]

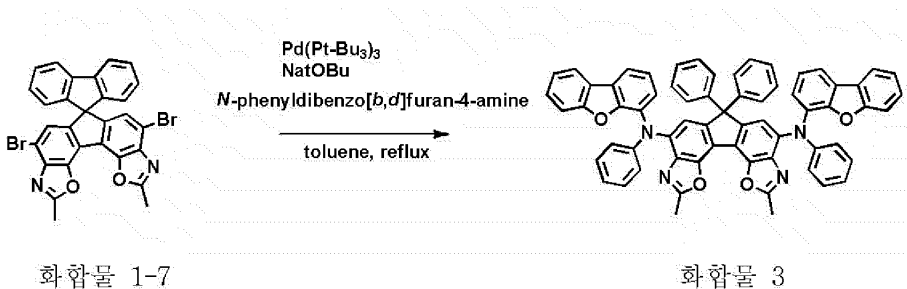
[0202] 화합물 1-7 (0.01 mol, 5.8 g), N-(4-(tert-부틸)페닐)-[1,1'-비페닐]-4-아민 (0.025 mol, 7.54g), NaOtBu(0.03 mol, 2.9g)을 50mL 톨루엔에 녹인 후 환류 시키고, 비스[트리-tert-부틸포스핀]팔라듐 (0.0001mol, 0.05g)을 천천히 적가하였다. 반응종결 후 H<sub>2</sub>O 처리로 NaOtBu를 제거하고, MgSO<sub>4</sub>로 수분제거 및 농축한 뒤, 컬럼 크로마토그래피를 통해(Hex:EA=6:1) 화합물 2 (5.02 g, 49 %)를 얻었다. MS [M] = 1027

[0203] 화합물 2의 1H NMR data : δ = 1.30 (s, 18H), 2.64 (s, 6H), 7.06-7.24 (m, 18H), 7.30-7.40 (m, 6H), 7.44 (t, 2H), 7.49-7.56 (m, 8H), 7.74 (d, 4H)

[0204] 1H NMR 스펙트럼은 Cambridge Isotope Laboratories, Inc.로부터 구입한 중소화된 클로로포름(deuterated chloroform)을 사용하여 Varian Mercury NMR 300 MHz spectrometer로 기록하였다.

[0206] **합성예 3. 화합물 3의 합성**

[0207] N4,N8-비스(디벤조[b,d]퓨란-4-일)-2,10-디메틸-N4,N8,6,6-테트라페닐-6H-플루오레노[3,4-d:6,5-d']비스(옥사졸)-4,8-디아민의 합성



[0208]

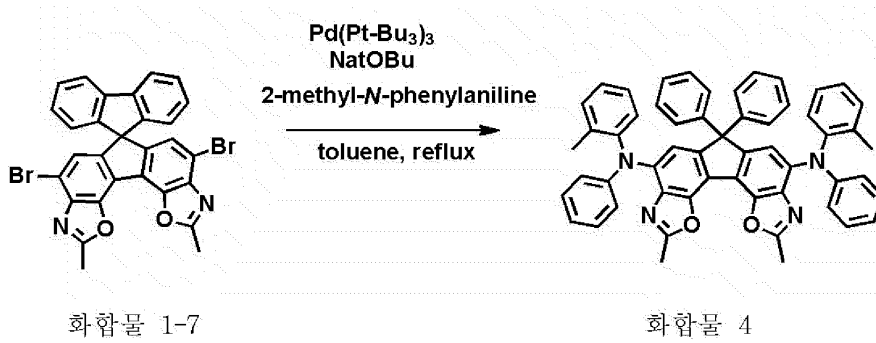
[0209] 화합물 1-7 (0.01 mol, 5.8 g), N-페닐디벤조[b,d]퓨란-4-아민 (0.025 mol, 6.5g), NaOtBu(0.03 mol, 2.9g)을 50mL 톨루엔에 녹인 후 환류 시키고, 비스[트리-tert-부틸포스핀]팔라듐 (0.0001mol, 0.05g)을 천천히 적가하였다. 반응종결 후 H<sub>2</sub>O 처리로 NaOtBu를 제거하고, MgSO<sub>4</sub>로 수분제거 및 농축한 뒤, 컬럼 크로마토그래피를 통해(Hex:EA=6:1) 화합물 3 (4.22 g, 45 %)를 얻었다. MS [M] = 943

[0210] 화합물 3의 1H NMR data : δ = 2.58 (s, 6H), 6.94-7.10 (m, 12H), 7.18-7.30 (m, 12H), 7.34-7.40 (m, 6H), 7.50-7.66 (m, 4H), 7.92 (d, 2H)

[0211] 1H NMR 스펙트럼은 Cambridge Isotope Laboratories, Inc.로부터 구입한 중소화된 클로로포름(deuterated chloroform)을 사용하여 Varian Mercury NMR 300 MHz spectrometer로 기록하였다.

[0213] **합성예 4. 화합물 4의 합성**

[0214] 2,10-디메틸-N4,N8,6,6-테트라페닐-N4,N8-di-o-톨릴-6H-플루오레노[3,4-d:6,5-d']비스(옥사졸)-4,8-디아민의 합성



[0215]

[0216] 상기 합성예 3에서 N-페닐디벤조[b,d]퓨란-4-아민 대신 2-메틸-N-페닐아닐린을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 3과 동일한 방법으로 화합물 4를 합성하였다.

[0218] <실시예>

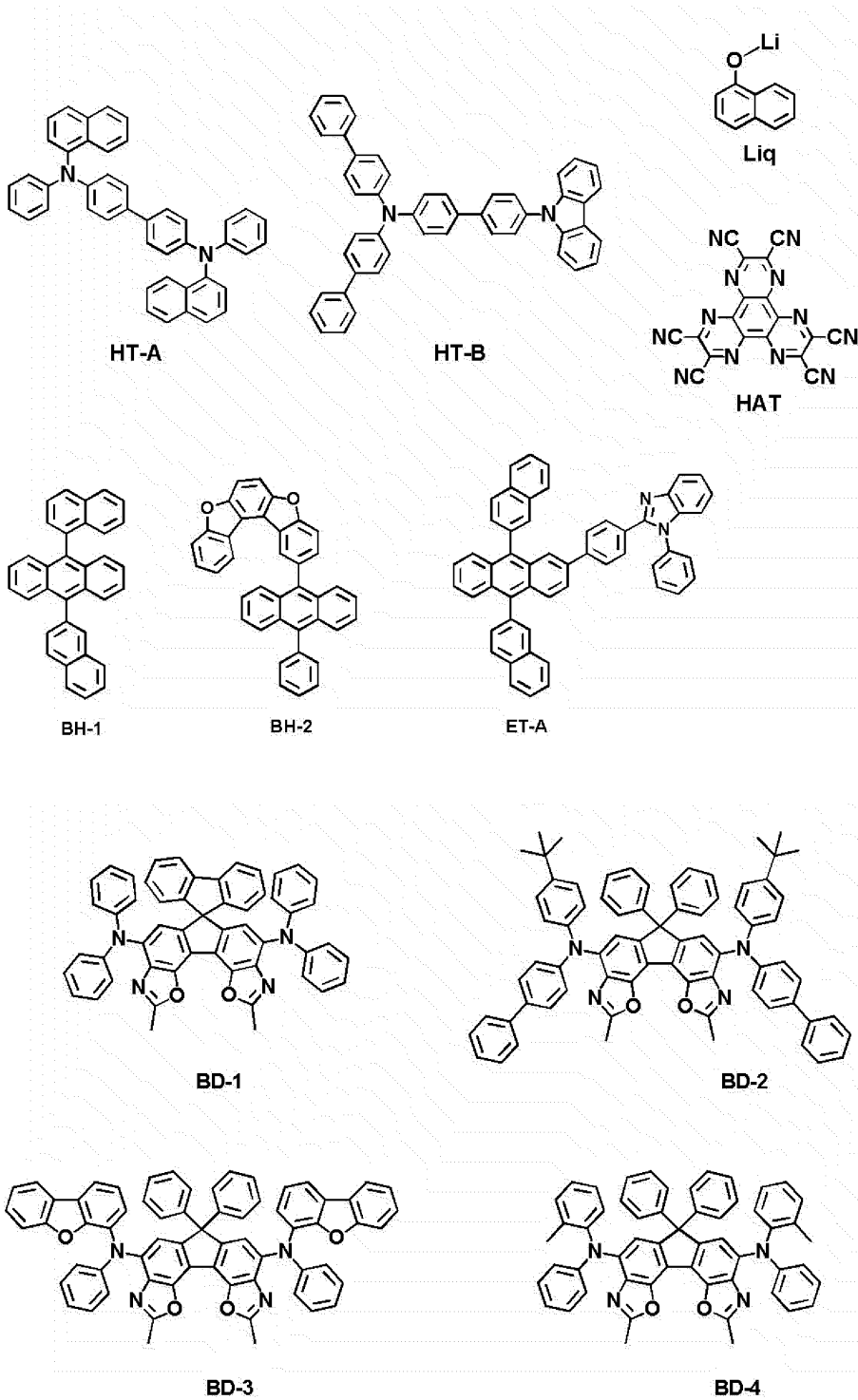
[0219] 실시예 1.

[0220] ITO(인듐 주석 산화물)가 1,000Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판(corning 7059 glass)을, 분산제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 세제는 Fischer Co.의 제품을 사용하였으며, 증류수는 Millipore Co. 제품의 필터(Filter)로 2차 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후, 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올 용제 순서로 초음파 세척을 하고 건조시켰다.

[0221] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 화합물 HAT를 50Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다. 그 위에 정공수송층으로 하기 화합물 HT-A 1000Å을 진공 증착하고, 연이어 하기 화합물 HT-B 100Å을 증착하였다. 발광층에는 호스트로 BH-1와 도펀트로 BD-1을 2중량%로 200Å 두께로 진공 증착하였다.

[0222] 그 다음에 하기 화합물 ET-A 와 하기 화합물 Liq를 1:1 비율로 300Å을 증착하였고, 이 위에 순차적으로 150Å 두께의 은(Ag) 10중량% 도핑된 마그네슘(Mg) 그리고 1,000Å 두께의 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하여, 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0223] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 1 Å/sec를 유지하였고, LiF는 0.2 Å/sec, 알루미늄은 3Å/sec 내지 7Å/sec의 증착속도를 유지하였다.



[0224]

[0225]

[0227]

실시예 2.

[0228]

상기 실시예 1에서, 화합물 BD-1 대신 상기 화합물 BD-2를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0230]

실시예 3.

[0231]

상기 실시예 1에서, 화합물 BD-1 대신 상기 화합물 BD-3를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0233]

실시예 4.

[0234]

상기 실시예 1에서, 화합물 BD-1 대신 상기 화합물 BD-4를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로

로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0236] 실시예 5.

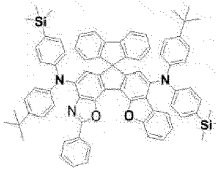
[0237] 상기 실시예 1에서, 상기 화합물 BH-2를 더 포함(BH-1와 BH-2의 중량비: 1:1)한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0239] <비교예>

[0240] 비교예 1.

[0241] 상기 실시예 1에서, 화합물 BD-1 대신 하기 화합물 D-1을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[D-1]

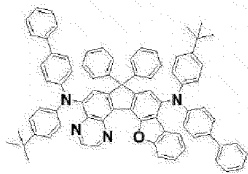


[0242]

[0244] 비교예 2.

[0245] 상기 실시예 1에서, 화합물 BD-1 대신 하기 화합물 D-2를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[D-2]

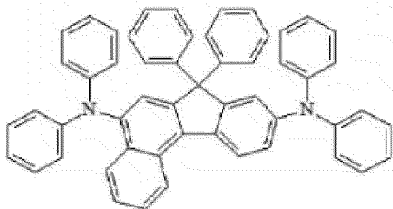


[0246]

[0248] 비교예 3.

[0249] 상기 실시예 1에서, 화합물 BD-1 대신 하기 화합물 D-3를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[D-3]

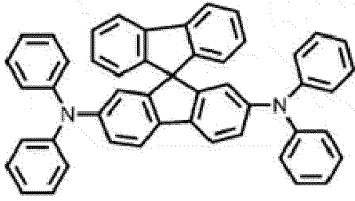


[0250]

[0252] 비교예 4.

[0253] 상기 실시예 1에서, 화합물 BD-1 대신 하기 화합물 D-4를 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[D-4]



[0254]

[0255]

상기 실시예 1 내지 5 및 비교예 1 내지 4의 유기 발광 소자를 10mA/cm<sup>2</sup>의 전류밀도에서 구동전압, 발광효율 및 색좌표를 측정하였고, 20mA/cm<sup>2</sup>의 전류밀도에서 초기 휘도 대비 95%가 되는 시간(LT95)을 측정하였다. 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0256]

실시예	호스트	도펀트	10mA/cm <sup>2</sup>			LT95 at
			구동전압(v)	효율(cd/A)	CIEy	20mA/cm <sup>2</sup> 수명(hr)
실시예 1	BH-1	BD-1	4.4	6.0	0.092	215
실시예 2	BH-1	BD-2	4.6	6.1	0.093	210
실시예 3	BH-1	BD-3	4.5	6.2	0.096	224
실시예 4	BH-1	BD-4	4.5	6.2	0.096	224
실시예 5	BH-1+BH-2	BD-1	4.6	6.3	0.093	200
비교예 1	BH-1	D-1	4.3	2.9	0.097	112
비교예 2	BH-1	D-2	4.6	4.8	0.094	108
비교예 3	BH-1	D-3	4.3	4.2	0.097	118
비교예 4	BH-1	D-4	4.6	4.8	0.094	88

[0257]

상기 표 1로부터, 본원 화학식 1의 화합물을 사용한 실시예 1 내지 5가, 플루오렌 코어구조에 축합된 구조가 상이한 비교예 1 및 2; 코어구조가 벤조플루오렌인 화합물을 사용한 비교예 3; 및 코어구조가 스피로비플루오렌인 화합물을 사용한 비교예 4보다 우수한 효율 및 수명 특성을 갖는 것을 확인할 수 있다.

부호의 설명

[0258]

- 1: 기판
- 2: 양극
- 3: 발광층
- 4: 음극
- 5: 정공주입층
- 6: 정공수송층
- 7: 발광층
- 8: 전자수송층



도면

도면1

4
3
2
1

도면2

4
8
7
6
5
2
1