(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2018 년 4 월 19 일 (19.04.2018)

WIPO | PCT

(10) 국제공개번호
WO 2018/070641 A2

(51) 국제특허분류:
C09K 11/06 (2006.01) ***C07D 409/14*** (2006.01)
C07D 307/77 (2006.01) ***H01L 51/00*** (2006.01)
C07D 333/50 (2006.01) ***H01L 51/50*** (2006.01)
C07D 405/14 (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2017/006974

(22) 국제출원일: 2017 년 6 월 30 일 (30.06.2017)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2016-0131991 2016 년 10 월 12 일 (12.10.2016) KR

(71) 출원인: **삼성에스디아이주식회사 (SAMSUNG SDI CO., LTD.)** [KR/KR]; 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR). **삼성전자 주식회사 (SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD.)** [KR/KR]; 16677 경기도 수원시 영통구 삼성로 129, Gyeonggi-do (KR).

(72) 발명자: **이한일 (LEE, Hanill)**; 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). **홍진석 (HONG, Jinseok)**; 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). **유은선 (YU, Eun Sun)**; 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). **정성현 (JUNG, Sung-Hyun)**; 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). **한수진 (HAN, Sujin)**; 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: **팬코리아특허법인 (PANKOREA PATENT AND LAW FIRM)**; 06234 서울시 강남구 논현로85길 70 13F, Seoul (KR).

(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

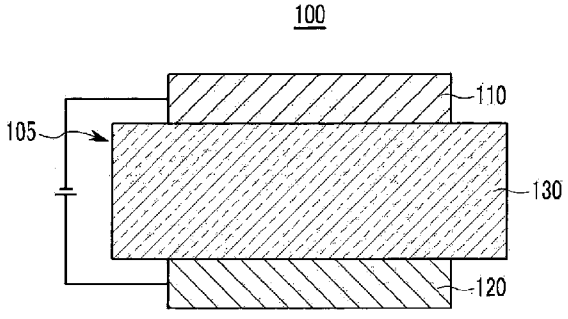
— 국제조사보고서 없이 공개하며 보고서 접수 후 이를 별도 공개함 (규칙 48.2(g))

WO 2018/070641 A2

(54) **Title:** COMPOUND FOR ORGANIC OPTOELECTRONIC ELEMENT, ORGANIC OPTOELECTRONIC ELEMENT, AND DISPLAY DEVICE

(54) **발명의 명칭:** 유기 광전자 소자용 화합물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치

【도 1】



(57) **Abstract:** The present invention relates to a compound represented by chemical formula 1 for an organic optoelectronic element, an organic optoelectronic element employing the same, and a display device. The details for chemical formula 1 above are as defined in the specification.

(57) **요약서:** 화학식 1 로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물, 이를 적용한 유기 광전자 소자 및 표시 장치에 관한 것이다. 상기 화학식 1에 대한 상세 내용은 명세서에서 정의한 바와 같다.

【명세서】

【발명의 명칭】

유기 광전자 소자용 화합물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치

【기술분야】

유기 광전자 소자용 화합물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치에 관한 것이다.

【배경기술】

유기 광전자 소자(organic optoelectronic diode)는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이다.

유기 광전자 소자는 동작 원리에 따라 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 하나는 광 에너지에 의해 형성된 엑시톤(exciton)이 전자와 정공으로 분리되고 상기 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되면서 전기 에너지를 발생하는 광전 소자이고, 다른 하나는 전극에 전압 또는 전류를 공급하여 전기 에너지로부터 광 에너지를 발생하는 발광 소자이다.

유기 광전자 소자의 예로는 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 및 유기 감광체 드럼(organic photo conductor drum) 등을 들 수 있다.

이 중, 유기 발광 소자(organic light emitting diode, OLED)는 근래 평판 표시 장치(flat panel display device)의 수요 증가에 따라 크게 주목받고 있다. 상기 유기 발광 소자는 유기 발광 재료에 전류를 가하여 전기 에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서, 통상 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 유기 층이 삽입된 구조로 이루어져 있다. 여기서 유기 층은 발광층과 선택적으로 보조층을 포함할 수 있으며, 상기 보조층은 예컨대 유기발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위한 정공 주입 층, 정공 수송 층, 전자 차단 층, 전자 수송 층, 전자 주입 층 및 정공 차단 층에서 선택된 적어도 1층을 포함할 수 있다.

유기 발광 소자의 성능은 상기 유기 층의 특성에 의해 영향을 많이 받으며, 그 중에서도 상기 유기 층에 포함된 유기 재료에 의해 영향을 많이 받는다.

특히 상기 유기 발광 소자가 대형 평판 표시 장치에 적용되기 위해서는 정공 및 전자의 이동성을 높이는 동시에 전기화학적 안정성을 높일 수 있는 유기 재료의 개발이 필요하다.

【발명의 상세한 설명】

【기술적 과제】

일 구현예는 고효율 및 장수명 유기 광전자 소자를 구현할 수 있는 유기 광전자 소자용 화합물을 제공한다.

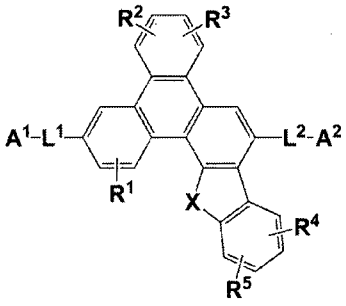
다른 구현예는 상기 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

또 다른 구현예는 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를 제공한다.

【기술적 해결방법】

일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물을 제공한다.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X는 O 또는 S이고,

R^1 내지 R^5는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C5 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기이고,

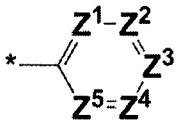
L^1 및 L^2는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

A^1 및 A^2는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

A^1 및 A^2 중 적어도 하나는 하기 화학식 A로 표현되는 모이어티를

포함하고,

[화학식 A]



상기 화학식 A에서,

Z^1 내지 Z^5은 각각 독립적으로 N 또는 CR^a이고,

Z^1 내지 Z^5 중 적어도 하나는 N이고,

R^a는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C5 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기이고,

R^a는 각각 독립적으로 존재하거나 인접한 기끼리 연결되어 치환 또는 비치환된 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족의 단환식 또는 다환식 고리를 형성하고,

m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수 중 하나이고,

*은 상기 화학식 1의 L^1 또는 L^2와 연결되는 지점이고,

상기 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, 시아노기, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C30 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다.

다른 구현예에 따르면, 서로 마주하는 양극과 음극, 그리고 상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 한 층의 유기층을 포함하고, 상기 유기층은 전술한 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

또 다른 구현예에 따르면 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를 제공한다.

【발명의 효과】

고효율 장수명 유기 광전자 소자를 구현할 수 있다.

【도면의 간단한 설명】

도 1 및 도 2는 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 도시한 단면도이다.

<부호의 설명>

100, 200: 유기 발광 소자

105: 유기층

110: 음극

120: 양극

130: 발광층

140: 정공 보조층

【발명의 실시를 위한 최선의 형태】

이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로겐기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C6 내지 C30 아릴실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C3 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 시아노기, 또는 이들의 조합으로 치환된 것을 의미한다.

본 발명의 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C6 내지 C30 아릴실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C3 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C30 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C5 알킬기, C6 내지 C18 아릴기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 또는 벤조퀴나졸리닐기로 치환된 것을

의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 메틸기, 에틸기, 프로판일기, 부틸기, 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 트리페닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 또는 벤조퀴나졸리닐기로 치환된 것을 의미한다.

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

본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"이란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다. 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.

상기 알킬기는 C1 내지 C30인 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C20 알킬기 또는 C1 내지 C10 알킬기일 수도 있다. 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자가 포함되는 것을 의미하며, 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.

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

본 명세서에서 "아릴(aryl)기"는 탄화수소 방향족 모이어티를 하나 이상 갖는 그룹을 총괄하는 개념으로서,

탄화수소 방향족 모이어티의 모든 원소가 p-오비탈을 가지면서, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 형태, 예컨대 페닐기, 나프틸기 등을 포함하고,

2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 시그마 결합을 통하여 연결된 형태, 예컨대 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기 등을 포함하며,

2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 직접 또는 간접적으로 융합된 비방향족 융합 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, 플루오레닐기 등을 들 수

있다.

아릴기는 모노시클릭, 폴리시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

본 명세서에서 "헤테로고리기(heterocyclic group)"는 헤테로아릴기를 포함하는 상위 개념으로서, 아릴기, 시클로알킬기, 이들의 융합고리 또는 이들의 조합과 같은 고리 화합물 내에 탄소 (C) 대신 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개를 함유하는 것을 의미한다. 상기 헤테로고리기가 융합고리인 경우, 상기 헤테로고리기 전체 또는 각각의 고리마다 헤테로 원자를 한 개 이상 포함할 수 있다.

일 예로 "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개를 함유하는 것을 의미한다. 2 이상의 헤테로아릴기는 시그마 결합을 통하여 직접 연결되거나, 상기 헤테로아릴기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.

상기 헤테로고리기는 구체적인 예를 들어, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 벤조퀴나졸리닐기 등을 포함할 수 있다.

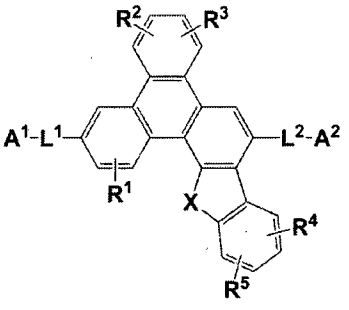
보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및/또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기는, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 o-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는

비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸일기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기, 치환 또는 비치환된 페녹사진일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

이하 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자용 화합물을 설명한다.

일 구현예에 따른 유기 광전자 소자용 화합물은 하기 화학식 1로 표현된다.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X는 O 또는 S이고,

R^1 내지 R^5는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1

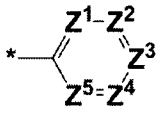
내지 C5 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기이고,

L^1 및 L^2는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

A^1 및 A^2는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

A^1 및 A^2 중 적어도 하나는 하기 화학식 A로 표현되는 모이어티를 포함하고,

[화학식 A]



상기 화학식 A에서,

Z^1 내지 Z^5은 각각 독립적으로 N 또는 CR^a이고,

Z^1 내지 Z^5 중 적어도 하나는 N이고,

R^a는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C5 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기이고,

R^a는 각각 독립적으로 존재하거나 인접한 기끼리 연결되어 치환 또는 비치환된 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족의 단환식 또는 다환식 고리를 형성하고,

*은 상기 화학식 1의 L^1 또는 L^2와 연결되는 지점이고,

상기 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, 시아노기, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C30 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다. 본 발명의 구체적인 일예에서, 상기 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C30 아릴기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 또는 벤조퀴나졸리닐로 치환된 것을 의미한다.

예컨대, 상기 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, 페닐기, 바이페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기, 또는

벤조퀴나졸리닐기로 치환된 것을 의미한다.

본 발명은 트리페닐렌에 벤조퓨란 또는 벤조티오펜이 융합된 화합물에 ET 유닛(Electron transfer unit), 즉 전자 이동도가 높은 치환기가 연결된 유기 광전자 소자용 화합물을 제공함으로써 장수명, 저구동 및 고효율의 소자를 구현할 수 있다.

본 발명에 따른 화합물은 트리페닐렌에 벤조퓨란 또는 벤조티오펜이 융합됨으로써, 유리전이온도(Tg)가 높아져 소자에 적용 시 공정 중 화합물의 안정성을 높이고 열화를 방지할 수 있다. 유리전이온도(Tg)는 화합물 및 이를 적용한 소자의 열안정성과 관련될 수 있다. 즉 높은 유리전이온도(Tg)를 가지는 유기 광전자 소자용 화합물은, 유기발광소자에 박막 형태로 적용되었을 때, 상기 유기 광전자 소자용 화합물을 증착한 후에 이루어지는 후속 공정, 예컨대 봉지(encapsulation) 공정에서 온도에 의해 열화되는 것이 방지되어 화합물 및 소자의 수명 특성을 확보할 수 있다.

또한, ET 유닛이 트리페닐렌 모이어티에 치환됨으로써 ET기의 LUMO 전자 구름이 트리페닐렌까지 확장될 수 있으므로, 벤조퓨란 (또는 벤조티오펜) 모이어티에 ET기가 치환된 화합물 대비 상대적으로 낮은 LUMO 에너지 레벨을 가질 수 있고, ET 유닛에 포함된 질소의 극성기로 인하여 전극과 상호작용이 가능하기 때문에 전하의 주입이 용이하고 이동도가 높음으로 인하여 저구동 전압을 구현할 수 있다.

뿐만 아니라, 분자 구조의 입체 장해성으로 인하여 분자 사이의 상호작용이 작아져 결정화가 억제되므로, 이를 포함하는 유기 EL 소자의 수율 향상 및 장수명의 효과를 확보할 수 있다.

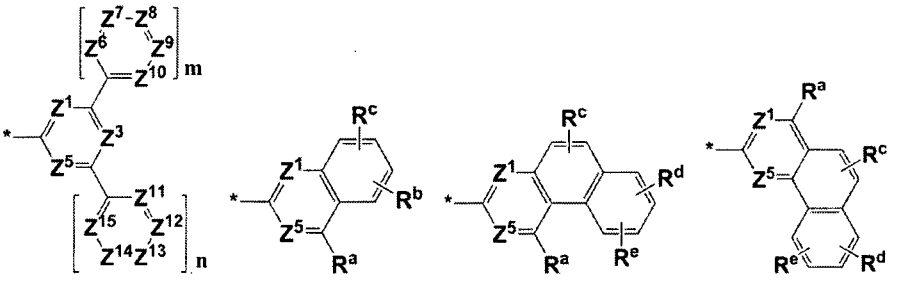
본 발명의 일 실시예에서, 상기 A^1 및 A^2는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기일 수 있고, A^1 및 A^2 중 적어도 하나가 상기 화학식 A로 표현될 수 있다.

본 발명의 일 실시예에서, 화학식 A에서 Z^1 내지 Z^5 중 적어도 두개는 N일 수 있다.

상기 화학식 A는 구체적으로 하기 화학식 A1, 화학식 A2, 화학식 A3 및

화학식 A4 중 하나로 표현될 수 있다.

[화학식 A1] [화학식 A2] [화학식 A3] [화학식 A4]



상기 화학식 A1 내지 화학식 A4에서,

Z^1, Z^3, Z^5, 및 Z^6 내지 Z^{15}은 각각 독립적으로 N 또는 CR^a이고,

상기 화학식 A1의 Z^1, Z^3, Z^5, 및 Z^6 내지 Z^{15} 중 적어도 하나는 N이고,

상기 화학식 A2 내지 A4의 Z^1 및 Z^5 중 적어도 하나는 N이고,

m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수 중 하나이고,

R^a 내지 R^e는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C5 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기이고,

*은 상기 화학식 1의 L^1 또는 L^2와 연결되는 지점이다.

본 발명의 구체적인 일 실시예에서, 상기 화학식 A1의 Z^1, Z^3, Z^5, 및 Z^6 내지 Z^{15} 중 적어도 둘은 N일 수 있다.

본 발명의 구체적인 다른 일 실시예에서, 상기 화학식 A2 내지 A4의 Z^1 및 Z^5 중 적어도 둘은 N일 수 있다.

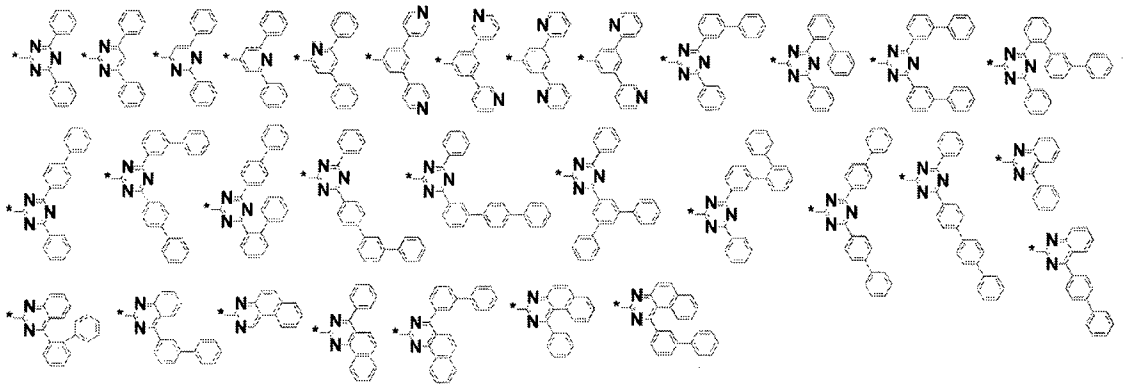
상기 화학식 A는 예컨대 ET 유닛으로 치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조이소퀴놀리닐기, 또는 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐기일 수 있다. 이 때 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 페닐기, 바이페닐기, 나프틸기, 피리디닐기, 또는 피리미디닐기로 치환된 것을 의미한다.

한편, ET 유닛이란 카바졸일기를 제외한 N 함유 6각환 함유 모이어티를 의미하는 것으로서, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조이소퀴놀리닐기,

벤조퀴나졸리닐기 등을 들 수 있다. 보다 구체적으로, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴나졸리닐기 또는 벤조퀴나졸리닐기 일 수 있다.

본 발명의 구체적인 일 실시예에서, 상기 화학식 A는 하기 그룹 I에 나열된 치환기에서 선택될 수 있다.

[그룹 I]

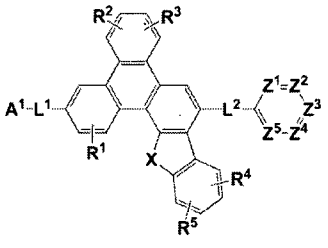


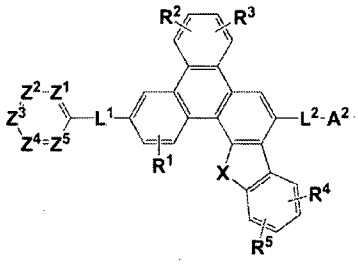
상기 그룹 I에서, *은 상기 화학식 1의 L^1 또는 L^2와 연결되는 지점이다.

본 발명의 가장 구체적인 일 실시예에서 상기 화학식 A는 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 또는 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐기일 수 있다.

한편, 화학식 A의 치환 위치에 따라 상기 화학식 1은 예컨대 하기 화학식 1-I, 또는 화학식 1-II로 표현될 수 있다.

[화학식 1-I] [화학식 1-II]





상기 화학식 1-I, 및 화학식 1-II에서, A^1 및 A^2, X, Z^1 내지 Z^5, R^1 내지 R^5, 그리고 L^1 및 L^2은 전술한 바와 같고,

상기 화학식 1-I, 및 화학식 1-II의 A^1 및 A^2는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기일 수 있다.

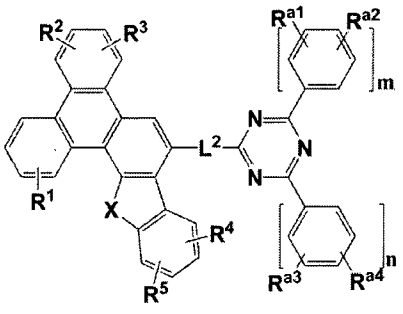
구체적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기일 수 있고, 더욱 구체적으로 수소 또는 페닐기일 수 있다.

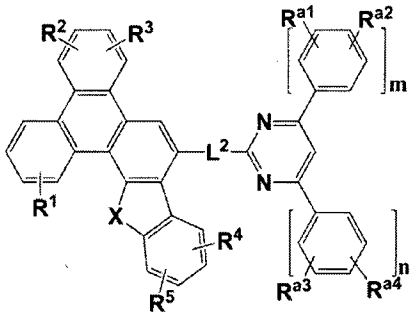
본 발명의 일 실시예에서, 상기 L^1 및 L^2는 각각 독립적으로 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기일 수 있고, 구체적으로 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴렌기일 수 있으며, 예컨대 단일결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기일 수 있다.

본 발명의 구체적인 일 실시예에서, 상기 R^a는 수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기일 수 있고,

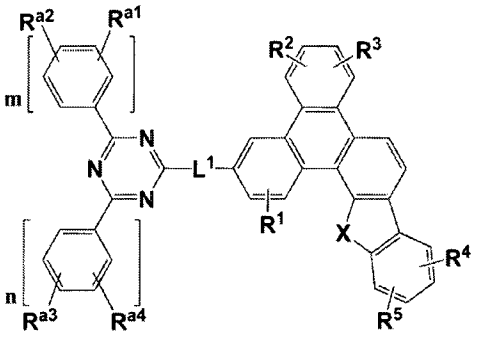
R^a는 각각 독립적으로 존재하여 상기 화학식 1은 예컨대 하기 화학식 1-A1-a1, 화학식 1-A1-a2, 화학식 1-A1-b1, 및 화학식 1-A1-b2 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

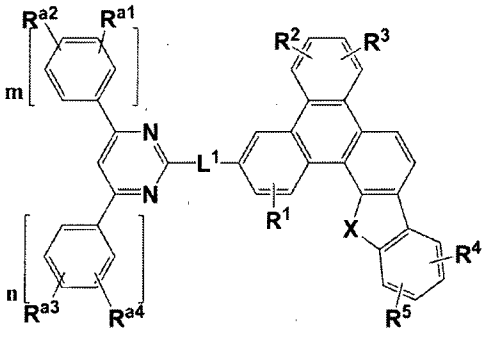
[화학식 1-A1-a1] [화학식 1-A1-a2]





[화학식 1-A1-b1] [화학식 1-A1-b2]





상기 화학식 화학식 1-A1-a1, 화학식 1-A1-a2, 화학식 1-A1-b1, 및 화학식 1-A1-b2에서, X, L^1 및 L^2, R^1 내지 R^5, m 및 n은 전술한 바와 같고,

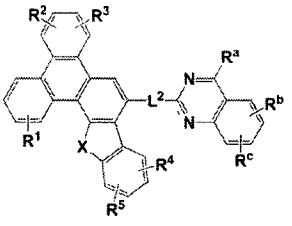
R^{a1} 내지 R^{a4}는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1

내지 C5 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기이고, 구체적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C5 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기일 수 있으며, 예컨대, 수소, 페닐기, 또는 바이페닐기일 수 있다.

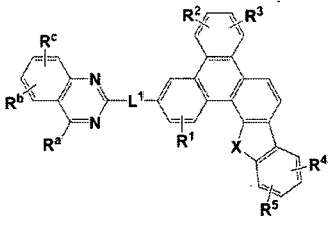
또한, R^a는 인접한 기끼리 연결되어 치환 또는 비치환된 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족의 단환식 또는 다환식 고리를 형성할 수 있다.

"인접한 기끼리 연결"되는 경우란, R^a가 연결된 페닐기와 R^a 중 인접하고 있는 어느 2개의 치환기가 서로 융합하여 치환 또는 비치환된 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족의 단환식 또는 다환식 고리를 형성하는 것을 의미한다. 헤테로방향족 다환식 고리의 예로는 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐기 등을 들 수 있으며, 예컨대 하기 화학식 1-A2-a, 화학식 1-A2-b, 화학식 1-A3-a, 화학식 1-A3-b, 화학식 1-A4-a, 및 화학식 1-A4-b 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

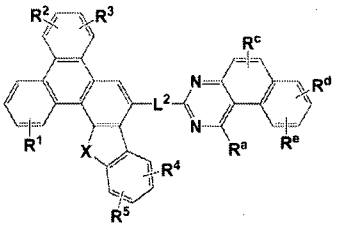
[화학식 1-A2-a]



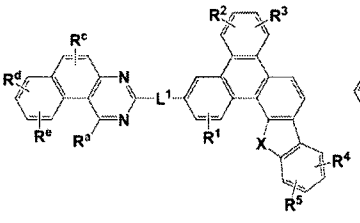
[화학식 1-A2-b]



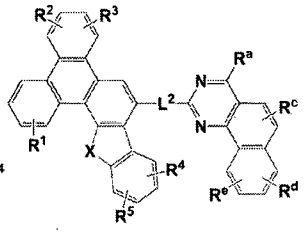
[화학식 1-A3-a]



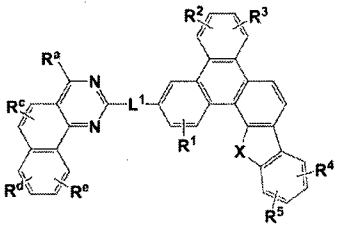
[화학식 1-A3-b]



[화학식 1-A4-a]



[화학식 1-A4-b]



상기 화학식 1-A2-a, 화학식 1-A2-b, 화학식 1-A3-a, 화학식 1-A3-b, 화학식 1-A4-a, 및 화학식 1-A4-b에서, X, L^1 및 L^2, 그리고 R^1 내지 R^5는 전술한 바와 같고,

R^a 내지 R^e는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C5 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기이고,

구체적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C5 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기일 수 있으며, 예컨대, 수소, 페닐기, 또는 바이페닐기일 수 있다.

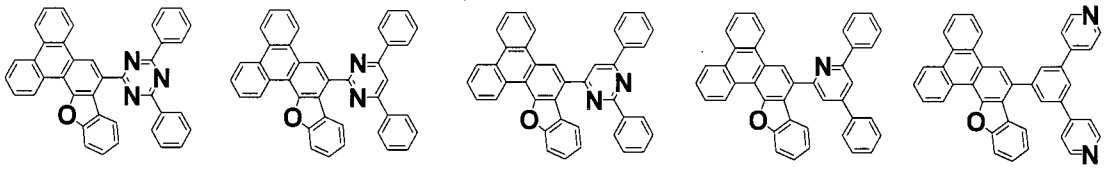
본 발명의 일 실시예에서, R^1 내지 R^5는 수소, 중수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기일 수 있고, 구체적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기일 수 있으며, 예컨대, 모두 수소이거나 어느 하나가 페닐기 또는 나프틸기일 수 있다.

본 발명의 구체적인 일 실시예에 따른 유기 광전자 소자용 화합물은 상기 화학식 1-A1-a1, 화학식 1-A1-a2, 화학식 1-A1-b1, 화학식 1-A1-b2, 화학식 1-A2-a, 화학식 1-A2-b, 화학식 1-A4-a, 및 화학식 1-A4-b 중 어느 하나로 표현될 수 있고, 가장 구체적으로 상기 화학식 1-A1-a1, 화학식 1-A1-a2, 화학식 1-A2-a, 및 화학식 1-A4-a 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

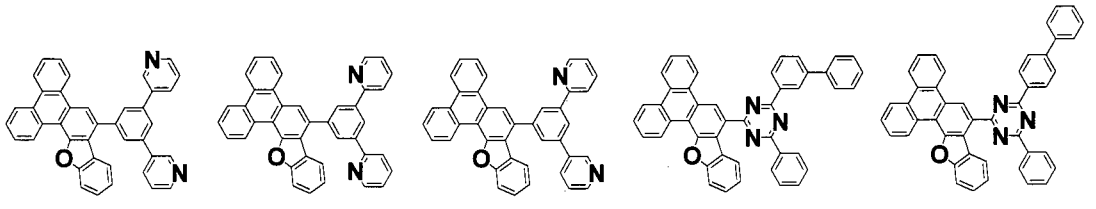
상기 화학식 1로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물은 예컨대 하기 그룹 1에 나열된 화합물에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[그룹 1]

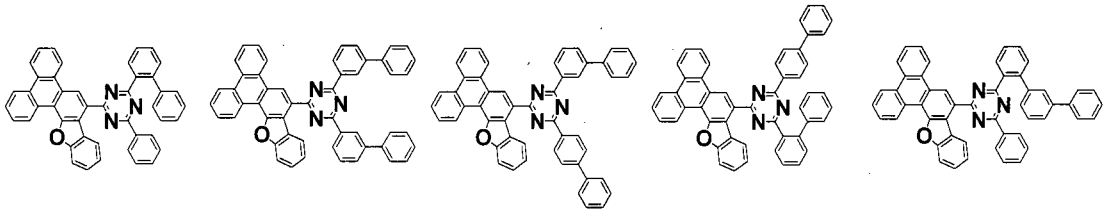
[A-1][A-2][A-3][A-4][A-5]



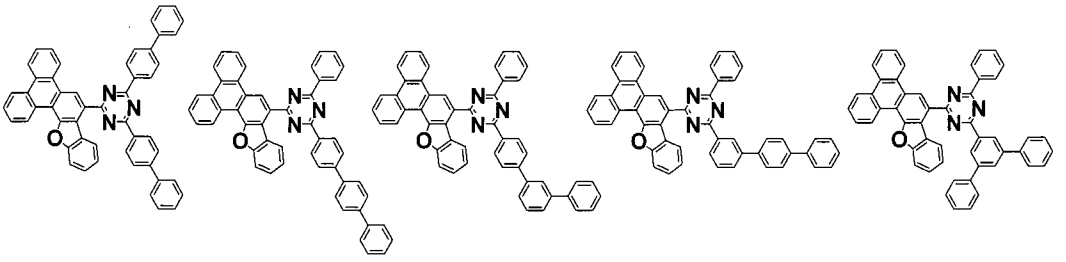
[A-6][A-7][A-8][A-9][A-10]



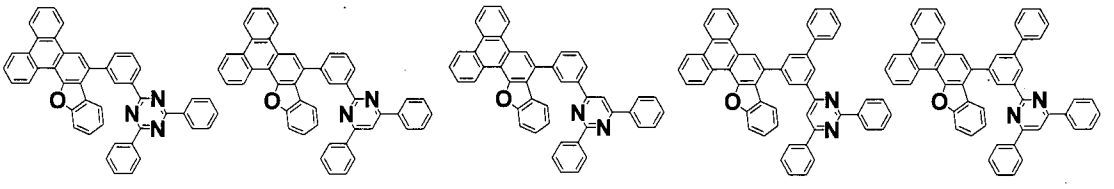
[A-11][A-12][A-13][A-14][A-15]



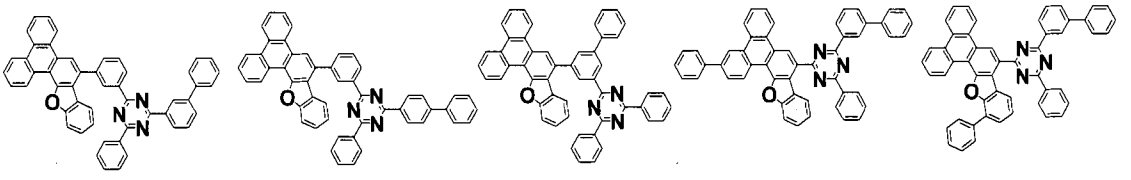
[A-16][A-17][A-18][A-19][A-20]



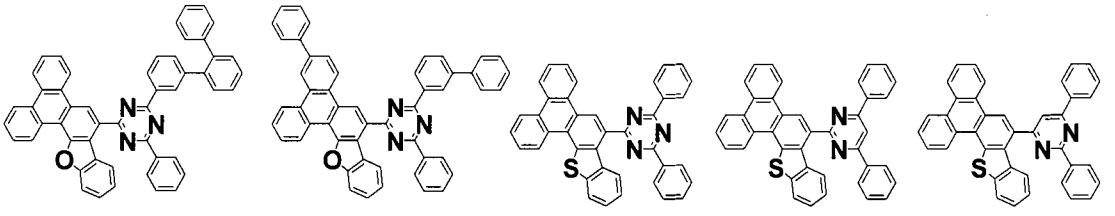
[A-21][A-22][A-23][A-24][A-25]



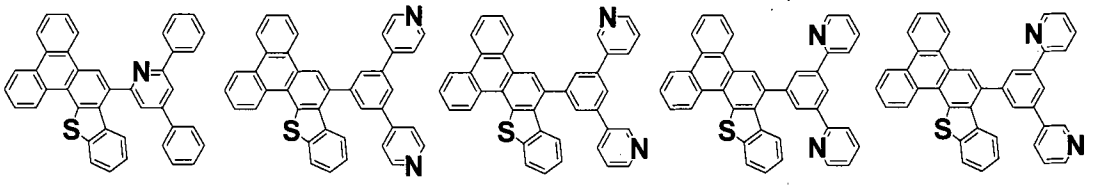
[A-26][A-27][A-28][A-29][A-30]



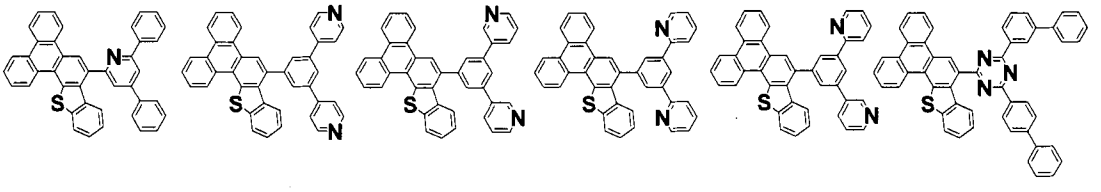
[A-31][A-32][A-33][A-34][A-35]



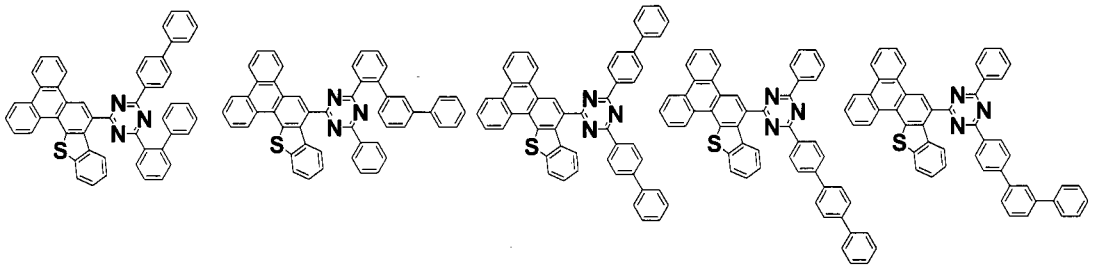
[A-36][A-37][A-38][A-39][A-40]



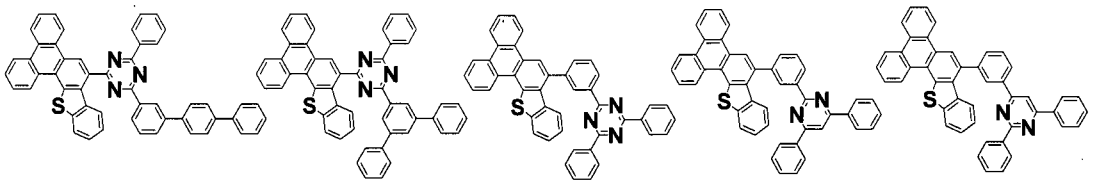
[A-41][A-42][A-43][A-44][A-45][A-46]



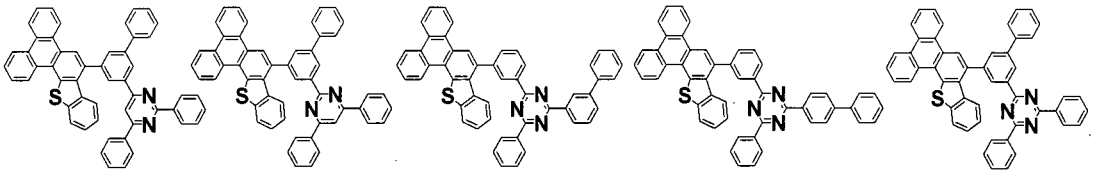
[A-47][A-48][A-49][A-50][A-51]



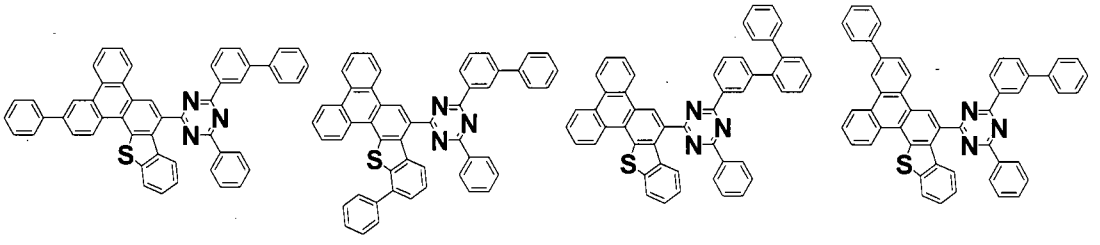
[A-52][A-53][A-54][A-55][A-56]



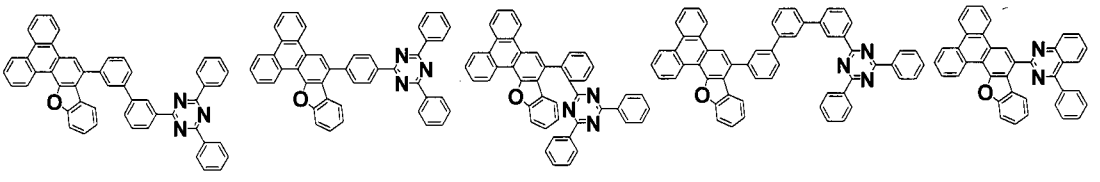
[A-57][A-58][A-59][A-60][A-61]



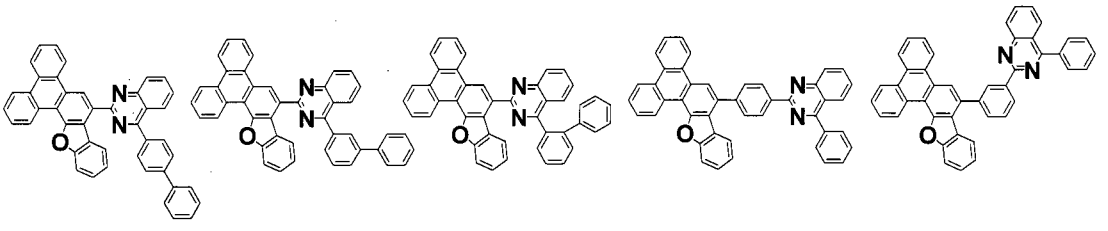
[A-62][A-63][A-64][A-65]



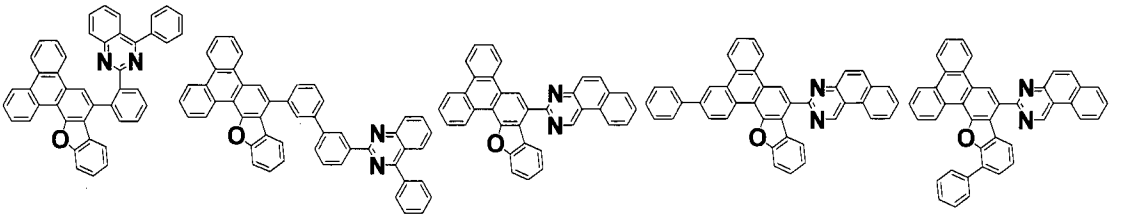
[A-66][A-67][A-68][A-69][A-70]



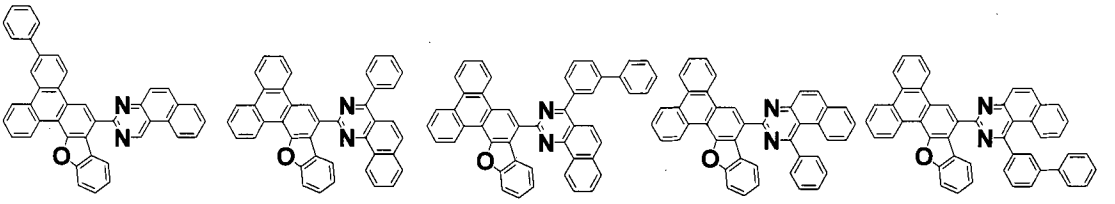
[A-71][A-72][A-73][A-74][A-75]



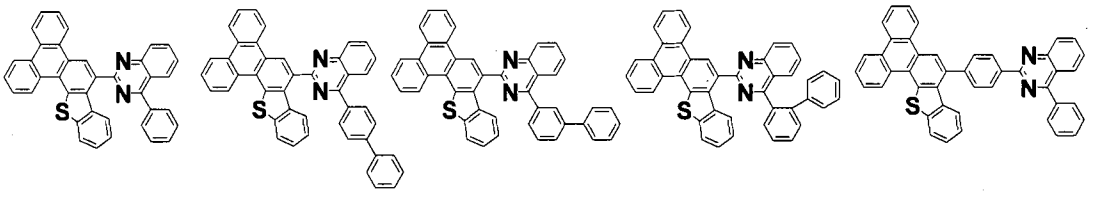
[A-76][A-77][A-78][A-79][A-80]



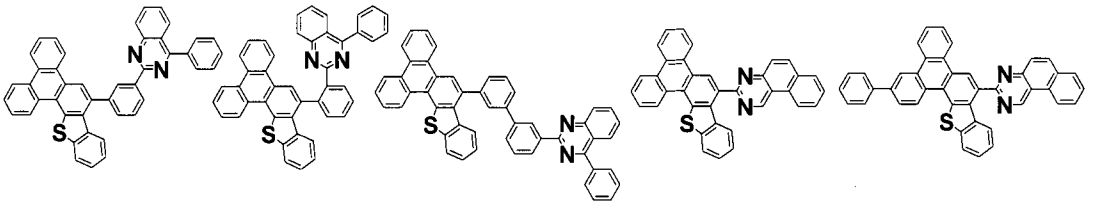
[A-81][A-82][A-83][A-84][A-85]



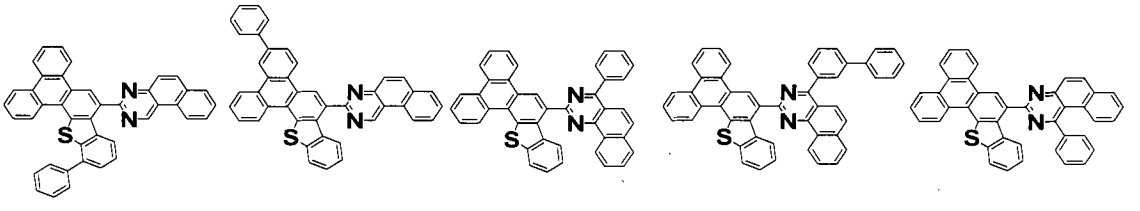
[A-86][A-87][A-88][A-89][A-90]



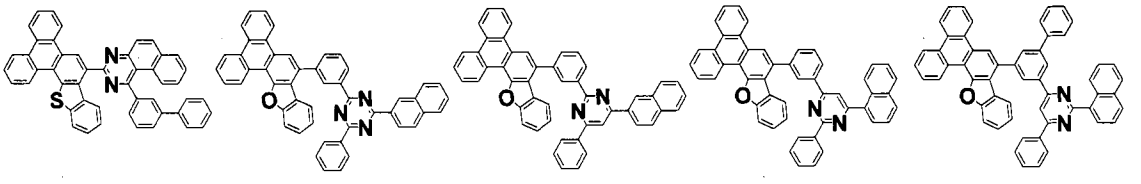
[A-91][A-92][A-93][A-94][A-95]



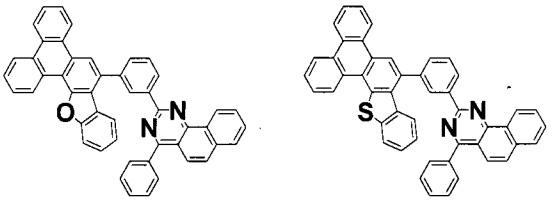
[A-96][A-97][A-98][A-99][A-100]



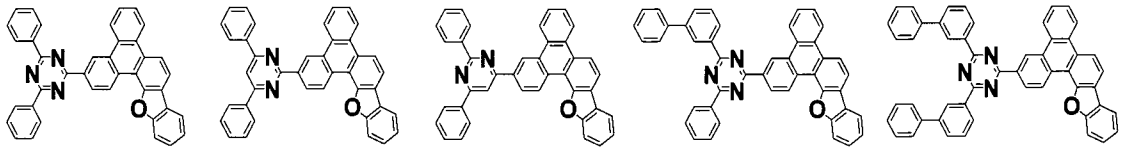
[A-101][A-102][A-103][A-104][A-105]



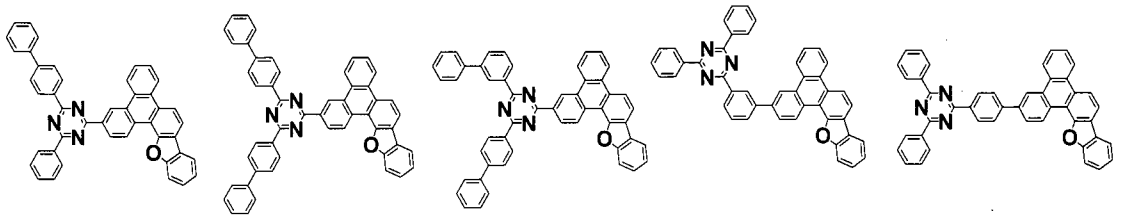
[A-106] [A-107]



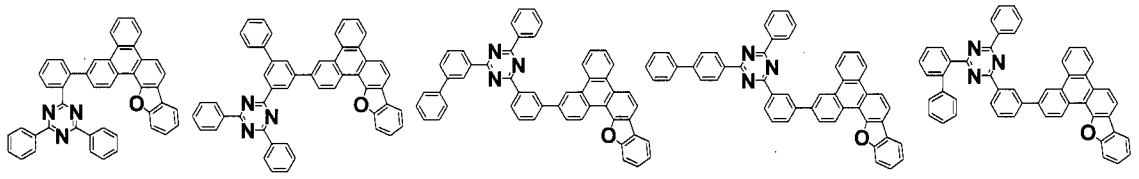
[B-1][B-2][B-3][B-4][B-5]



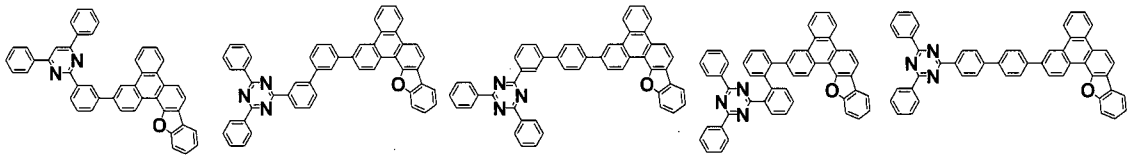
[B-6][B-7][B-8][B-9][B-10]



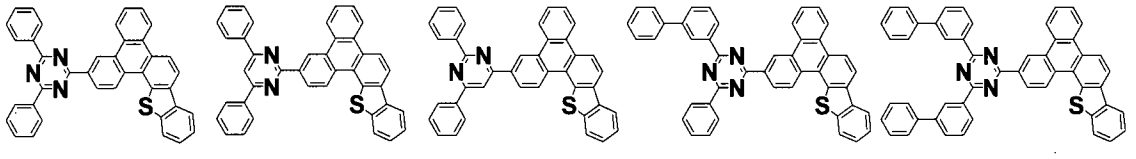
[B-11][B-12][B-13][B-14][B-15]



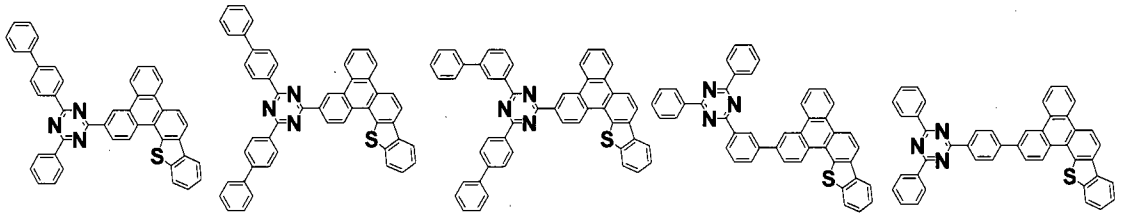
[B-16][B-17][B-18][B-19][B-20]



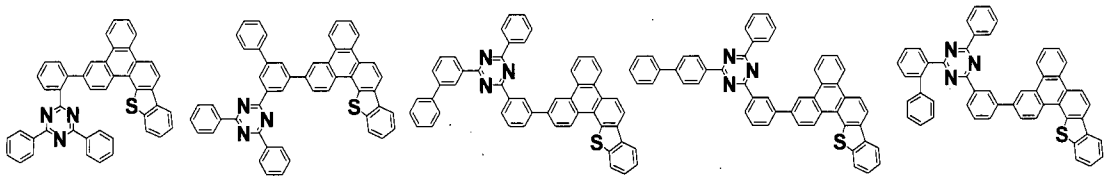
[B-21][B-22][B-23][B-24][B-25]



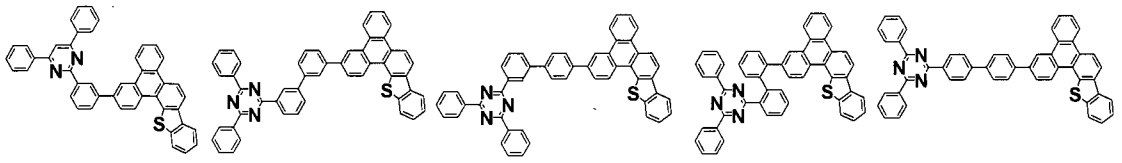
[B-26][B-27][B-28][B-29][B-30]



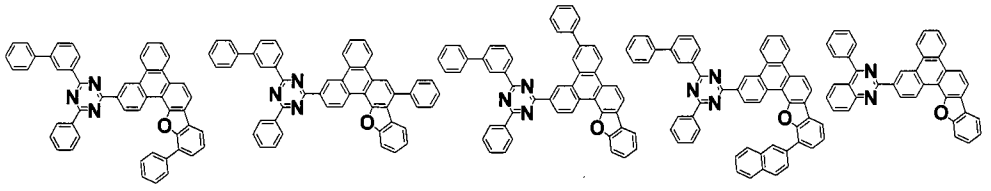
[B-31][B-32][B-33][B-34][B-35]



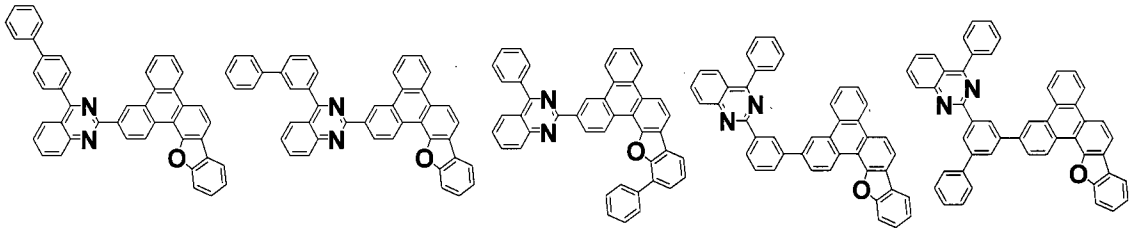
[B-36][B-37][B-38][B-39][B-40]



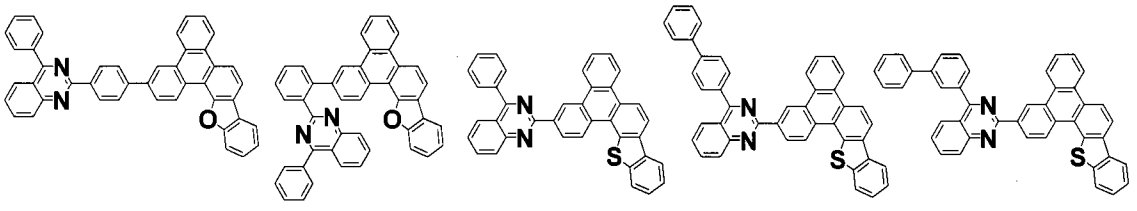
[B-41][B-42][B-43][B-44][B-45]



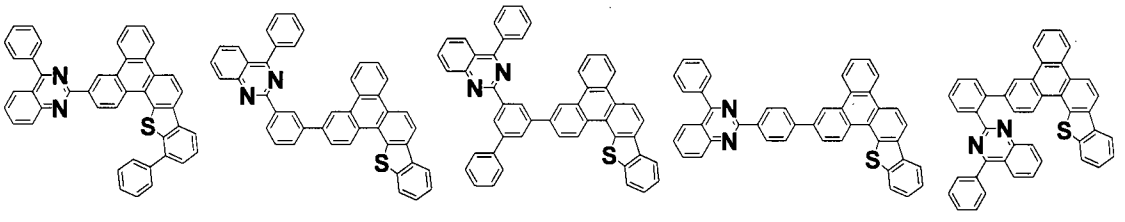
[B-46][B-47][B-48][B-49][B-50]



[B-51][B-52][B-53][B-54][B-55]



[B-56][B-57][B-58][B-59][B-60]



.

전술한 제1 유기 광전자 소자용 화합물은 유기 광전자 소자에 적용될 수 있고, 단독으로 또는 다른 유기 광전자 소자용 화합물과 함께 유기 광전자 소자에 적용될 수 있다. 전술한 유기 광전자 소자용 화합물이 다른 유기 광전자 소자용 화합물과 함께 사용되는 경우, 조성물의 형태로 적용될 수 있다.

상기 유기 광전자 소자용 화합물은 도펀트를 더 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 적색, 녹색 또는 청색의 도펀트일 수 있다.

상기 도펀트는 미량 혼합되어 발광을 일으키는 물질로, 일반적으로

삼중항 상태 이상으로 여기시키는 다중항 여기(multiple excitation)에 의해 발광하는 금속 착체(metal complex)와 같은 물질이 사용될 수 있다. 상기 도펀트는 예컨대 무기, 유기, 유무기 화합물일 수 있으며, 1종 또는 2종 이상 포함될 수 있다.

상기 도펀트의 일 예로 인광 도펀트를 들 수 있으며, 인광 도펀트의 예로는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합을 포함하는 유기 금속화합물을 들 수 있다. 상기 인광 도펀트는 예컨대 하기 화학식 Z로 표현되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[화학식 Z]

L_2MX

상기 화학식 Z에서, M은 금속이고, L 및 X는 서로 같거나 다르며 M과 착화합물을 형성하는 리간드이다.

상기 M은 예컨대 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합일 수 있고, 상기 L 및 X는 예컨대 바이덴테이트 리간드일 수 있다.

이하 전술한 유기 광전자 소자용 화합물을 적용한 유기 광전자 소자를 설명한다.

또 다른 구현예에 따른 유기 광전자 소자는 서로 마주하는 양극과 음극, 그리고 상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 한 층의 유기층을 포함하고, 상기 유기층은 전술한 유기 광전자 소자용 화합물을 포함할 수 있다.

일 예로 상기 유기층은 발광층을 포함하고, 본 발명의 유기 광전자 소자용 화합물은 상기 발광층의 호스트, 예컨대 그린 호스트로서 포함될 수 있다.

또한, 상기 유기층은 발광층, 및 정공주입층, 정공수송층, 전자차단층, 전자수송층, 전자주입층 및 정공차단층에서 선택된 적어도 하나의 보조층을 포함하고, 상기 보조층은 상기 유기 광전자 소자용 화합물을 포함할 수 있다.

상기 보조층은 발광층에 인접한 전자수송보조층을 더 포함하고, 상기 전자수송보조층은 상기 유기 광전자 소자용 화합물을 포함할 수 있다.

상기 유기 광전자 소자는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이면 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 및 유기 감광체 드럼 등을 들 수 있다.

여기서는 유기 광전자 소자의 일 예인 유기 발광 소자를 도면을 참고하여 설명한다.

도 1 및 도 2는 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.

도 1을 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자(100)는 서로 마주하는 양극(120)과 음극(110), 그리고 양극(120)과 음극(110) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.

양극(120)은 예컨대 정공 주입이 원활하도록 일 함수가 높은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 양극(120)은 예컨대 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO와 Al 또는 SnO_2와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리(3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜)(polyehtylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 도전성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

음극(110)은 예컨대 전자 주입이 원활하도록 일 함수가 낮은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 음극(110)은 예컨대 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al, LiO_2/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF_2/Ca과 같은 다층 구조 물질을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

유기층(105)은 전술한 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하는

발광층(130)을 포함한다.

도 2는 다른 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.

도 2를 참고하면, 유기 발광 소자(200)는 발광층(130) 외에 정공 보조층(140)을 더 포함한다. 정공 보조층(140)은 양극(120)과 발광층(130) 사이의 정공 주입 및/또는 정공 이동성을 더욱 높이고 전자를 차단할 수 있다. 정공 보조층(140)은 예컨대 정공 수송층, 정공 주입층 및/또는 전자 차단층일 수 있으며, 적어도 1층을 포함할 수 있다.

도 1 또는 도 2의 유기층(105)은 도시하지는 않았지만, 전자주입층, 전자수송층, 전자수송보조층, 정공수송층, 정공수송보조층, 정공주입층 또는 이들의 조합층을 추가로 더 포함할 수 있다. 본 발명의 유기 광전자 소자용 화합물은 이들 유기층에 포함될 수 있다. 유기 발광 소자(100, 200)는 기판 위에 양극 또는 음극을 형성한 후, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금 및 이온도금과 같은 건식성막법; 또는 스핀코팅(spin coating), 침지법(dipping), 유동코팅법(flow coating)과 같은 습식성막법 등으로 유기층을 형성한 후, 그 위에 음극 또는 양극을 형성하여 제조할 수 있다.

전술한 유기 발광 소자는 유기 발광 표시 장치에 적용될 수 있다.

【발명의 실시를 위한 형태】

이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

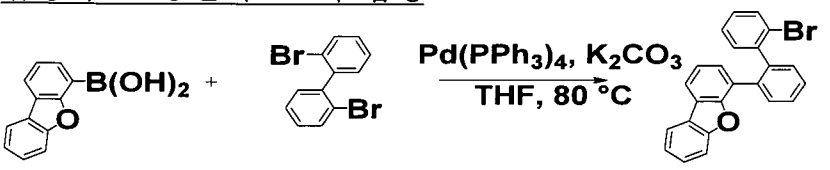
이하, 실시예 및 합성예에서 사용된 출발물질 및 반응물질은 특별한 언급이 없는 한, Sigma-Aldrich 社 또는 TCI 社에서 구입하였거나, 공지된 방법을 통해 합성하였다.

(유기 광전자 소자용 화합물의 제조)

본 발명의 화합물의 보다 구체적인 예로서 제시된 화합물을 하기 단계를 통해 합성하였다.

(제1 유기 광전자 소자용 화합물)

합성예 1: 중간체 I-1의 합성



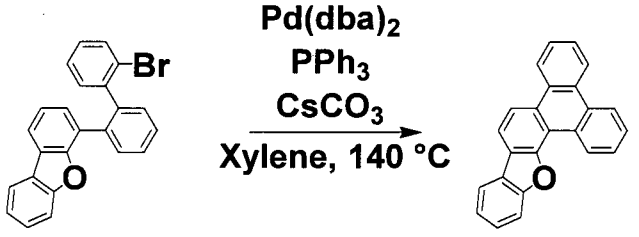
I - 1

질소 환경에서 tokyo chemical industry(http://www.tcichemicals.com/)사에서 구입한 dibenzofuran-4-boronic acid(50 g, 236 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.8 L에 녹인 후, 여기에 Mascot (Asia) Company Limited에서 구입한 2,2'-dibromobiphenyl(110 g, 354 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(2.72 g, 2.86 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassuim carbonate(81.5 g, 59.0 mmol)을 넣고 80 ℃에서 12시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 $MgSO_4$로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-1(49.7 g, 53 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H15BrO: 398.0306, found: 398.

Elemental Analysis: C, 72 %; H, 4 %

합성예 2: 중간체 I-2의 합성



I - 1 I - 2

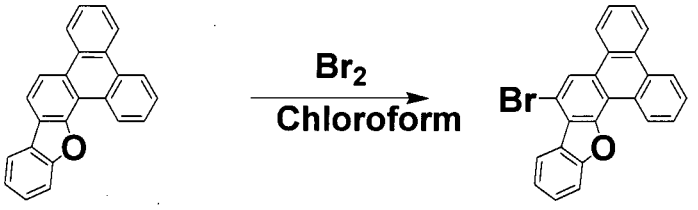
질소 환경에서 중간체 I-1(50 g, 236 mmol)을 xylene 0.5 L에 녹인 후, 여기에 bis(dibenzylideneacetone)palladium(0)(3.48 g, 6.05 mmol)와 triphenylphosphine(6.35 g, 2.42 mmol) 그리고 cesium carbonate(47.3 g, 145 mmol)을 넣고 140 ℃에서 27시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후

반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 $MgSO_4$로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-2(27.6 g, 72 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H14O: 318.1045, found: 318.

Elemental Analysis: C, 91 %; H, 4 %

합성예 3: 중간체 I-3의 합성



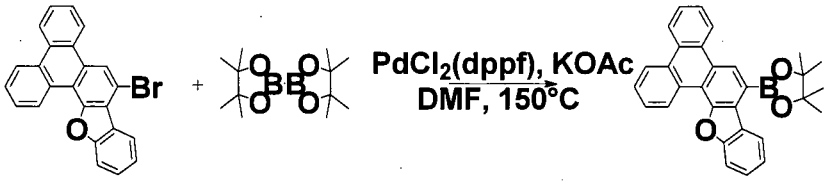
I-2 I-3

질소 환경에서 중간체 I-2(27 g, 84.8 mmol)을 chloroform 0.1 L에 녹인 후, 여기에 bromine(3.01 g, 18.9 mmol)을 넣고 반응 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물에 포화된 sodium thiosulfate(6.62 g, 41.9 mmol) 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 $MgSO_4$로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-3(21.2 g, 63 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H13BrO: 396.0150, found: 396.

Elemental Analysis: C, 73 %; H, 3 %

합성예 4: 중간체 I-4의 합성



I-3 I-4

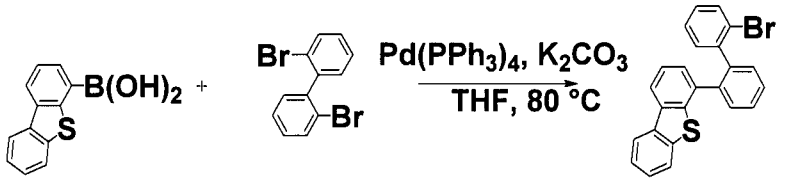
질소 환경에서 중간체 I-3(20g, 50.3 mmol)을 dimethylforamide(DMF) 0.6 L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (15.3 g, 60.4 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.41 g, 0.5

mmol) 그리고 potassium acetate(14.8 g, 151 mmol)을 넣고 150 ℃에서 3시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-4(19.9 g, 89 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C30H25BO3: 444.1897, found: 444.

Elemental Analysis: C, 81 %; H, 6 %

합성예 5: 중간체 I-5의 합성



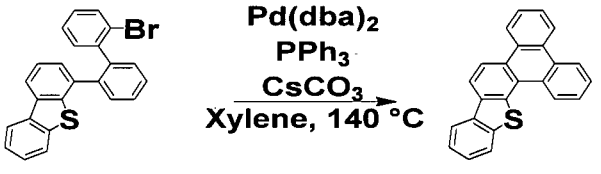
I-5

합성예 1과 동일한 방법으로 tokyo chemical industry(http://www.tcichemicals.com/)사에서 구입한 dibenzothiophene-4-boronic acid(50 g, 219 mmol)와 Mascot (Asia) Company Limited에서 구입한 2,2'-dibromobiphenyl(102 g, 329 mmol)을 사용하여 중간체 I-5(54.6 g, 60 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H15BrS: 414.0078, found: 414.

Elemental Analysis: C, 69 %; H, 4 %

합성예 6: 중간체 I-6의 합성



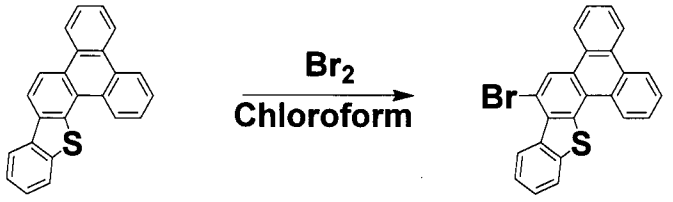
I-5 I-6

합성예 2와 동일한 방법으로 중간체 I-5(50 g, 120 mmol)를 사용하여 중간체 I-6(34.2 g, 85 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H14S: 334.0816, found: 334.

Elemental Analysis: C, 86 %; H, 4 %

합성예 7: 중간체 I-7의 합성



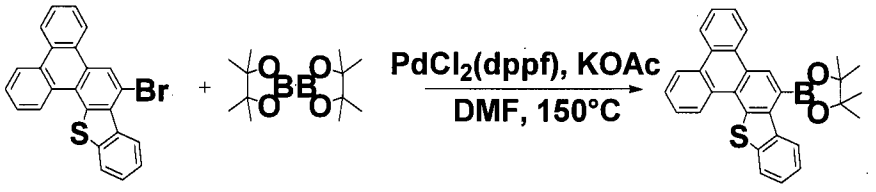
I-6 I-7

합성예 3과 동일한 방법으로 중간체 I-6(32 g, 95.7 mmol)을 사용하여 중간체 I-7(28.5 g, 72 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H13BrS: 411.9921, found: 412.

Elemental Analysis: C, 70 %; H, 3 %

합성예 8: 중간체 I-8의 합성



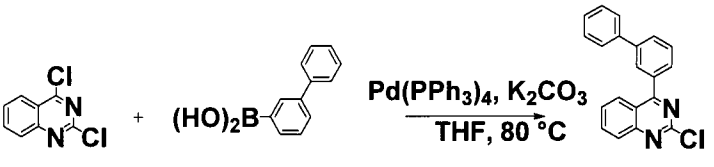
I-7 I-8

합성예 4와 동일한 방법으로 중간체 I-7(28 g, 67.7 mmol)을 사용하여 중간체 I-8(29.6 g, 95 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C30H25BO2S: 460.1668, found: 460.

Elemental Analysis: C, 78 %; H, 5 %

합성예 9: 중간체 I-9의 합성



I-9

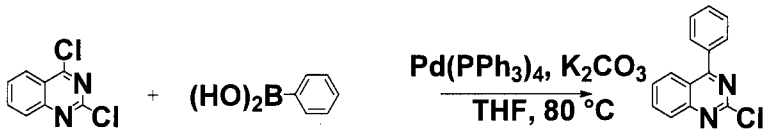
합성예 1과 동일한 방법으로 P&H tech(http://www.phtech.co.kr/)사에서 구입한 2,4-dichloroquinazoline(100 g, 502 mmol)와 biphenyl-3-boronic acid(89.5

g, 452 mmol)을 사용하여 중간체 I-9(77.3 g, 54 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C20H13ClN2: 316.0767, found: 316.

Elemental Analysis: C, 76 %; H, 4 %

합성예 10: 중간체 I-10의 합성



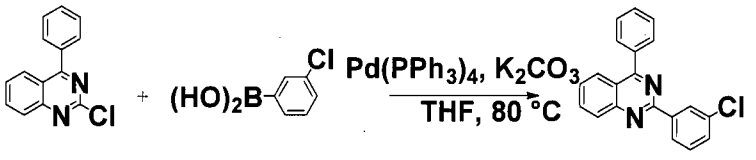
I - 10

합성예 1과 동일한 방법으로 P&H tech(http://www.phtech.co.kr/)사에서 구입한 2,4-dichloroquinazoline(100 g, 502 mmol)와 phenylboronic acid(55.1 g, 452 mmol)을 사용하여 중간체 I-10(65.3 g, 60 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C14H9ClN2: 240.0454, found: 240.

Elemental Analysis: C, 70 %; H, 4 %

합성예 11: 중간체 I-11의 합성



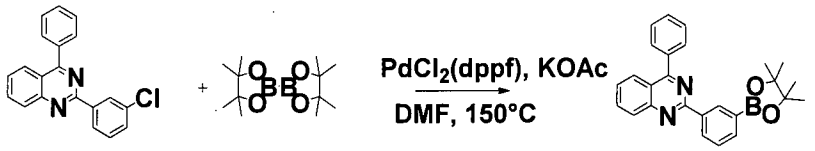
I - 10 I - 11

합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-10(60 g, 249 mmol)과 3-chlorophenylboronic acid(42.8 g, 274 mmol)을 사용하여 중간체 I-11(74.9 g, 95 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C20H13ClN2: 316.0767, found: 316.

Elemental Analysis: C, 76 %; H, 4 %

합성예 12: 중간체 I-12의 합성



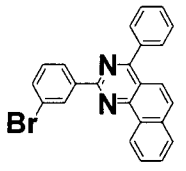
I-11 I-12

합성예 4와 동일한 방법으로 중간체 I-11(70 g, 221 mmol)을 사용하여 중간체 I-12(60.5 g, 67 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C26H25BN2O2: 408.2009, found: 408.

Elemental Analysis: C, 76 %; H, 6 %

합성예 13: 중간체 I-13의 합성



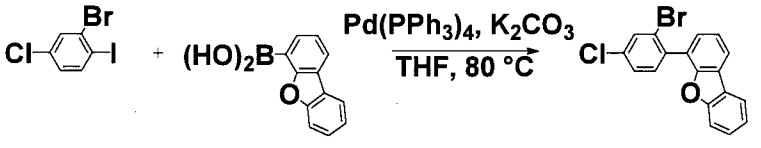
I-13

공개특허 KR10-2015-0140127의 합성법을 참고하여 중간체 I-13을 합성하였다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H15BrN2: 410.0419, found: 410.

Elemental Analysis: C, 70 %; H, 4 %

합성예 14: 중간체 I-14의 합성



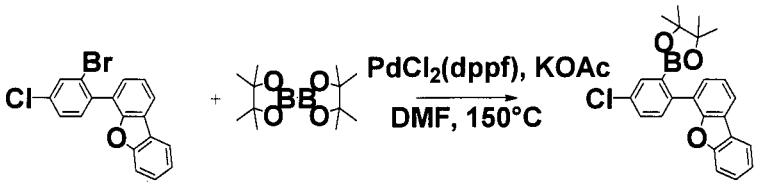
I-14

합성예 1과 동일한 방법으로 sigma aldrich(http://www.sigmaaldrich.com/)사에서 구입한 2-bromo-4-chloro-1-iodobenzene(50 g, 158 mmol)과 dibenzofuran-4-boronic acid(40.1 g, 189 mmol)을 사용하여 중간체 I-14(22.8 g, 40 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C18H10BrClO: 355.9604, found: 356.

Elemental Analysis: C, 60 %; H, 3 %

합성예 15: 중간체 I-15의 합성



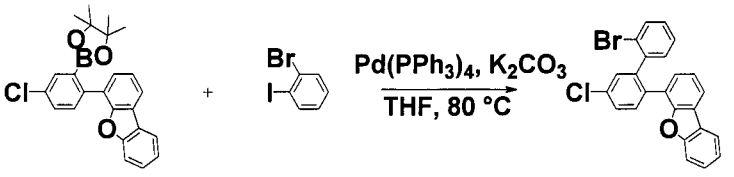
I - 14 I - 15

합성예 4와 동일한 방법으로 중간체 I-14(22.8 g, 63.8 mmol)를 사용하여 중간체 I-15(6.7 g, 26 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H22BClO3: 404.1351, found: 404.

Elemental Analysis: C, 71 %; H, 5 %

합성예 16: 중간체 I-16의 합성



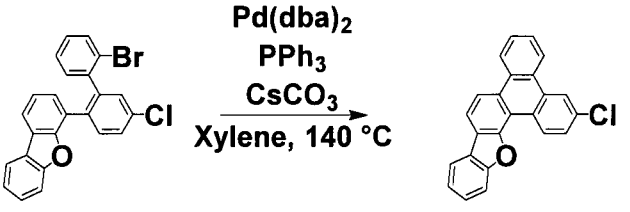
I - 15 I - 16

합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-15(6.7 g, 16.6 mmol)와 1-bromo-2-iodobenzene(5.62 g, 19.9 mmol)을 사용하여 중간체 I-16(7.06 g, 98 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H14BrClO: 431.9917, found: 432.

Elemental Analysis: C, 66 %; H, 3 %

합성예 17: 중간체 I-17의 합성



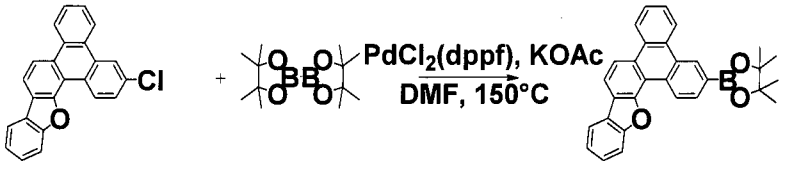
I - 16 I - 17

합성예 2와 동일한 방법으로 중간체 I-16(7 g, 16.1 mmol)을 사용하여 중간체 I-17(4.73 g, 83 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H13ClO: 352.0655, found: 352.

Elemental Analysis: C, 82 %; H, 4 %

합성예 18: 중간체 I-18의 합성



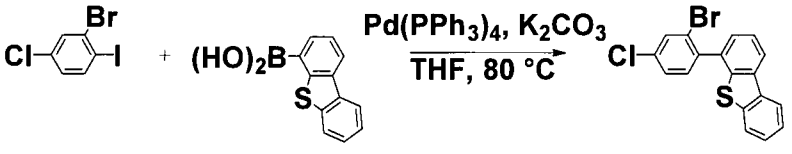
I-17 I-18

합성예 4와 동일한 방법으로 중간체 I-17(4.5 g, 12.8 mmol)을 사용하여 중간체 I-18(3.91 g, 69 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C30H25BO3: 444.1897, found: 444.

Elemental Analysis: C, 81 %; H, 6 %

합성예 19: 중간체 I-19의 합성



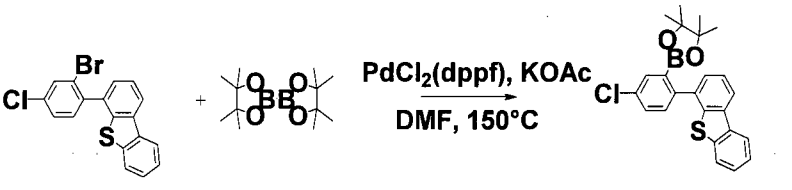
I-19

합성예 1과 동일한 방법으로 sigma aldrich(http://www.sigmaaldrich.com/)사에서 구입한 2-bromo-4-chloro-1-iodobenzene(50 g, 158 mmol)과 dibenzothiophene-4-boronic acid(43.1 g, 189 mmol)을 사용하여 중간체 I-19(30.1 g, 51 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C18H10BrClS: 371.9375, found: 372.

Elemental Analysis: C, 58 %; H, 3 %

합성예 20: 중간체 I-20의 합성



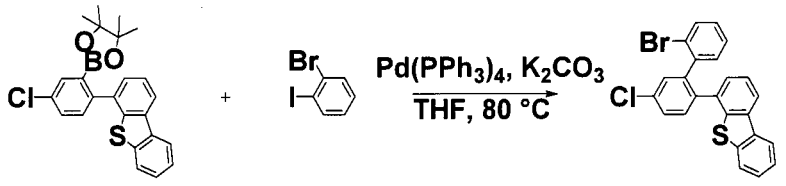
I-19 I-20

합성예 4와 동일한 방법으로 중간체 I-19(29 g, 77.6 mmol)를 사용하여 중간체 I-20(12.1 g, 37 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H22BClO2S: 420.1122, found: 420.

Elemental Analysis: C, 71 %; H, 5 %

합성예 21: 중간체 I-21의 합성



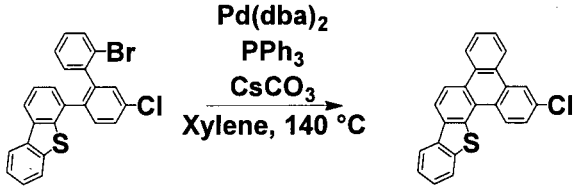
I - 20 I - 21

합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-20(11.5 g, 27.3 mmol)과 1-bromo-2-iodobenzene(8.51 g, 30.1 mmol)을 사용하여 중간체 I-21(11.7 g, 95 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H14BrClS: 447.9688, found: 448.

Elemental Analysis: C, 64 %; H, 3 %

합성예 22: 중간체 I-22의 합성



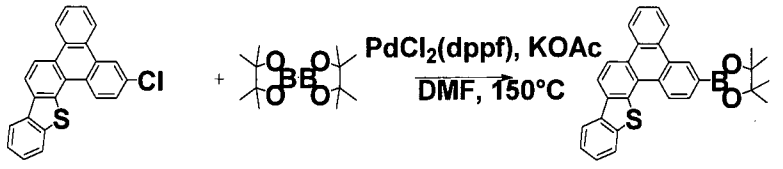
I - 21 I - 22

합성예 2와 동일한 방법으로 중간체 I-21(11 g, 24.5 mmol)을 사용하여 중간체 I-22(7.67 g, 85 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H13ClS: 368.0426, found: 368.

Elemental Analysis: C, 78 %; H, 4 %

합성예 23: 중간체 I-23의 합성



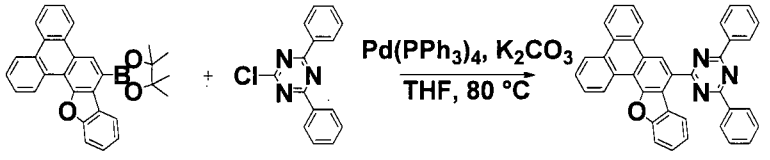
I - 22 I - 23

합성예 4와 동일한 방법으로 중간체 I-22(7 g, 19.0 mmol)를 사용하여 중간체 I-23(6.47 g, 74 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C30H25BO2S: 460.1668, found: 460.

Elemental Analysis: C, 78 %; H, 5 %

합성예 24: 화합물 A-1의 합성



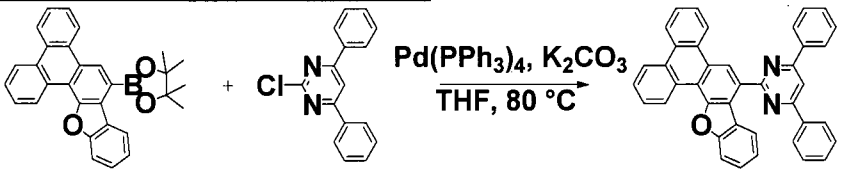
I - 4 A - 1

합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-4(10 g, 22.5 mmol)와 tokyo chemical industry(http://www.tcichemicals.com/)에서 구입한 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(6.02 g, 22.5 mmol)을 사용하여 화합물 A-1(11.3 g, 91 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C39H23N3O: 549.1841, found: 549.

Elemental Analysis: C, 85 %; H, 4 %

합성예 25: 화합물 A-2의 합성

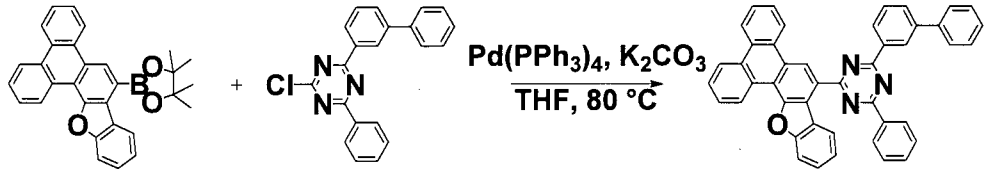


I - 4 A - 2

합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-4(10 g, 22.5 mmol)와 tokyo chemical industry(http://www.tcichemicals.com/)에서 구입한 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine (6.0 g, 22.5 mmol)을 사용하여 화합물 A-2(11.7 g, 95 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C40H24N2O: 548.1889, found: 548.
Elemental Analysis: C, 88 %; H, 4 %

합성예 26: 화합물 A-9의 합성

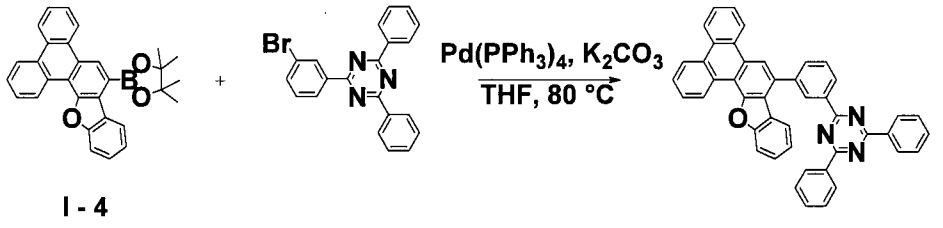


I-4 A-9

합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-4(10 g, 22.5 mmol)와 richest group(http://www.richest-group.com/)에서 구입한 2-(biphenyl-3-yl)-4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine(7.74 g, 22.5 mmol)을 사용하여 화합물 A-9(12.7 g, 90 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C45H27N3O: 625.2154, found: 625.
Elemental Analysis: C, 86 %; H, 4 %

합성예 27: 화합물 A-21의 합성



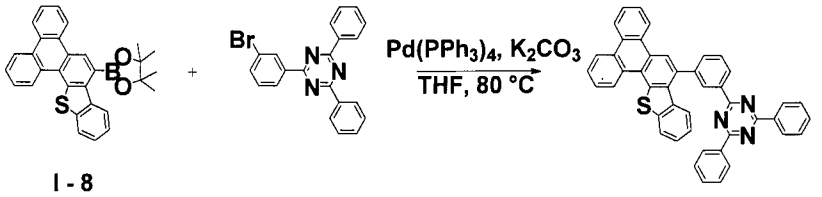
I-4

A-21

합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-4(10 g, 22.5 mmol)와 richest group(http://www.richest-group.com/)에서 구입한 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(8.74 g, 22.5 mmol)을 사용하여 화합물 A-21(13.4 g, 95 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C45H27N3O: 625.2154, found: 625.
Elemental Analysis: C, 86 %; H, 4 %

합성예 28: 화합물 A-54의 합성



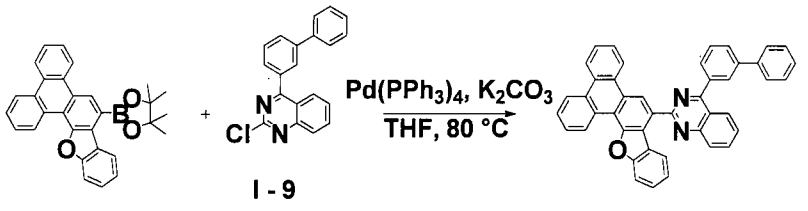
I-8 A-54

합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-8(10 g, 21.7 mmol)와 richest group(http://www.richest-group.com/)에서 구입한 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(8.43 g, 21.7 mmol)을 사용하여 화합물 A-54(13.4 g, 96 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C45H27N3S: 641.1926, found: 641.

Elemental Analysis: C, 84 %; H, 4 %

합성예 29: 화합물 A-72의 합성



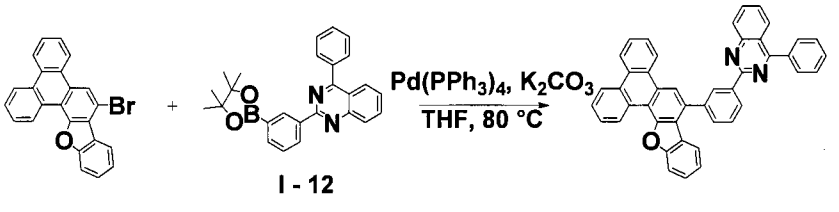
I-4 I-9 A-72

합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-4(10 g, 22.5 mmol)와 중간체 I-9(7.13 g, 22.5 mmol)를 사용하여 화합물 A-72(12.3 g, 91 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C44H26N2O: 598.2045, found: 598.

Elemental Analysis: C, 88 %; H, 4 %

합성예 30: 화합물 A-75의 합성



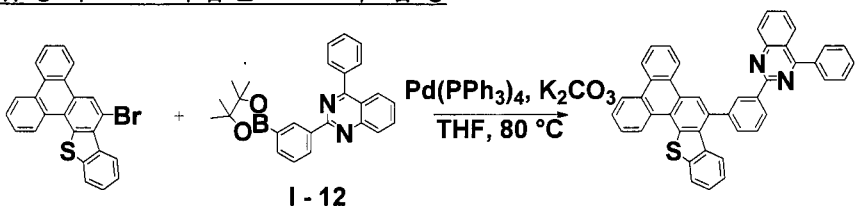
I-3 I-12 A-75

합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-3(10 g, 25.2 mmol)와 중간체 I-12(10.3 g, 25.2 mmol)를 사용하여 화합물 A-75(13.3 g, 88 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C44H26N2O: 598.2045, found: 598.

Elemental Analysis: C, 88 %; H, 4 %

합성예 31: 화합물 A-91의 합성



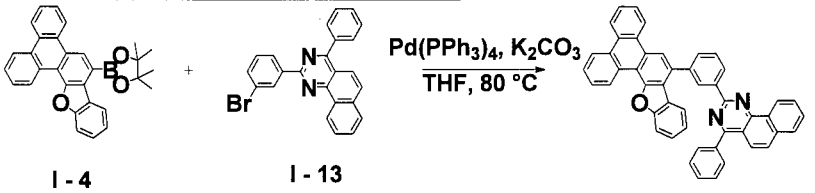
I-7 I-12 A-91

합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-7(10 g, 24.2 mmol)과 중간체 I-12(9.88 g, 24.2 mmol)를 사용하여 화합물 A-91(13.7 g, 92 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C44H26N2S: 614.1817, found: 614.

Elemental Analysis: C, 86 %; H, 4 %

합성예 32: 화합물 A-106의 합성



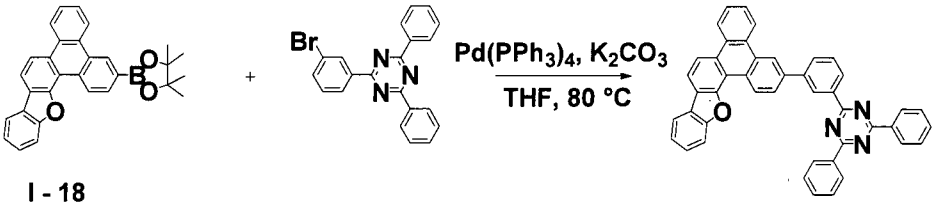
I-4 I-13 A-106

합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-4(10 g, 22.5 mmol)와 중간체 I-13(9.25 g, 22.5 mmol)을 사용하여 화합물 A-106(13.6 g, 93 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C48H28N2O: 648.2202, found: 648.

Elemental Analysis: C, 89 %; H, 4 %

합성예 33: 화합물 B-9의 합성



I-18 B-9

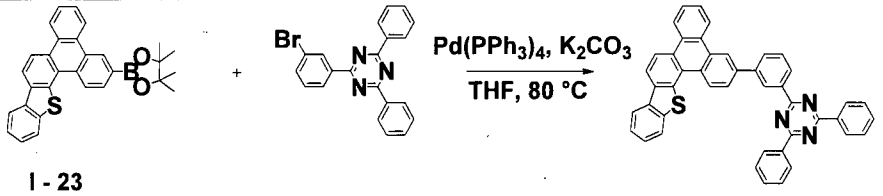
합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-18(3 g, 6.75 mmol)와 richest group(http://www.richest-group.com/)에서 구입한

2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(2.62 g, 6.75 mmol)을 사용하여 화합물 B-9(3.93 g, 93 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C45H27N3O: 625.2154, found: 625.

Elemental Analysis: C, 86 %; H, 4 %

합성예 34: 화합물 B-29의 합성



I - 23 B - 29

합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 I-23(5 g, 10.9 mmol)과 richest group(http://www.richest-group.com/)에서 구입한 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(4.22 g, 10.9 mmol)을 사용하여 화합물 B-29(6.23 g, 89 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C45H27N3S: 641.1926, found: 641.

Elemental Analysis: C, 84 %; H, 4 %

유기 발광 소자의 제작(Green)

실시예 1

합성예 24에서 얻은 화합물 A-1을 호스트로 사용하고, $Ir(PPy)_3$를 도펀트로 사용하여 유기발광소자를 제작하였다.

양극으로는 ITO를 1000 Å의 두께로 사용하였고, 음극으로는 알루미늄(Al)을 1000 Å의 두께로 사용하였다. 구체적으로, 유기발광소자의 제조방법을 설명하면, 양극은 15 Ω/㎠의 면저항값을 가진 ITO 유리 기판을 50mm × 50 mm × 0.7 mm의 크기로 잘라서 아세톤과 이소프로필알코올과 순수물 속에서 각 15 분 동안 초음파세정한 후, 30 분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다.

상기 기판 상부에 진공도 650×10^{-7}Pa, 증착속도 0.1 내지 0.3 nm/s의 조건으로

N4,N4'-di(naphthalen-1-yl)-N4,N4'-diphenylbiphenyl-4,4'-diamine (NPB) (80 nm)를 증착하여 800 Å의 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 동일한 진공 증착조건에서 합성예 24에서 얻은 화합물 A-1을 이용하여 막 두께 300 Å의 발광층을 형성하였고, 이 때, 인광 도펀트인 $Ir(PPy)_3$을 동시에 증착하였다. 이 때, 인광 도펀트의 증착속도를 조절하여, 발광층의 전체량을 100 중량%로 하였을 때, 인광 도펀트의 배합량이 7 중량%가 되도록 증착하였다.

상기 발광층 상부에 동일한 진공 증착조건을 이용하여 Bis(2-methyl-8-quinolinolate)-4-(phenylphenolato)aluminium (BAlq)를 증착하여 막 두께 50 Å의 정공저지층을 형성하였다. 이어서, 동일한 진공 증착조건에서 Alq_3를 증착하여, 막 두께 200 Å의 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 음극으로서 LiF와 Al을 순차적으로 증착하여 유기광전소자를 제작하였다.

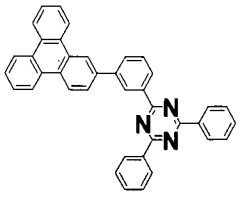
상기 유기광전소자의 구조는 ITO/ NPB (80 nm)/ EML (화합물 A-1 (93 중량%) + $Ir(PPy)_3$(7 중량%), 30 nm)/ BAlq (5 nm)/ Alq3 (20 nm)/ LiF (1 nm) / Al (100 nm) 의 구조로 제작하였다.

실시예 2 내지 실시예 7

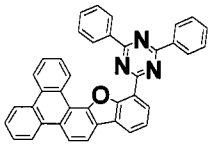
하기 표 1에 기재된 화합물을 실시예 1의 화합물 A-1 대신 사용한 것을 제외하고 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 실시예 2 내지 7의 각각의 유기발광소자를 제조하였다.

비교예 1 내지 비교예 4

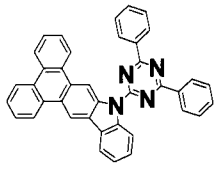
합성예 24에서 얻은 화합물 A-1 대신 4,4'-di(9-carbazol-9-yl)biphenyl (CBP), 하기 Host 1, Host 2, 및 Host 3의 화합물을 각각 사용한 것을 제외하고 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 비교예 1 내지 비교예 4 각각의 유기발광소자를 제조하였다.



Host 1



Host 2



Host 3

평가 I

실시예 1 내지 7과 비교예 1 내지 4에 따른 유기발광소자의 전압에 따른 전류밀도 변화, 휘도 변화, 발광효율 및 구동전압을 측정하였다.

구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 표 1과 같다.

(1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

(2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그 때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

(3) 발광효율 측정

상기 (1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm^2)의 전류 효율(cd/A) 을 계산하였다.

(4) 구동전압 측정

전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 15 mA/cm^2에서 각 소자의 구동전압을 측정하였다.

[표 1]

No.	화합물	구동전압 (V)	색(EL color)	효율(cd/A)
실시예 1	A-1	3.44	Green	89.5
실시예 2	A-2	3.46	Green	89.9
실시예 3	A-9	3.48	Green	90.0
실시예 4	A-21	3.50	Green	90.1

실시예 5	A-54	3.52	Green	91.5
실시예 6	B-9	3.51	Green	89.2
실시예 7	B-29	3.49	Green	88.9
비교예 1	CBP	4.80	Green	31.4
비교예 2	Host 1	3.65	Green	79.8
비교예 3	Host 2	4.32	Green	80.2
비교예 4	Host 3	4.10	Green	85.0

상기 표 1의 결과에 따르면, 실시예 1 내지 실시예 7의 소자결과가 비교예 1 내지 비교예 4의 소자결과에 비해 구동전압이 확연하게 낮아지고, 효율 역시 동등이상으로 향상되었음을 확인 할 수 있었다.

5

유기 발광 소자의 제작(Red)

실시예 8

합성예 29에서 얻은 화합물 A-72를 호스트로 사용하고, acetylacetonatobis(2-phenylquinolinato)iridium ($Ir(pq)_2acac$)를 도펀트로 사용하여 유기발광소자를 제작하였다.

양극으로는 ITO를 1500 Å의 두께로 사용하였고, 음극으로는 알루미늄(Al)을 1000 Å의 두께로 사용하였다. 구체적으로, 유기발광소자의 제조방법을 설명하면, 양극은 15 Ω/㎠의 면저항값을 가진 ITO 유리 기판을 50mm × 50 mm × 0.7 mm의 크기로 잘라서 아세톤과 이소프로필알코올과 순수물 속에서 각 15 분 동안 초음파세정한 후, 30 분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다.

상기 기판 상부에 진공도 650×10^{-7}Pa, 증착속도 0.1 내지 0.3 nm/s의 조건으로

4,4'-bis[N-[4-{N,N-bis(3-methylphenyl)amino}-phenyl]-N-phenylamino]biphenyl [DNTPD]를 진공 증착하여 600Å두께의 정공 주입층을 형성하였다. 이어서 동일한 진공 증착조건에서 HT-1(N-(biphenyl-4-yl)-N-(4-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)phenyl)biphenyl

-4-amine)을 진공 증착으로 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 다음으로, 동일한 진공 증착조건에서 합성예 29에서 얻은 화합물 A-72를 이용하여 막 두께 300 Å의 발광층을 형성하였고, 이 때, 인광 도펀트인 acetylacetonatobis(2-phenylquinolinato)iridium ($Ir(pq)_2acac$)을 동시에 증착하였다. 이 때, 인광 도펀트의 증착속도를 조절하여, 발광층의 전체량을 100 중량%로 하였을 때, 인광 도펀트의 배합량이 7 중량%가 되도록 증착하였다.

상기 발광층 상부에 동일한 진공 증착조건을 이용하여 Bis(2-methyl-8-quinolinolate)-4-(phenylphenolato)aluminium (BAlq)를 증착하여 막 두께 50 Å의 정공저지층을 형성하였다. 이어서, 동일한 진공 증착조건에서 Tris(8-hydroxyquinolinato)aluminium (Alq_3)를 증착하여, 막 두께 250 Å의 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 음극으로서 LiF와 Al을 순차적으로 증착하여 유기광전소자를 제작하였다.

상기 유기광전소자의 구조는 ITO/ DNTPD (60 nm)/ HT-1 (30 nm)/ EML (화합물 A-72 (93 중량%) + $Ir(pq)_2acac$(7 중량%), 30 nm)/ Balq (5 nm)/ Alq_3 (25 nm)/ LiF (1 nm) / Al (100 nm) 의 구조로 제작하였다.

실시예 9 내지 실시예 11

합성예 29의 화합물 A-72 대신 하기 표 2에 기재된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 8과 동일한 방법으로 실시예 9 내지 실시예 11의 유기발광소자를 각각 제조하였다.

비교예 5

합성예 29의 화합물 A-72 대신 4,4'-di(9-carbazol-9-yl)biphenyl (CBP)를 사용한 것을 제외하고는 실시예 8과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

평가 Ⅱ

실시예 8 내지 11과 비교예 5에 따른 유기발광소자의 전압에 따른

전류밀도 변화, 휘도 변화, 발광효율 및 구동전압을 상기 평가 I 과 동일한 방법으로 측정하여 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[표 2]

No.	화합물	구동전압 (V)	색(EL color)	효율(cd/A)
실시예 8	A-72	5.0	Red	46.3
실시예 9	A-75	5.5	Red	45.8
실시예 10	A-91	5.7	Red	47.0
실시예 11	A-106	4.8	Red	45.1
비교예 5	CBP	7.4	Red	37.2

표 2를 참고하면, 실시예 8 내지 11에 따른 유기발광소자는 비교예 5에 따른 유기발광소자와 비교하여 발광효율 및 구동전압 특성이 현저하게 개선된 것을 확인할 수 있다.

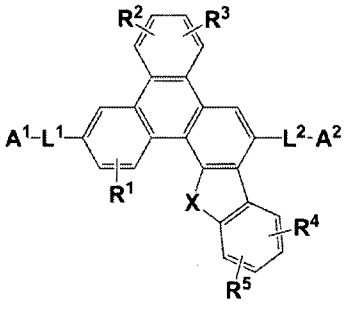
본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

【청구의 범위】

【청구항 1】

하기 화학식 1로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X는 O 또는 S이고,

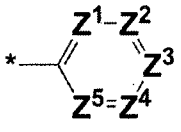
R^1 내지 R^5는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C5 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기이고,

L^1 및 L^2는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

A^1 및 A^2는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

A^1 및 A^2 중 적어도 하나는 하기 화학식 A로 표현되는 모이어티를 포함하고,

[화학식 A]



상기 화학식 A에서,

Z^1 내지 Z^5은 각각 독립적으로 N 또는 CR^a이고,

Z^1 내지 Z^5 중 적어도 하나는 N이고,

R^a는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C5 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기이고,

R^a는 각각 독립적으로 존재하거나 인접한 기끼리 연결되어 치환 또는 비치환된 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족의 단환식 또는 다환식 고리를

형성하고,

*은 상기 화학식 1의 L^1 또는 L^2와 연결되는 지점이고,

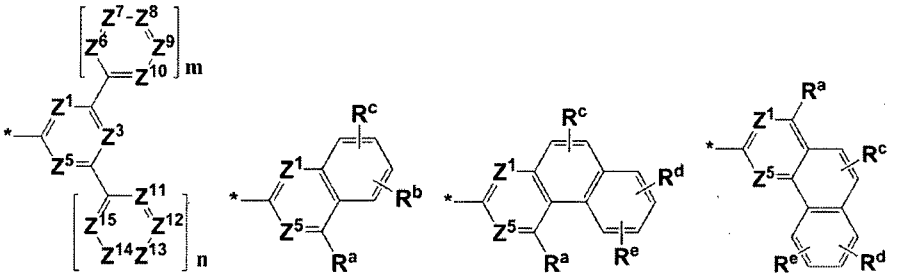
상기 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, 시아노기, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C30 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다.

【청구항 2】

제1항에 있어서,

상기 화학식 A는 하기 화학식 A1, 화학식 A2, 화학식 A3 및 화학식 A4 중 하나로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 A1] [화학식 A2] [화학식 A3] [화학식 A4]



상기 화학식 A1 내지 화학식 A4에서,

Z^1, Z^3, Z^5, 및 Z^6 내지 Z^{15}은 각각 독립적으로 N 또는 CR^a이고,

상기 화학식 A1의 Z^1, Z^3, Z^5, 및 Z^6 내지 Z^{15} 중 적어도 하나는 N이고,

상기 화학식 A2 내지 A4의 Z^1 및 Z^5 중 적어도 하나는 N이고,

m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수 중 하나이고,

R^a 내지 R^e는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C5 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴기이고,

*은 상기 화학식 1의 L^1 또는 L^2와 연결되는 지점이다.

【청구항 3】

제1항에 있어서,

상기 A^1 및 A^2는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는

비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조이소퀴놀리닐기, 또는 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐기이고,

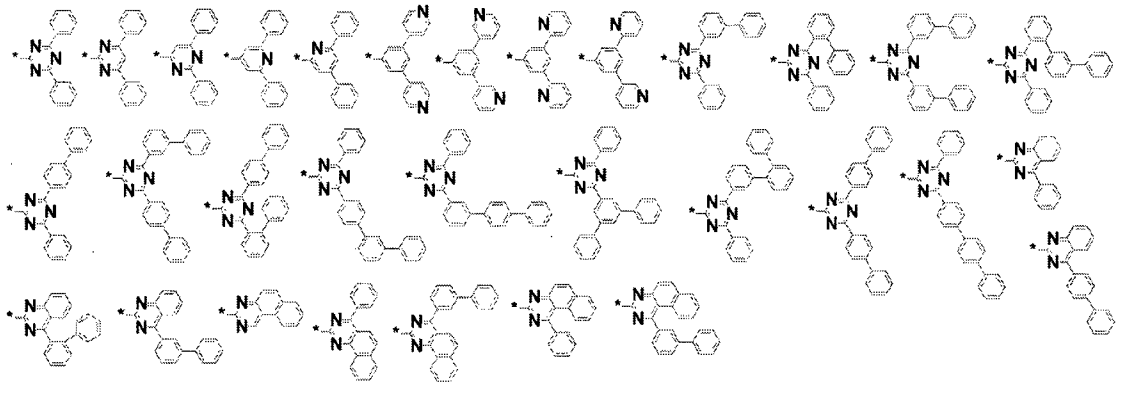
A^1 및 A^2 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조이소퀴놀리닐기, 또는 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐기인 유기 광전자 소자용 화합물.

【청구항 4】

제1항에 있어서,

상기 화학식 A는 하기 그룹 I에 나열된 치환기에서 선택되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[그룹 I]



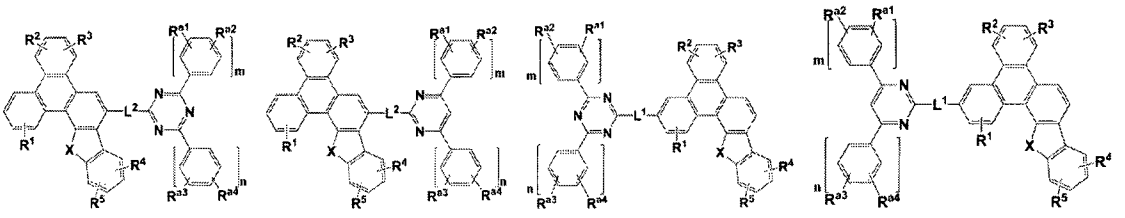
상기 그룹 I에서, *은 상기 화학식 1의 L^1 또는 L^2와 연결되는 지점이다.

【청구항 5】

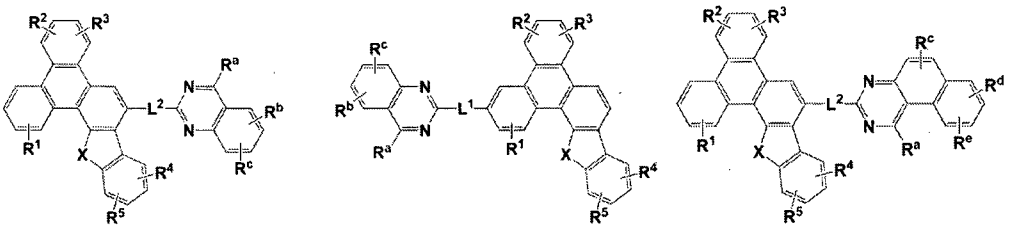
제1항에 있어서,

하기 화학식 1-A1-a1, 화학식 1-A1-a2, 화학식 1-A1-b1, 화학식 1-A1-b2, 화학식 1-A2-a, 화학식 1-A2-b, 화학식 1-A3-a, 화학식 1-A3-b, 화학식 1-A4-a, 및 화학식 1-A4-b 중 어느 하나로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

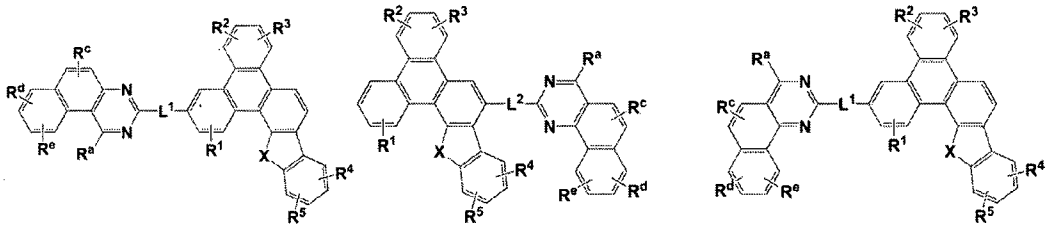
[화학식 1-A1-a1] [화학식 1-A1-a2] [화학식 1-A1-b1] [화학식 1-A1-b2]



[화학식 1-A2-a] [화학식 1-A2-b] [화학식 1-A3-a]



[화학식 1-A3-b] [화학식 1-A4-a] [화학식 1-A4-b]



상기 화학식 1-A1-a1, 화학식 1-A1-a2, 화학식 1-A1-b1, 화학식 1-A1-b2, 화학식 1-A2-a, 화학식 1-A2-b, 화학식 1-A3-a, 화학식 1-A3-b, 화학식 1-A4-a, 및 화학식 1-A4-b에서,

X는 O 또는 S이고,

R^1 내지 R^5, R^a, R^{a1} 내지 R^{a4}, R^b, R^c, R^d, 및 R^e는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C5 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기이고,

L^1 및 L^2는 각각 독립적으로 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴렌기이고,

m 및 n은 0 또는 2의 정수이다.

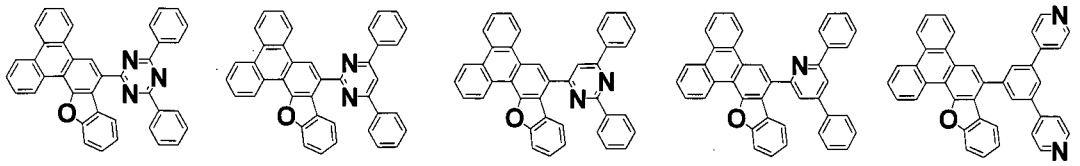
【청구항 6】

제1항에 있어서,

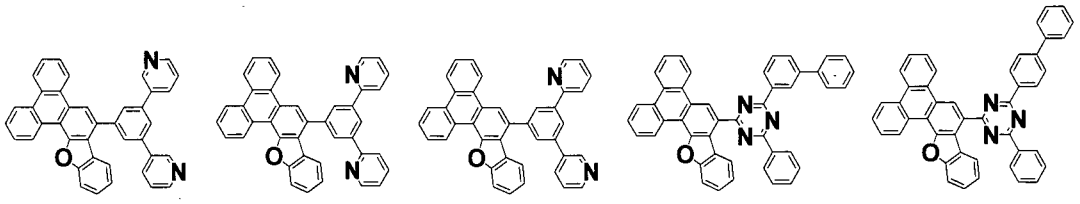
하기 그룹 1에 나열된 화합물에서 선택되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[그룹 1]

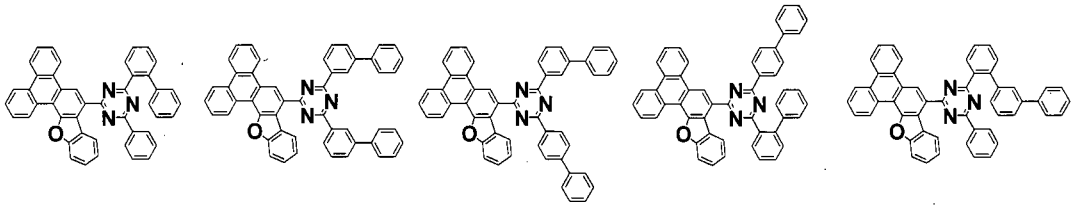
[A-1][A-2][A-3][A-4][A-5]



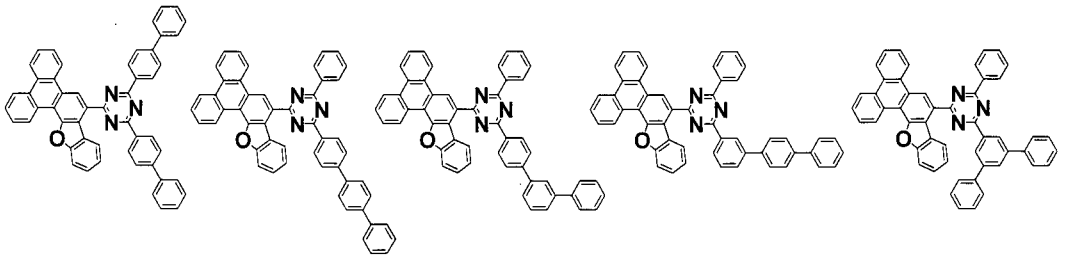
[A-6][A-7][A-8][A-9][A-10]



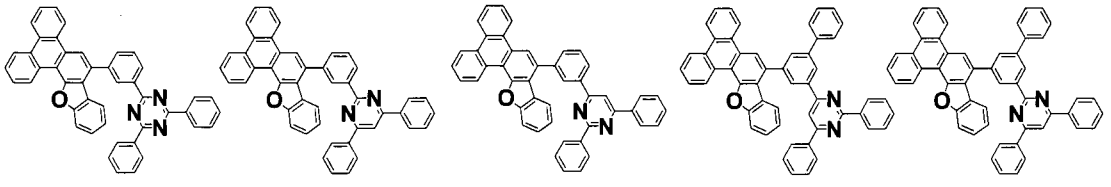
[A-11][A-12][A-13][A-14][A-15]



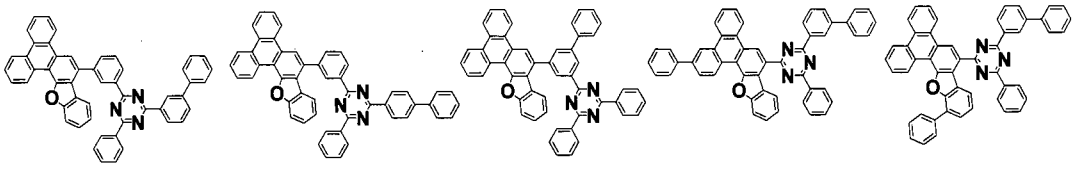
[A-16][A-17][A-18][A-19][A-20]



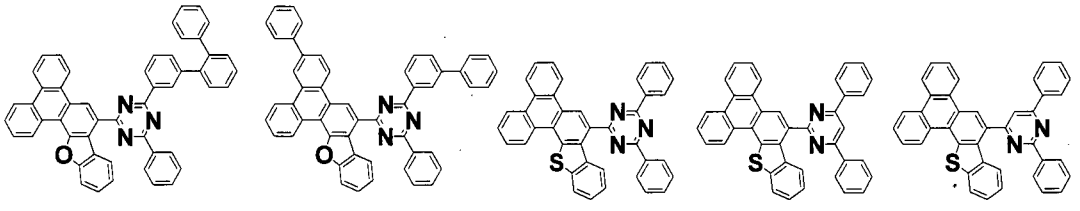
[A-21][A-22][A-23][A-24][A-25]



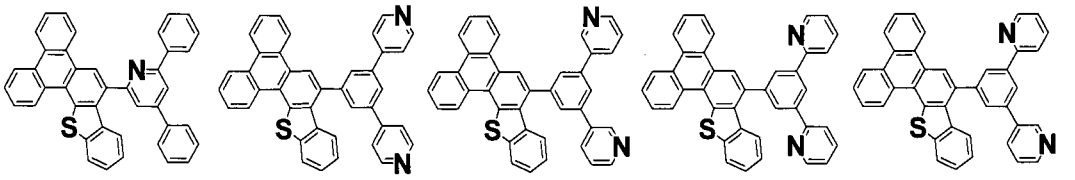
[A-26][A-27][A-28][A-29][A-30]



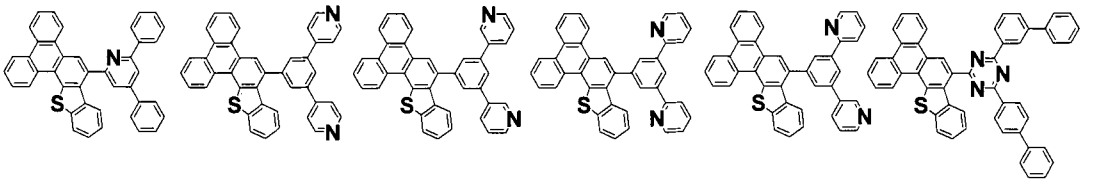
[A-31][A-32][A-33][A-34][A-35]



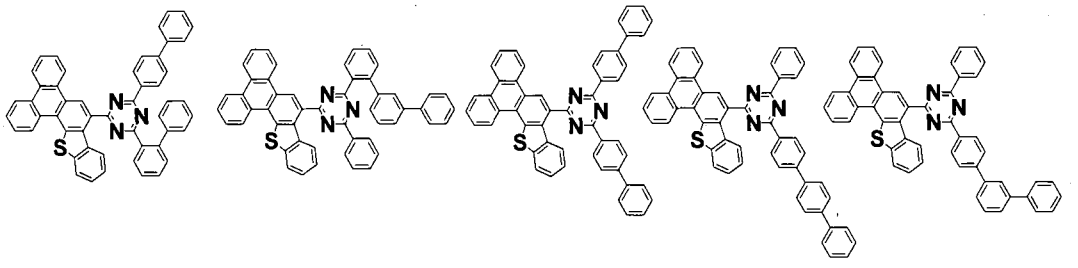
[A-36][A-37][A-38][A-39][A-40]



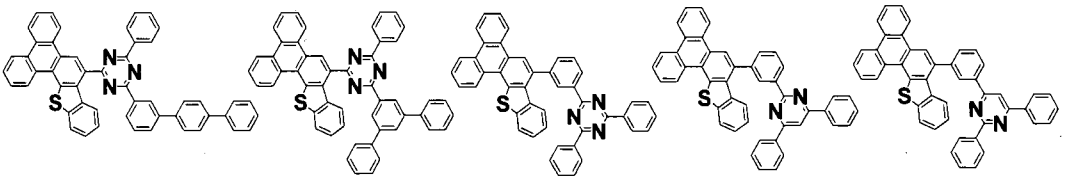
[A-41][A-42][A-43][A-44][A-45][A-46]



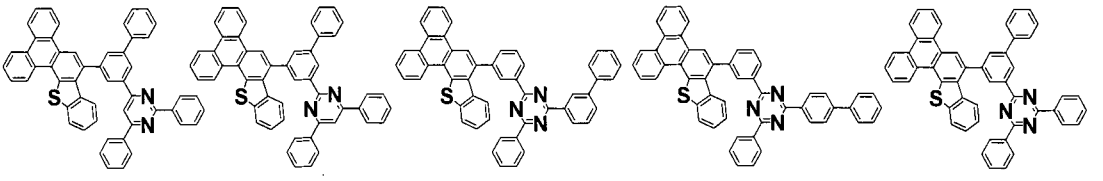
[A-47][A-48][A-49][A-50][A-51]



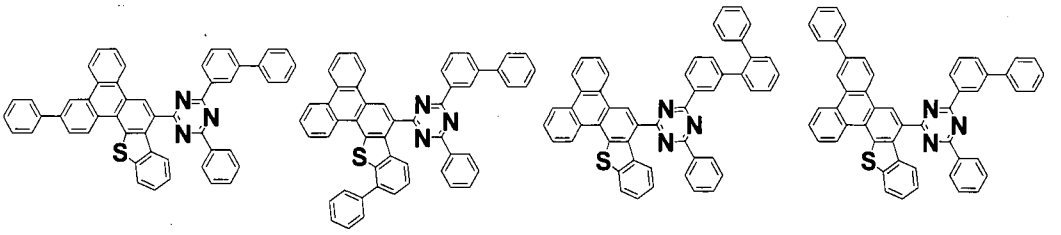
[A-52][A-53][A-54][A-55][A-56]



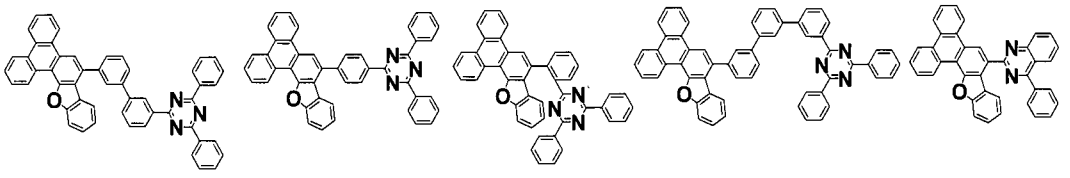
[A-57][A-58][A-59][A-60][A-61]



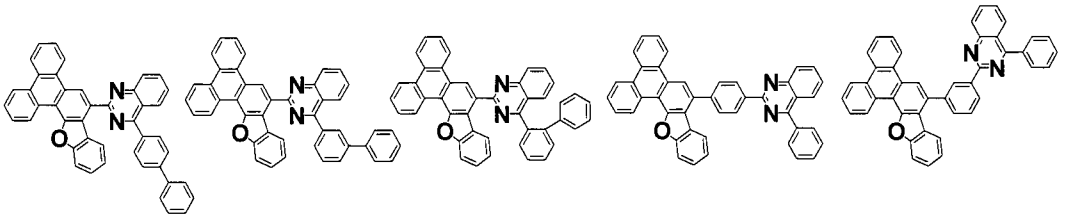
[A-62][A-63][A-64][A-65]



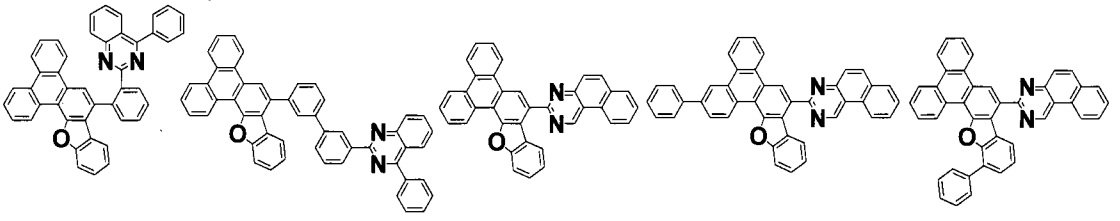
[A-66][A-67][A-68][A-69][A-70]



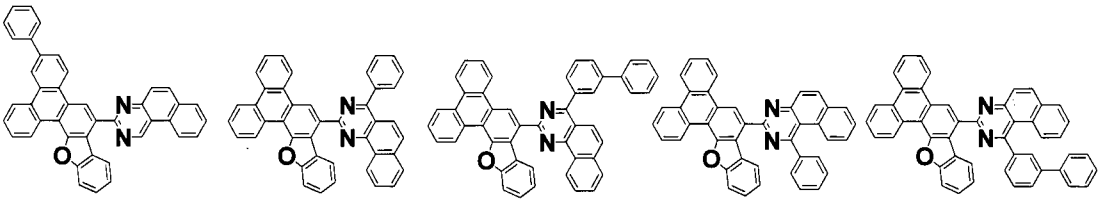
[A-71][A-72][A-73][A-74][A-75]



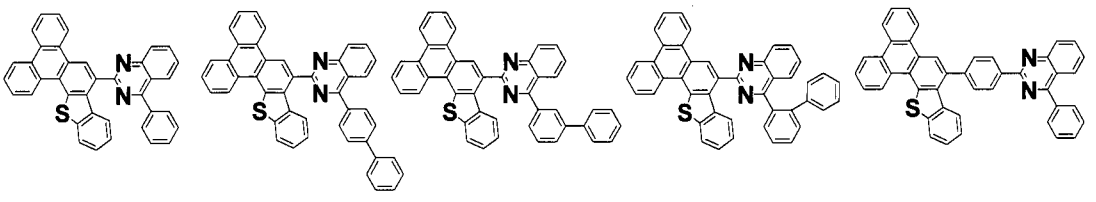
[A-76][A-77][A-78][A-79][A-80]



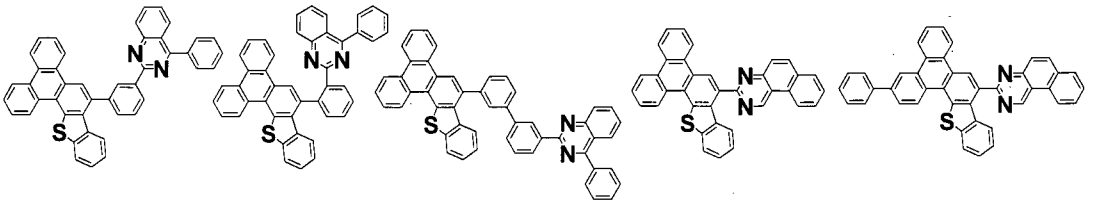
[A-81][A-82][A-83][A-84][A-85]



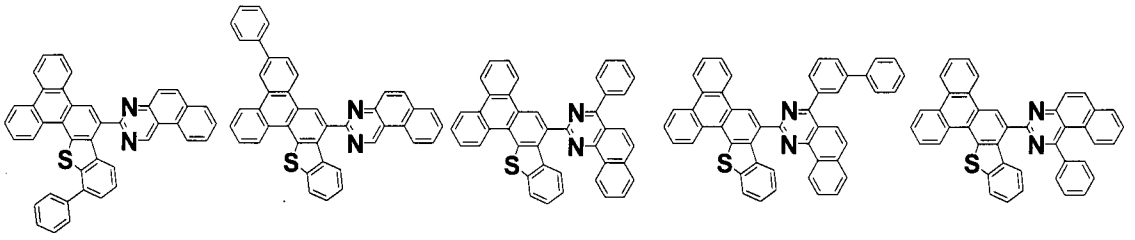
[A-86][A-87][A-88][A-89][A-90]



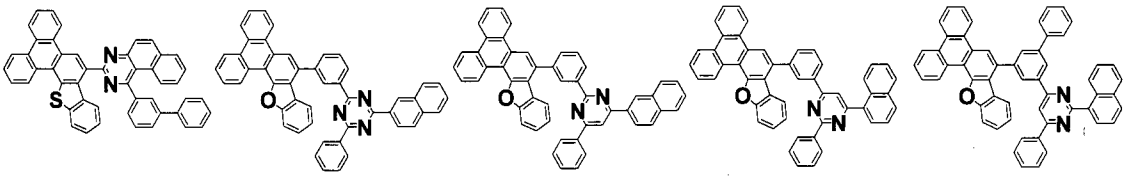
[A-91][A-92][A-93][A-94][A-95]



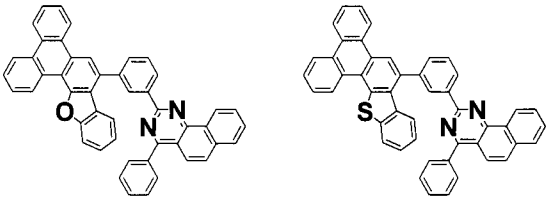
[A-96][A-97][A-98][A-99][A-100]



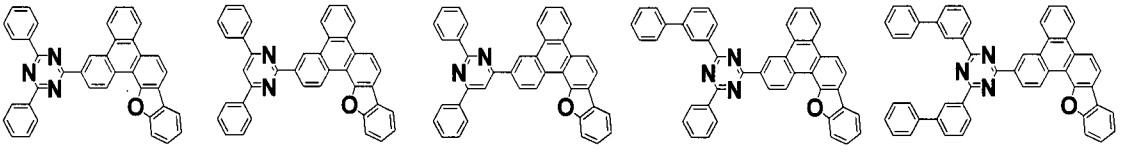
[A-101][A-102][A-103][A-104][A-105]



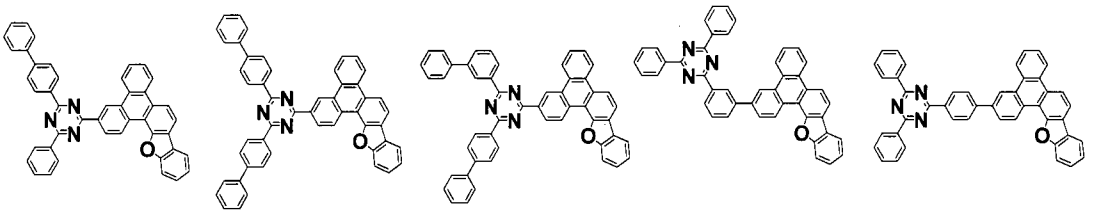
[A-106] [A-107]



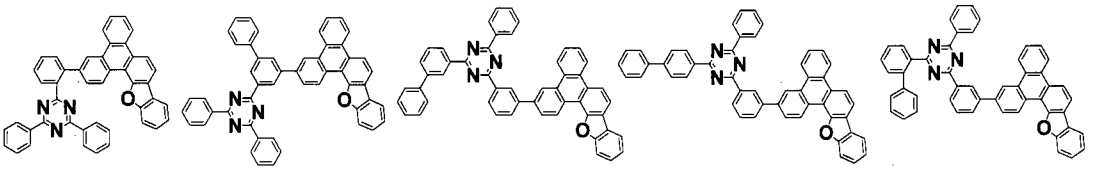
[B-1][B-2][B-3][B-4][B-5]



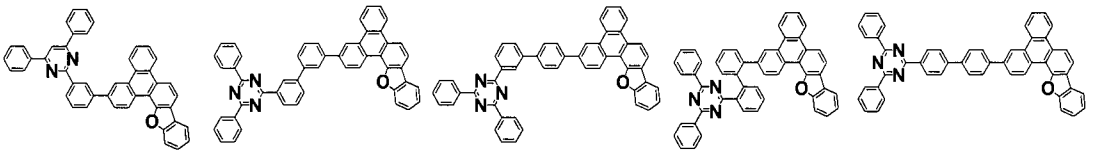
[B-6][B-7][B-8][B-9][B-10]



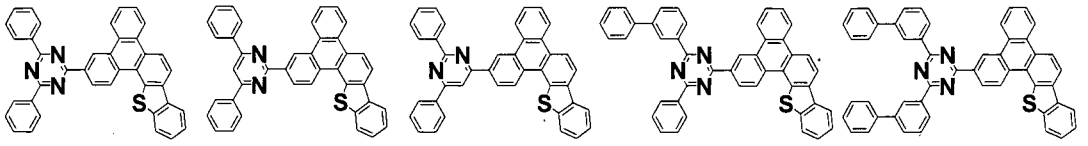
[B-11][B-12][B-13][B-14][B-15]



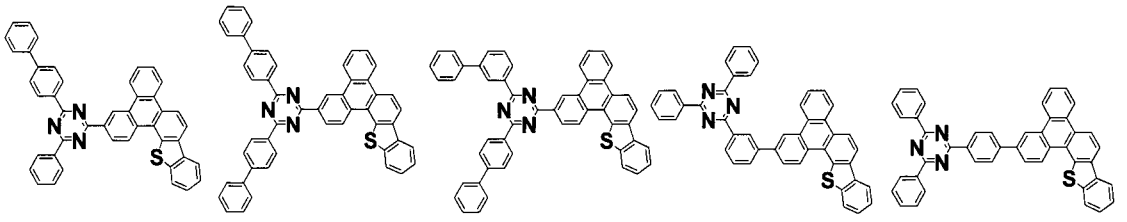
[B-16][B-17][B-18][B-19][B-20]



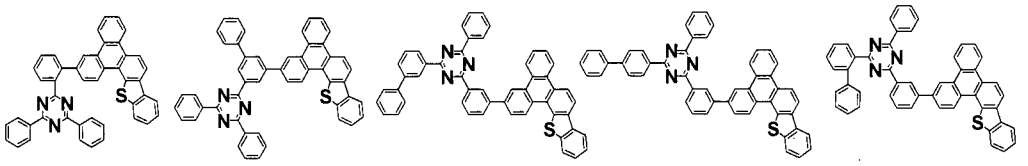
[B-21][B-22][B-23][B-24][B-25]



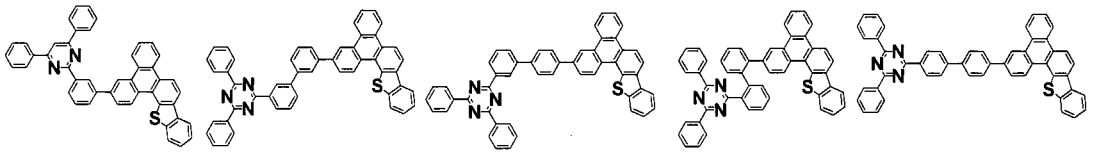
[B-26][B-27][B-28][B-29][B-30]



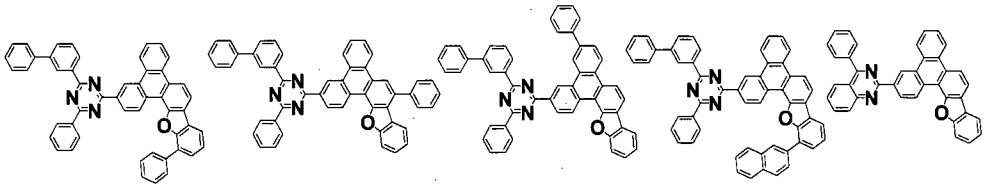
[B-31][B-32][B-33][B-34][B-35]



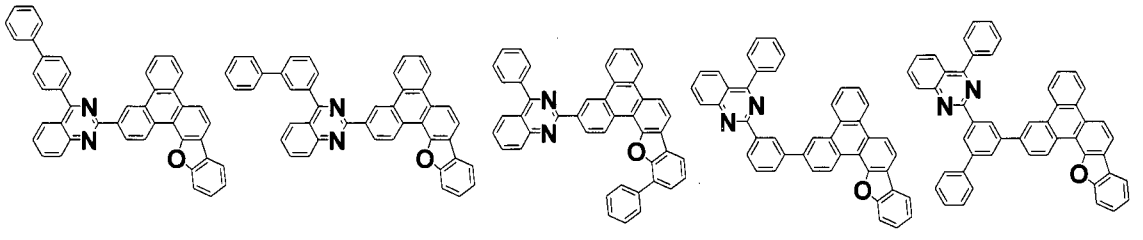
[B-36][B-37][B-38][B-39][B-40]



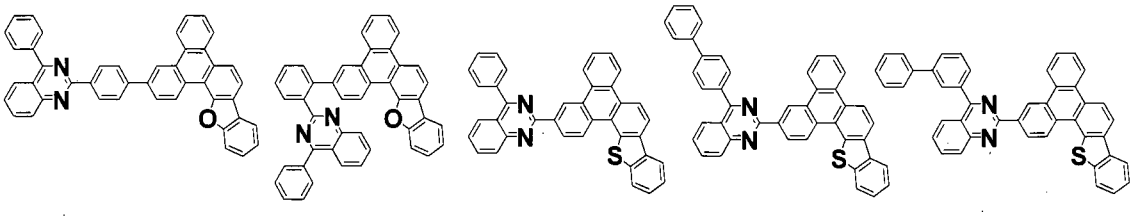
[B-41][B-42][B-43][B-44][B-45]



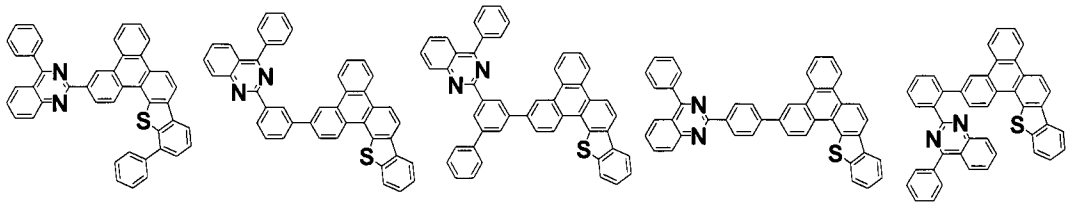
[B-46][B-47][B-48][B-49][B-50]



[B-51][B-52][B-53][B-54][B-55]



[B-56][B-57][B-58][B-59][B-60]



【청구항 7】

서로 마주하는 양극과 음극, 그리고

상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 한 층의 유기층을 포함하고,

상기 유기층은 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 따른 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자.

【청구항 8】

제7항에 있어서,

상기 유기층은 발광층을 포함하고,

상기 유기 광전자 소자용 화합물은 상기 발광층의 호스트로서 포함되는 유기 광전자 소자.

【청구항 9】

제8항에 있어서,

상기 유기층은 정공주입층, 정공수송층, 전자차단층, 전자수송층, 전자주입층 및 정공차단층에서 선택된 적어도 하나의 보조층을 더 포함하고,

상기 보조층은 상기 발광층에 인접한 전자수송보조층을 더 포함하고,

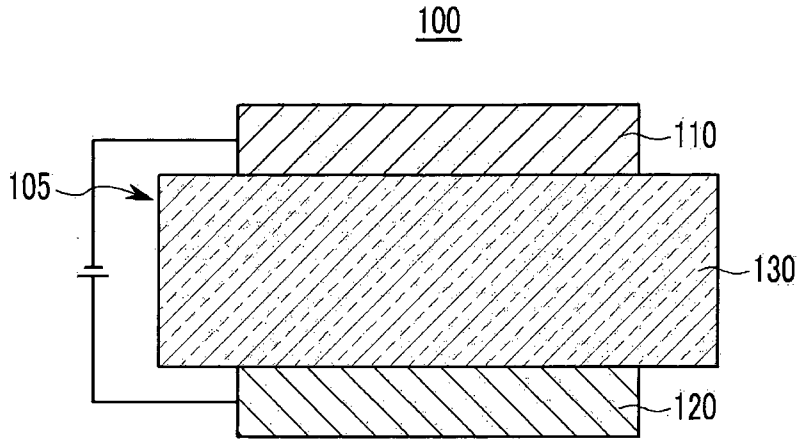
상기 전자수송보조층은 상기 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자.

【청구항 10】

제7항에 따른 유기 광전자 소자를 포함하는 표시장치.

【도면】

【도 1】



【도 2】

