

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구  
국제사무국



(10) 국제공개번호

WO 2010/131855 A2

(43) 국제공개일  
2010년 11월 18일 (18.11.2010)

PCT

- (51) 국제특허분류:  
C07D 209/82 (2006.01) C07D 495/04 (2006.01)  
C09K 11/06 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2010/002735
- (22) 국제출원일: 2010년 4월 30일 (30.04.2010)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:  
10-2009-0041877 2009년 5월 13일 (13.05.2009) KR  
10-2009-0043994 2009년 5월 20일 (20.05.2009) KR  
10-2009-0044895 2009년 5월 22일 (22.05.2009) KR  
10-2009-0044896 2009년 5월 22일 (22.05.2009) KR  
10-2009-0114960 2009년 11월 26일 (26.11.2009) KR  
10-2009-0114963 2009년 11월 26일 (26.11.2009) KR  
10-2009-0114964 2009년 11월 26일 (26.11.2009) KR  
10-2009-0114965 2009년 11월 26일 (26.11.2009) KR  
10-2009-0114966 2009년 11월 26일 (26.11.2009) KR
- (71) 출원인 (US 을(를) 제외한 모든 지정국에 대하여): 덕  
산 하이 메탈 (주) (DUKSAN HIGH METAL CO.,

LTD.) [KR/KR]; 울산광역시 북구 연암동 597-3, 683-804 Ulsan (KR). 삼성모바일디스플레이 주식회사 (SAMSUNG MOBILE DISPLAY CO., LTD.) [KR/KR]; 경기도 용인시 기흥구 농서동 산 24 번지, 446-711 Gyeonggi-do (KR).

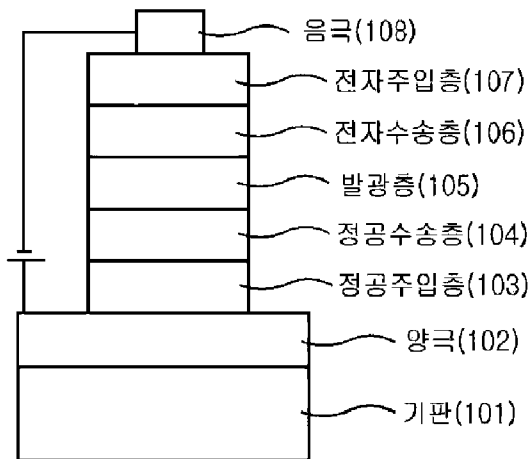
- (72) 발명자; 겸
- (75) 발명자/출원인 (US 에 한하여): 박정환 (PARK, Junghwan) [KR/KR]; 서울시 송파구 가락본동 80 성원상떼빌 101 동 703 호, 138-803 Seoul (KR). 김대성 (KIM, Daeung) [KR/KR]; 경기도 용인시 처인구 김량장동 현대아파트 101-601, 449-709 Gyeonggi-do (KR). 박정철 (PARK, Jungcheol) [KR/KR]; 경상남도 진해시 석동 355-3 락희빌라 A-301 호, 645-280 Gyeongsangnam-do (KR). 김기원 (KIM, Kiwon) [KR/KR]; 인천광역시 남동구 구월 2 동 롯데캐슬 1115 동 701 호, 405-761 Incheon (KR). 주진욱 (JU, Jinuk) [KR/KR]; 경상남도 의령군 의령읍 중리 155, 636-804 Gyeongsangnam-do (KR). 백장열 (BAEK, Jangyeol) [KR/KR]; 경상남도 사천시 축동면 배춘리 66, 664-811 Gyeongsangnam-do (KR). 문성윤 (MUN, Soungyun) [KR/KR]; 충청남도 예산군 예산읍 예산리 315-14, 340-806 Chungcheongnam-do (KR). 박용욱

[다음 쪽 계속]

(54) Title: COMPOUND CONTAINING A 5-MEMBERED HETEROCYCLE AND ORGANIC LIGHT-EMITTING DIODE USING SAME, AND TERMINAL FOR SAME

(54) 발명의 명칭: 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말

[Fig. 1]



- 101 ... Substrate
- 102 ... Anode
- 103 ... Hole injection layer
- 104 ... Hole transport layer
- 105 ... Light-emitting layer
- 106 ... Electron transport layer
- 107 ... Electron injection layer
- 108 ... Cathode

(57) Abstract: The present invention relates to a compound with a novel structure and containing a 5-membered heterocycle, to an organic light-emitting diode using same, and to a terminal for same.

(57) 요약서: 본 발명은 오원자 헤테로고리를 포함하는 신규한 구조의 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말을 제공한다.



WO 2010/131855 A2



(PARK, Yongwook) [KR/KR]; 경기도 안양시 동안구 갈산동 샘마을우방아파트 508 동 202 호, 431-703 Gyeonggi-do (KR). 정 화 순 (JUNG, Hwasoon) [KR/KR]; 강원도 춘천시 우두동 315-6 번지, 200-150 Gangwon-do (KR). 김 원 삼 (KIM, Wonsam) [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 백현동 366-7 번지 프린스타운 205 호, 463-420 Gyeonggi-do (KR). 변 지 훈 (BYUN, Jihun) [KR/KR]; 경기도 용인시 수지구 죽전 1 동 1337-8 302 호, 448-161 Gyeonggi-do (KR). 박 성 진 (PARK, Sungjin) [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 백현동 366-7 프린스타운 205 호, 463-420 Gyeonggi-do (KR). 김 은 경 (KIM, Eunkyung) [KR/KR]; 경상남도 진주시 상봉동 한주아파트 5 동 403 호, 660-050 Gyeongsangnam-do (KR). 최 대 혁 (CHOI, Daehyuk) [KR/KR]; 경기도 수원시 영통구 매탄동 신원천주공 아파트 1 단지 102 동 1501 호, 443-370 Gyeonggi-do (KR). 김 동 하 (KIM, Dongha) [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 분당동 장안 건영아파트 108 동 1102 호, 463-907 Gyeonggi-do (KR). 홍 철 광 (HONG, Cheolkwang) [KR/KR]; 경기도 광명시 철산 2 동 주공아파트 1105 동 409 호, 423-726 Gyeonggi-do (KR). 유 한 성 (YU, Hansung) [KR/KR]; 경기도 안양시 동안구 귀인동 꿈마을 현대아파트 602 동 1201 호, 431-713 Gyeonggi-do (KR). 이 관 희 (LEE, Kwanhee) [KR/KR]; 경기도 수원시 영통구 영통동 살구골 7 단지 아파트 728 동 1901 호, 443-470 Gyeonggi-do (KR). 김 태 식 (KIM, Taeshick) [KR/KR]; 경기도 용인시 기흥구 고매동 세원아파트 101 동 1302 호, 446-732 Gyeonggi-do (KR). 신 대 업 (SHIN, Daeyup) [KR/KR]; 경기도 수원시 영통구 영통동 황골주공아파트 131 동 702 호, 443-470 Gyeonggi-do (KR). 김 미 경 (KIM, Mikyung) [KR/KR]; 경기도 용인시 기흥구 지곡동 써니밸리아

파트 104 동 801 호, 446-592 Gyeonggi-do (KR). 김 동 현 (KIM, Dongheon) [KR/KR]; 경기도 수원시 영통구 영통동 1050-7 402 호, 443-470 Gyeonggi-do (KR).

- (74) 대리인: 김은구 (KIM, Eungu) 등; 서울시 강남구 역삼동 636-15 상원빌딩 2 층, 135-908 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, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, RO, RS, RU, 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, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), 유럽 (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, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

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

## 명세서

### 발명의 명칭: 오원자 헥테로고리를 포함하는 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말

#### 기술분야

- [1] 본 발명은 오원자 헥테로고리를 포함하는 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말에 관한 것이다.

#### 배경기술

- [2] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기전기소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기전기소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.
- [3] 유기전기소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다. 그리고, 상기 발광 재료는 분자량에 따라 고분자형과 저분자형으로 분류될 수 있고, 발광 메커니즘에 따라 전자의 일중항 여기상태로부터 유래되는 형광 재료와 전자의 삼중항 여기상태로부터 유래되는 인광 재료로 분류될 수 있다. 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.
- [4] 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다. 그 원리는 발광층을 형성하는 호스트 보다 에너지 대역 간극이 작은 도판트를 발광층에 소량 혼합하면, 발광층에서 발생한 엑시톤이 도판트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이때 호스트의 파장이 도판트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도판트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.
- [5] 전술한 유기전기소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정하고 효율적인 유기전기소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며,

따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

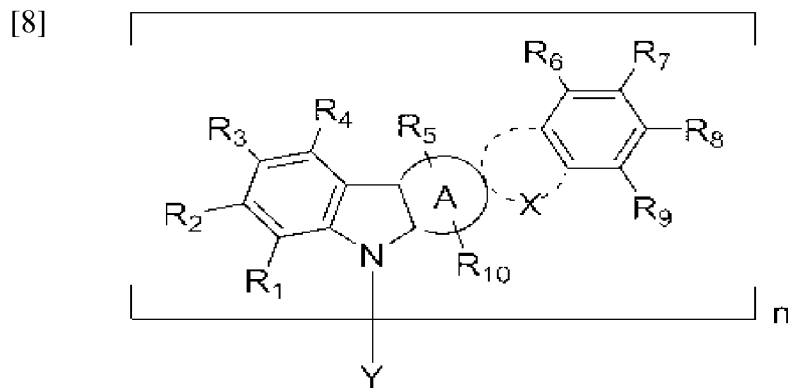
## 발명의 상세한 설명

### 기술적 과제

- [6] 본 발명은 오원자 헤테로고리를 포함하는 신규한 구조의 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말을 제공하고, 그 화합물의 특성으로서 발광소자의 고효율, 색순도 향상, 장수명 등을 확보하는 것을 목표로 한다.

### 과제 해결 수단

- [7] 일 측면에서, 본 발명은 하기 화학식의 화합물을 제공한다.



- [9] 본 발명은 오원자 헤테로고리를 포함하는 신규한 구조의 화합물로서, 유기전자소자에서 합성된 화합물에 따라 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 모든 칼라의 형광과 인광소자에 적합한 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료 및 전자수송 재료로 사용될 수 있으며, 다양한 색의 인광 도판트의 호스트물질로도 유용하다.

- [10] 따라서 본 발명은 오원자 헤테로고리를 포함하는 신규한 구조의 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말을 제공한다.

### 발명의 효과

- [11] 본 발명의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물 재료를 이용한 유기전계발광소자는 모든 칼라의 형광과 인광소자에 적합한 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료 및 전자수송 재료로 사용될 수 있으며, 다양한 색의 인광 도판트의 호스트물질로도 유용하다. 또한 발광소자의 형광 및 인광 호스트 물질로 사용되어 고효율이면서 색순도가 향상될 뿐만 아니라 수명을 현저히 개선시킬 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

- [12] 도 1 내지 도 6은 본 발명의 화합물을 적용할 수 있는 유기전계발광소자의 예를 도시한 것이다.

### 발명의 실시를 위한 형태

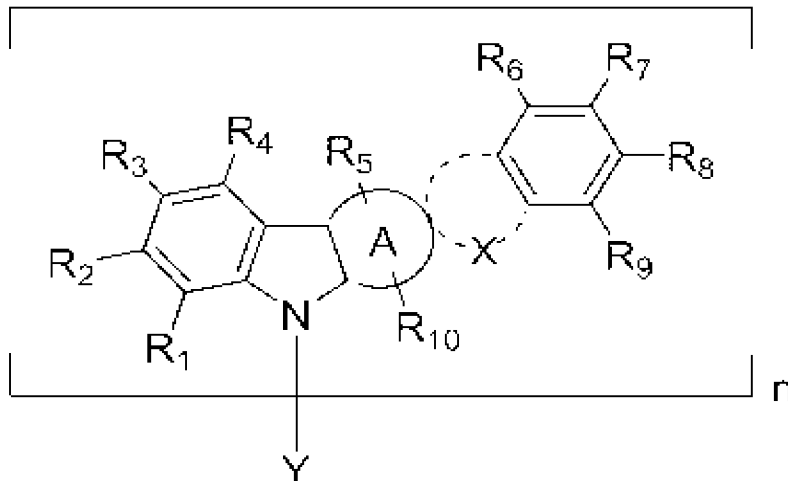
- [13] 이하, 본 발명의 일부 실시예들을 예시적인 도면을 통해 상세하게 설명한다. 각 도면의 구성요소들에 참조부호를 부가함에 있어서, 동일한 구성요소들에 대해서는 비록 다른 도면상에 표시되더라도 가능한 한 동일한 부호를 가지도록

하고 있음에 유의해야 한다. 또한, 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.

[14] 또한, 본 발명의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제 1, 제 2, A, B, (a), (b) 등의 용어를 사용할 수 있다. 이러한 용어는 그 구성 요소를 다른 구성 요소와 구별하기 위한 것일 뿐, 그 용어에 의해 해당 구성 요소의 본질이나 차례 또는 순서 등이 한정되지 않는다. 어떤 구성 요소가 다른 구성 요소에 "연결", "결합" 또는 "접속"된다고 기재된 경우, 그 구성 요소는 그 다른 구성 요소에 직접적으로 연결되거나 또는 접속될 수 있지만, 각 구성 요소 사이에 또 다른 구성 요소가 "연결", "결합" 또는 "접속"될 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.

[15] 본 발명은 아래와 같이 화학식 1의 화합물을 제공한다.

[16] 화학식 1



[17] (1) R1 내지 R10은 각각 서로 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 알콕시기, 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기 또는 황, 질소, 산소, 인 및 규소를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴옥시기이다.

[18] (2) R1 내지 R10은 각각 인접한 기와 결합하여 치환 또는 비치환된 포화 또는 불포화 고리를 형성 할 수 있다.

[19] (3) X는 적어도 1개 이상의 황, 산소 또는 규소이다.

[20] (4) Y는 수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 알콕시기, 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의

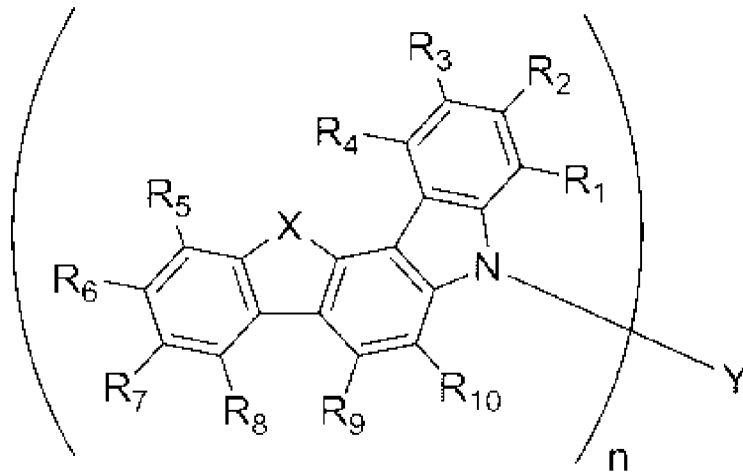
알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 황, 질소, 산소, 인 및 규소를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기 또는 황, 질소, 산소, 인 및 규소를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기 또는 황, 질소, 산소, 인 및 규소를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴옥시기이다.

[21] (5) n은 1 내지 3의 정수이다.

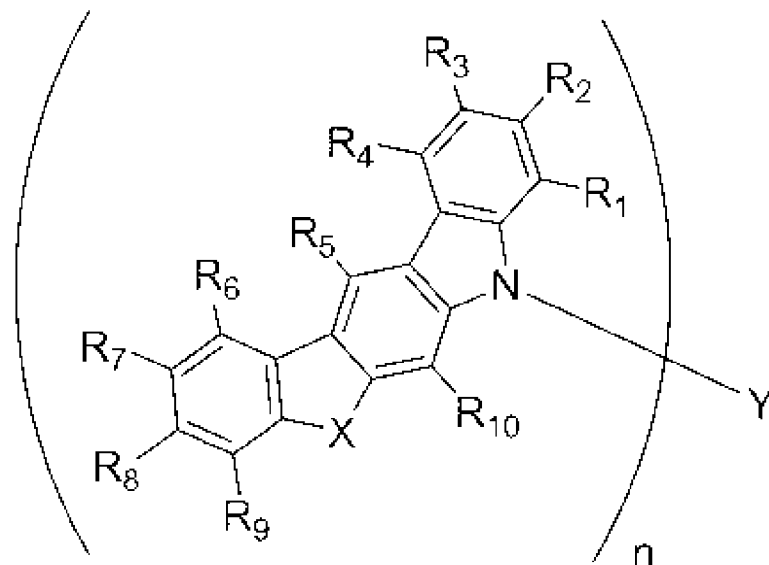
[22] (6) 상기 구조식을 가지는 화합물은 용액 공정(soluble process)에 사용될 수 있다.

[23] 상기 화학식 1은 제조 및 합성 방법에 따라 하기 화학식 2 내지 7과 같이 구성될 수 있다.

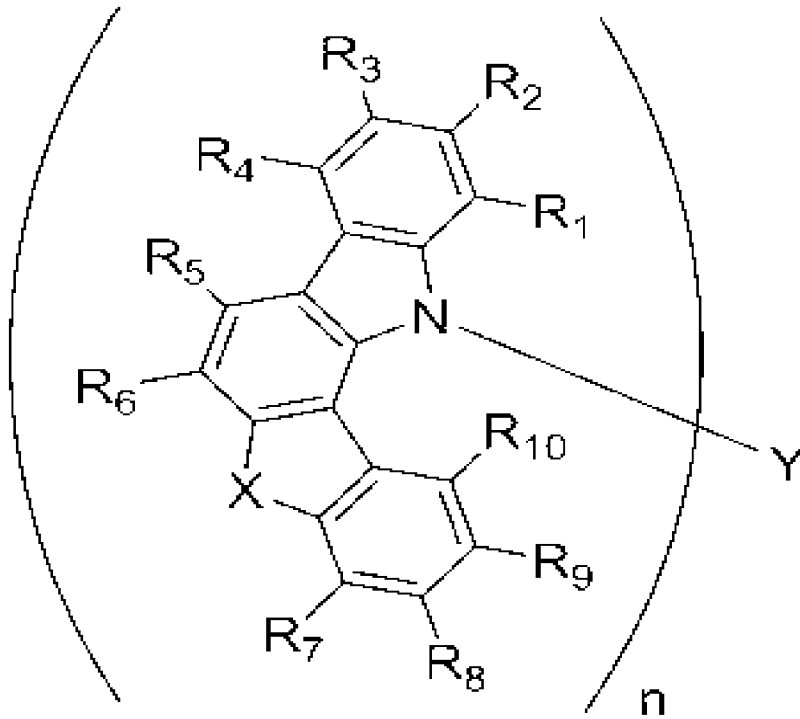
[24] 화학식 2



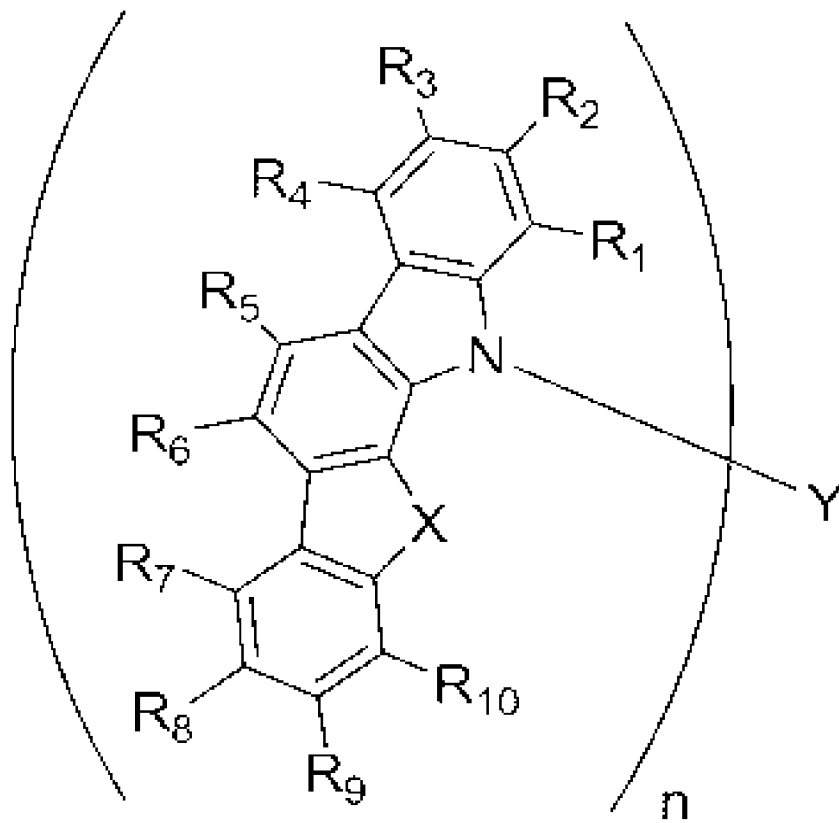
[25] 화학식 3



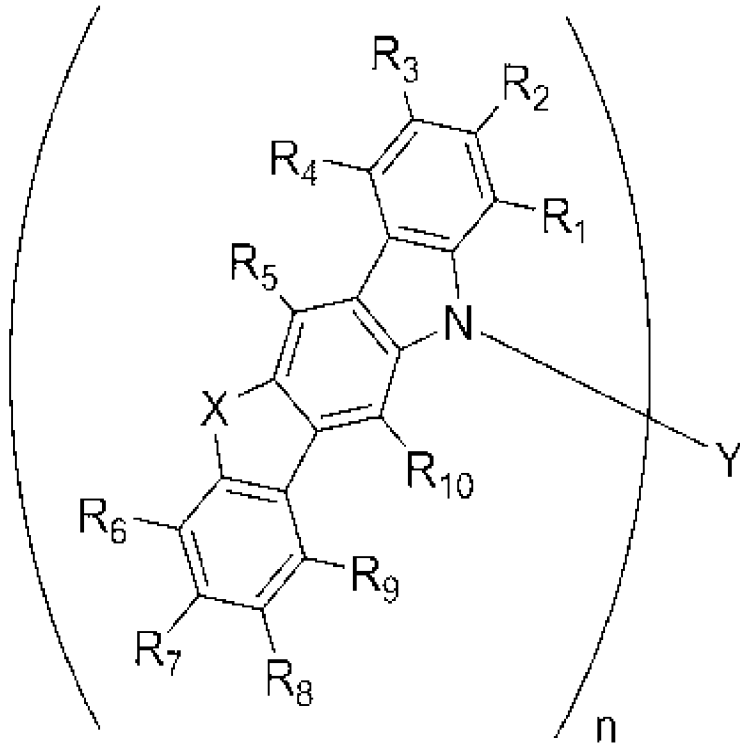
[26] 화학식 4



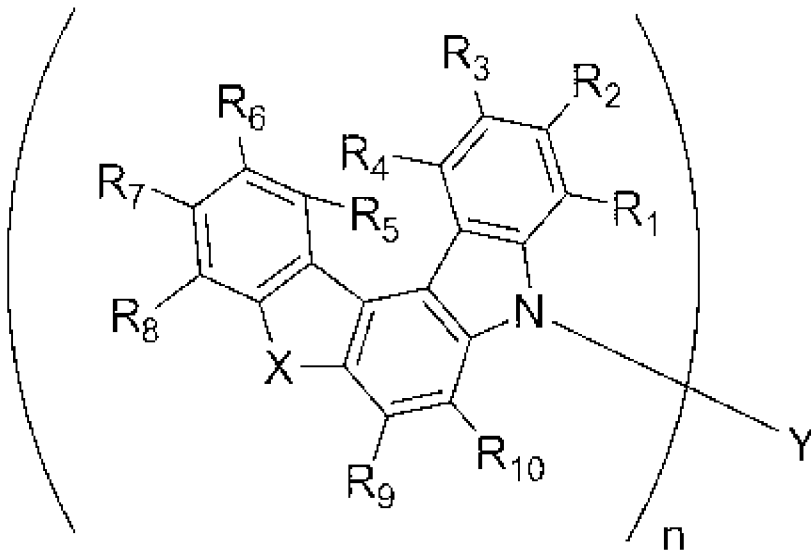
[27] 화학식 5



[28] 화학식 6

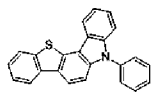


[29] 화학식 7

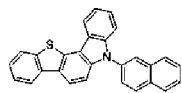


[30] 상기 화학식 2는 하기 화학식 8과 같이 실시할 수 있다.

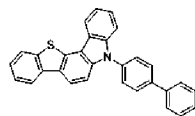
[31] 화학식 8



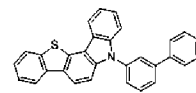
1-1



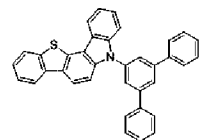
1-2



1-3

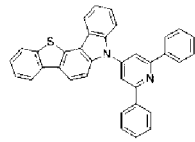


1-4

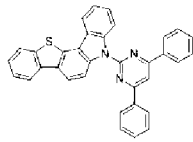


1-5

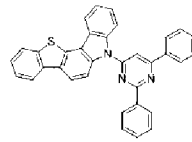
[32]



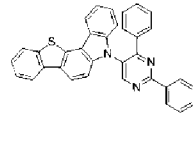
1-6



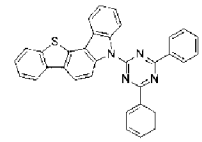
1-7



1-8

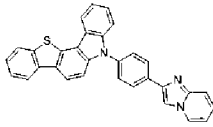


1-9

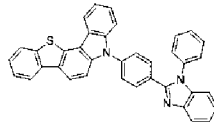


1-10

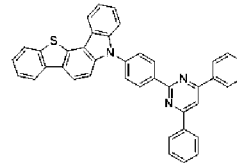
[33]



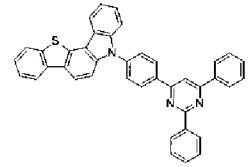
1-11



1-12

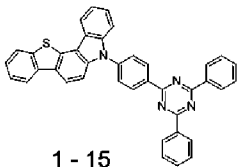


1-13

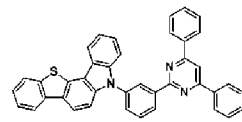


1-14

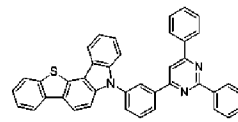
[34]



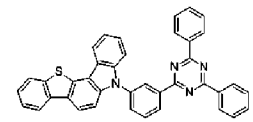
1-15



1-16

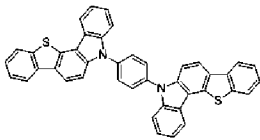


1-17

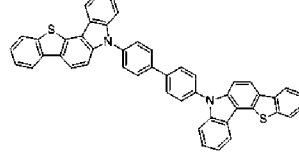


1-18

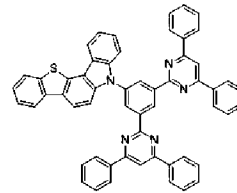
[35]



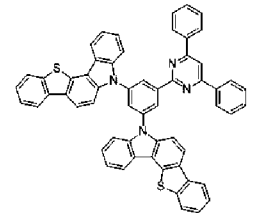
1-19



1-20



1-21



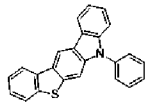
1-22

[36]

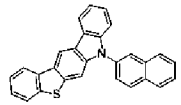
상기 화학식 3은 하기 화학식 9와 같이 실시할 수 있다.

[37]

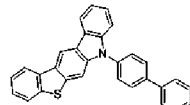
화학식 9



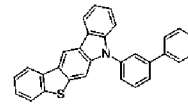
2-1



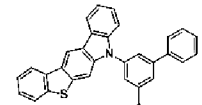
2-2



2-3

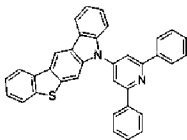


2-4

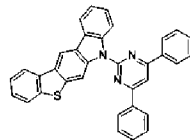


2-5

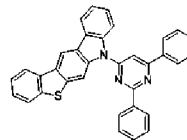
[38]



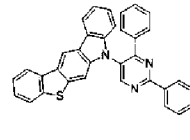
2-6



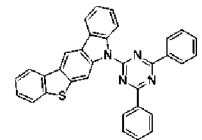
2-7



2-8

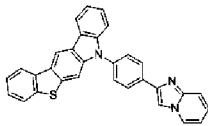


2-9

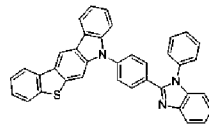


2-10

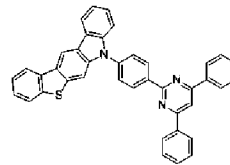
[39]



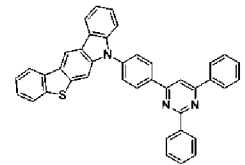
2-11



2-12

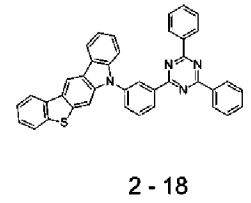
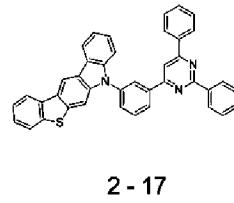
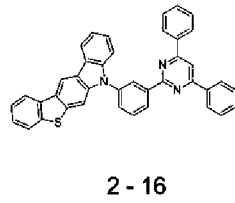
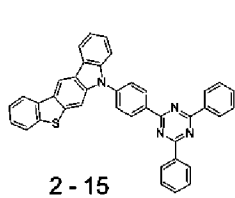


2-13

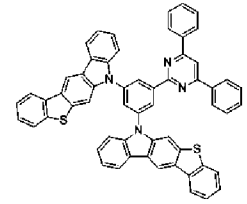
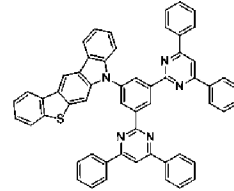
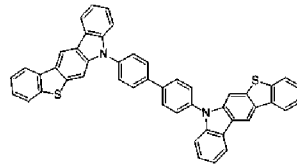
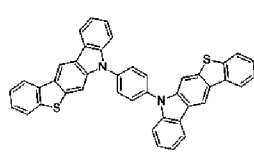


2-14

[40]

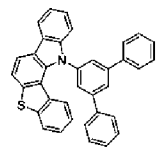
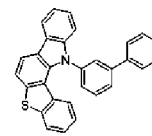
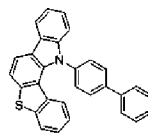
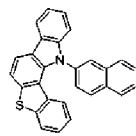
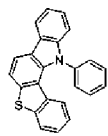


[41]

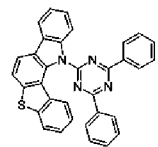
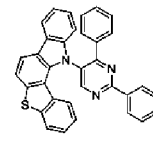
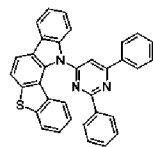
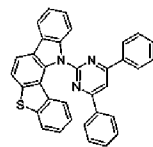
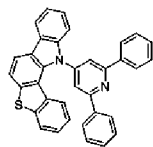


[42] 상기 화학식 4는 하기 화학식 10과 같이 실시할 수 있다.

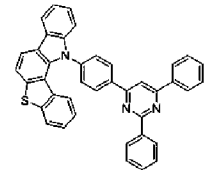
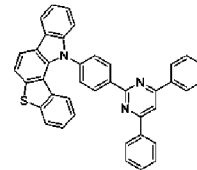
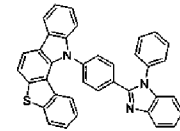
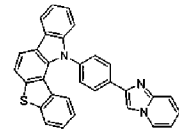
[43] 화학식 10



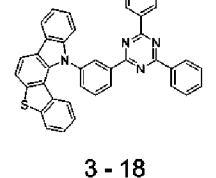
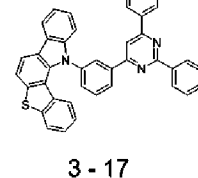
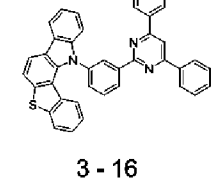
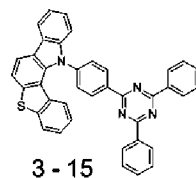
[44]



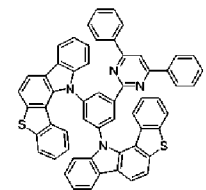
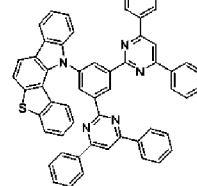
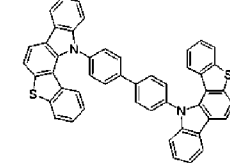
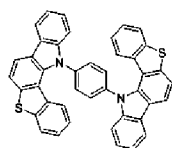
[45]



[46]

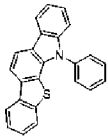


[47]

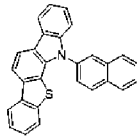


[48] 상기 화학식 5는 하기 화학식 11과 같이 실시할 수 있다.

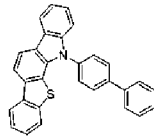
[49] 화학식 11



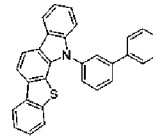
4 - 1



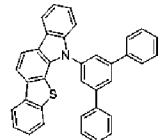
4 - 2



4 - 3

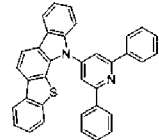


4 - 4

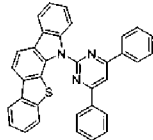


4 - 5

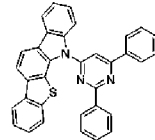
[50]



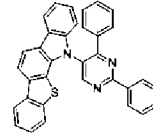
4 - 6



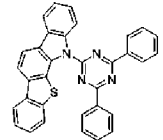
4 - 7



4 - 8

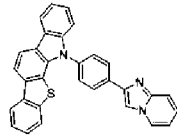


4 - 9

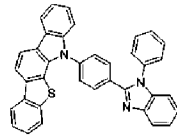


4 - 10

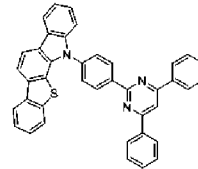
[51]



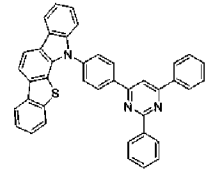
4 - 11



4 - 12

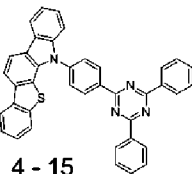


4 - 13

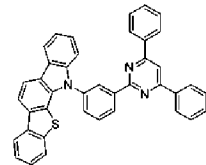


4 - 14

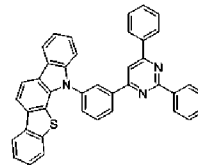
[52]



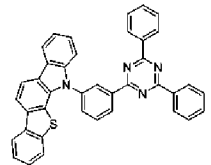
4 - 15



4 - 16

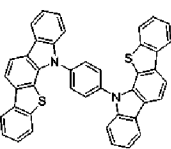


4 - 17

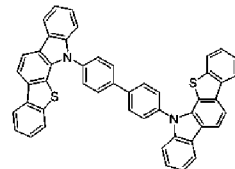


4 - 18

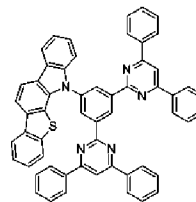
[53]



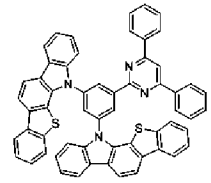
4 - 19



4 - 20



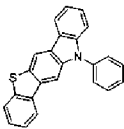
4 - 21



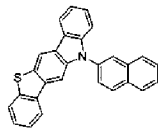
4 - 22

[54] 상기 화학식 6은 하기 화학식 12와 같이 실시할 수 있다.

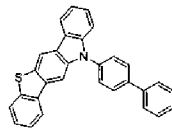
[55] 화학식 12



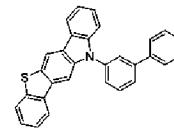
5 - 1



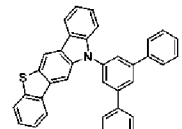
5 - 2



5 - 3

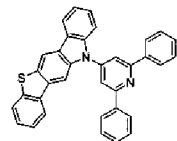


5 - 4

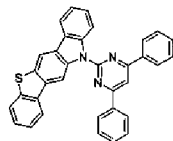


5 - 5

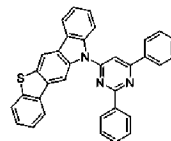
[56]



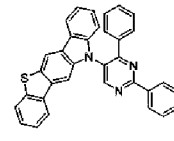
5 - 6



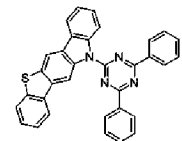
5 - 7



5 - 8

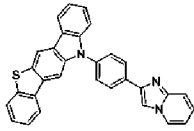


5 - 9

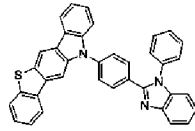


5 - 10

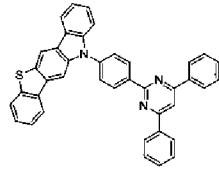
[57]



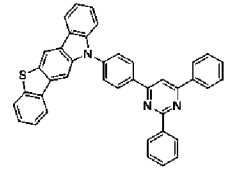
5 - 11



5 - 12

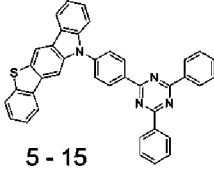


5 - 13

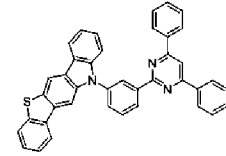


5 - 14

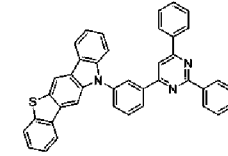
[58]



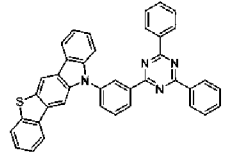
5 - 15



5 - 16

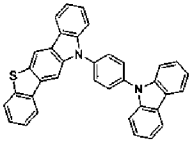


5 - 17

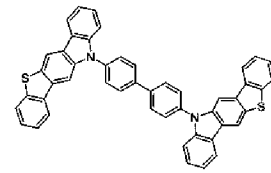


5 - 18

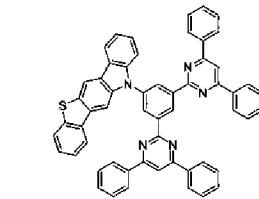
[59]



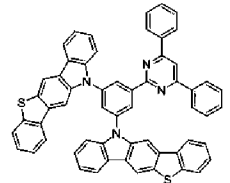
5 - 19



5 - 20



5 - 21



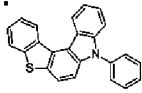
5 - 22

[60]

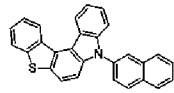
상기 화학식 7은 하기 화학식 13과 같이 실시할 수 있다.

[61]

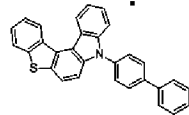
화학식 13



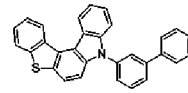
6 - 1



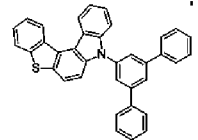
6 - 2



6 - 3

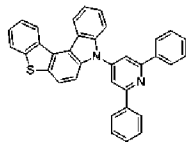


6 - 4

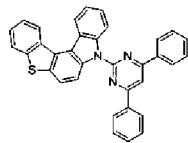


6 - 5

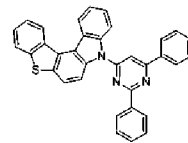
[62]



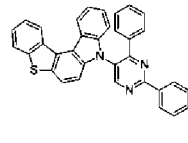
6 - 6



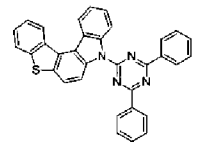
6 - 7



6 - 8

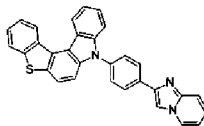


6 - 9

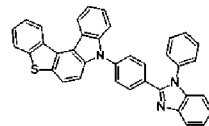


6 - 10

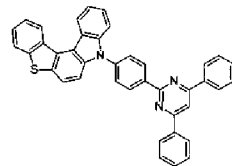
[63]



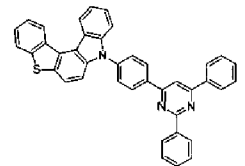
6 - 11



6 - 12

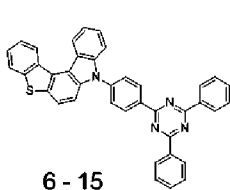


6 - 13

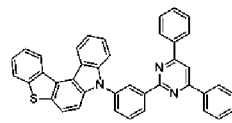


6 - 14

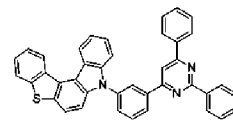
[64]



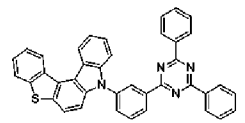
6 - 15



6 - 16

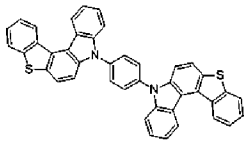


6 - 17

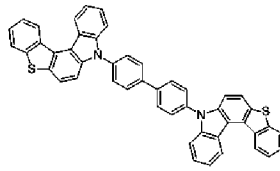


6 - 18

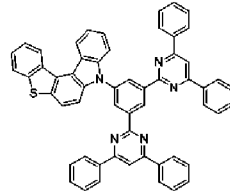
[65]



6 - 19



6 - 20



6 - 21



6 - 22

- [66] 본 발명의 일 실시예에 따른 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물인 화학식 1에 속하는 화합물의 구체적 예로서 하기 화학식 2 내지 7의 화합물들일 수 있고, 화학식 8 내지 13과 같이 실시할 수 있으나 본 발명이 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [67] 화학식 1 내지 13을 참조하여 설명한 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물들이 유기물층으로 사용되는 다양한 유기전기소자들이 존재한다. 화학식 1 내지 13을 참조하여 설명한 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물들이 사용될 수 있는 유기전기소자는 예를 들어, 유기전계발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC) 드럼, 유기트랜지스트(유기 TFT) 등이 있다.
- [68] 화학식 1 내지 13을 참조하여 설명한 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물들이 적용될 수 있는 유기전기소자 중 일례로 유기전계발광소자(OLED)에 대하여 설명하나, 본 발명은 이에 제한되지 않고 다양한 유기전기소자에 위에서 설명한 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 적용될 수 있다.
- [69] 본 발명의 다른 실시예는 제1 전극, 제2 전극 및 이들 전극 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 유기전기소자에 있어서, 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1 내지 13의 화합물들을 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.
- [70] 도 1 내지 도 6은 본 발명의 화합물을 적용할 수 있는 유기전계발광소자의 예를 도시한 것이다.
- [71] 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자는, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함하는 유기물층 중 1층 이상을 상기 화학식 1 내지 13의 화합물들을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 통상의 제조 방법 및 재료를 이용하여 당 기술 분야에 알려져 있는 구조로 제조될 수 있다.
- [72] 본 발명에 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자의 구조는 도 1 내지 6에 예시되어 있으나, 이들 구조에만 한정된 것은 아니다. 이때, 도 1의 실시예에 있어 도면번호 101은 기판, 102는 양극, 103는 정공주입층(HIL), 104는 정공수송층(HTL), 105는 발광층(EML), 106은 전자주입층(EIL), 107은 전자수송층(ETL), 108은 음극을 나타낸다. 미도시하였지만, 이러한 유기전계발광소자는 정공의 이동을 저지하는 정공저지층(HBL), 전자의 이동을 저지하는 전자저지층(EBL) 및 보호층이 더 위치할 수도 있다. 보호층의 경우 최상위층에서 유기물층을 보호하거나 음극을 보호하도록 형성될 수 있다.

- [73] 이때, 화학식 1 내지 13을 참조하여 설명한 오원자 헥테로고리를 포함하는 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층을 포함하는 유기물층 중 하나 이상에 포함될 수 있다. 구체적으로, 화학식 1 내지 13을 참조하여 설명한 오원자 헥테로고리를 포함하는 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층, 정공지지층, 전자지지층, 보호층 중 하나 이상을 대신하여 사용되거나 이들과 함께 층을 형성하여 사용될 수도 있다. 물론 유기물층 중 한 층에만 사용되는 것이 아니라 두 층 이상에 사용될 수 있다.
- [74] 특히, 화학식 1 내지 13을 참조하여 설명한 오원자 헥테로고리를 포함하는 화합물로서 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자주입 재료, 전자수송 재료, 발광 재료 및 패시베이션(케핑) 재료로 사용될 수 있고, 특히 단독으로 발광 재료 및 호스트 또는 도판트로 사용될 수 있다.
- [75] 예컨대, 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자는 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 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다.
- [76] 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기전기소자를 만들 수도 있다. 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 솔벤트 프로세스(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.
- [77] 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자는 위에서 설명한 오원자 헥테로고리를 포함하는 화합물을 스핀 코팅(spin coating)이나 잉크젯(ink jet) 공정과 같은 용액 공정(soluble process)을 활용하여 실시할 수 있다.
- [78] 기판은 유기전계발광소자의 지지체이며, 실리콘 웨이퍼, 석영 또는 유리판, 금속판, 플라스틱 필름이나 시트 등이 사용될 수 있다.
- [79] 기판 위에는 양극이 위치된다. 이러한 양극은 그 위에 위치되는 정공주입층으로 정공을 주입한다. 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공주입이 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; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연산화물(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)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

- [80] 양극 위에는 정공주입층이 위치된다. 이러한 정공주입층의 물질로 요구되는 조건은 양극으로부터의 정공주입 효율이 높으며, 주입된 정공을 효율적으로 수송할 수 있어야 한다. 이를 위해서는 이온화 포텐셜이 작고 가시광선에 대한 투명성이 높으며, 정공에 대한 안정성이 우수해야 한다.
- [81] 정공주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입받을 수 있는 물질로서, 정공주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [82] 상기 정공주입층 위에는 정공수송층이 위치된다. 이러한 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 전달받아 그 위에 위치되는 유기발광층으로 수송하는 역할을 하며, 높은 정공 이동도와 정공에 대한 안정성 및 전자를 막아주는 역할을 한다. 이러한 일반적 요구 이외에 차체 표시용으로 응용할 경우 소자에 대한 내열성이 요구되며, 유리 전이 온도(Tg)가 70 °C 이상의 값을 갖는 재료가 바람직하다. 이와 같은 조건을 만족하는 물질들로는 NPD(혹은 NPB라 함), 스피로-아릴아민계화합물, 페릴렌-아릴아민계화합물, 아자시클로헵타트리엔화합물, 비스(디페닐비닐페닐)안트라센, 실리콘게르마늄옥사이드화합물, 실리콘계아릴아민화합물 등이 될 수 있다.
- [83] 정공수송층 위에는 유기발광층이 위치된다. 이러한 유기발광층은 양극과 음극으로부터 각각 주입된 정공과 전자가 재결합하여 발광을 하는 층이며, 양자효율이 높은 물질로 이루어져 있다. 발광 물질로는 정공수송층과 전자수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자효율이 좋은 물질이 바람직하다.
- [84] 이와 같은 조건을 만족하는 물질 또는 화합물로는 녹색의 경우 Alq<sub>3</sub>가, 청색의 경우 Balq(8-hydroxyquinoline beryllium salt), DPVBi(4,4'-bis(2,2-diphenylethenyl)-1,1'-biphenyl) 계열, 스피로(Spiro) 물질, 스피로-DPVBi(Spiro-4,4'-bis(2,2-diphenylethenyl)-1,1'-biphenyl), LiPBO(2-(2-benzoxazolyl)-phenol lithium salt), 비스(디페닐비닐페닐비닐)벤젠, 알루미늄-퀴놀린 금속착체, 이미다졸, 티아졸 및 옥사졸의 금속착체 등이 있으며, 청색 발광 효율을 높이기 위해 페릴렌, 및 BczVBi(3,3'[(1,1'-biphenyl)-4,4'-diyldi-2,1-ethenediyl]bis(9-ethyl)-9H-carbazole; DSA(distrylamine)류를 소량 도핑하여 사용할 수 있다. 적색의 경우는 녹색 발광 물질에 DCJTB([2-(1,1-dimethylethyl)-6-[2-(2,3,6,7-tetrahydro-1,1,7,7-tetramethyl-1H,5H-benzozo(ij)quinolizin-9-yl)ethenyl]-4H-pyran-4-ylidene]-propanedinitrile)와 같은 물질에

소량 도핑하여 사용할 수 있다. 잉크젯프린팅, 롤코팅, 스핀코팅 등의 공정을 사용하여 발광층을 형성할 경우에, 폴리페닐렌비닐렌(PPV) 계통의 고분자나 폴리 플로렌(poly 플루오렌(fluorene)) 등의 고분자를 유기발광층에 사용할 수 있다.

- [85] 유기발광층 위에는 전자수송층이 위치된다. 이러한 전자수송층은 그 위에 위치되는 음극으로부터 전자주입 효율이 높고 주입된 전자를 효율적으로 수송할 수 있는 물질이 필요하다. 이를 위해서는 전자 친화력과 전자 이동속도가 크고 전자에 대한 안정성이 우수한 물질로 이루어져야 한다. 이와 같은 조건을 충족시키는 전자수송 물질로는 구체적인 예로 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq<sub>3</sub>를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [86] 전자수송층 위에는 전자주입층이 적층된다. 전자주입층은 Balq, Alq<sub>3</sub>, Be(bq)<sub>2</sub>, Zn(BTZ)<sub>2</sub>, Zn(phq)<sub>2</sub>, PBD, spiro-PBD, TPBI, Tf-6P 등과 같은 금속착제 화합물, imidazole ring 을 갖는 방향족(aromatic)화합물이나 boron화합물 등을 포함하는 저분자 물질을 이용하여 제작할 수 있다. 이때, 전자주입층은 100Å 내지 300Å의 두께 범위에서 형성될 수 있다.
- [87] 전자주입층 위에는 음극이 위치된다. 이러한 음극은 전자를 주입하는 역할을 한다. 음극으로 사용하는 재료는 양극에 사용된 재료를 이용하는 것이 가능하며, 효율적인 전자주입을 위해서는 일 함수가 낮은 금속이 보다 바람직하다. 특히 주석, 마그네슘, 인듐, 칼슘, 나트륨, 리튬, 알루미늄, 은 등의 적당한 금속, 또는 그들의 적절한 합금이 사용될 수 있다. 또한 100 μm 이하 두께의 리튬플루오라이드와 알루미늄, 산화리튬과 알루미늄, 스트론튬산화물과 알루미늄 등의 2 층 구조의 전극도 사용될 수 있다.
- [88] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.
- [89] 한편 본 발명은, 위에서 설명한 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 이 디스플레이장치를 구동하는 제어부를 포함하는 단말을 포함한다. 이 단말은 현재 또는 장래의 유무선 통신단말을 의미한다. 이상에서 기술한 본 발명에 따른 단말은 휴대폰 등의 이동 통신 단말기일 수 있으며, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 단말을 포함한다.

[90] 실시예

- [91] 이하, 제조예 및 실험예를 통하여 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다. 그러나 이하의 제조예 및 실험예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[92] 제조예

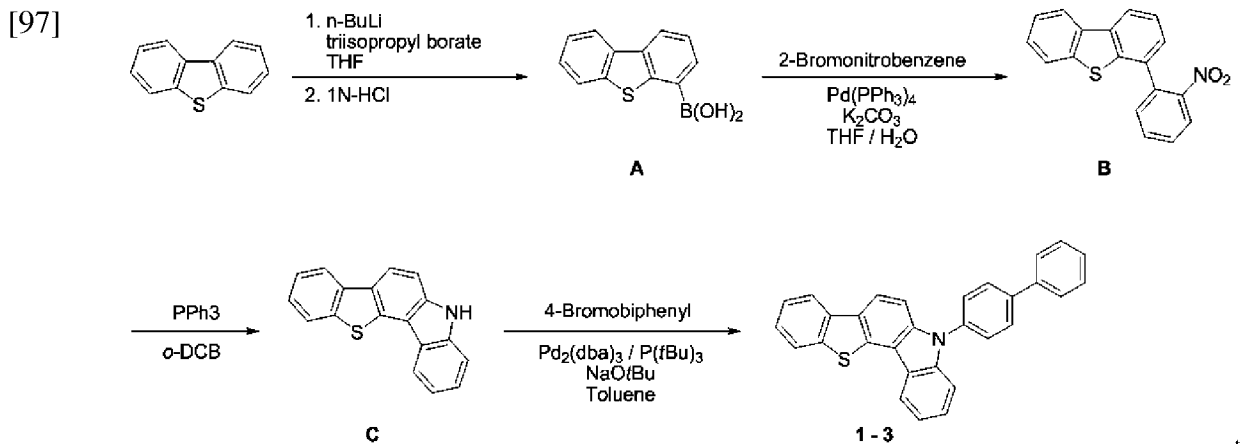
- [93] 이하, 화학식 1에 속하는 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물에 대한 제조예 또는 합성예를 설명한다. 다만, 화학식 1에 속하는 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물들의 수가 많기 때문에 화학식 1에 속하는 오원자 헤테로고리를

포함하는 화합물들 중 하나 또는 둘을 예시적으로 설명한다. 본 발명이 속하는 기술분야의 통상의 지식을 가진 자, 즉 당업자라면 하기에서 설명한 제조예들을 통해, 예시하지 않은 본 발명에 속하는 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물을 제조할 수 있다.

[94] **합성안**

[95] 이하, 화학식 1에 속하는 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물에 대한 제조예 또는 합성예를 설명한다. 다만, 화학식 1에 속하는 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물들의 수가 많기 때문에 화학식 1에 속하는 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물들 중 하나 또는 둘을 예시적으로 설명한다. 본 발명이 속하는 기술분야의 통상의 지식을 가진 자, 즉 당업자라면 하기에서 설명한 제조예들을 통해, 예시하지 않은 본 발명에 속하는 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물을 제조할 수 있다.

[96] [합성예 1]



[98] **중간체 A의 합성방법**

[99] 다이벤조티오펜(Dibenzothiophene)을 테트라하이드로퓨란(tetrahydrofuran)에 녹이고, 반응물의 온도를  $-78^{\circ}\text{C}$ 로 낮췄다. n-BuLi (2.5 M in hexane)을 천천히 적가하고 난 후, 반응물을  $0^{\circ}\text{C}$ 에서 1시간동안 교반시켰다. 이후, 반응물의 온도를  $-78^{\circ}\text{C}$ 로 낮추고, 테트라하이드로퓨란 (tetrahydrofuran)에 용해시킨 트리이소프로필 보레이트(triisopropyl borate) 용액을 적가하고 상온에서 12시간동안 교반시켰다. 반응이 종결되면 1N-HCl 수용액을 넣고 30분간 교반한 후, 에테르로 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 소량의 물을 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 A를 얻었다 (수율: 71%).

[100] **중간체 B의 합성방법**

[101] 상기 단계에서 얻은 중간체 A와 2-bromonitrobenzene, Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 탄산칼륨(K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>)을 테트라하이드로퓨란 (tetrahydrofuran)과 소량의 물에 녹이고 난 후, 24시간동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, 디클로로메탄(CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)으로 추출하고 물로 닦아주었다. 무수 황산마그네슘으로

소량의 물을 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 B를 얻었다 (수율: 87%).

[102] 중간체 C의 합성방법

[103] 상기 단계에서 얻은 중간체 B와 트리페닐포스핀(triphenylphosphine)을 o-DCB(o-dichlorobenzene)에 녹이고, 24시간동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 감압 증류를 이용하여 용매를 제거한 후, 농축된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 C를 얻었다 (수율: 61%).

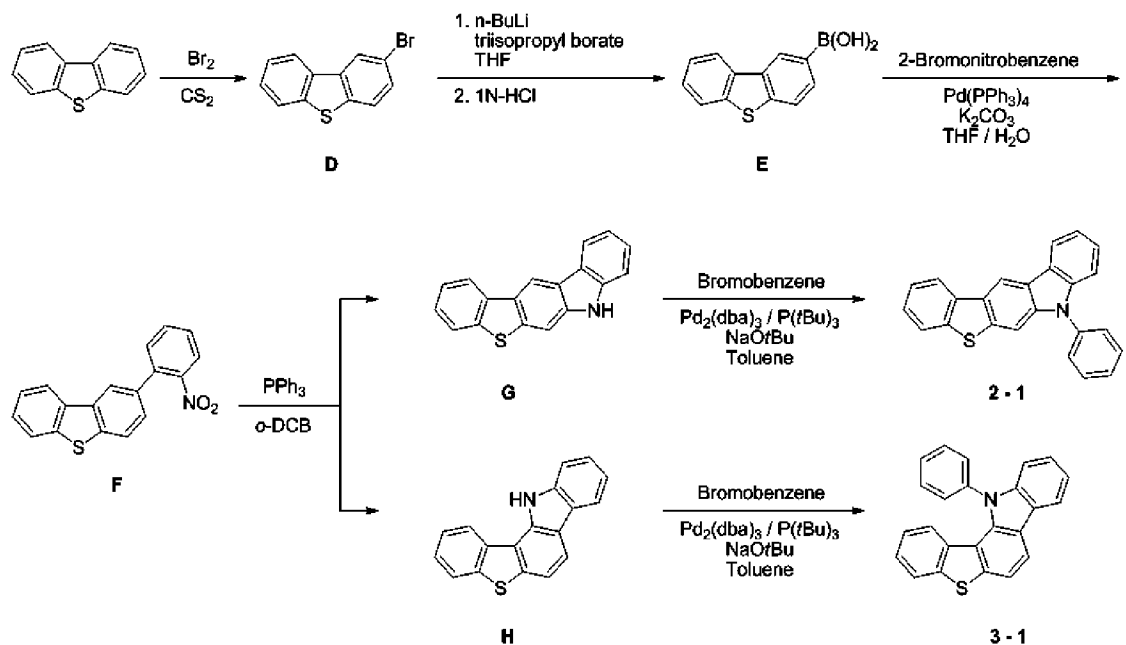
[104] 화합물 1-3의 합성방법

[105] 상기 단계에서 얻은 중간체 C와 4-bromobiphenyl, Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>, P(tBu)<sub>3</sub> 그리고 NaOtBu를 톨루엔용매에 녹인 후, 110 °C에서 6시간동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 반응물을 뜨거운 톨루엔용매를 사용하여 셀라이트(celite)와 실리카겔을 이용하여 감압 여과를 하였다. 온도를 상온으로 식힌 다음 석출된 생성물을 다시 톨루엔과 o-아세톤을 사용하여 재결정화하여 원하는 화합물 1-3을 얻었다(수율: 70%).

[106] 2. 화학식 9와 10에 도시된 화합물 2-1과 3-1의 합성

[107] [합성에 2]

[108]



[109] 중간체 D의 합성방법

[110] 다이벤조티오펜을 카본다이설파이드(CS<sub>2</sub>)에 녹인 후, 브로민(bromine)을 천천히 적가시켰다. 상온에서 12시간동안 교반시킨 후, 반응이 종결되면 감압장치를 이용하여 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 에탄올 용매를 이용하여 재결정화하여 원하는 중간체 D를 얻었다 (수율: 86%).

[111] 중간체 E의 합성방법

[112] 상기 단계에서 얻은 중간체 D를 무수 테트라하이드로퓨란(tetrahydrofuran)에 녹이고, 반응물의 온도를  $-78^{\circ}\text{C}$ 로 낮췄다. n-BuLi (2.5 M in hexane)을 천천히 적가하고 난 후, 반응물을  $0^{\circ}\text{C}$ 에서 1시간 동안 교반시켰다. 이후, 반응물의 온도를  $-78^{\circ}\text{C}$ 로 낮추고, 테트라하이드로퓨란 (tetrahydrofuran)에 용해시킨 트리이소프로필 보레이트(triisopropyl borate)용액을 적가하고 상온에서 12시간동안 교반시켰다. 반응이 종결되면 1N-HCl 수용액을 넣고 30분간 교반한 후, 에테르로 추출하였다. 무수 황산마그네슘으로 소량의 물을 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 E를 얻었다 (수율: 82%).

[113] 중간체 F의 합성방법

[114] 상기 단계에서 얻은 중간체 E와 2-bromonitrobenzene, Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 탄산칼륨을 테트라하이드로퓨란(tetrahydrofuran)와 소량의 물에 녹이고 난 후, 24시간동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, 디클로로메탄으로 추출하고 물로 닦아주었다. 무수 황산마그네슘으로 소량의 물을 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 F를 얻었다 (수율: 87%).

[115] 중간체 G와 H의 합성방법

[116] 상기 단계에서 얻은 중간체 F와 트리페닐포스핀을 o-DCB에 녹이고, 24시간동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 감압 증류를 이용하여 용매를 제거한 후, 농축된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 G와 H를 얻었다 (수율: 61%, G와 H의 비율은 6:4).

[117] 화합물 2-1의 합성방법

[118] 상기 단계에서 얻은 중간체 G와 브로모벤젠, Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>, P(tBu)<sub>3</sub> 그리고 NaOtBu를 톨루엔 용매에 녹인 후,  $110^{\circ}\text{C}$ 에서 6시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 반응물을 뜨거운 톨루엔 용매를 사용하여 셀라이트(celite)와 실리카겔을 이용하여 감압 여과를 하였다. 온도를 상온으로 식힌 다음 석출된 생성물을 다시 톨루엔과 acetone을 사용하여 재결정화하여 원하는 화합물 2-1을 얻었다(수율: 68%).

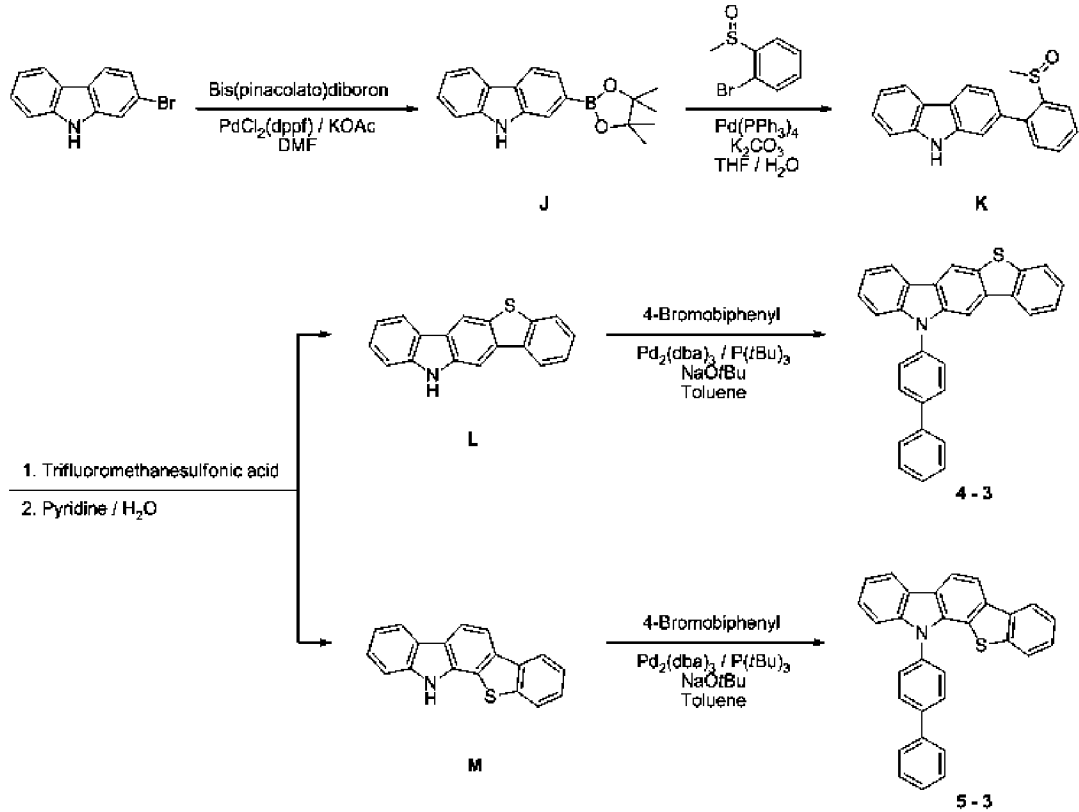
[119] 화합물 3-1의 합성방법

[120] 상기 단계에서 얻은 중간체 H와 브로모벤젠, Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>, P(tBu)<sub>3</sub> 그리고 NaOtBu를 톨루엔용매에 녹인 후,  $110^{\circ}\text{C}$ 에서 6시간동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 반응물을 뜨거운 톨루엔용매를 사용하여 셀라이트(celite)와 실리카겔을 이용하여 감압 여과를 하였다. 온도를 상온으로 식힌 다음 석출된 생성물을 다시 톨루엔과 아세톤을 사용하여 재결정화하여 원하는 화합물 3-1을 얻었다(수율: 62%).

[121] 3. 화학식 11과 12의 화합물 4-3과 5-3의 합성.

[122] [합성에 3]

[123]

[124] 중간체 J의 합성방법

[125] 2-Bromocarbazole과 bis(pinacolato)diboron, 팔라듐 클로라이드(PdCl<sub>2</sub>) (dppf), KOAc를 디메틸포름아마이드(dimethylformamide)에 녹인 후, 130 °C에서 3시간 동안 교반시켰다. 반응이 종결되면 반응물의 온도를 상온으로 식힌 다음, 에테르와 증류수를 넣고 상온에서 다시 교반시켰다. 유기층과 물층을 분리한 후, 유기층을 동일한 방법으로 2회 반복하여 얻어진 유기층을 농축하여 생성된 생성물을 아세토나이트릴(acetonitrile)을 이용하여 재결정화하여 원하는 중간체 J를 얻었다 (수율: 38%).

[126] 중간체 K의 합성방법

[127] 상기 단계에서 얻은 중간체 J와 1-bromo-2-(methylsulfinyl)benzene, Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 탄산칼륨을 테트라하이드로퓨란(tetrahydrofuran)을 소량의 물에 녹이고 난 후, 24시간동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, 디클로로메탄(CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)로 추출하고 물로 닦아주었다. 무수 황산마그네슘으로 소량의 물을 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 K를 얻었다 (수율: 51%).

[128] 중간체 L과 M의 합성방법

[129] 상기 단계에서 얻은 중간체 K를 트리플루오로메탄 술폰산(trifluoromethanesulfonic acid) 용매에 녹인 후, 상온에서 48시간 동안 교반시켰다. 반응이 종결되면 반응물을 물과 피리딘 혼합용매에 넣고 20 분 동안 환류시켰다.

반응물의 온도를 상온으로 식히고, 디클로로메탄( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ )으로 추출하고 물로 닦아주었다. 무수 황산마그네슘으로 소량의 물을 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 L과 M을 얻었다(수율: 38%, L과 M의 비율은 8:2).

[130] **화합물 4-3의 합성방법**

[131] 상기 단계에서 얻은 중간체 L과 4-bromobiphenyl,  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ ,  $\text{P}(\text{tBu})_3$  그리고  $\text{NaOtBu}$ 를 톨루엔 용매에 녹인 후,  $110^\circ\text{C}$ 에서 6시간동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 반응물을 뜨거운 톨루엔 용매를 사용하여 셀라이트(celite)와 실리카겔을 이용하여 감압 여과를 하였다. 온도를 상온으로 식힌 다음 석출된 생성물을 다시 톨루엔과 아세톤을 사용하여 재결정화하여 원하는 화합물 4-3을 얻었다(수율: 77%).

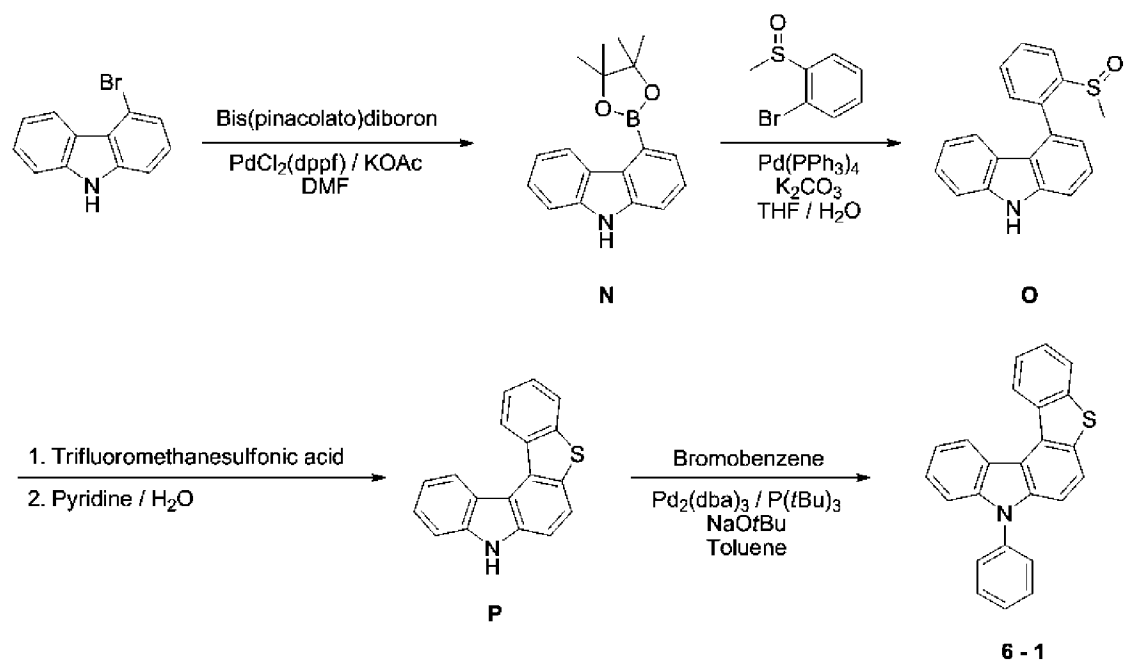
[132] **화합물 5-3의 합성방법**

[133] 상기 단계에서 얻은 중간체 M과 4-bromobiphenyl,  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ ,  $\text{P}(\text{tBu})_3$  그리고  $\text{NaOtBu}$ 를 톨루엔 용매에 녹인 후,  $110^\circ\text{C}$ 에서 6시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 반응물을 뜨거운 톨루엔 용매를 사용하여 셀라이트(celite)와 실리카겔을 이용하여 감압 여과를 하였다. 온도를 상온으로 식힌 다음 석출된 생성물을 다시 톨루엔과 아세톤을 사용하여 재결정화하여 원하는 화합물 5-3을 얻었다(수율: 63%).

[134] 4. 화학식 13에 도시된 화합물 6-1의 합성.

[135] [합성에 4]

[136]



[137] **중간체 N의 합성방법**

[138] 1-Bromocarbazole과 bis(pinacolato)diboron, 팔라듐 클로라이드 ( $\text{PdCl}_2$ )(dppf),  $\text{KOAc}$ 를 디메틸포름아마이드(dimethylformamide)에 녹인 후,  $130^\circ\text{C}$ 에서 3시간

동안 교반시켰다. 반응이 종결되면 반응이 종결되면 반응물의 온도를 상온으로 식힌 다음, 에테르와 증류수를 넣고 상온에서 다시 교반시켰다. 유기층과 물층을 분리한 후, 유기층을 동일한 방법으로 2회 반복하여 얻어진 유기층을 농축하여 생성된 생성물을 아세토나이트릴(acetonitrile)을 이용하여 재결정화하여 원하는 중간체 N를 얻었다 (수율: 35%).

[139] 중간체 O의 합성방법

[140] 상기 단계에서 얻은 중간체 N과 1-bromo-2-(methylsulfinyl)benzene, Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 탄산칼륨을 테트라하이드로퓨란(tetrahydrofuran)과 소량의 물에 녹이고 난 후, 24시간동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, 디클로로메탄(CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)로 추출하고 물로 닦아주었다. 무수 황산마그네슘으로 소량의 물을 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 O를 얻었다 (수율: 62%).

[141] 중간체 P의 합성방법

[142] 상기 단계에서 얻은 중간체 O를 트리플루오로메탄 술폰산(trifluoromethanesulfonic acid)용매에 녹인 후, 상온에서 48시간 동안 교반시켰다. 반응이 종결되면 반응물을 물과 피리딘 혼합용매에 넣고 20분 동안 환류

[143] 시켰다. 반응물의 온도를 상온으로 식히고, 디클로로메탄(CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)으로 추출하고 물로 닦아주었다. 무수 황산마그네슘으로 소량의 물을 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 P를 얻었다 (수율: 42%).

[144] 화합물 6-1의 합성 방법

[145] 상기 단계에서 얻은 중간체 P와 브로모 벤젠(bromobenzene), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>, P(tBu)<sub>3</sub> 그리고 NaOtBu를 톨루엔 용매에 녹인 후, 110 °C에서 6시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 반응물을 뜨거운 톨루엔 용매를 사용하여 셀라이트(celite)와 실리카겔을 이용하여 감압 여과를 하였다. 온도를 상온으로 식힌 다음 석출된 생성물을 다시 톨루엔과 아세톤을 사용하여 재결정화하여 원하는 화합물 6-1을 얻었다(수율: 75%).

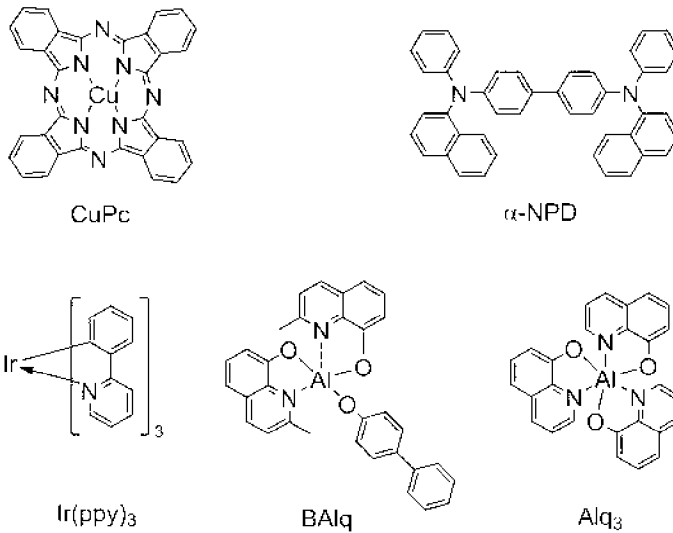
[146] 유기 EL 소자의 제조 평가

[147] 합성을 통해 얻은 화합물 1-3, 2-1, 3-1, 4-3, 5-3, 6-1 각각을 발광층의 발광 호스트 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전계 발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 ITO층(양극)을 10 nm 두께로 형성하였다. ITO층(양극) 위에 우선 정공 주입층으로서 구리프탈로시아닌 (이하 CuPc로 약기함)막을 진공증착하여 이어서, 이 막 상에 전공수송 화합물로서 4,4-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(이하 α-NPD로 약기함)을 30 nm의 두께로 진공증착하여 정공 수송층을 형성하였다. 정공 수송층을 형성한 후, 이 정공 수송층 상부에 화합물 1-3, 2-1, 3-1, 4-3, 5-3 또는 6-1 각각을 인광 호스트 재료로서 증착하여 발광층을 성막하였다. 동시에 인광 발광성의 Ir 금속 착체

도펀트로서 트리스(2-페닐피리딘)이리듐(이하 Ir(ppy)<sub>3</sub>로 약기함)을 첨가하였다. 이때 발광층 중에 있어서의 Ir(ppy)<sub>3</sub>의 농도는 5중량%로 하였다. 정공 저지층으로

(1,1-비스페닐)-4-올레이트)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이트)알루미늄(이하 BAlq로 약기함)을 10 nm의 두께로 진공증착하고, 이어서 전자 주입층으로 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄(이하 Alq<sub>3</sub>로 약칭함)을 40 nm의 두께로 성막하였다. 이 후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm의 두께로 증착하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 이 Al/LiF를 음극으로 사용함으로써 유기전계 발광소자를 제조하였다.

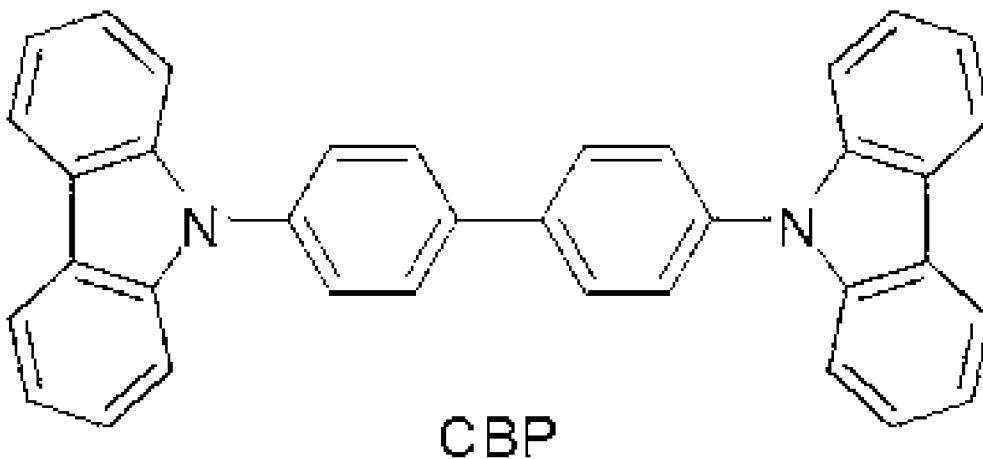
[148] 화학식 14



[149] 비교실험예

[150] 비교를 위해, 본 발명의 화합물 대신에 하기식으로 표시되는 화합물(이하 CBP로 약기함)을 발광 호스트 물질로 사용하여 시험예와 동일한 구조의 유기전계발광소자를 제작하였다.

[151] 화학식 15



[152] 표 1

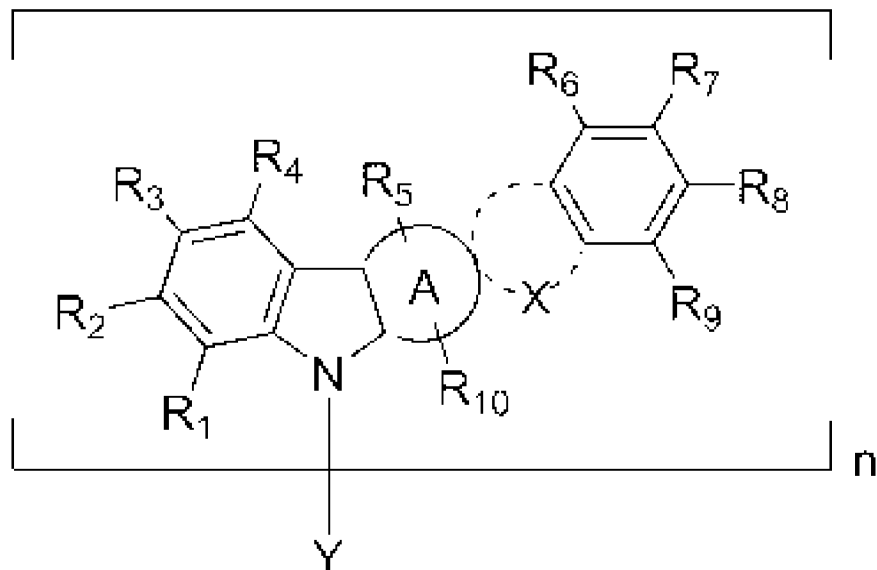
	발광층의 호스트 재료	전압(V)	전류밀도(mA/cm <sup>2</sup> )	휘도(cd/m <sup>2</sup> )	발광효율(cd/A)	색도좌표(x, y)
실시예 1	화합물 1-3	5.5	0.35	106	51.3	(0.30, 0.60)
실시예 2	화합물 2-1	5.8	0.33	107	47.3	(0.30, 0.60)
실시예 3	화합물 3-1	5.9	0.31	105	45.2	(0.32, 0.61)
실시예 4	화합물 4-3	5.9	0.31	105	44.2	(0.30, 0.60)
실시예 5	화합물 5-3	5.6	0.32	107	48.3	(0.31, 0.61)
실시예 6	화합물 6-1	6.1	0.31	103	43.9	(0.30, 0.60)
비교예 1	CBP	6.1	0.31	101	32.6	(0.33, 0.61)

- [153] 상기 표1의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 유기전계발광소자용 재료를 이용한 유기전계발광 소자는 고효율이면서 색순도가 향상될 뿐만 아니라 장수명인 녹색 발광이 얻어지므로 유기전계발광 소자의 녹색 인광 호스트 물질로 사용되어 발광효율 및 수명을 현저히 개선시킬 수 있다.
- [154] 본 발명의 화합물들을 유기전계발광소자의 다른 유기물층들, 예를 들어 정공수송층 뿐만 아니라 발광층, 발광 보조층, 전자주입층, 전자수송층, 및 정공주입층에 사용되더라도 동일한 효과를 얻을 수 있는 것은 자명하다.
- [155] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본 명세서에 개시된 실시예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다.
- [156] 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다.

## 청구범위

[청구항 1]

하기 화학식으로 표시되는 화합물 및 유도체를 핵심으로 하는 화합물.



상기 화학식에서 R1 내지 R10은 각각 서로 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 알콕시기, 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알콕시기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴기 또는 황, 질소, 산소, 인 및 규소를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴옥시기이며;

X는 적어도 1개 이상의 황, 산소 또는 규소이며;

Y는 수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 알콕시기, 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 5 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 황, 질소, 산소, 인 및 규소를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기 또는 황, 질소, 산소, 인 및 규소를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지

60의 헤테로아릴기 또는 황, 질소, 산소, 인 및 규소를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴옥시기이며;

$n$ 은 1 내지 3의 정수이다.

[청구항 2]

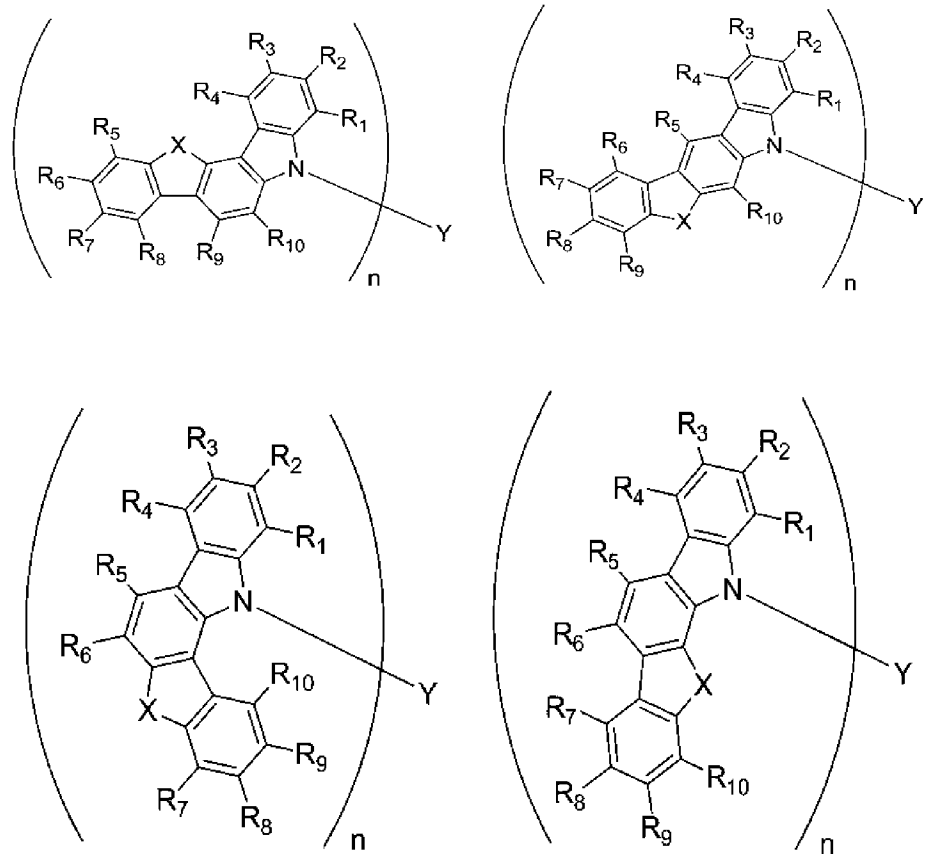
제 1항에 있어,

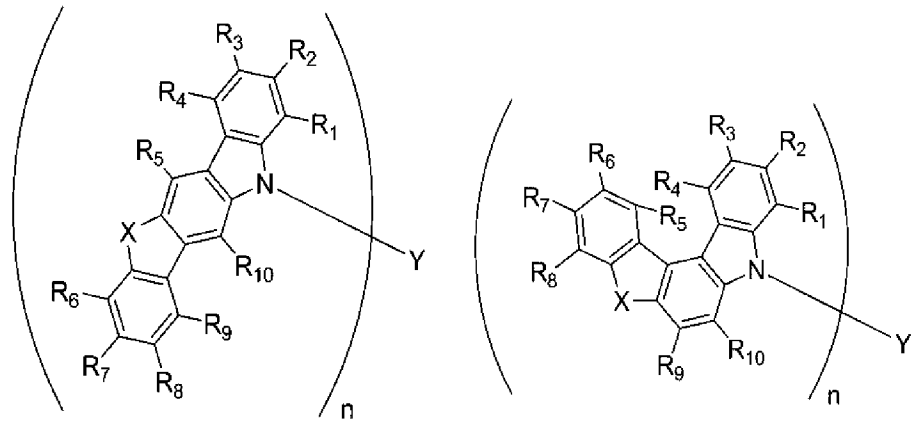
$R_1$  내지  $R_{10}$ 은 각각 인접한 기와 결합하여 치환 또는 비치환된 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있음을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 3]

제 1항에 있어,

상기 화합물은 하기 화합물 중 하나인 것을 특징으로 하는 화합물.

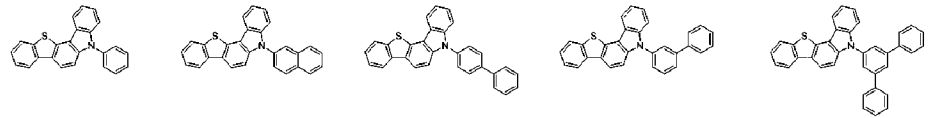




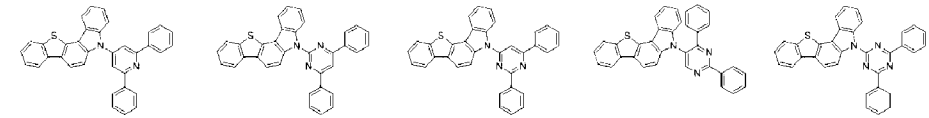
[청구항 4]

제 2항에 있어,

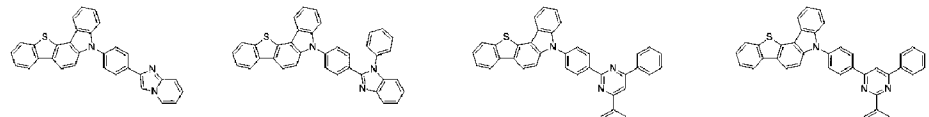
상기 화합물은 하기 화합물 중 하나인 것을 특징으로 하는 화합물.



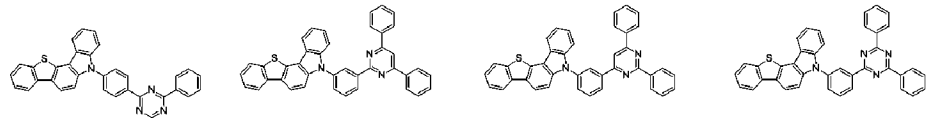
1-1                      1-2                      1-3                      1-4                      1-5



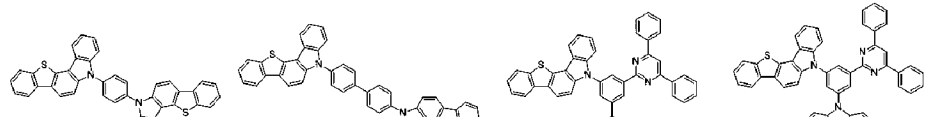
1-6                      1-7                      1-8                      1-9                      1-10



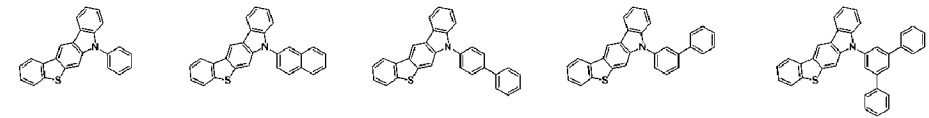
1-11                      1-12                      1-13                      1-14



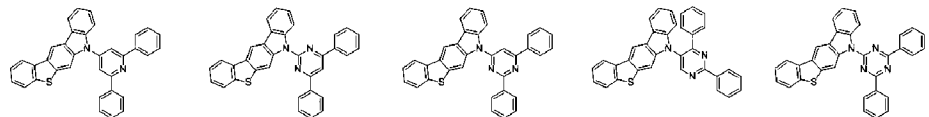
1-15                      1-16                      1-17                      1-18



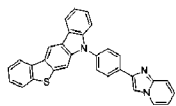
1-19                      1-20                      1-21                      1-22



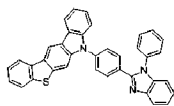
2-1                      2-2                      2-3                      2-4                      2-5



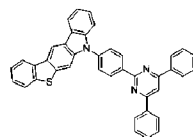
2-6                      2-7                      2-8                      2-9                      2-10



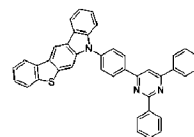
2-11



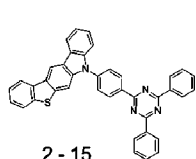
2-12



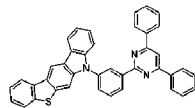
2-13



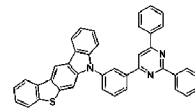
2-14



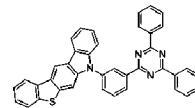
2-15



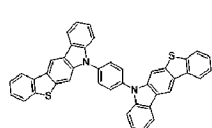
2-16



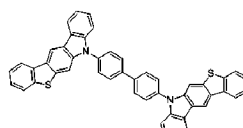
2-17



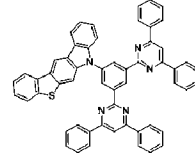
2-18



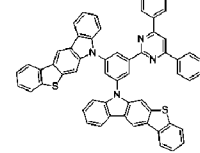
2-19



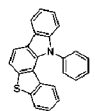
2-20



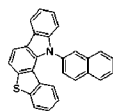
2-21



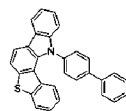
2-22



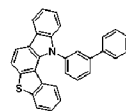
3-1



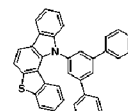
3-2



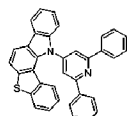
3-3



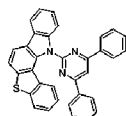
3-4



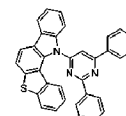
3-5



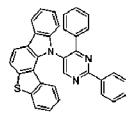
3-6



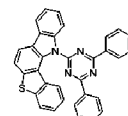
3-7



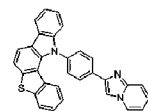
3-8



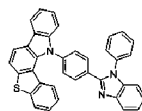
3-9



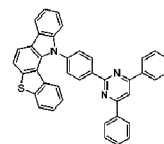
3-10



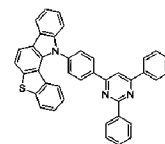
3-11



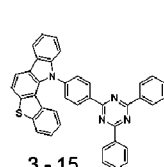
3-12



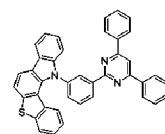
3-13



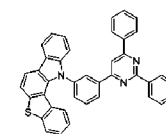
3-14



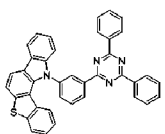
3-15



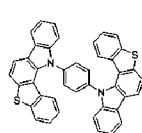
3-16



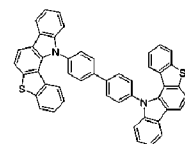
3-17



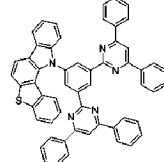
3-18



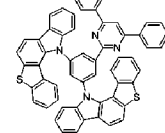
3-19



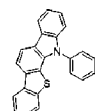
3-20



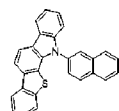
3-21



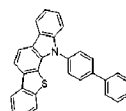
3-22



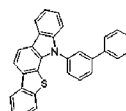
4-1



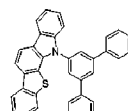
4-2



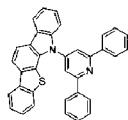
4-3



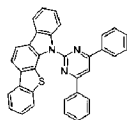
4-4



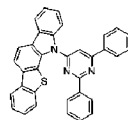
4-5



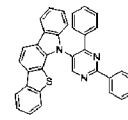
4-6



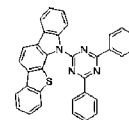
4-7



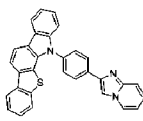
4-8



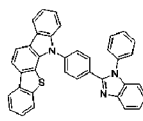
4-9



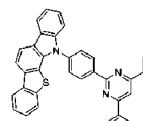
4-10



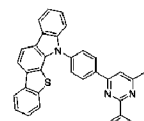
4-11



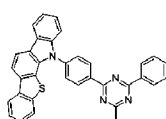
4-12



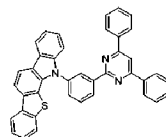
4-13



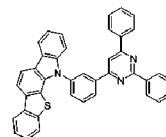
4-14



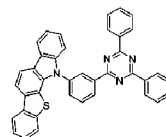
4-15



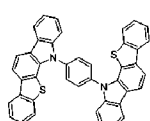
4-16



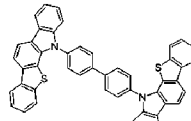
4-17



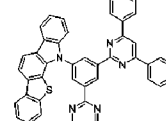
4-18



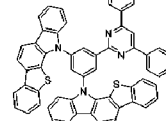
4-19



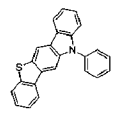
4-20



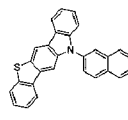
4-21



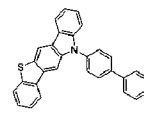
4-22



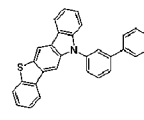
5-1



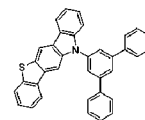
5-2



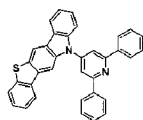
5-3



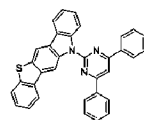
5-4



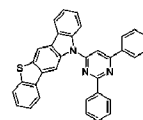
5-5



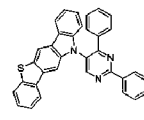
5-6



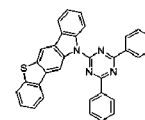
5-7



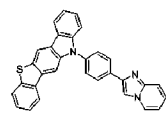
5-8



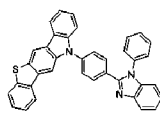
5-9



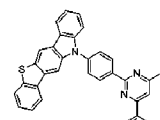
5-10



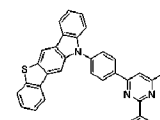
5-11



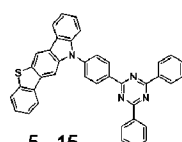
5-12



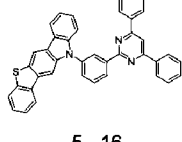
5-13



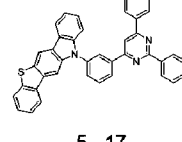
5-14



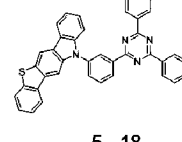
5-15



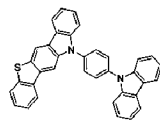
5-16



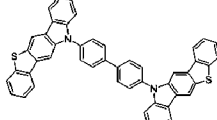
5-17



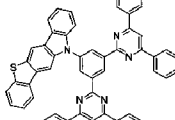
5-18



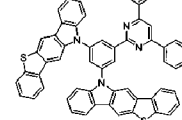
5-19



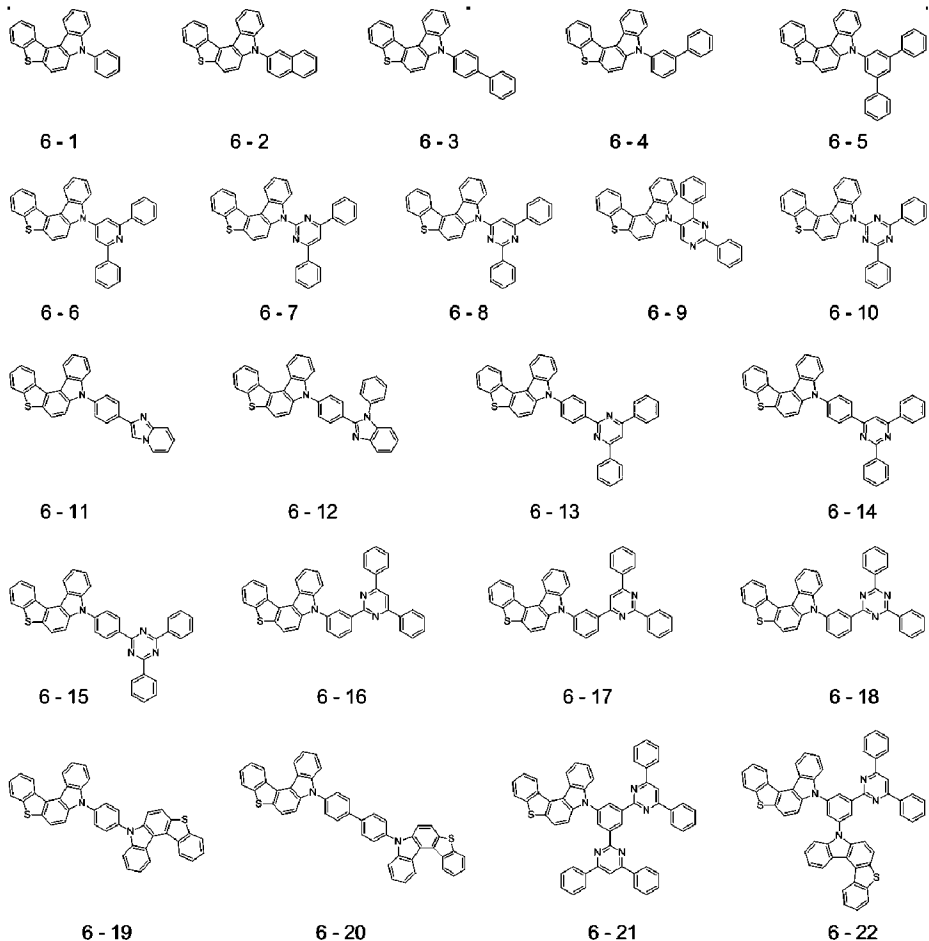
5-20



5-21



5-22

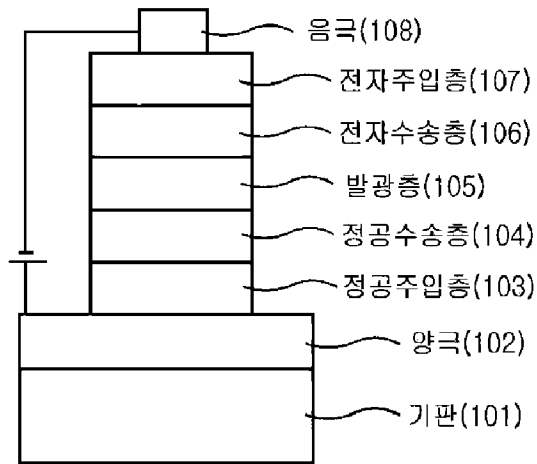


- [청구항 5] 제1항의 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전기소자.
- [청구항 6] 제5항에 있어서, 상기 화합물을 용액 공정(soluble process)에 의해 상기 유기물층을 형성하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 7] 제5항에 있어서, 상기 유기전기소자는 제1 전극, 상기 1층 이상의 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층된 형태로 포함하는 유기전계발광소자인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 8] 제7항에 있어서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 9] 제7항에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하며, 상기 발광층에서 상기 화합물이 호스트 또는 도판트 물질로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 10] 제7항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와; 상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부를 포함하는 단말.

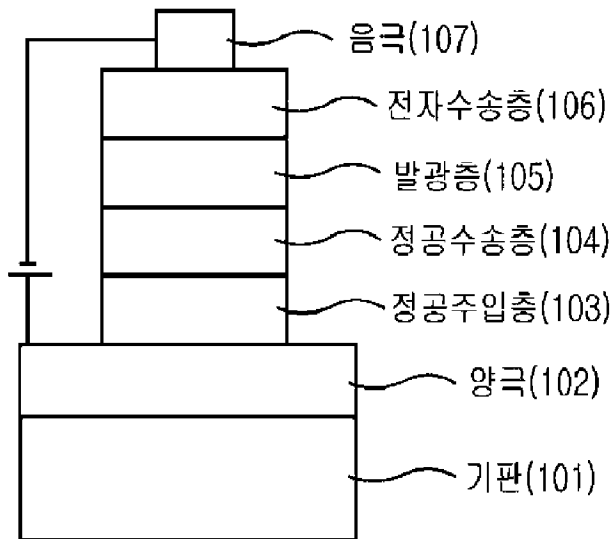
[청구항 11]

제10항에 있어서,  
상기 유기전기소자는 유기전계발광소자(OLED), 유기태양전지,  
유기감광체(OPC) 드럼, 유기트랜지스트(유기 TFT) 중 하나인  
것을 특징으로 하는 단말.

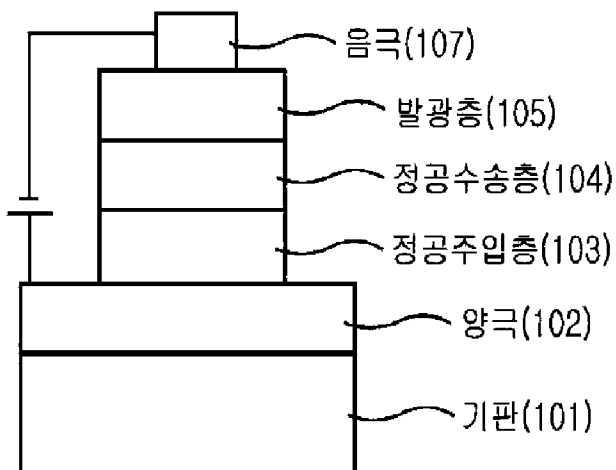
[Fig. 1]



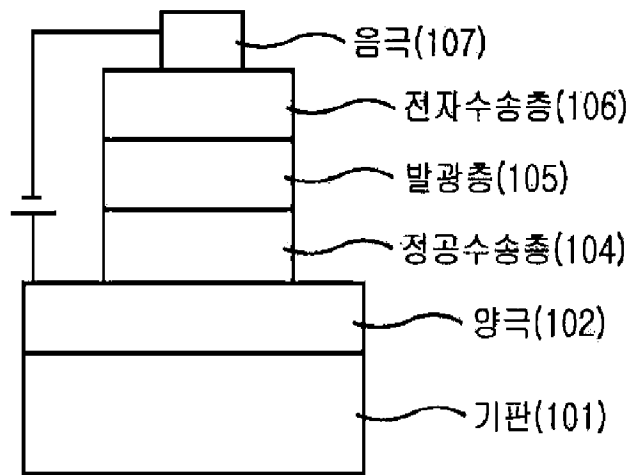
[Fig. 2]



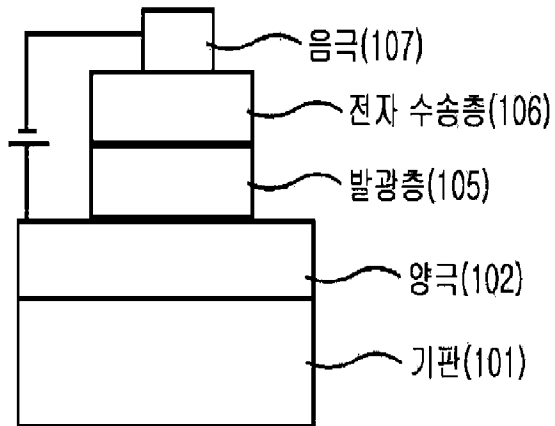
[Fig. 3]



[Fig. 4]



[Fig. 5]



[Fig. 6]

