

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

정정판

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국



(43) 국제공개일
2011년 9월 9일 (09.09.2011)

PCT

(10) 국제공개번호
WO 2011/108902 A9

- (51) 국제특허분류: C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2011/001539
- (22) 국제출원일: 2011년 3월 7일 (07.03.2011)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보: 10-2010-0019950 2010년 3월 5일 (05.03.2010) KR
- (71) 출원인 (US 을(를) 제외한 모든 지정국에 대하여): 덕산하이메탈(주) (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) [KR/KR]; 울산광역시 북구 연암동 597-3, 683-804 Ulsan (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, Daesung) [KR/KR]; 경기도 용인시 처인구 김량장동 현대아파트 101 동 601 호, 449-709 Gyeonggi-do (KR). 김기원 (KIM, Kiwon) [KR/KR]; 인천광역시 남동구 구월 2 동 롯데캐슬 1115 동 701 호, 405-761 Incheon (KR). 박용욱 (PARK, Yongwook) [KR/KR];

경기도 안양시 동안구 갈산동 샘마을우방아파트 508 동 202 호, 431-703 Gyeonggi-do (KR). 정화순 (JUNG, Hwasoon) [KR/KR]; 강원도 춘천시 우두동 315-6, 200-150 Gangwon-do (KR). 변지훈 (BYUN, Jihun) [KR/KR]; 경기도 용인시 수지구 죽전 1 동 1337-8 302 호, 448-161 Gyeonggi-do (KR). 박정근 (PARK, Jeongkeun) [KR/KR]; 부산광역시 부산진구 부암 1 동 미주아파트 1 동 111 호, 614-091 Busan (KR). 최대혁 (CHOI, Daehyuk) [KR/KR]; 경기도 수원시 영통구 매탄동 신원천주공아파트 1 단지 102 동 1501 호, 443-370 Gyeonggi-do (KR). 김동하 (KIM, Dongha) [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 분당동 장안 건영아파트 108 동 1102 호, 463-907 Gyeonggi-do (KR).

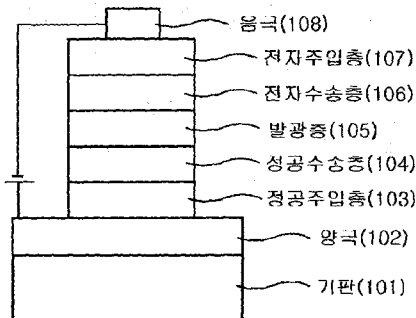
- (74) 대리인: 김은구 (KIM, Eungu) 등; 서울시 강남구 역삼동 636-15 상원빌딩 2 층, 135-908 Seoul (KR).
- (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, 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,

[다음 쪽 계속]

(54) Title: COMPOUND COMPRISING AT LEAST TWO COMPOUNDS COMPRISING AT LEAST TWO FIVE-MEMBERED HETERO RINGS, AN ORGANIC ELECTRICAL ELEMENT USING THE SAME AND A TERMINAL THEREOF

(54) 발명의 명칭: 2 개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2 개 이상 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: Provided are a compound comprising at least two compounds comprising at least two five-membered hetero rings, an organic electrical element using the same and a terminal thereof.

(57) 요약서: 본 발명은 2 개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2 개 이상 포함하는 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말을 제공한다.

WO 2011/108902 A9



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 (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, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

- 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))
- 규칙 91.3(b) 규정에 의한 명백한 잘못의 정정 허가에 관한 정보와 함께 (규칙 48.2(i))

(88) **국제조사보고서 공개일:** 2012년 1월 12일

(48) **본 정정판 공개일:** 2012년 3월 1일

(15) **정정사항에 관한 정보:**
2012년 3월 1일 자 공지 참조

명세서

**발명의 명칭: 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이
2개 이상 포함하는 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말
기술분야**

- [1] 본 발명은 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 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. 이 때 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.

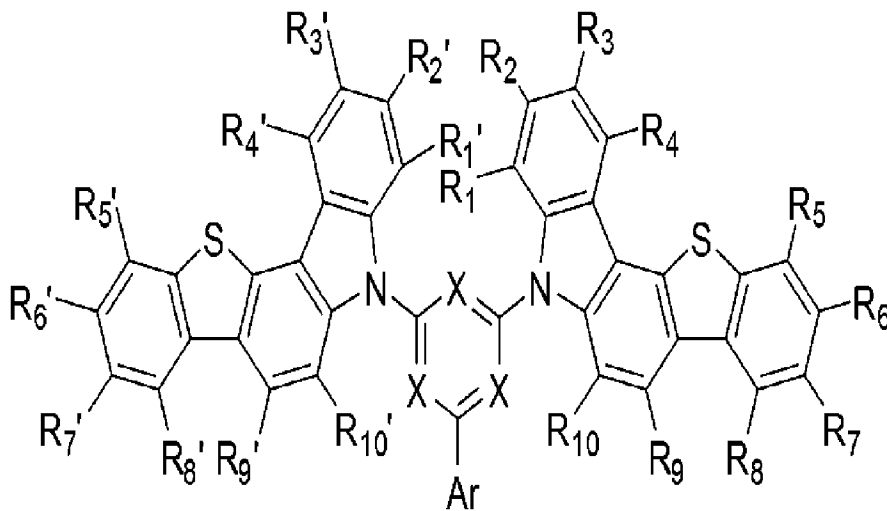
발명의 상세한 설명

기술적 과제

- [6] 본 발명자들은 신규한 구조를 갖는 오원자 헤테로 고리를 포함하는 화합물을 밝혀내었으며, 또한 이 화합물을 유기전기소자에 적용시 소자의 발광효율, 안정성 및 수명을 크게 향상시킬 수 있다는 사실을 밝혀내었다.
- [7] 이에 본 발명은 신규한 오원자 헤테로 고리를 포함하는 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말을 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

- [8] 일측면에서, 본 발명은 아래 화학식으로 표시되는 화합물을 제공한다.
- [9]



- [10] 본 발명은 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물에 따라서 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 모든 칼라의 형광과 인광소자에 적합한 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료 및/또는 전자수송 재료로 유용하며, 다양한 색의 인광 도판트의 호스트 물질로 유용하다.
- [11] 또한, 본 발명은 상기의 화학식을 가지는 화합물을 이용한 유기 전자 소자 및 이 유기 전자 소자를 포함하는 단말을 제공한다.

발명의 효과

- [12] 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물은 유기전기소자 및 단말에서 다양한 역할을 할 수 있으며, 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 모든 칼라의 형광과 인광소자에 적합한 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료 및/또는 전자수송 재료로 유용하며, 다양한 색의 인광 도판트의 호스트 물질로 유용하다.

도면의 간단한 설명

- [13] 도 1 내지 도 6은 본 발명의 화합물을 적용할 수 있는 유기전계발광소자의 예를

도시한 것이다.

발명의 실시를 위한 형태

[14] 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.

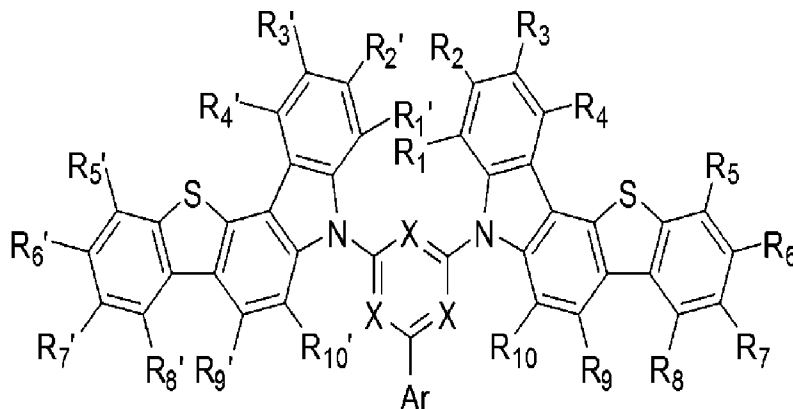
[15] 또한, 본 발명의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제 1, 제 2, A, B, (a), (b) 등의 용어를 사용할 수 있다. 이러한 용어는 그 구성 요소를 다른 구성 요소와 구별하기 위한 것일 뿐, 그 용어에 의해 해당 구성 요소의 본질이나 차례 또는 순서 등이 한정되지 않는다. 어떤 구성 요소가 다른 구성요소에 "연결", "결합" 또는 "접속"된다고 기재된 경우, 그 구성 요소는 그 다른 구성요소에 직접적으로 연결되거나 또는 접속될 수 있지만, 각 구성 요소 사이에 또 다른 구성 요소가 "연결", "결합" 또는 "접속"될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

[16]

[17] 일측면에서, 본 발명은 아래 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[18] [화학식 1]

[19]



[20] 위 화학식 1에 있어서,

[21] (1) R₁, R₂, R₃, R₄, R₅, R₆, R₇, R₈, R₉, R₁₀, R₁', R₂', R₃', R₄', R₅', R₆', R₇', R₈', R₉', 및 R₁₀'은 각각 서로 독립적으로 수소 원자, 할로젠 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(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴옥시기일 수 있다.

[22] (2) R₁ 내지 R₁₀ 및 R₁' 내지 R₁₀'은 인접한 기와 결합하여 포화 또는 불포화고리를 형성할 수 있다. 예를 들어 이웃하는 R₁과 R₂, R₂와 R₃, ...R₈과 R₉, R₉와 R₁₀이 결합하여 포화 또는 불포화고리를 형성할 수 있다. 예를 들어 이웃하는 R₁'과 R₂', R₂'와 R₃', ...R₈'과 R₉', R₉'와 R₁₀'이 결합하여 포화 또는 불포화고리를 형성할 수 있다.

[23] (3) X는 탄소(C) 또는 질소(N)일 수 있다.

[24] (4) Ar은 수소 원자, 할로젠 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(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

[25] 헤테로아릴기 또는 황(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴옥시기일 수 있다.

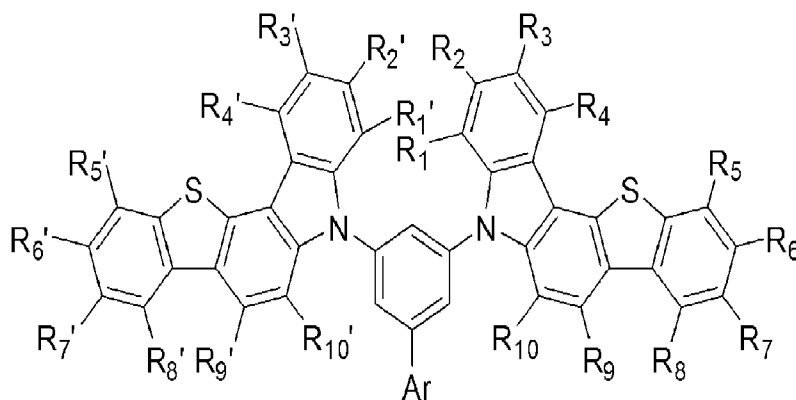
[26] (5) 상기 구조식을 가지는 화합물은 용액 공정(soluble process)에 사용될 수 있다. 즉, 상기 화합물로 용액 공정(soluble process)에 의해 후술할 유기전기소자의 유기물층을 형성할 수 있다. 즉 유기전기소자의 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 솔벤트 프로세스(solvent process), 에컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.

[27]

[28] 다른 측면에서, 본 발명은 아래 화학식 2로 표시되는 화합물을 제공한다.

[29] [화학식 2]

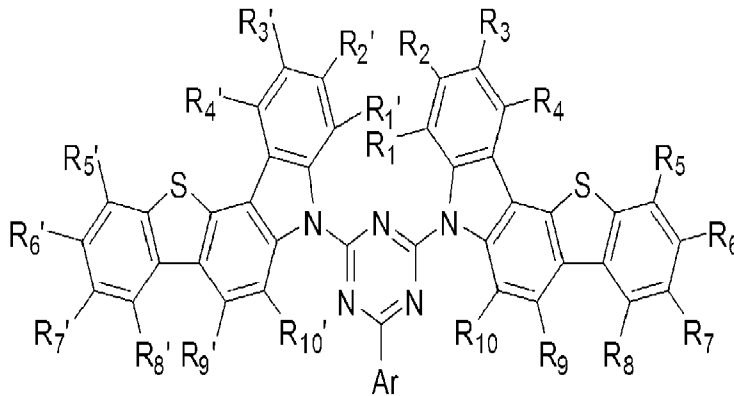
[30]



[31] 또다른 측면에서, 본 발명은 아래 화학식 3으로 표시되는 화합물을 제공한다.

[32] [화학식 3]

[33]



[34] 위 화학식 2 및 3에서 Ar은 화학식 1과 동일하다.

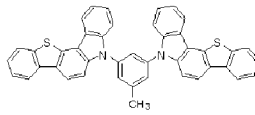
[35] 위 화학식 1 내지 3에서 R₁, R₂, R₃, R₄, R₅, R₆, R₇, R₈, R₉, R₁₀, R₁', R₂', R₃', R₄', R₅', R₆', R₇', R₈', R₉', 및 R₁₀'의 치환기들은 치환 또는 비치환될 수 있는데 치환된 경우 각각 독립적으로 각각 서로 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 알콕시기, 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알콕시기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 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(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴옥시기이루어진 군으로부터 선택된 하나로 치환될 수 있다.

[36] 본 발명의 일실시예에 따른 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물인 화학식 1 내지 3에 속하는 화합물의 구체적 예로서 아래 화학식 4의 화합물들이 있으나, 본 발명이 이들에만 한정되는 것은 아니다. 아래 화학식 4의 화합물들은 R₁ 내지 R₁₀ 및 R₁' 내지 R₁₀'가 수소 원자인 것으로 표시하였으나 화학식 1 내지 3에서 설명한 다른 작용기일 수도 있다.

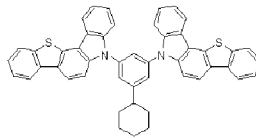
[37] 다시말해 이때 화학식 1 내지 3로 표시되는 화합물들은 R₁, R₂, R₃, R₄, R₅, R₆, R₇, R₈, R₉, R₁₀, R₁', R₂', R₃', R₄', R₅', R₆', R₇', R₈', R₉', 및 R₁₀'의 치환기들의 치환 또는 비치환된 치환기들은 광범위한 관계로 모든 화합물들을 예시하는 것은 현실적으로 어려우므로 대표적인 화합물들을 예시적으로 설명하나 화학식 4에 설명하지 않은 화학식 1 내지 3로 표시되는 화합물들도 본 명세서의 일부를 구성할 수 있다.

[38] [화학식 4]

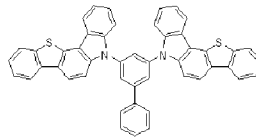
[39]



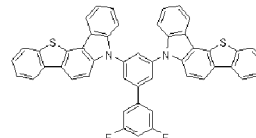
화합물 1



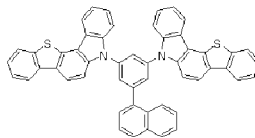
화합물 2



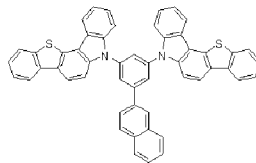
화합물 3



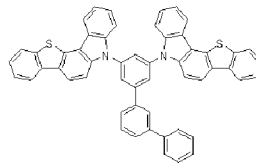
화합물 4



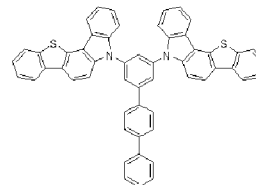
화합물 5



화합물 6

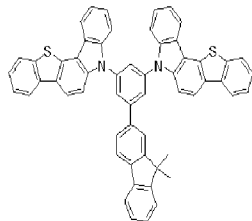


화합물 7

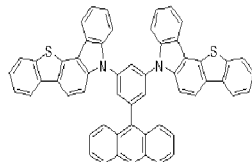


화합물 8

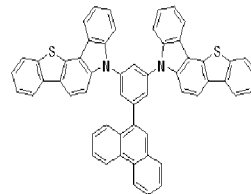
[40]



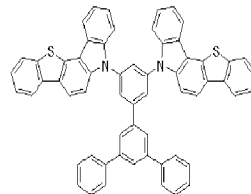
화합물 9



화합물 10

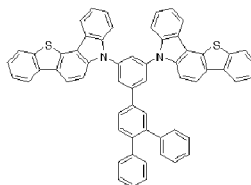


화합물 11

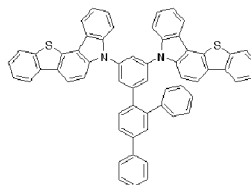


화합물 12

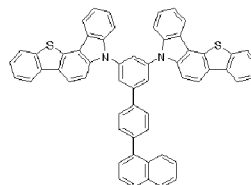
[41]



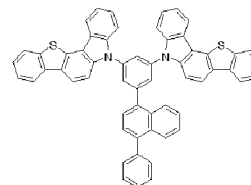
화합물 13



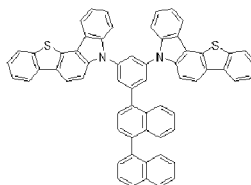
화합물 14



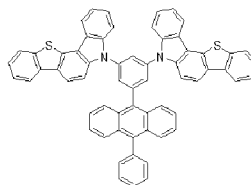
화합물 15



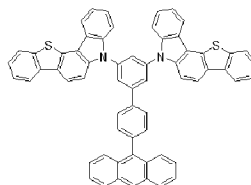
화합물 16



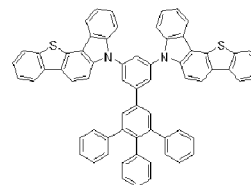
화합물 17



화합물 18

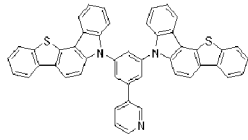


화합물 19

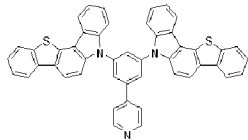


화합물 20

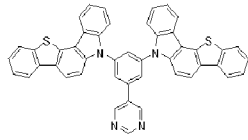
[42]



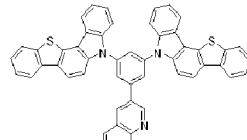
화합물 21



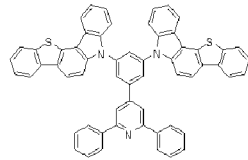
화합물 22



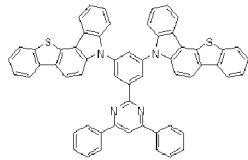
화합물 23



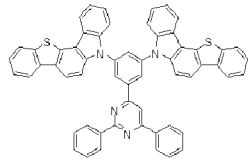
화합물 24



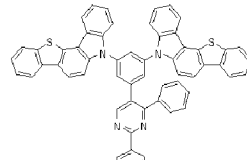
화합물 25



화합물 26

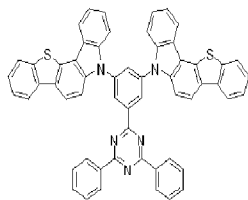


화합물 27

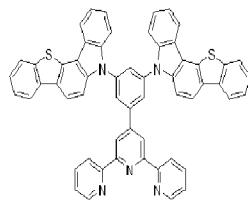


화합물 28

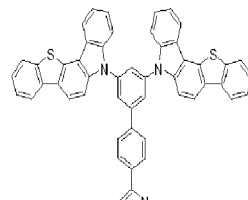
[43]



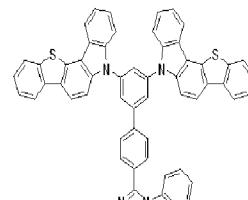
화합물 29



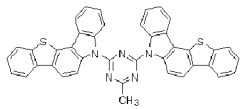
화합물 30



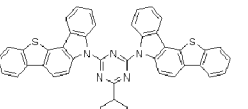
화합물 31



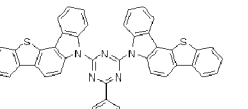
화합물 32



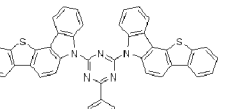
화합물 33



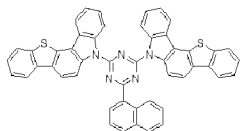
화합물 34



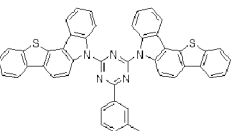
화합물 35



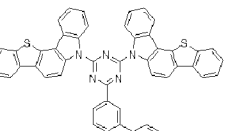
화합물 36



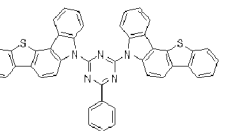
화합물 37



화합물 38

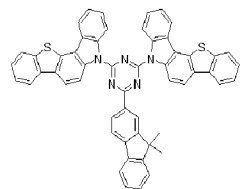


화합물 39

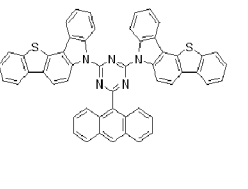


화합물 40

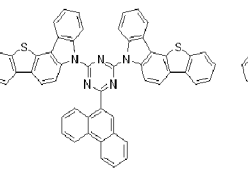
[44]



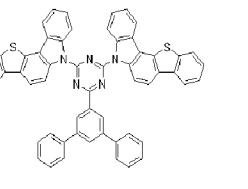
화합물 41



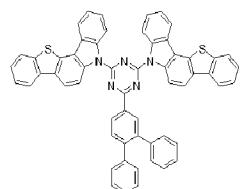
화합물 42



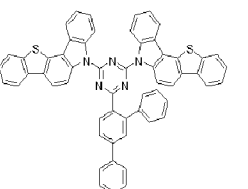
화합물 43



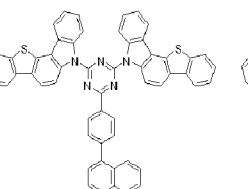
화합물 44



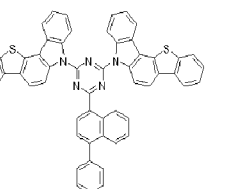
화합물 45



화합물 46

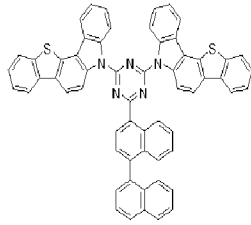


화합물 47

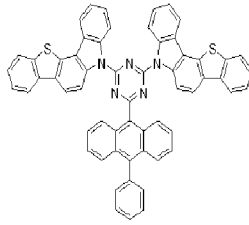


화합물 48

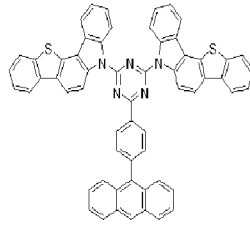
[45]



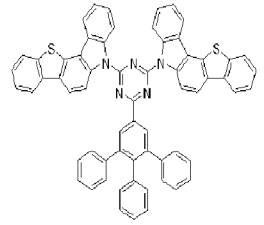
화합물 49



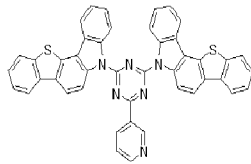
화합물 50



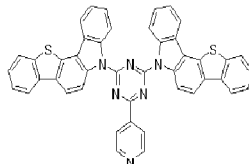
화합물 51



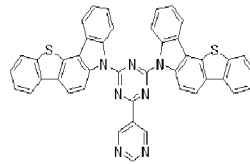
화합물 52



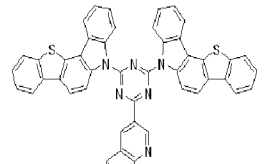
화합물 53



화합물 54

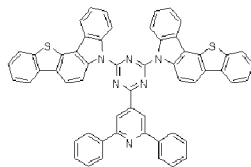


화합물 55

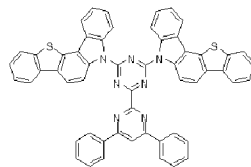


화합물 56

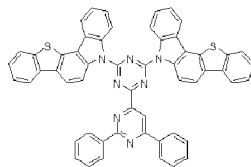
[46]



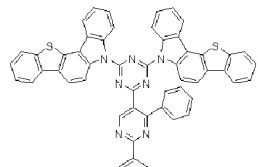
화합물 57



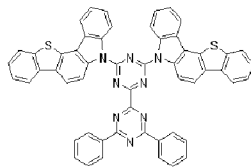
화합물 58



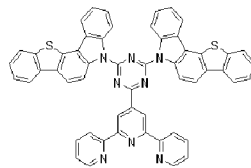
화합물 59



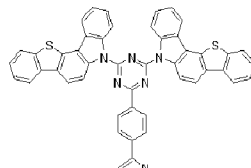
화합물 60



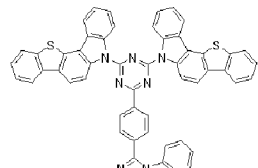
화합물 61



화합물 62



화합물 63



화합물 64

[47] 화학식 1 내지 4를 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물들이 유기물층으로 사용되는 다양한 유기전기소자들이 존재한다. 화학식 1 내지 4를 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물들이 사용될 수 있는 유기전기소자는 예를 들어, 유기전계발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC) 드럼, 유기트랜지스트(유기 TFT), 포토다이오드(photodiode), 유기레이저(organic laser), 레이저 다이오드(laser diode) 등이 있다.

[48] 화학식 1 내지 4를 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물들이 적용될 수 있는 유기전기소자 중 일례로 유기전계발광소자(OLED)에 대하여 아래 설명하나, 본 발명은 이에 제한되지 않고 다양한 유기전기소자에 위에서 설명한 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물이 적용될 수 있다.

[49] 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 4의 화합물들을 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.
- [50] 도 1 내지 도 6은 본 발명의 화합물을 적용할 수 있는 유기전계발광소자의 예를 도시한 것이다.
- [51] 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자는, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함하는 유기물층 중 1층 이상을 상기 화학식 1 내지 6의 화합물들을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 통상의 제조 방법 및 재료를 이용하여 당 기술 분야에 알려져 있는 구조로 제조될 수 있다.
- [52] 본 발명에 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자의 구조는 도 1 내지 6에 예시되어 있으나, 이들 구조에만 한정된 것은 아니다. 이때, 도면번호 101은 기관, 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.
- [53] 이때, 화학식 1 내지 4를 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층을 포함하는 유기물층 중 하나 이상에 포함될 수 있다. 구체적으로, 화학식 1 내지 4를 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층, 정공저지층, 전자저지층, 보호층 중 하나 이상을 대신하여 사용되거나 이들과 함께 층을 형성하여 사용될 수도 있다. 물론 유기물층 중 한층에만 사용되는 것이 아니라 두층 이상에 사용될 수 있다.
- [54] 화학식 1 내지 4를 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물은 유기전기소자 및 단말에서 다양한 역할을 할 수 있으며, 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 모든 칼라의 형광과 인광소자에 적합한 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료 및/또는 전자수송 재료로 유용하며, 다양한 색의 인광 도판트의 호스트 물질로 사용될 수 있다.
- [55] 예컨대, 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기관 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.
- [56] 이와 같은 방법 외에도, 기관 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.

- [57] 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자는 위에서 설명한 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물을 용액 공정(soluble process)에 의해 유기물층, 예를 들어 발광층을 형성할 수도 있다.
- [58] 기판은 유기전계발광소자의 지지체이며, 실리콘 웨이퍼, 석영 또는 유리판, 금속판, 플라스틱 필름이나 시트 등이 사용될 수 있다.
- [59] 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 SnO₂: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.
- [60] 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.
- [61] 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.
- [62] 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 이상의 값을 갖는 재료가 바람직하다. 이와 같은 조건을 만족하는 물질들로는 NPD(혹은 NPB라 함), 스피로-아릴아민계 화합물, 페릴렌-아릴아민계 화합물, 아자시클로헥사트리엔화합물, 비스(디페닐비닐페닐)안트라센,

- 실리콘게르마늄옥사이드화합물, 실리콘계아릴아민화합물 등이 될 수 있다.
- [63] 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.
- [64] 이와 같은 조건을 만족하는 물질 또는 화합물로는 녹색의 경우 Alq₃가, 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'-diylidene-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-benzo(ij)quinolizin-9-yl)ethenyl]-4H-pyran-4-ylidene]-propanedinitrile)와 같은 물질을 소량 도핑하여 사용할 수 있다. 잉크젯프린팅, 롤코팅, 스펀코팅 등의 공정을 사용하여 발광층을 형성할 경우에, 폴리페닐렌비닐렌(PPV) 계통의 고분자나 폴리 플루오렌(poly 플루오렌(fluorene)) 등의 고분자를 유기발광층에 사용할 수 있다.
- [65] 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; Alq₃를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [66] 전자수송층 위에는 전자주입층이 적층된다. 전자주입층은 Balq, Alq₃, Be(bq)₂, Zn(BTZ)₂, Zn(phq)₂, PBD, spiro-PBD, TPBI, Tf-6P 등과 같은 금속착제 화합물, imidazole ring을 갖는 aromatic 화합물이나 boron 화합물 등을 포함하는 저분자 물질을 이용하여 제작할 수 있다. 이때, 전자주입층은 100 ~ 300Å 두께 범위에서 형성될 수 있다.
- [67] 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 이하 두께의 리튬플루오라이드와 알루미늄, 산화리튬과 알루미늄, 스트론튬산화물과 알루미늄 등의 2층 구조의 전극도 사용될 수 있다.

- [68] 전술하였듯이, 화학식 1 내지 12을 참조하여 설명한 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물에 따라서 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 모든 칼라의 형광과 인광소자에 적합한 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료, 전자수송 재료 및 전자주입 재료로 사용할 수 있으며, 다양한 색의 인광 도판트의 호스트 물질로 사용될 수 있다.
- [69] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.
- [70] 한편 본 발명은, 위에서 설명한 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 이 디스플레이장치를 구동하는 제어부를 포함하는 단말을 포함한다. 이 단말은 현재 또는 장래의 유무선 통신단말을 의미한다. 이상에서 전술한 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.

[71]

[72] 실시에

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

[74]

[75] 제조에

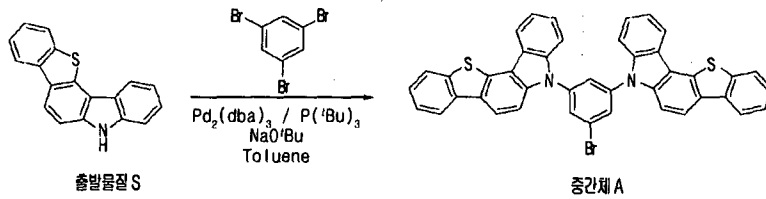
- [76] 이하, 화학식 4에 속하는 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물들에 대한 제조에 또는 합성예를 설명한다. 다만, 화학식 4에 속하는 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물들의 수가 많기 때문에 화학식 4에 속하는 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물들 중 하나 또는 둘을 예시적으로 설명한다. 본 발명이 속하는 기술분야의 통상의 지식을 가진 자, 즉 당업자라면 아래에서 설명한 제조예들을 통해, 예시하지 않은 본 발명에 속하는 2개 이상의 오원자 헤테로고리를 포함하는 화합물이 2개 이상 포함하는 화합물을 제조할 수 있다.

[77]

[78] 단계 1) 중간체 A의 합성

- [79] [반응식 1]

[80]



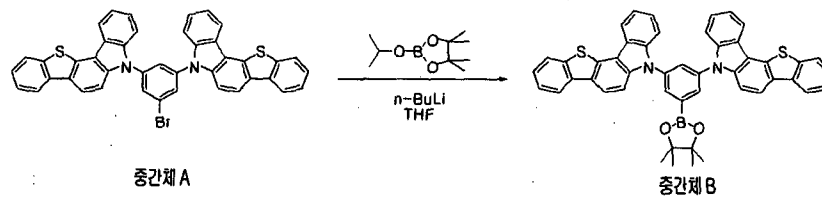
[81] 출발물질 S와 1,3,5-tribromobenzene, Pd₂(dba)₃, P(*t*Bu)₃ 그리고 NaO*t*Bu를 톨루엔 용매에 녹인 후, 110 에서 24시간동안 교반시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 낮추고 생성된 고체를 감압여과 후, 뜨거운 톨루엔 용매를 이용하여 재결정화하여 원하는 중간체 A를 얻어내었다(수율: 69%).

[82]

[83] 단계 2) 중간체 B의 합성

[84] [반응식 2]

[85]



[86] 단계 1)에서 얻은 중간체 A를 무수 THF에 녹이고, 반응물의 온도를 8 로 낮추고, n-BuLi (1.6 M in hexane)을 천천히 적가하고 난 후, 반응물을 0 에서 1시간동안 교반시켰다. 반응물의 온도를 -78 로 낮추고, Isopropoxy-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 적가하고, 상온에서 12시간동안 교반시켰다. 반응이 종결되면 CH₂Cl₂로 추출하고 무수 MgSO₄로 반응물 내의 물을 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 메틸알콜(Methyl alcohol)을

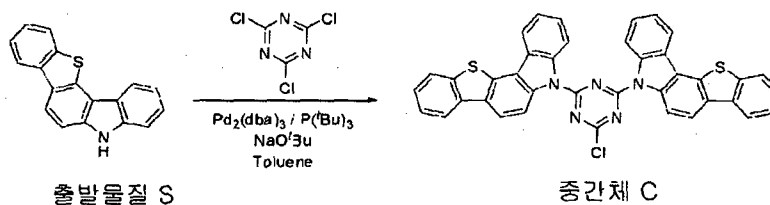
[87] 사용하여 재결정화하여 원하는 중간체 B를 얻었다(수율: 62%).

[88]

[89] 단계 3) 중간체 C의 합성

[90] [반응식 3]

[91]



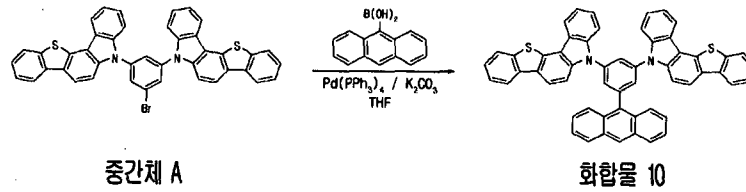
[92] 출발물질 S와 Cyanuric chloride, Pd₂(dba)₃, P(*t*Bu)₃ 그리고 NaO*t*Bu를 톨루엔 용매에 녹인 후, 110 에서 24시간동안 교반시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 낮추고 생성된 고체를 감압여과 후, 뜨거운 톨루엔 용매를 이용하여 재결정화하여 원하는 중간체 C를 얻어내었다(수율: 49%).

[93]

[94] 합성예 1: 화합물 10의 합성

[95] [반응식 4]

[96]



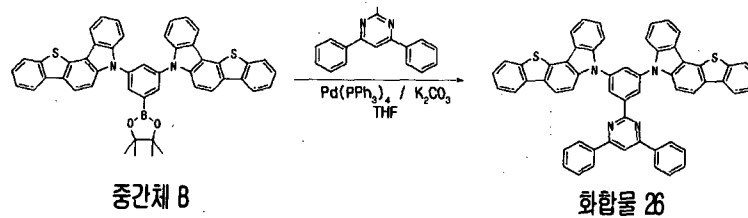
[97] 단계 1)에서 합성한 중간체 A와 9-Anthraceneboronic acid, Pd(PPh₃)₄ 그리고 K₂CO₃를 무수 THF와 소량의 물에 녹인 후, 24시간동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식힘 다음 CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 무수 MgSO₄로 소량의 물을 제거하고 감압여과 후, 유기 용매를 농축하여 생성된 생성물을 톨루엔 용매를 이용하여 재결정화하여 원하는 화합물 10을 얻어내었다 (수율: 71%).

[98]

[99] 합성예 2: 화합물 26의 합성

[100] [반응식 5]

[101]



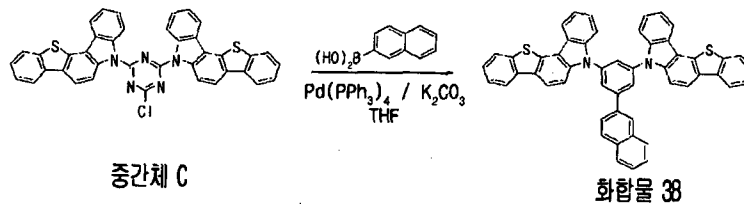
[102] 단계 2)에서 합성한 중간체 B와 2-Iodo-4,6-diphenylpyrimidine, Pd(PPh₃)₄ 그리고 K₂CO₃를 무수 THF와 소량의 물에 녹인 후, 24시간동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식힘 다음 CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 무수 MgSO₄로 소량의 물을 제거하고 감압여과 후, 유기 용매를 농축하여 생성된 생성물을 톨루엔 용매를 이용하여 재결정화하여 원하는 화합물 26을 얻어내었다 (수율: 54%).

[103]

[104] 합성예 3: 화합물 38의 합성

[105] [반응식 6]

[106]



[107] 단계 3)에서 합성한 중간체 C와 2-Naphthylboronic acid, Pd(PPh₃)₄ 그리고 K₂CO₃를 무수 THF와 소량의 물에 녹인 후, 24시간동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식힘 다음 CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 무수

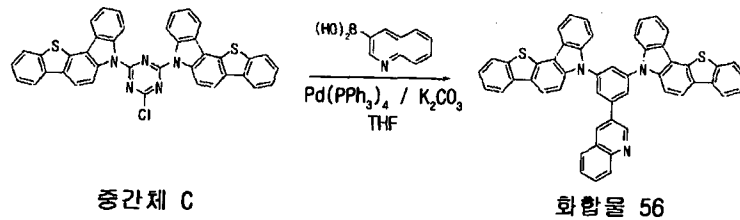
MgSO₄로 소량의 물을 제거하고 감압여과 후, 유기 용매를 농축하여 생성된 생성물을 톨루엔 용매를 이용하여 재결정화하여 원하는 화합물 38을 얻어내었다 (수율: 77%).

[108]

[109] 합성예 4: 화합물 56의 합성

[110] [반응식 7]

[111]



[112] 단계 3)에서 합성한 중간체 C와 Quinolin-3-ylboronic acid, Pd(PPh₃)₄ 그리고 K₂CO₃를 무수 THF와 소량의 물에 녹인 후, 24시간동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식힘 다음 CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 무수 MgSO₄로 소량의 물을 제거하고 감압여과 후, 유기 용매를 농축하여 생성된 생성물을 톨루엔 용매를 이용하여 재결정화하여 원하는 화합물 56을 얻어내었다 (수율: 65%).

[113] 이때 화학식 1 내지 3으로 표시되는 화합물들은 R₁, R₂, R₃, R₄, R₅, R₆, R₇, R₈, R₉, R₁₀, R₁', R₂', R₃', R₄', R₅', R₆', R₇', R₈', R₉', 및 R₁₀'의 치환기들의 치환 또는 비치환된 치환기들은 광범위한 관계로 화학식 4로 표시한 화합물들 중 일부의 합성예를 예시적으로 설명하였으나 합성예로 예시적으로 설명하지 않은 화학식 1 내지 4로 표시되는 화합물들도 본 명세서의 일부를 구성할 수 있다.

[114]

[115] 유기 전계 소자의 제조 평가

[116] 합성을 통해 얻은 화합물들 10, 26, 38, 56 각각을 발광층의 발광 호스트 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전계 발광소자를 제작하였다.

[117] 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 우선 홀 주입층으로서 구리프탈로사이아닌(이하 CuPc로 약기함)막을 진공증착하여 10 nm 두께로 형성하였다. 이어서, 이 막 상에 전공수송 화합물로서 4,4-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 (이하 a-NPD로 약기함)을 30 nm의 두께로 진공증착하여 홀 수송층을 형성하였다.

[118] 홀 수송층을 형성한 후, 이 홀 수송층 상부에 화합물들 10, 26, 38, 56 각각을 인광 호스트 재료로서 증착하여 발광층을 성막하였다.

[119] 동시에 인광 발광성의 Ir 금속착체 도펀트로서 트리스(2-페닐피리딘)이리듐 (이하 Ir(ppy)₃로 약기함)을 첨가하였다. 이때 발광층 중에 있어서의 Ir(ppy)₃의 농도는 5중량%로 하였다. 홀 저지층으로

(1,1-비스페닐)-4-올레이트)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이트)알루미늄 (이하 BAiq로 약기함)을 10 nm의 두께로 진공증착하고, 이어서 전자주입층으로

트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄 (이하 Alq₃로 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.

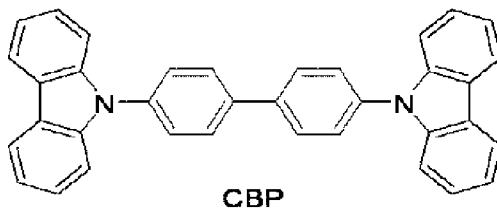
[120]

[121] 비교실험예1

[122] 비교를 위해, 본 발명의 화합물 대신에 화학식 13로 표시되는 화합물(이하 CBP로 약칭함)을 발광 호스트 물질로 사용하여 시험예와 동일한 구조의 유기전계발광소자를 제작하였다.

[123] [화학식 5]

[124]



[125] 표 1

	발광층의 호스트 재료	전압(V)	전류밀도(mA/cm ²)	휘도(cd/m ²)	발광효율(cd/A)	색도좌표(x, y)
실시예 1	화합물 10	5.1	0.31	107	62.3	(0.30, 0.60)
실시예 2	화합물 26	4.9	0.30	105	68.2	(0.32, 0.61)
실시예 3	화합물 38	5.2	0.33	107	58.3	(0.30, 0.60)
실시예 4	화합물 56	5.0	0.32	107	65.3	(0.30, 0.60)
비교예 1	CBP	6.1	0.31	101	32.6	(0.33, 0.61)

[126]

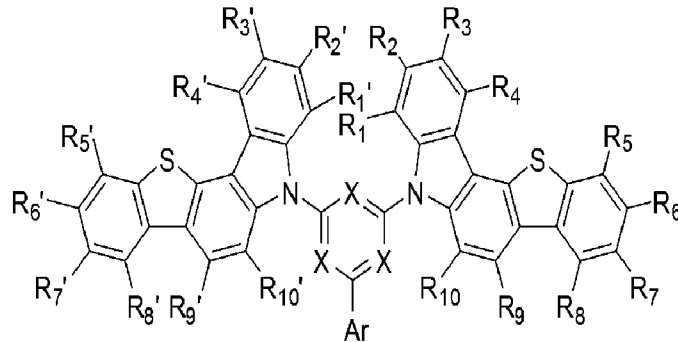
[127] 상기 표 1의 결과로부터 알 수 있듯이, 상기 표의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 유기전계발광소자용 재료를 이용한 유기전계발광소자는 발광효율이 비교예로 사용된 CBP에 비해 월등히 우수할 뿐만 아니라 색순도가 현저히 개선된 녹색 발광이 얻어지므로 유기전계발광 소자의 인광 호스트 물질로 사용되어 발광효율 및 색순도를 현저히 개선시킬 수 있다.

- [128] 본 발명의 화합물들을 유기전계발광소자의 다른 유기물층들, 예를 들어 발광층의 호스트 재료 뿐만 아니라, 전자주입층, 전자수송층, 정공주입층 및 정공수송층에 사용되더라도 동일한 효과를 얻을 수 있는 것은 자명하다.
- [129] 이때 화학식 1 내지 4로 표시되는 화합물들은 $R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10}, R'_1, R'_2, R'_3, R'_4, R'_5, R'_6, R'_7, R'_8, R'_9$, 및 R'_{10} 의 치환 또는 비치환된 치환기들은 광범위한 관계로 화학식 4으로 표시한 화합물들 중 일부의 비교실시예를 예시적으로 설명하였으나 비교실시예로 예시적으로 설명하지 않은 화학식 1 내지 3로 표시되는 화합물들도 전술한 화학식 1 내지 3의 모핵 구조를 가지는 이유로 전술한 비교실시예들과 동일한 효과를 나타내는 것으로 확인할 수 있으며 그 결과는 본 명세서의 일부를 구성할 수 있다.
- [130] 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.
- [131] 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함되는 것으로 해석되어야 할 것이다.
- [132]
- [133] **CROSS-REFERENCE TO RELATED APPLICATION**
- [134] 본 특허출원은 2010년 3월 5일 한국에 출원한 특허출원번호 제 10-2010-
- [135] 0019950 호에 대해 미국 특허법 119(a)조(35 U.S.C § 119(a))에 따라 우선권을 주장하며, 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다. 아울러, 본 특허출원은 미국 이외에 국가에 대해서도 위와 동일한 동일한 이유로 우선권을 주장하면 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다.

청구범위

[청구항 1]

다음 화학식으로 표시되는 화합물.



위 화학식에 있어서,

(1) $R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10}, R_{1'}, R_{2'}, R_{3'}, R_{4'}, R_{5'}, R_{6'}, R_{7'}, R_{8'}, R_{9'},$ 및 R_{10}' 은 각각 서로 독립적으로 수소 원자, 할로젠 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(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴옥시기이며,

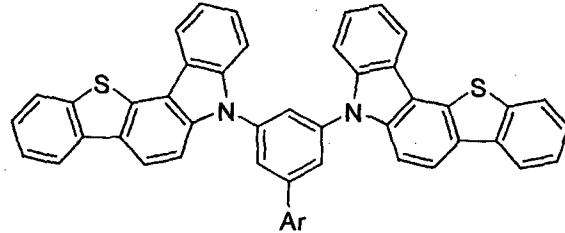
(2) X는 탄소(C) 또는 질소(N)이며,

(3) Ar은 수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 알콕시기, 티올기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 알킬기, 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(S), 질소(N), 산소(O), 인(P) 및 규소(Si)를 적어도 하나 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 헤테로아릴옥시기이며,

60의 헤테로아릴옥시기이다.

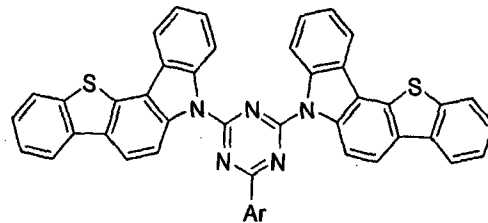
[청구항 2]

제1항에 있어서, 상기 화합물은 다음 화학식으로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 하는 화합물.



[청구항 3]

제1항에 있어서, 상기 화합물은 다음 화학식으로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 하는 화합물.

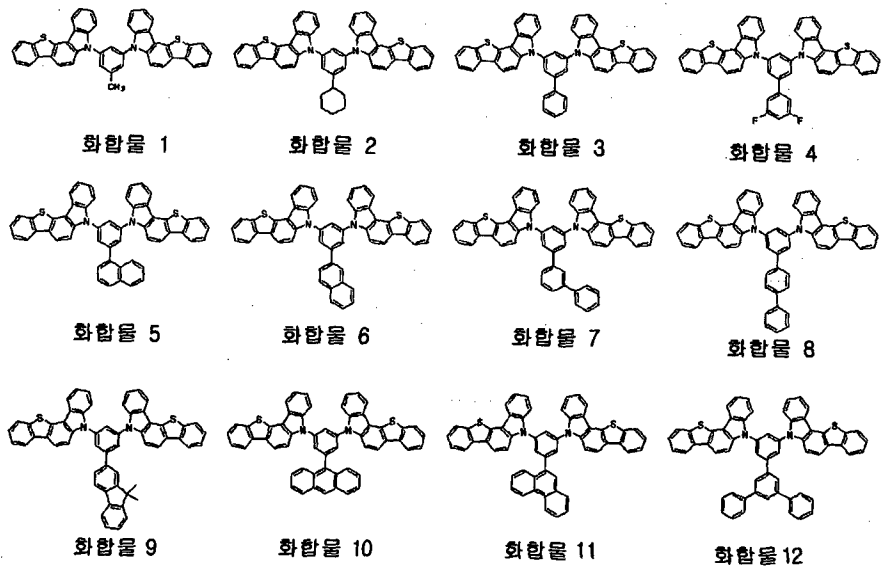


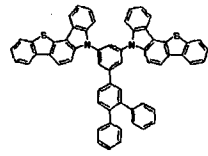
[청구항 4]

제1항에 있어서, 상기 R₁ 내지 R₁₀ 및 R₁' 내지 R₁₀'은 인접한 기와 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성하는 것을 특징으로 하는 화합물.

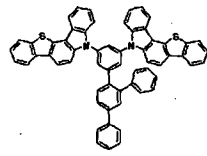
[청구항 5]

제1항에 있어서, 상기 화합물은,

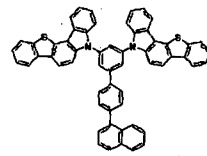




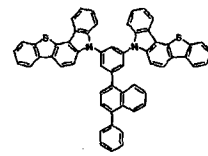
화합물 13



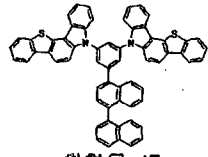
화합물 14



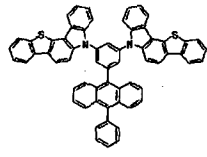
화합물 15



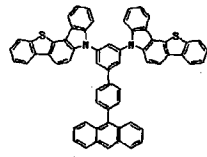
화합물 16



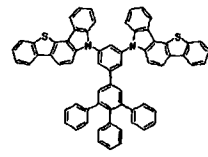
화합물 17



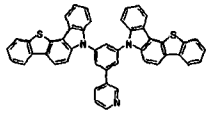
화합물 18



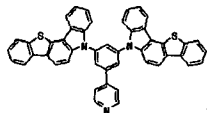
화합물 19



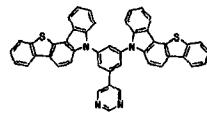
화합물 20



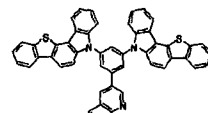
화합물 21



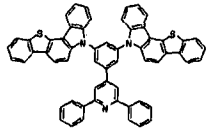
화합물 22



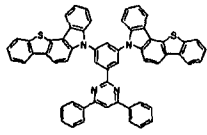
화합물 23



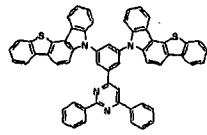
화합물 24



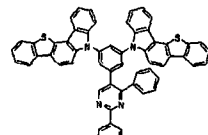
화합물 25



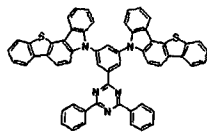
화합물 26



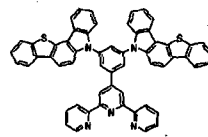
화합물 27



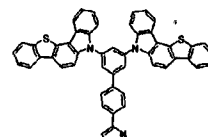
화합물 28



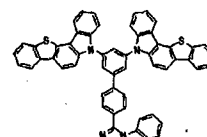
화합물 29



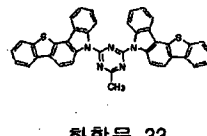
화합물 30



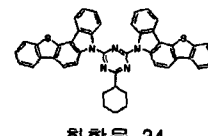
화합물 31



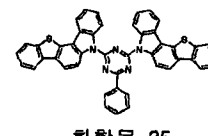
화합물 32



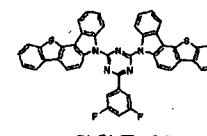
화합물 33



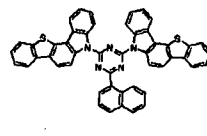
화합물 34



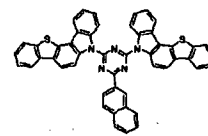
화합물 35



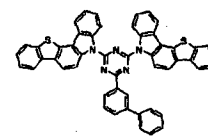
화합물 36



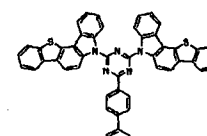
화합물 37



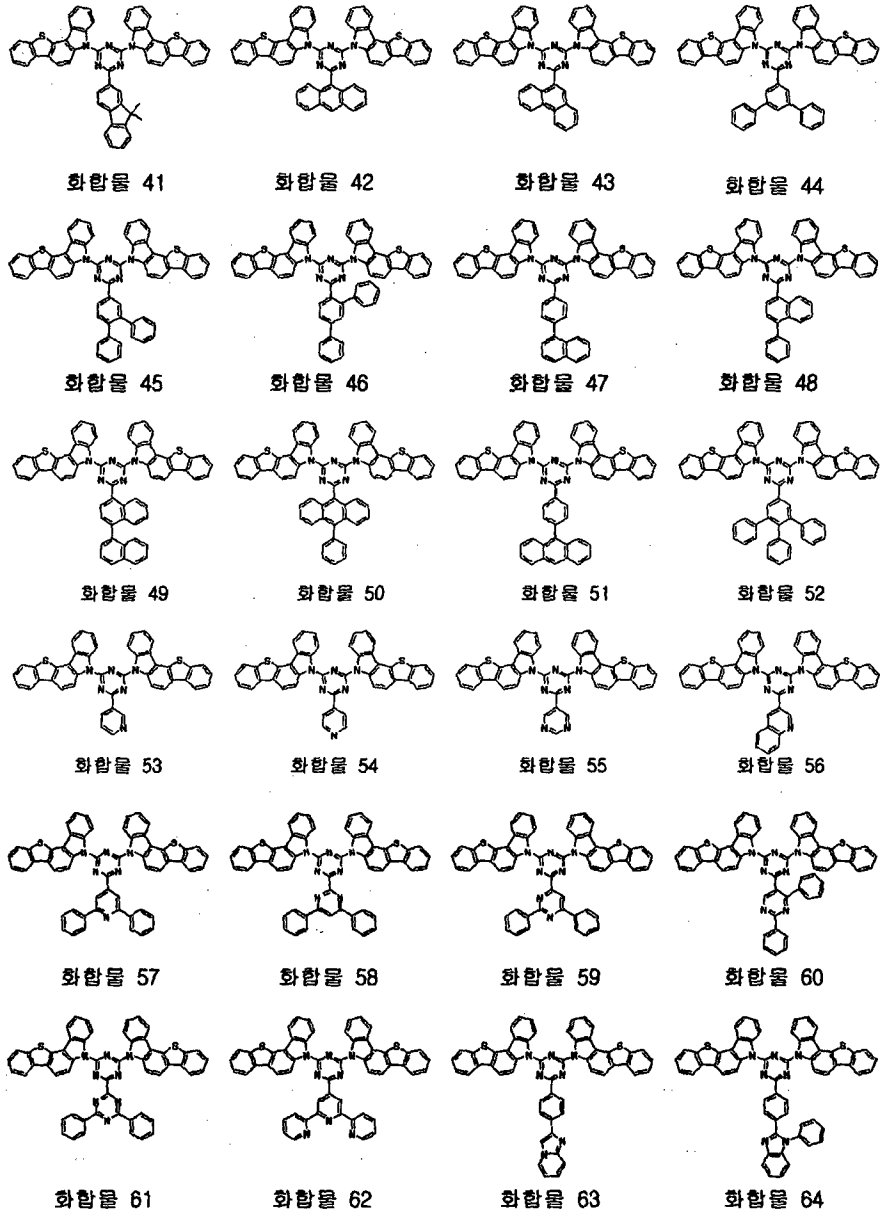
화합물 38



화합물 39



화합물 40



으로 구성된 그룹에서 선택된 하나인 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 6]

제1항 내지 제5항 중 하나의 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전기소자.

[청구항 7]

제6항에 있어서,
상기 화합물을 용액 공정(soluble process)에 의해 상기 유기물층을 형성하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 8]

제6항에 있어서,
상기 유기전기소자는 제1 전극, 상기 1층 이상의 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층된 형태로 포함하는 유기전계발광소자인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 9]

제8항에 있어서,

상기 유기물층은 발광층을 포함하며,
상기 발광층에서 상기 화합물이 호스트 물질로 사용되는 것을
특징으로 하는 유기전기소자.

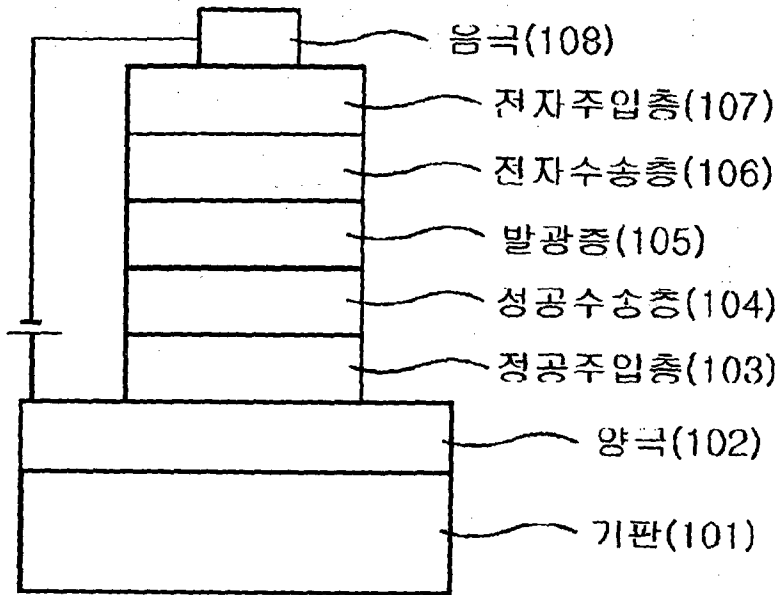
[청구항 10]

제6항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와;
상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부를 포함하는 단말.

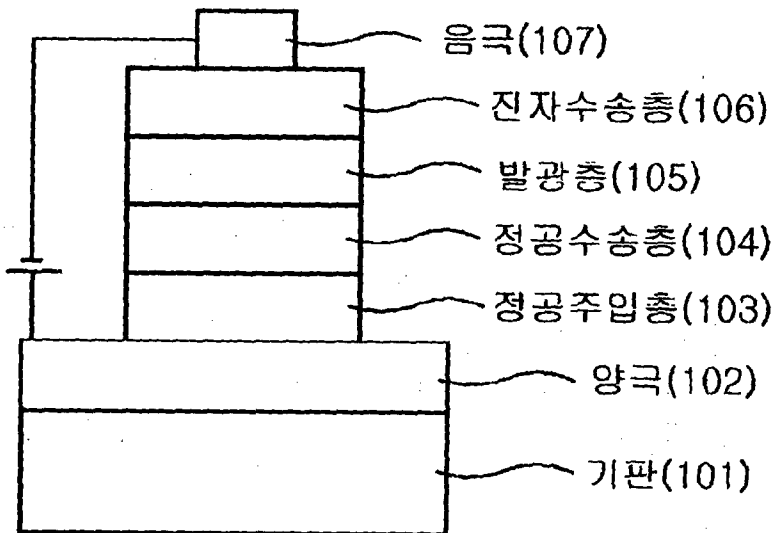
[청구항 11]

제10항에 있어서,
상기 유기전기소자는 유기전계발광소자(OLED), 유기태양전지,
유기감광체(OPC) 드럼, 유기트랜지스트(유기 TFT),
포토다이오드(photodiode), 유기레이저(organic laser), 레이저
다이오드(laser diode) 중 하나인 것을 특징으로 하는 단말.

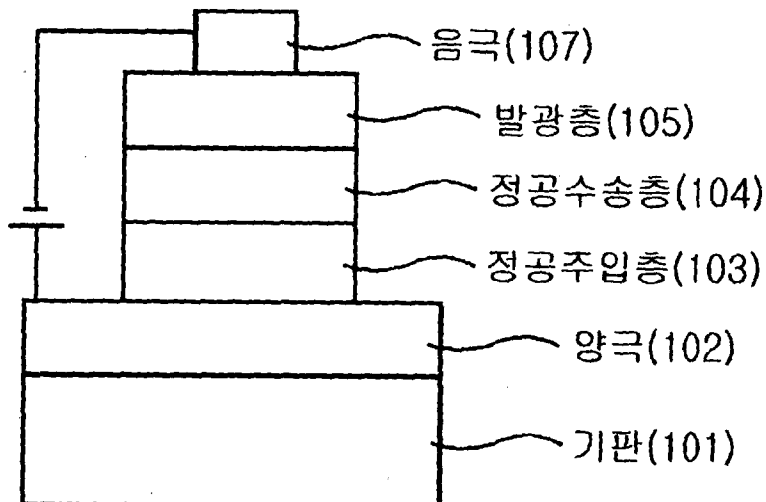
[Fig. 1]



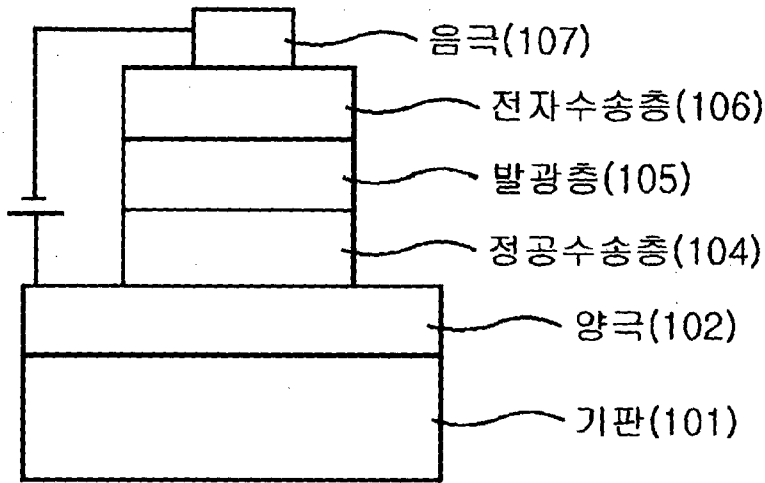
[Fig. 2]



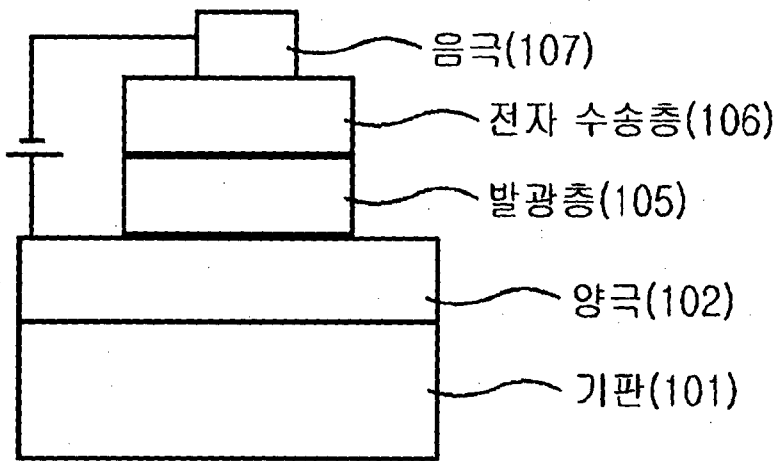
[Fig. 3]



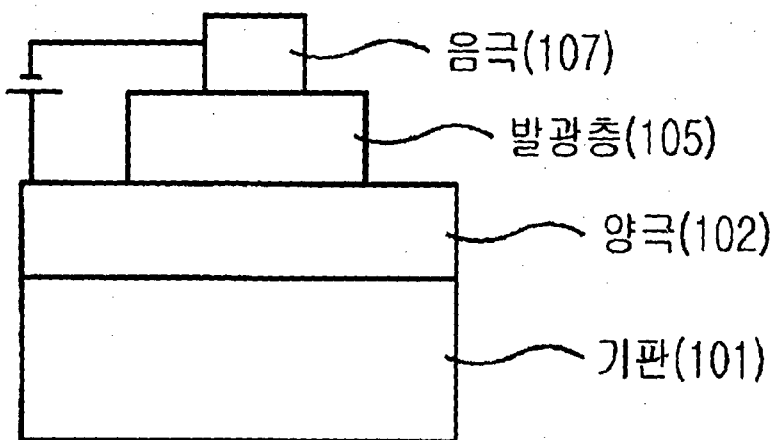
[Fig. 4]



[Fig. 5]



[Fig. 6]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2011/001539

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C09K 11/06; C07F 5/02; C07D 333/76; H01L 51/50; H01J 1/63

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above
Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

eKOMPASS (KIPO internal) & Keywords: benzothieno, benzothiophane, benzothiophene, electroluminescent, carbazole.

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	US 2008-0166594 A1 (ITO, M. et al.) 10 July 2008 See abstract and the claims.	1-11
A	JP 2008-109103 A (FUJIFILM CORP.) 08 May 2008 See abstract and the claims.	1-11
A	JP 2007-077033 A (JSR CORP.) 29 March 2007 See abstract and the claims.	1-11
A	KR 10-2006-0080726 A (SAMSUNG SDI CO., LTD.) 11 July 2006 See abstract and the claims.	1-11

 Further documents are listed in the continuation of Box C. See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

22 NOVEMBER 2011 (22.11.2011)

Date of mailing of the international search report

22 NOVEMBER 2011 (22.11.2011)

Name and mailing address of the ISA/KR

Korean Intellectual Property Office
Government Complex-Daejeon, 139 Seonsa-ro, Daejeon 302-701,
Republic of Korea

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2011/001539

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
US 2008-0166594 A1	10.07.2008	CN 101223156 A0 EP 1894923 A1 JP W020-061372 10A1 KR 10-2008-0031872 A TW 200700405 A WO 2006-137210 A1	16.07.2008 05.03.2008 28.12.2006 11.04.2008 01.01.2007 28.12.2006
JP 2008-109103 A	08.05.2008	NONE	
JP 2007-077033 A	29.03.2007	NONE	
KR 10-2006-0080726 A	11.07.2006	CN 1800298 A JP 2006-188708 A US 2006-0147753 A1 US 7550207 B2	12.07.2006 20.07.2006 06.07.2006 23.06.2009

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야
조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)
C09K 11/06; C07F 5/02; C07D 333/76; H01L 51/50; H01J 1/63

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌
한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))
eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: benzothieno, benzothiophane, benzothiophene, electroluminescent, carbazole.


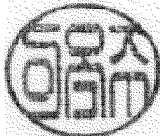
C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
A	US 2008-0166594 A1 (ITO, M. 외 2명) 2008.07.10 요약 및 청구범위 참조.	1-11
A	JP 2008-109103 A (FUJIFILM CORP.) 2008.05.08 요약 및 청구범위 참조.	1-11
A	JP 2007-077033 A (JSR CORP.) 2007.03.29 요약 및 청구범위 참조.	1-11
A	KR 10-2006-0080726 A (삼성에스디아이 주식회사) 2006.07.11 요약 및 청구범위 참조.	1-11

추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:
 “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌
 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌 “X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.
 “L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌 “Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.
 “O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌
 “P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌 “&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

국제조사의 실제 완료일 2011년 11월 22일 (22.11.2011)	국제조사보고서 발송일 2011년 11월 22일 (22.11.2011)
--------------------------------------------	--------------------------------------------------

ISA/KR의 명칭 및 우편주소  대한민국 특허청 (302-701) 대전광역시 서구 청사로 189, 정부대전청사 팩스 번호 82-42-472-7140	심사관 이옥주 전화번호 82-42-481-8450 
------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
US 2008-0166594 A1	2008.07.10	CN 101223156 A0 EP 1894923 A1 JP W020-061372 10A1 KR 10-2008-0031872 A TW 200700405 A WO 2006-137210 A1	2008.07.16 2008.03.05 2006.12.28 2008.04.11 2007.01.01 2006.12.28
JP 2008-109103 A	2008.05.08	없음	
JP 2007-077033 A	2007.03.29	없음	
KR 10-2006-0080726 A	2006.07.11	CN 1800298 A JP 2006-188708 A US 2006-0147753 A1 US 7550207 B2	2006.07.12 2006.07.20 2006.07.06 2009.06.23