

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2014년 1월 16일 (16.01.2014)



(10) 국제공개번호
WO 2014/010823 A1

- (51) 국제특허분류:
C07D 403/10 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 407/14 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2013/004230
- (22) 국제출원일: 2013년 5월 13일 (13.05.2013)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2012-0076493 2012년 7월 13일 (13.07.2012) KR
- (71) 출원인: 주식회사 엘지화학 (LG CHEM, LTD.)
[KR/KR]; 150-721 서울시 영등포구 여의대로 128, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 이상빈 (LEE, Sangbin); 305-380 대전시 유성구 문지동 104-1 번지 LG 화학 기술연구원 내, Daejeon (KR). 이동훈 (LEE, Dong Hoon); 305-380 대전시 유성구 문지동 104-1 번지 LG 화학 기술연구원 내, Daejeon (KR). 이호용 (LEE, Hoyong); 305-380 대전시 유성구 문지동 104-1 번지 LG 화학 기술연구원 내, Daejeon (KR). 김공겸 (KIM, Kongkyeom); 305-380 대전시 유성구 문지동 104-1 번지 LG 화학 기술연구원 내, Daejeon (KR). 장준기 (JANG, Jungi); 305-380 대전시 유성구 문지동 104-1 번지 LG 화학 기술연구원 내, Daejeon (KR). 홍성길 (HONG, Sung Kil); 305-380 대전시 유성

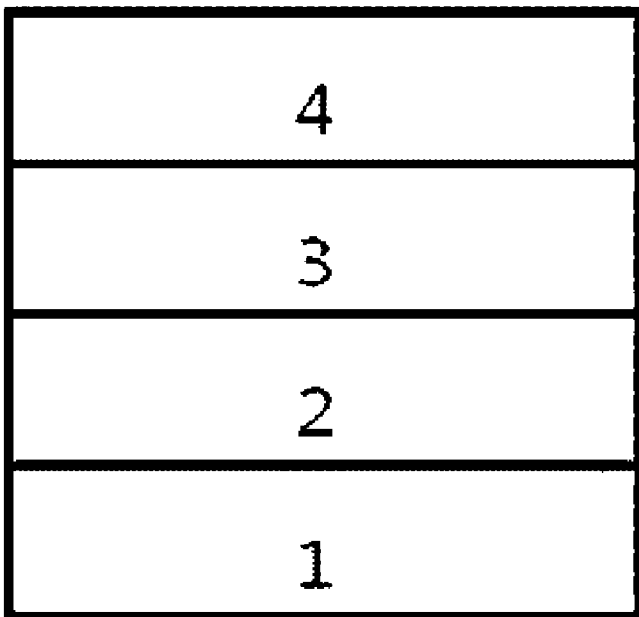
구 문지동 104-1 번지 LG 화학 기술연구원 내, Daejeon (KR). 신창환 (SHIN, Changhwan); 305-380 대전시 유성구 문지동 104-1 번지 LG 화학 기술연구원 내, Daejeon (KR). 이형진 (LEE, Hyungjin); 305-380 대전시 유성구 문지동 104-1 번지 LG 화학 기술연구원 내, Daejeon (KR).

- (74) 대리인: 정순성 (CHUNG, Soon-Sung); 135-911 서울시 강남구 테헤란로 19길 5, 삼보빌딩 6층, Seoul (KR).
- (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, 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, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
- (84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR),

[다음 쪽 계속]

(54) Title: HETEROCYCLIC COMPOUND AND ORGANIC ELECTRONIC ELEMENT CONTAINING SAME

(54) 발명의 명칭 : 헤테로환 화합물 및 이를 포함하는 유기 전자 소자



(57) Abstract: The present specification provides a novel compound which can significantly lengthen the life span and improve efficacy, electrochemical stability, and thermal stability of an organic heterocyclic element, and an organic heterocyclic element containing the compound in an organic compound layer thereof.

(57) 요약서: 본 명세서는 유기 전자 소자의 수명, 효율, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성을 크게 향상시킬 수 있는 신규 화합물 및 상기 화합물이 유기 화합물 층에 함유되어 있는 유기 전자 소자를 제공한다.

WO 2014/010823 A1

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))

명세서

발명의 명칭: 헤테로환 화합물 및 이를 포함하는 유기 전자 소자 기술분야

[1] 본 명세서는 새로운 헤테로환 화합물 및 이를 포함하는 유기 전자 소자에 관한 것이다.

[2] 본 명세서는 2012년 7월 13일에 한국 특허청에 제출된 한국 특허 출원 제 10-2012-0076493호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용은 전부 본 명세서에 포함된다.

배경기술

[3] 유기 전자 소자란 정공 및/또는 전자를 이용한 전극과 유기물 사이에서의 전하 교류를 필요로 하는 소자를 의미한다. 유기 전자 소자는 동작 원리에 따라 하기와 같이 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 첫째는 외부의 광원으로부터 소자로 유입된 광자에 의하여 유기물층에서 엑시톤(exiton)이 형성되고 이 엑시톤이 전자와 정공으로 분리되고, 이 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되어 전류원(전압원)으로 사용되는 형태의 전기소자이다. 둘째는 2개 이상의 전극에 전압 또는 전류를 가하여 전극과 계면을 이루는 유기물 반도체에 정공 및/또는 전자를 주입하고, 주입된 전자와 정공에 의하여 동작하는 형태의 전자소자이다.

[4] 유기 전자 소자의 예로는 유기 발광 소자, 유기 태양전지, 유기 트랜지스터 등이 있으며, 이들은 모두 소자의 구동을 위하여 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질을 필요로 한다. 이하에서는 주로 유기발광소자에 대하여 구체적으로 설명하지만, 상기 유기 전자 소자들에서는 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질이 유사한 원리로 작용한다.

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

[6] 상기와 같은 유기 발광 소자를 위한 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있으며, 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기 전자 소자에서도 마찬가지이다.

- [7] [선행기술문헌]
 [8] [특허문헌]
 [9] 국제 특허 출원 공개 제 2003/012890호

발명의 상세한 설명

기술적 과제

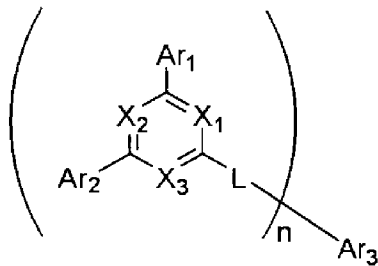
- [10] 이에 본 발명자들은 상기와 같은 이유로 치환기에 따라 유기 전자 소자에서 요구되는 다양한 역할을 할 수 있는 화학 구조를 갖는 헤테로환 화합물 및 이를 포함하는 유기 전자 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

- [11] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

- [12] [화학식 1]

- [13]



- [14] 상기 화학식 1에 있어서,

- [15] n은 2 이고,

- [16] X₁ 내지 X₃은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 3가의 헤테로 원자 또는 CH이고, X₁ 내지 X₃ 중 적어도 하나는 3가의 헤테로 원자이며,

- [17] Ar₁ 및 Ar₂는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 헤테로고리기이고,

- [18] L은 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 치환 또는 비치환된 알케닐렌기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기; 또는 이종 원소로 O, N, S 또는 P를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

- [19] Ar₃는 치환 또는 비치환된 1,3-페닐기, 치환 또는 비치환된 1,2-페닐기, 치환 또는 비치환된 9,10-페난트릴기, 치환 또는 비치환된 2,7-페난트릴기, 치환 또는 비치환된 1,8-페난트릴기, 치환 또는 비치환된 3,6-디벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 3,6-디벤조퓨란기, 치환 또는 비치환된 1,8-디벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 1,8-디벤조퓨란기, 치환 또는 비치환된 테트라세닐기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐기, 치환 또는 비치환된 플루오란텐기, 치환 또는 비치환된 잔텐기(Xanthene) 및 치환 또는 비치환된 아세나프틸기로 이루어진 군에서 선택된다.

- [20] 또한, 본 명세서는 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전자 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1의 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전자 소자를

제공한다.

발명의 효과

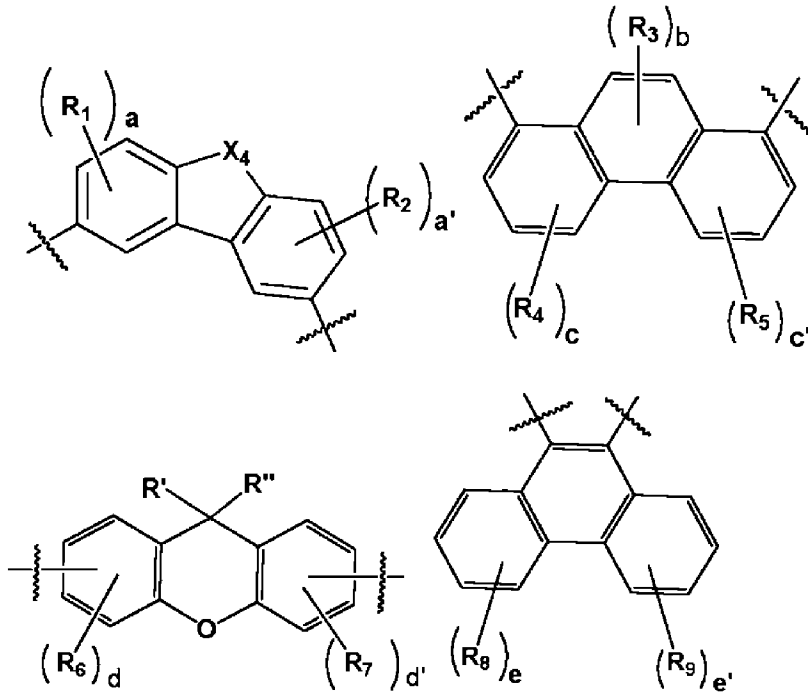
- [21] 본 명세서에 따른 새로운 화합물은 유기 발광 소자를 비롯한 유기 전자 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있고, 이를 사용함으로써 유기 발광 소자를 비롯한 유기 전자 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동전압 및/또는 수명 특성의 향상이 가능하다.

도면의 간단한 설명

- [22] 도 1은 기판(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.
- [23] 도 2는 기판 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자수송층(8) 및 음극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.


발명의 실시를 위한 최선의 형태


- [24] 본 명세서는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.
- [25] 본 명세서에 있어서, 상기 3가기의 헤테로원자는 N 또는 P 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [26] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 3가기의 헤테로원자는 N이다.
- [27] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X_1 내지 X_3 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 CH이고, X_1 내지 X_3 중 적어도 하나는 N이다.
- [28] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 n은 2이다.
- [29] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, n이 2인 경우, X_1 내지 X_3 , Ar_1 내지 Ar_3 및 L은 같거나 상이할 수 있다.
- [30] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 n은 2이고, 상기 Ar_3 는 하기 구조에서 선택된다.
- [31]



- [32] 상기 구조에 있어서,
 [33] a, a', c, c', d 및 d'는 각각 1 내지 3의 정수이고,
 [34] b는 1 내지 2의 정수이며,
 [35] e 및 e'는 각각 1 내지 4의 정수이고,
 [36] X₄는 S 또는 O이며,
 [37] R₁ 내지 R₉는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 카바졸기; 또는 N, O, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
 [38] R' 및 R''는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환

또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 카바졸기; 및 N, O, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되거나, 지방족, 방향족, 지방족의 헤테로고리 또는 방향족의 헤테로고리로 축합고리를 형성하거나 스피로 결합을 형성할 수 있다.

[39] 본 명세서에 있어서, 는 다른 치환기에 연결되는 부위를 의미한다. 하나의

실시상태에 있어서, 는 화학식 1의 L과 연결될 수 있다.

[40] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar₁ 및 Ar₂는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 비페닐기; 또는 치환 또는 비치환된 피리딘기이다.

[41] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 L은 치환 또는 비치환된 페닐렌기이다.

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

[43] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 50인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기 및 헵틸기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[44] 본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 50인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 스틸베닐기(stylybenyl), 스티레닐기(styrenyl)기 등의 아릴기가 치환된 알케닐기가 바람직하나 이들에 한정되지 않는다.

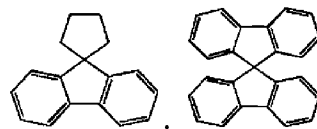
[45] 본 명세서에 있어서, 상기 알콕시기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 50인 것이 바람직하다.

[46] 화합물 중에 포함되어 있는 알킬기, 알케닐기 및 알콕시기의 길이는 화합물의 공액 길이에는 영향을 미치지 않고, 다만 부수적으로 화합물의 유기 전자 소자에의 적용 방법, 예컨대 진공 증착법 또는 용액 도포법의 적용에 영향을 미칠 뿐이므로 탄소수의 개수는 특별히 한정되지 않는다.

[47] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 특히 시클로펜틸기, 시클로헥실기가 바람직하다.

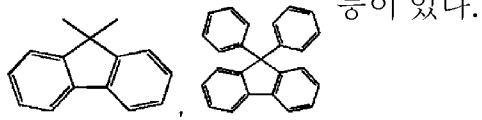
[48] 본 명세서에 있어서, 할로젠기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.

[49] 본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 2개의 고리 유기화합물이 1개의 원자를 통하여 연결된 구조로서, 예로는



등이 있다.

- [50] 본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 열린 플루오레닐기의 구조를 포함하며, 여기서 열린 플루오레닐기는 2개의 고리 화합물이 1개의 원자를 통하여 연결된 구조에서 한쪽 고리 화합물이 연결이 끊어진 상태의 구조로서, 예로는



- [51] 본 명세서에 있어서, 아민기는 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 내지 50인 것이 바람직하다. 아민기의 구체적인 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 에틸아민기, 디에틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 비페닐아민기, 안트라세닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐아민기, 페닐나프틸아민기, 디톨릴아민기, 페닐톨릴아민기, 트리페닐아민기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [52] 본 명세서에 있어서, 아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노아릴아민기, 치환 또는 비치환된 디아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리아릴아민기가 있다. 상기 아릴아민기 중의 아릴기는 단환식 아릴기일 수 있고, 다환식 아릴기일 수 있다. 상기 아릴기가 2 이상을 포함하는 아릴아민기는 단환식 아릴기, 다환식 아릴기, 또는 단환식아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다.
- [53] 아릴 아민기의 구체적인 예로는 페닐아민, 나프틸아민, 비페닐아민, 안트라세닐아민, 3-메틸-페닐아민, 4-메틸-나프틸아민, 2-메틸-비페닐아민, 9-메틸-안트라세닐아민, 디페닐 아민기, 페닐 나프틸 아민기, 디톨릴 아민기, 페닐 톨릴 아민기, 카바졸 및 트리페닐 아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [54] 본 명세서에 있어서, 아릴옥시기, 아릴티옥시기, 아릴술폰시기 및 아랄킬아민기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 6 내지 50인 것이 바람직하다. 아릴옥시기, 아릴티옥시기, 아릴술폰시기 및 아랄킬아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다.
- [55] 본 명세서에 있어서, 알킬티옥시기, 알킬술폰시기, 알킬아민기 및 아랄킬아민기 중의 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다.
- [56] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민기 중의 헤테로 아릴기는 전술한 헤테로고리기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [57] 본 명세서에 있어서, 아릴렌기, 알케닐렌기, 플루오레닐렌기, 및 헤테로아릴렌기는 각각 아릴기, 알케닐기, 플루오레닐기, 및 헤테로아릴기의 2가지이다. 이들은 각각 2가지인 것을 제외하고는, 전술한 아릴기, 알케닐기, 플루오레닐기, 헤테로아릴기의 설명이 적용될 수 있다.
- [58] 또한, 본 명세서에서 "치환 또는 비치환"이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 알킬기; 알케닐기; 알콕시기; 시클로알킬기; 실릴기; 아릴알케닐기; 아릴기;

아릴옥시기; 알킬티옥시기; 알킬술포시기; 아릴술포시기; 붕소기; 알킬아민기; 아랄킬아민기; 아릴아민기; 헤테로아릴기; 카바졸기; 아릴아민기; 플루오레닐기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 시아노기 및 N, O, S 또는 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 헤테로 고리기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되었거나 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다.

[59] 본 명세서는 상기 화학식 1로 표시되는 새로운 헤테로환 화합물을 제공한다. 이와 같은 화합물은 구조적 특이성으로 인하여 유기 전자 소자에서 유기물층으로 사용될 수 있다.

[60] 하나의 실시상태에 있어서, Ar₃는 치환 또는 비치환된 9,10-페난트릴기; 치환 또는 비치환된 1,8-페난트릴기; 치환 또는 비치환된 1,8-잔텐기; 치환 또는 비치환된 3,6-디벤조티오펜기; 또는 치환 또는 비치환된 3,6-디벤조퓨란기이다.

[61] 또 하나의 실시상태에 있어서, Ar₃는 3,6-디벤조티오펜기이다.

[62] 본 명세서에 있어서, Ar₃가 3,6-디벤조티오펜기인 경우, 전자 주개의 효과가 우수하여, 발광층에 전자 주입 및 전달의 효율을 높일 수 있다. 이로 인하여, 전압 및 효율 면에서 더 우수한 특성을 가질 수 있다.

[63] 또 하나의 실시상태에 있어서, Ar₃는 3,6-디벤조퓨란기이다.

[64] 본 명세서에 있어서, Ar₃가 3,6-디벤조퓨란기인 경우, 전자 주개의 효과가 우수하여, 발광층에 전자 주입 및 전달의 효율을 높일 수 있다. 이로 인하여, 전압 및 효율 면에서 더 우수한 특성을 가질 수 있다.

[65] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar₃는 9,10-페난트릴기이다.

[66] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar₃는 1,8-페난트릴기이다.

[67] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar₃는 1,8-잔텐기이다.

[68] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar₃는 페닐기로 치환된 3,6-디벤조티오펜기이다.

[69] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar₃는 아릴기로 치환된 3,6-디벤조티오펜기이다.

[70] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar₃는 아릴기로 치환된 3,6-디벤조퓨란기이다.

[71] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar₃는 페닐기로 치환된 3,6-디벤조퓨란기이다.

[72] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar₃는 아릴기로 치환된 9,10-페난트릴기이다.

[73] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar₃는 페닐기로 치환된 9,10-페난트릴기이다.

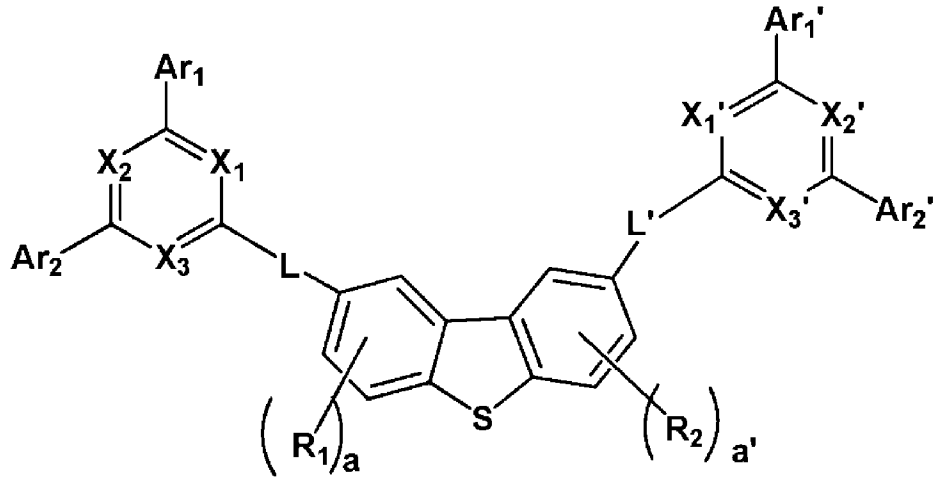
[74] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar₃는 아릴기로 치환된 1,8-페난트릴기이다.

[75] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar₃는 페닐기로 치환된 1,8-페난트릴기이다.

- [76] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar₃는 아릴기로 치환된 1,8-잔텐기이다.
 [77] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar₃는 페닐기로 치환된 1,8-잔텐기이다.
 [78] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 1-a, 1-b, 1-c, 1-d, 1-e 및 1-f 중 어느 하나로 표시된다.

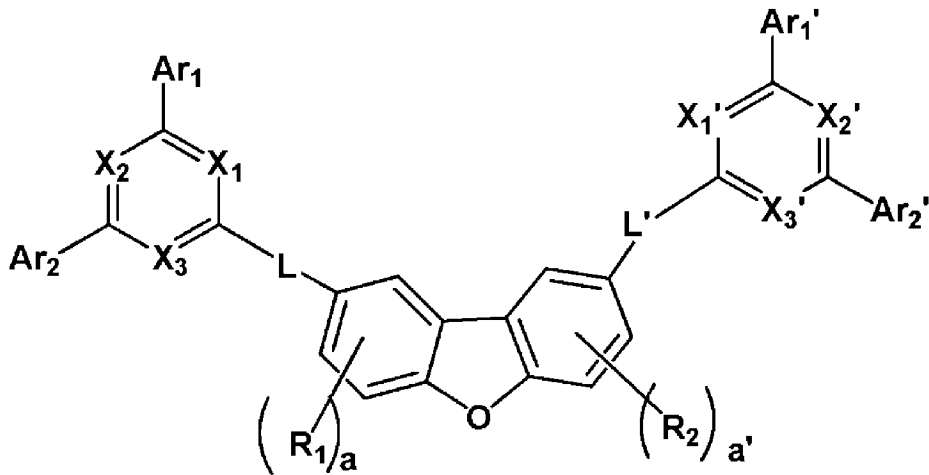
[79] [화학식 1-a]

[80]



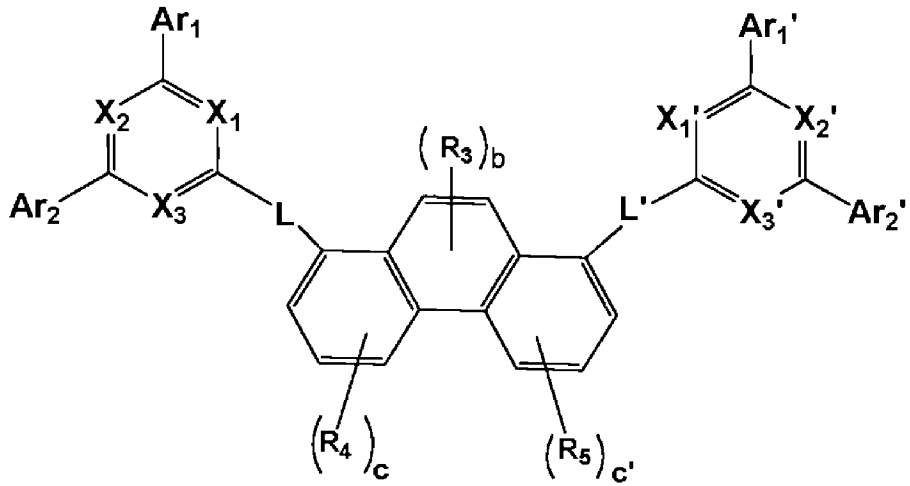
[81] [화학식 1-b]

[82]



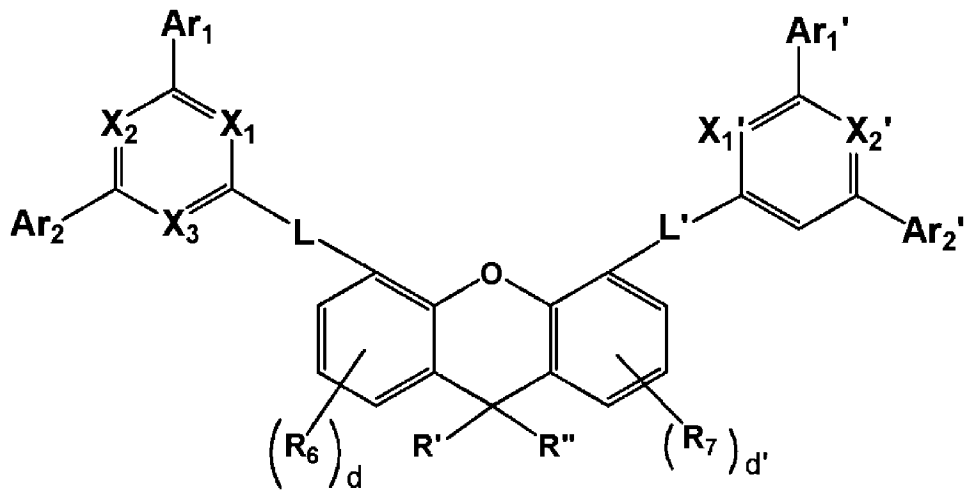
[83] [화학식 1-c]

[84]



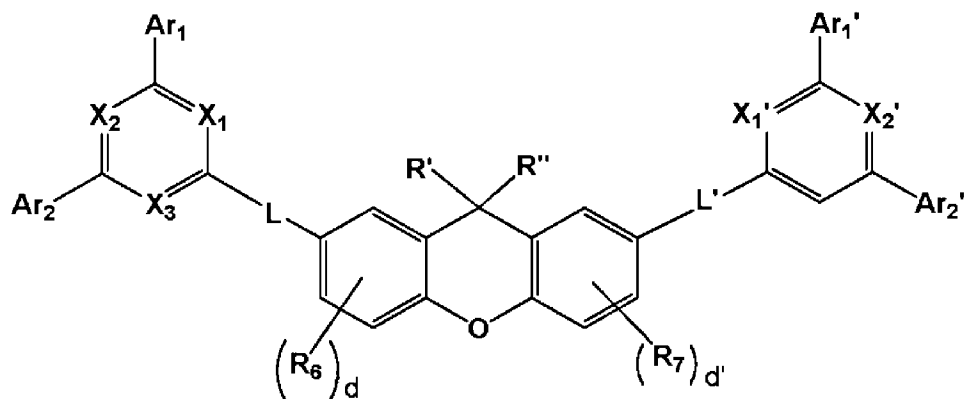
[85]

[86]



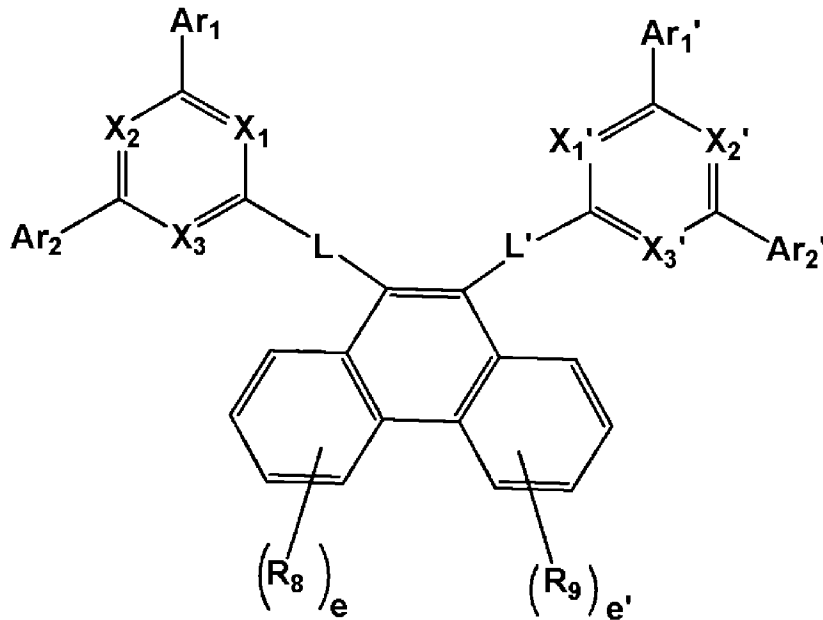
[87]

[88]



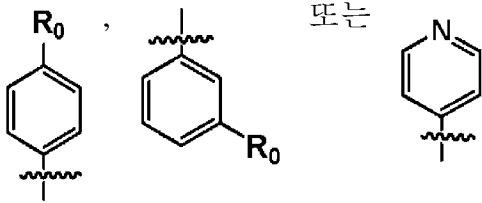
[89]

[90]



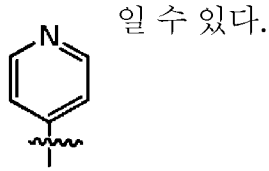
- [91] 화학식 1-a, 1-b, 1-c, 1-d, 1-e 및 1-f 에 있어서,
 [92] Ar₁, Ar₂, L 및 X₁ 내지 X₃는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하고,
 [93] Ar₁', Ar₂', L' 및 X₁' 내지 X₃'는 각각 Ar₁, Ar₂, L 및 X₁ 내지 X₃과 동일하하고, Ar₁, Ar₂, L 및 X₁ 내지 X₃의 정의와 동일하며,
 [94] R₁ 내지 R₇, R', R'', a, a', b, c, c', d, d', e 및 e'는 상기에서 정의한 바와 동일하다.
 [95] 하나의 실시상태에 있어서, 화학식 1 중 X₁ 내지 X₃ 중 적어도 어느 하나는 3가기의 헤테로원자일 수 있다.
 [96] 구체적으로, X₁ 내지 X₃ 중 적어도 어느 하나는 N 또는 P일 수 있다.
 [97] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, X₁ 내지 X₃는 모두 N일 수 있다.
 [98] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, X₁은 N이고, X₂ 및 X₃는 CH일 수 있다.
 [99] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, X₂는 N이고, X₁ 및 X₃는 CH일 수 있다.
 [100] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, X₃는 N이고, X₁ 및 X₂는 CH일 수 있다.
 [101] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, X₁ 및 X₂는 N일 수 있다. 이 경우, X₃는 CH이다.
 [102] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, X₁ 및 X₃는 N일 수 있다. 이 경우, X₂는 CH이다.
 [103] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, X₂ 및 X₃는 N일 수 있다. 이 경우, X₁은 CH이다.
 [104] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 화학식 1 중 n이 2인 경우, Ar₃와 연결된 구조는 동일하거나 상이할 수 있다.
 [105] 또 하나의 실시상태에 있어서, 화학식 1 중 Ar₁ 및 Ar₂는 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 헤테로아릴기일 수 있다.
 [106] 구체적으로 Ar₁ 및 Ar₂는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된

피리딜기, 치환 또는 비치환된 나프틸기일 수 있다.

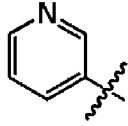
- [107] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환된 페닐기, 알콕시기로 치환된 페닐기, 할로젠으로 치환된 페닐기, 트리플루오르기로 치환된 페닐기일 수 있다.
- [108] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환된 비페닐기, 알콕시기로 치환된 비페닐기, 할로젠으로 치환된 비페닐기, 트리플루오르기로 치환된 비페닐기일 수 있다.
- [109] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환된 피리딜기, 알콕시기로 치환된 피리딜기, 할로젠으로 치환된 피리딜기, 트리플루오르기로 치환된 피리딜기일 수 있다.
- [110] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환된 페닐기, 알콕시기로 치환된 나프틸기, 할로젠으로 치환된 나프틸기, 트리플루오르기로 치환된 나프틸기일 수 있다.
- [111] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 메틸기로 치환된 페닐기, 메톡시기로 치환된 페닐기, 플루오르기로 치환된 페닐기, 트리플루오르기로 치환된 페닐기일 수 있다.
- [112] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로  일 수 있다. 이 경우, R_0 는

알킬기, 알콕시기, 할로젠기 및 트리플루오르기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

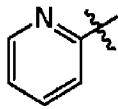
- [113] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 메틸기로 치환된 비페닐기, 메톡시기로 치환된 비페닐기, 플루오르기로 치환된 비페닐기, 트리플루오르기로 치환된 비페닐기일 수 있다.
- [114] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 메틸기로 치환된 피리딜기, 메톡시기로 치환된 피리딜기, 플루오르기로 치환된 피리딜기, 트리플루오르기로 치환된 피리딜기일 수 있다.
- [115] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 메틸기로 치환된 나프틸기, 메톡시기로 치환된 나프틸기, 플루오르기로 치환된 나프틸기, 트리플루오르기로 치환된 나프틸기일 수 있다.
- [116] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기, 피리딜기, 나프틸기일 수 있다.
- [117] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고,



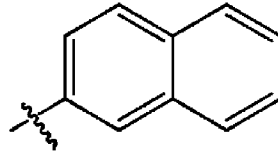
- [118] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로



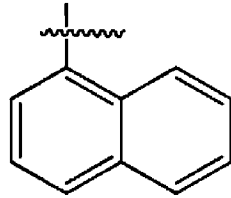
- [119] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로



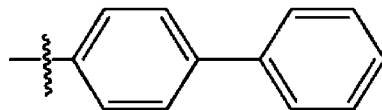
- [120] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로




- [121] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로



- [122] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로



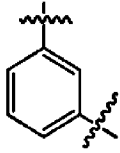
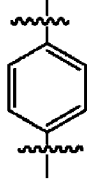
- [123] 상기 는 화학식 1의 X_1 내지 X_3 를 포함하는 화학식 헤테로환 고리와


연결되는 것을 의미한다.

- [124] 또 하나의 실시상태에 있어서, L은 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 또는 이종 원소로 O, N, S 또는 P를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기일 수 있다.

- [125] 구체적으로, L은 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리딜렌기, 치환 또는 비치환된 비페닐렌기일 수 있다.

- [126] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, L은 페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 피리딜렌기, 비페닐렌기일 수 있다.

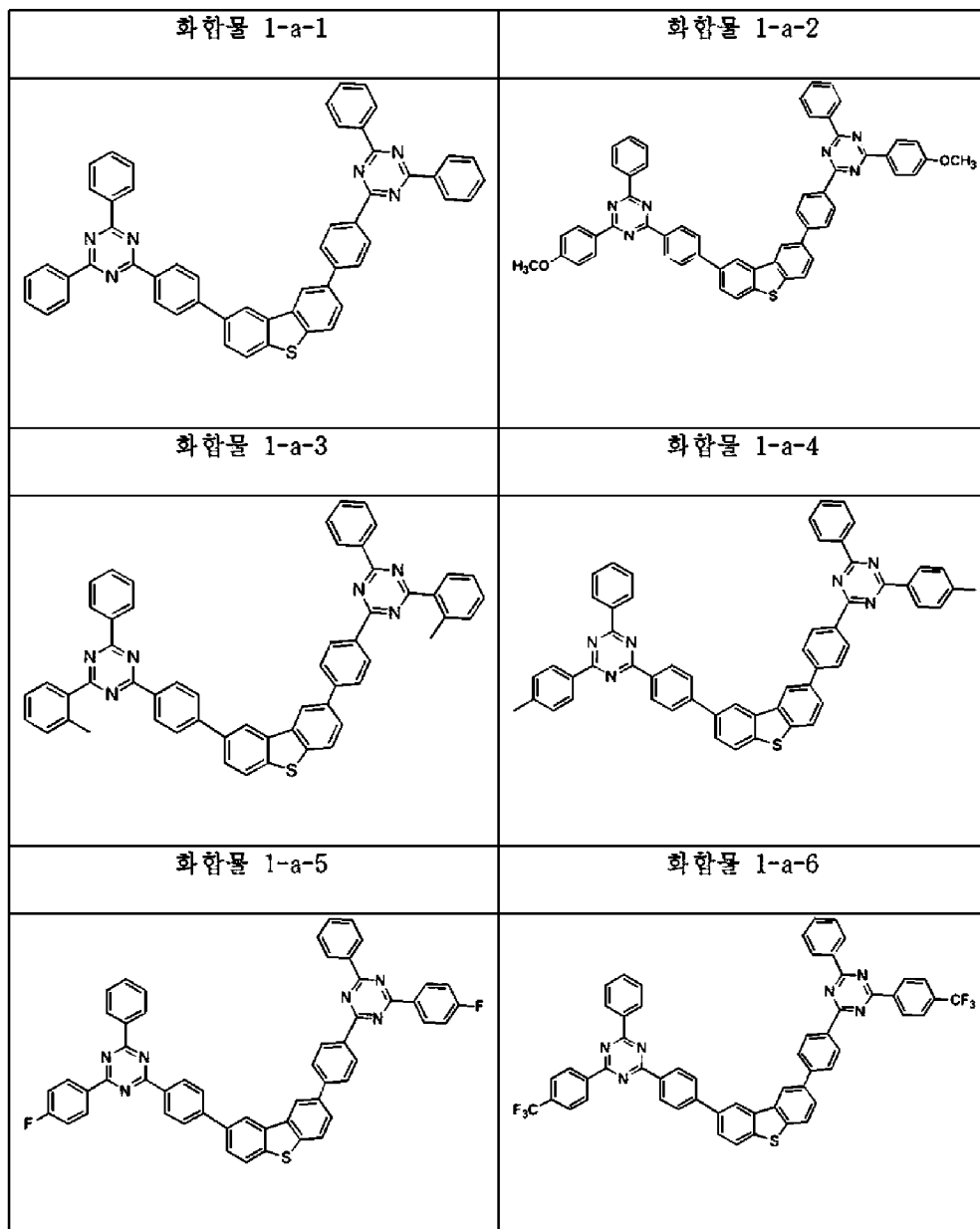
- [127] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 페닐렌기일 수 있다. 구체적으로 L은  일 수 있다. 또 하나의 예에 있어서, L은  일 수 있다. 상기

는 화학식 1 중 X_1 내지 X_3 를 포함하는 헤테로환 고리기와 연결되거나, Ar_3

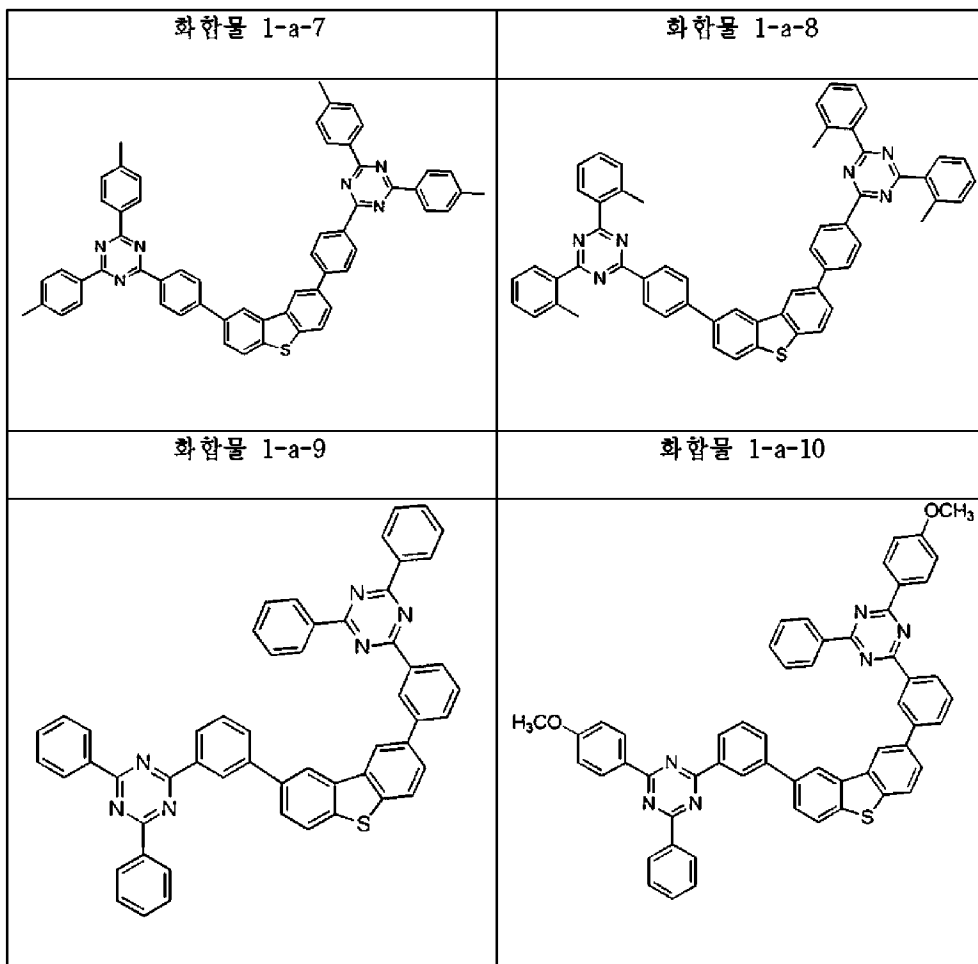
와 연결되는 것을 의미한다.

- [128] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1-a-1 내지 1-a-16, 2-a-1 내지 2-a-8, 1-b-1 내지 1-b-16, 2-b-1 내지 2-b-8, 1-c-1 내지 1-c-12, 2-c-1 내지 2-c-8, 1-d-1 내지 1-d-10, 2-d-1 내지 2-d-8, 1-e-1 내지 1-e-10, 2-e-1 내지 2-e-8, 1-f-1 내지 1-f-12 및 2-f-1 내지 2-f-8 중 어느 하나로 표시된다.
- [129] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1-a로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1-a-1 내지 1-a-16 및 2-a-1 내지 2-a-8 중 어느 하나로 표시된다.

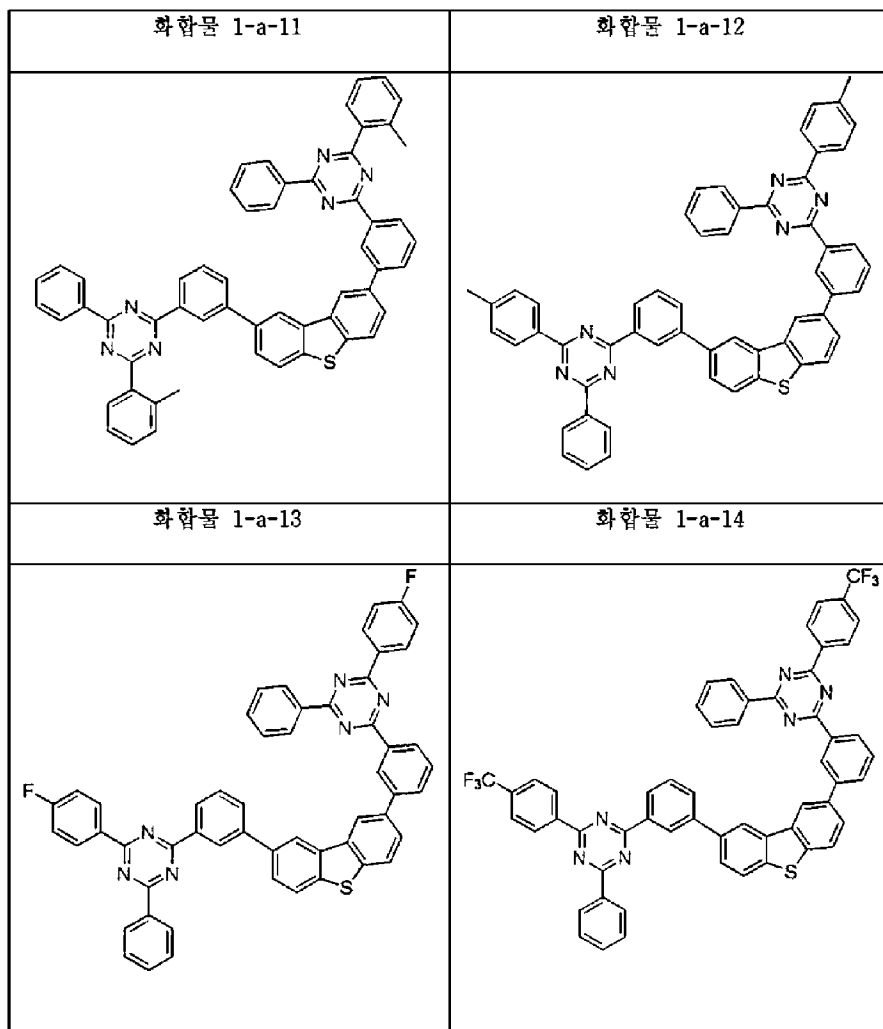
[130]



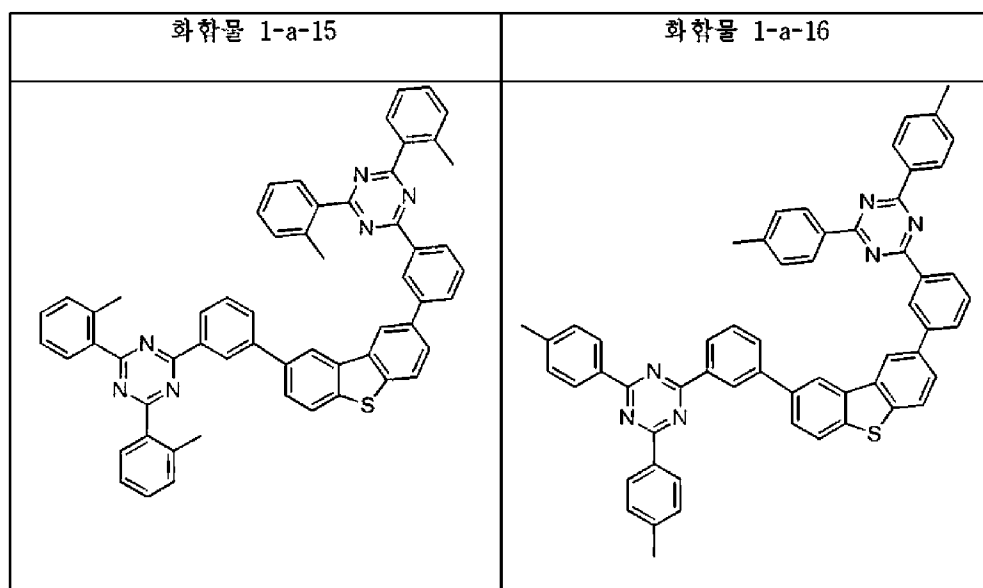
[131]



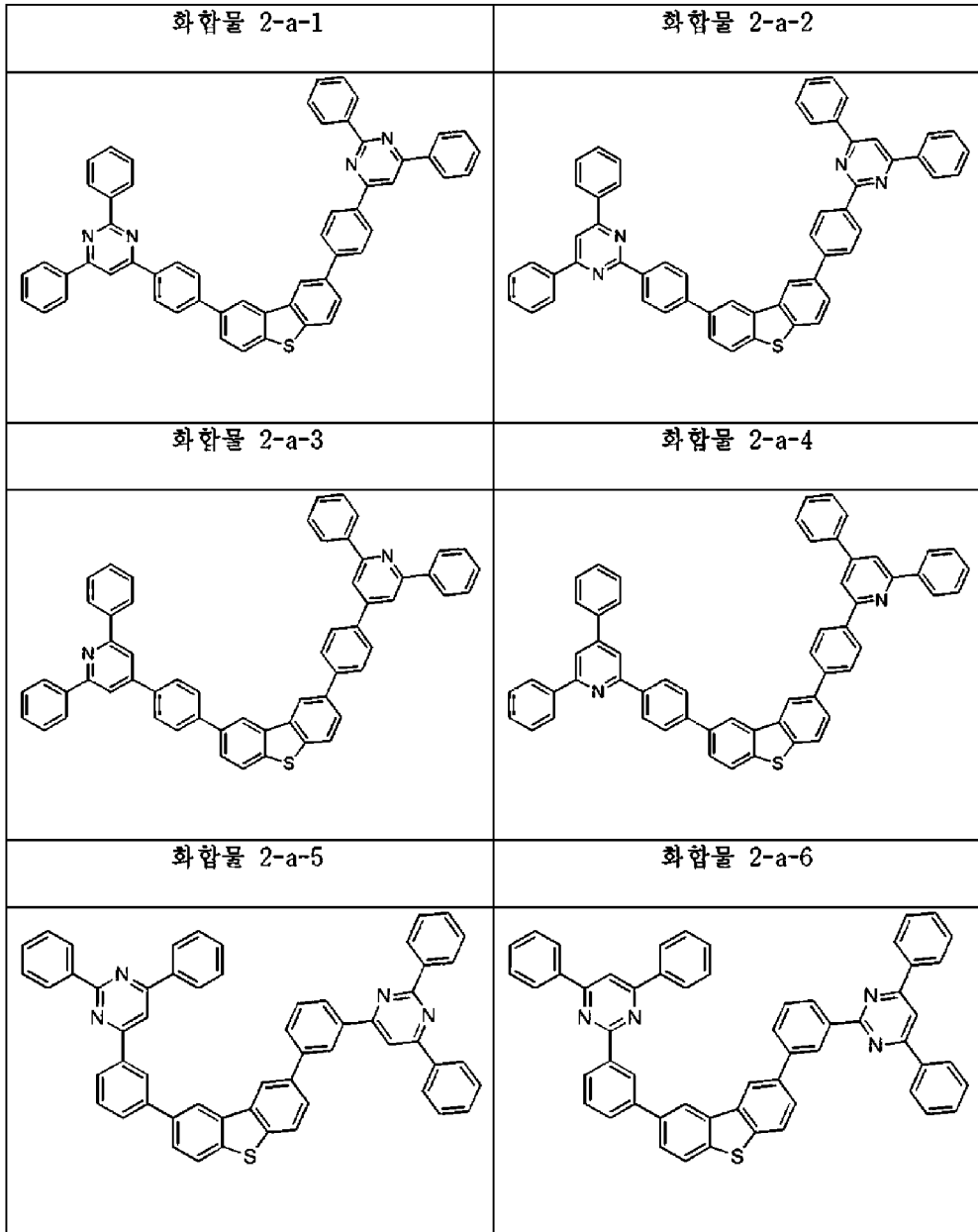
[132]



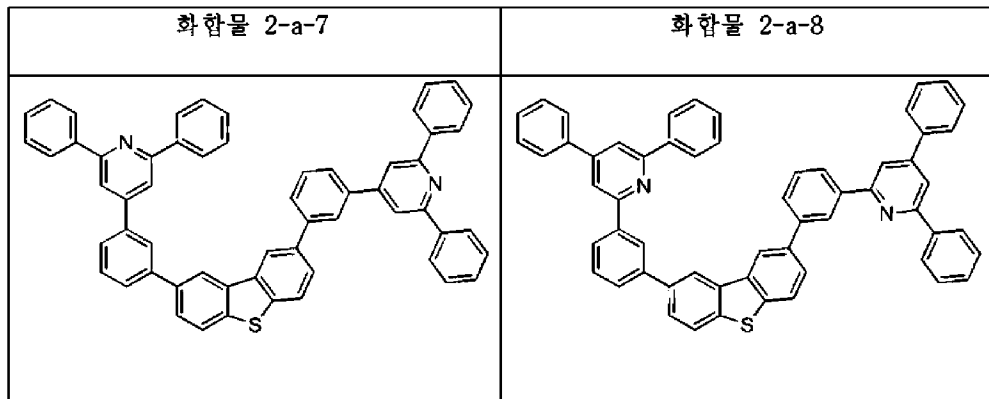
[133]



[134]

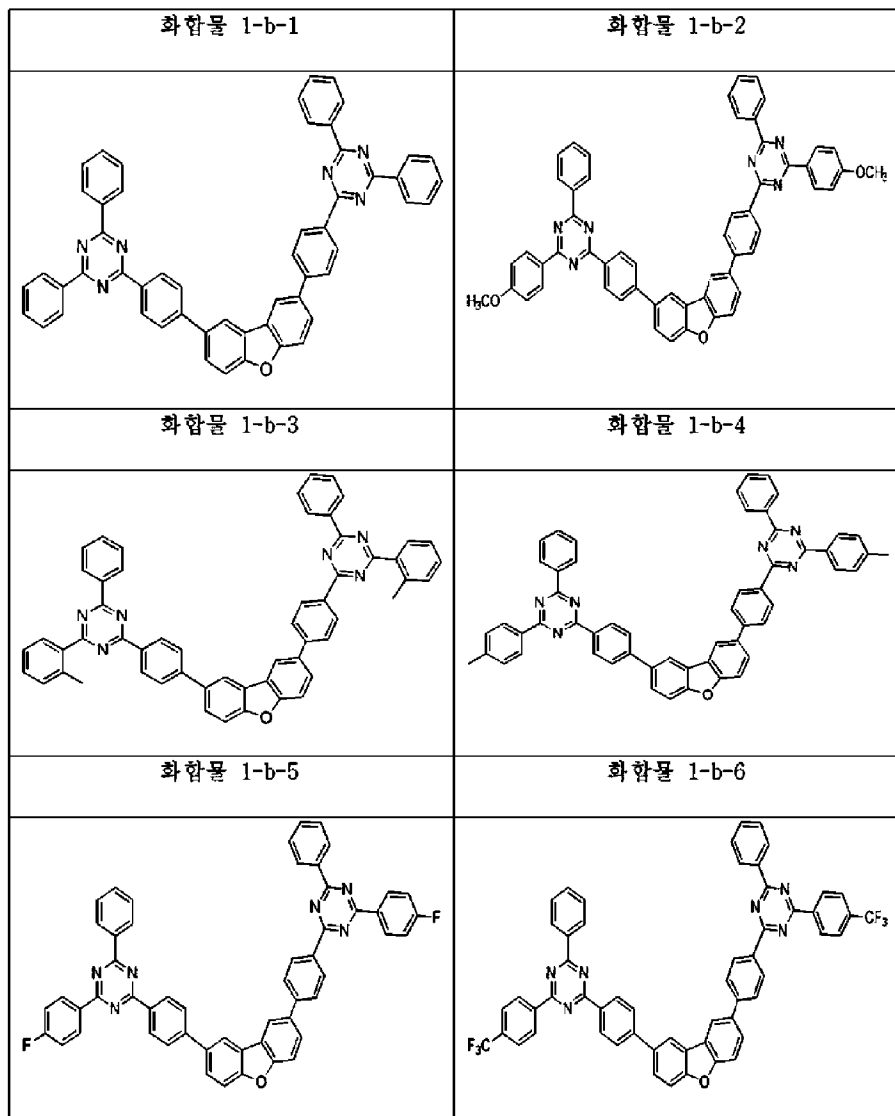


[135]

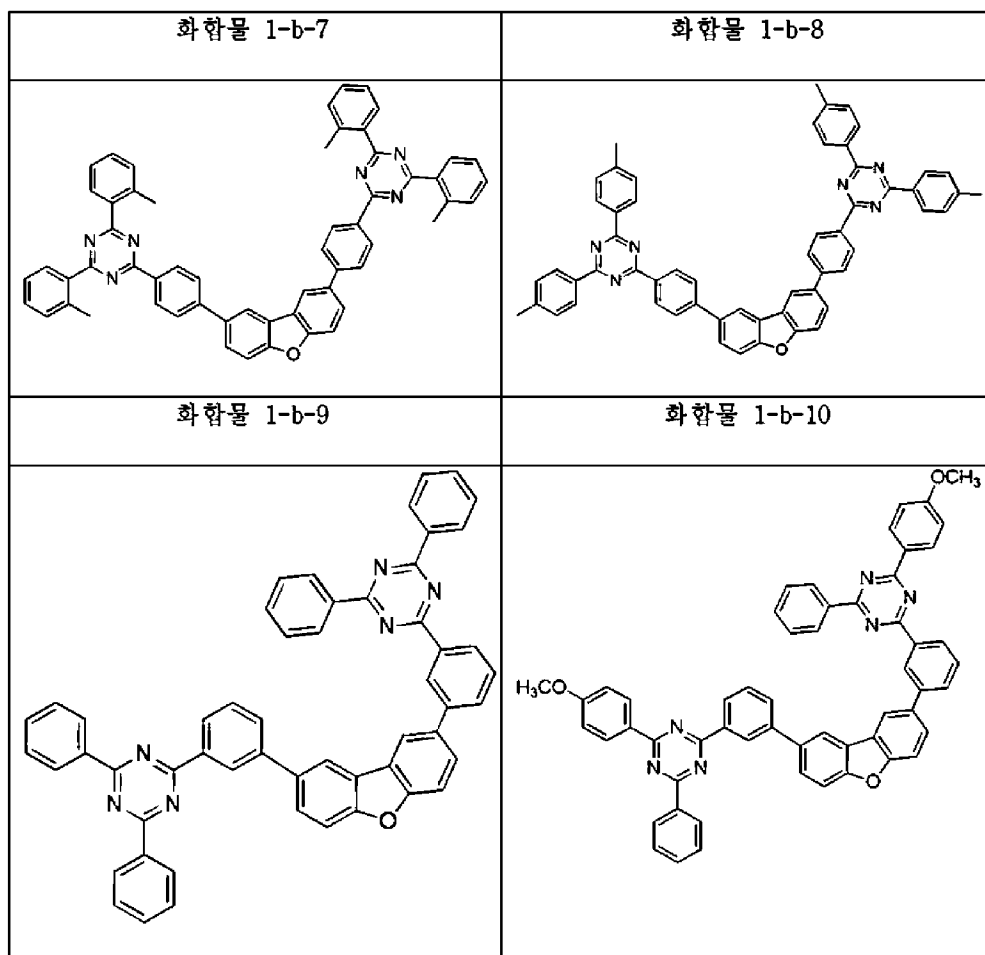


[136] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1-b로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1-b-1 내지 1-b-16 및 2-b-1 내지 2-b-8 중 어느 하나로 표시된다.

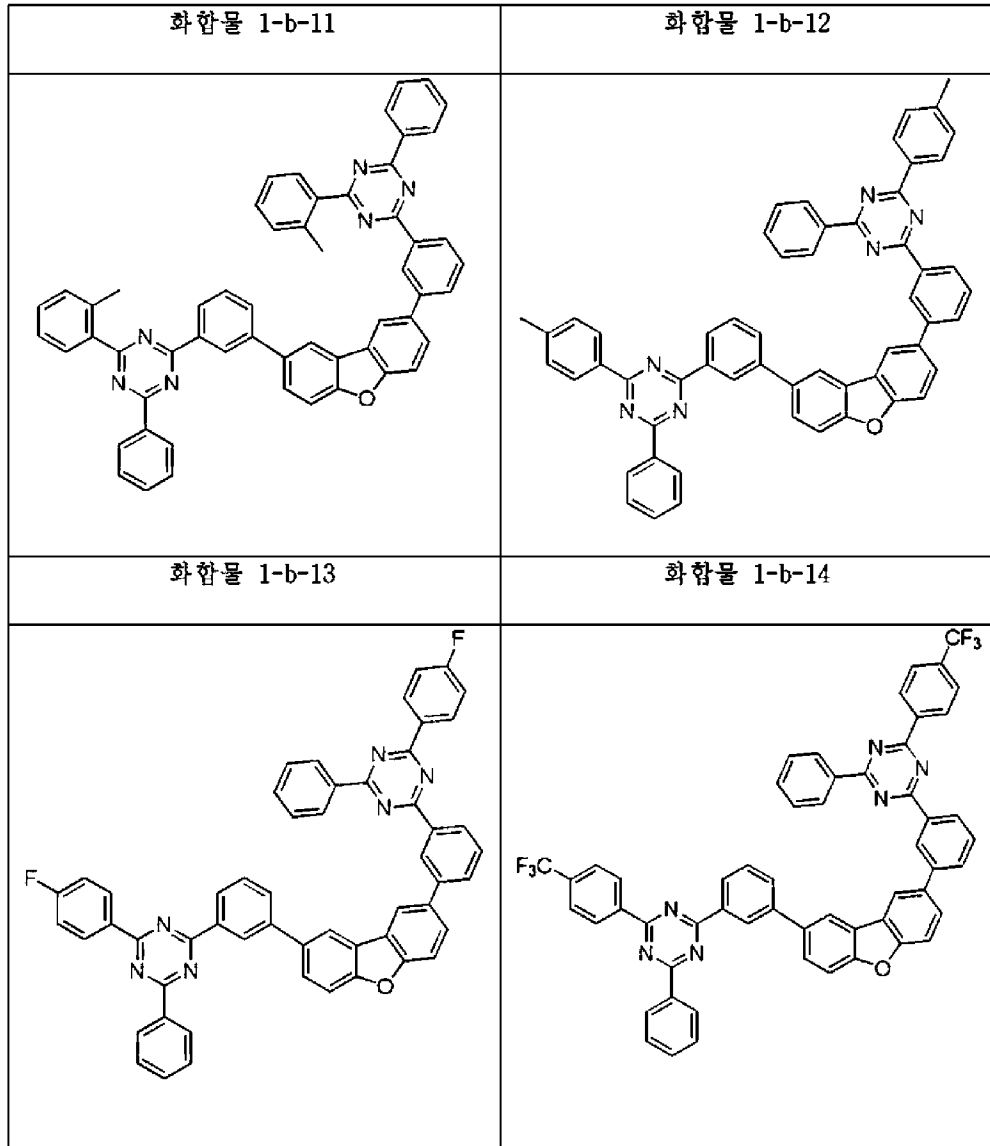
[137]



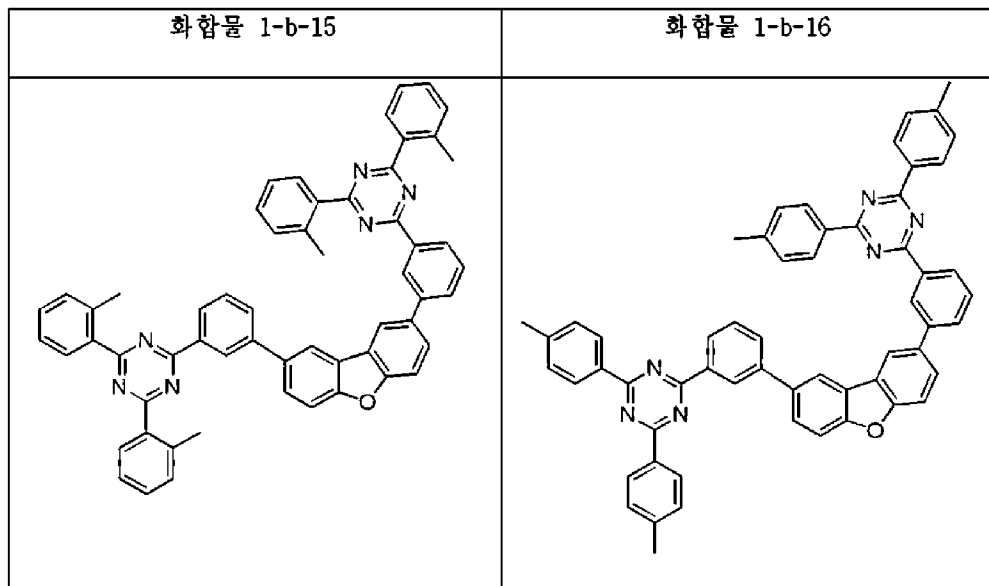
[138]



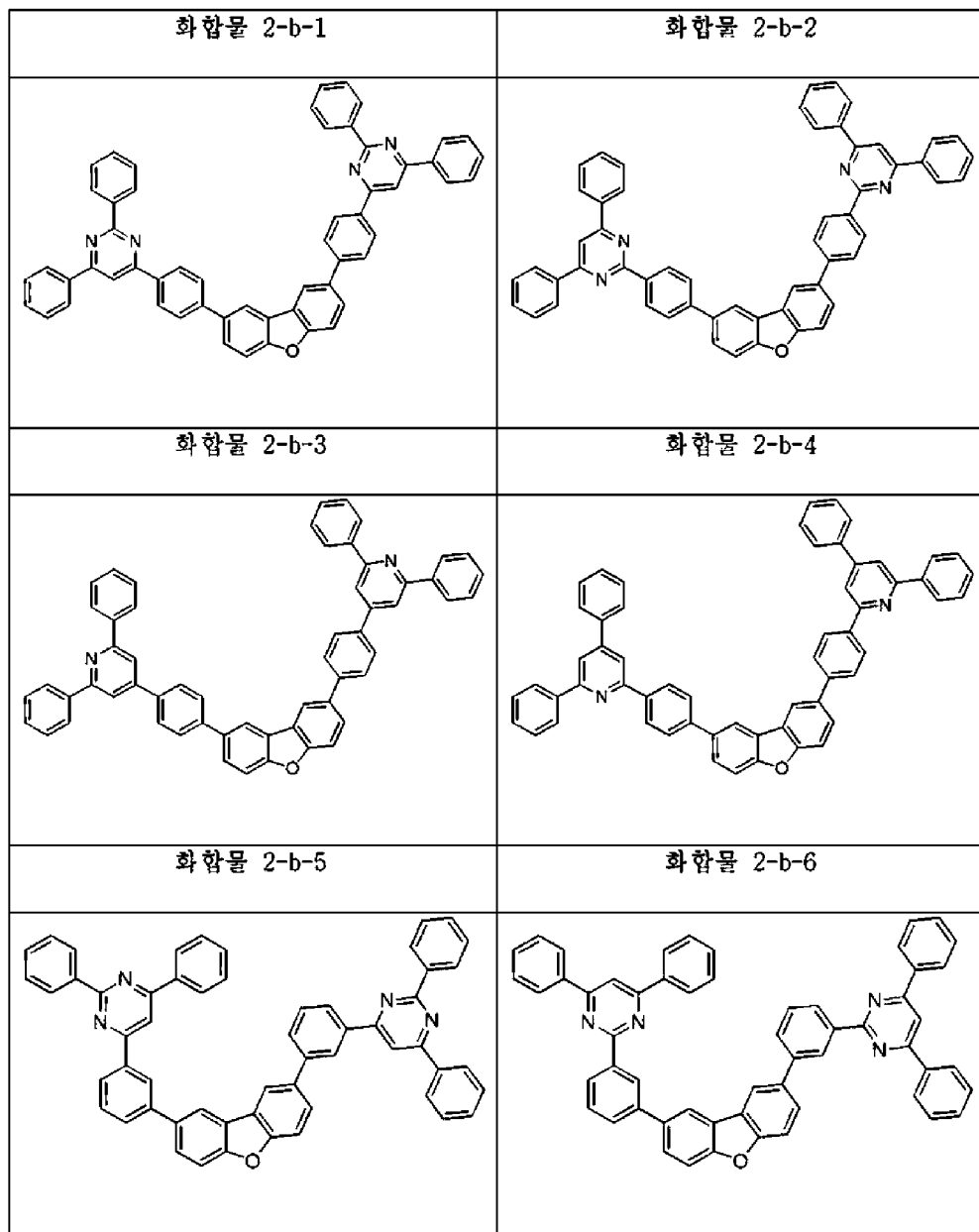
[139]



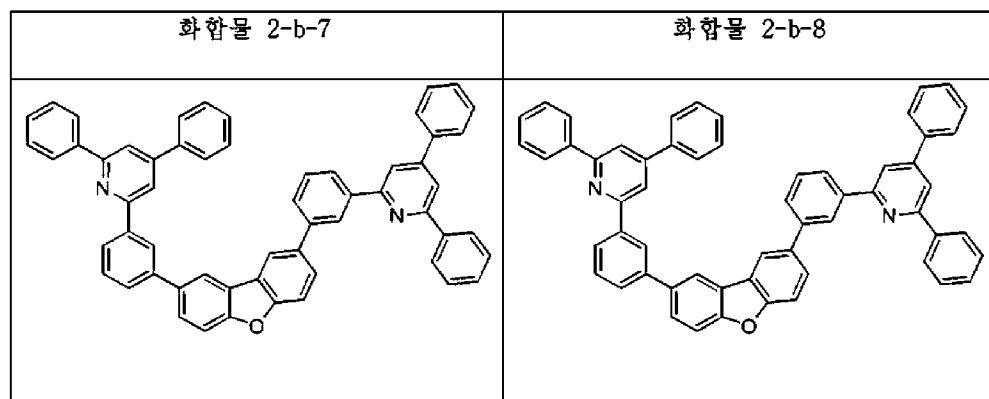
[140]



[141]



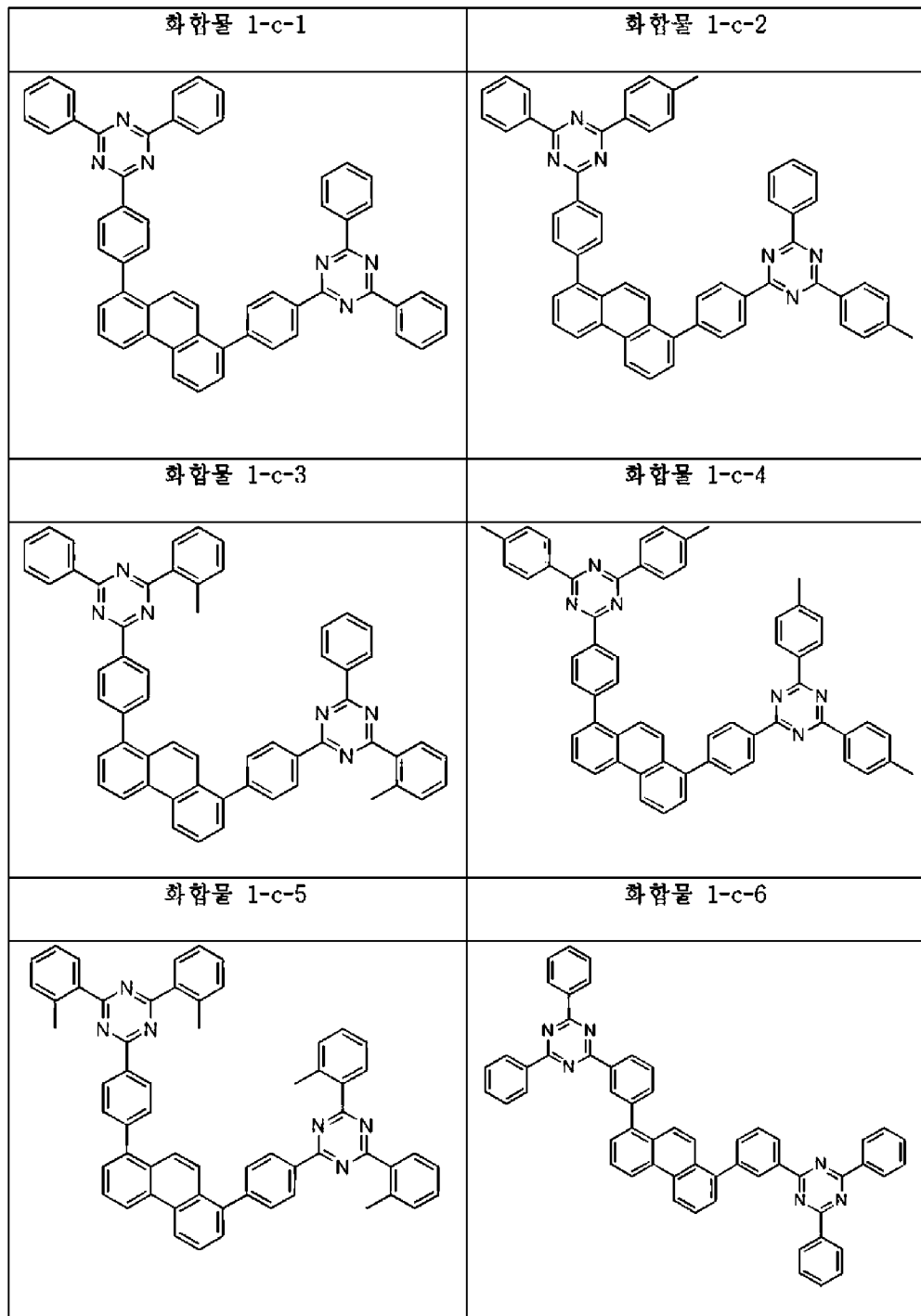
[142]



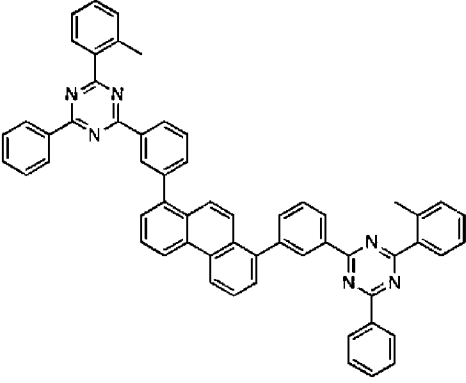
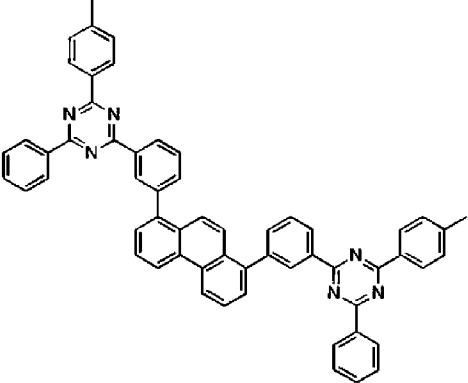
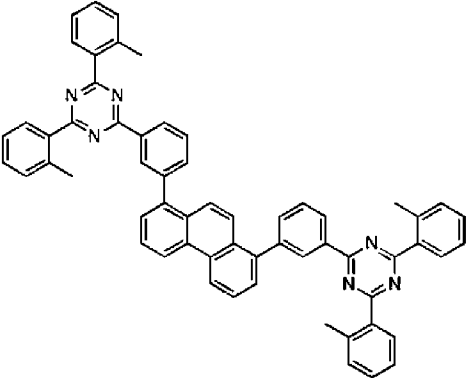
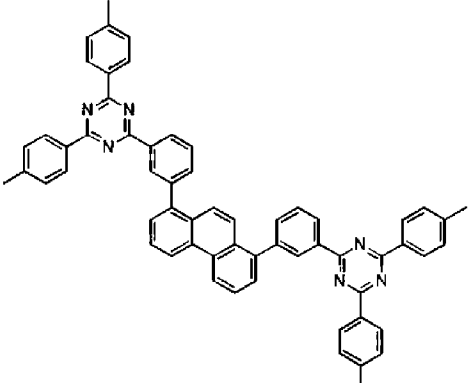
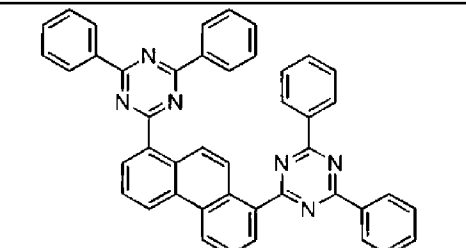
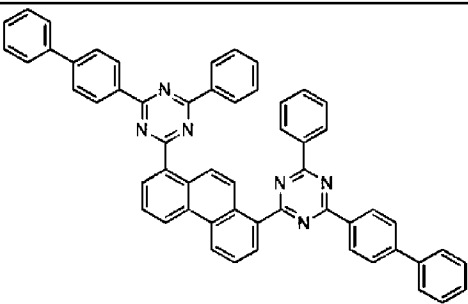
[143] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1-c로 표시되는 화합물은 하기

화합물 1-c-1 내지 1-c-12 및 2-c-1 내지 2-c-8 중 어느 하나로 표시된다.

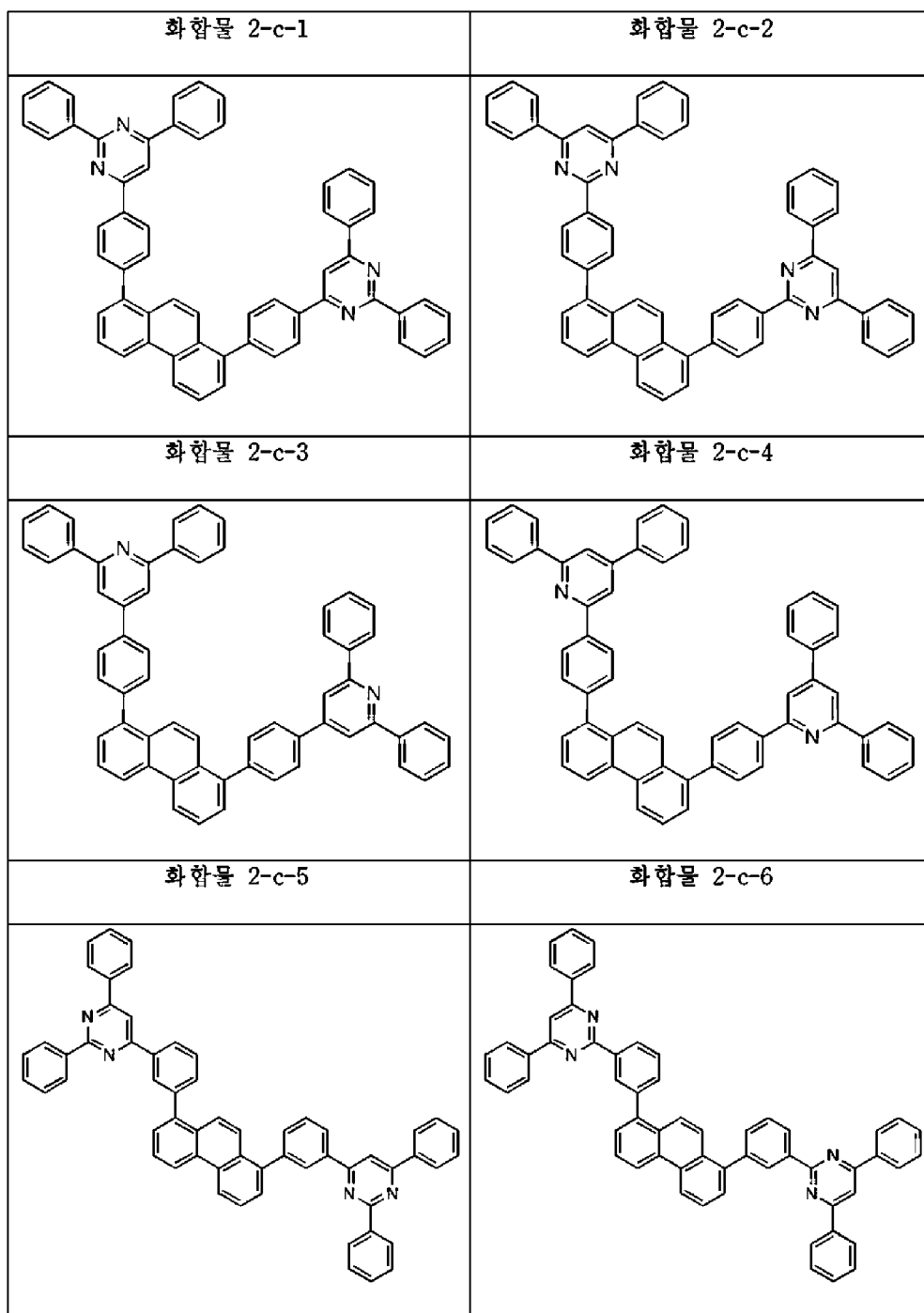
[144]



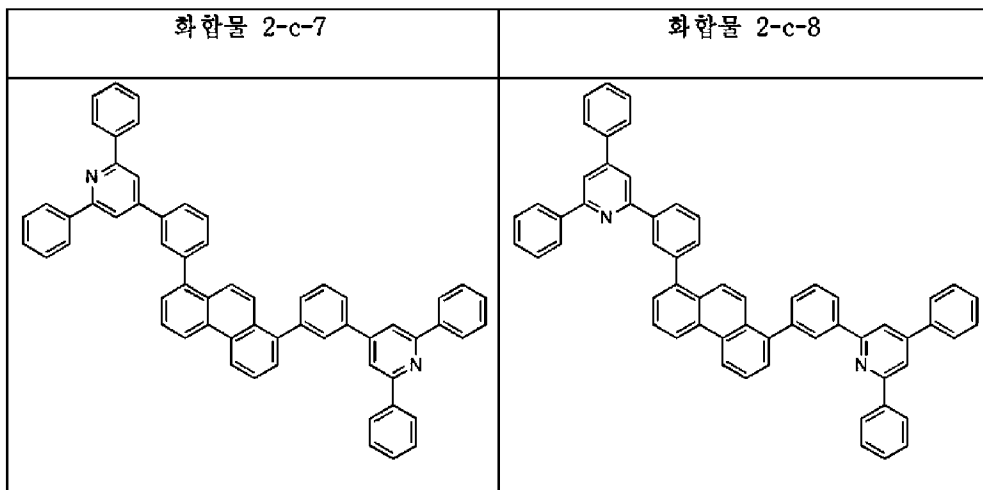
[145]

화합물 1-c-7	화합물 1-c-8
	
화합물 1-c-9	화합물 1-c-10
	
화합물 1-c-11	화합물 1-c-12
	

[146]

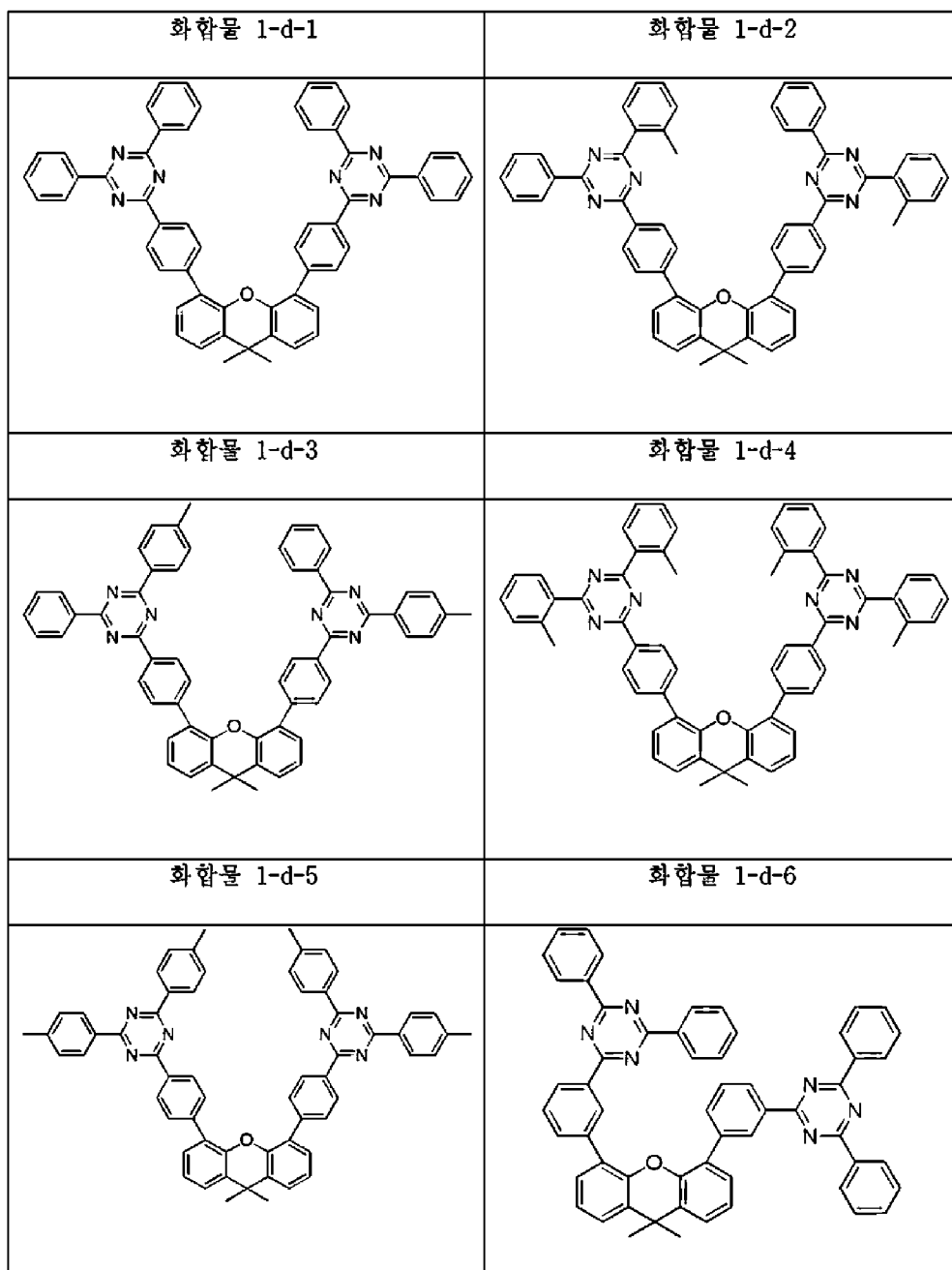


[147]

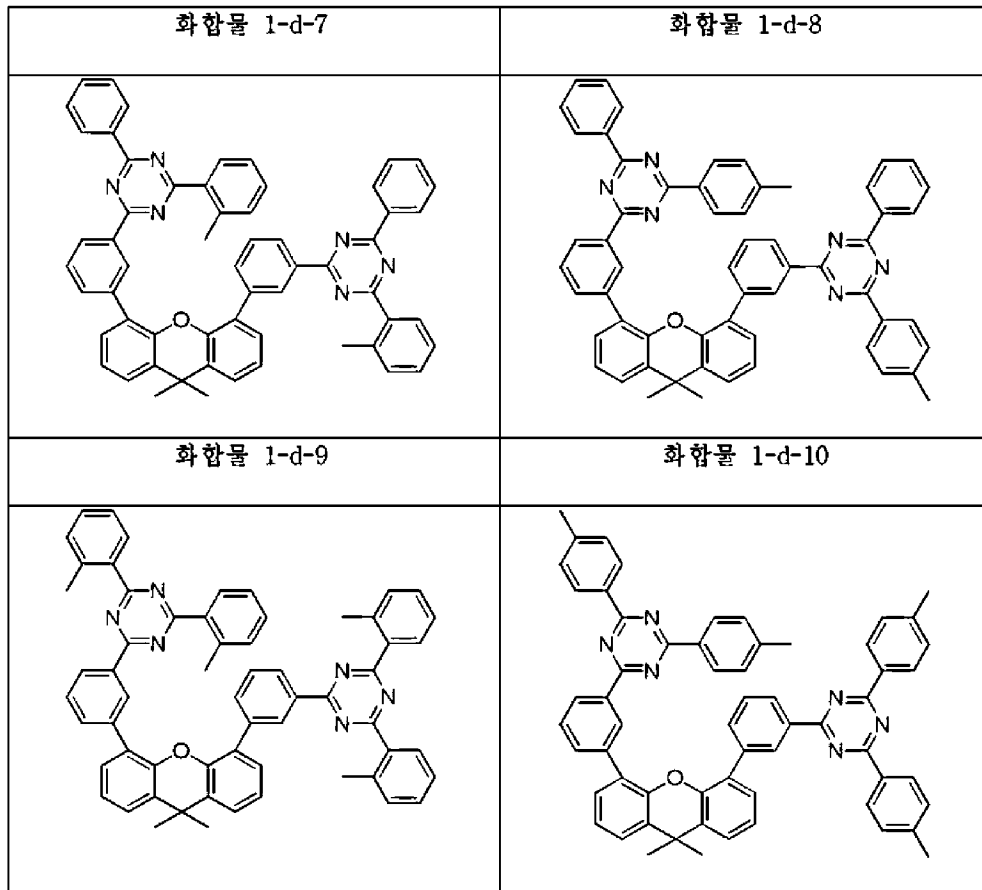


[148] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1-d로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1-d-1 내지 1-d-10 및 2-d-1 내지 2-d-8 중 어느 하나로 표시된다.

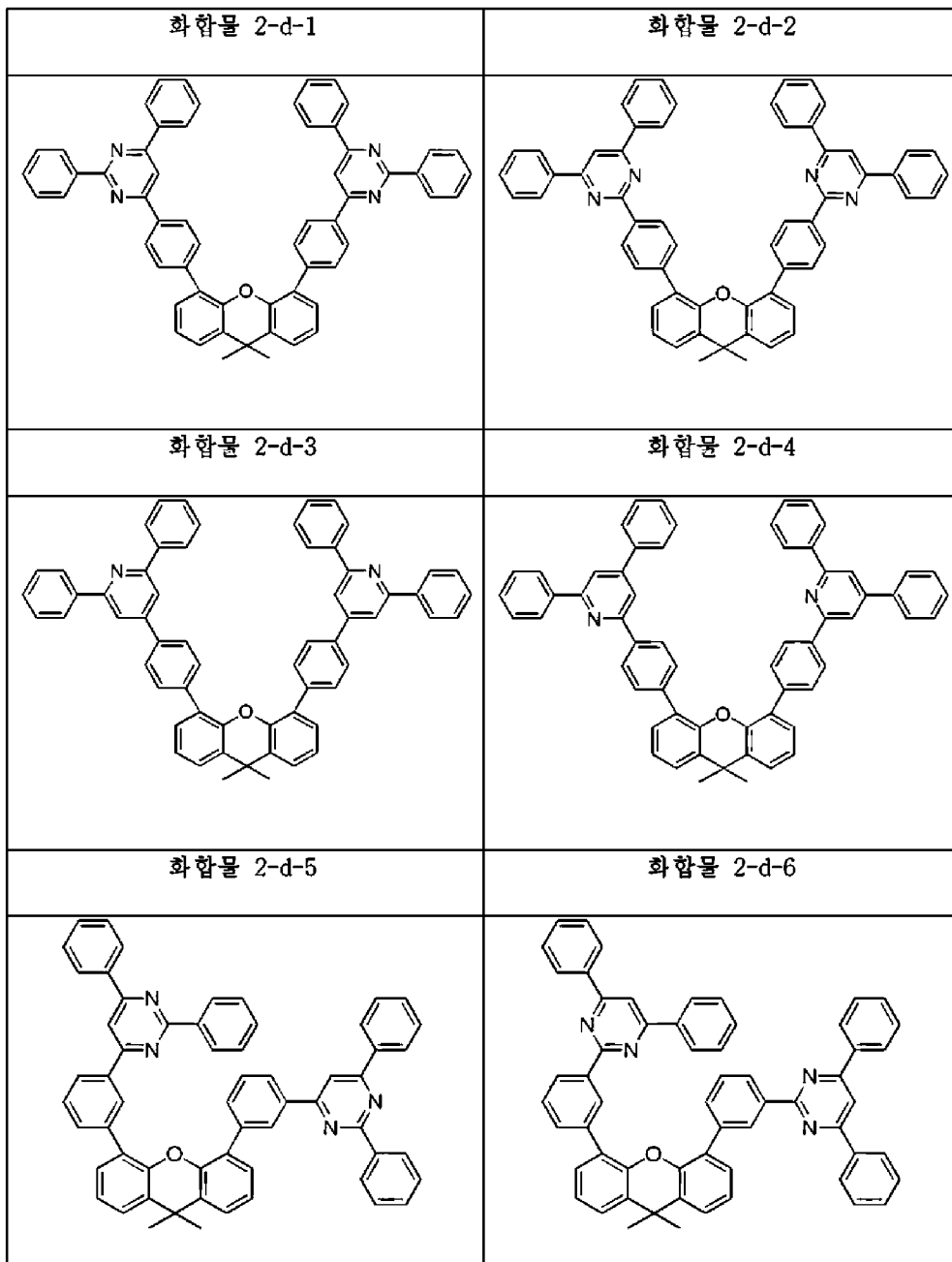
[149]



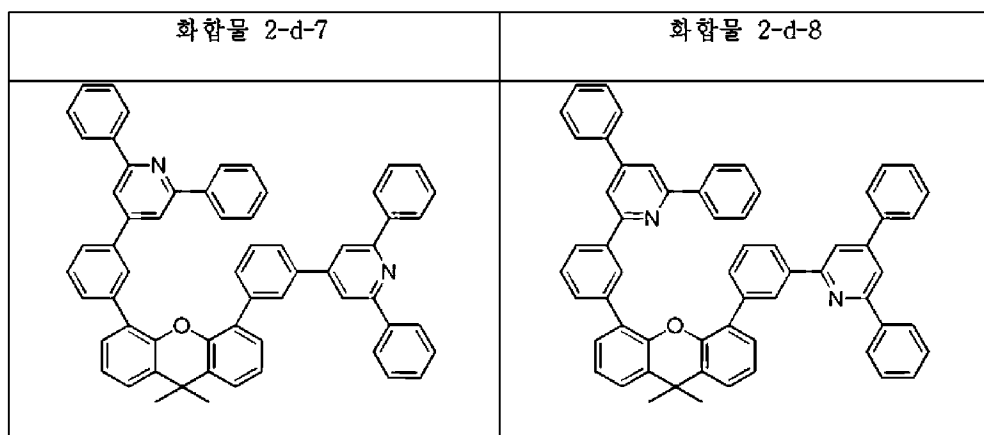
[150]



[151]



[152]

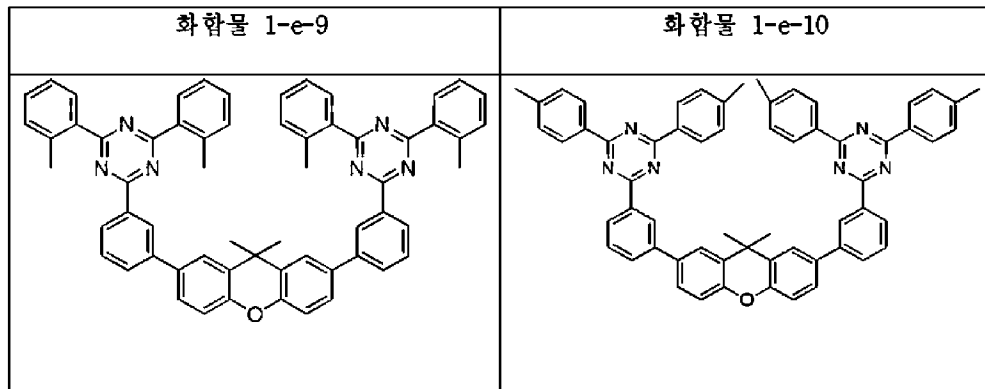


[153] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1-e로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1-e-1 내지 1-e-10 및 2-e-1 내지 2-e-8 중 어느 하나로 표시된다.

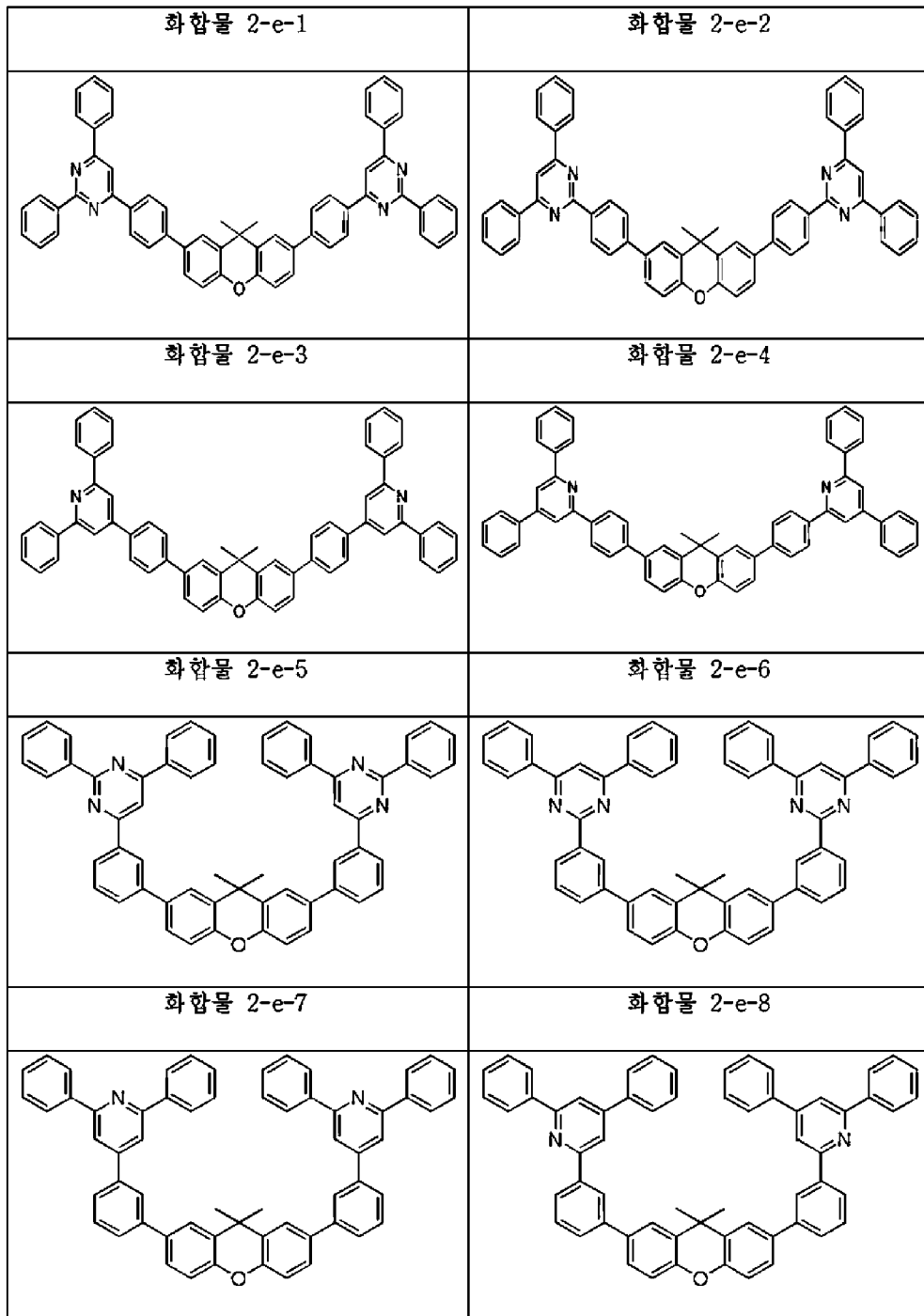
[154]

화합물 1-e-1	화합물 1-e-2
화합물 1-e-3	화합물 1-e-4
화합물 1-e-5	화합물 1-e-6
화합물 1-e-7	화합물 1-e-8

[155]

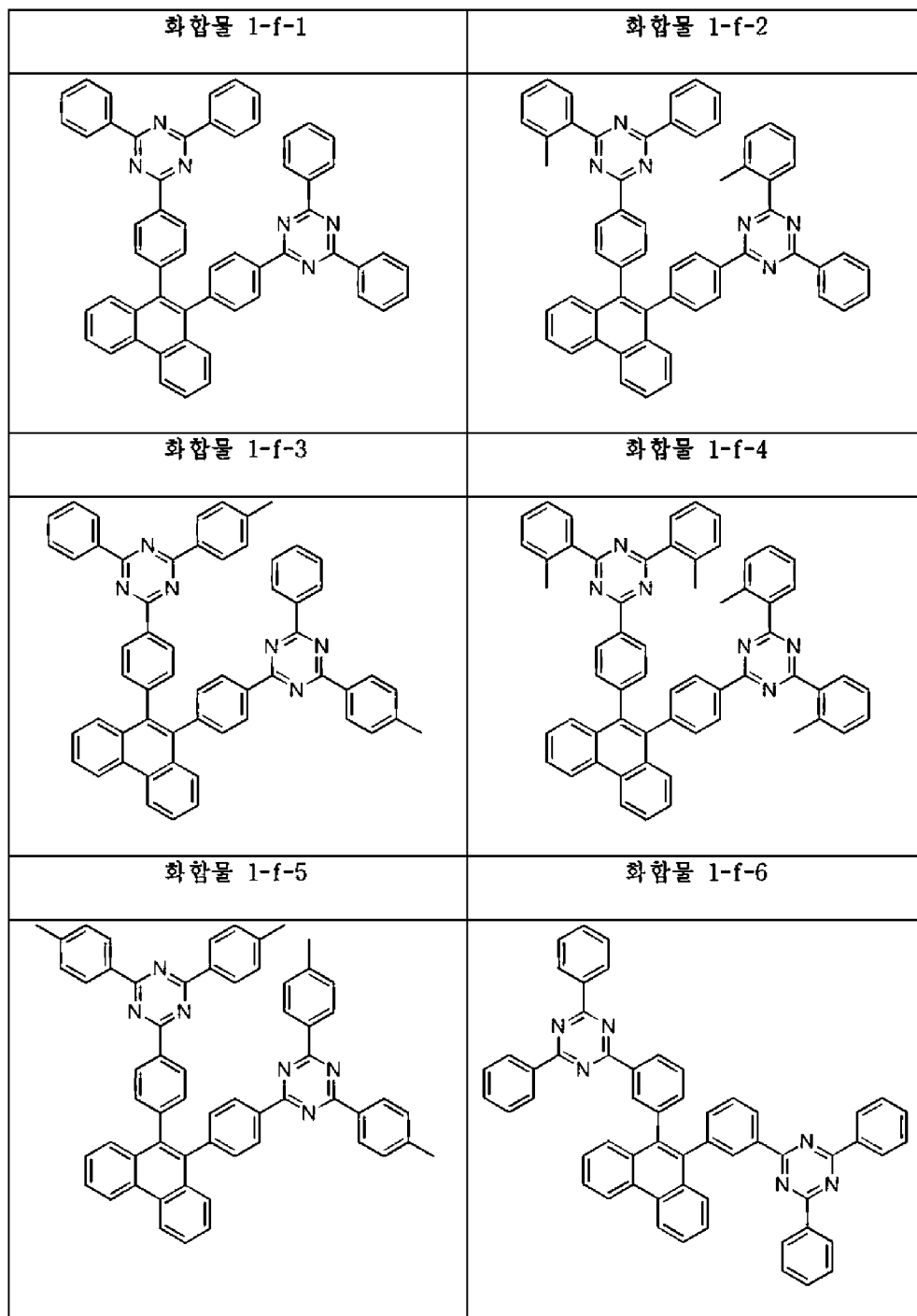


[156]

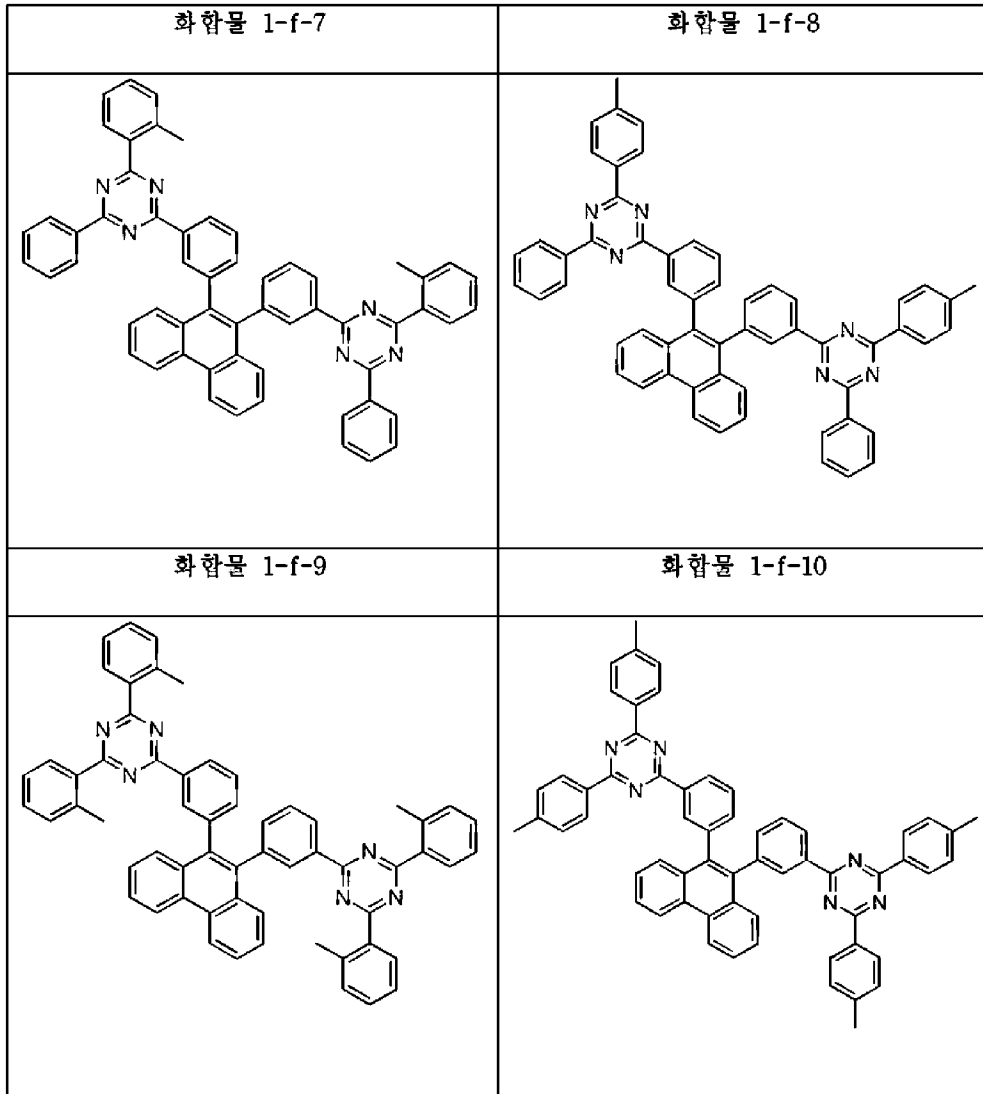


[157] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1-f로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1-f-1 내지 1-f-12 및 2-f-1 내지 2-f-8 중 어느 하나로 표시된다.

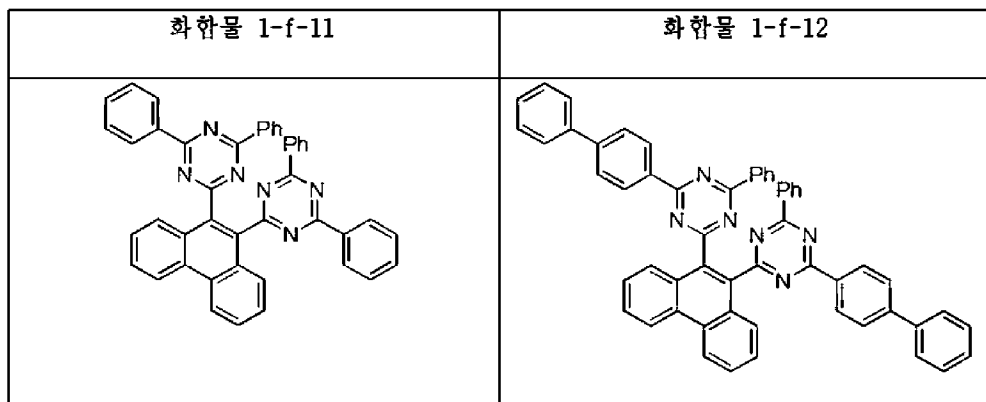
[158]



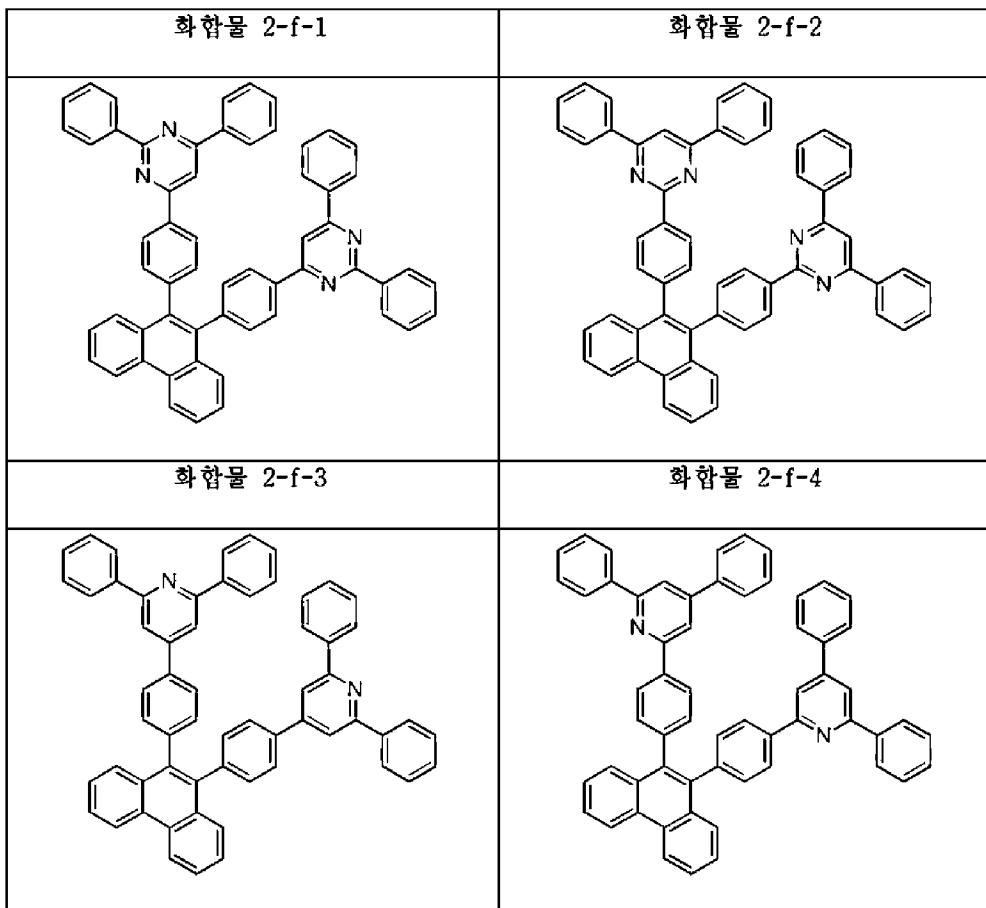
[159]



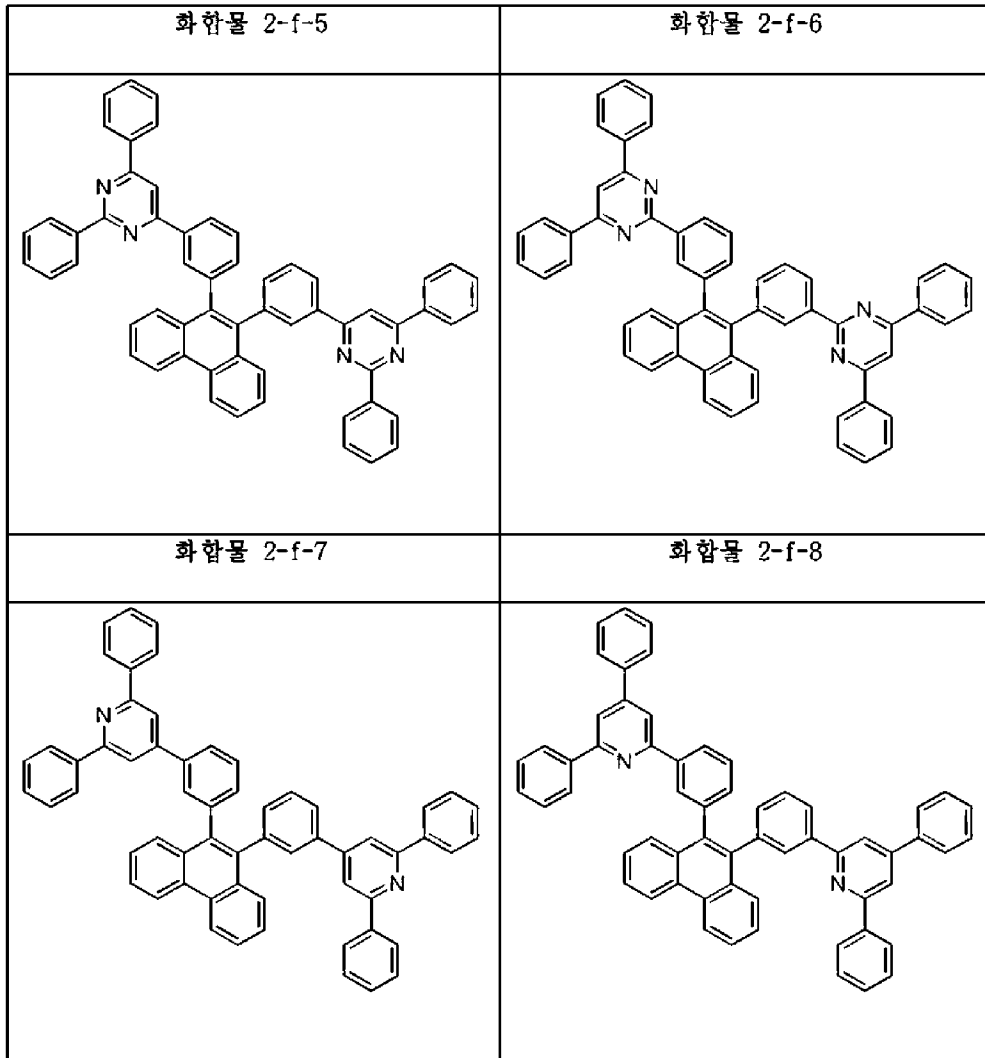
[160]



[161]



[162]



- [163] 상기 화학식 1의 화합물은 상기 화학식 1에 표시된 바와 같이 헤테로환 구조를 코어구조로 하고 다양한 치환체를 도입함으로써 유기 전자 소자에서 사용되는 유기물층으로 사용되기에 적합한 특성을 가질 수 있다.
- [164] 화합물의 컨쥬게이션 길이와 에너지 밴드 갭은 밀접한 관계가 있다. 구체적으로, 화합물의 컨쥬게이션 길이가 길수록 에너지 밴드갭이 작아진다. 전술한 바와 같이, 상기 화학식 1의 화합물의 코어는 제한된 컨쥬게이션을 포함하고 있으므로, 이는 에너지 밴드 갭이 큰 성질을 갖는다.
- [165] 본 명세서에서는 상기와 같이 에너지 밴드 갭이 큰 코어 구조의 Ar₁ 내지 Ar₃ 및 R₁ 내지 R₉의 위치에 다양한 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드 갭을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 통상 에너지 밴드 갭이 큰 코어 구조에 치환기를 도입하여 에너지 밴드 갭을 조절하는 것은 용이하나, 코어 구조가 에너지 밴드 갭이 작은 경우에는 치환기를 도입하여 에너지 밴드 갭을 크게 조절하기 어렵다. 또한, 본 발명에서는 상기와 같은 구조의 코어 구조의 Ar₁ 내지 Ar₃ 및 R₁ 내지 R₉ 위치에 다양한 치환기를 도입함으로써 화합물의 HOMO 및 LUMO 에너지 준위도 조절할 수 있다.

- [166] 또한, 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기 전자 소자 제조시 사용되는 정공 주입층 물질, 정공 수송층 물질, 발광층 물질 및 전자 수송층 물질에 주로 사용되는 치환기를 상기 코어 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 합성할 수 있다.
- [167] 상기 화학식 1의 화합물은 코어 구조에 헤테로환 구조를 포함하고 있으므로, 유기 발광 소자에서 정공 주입 및/또는 정공수송 물질로서의 적절한 에너지 준위를 가질 수 있다. 본 발명에서는 상기 화학식 1의 화합물 중 치환기에 따라 적절한 에너지 준위를 갖는 화합물을 선택하여 유기 발광 소자에 사용함으로써 구동 전압이 낮고 광효율이 높은 소자를 구현할 수 있다.
- [168] 또한, 상기 코어구조에 다양한 치환기, 특히 수소 또는 중수소를 도입함으로써 에너지 밴드 갭을 미세하게 조절이 가능하게 하며, 한편으로 유기물 사이의 계면에서의 특성을 향상되게 하며 물질의 용도를 다양하게 할 수 있다.
- [169] 한편, 상기 화학식 1의 화합물은 유리 전이 온도 (T_g)가 높아 열적 안정성이 우수하다. 이러한 열적 안정성의 증가는 소자에 구동 안정성을 제공하는 중요한 요인이 된다.
- [170] 상기 화학식 1의 화합물은 후술하는 제조예를 기초로 제조될 수 있다.
- [171] 상기 화학식 1의 헤테로환 화합물은 화학식 1의 X_1 내지 X_3 를 포함하는 화학식 헤테로환 고리에 Ar_1 , Ar_2 및 L 을 치환 시킨 후, Ar_3 에 치환된 X_1 내지 X_3 를 포함하는 화학식 헤테로환 고리를 2개를 결합시키는 방법으로 제조될 수 있다.
- [172] X_1 내지 X_3 중 헤테로 원자의 개수, Ar_1 내지 Ar_3 및 L 의 치환기를 변경하여, 화합물 1-a-1 내지 1-a-16, 2-a-1 내지 2-a-8, 1-b-1 내지 1-b-16, 2-b-1 내지 2-b-8, 1-c-1 내지 1-c-12, 2-c-1 내지 2-c-8, 1-d-1 내지 1-d-10, 2-d-1 내지 2-d-8, 1-e-1 내지 1-e-10, 2-e-1 내지 2-e-8, 1-f-1 내지 1-f-12 및 2-f-1 내지 2-f-8 외에도 화학식 1로 표시되는 화합물을 제조할 수 있다.
- [173] 본 명세서는 또한 상기 화학식 1의 화합물을 이용하는 유기 전자 소자를 제공한다.
- [174] 본 명세서의 하나의 실시상태에 있어서, 유기 전자 소자는 제1 전극과 제2 전극 및 이 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 구조로 이루어질 수 있다.
- [175] 상기 유기 전자 소자는 유기 발광 소자, 유기 태양 전지, 및 유기 트랜지스터로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.
- [176] 본 명세서의 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기 전자 소자는 유기 발광 소자일 수 있다.
- [177] 본 명세서의 하나의 실시 상태에 있어서, 제1 전극, 제 2전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.
- [178] 본 명세서의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나,

2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기층을 포함할 수 있다.

- [179] 따라서, 본 명세서의 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입 및 정공수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [180] 구체적으로, 상기 유기 발광 소자의 유기물층은 정공 주입층을 포함할 수 있고, 상기 정공 주입층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 또 하나의 예에 있어서, 상기 유기 발광 소자의 유기물층은 정공 수송층을 포함할 수 있고, 상기 정공 수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 또 하나의 예에 있어서, 상기 유기 발광 소자의 유기물층은 정공 수송층 및 정공 주입층을 포함할 수 있고, 상기 정공 수송층 및 정공 주입층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [181] 또한, 상기 유기물층은 발광층을 포함할 수 있고, 상기 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 하나의 예로서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 호스트로서 포함될 수 있다. 또 하나의 예로서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 호스트로서 포함하고, 다른 유기 화합물, 금속 또는 금속화합물을 도판트로 포함할 수 있다.
- [182] 또한, 상기 유기물층은 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송 및 전자 주입을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [183] 구체적으로, 상기 유기 발광 소자의 유기물층은 전자 주입층을 포함할 수 있고, 상기 전자 주입층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [184] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자의 유기물층은 전자 수송층을 포함할 수 있고, 상기 전자 수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자의 유기물층은 전자 수송층 및 전자 주입층을 포함할 수 있고, 상기 전자 수송층 및 전자 주입층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [185] 이와 같은 다층 구조의 유기물층에서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층, 정공 주입/정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 또는 전자 수송과 발광을 동시에 하는 층 등에 포함될 수 있다.
- [186] 또 하나의 실시 상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자의 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함하는 유기물층 이외에, 아릴아미노기, 카바졸기, 또는 벤즈카바졸기를 포함하는 화합물을 포함하는 정공 주입층 또는 정공 수송층을 포함할 수 있다.

- [187] 본 명세서의 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기 전자 소자는 유기 태양전지일 수 있다.
- [188] 본 명세서의 하나의 실시상태에 있어서, 제1 전극, 제 2전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 광활성층을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 태양전지가 제공된다.
- [189] 본 명세서의 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 전자수송층을 포함할 수 있고, 상기 전자수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [190] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 광활성층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [191] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 광활성층과 전자주개(electron donor) 및 전자 받개(electron acceptor)를 포함할 수 있으며, 상기 광활성층과 전자주개 및 전자 받개는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [192] 본 명세서의 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지가 외부 광원으로부터 광자를 받으면 전자 주개와 전자 받개 사이에서 전자와 정공이 발생한다. 발생된 정공은 전자 도너층을 통하여 양극으로 수송된다.
- [193] 본 명세서의 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 부가적인 유기물층을 더 포함할 수 있다. 상기 유기 태양 전지는 여러 기능을 동시에 갖는 유기물을 사용하여 유기물층의 수를 감소시킬 수 있다.
- [194] 본 명세서의 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기 전자 소자는 유기 트랜지스터일 수 있다.
- [195] 본 명세서의 하나의 실시상태에 있어서, 소스, 드레인, 게이트 및 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 트랜지스터가 제공된다.
- [196] 본 명세서의 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기 트랜지스터는 전하발생층을 포함할 수 있고, 상기 전하발생층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [197] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기 트랜지스터는 절연층을 포함할 수 있고, 상기 절연층은 기판과 게이트 위에 위치할 수 있다.
- [198] 상기 유기 전자 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.
- [199] 본 명세서의 유기 전자 소자의 실시상태에 있어서, 도 1 및 도 2에 나타낸 것과 같은 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [200] 도 1은 기판(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화합물은 상기 발광층(3)에 포함될 수 있다.
- [201] 도 2는 기판 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7),

- 전자수송층(8) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서 상기 화합물은 상기 정공주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7) 및 전자 수송층(8) 중 1층 이상에 포함될 수 있다.
- [202] 본 명세서의 유기 전자 소자는 유기물층 중 1층 이상이 본 발명의 화합물, 즉 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.
- [203] 예컨대, 본 명세서의 유기 전자 소자는 기판 상에 제1 전극, 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층시킴으로써 제조할 수 있다. 이 때 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical Vapor Deposition)방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 전자 소자를 만들 수 있다.
- [204] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 유기 전자 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.
- [205] 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질로부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 전자 소자를 만들 수도 있다 (국제 특허 출원 공개 제 2003/012890호). 다만, 제조 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [206] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 $\text{SNO}_2 : \text{Sb}$ 와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [207] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO_2/Al 과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [208] 상기 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입 받을 수 있는 물질로서, 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공

주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrin), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone)계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정 되는 것은 아니다.

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

[210] 상기 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq_3); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAlq; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[211] 상기 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al착물; Alq_3 를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

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

발명의 실시를 위한 형태

[213] 이하 제조예 및 실험예를 통하여 본 발명을 보다 상세하게 설명하지만, 본 발명은 하기 제조예 및 실험예에 의하여 범위가 한정되지 않는다.

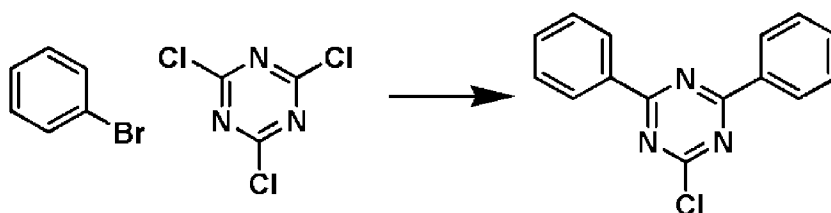
[214] 제조예

[215] <제조예 1> 하기 화합물 1-a-1의 제조

[216] 1) 하기 화합물 1-A의 화합물 합성

[217]

[화합물 1-A]



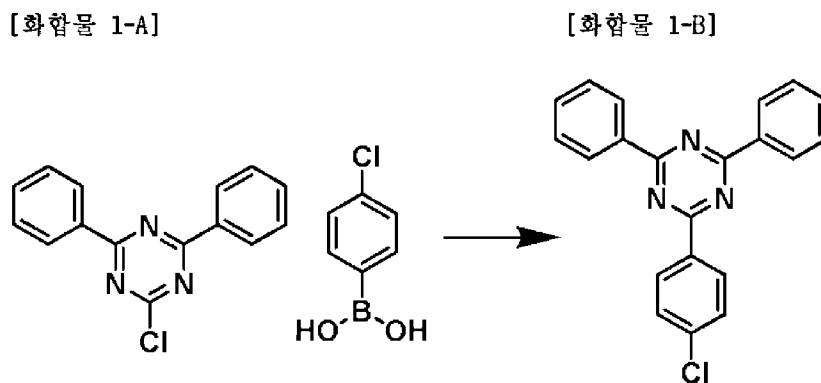
[218] 질소 분위기에서 마그네슘(9.7g, 0.40mol), 요오드 (1.02g, 8mmol)을

무수테트라하이드로퓨란 80ml 용매에 현탁하여 현탁액을 제조하고, 브로모벤젠(62.8g, 0.4mol)을 무수 테트로하이드로퓨란 150ml에 희석한 용액을 이 현탁액에 1시간에 걸쳐 천천히 적가하고, 이 혼합물을 3시간 가열 환류하였다. 이 혼합물을 상온으로 식힌 후, 1,3,5-트리클로로트리아진(27.6g, 0.15mol)을 무수 테트라하이드로퓨란 150ml에 용해한 용액을 이 혼합물에 천천히 적가하고, 약 5시간 환류교반하였다. 반응이 끝난 후, 반응 유체의 유기 용매를 감압 증류 후 에탄올로 재결정하여, 화합물 1-A (39g, 수율: 73.5%)를 수득했다.

[219] MS[M+H]⁺= 268

[220] 2) 하기 화합물 1-B의 합성

[221]

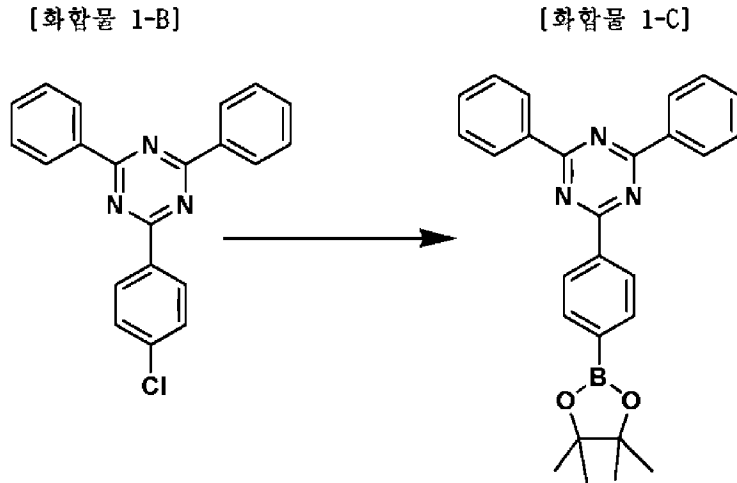


[222] 질소 분위기에서 상기 화합물 1-A(37.1g, 0.14mol), 4-클로로페닐보로닉시드(23.8g, 0.15mol)을 테트라하이드로퓨란 150ml에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(80ml)을 첨가하고, 테트라키스-(트리페닐포스핀)팔라듐(3.2g, 2.7mmol)을 넣은 후 5시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압농축시키고 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:6으로 컬럼하여 상기 화합물 1-B (34g, 수율: 72%)를 제조하였다.

[223] MS[M+H]⁺= 344

[224] 3) 하기 화합물 1-C의 합성

[225]

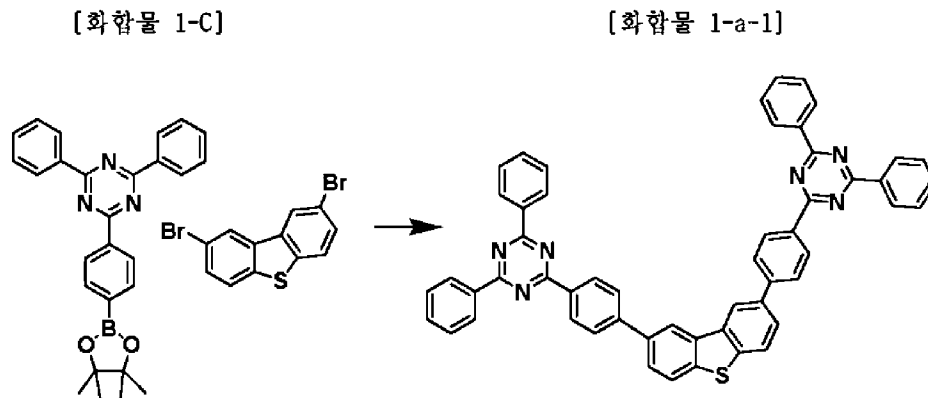


[226] 질소 분위기에서 상기 화합물 1-B(34g, 98.9mmol),
비스(피나콜라토)다이보론(27.6g, 108mmol) 및 아세트산칼륨(29.1g, 296mmol)을
섞고 디옥산 100ml에 첨가하고 교반하면서 가열하였다. 환류되는 상태에서
비스(디벤질리딘아세톤)팔라듐(1.7g, 2.94mmol)과
트리사이클로헥실포스핀(1.6g, 5.9mmol)을 넣고 10시간동안 가열, 교반하였다.
반응 종료 후 상온으로 온도를 낮춘 후 여과하였다. 여과액을 물에 붓고
클로로포름으로 추출하고, 유기층을 무수황산마그네슘으로 건조하였다. 감압
증류 후 에탄올로 재결정하여 상기 화합물 1-C(35g, 수율: 81%)를 제조하였다.

[227] MS[M+H]⁺= 436

[228] 4) 하기 화합물 1-a-1의 합성

[229]



[230] 상기 화합물 1-C (16.4g, 37.7mmol)과
3,6-다이브로모다이벤조티오펜(2,8-dibromodibenzothiophene)(12.8g, 37.7mmol)을
테트라하이드로퓨란(50ml)에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(30ml)을
첨가하고, 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(400mg, 0.34mmol)을 넣은 후,
2시간동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 반응을 종결한 후,
탄산칼륨 용액을 제거하여 상기의 흰색 고체를 걸렀다. 걸러진 흰색의 고체를
테트라하이드로퓨란과 에탄올로 각각 1번씩 세척하여 상기 화합물 1-a-1(19.8g,

수율:65%)을 제조하였다.

[231] MS[M+H]⁺= 799

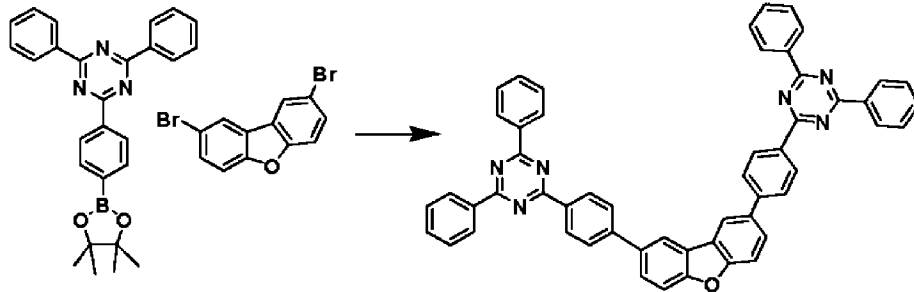
[232] <제조예 2> 화합물 1-b-1의 제조

[233] 1) 하기 화합물 1-b-1의 합성

[234]

[화합물 1-B]

[화합물 1-b-1]



[235] 3,6-다이브로모다이벤조티오펜(2,8-dibromodibenzothiophene) 대신

3,6-다이브로모다이벤조푸란(2,8-dibromodibenzoburan)을 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 1-a-1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 1-b-1를 제조하였다.

[236] MS[M+H]⁺= 783

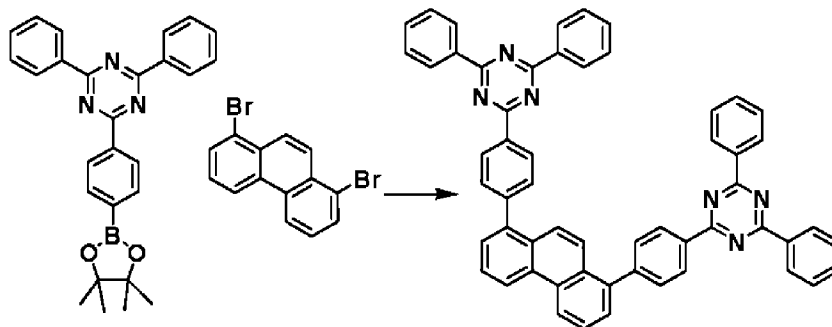
[237] <제조예 3> 화합물 1-c-1의 제조

[238] 1) 하기 화합물 1-c-1의 합성

[239]

[화합물 1-C]

[화합물 1-c-1]



[240] 3,6-다이브로모다이벤조티오펜 대신 1,8-다이브로모페난트렌

(1,8-dibromophenanthrene)을 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 1-a-1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 1-c-1를 제조하였다.

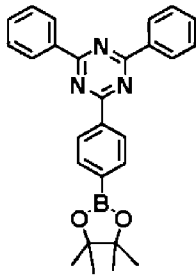
[241] MS[M+H]⁺= 793

[242] <제조예 4> 화합물 1-d-1의 제조

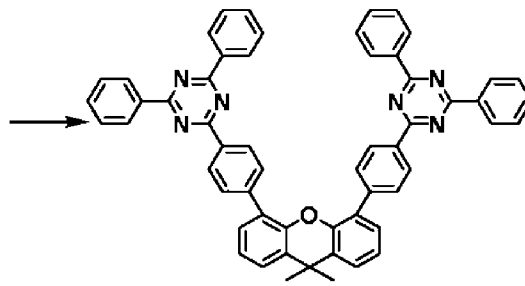
[243] 1) 하기 화합물 1-d-1의 합성

[244]

[화합물 1-c]



[화합물 1-d-1]



[245] 3,6-다이브로모다이벤조티오펜 대신
4,5-다이브로모-9,9-다이메틸잔틴(4,5-dibromo-9,9-dimethyl-9H-xanthene)을
사용한 것을 제외하고 상기 화합물 1-a-1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로
상기 화합물 1-d-1를 제조하였다.

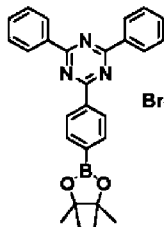
[246] MS[M+H]⁺= 825

[247] <제조예 5> 화합물 1-e-1의 제조

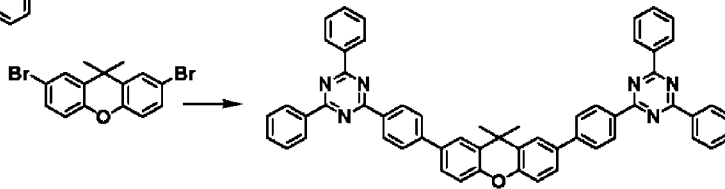
[248] 1) 하기 화합물 1-e-1의 합성

[249]

[화합물 1-c]



[화합물 1-e-1]



[250] 3,6-다이브로모다이벤조티오펜 대신
2,7-다이브로모-9,9-다이메틸잔틴(2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-xanthene)을
사용한 것을 제외하고 상기 화합물 1-a-1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로
상기 화합물 1-e-1를 제조하였다.

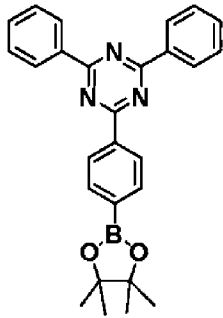
[251] MS[M+H]⁺= 825

[252] <제조예 6> 화합물 1-f-1의 제조

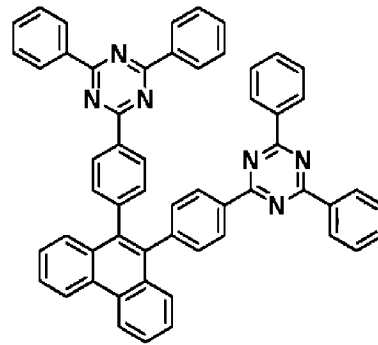
[253] 1) 하기 화합물 1-f-1의 합성

[254]

[화합물 1-c]



[화합물 1-f-1]



[255] 3,6-다이브로모다이벤조티오펜 대신 9,10-다이브로모페난트렌 (9,10-dibromophenanthrene)을 사용한 것을 제외하고 상기 화합물 1-a-1을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 1-f-1를 제조하였다.

[256] MS[M+H]⁺= 793

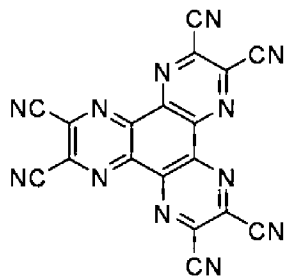
[257] <실험예 1>

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

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

[260] [HAT]

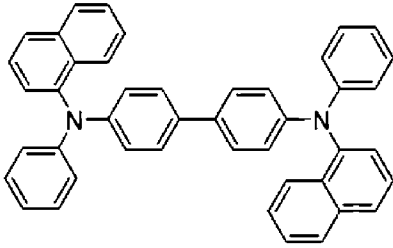
[261]



[262] 상기 정공 주입층 위에 정공을 수송하는 물질인 하기 화합물 4-4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB)(400Å)를 진공 증착하여 정공 수송층을 형성하였다.

[263] [NPB]

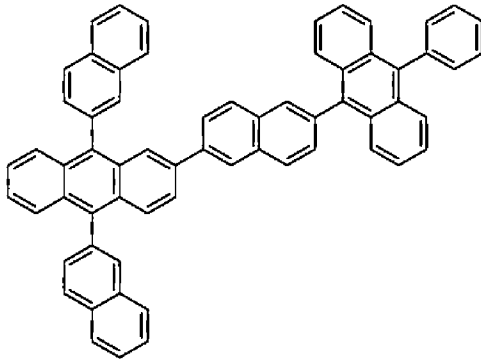
[264]



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

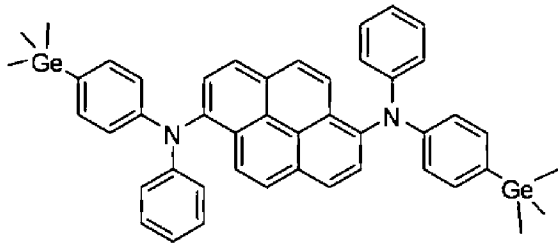
[266] [BH]

[267]



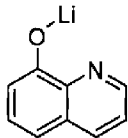
[268] [BD]

[269]



[270] [LiQ]

[271]



[272] 상기 발광층 위에 제조예 1에서 제조한 화합물 1-a-1과 상기 화합물 LiQ(Lithium Quinolate)를 1:1의 중량비로 진공증착하여 300Å의 두께로 전자 주입 및 수송층을 형성하였다. 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 12Å두께로 리튬플로라이드(LiF)와 2,000Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

[273] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4~ 0.7Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플로라이드는 0.3Å/sec, 알루미늄은 2Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 2×10^{-7} ~ 5×10^{-6} torr를 유지하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.

[274] <실험예 2>

[275] 상기 실험예 1에서 화합물 1-a-1 대신 상기 화합물 1-b-1를 사용한 것을

제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[276] <실험예 3>

[277] 상기 실험예 1에서 화합물 1-a-1 대신 상기 화합물 1-c-1를 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[278] <실험예 4>

[279] 상기 실험예 1에서 화합물 1-a-1 대신 상기 화합물 1-d-1를 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[280] <실험예 5>

[281] 상기 실험예 1에서 화합물 1-a-1 대신 상기 화합물 1-e-1를 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[282] <실험예 6>

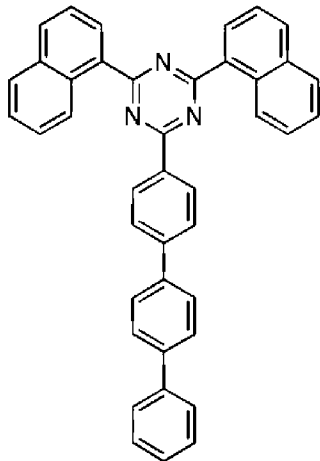
[283] 상기 실험예 1에서 화합물 1-a-1 대신 상기 화합물 1-f-1를 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[284] <비교예 1>

[285] 상기 실험예 1에서 화합물 1-a-1 대신 하기 ET1의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[286] [ET1]

[287]

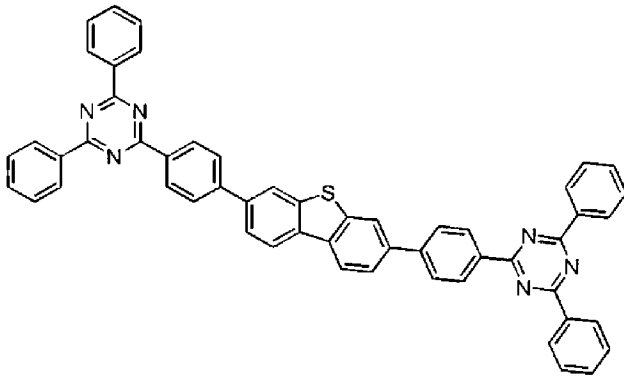


[288] <비교예 2>

[289] 상기 실험예 1에서 화합물 1-a-1 대신 하기 ET2의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[290] [ET2]

[291]

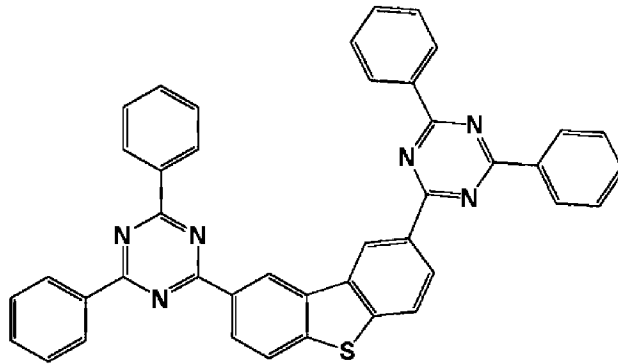


[292] <비교예 3>

[293] 상기 실험예 1에서 화합물 1-a-1 대신 하기 ET3의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[294] [ET3]

[295]

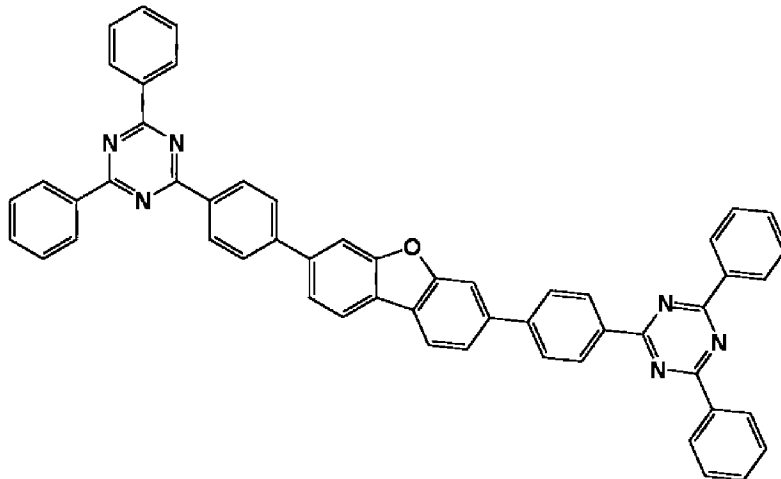


[296] <비교예 4>

[297] 상기 실험예 1에서 화합물 1-a-1 대신 하기 ET4의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[298] [ET4]

[299]



[300] 실험예 1 내지 6 및 비교예 1 내지 4에 의해 제작된 유기 발광 소자에 전류를

인가하였을 때, 표 1의 결과를 얻었다.

[301] [표 1]

[302]

	화합물	전압 (V@10mA/cm ²)	효율 (cd/A@10mA/cm ²)	색좌표 (x, y)
실험예 1	화합물 1-a-1	3.74	5.11	(0.139, 0.121)
실험예 2	화합물 1-b-1	3.93	5.28	(0.138, 0.126)
실험예 3	화합물 1-c-1	3.64	5.13	(0.138, 0.128)
실험예 4	화합물 1-d-1	3.71	5.09	(0.132, 0.131)
실험예 5	화합물 1-e-1	3.83	4.72	(0.136, 0.133)
실험예 6	화합물 1-f-1	3.99	5.01	(0.137, 0.128)
비교예 1	ET1	4.02	3.95	(0.136, 0.130)
비교예 2	ET2	4.21	3.72	(0.133, 0.126)
비교예 3	ET3	4.16	4.05	(0.136, 0.133)
비교예 4	ET4	4.25	3.67	(0.133, 0.125)

[303] 상기 표 1에서 보는 바와 같이 실험예 1과 비교예 2를 비교하면, 3,6-디벤조티오펜은 2,7-디벤조티오펜보다 전자 수송 및 주입 능력이 우수함을 확인할 수 있다.

[304] 상기 표 1에서 보는 바와 같이 실험예 2와 비교예 4를 비교하면 3,6-디벤조퓨란은 2,7-디벤조퓨란보다 전자 수송 및 주입 능력이 우수함을 확인할 수 있다.

[305] 상기 표 1에서 보는 바와 같이 실험예 1과 비교예 3을 비교하면, L이 직접 결합이 아닌 경우에 비하여, L이 아릴기인 경우가 전자 수송 및 주입 능력이 우수함을 확인할 수 있다.

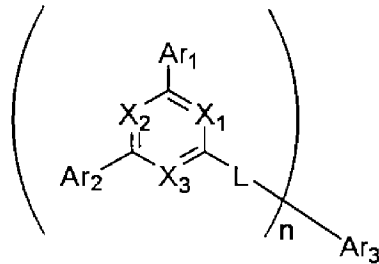
[306] 상기 표 1의 결과와 같이, 본 발명에 다른 화합물은 전자 수송 및 주입 능력이 우수하여 유기 발광 소자에 적용 가능함을 확인할 수 있었다.

청구범위

[청구항 1]

하기 화학식 1로 표시되는 헤테로환 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

n 은 2 이고,

X_1 내지 X_3 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 3가의 헤테로 원자 또는 CH이고, X_1 내지 X_3 중 적어도 하나는 3가의 헤테로 원자이며,

Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 헤테로고리기이고,

L 은 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 치환 또는 비치환된 알케닐렌기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기; 또는 이중 원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

Ar_3 는 치환 또는 비치환된 1,3-페닐기, 치환 또는 비치환된 1,2-페닐기, 치환 또는 비치환된 9,10-페난트릴기, 치환 또는 비치환된 2,7-페난트릴기, 치환 또는 비치환된 1,8-페난트릴기, 치환 또는 비치환된 3,6-디벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 3,6-디벤조퓨란기, 치환 또는 비치환된 1,8-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 1,8-디벤조퓨란기, 치환 또는 비치환된 1,8-디벤조퓨란기, 치환 또는 비치환된 테트라세닐기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐기, 치환 또는 비치환된 플루오란텐기, 치환 또는 비치환된 잔텐기(Xanthene) 및 치환 또는 비치환된 아세나프틸기로 이루어진 군에서 선택된다.

[청구항 2]

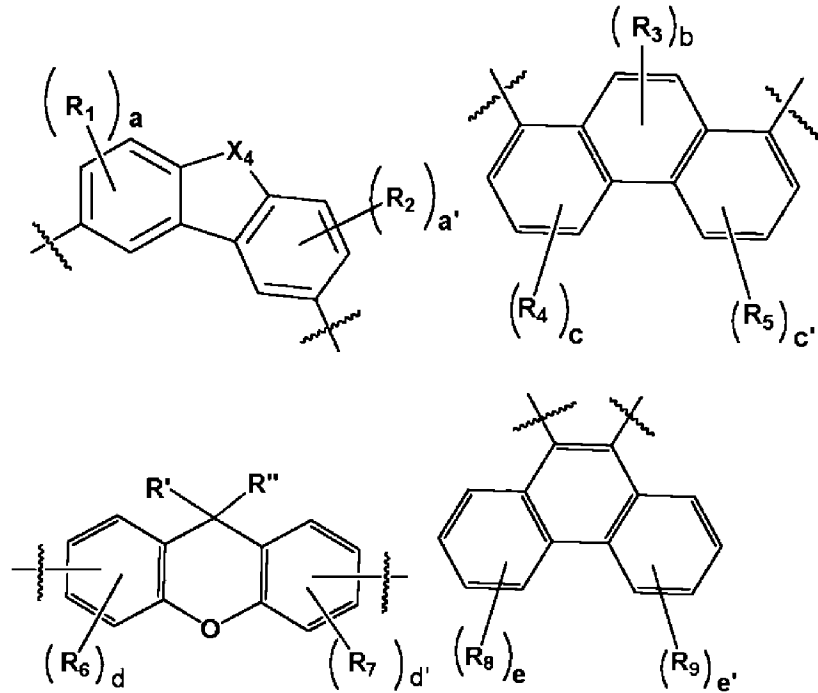
청구항 1에 있어서,

상기 X_1 내지 X_3 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 CH이고, X_1 내지 X_3 중 적어도 하나는 N인 것인 헤테로환 화합물.

[청구항 3]

청구항 1에 있어서,

상기 Ar_3 는 하기 구조 중에서 어느 하나인 것인 헤테로환 화합물:



상기 구조에 있어서,

a, a', c, c', d 및 d' 는 각각 1 내지 3의 정수이고,

b 는 1 내지 2의 정수이며,

e 및 e' 는 각각 1 내지 4의 정수이고,

X_4 는 S 또는 O이며,

R_1 내지 R_9 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소;

중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 치환 또는

비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는

비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는

비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환

또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기;

치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환

또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는

비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기; 치환

또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된

헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는

비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 카바졸기; 또는 N, O,

S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된

헤테로고리기이며,

R' 및 R'' 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소;

중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 치환 또는

비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는

비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 카바졸기; 및 N, O, S 및 P 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되거나, 지방족, 방향족, 지방족의 헤테로고리 또는 방향족의 헤테로고리로 축합고리를 형성하거나 스피로 결합을 형성할 수 있다.

[청구항 4]

청구항 1에 있어서,

상기 Ar₁ 및 Ar₂는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 비페닐기; 또는 치환 또는 비치환된 피리딘기인 것인 헤테로환 화합물.

[청구항 5]

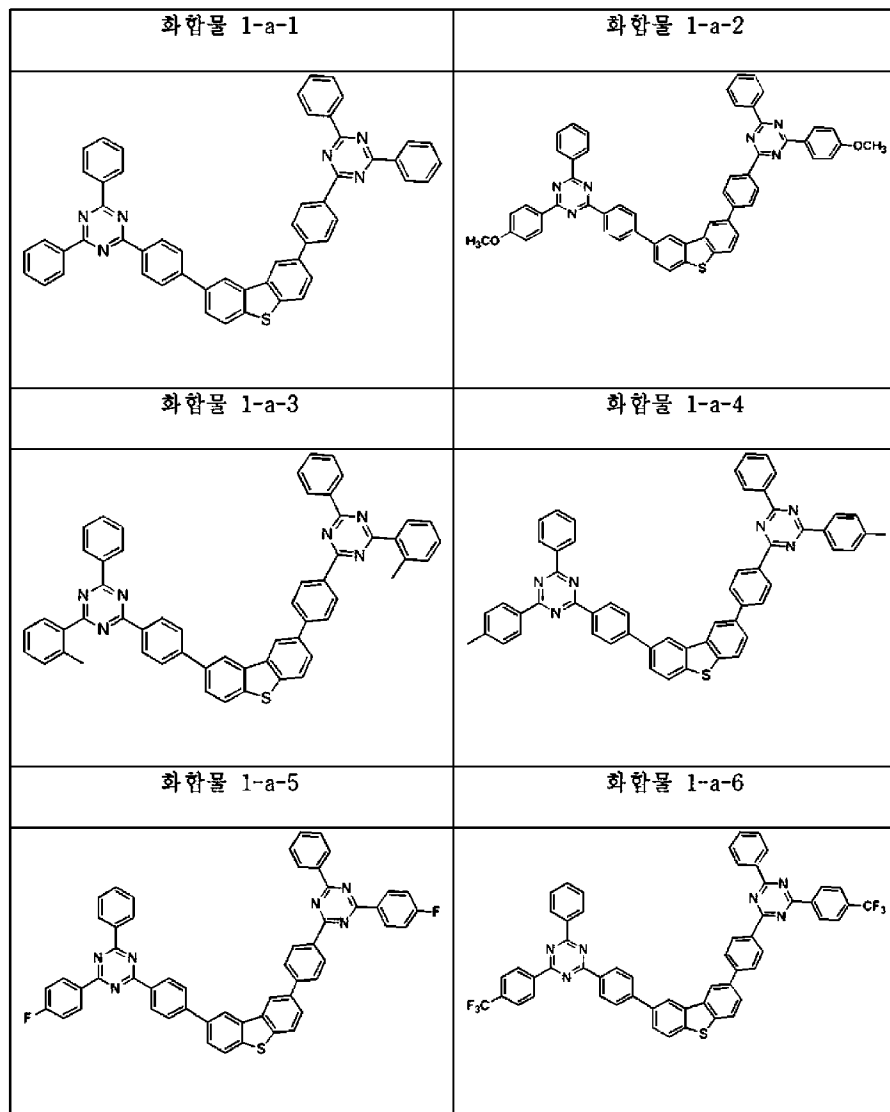
청구항 1에 있어서, 상기 L은 치환 또는 비치환된 페닐렌기인 것인 헤테로환 화합물.

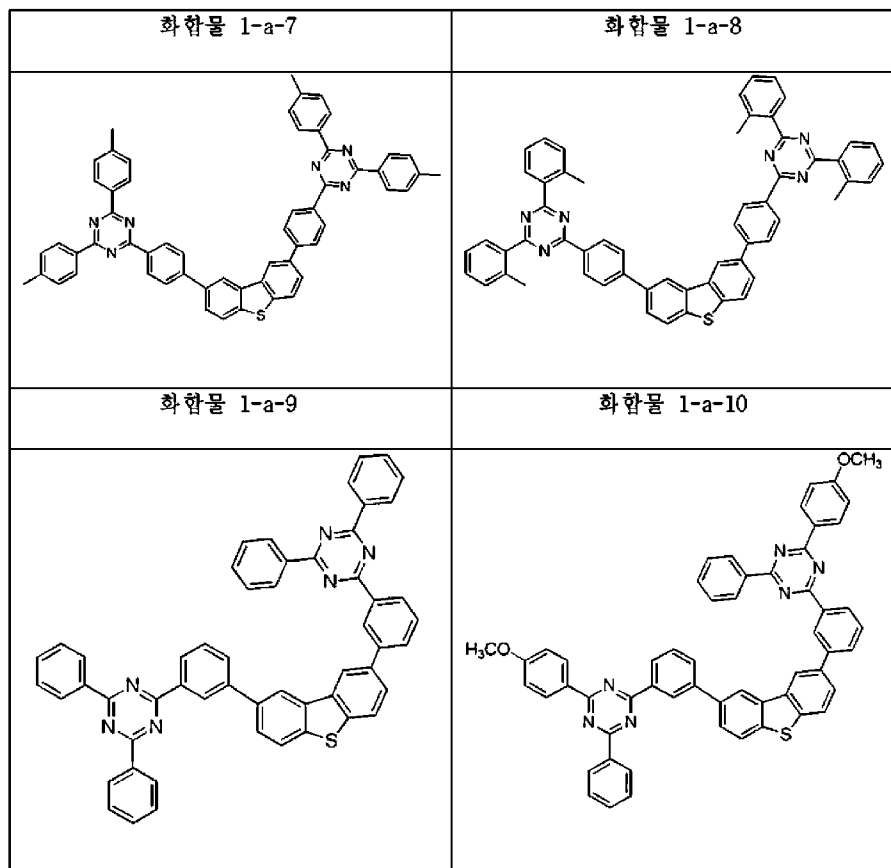
[청구항 6]

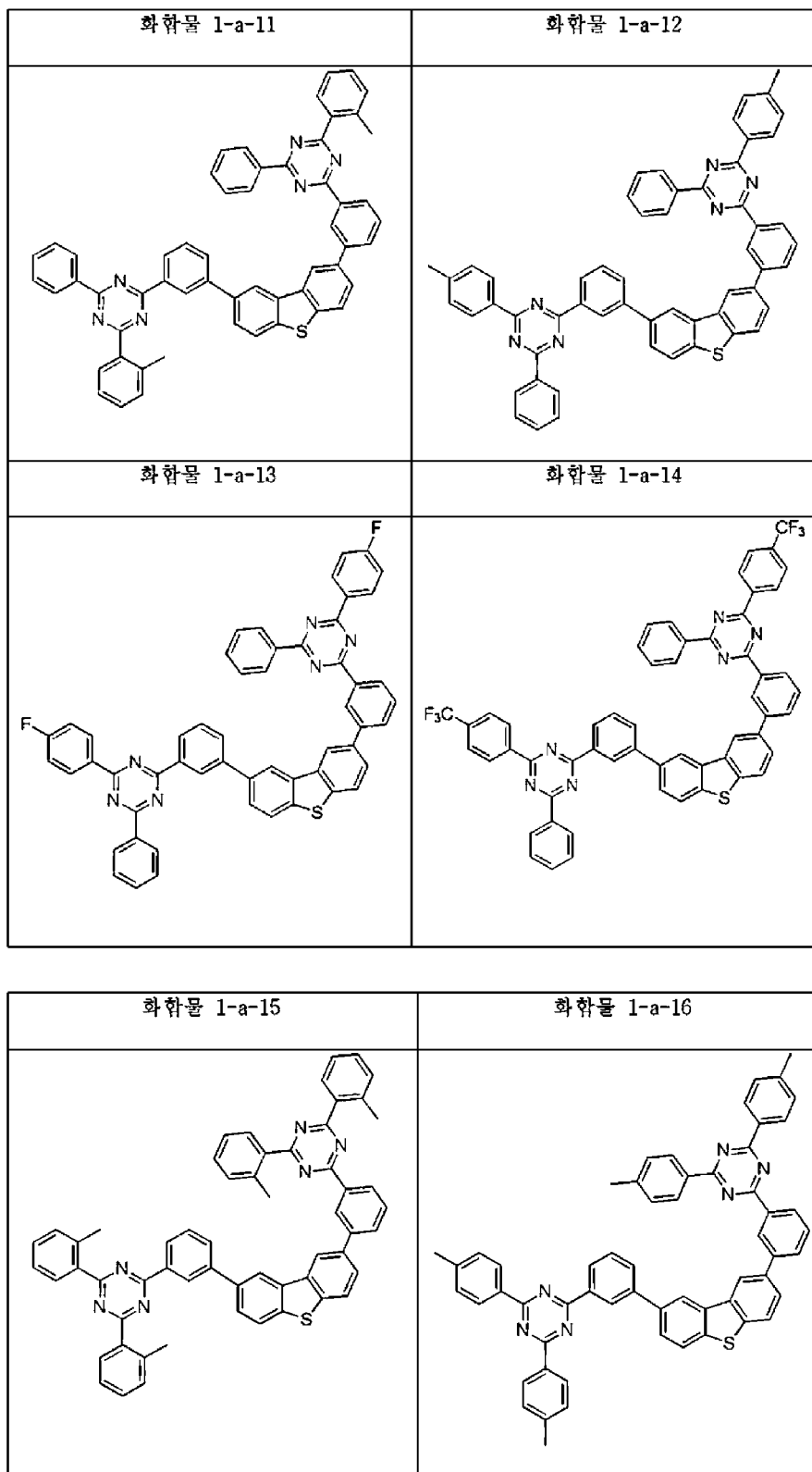
청구항 1에 있어서,

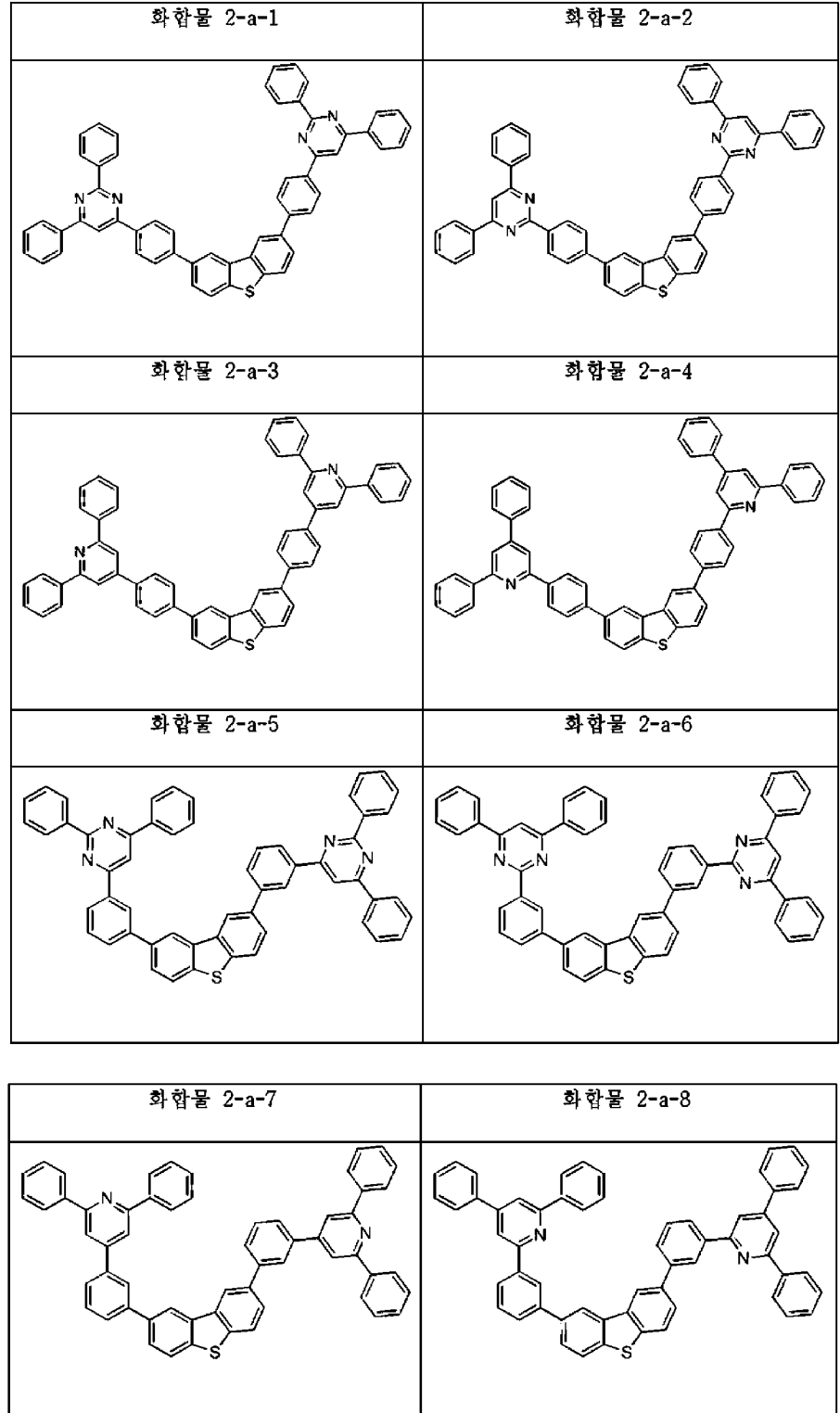
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 하기 화합물

1-a-1 내지 1-a-16 및 2-a-1 내지 2-a-8 중 어느 하나로 표시되는 것인 헤테로환 화합물.



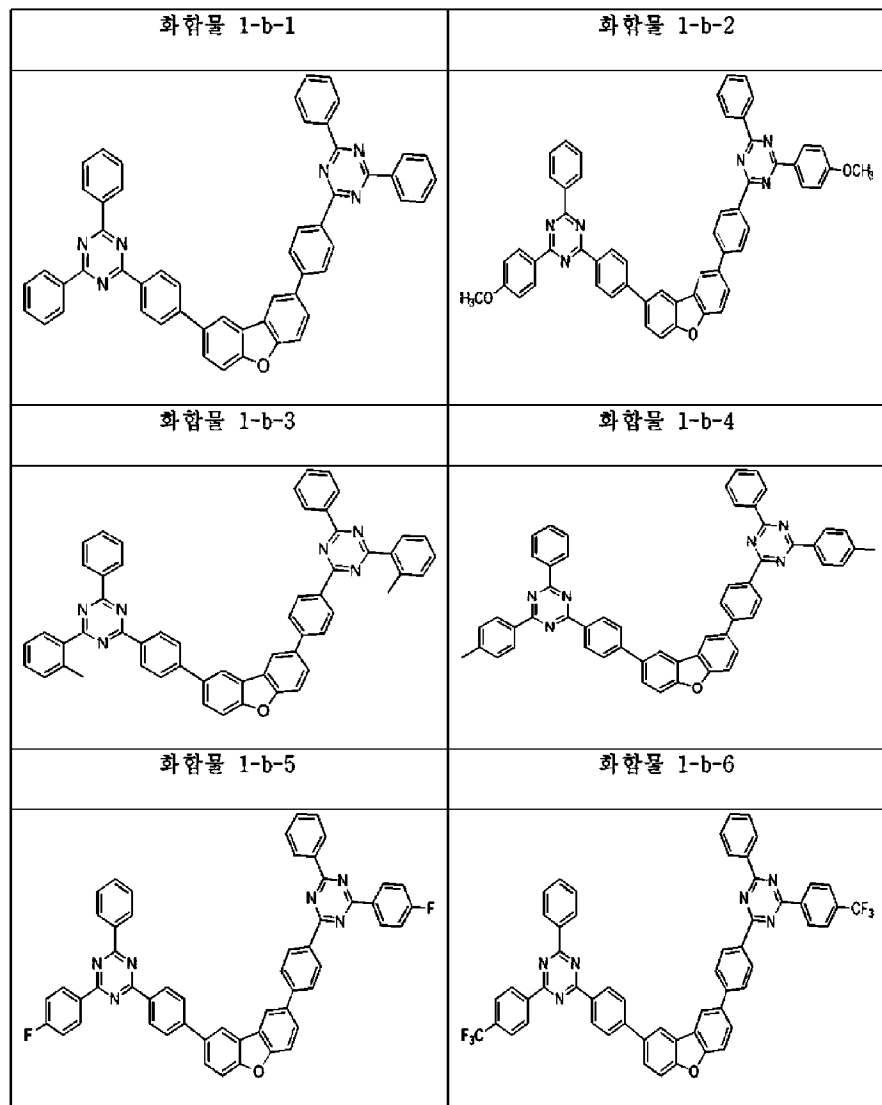


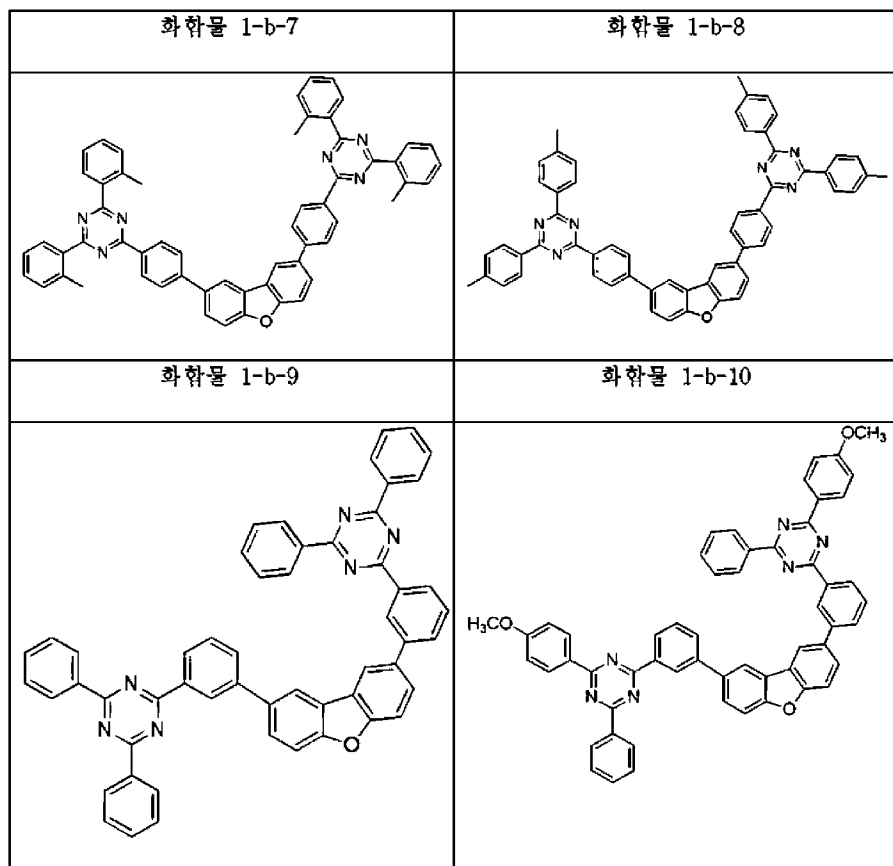


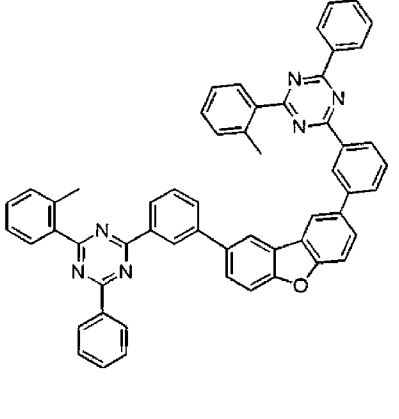
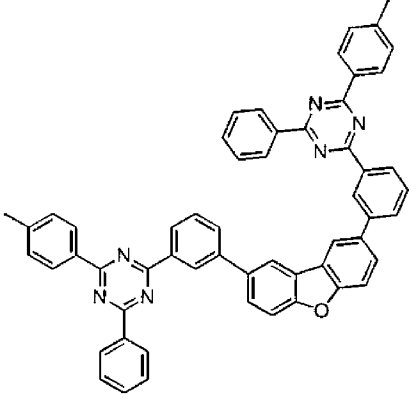
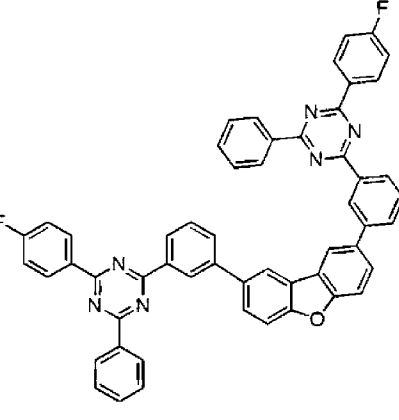
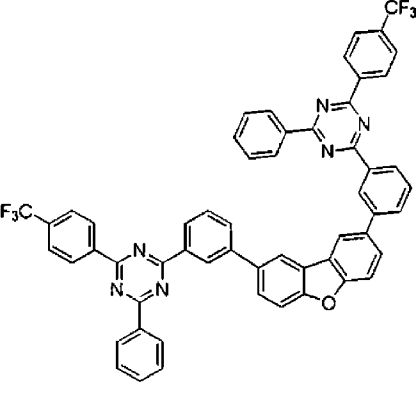
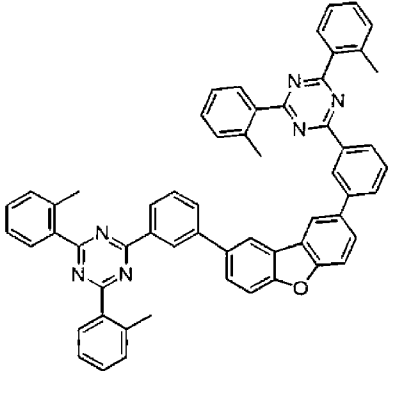
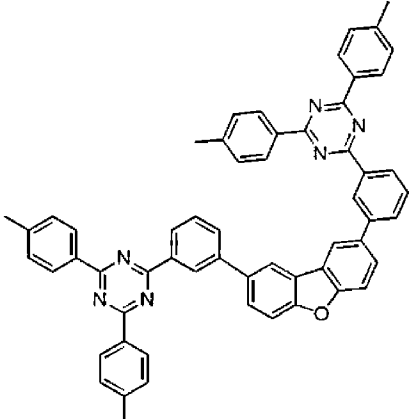


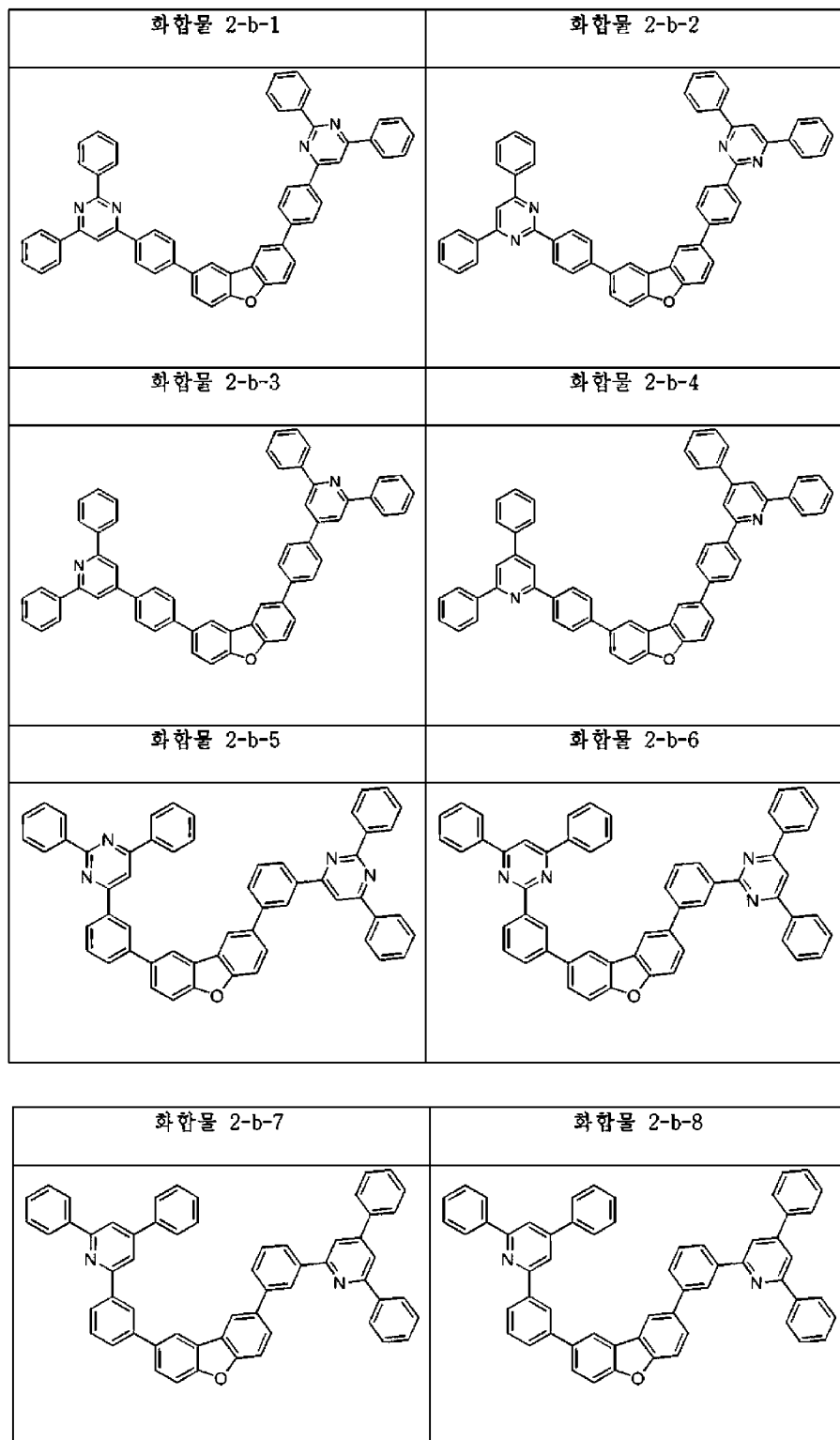
[청구항 7]

청구항 1에 있어서,
 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1-b-1 내지 1-b-16
 및 2-b-1 내지 2-b-8 중 어느 하나로 표시되는 것인 헤테로환
 화합물.



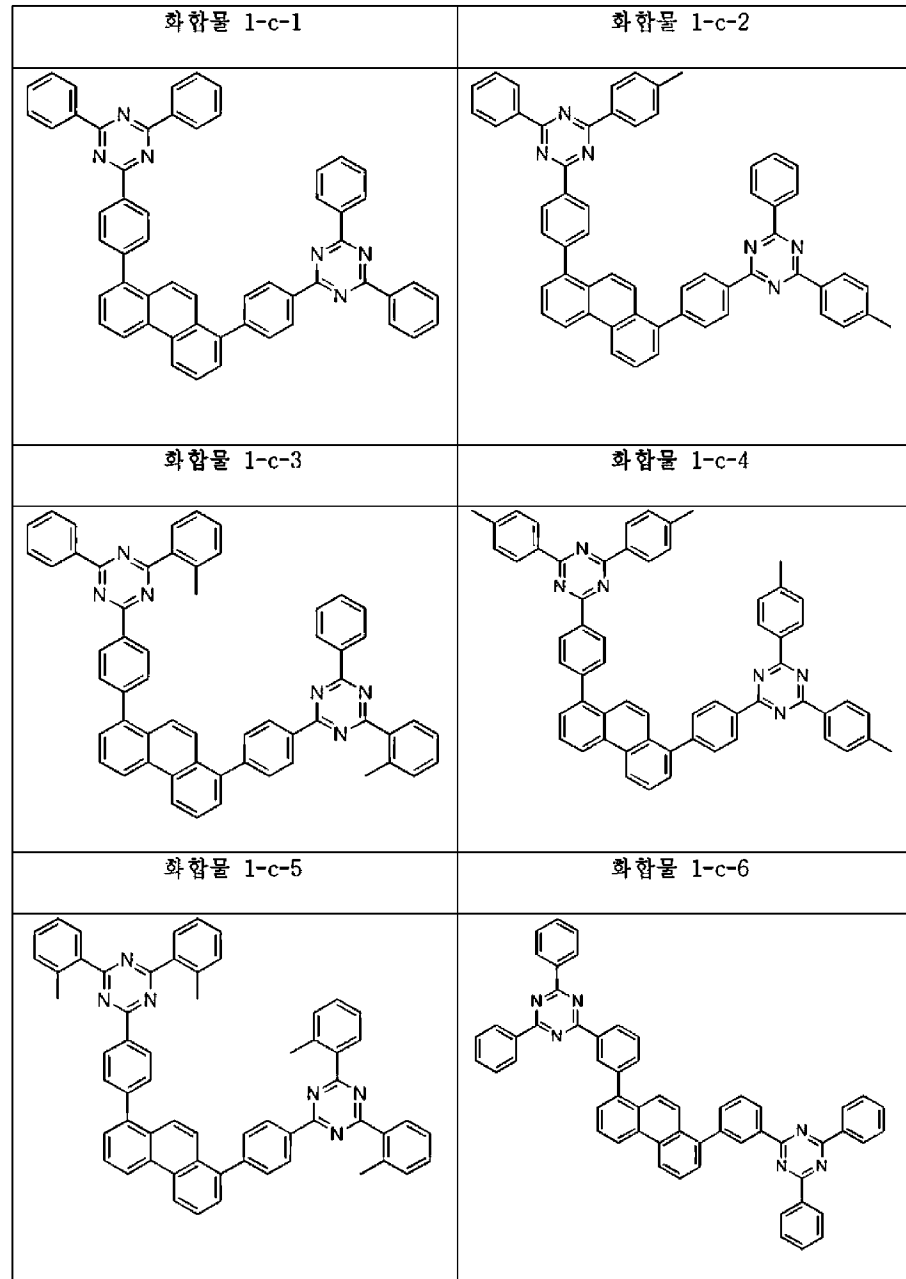


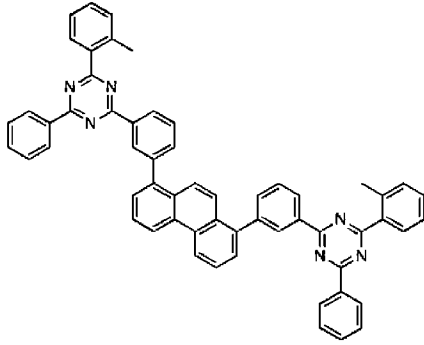
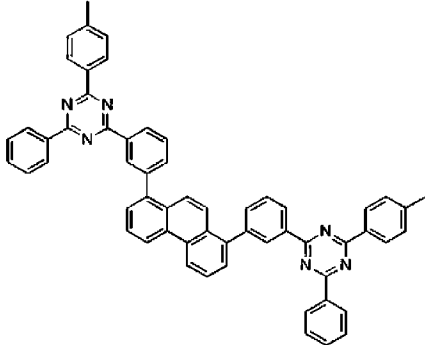
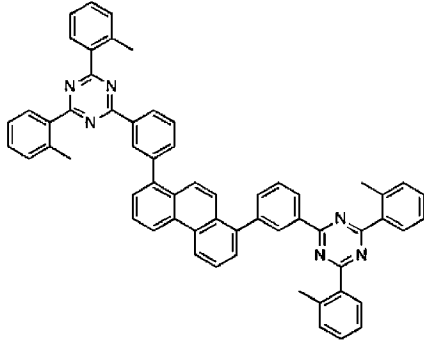
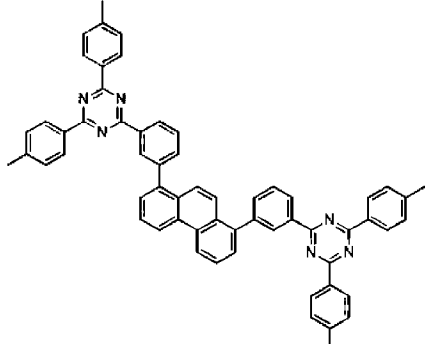
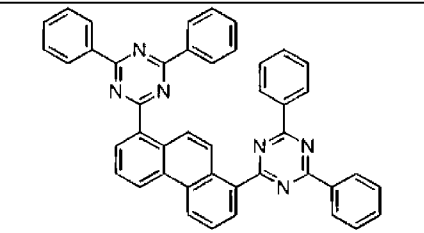
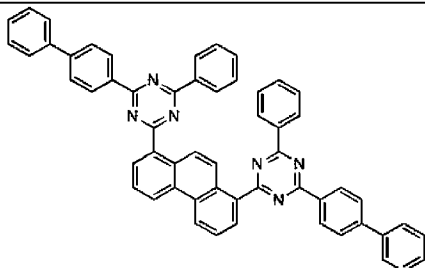
화합물 1-b-11	화합물 1-b-12
	
화합물 1-b-13	화합물 1-b-14
	
화합물 1-b-15	화합물 1-b-16
	

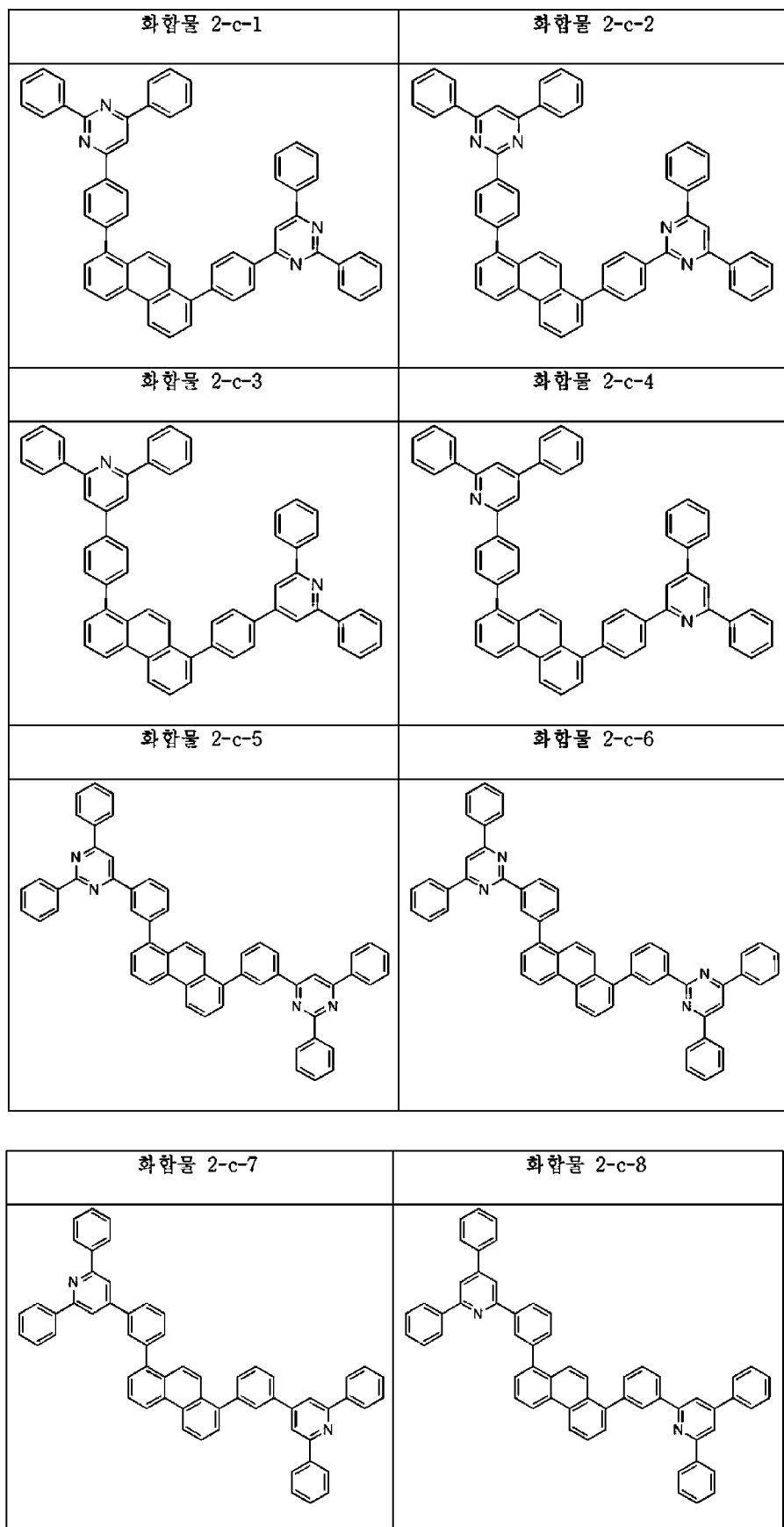


[청구항 8]

청구항 1에 있어서,
 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1-c-1 내지 1-c-12
 및 2-c-1 내지 2-c-8 중 어느 하나로 표시되는 것인 헤테로환
 화합물.



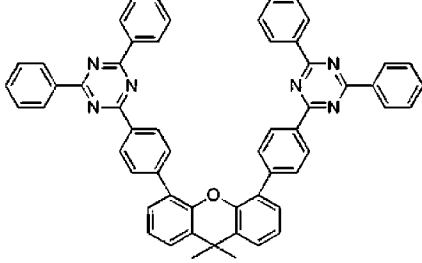
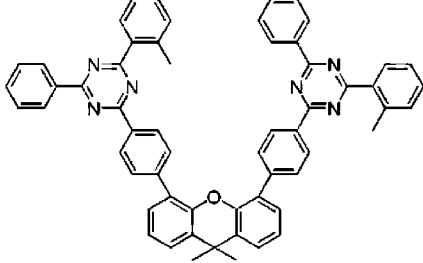
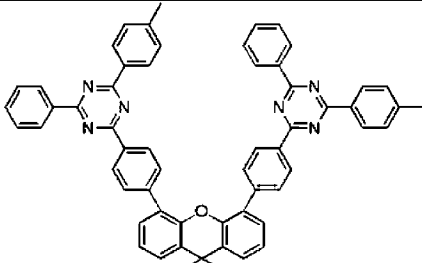
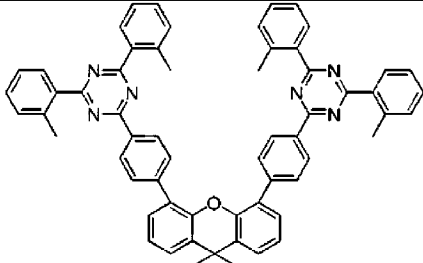
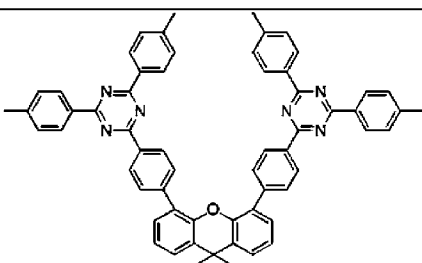
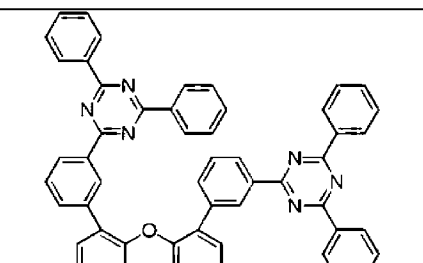
화합물 1-c-7	화합물 1-c-8
	
화합물 1-c-9	화합물 1-c-10
	
화합물 1-c-11	화합물 1-c-12
	

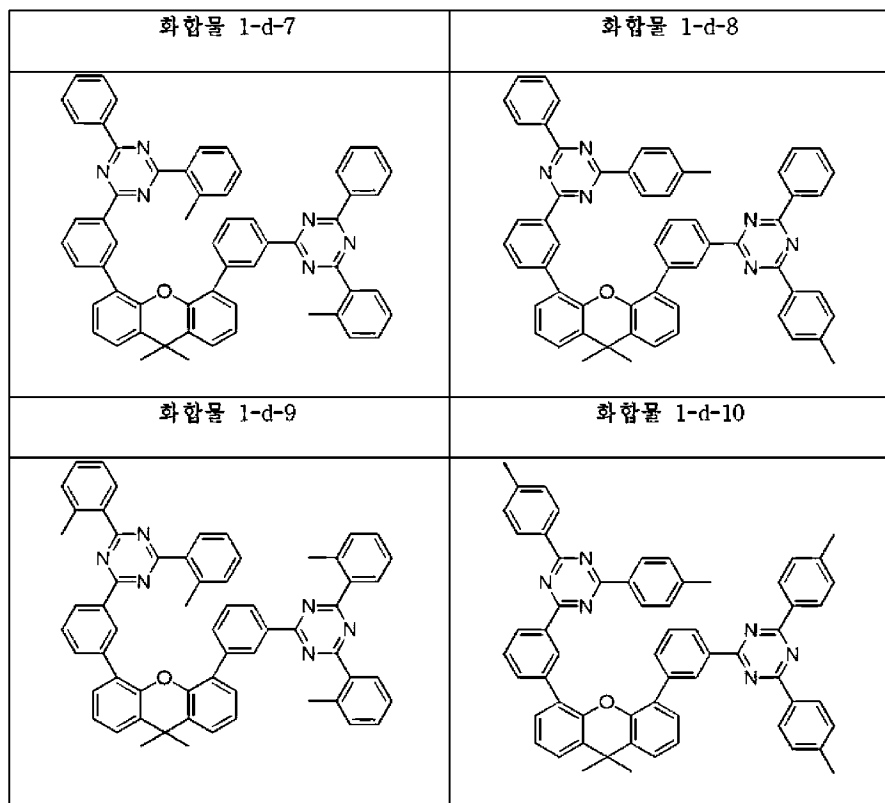


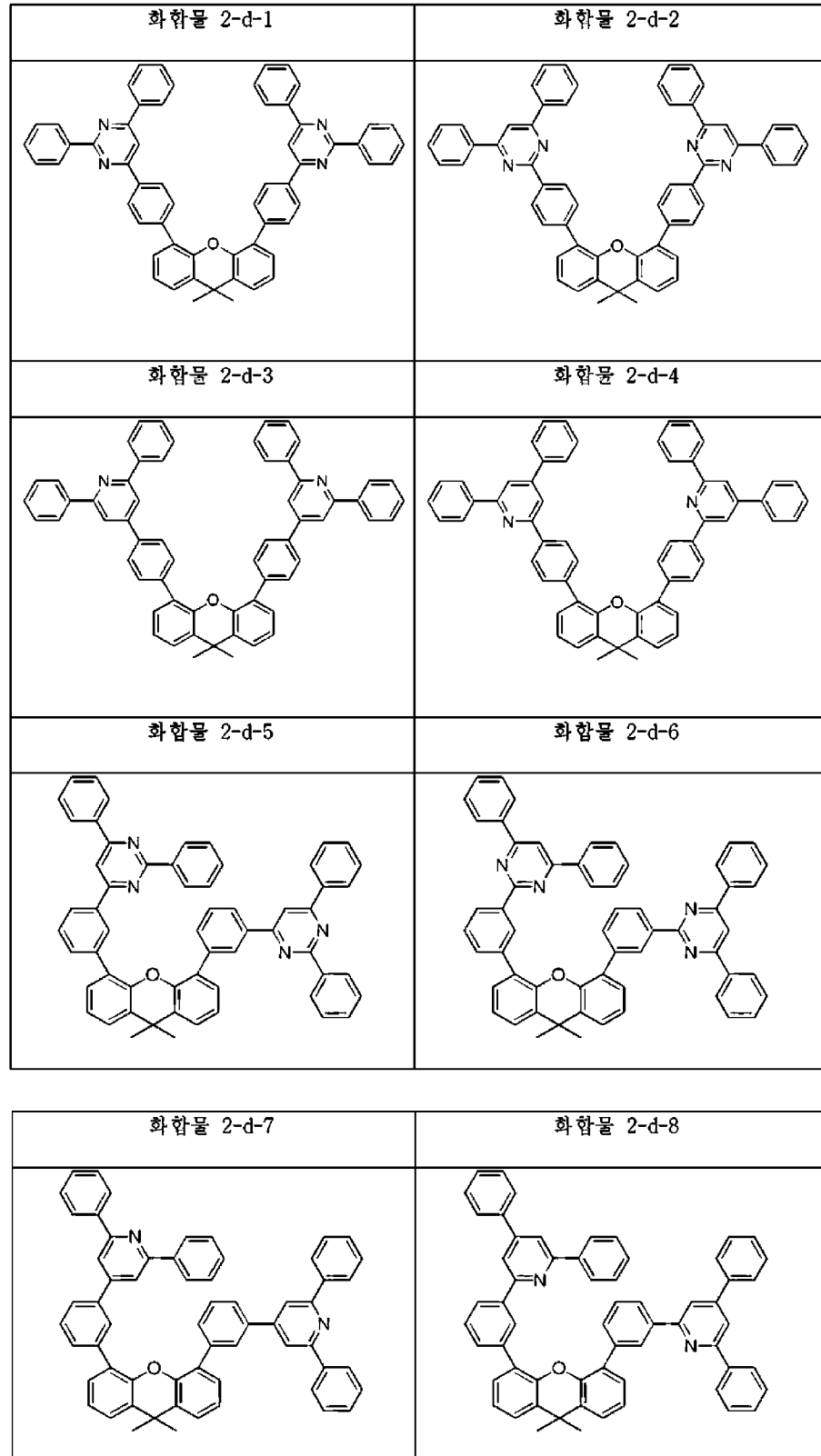
[청구항 9]

청구항 1에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1-d-1 내지 1-d-10 및 2-d-1 내지 2-d-8 중 어느 하나로 표시되는 것인 헤테로환 화합물.

<p style="text-align: center;">화합물 1-d-1</p>	<p style="text-align: center;">화합물 1-d-2</p>
	
<p style="text-align: center;">화합물 1-d-3</p>	<p style="text-align: center;">화합물 1-d-4</p>
	
<p style="text-align: center;">화합물 1-d-5</p>	<p style="text-align: center;">화합물 1-d-6</p>
	

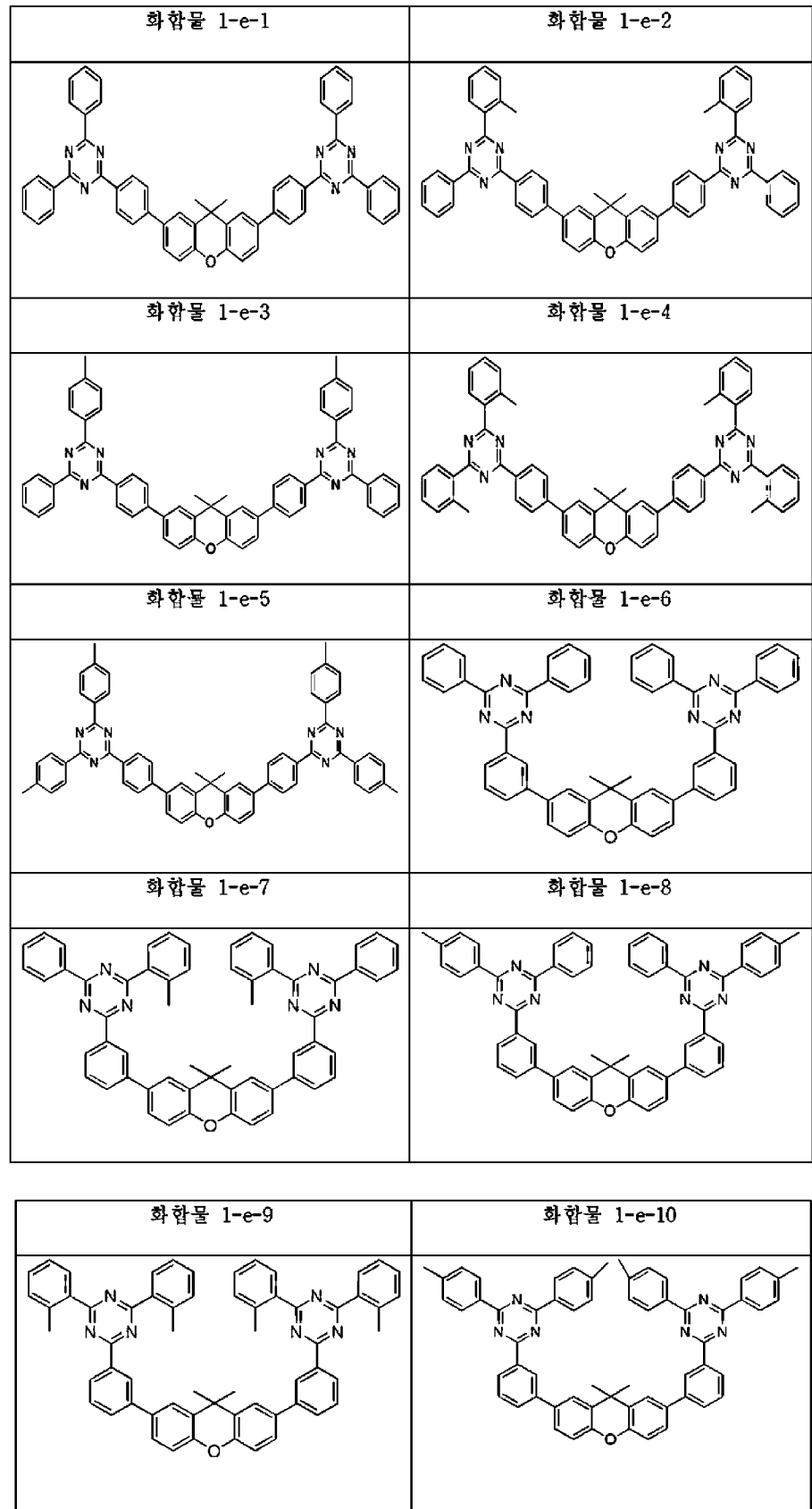


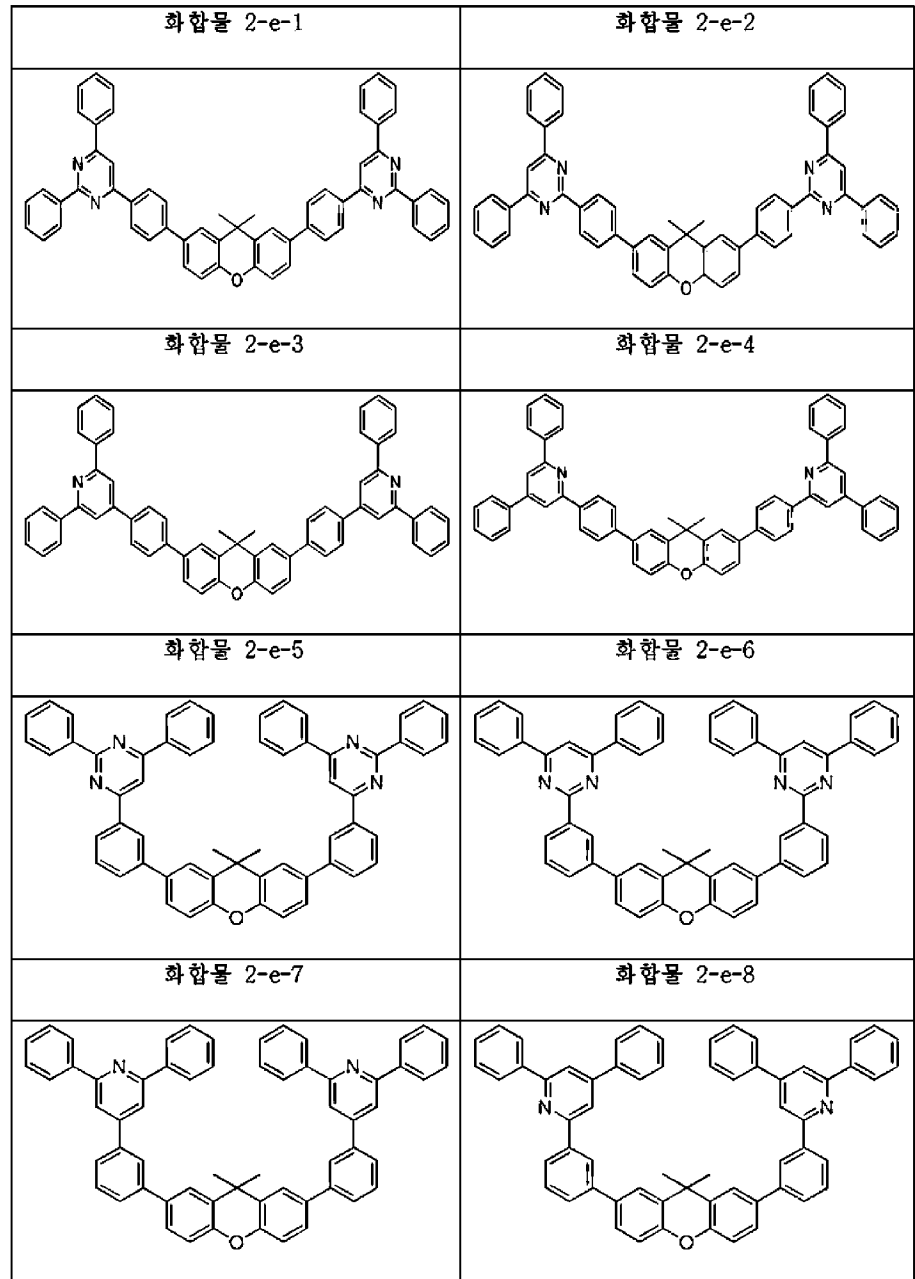


[청구항 10]

청구항 1에 있어서,
 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1-e-1 내지 1-e-10
 및 2-e-1 내지 2-e-8 중 어느 하나로 표시되는 것인 헤테로환

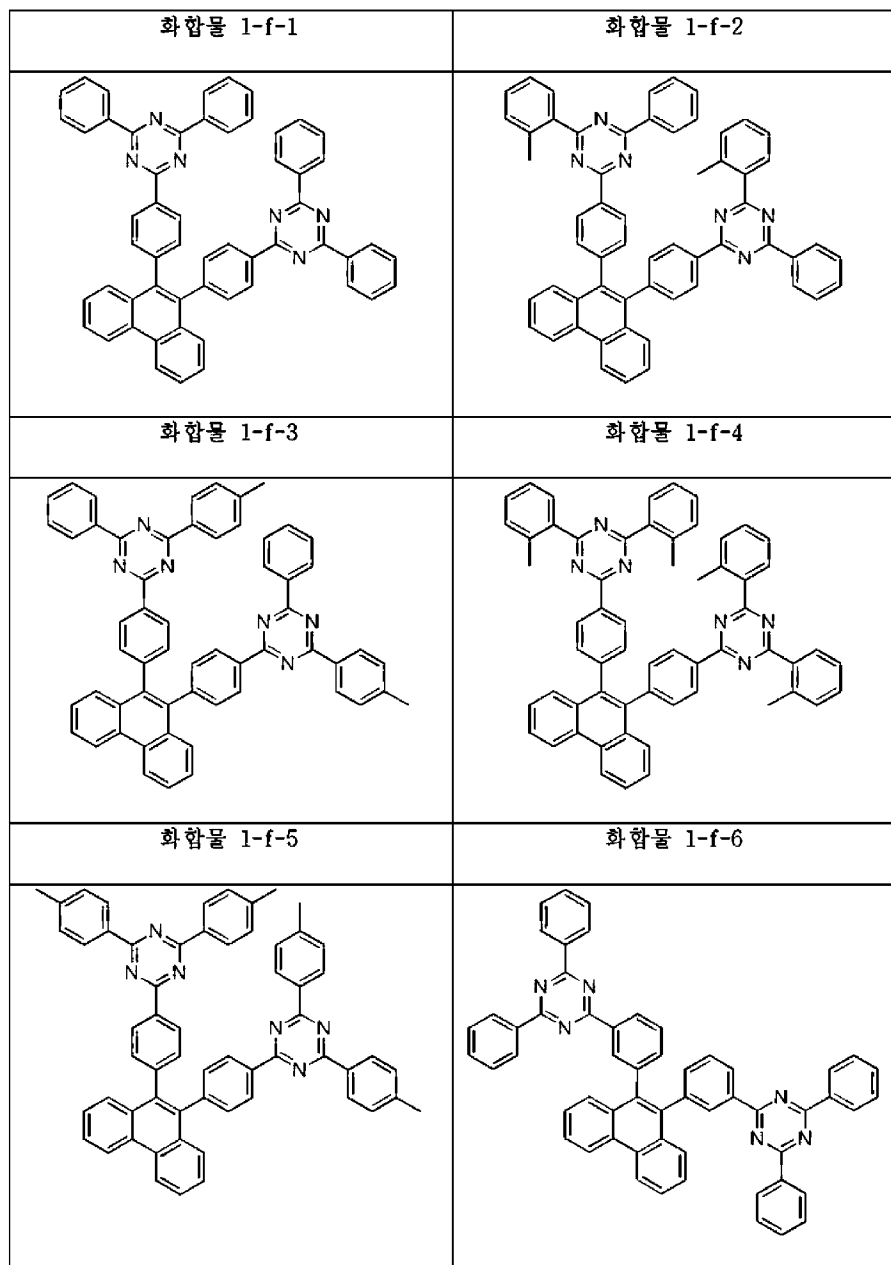
화합물.

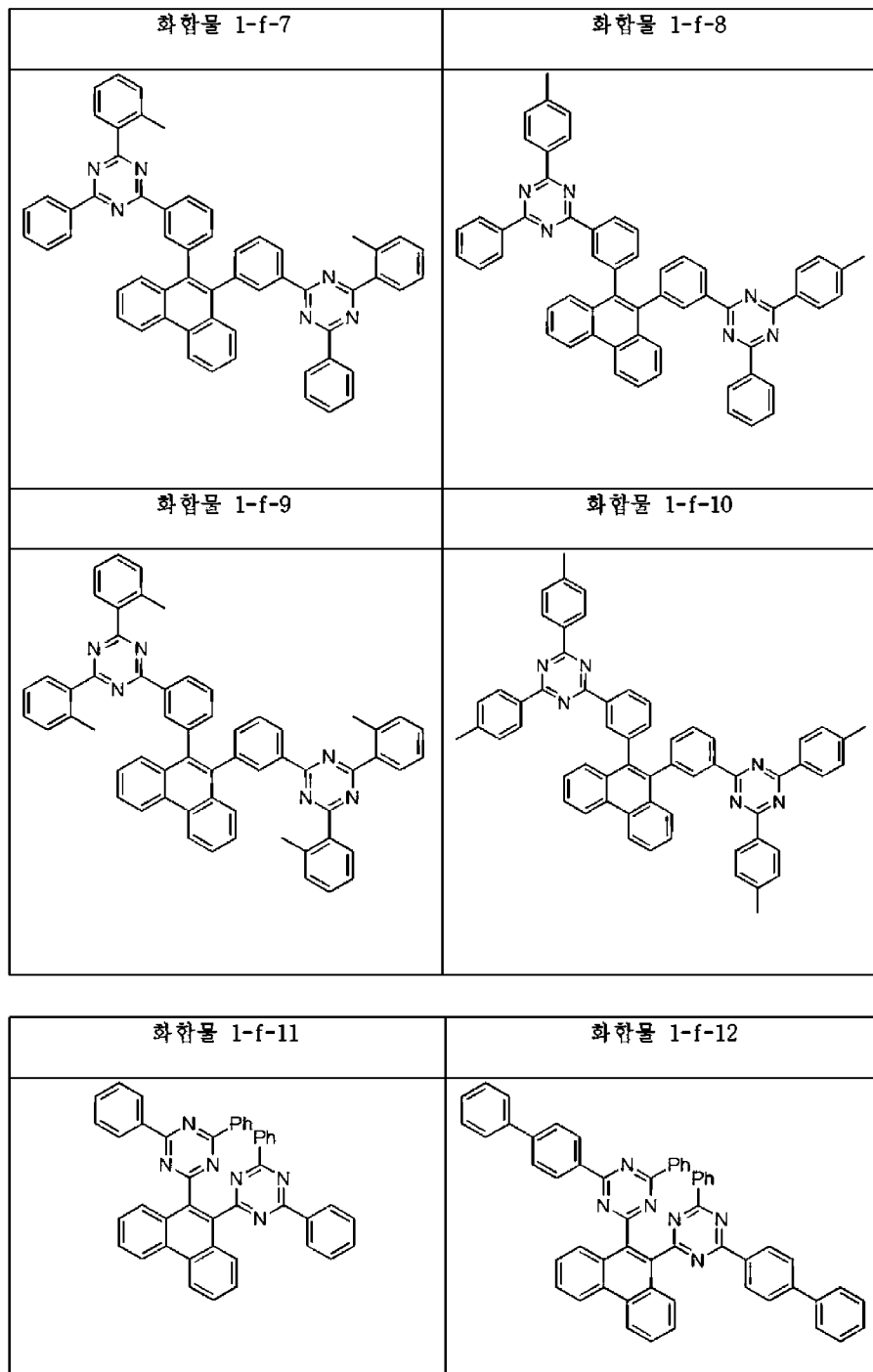


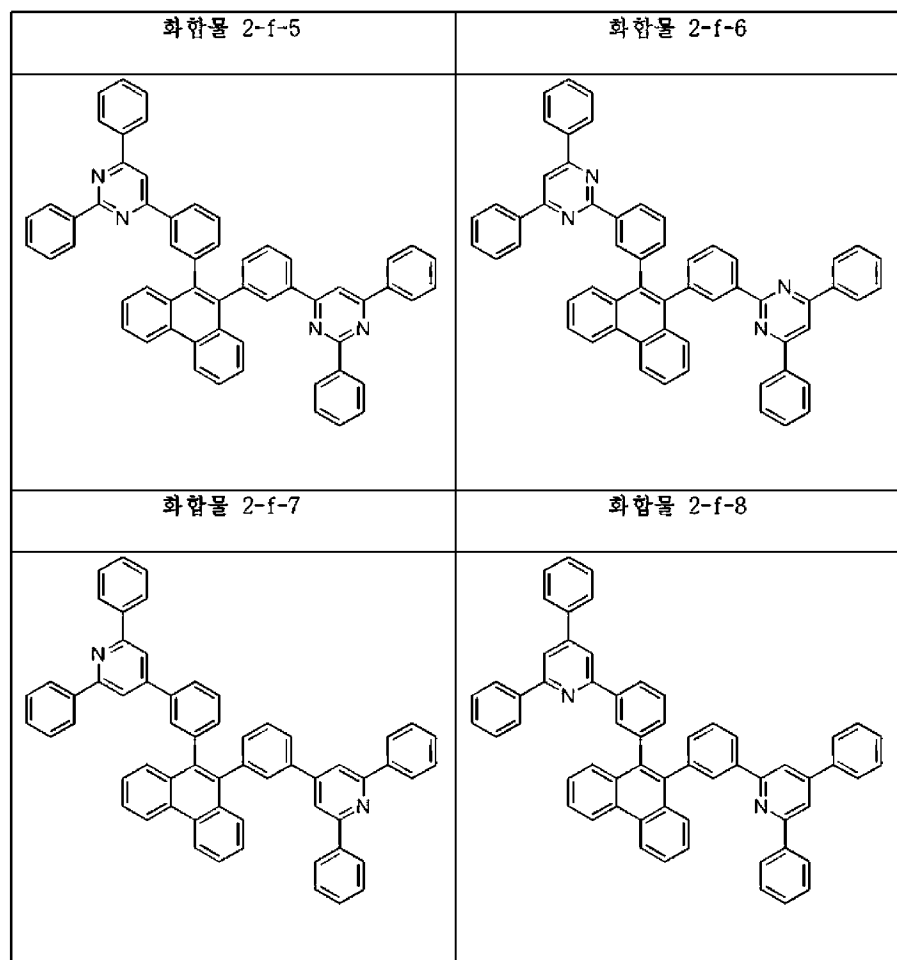
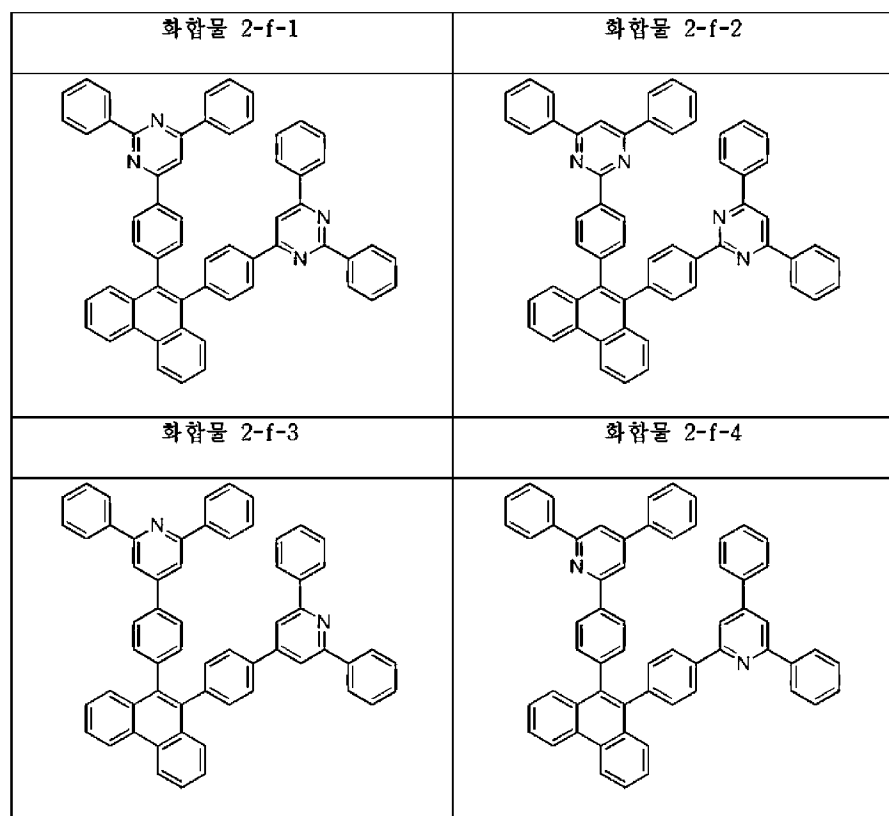


[청구항 11]

청구항 1에 있어서,
 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1-f-1 내지 1-f-12
 및 2-f-1 내지 2-f-8 중 어느 하나로 표시되는 것인 헤테로환 화합물.







- [청구항 12] 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전자 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 청구항 1 내지 11 중 어느 한 항에 따른 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전자 소자.
- [청구항 13] 청구항 12에 있어서,
상기 유기 전자 소자는 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 및 유기 트랜지스터로 이루어진 군에서 선택되는 것인 유기 전자 소자.
- [청구항 14] 청구항 12에 있어서,
상기 유기 전자 소자는 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전자 소자.
- [청구항 15] 청구항 14에 있어서,
상기 유기물층은 정공주입층 또는 정공수송층을 포함하고, 상기 정공주입층 또는 정공수송층이 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전자 소자.
- [청구항 16] 청구항 14에 있어서,
상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 헤테로환 화합물을 발광층의 호스트로서 포함하는 것인 유기 전자 소자.
- [청구항 17] 청구항 14에 있어서,
상기 유기물층은 전자수송층을 포함하고, 상기 전자수송층이 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전자 소자.
- [청구항 18] 청구항 14에 있어서,
상기 유기물층은 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 유기물층 이외에 아릴아미노기, 카바졸기 또는 벤즈카바졸기를 포함하는 화합물을 포함하는 정공주입층 또는 정공수송층을 포함하는 것인 유기 전자 소자.
- [청구항 19] 청구항 14에 있어서,
상기 헤테로환 화합물을 포함하는 유기물층은 상기 헤테로환 화합물을 호스트로서 포함하고, 다른 유기화합물, 금속 또는 금속화합물을 도판트로 포함하는 것인 유기 전자 소자.
- [청구항 20] 청구항 12에 있어서,
상기 유기 전자 소자는 제1 전극, 제2 전극 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 광활성층을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 태양 전지로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전자 소자.
- [청구항 21] 청구항 20에 있어서,

- 상기 유기물층은 전자수송층을 포함하고, 상기 전자수송층은 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전자 소자.
- [청구항 22] 청구항 20에 있어서,
상기 유기물층은 광활성층을 포함하고, 상기 광활성층은 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전자 소자.
- [청구항 23] 청구항 20에 있어서,
상기 유기물층은 전자 주개 및 전자 받개를 포함하고, 상기 전자 주개 또는 전자 받개는 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 유기 전자 소자.
- [청구항 24] 청구항 12에 있어서,
상기 유기 전자 소자는 소스, 드레인, 게이트 및 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 트랜지스터로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전자 소자.
- [청구항 25] 청구항 24에 있어서,
상기 유기물층은 전하 발생층을 포함하고, 상기 전하 발생층은 상기 헤테로환 화합물을 포함하는 것인 유기 전자 소자.

[Fig. 1]

4
3
2
1

[Fig. 2]

4
8
7
6
5
2
1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2013/004230

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 403/10(2006.01)i, C07D 407/14(2006.01)i, 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)

C07D 403/10; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 407/14

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: organic electronic device, bis-nitrogen containing heterocycles

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2011-081290 A2 (CHEIL INDUSTRIES INC.) 07 July 2011 See claims 1 to 13, the examples	1-25
X	WO 2011-005060 A2 (CHEIL INDUSTRIES INC.) 13 January 2011 See claims 1 to 14, the examples	1-25
A	KR 10-2012-0038032 A (SFC CO., LTD.) 23 April 2012 See the entire description	1-25

 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

30 SEPTEMBER 2013 (30.09.2013)

Date of mailing of the international search report

30 SEPTEMBER 2013 (30.09.2013)

Name and mailing address of the ISA/KR

Korean Intellectual Property Office
Government Complex-Daejeon, 189 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/KR2013/004230

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
WO 2011-081290 A2	07/07/2011	EP 2520632 A2	07/11/2012
		JP 2013-516405A	13/05/2013
		KR 10-2011-0079197 A	07/07/2011
		US 2012-0273771 A1	01/11/2012
		WO 2011-081290 A3	22/09/2011
		WO 2011-081290 A4	01/12/2011
		WO 2011-081290 A4	07/07/2011
		WO 2011-081290 A9	20/09/2012
		WO 2011-081290 A9	07/07/2011
		WO 2011-005060 A2	13/01/2011
EP 2452997 A2	16/05/2012		
KR 10-2011-0005666 A	18/01/2011		
US 2012-0104941 A1	03/05/2012		
WO 2011-005060 A3	28/04/2011		
WO 2011-005060 A9	26/10/2012		
WO 2011-005060 A9	13/01/2011		
KR 10-2012-0038032 A	23/04/2012	NONE	

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))
C07D 403/10(2006.01)i, C07D 407/14(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)
C07D 403/10; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 407/14

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: 유기전자소자, 비스 합질소 헤테로환

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	WO 2011-081290 A2 (제일모직 주식회사) 2011.07.07 청구항 제1항 내지 제13항, 실시예 참조	1-25
X	WO 2011-005060 A2 (제일모직 주식회사) 2011.01.13 청구항 제1항 내지 제14항, 실시예 참조	1-25
A	KR 10-2012-0038032 A (에스에프씨 주식회사) 2012.04.23 전체 명세서 참조	1-25

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

국제조사의 실제 완료일: 2013년 09월 30일 (30.09.2013)
국제조사보고서 발송일: 2013년 09월 30일 (30.09.2013)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소: 대한민국 특허청 (302-701) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-472-7140
 심사관: 신창훈
 전화번호 +82-42-481-8406

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
WO 2011-081290 A2	2011/07/07	EP 2520632 A2	2012/11/07
		JP 2013-516405A	2013/05/13
		KR 10-2011-0079197 A	2011/07/07
		US 2012-0273771 A1	2012/11/01
		WO 2011-081290 A3	2011/09/22
		WO 2011-081290 A4	2011/12/01
		WO 2011-081290 A4	2011/07/07
		WO 2011-081290 A9	2012/09/20
		WO 2011-081290 A9	2011/07/07
		WO 2011-005060 A2	2011/01/13
EP 2452997 A2	2012/05/16		
KR 10-2011-0005666 A	2011/01/18		
US 2012-0104941 A1	2012/05/03		
WO 2011-005060 A3	2011/04/28		
WO 2011-005060 A9	2012/10/26		
WO 2011-005060 A9	2011/01/13		
KR 10-2012-0038032 A	2012/04/23	없음	