



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2012-0125942  
(43) 공개일자 2012년11월19일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)  
(21) 출원번호 10-2011-0127858  
(22) 출원일자 2011년12월01일  
심사청구일자 없음  
(30) 우선권주장  
1020110043650 2011년05월09일 대한민국(KR)

(71) 출원인  
삼성디스플레이 주식회사  
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)  
에스에프씨 주식회사  
충청북도 청원군 오창읍 각리 653-9  
(72) 발명자  
박수진  
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)  
나이쵸 츠요시  
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
리엔목특허법인

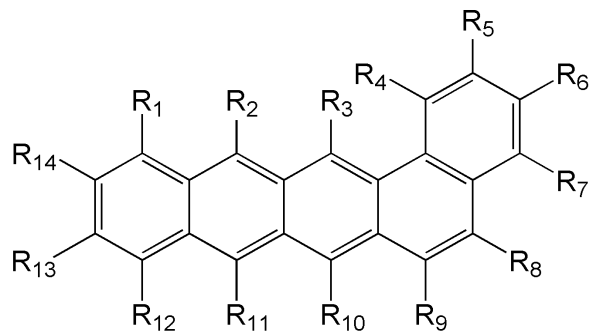
전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 신규한 화합물 및 이를 포함한 유기발광 소자

(57) 요약

본 발명은 하기 화학식 1 로 표시되는 화합물 및 이를 포함한 유기막을 구비한 유기 발광 소자에 관한 것이다:

<화학식 1>



상기 화학식에 대한 설명은 발명의 상세한 설명을 참조한다.

대표도 - 도1

|       |
|-------|
| 제2전극  |
| 전자주입층 |
| 전자수송층 |
| 발광층   |
| 정공수송층 |
| 정공주입층 |
| 제1전극  |

(72) 발명자

**최건하**

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

**심지혜**

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

**제종태**

충청북도 청주시 상당구 용암동 건영아파트  
106-801

**김정수**

충청남도 홍성군 홍성읍 월산로30번길 39, 202동  
401호 (부영아파트)

**권현중**

충청북도 청주시 흥덕구 사운로236번길 30 (운천동)

**신유나**

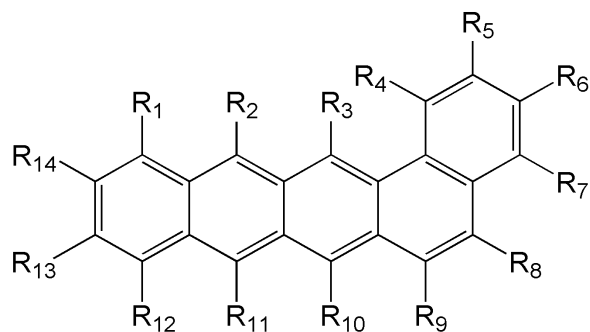
서울특별시 성북구 정릉로 305, 101동 1004호 (정릉동, 경남아파트)

## 특허청구의 범위

### 청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 탄소수 1 내지 60의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 2 내지 60의 치환 또는 비치환된 알케닐기, 탄소수 2 내지 60의 치환 또는 비치환된 알키닐기, 탄소수 3 내지 60의 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 탄소수 1 내지 60의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 탄소수 5 내지 60의 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 탄소수 5 내지 60의 치환 또는 비치환된 아릴싸이오기, 탄소수 5 내지 60의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 5 내지 60의 아릴기 또는 탄소수 3 내지 60의 헤테로아릴기로 치환된 아미노기, 탄소수 3 내지 60의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 60의 치환 또는 비치환된 축합 다환기, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 하이드록시기 또는 카복시기이다.

### 청구항 2

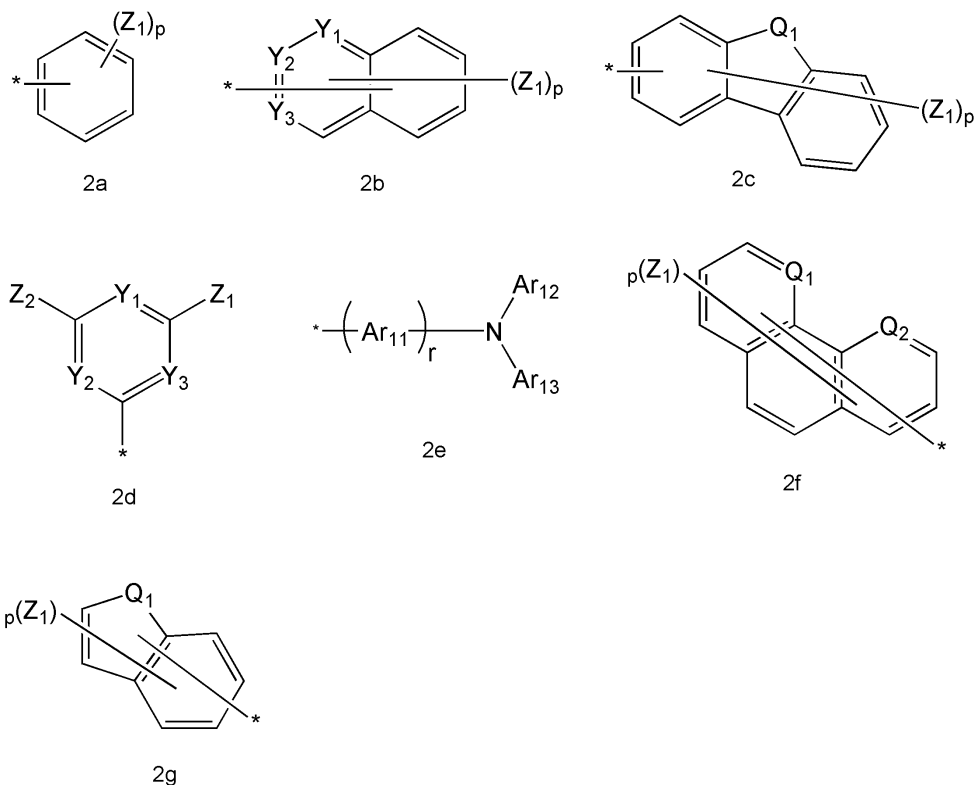
제 1 항에 있어서,

상기 화학식 1 식 중, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠, 탄소수 1 내지 30의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 5 내지 30의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 5 내지 30의 아릴기 또는 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기로 치환된 아미노기, 또는 탄소수 6 내지 30의 치환 또는 비치환된 축합 다환기인 화합물.

### 청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 화학식 1 중, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>14</sub>가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 하기 화학식 2a 내지 2g인 화합물:



상기 화학식 2a 내지 2g 중,

$Q_1$  및  $Q_2$ 는  $-C(R_{20})(R_{21})-$ ,  $-N(R_{20})-$ ,  $-S-$  또는  $-O-$ 로 표시되는 연결기들이고;

$Y_1$ ,  $Y_2$  및  $Y_3$ 는 서로 독립적으로,  $-N=$  또는  $-C(R_{22})=$ 로 표시되는 연결기들이고;

$Z_1$ ,  $Z_2$ ,  $Ar_{12}$ ,  $Ar_{13}$ ,  $R_{20}$ ,  $R_{21}$ , 및  $R_{22}$ 은 서로 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 20의 치환 또는 비치환된 축합 다환기, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복시기 또는 치환된 실릴기이고, 여기서, 인접한  $Ar_{12}$  및  $Ar_{13}$  또는 인접한  $R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 서로 융합되거나 단일 결합으로 연결될 수 있으며;

$Ar_{11}$ 은 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 또는 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고;

$p$ 는 1 내지 12의 정수이고;

$r$ 은 0 내지 5의 정수이고;

$*$ 는 결합을 나타낸다.

#### 청구항 4

제 1 항에 있어서,

상기 화학식 1 중,  $R_1$ ,  $R_3$ ,  $R_4$ ,  $R_7$ ,  $R_{10}$ ,  $R_{12}$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소 또는 중수소인 화합물.

#### 청구항 5

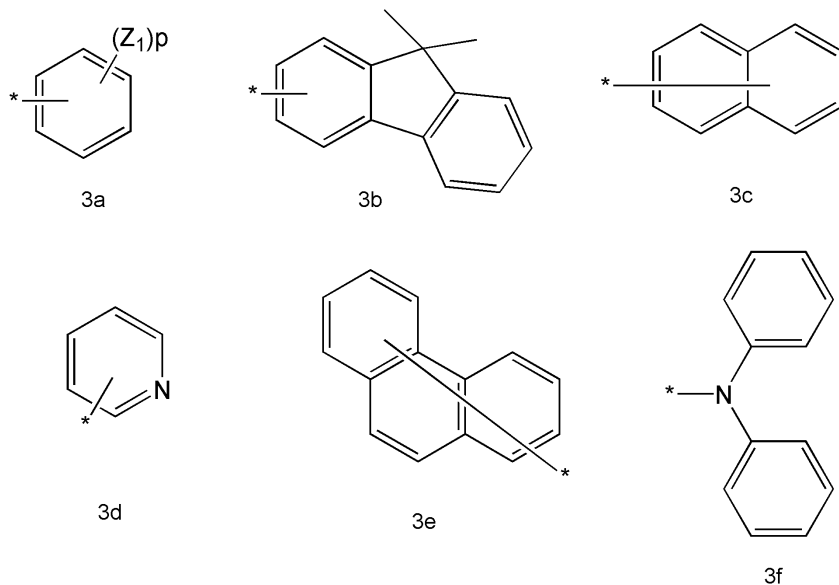
제 1 항에 있어서,

상기 화학식 1 중,  $R_2$  및  $R_{11}$ 이 동일한 치환기인 화합물.

#### 청구항 6

제 1 항에 있어서,

$R_1$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 30의 치환 또는 비치환된 축합 다환기, 또는 하기 화학식 3a 내지 3f인 화합물:



상기 화학식 3a 내지 3f 중,

$Z_1$ 는 수소 원자, 중수소, 또는 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기이고;

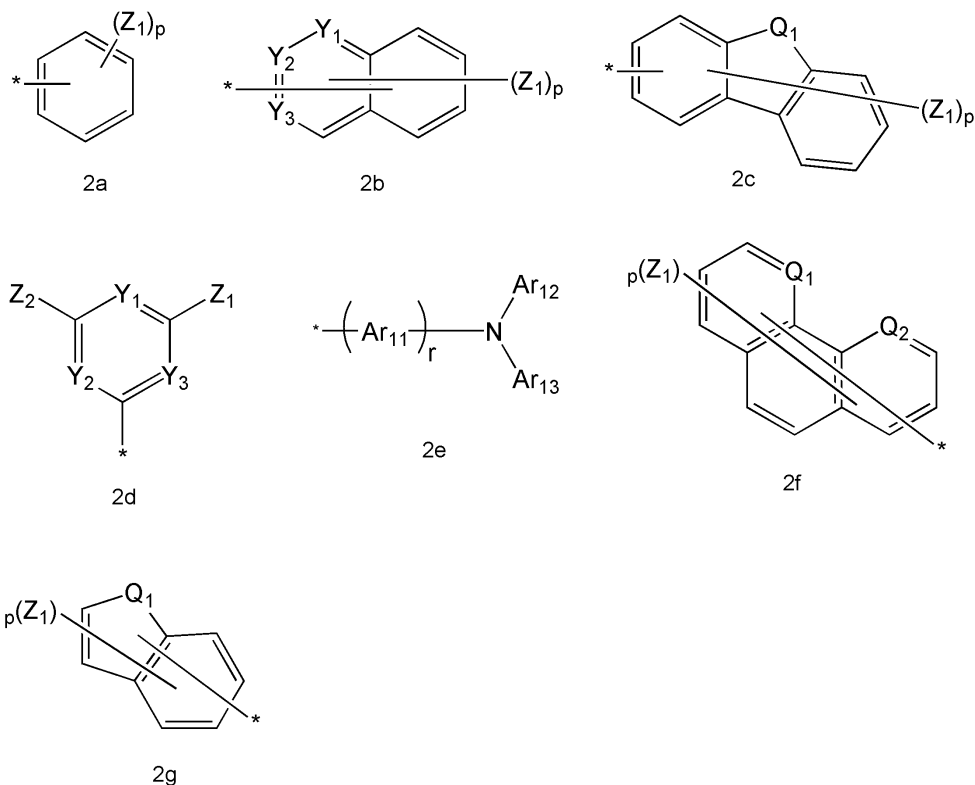
p는 1 내지 5의 정수이고;

\*는 결합을 나타낸다.

## 청구항 7

제 1 항에 있어서,

상기 화학식 1 중,  $R_1$ ,  $R_3$ ,  $R_4$ ,  $R_7$ ,  $R_{10}$ ,  $R_{12}$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소 또는 중수소이고,  $R_2$ ,  $R_5$ ,  $R_6$ ,  $R_8$ ,  $R_9$  및  $R_{11}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 하기 화학식 2a 내지 2g인 화합물:



상기 화학식 2a 내지 2g 중,

$Q_1$  및  $Q_2$ 는  $-C(R_{20})(R_{21})-$ ,  $-N(R_{20})-$ ,  $-S-$  또는  $-O-$ 로 표시되는 연결기들이고;

$Y_1$ ,  $Y_2$  및  $Y_3$ 는 서로 독립적으로,  $-N=$  또는  $-C(R_{22})=$ 로 표시되는 연결기들이고;

$Z_1$ ,  $Z_2$ ,  $Ar_{12}$ ,  $Ar_{13}$ ,  $R_{20}$ ,  $R_{21}$ , 및  $R_{22}$ 은 서로 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 20의 치환 또는 비치환된 축합 다환기, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복시기 또는 치환된 실릴기이고, 여기서, 인접한  $Ar_{12}$  및  $Ar_{13}$  또는 인접한  $R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 서로 융합되거나 단일 결합으로 연결될 수 있으며;

$Ar_{11}$ 은 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 또는 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고;

$p$ 는 1 내지 12의 정수이고;

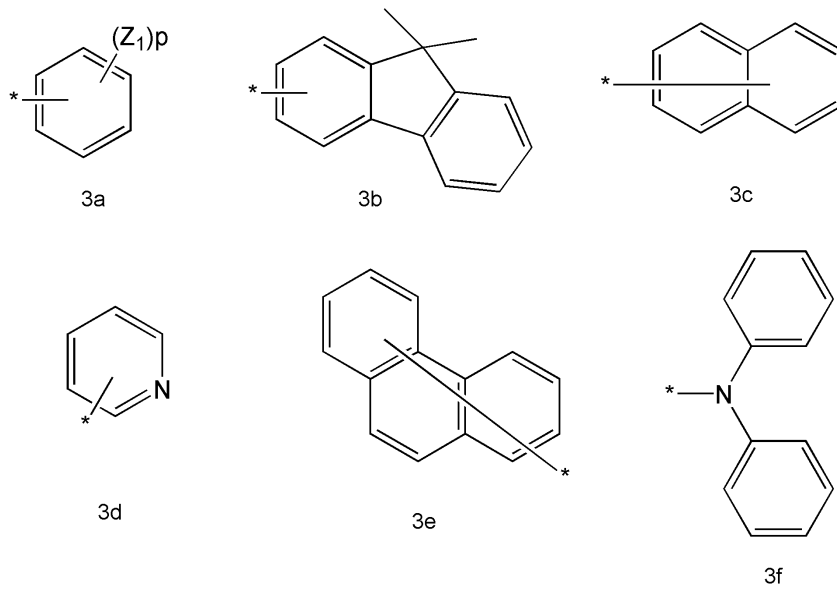
$r$ 은 0 내지 5의 정수이고;

$*$ 는 결합을 나타낸다.

## 청구항 8

제 1 항에 있어서,

상기 화학식 1 중,  $R_1$ ,  $R_3$ ,  $R_4$ ,  $R_7$ ,  $R_{10}$ ,  $R_{12}$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소 또는 중수소이고,  $R_2$ ,  $R_5$ ,  $R_6$ ,  $R_8$ ,  $R_9$  및  $R_{11}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 하기 화학식 3a 내지 3f인 화합물:



상기 화학식 3a 내지 3f 중,

Z<sub>1</sub>는 수소 원자, 중수소 또는 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기이고;

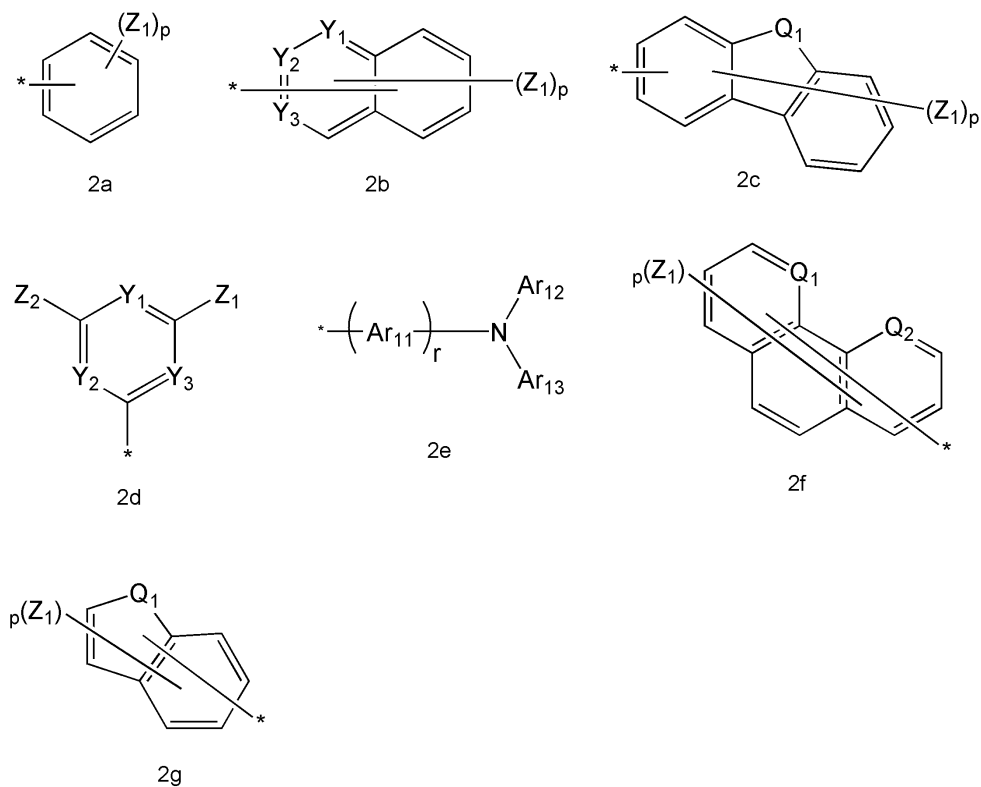
p는 1 내지 5의 정수이고;

\*는 결합을 나타낸다.

### 청구항 9

제 1 항에 있어서,

상기 화학식 1 중, R<sub>1</sub>, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>10</sub>, R<sub>12</sub> 내지 R<sub>14</sub>가 서로 독립적으로, 수소 또는 중수소이고, R<sub>2</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>8</sub>, R<sub>9</sub> 및 R<sub>11</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 하기 화학식 2a 내지 2g이며, R<sub>2</sub> 및 R<sub>11</sub>이 동일한 치환기인 화합물:



상기 화학식 2a 내지 2g 중,

$Q_1$  및  $Q_2$ 는  $-C(R_{20})(R_{21})-$ ,  $-N(R_{20})-$ ,  $-S-$  또는  $-O-$ 로 표시되는 연결기들이고;

$Y_1$ ,  $Y_2$  및  $Y_3$ 는 서로 독립적으로,  $-N=$  또는  $-C(R_{22})=$ 로 표시되는 연결기들이고;

$Z_1$ ,  $Z_2$ ,  $Ar_{12}$ ,  $Ar_{13}$ ,  $R_{20}$ ,  $R_{21}$ , 및  $R_{22}$ 은 서로 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 20의 치환 또는 비치환된 축합 다환기, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복시기 또는 치환된 실릴기이고, 여기서, 인접한  $Ar_{12}$  및  $Ar_{13}$  또는 인접한  $R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 서로 융합되거나 단일 결합으로 연결될 수 있으며;

$Ar_{11}$ 은 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 또는 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고;

$p$ 는 1 내지 12의 정수이고;

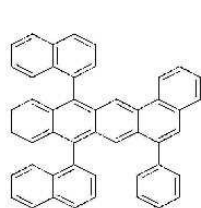
$r$ 은 0 내지 5의 정수이고;

\*는 결합을 나타낸다.

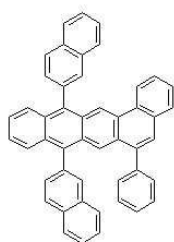
## 청구항 10

제 1 항에 있어서,

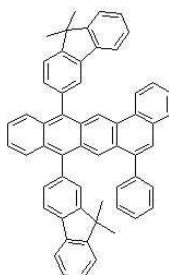
상기 화학식 1의 화합물이 하기 화합물들 중 하나인 화합물:



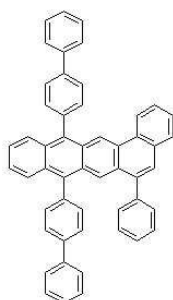
10



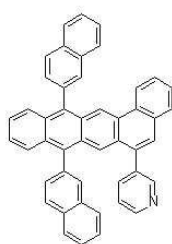
24



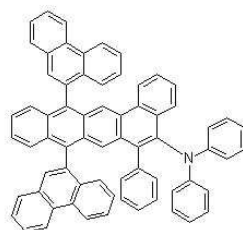
28



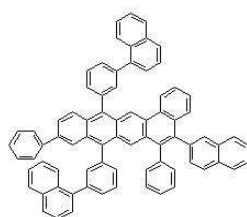
29



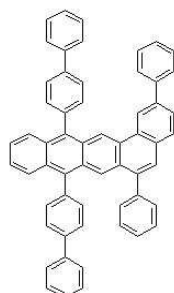
83



144



231



330

#### 청구항 11

제 1 전극;

제 2 전극; 및

상기 제 1 전극 및 제 2 전극 사이에 개재된 유기층을 구비한 유기 발광 소자로서,

상기 유기층이 제 1 항의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.

#### 청구항 12

제 11 항에 있어서,

상기 유기층이 정공주입층, 정공수송층, 정공주입 및 정공수송기능을 동시에 갖는 기능층, 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 전자수송기능을 동시에 갖는 기능층인 유기 발광 소자.

#### 청구항 13

제 11 항에 있어서,

상기 유기 발광 소자가 전자 수송성 유기 물질 및 금속-함유 물질을 포함하는 전자 수송층을 포함하는 유기 발광 소자.

#### 청구항 14

제 11 항에 있어서,

상기 유기층이 발광층이며 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 형광 또는 인광 호스트로 사용되는 유기 발광 소자.

#### 청구항 15

제 11 항에 있어서,

상기 유기 발광 소자가 발광층, 정공수송층 및 전자수송층을 포함하고,

상기 발광층은 안트라센 화합물, 아릴아민 화합물 또는 스티릴 화합물을 더 포함하는 유기 발광 소자.

#### 청구항 16

제 11 항에 있어서,

상기 유기 발광 소자가 발광층, 정공수송층 및 전자수송층을 포함하고,

상기 발광층의 적색층, 녹색층, 청색층 또는 흰색층의 어느 한 층은 인광 화합물을 더 포함하는 유기 발광 소자.

#### 청구항 17

제 11 항에 있어서,

상기 유기층이 적색 발광층인 유기 발광 소자.

#### 청구항 18

제 11 항에 있어서,

상기 유기층이 적색 발광층이며,

상기 화학식 1의 화합물이 적색 호스트로 사용되는 유기 발광 소자.

#### 청구항 19

제 11 항에 있어서,

상기 유기층이 제 1 항의 화합물을 사용하여 습식 공정으로 형성되는 유기 발광 소자.

## 청구항 20

제 11 항의 유기 발광 소자를 구비하고,

상기 유기 발광 소자의 제 1 전극이 박막 트랜지스터의 소스 전극 또는 드레인 전극과 전기적으로 연결된 평판 표시 장치.

## 명세서

### 기술 분야

[0001] 화학식 1로 표시되는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0002] 최근 표시장치의 대형화에 따라 공간 점유가 작은 평면표시소자의 요구가 증대되고 있는데, 대표적인 평면표시 소자인 액정 디스플레이는 기존의 CRT (cathode ray tube)에 비해 경량화가 가능하다는 장점은 있으나, 시야각 (viewing angle)이 제한되고 배면 광(back light)이 반드시 필요하다는 등의 단점을 갖고 있다. 이에 반하여, 새로운 평면표시소자인 유기전계발광소자(organic light emitting diode, OLED)는 자기 발광 현상을 이용한 디스플레이로서, 시야각이 크고, 액정 디스플레이에 비해 경박, 단소해질 수 있으며, 빠른 응답 속도 등의 장점을 가지고 있으며, 최근에는 풀-컬러(full-color) 디스플레이 또는 조명으로의 응용이 기대되고 있다.

[0003] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다.

[0004] 유기 발광 현상을 이용하는 유기전계발광소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기전계발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기전계발광소자의 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. 이러한 유기전계발광소자는 자발광, 고휘도, 고효율, 낮은 구동전압, 넓은 시야각, 높은 콘트라스트, 고속 응답성 등의 특성을 갖는 것으로 알려져 있다.

### 발명의 내용

#### 해결하려는 과제

[0005] 본 발명의 일 측면은 구동전압이 낮고 발광효율이 우수한 특성을 갖는 신규한 화합물을 제공하는 것이다.

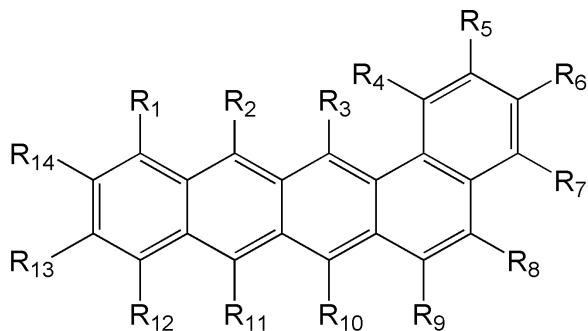
[0006] 본 발명의 다른 측면은 상기 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공하는 것이다.

[0007] 본 발명의 또다른 측면은 상기 유기 발광 소자를 구비한 평판 표시 장치를 제공하는 것이다.

#### 과제의 해결 수단

[0008] 본 발명의 일 측면에 따라, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물이 제공된다:

[0009] <화학식 1>



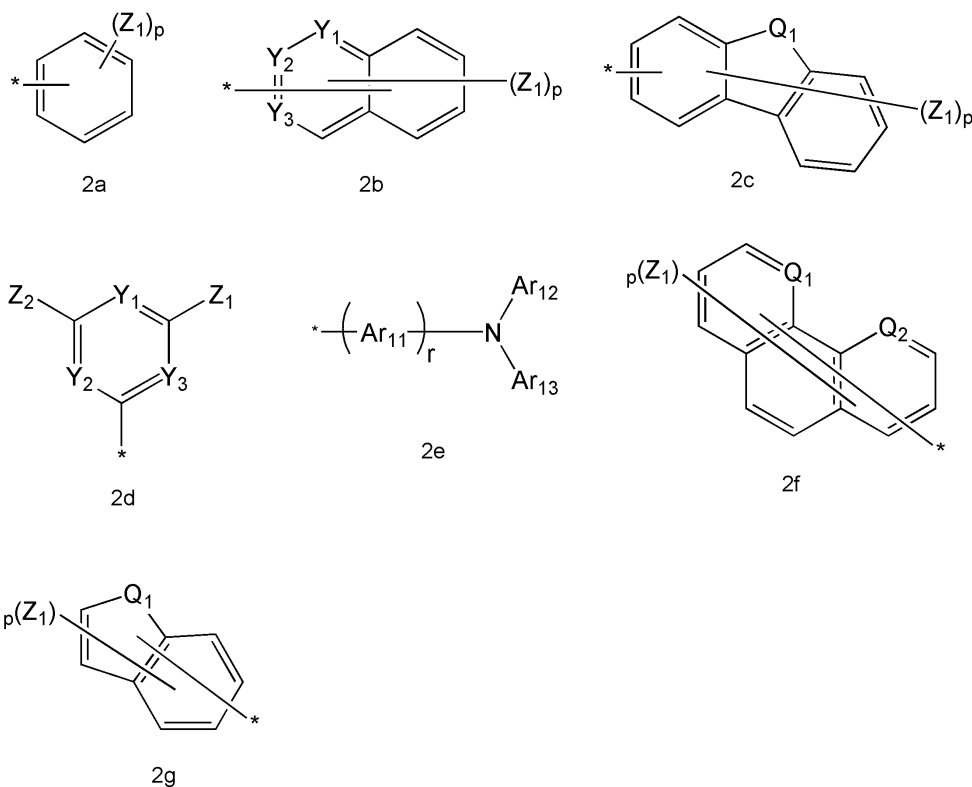
[0010]

[0011] 상기 화학식 1 중,

[0012]  $R_1$  내지  $R_{14}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 탄소수 1 내지 60의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 2 내지 60의 치환 또는 비치환된 알케닐기, 탄소수 2 내지 60의 치환 또는 비치환된 알키닐기, 탄소수 3 내지 60의 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 탄소수 1 내지 60의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 탄소수 5 내지 60의 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 탄소수 5 내지 60의 치환 또는 비치환된 아릴싸이오기, 탄소수 5 내지 60의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 5 내지 60의 아릴기 또는 탄소수 3 내지 60의 헤테로아릴기로 치환된 아미노기, 탄소수 3 내지 60의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 60의 치환 또는 비치환된 축합 다환기, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 하이드록시기 또는 카복시기일 수 있다.

[0013] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 식 중,  $R_1$  내지  $R_{14}$ 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 시아노기, 할로겐, 탄소수 1 내지 30의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 5 내지 30의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 5 내지 30의 아릴기 또는 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기로 치환된 아미노기, 또는 탄소수 6 내지 30의 치환 또는 비치환된 축합 다환기일 수 있다.

[0014] 본 발명의 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,  $R_1$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 하기 화학식 2a 내지 2g일 수 있다:



[0015]

[0016] 상기 화학식 2a 내지 2g 중,  $Q_1$  및  $Q_2$ 는  $-C(R_{20})(R_{21})-$ ,  $-N(R_{20})-$ ,  $-S-$  또는  $-O-$ 로 표시되는 연결기들이고;  $Y_1$ ,  $Y_2$

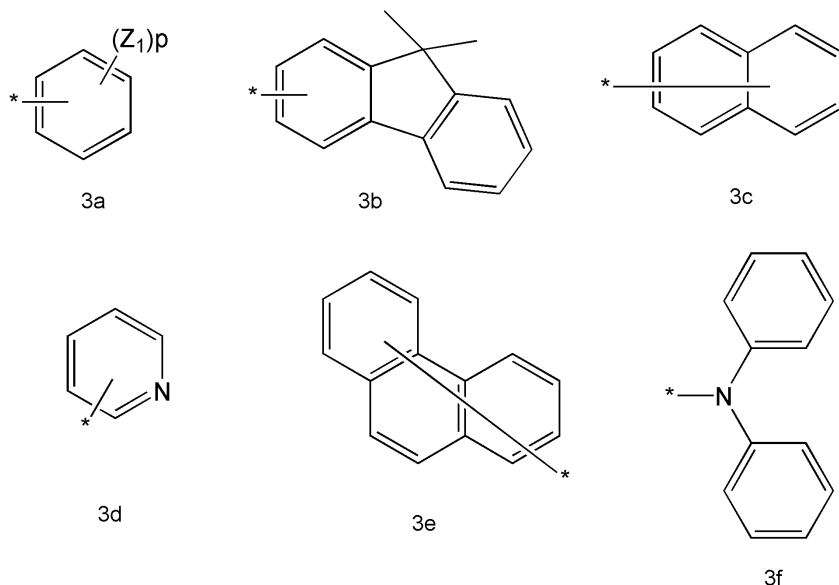
및  $Y_3$ 는 서로 독립적으로,  $-N=$  또는  $-C(R_{22})=$ 로 표시되는 연결기들이고;  $Z_1$ ,  $Z_2$ ,  $Ar_{12}$ ,  $Ar_{13}$ ,  $R_{20}$ ,  $R_{21}$ , 및  $R_{22}$ 은 서로 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 20의 치환 또는 비치환된 축합 다환기, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복시기 또는 치환된 실릴기이고, 여기서, 인접한  $Ar_{12}$  및  $Ar_{13}$  또는 인접한  $R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 서로 융합되거나 단일 결합으로 연결될 수 있으며;

$Ar_{11}$ 은 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 또는 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고;  $p$ 는 1 내지 12의 정수이고;  $r$ 은 0 내지 5의 정수이고; \*는 결합을 나타낸다.

[0017] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,  $R_1$ ,  $R_3$ ,  $R_4$ ,  $R_7$ ,  $R_{10}$ ,  $R_{12}$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소 또는 중수소일 수 있다.

[0018] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,  $R_2$  및  $R_{11}$ 이 동일한 치환기일 수 있다.

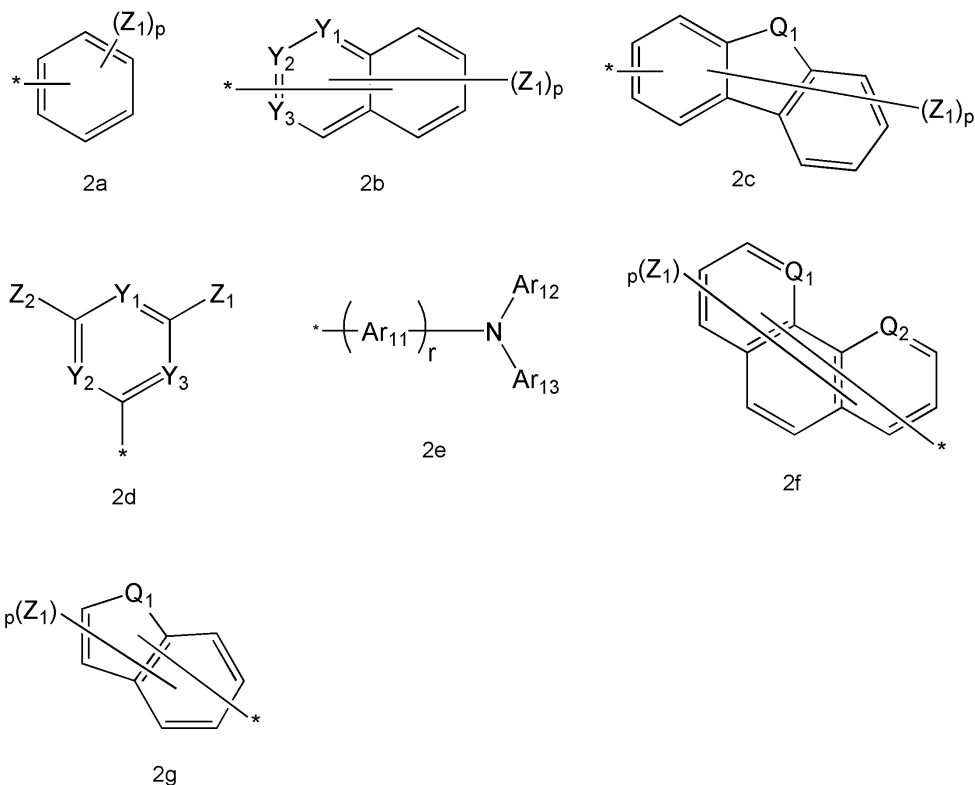
[0019] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면,  $R_1$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 30의 치환 또는 비치환된 축합 다환기, 또는 하기 화학식 3a 내지 3f일 수 있다:



[0020]

[0021] 상기 화학식 3a 내지 3f 중,  $Z_1$ 는 수소 원자, 중수소, 또는 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기이고;  $p$ 는 1 내지 5의 정수이고; \*는 결합을 나타낸다.

[0022] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,  $R_1$ ,  $R_3$ ,  $R_4$ ,  $R_7$ ,  $R_{10}$ ,  $R_{12}$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소 또는 중수소이고,  $R_2$ ,  $R_5$ ,  $R_6$ ,  $R_8$ ,  $R_9$  및  $R_{11}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 하기 화학식 2a 내지 2g일 수 있다:



[0023]

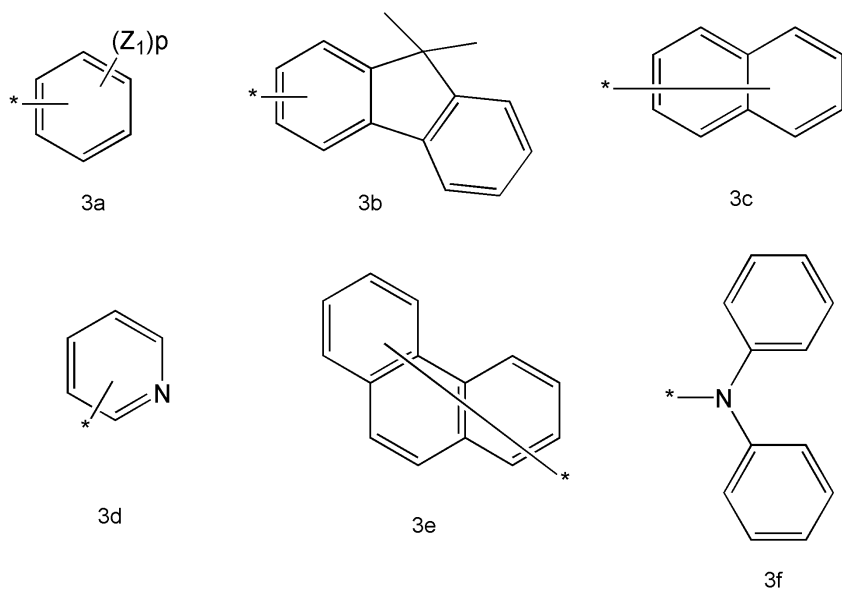
[0024]

상기 화학식 2a 내지 2g 중,  $Q_1$  및  $Q_2$ 는  $-C(R_{20})(R_{21})-$ ,  $-N(R_{20})-$ ,  $-S-$  또는  $-O-$ 로 표시되는 연결기들이고;  $Y_1$ ,  $Y_2$  및  $Y_3$ 는 서로 독립적으로,  $-N=$  또는  $-C(R_{22})=$ 로 표시되는 연결기들이고;  $Z_1$ ,  $Z_2$ ,  $Ar_{12}$ ,  $Ar_{13}$ ,  $R_{20}$ ,  $R_{21}$ , 및  $R_{22}$ 은 서로 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 20의 치환 또는 비치환된 축합 다환기, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복시기 또는 치환된 실릴기이고, 여기서, 인접한  $Ar_{12}$  및  $Ar_{13}$  또는 인접한  $R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 서로 융합되거나 단일 결합으로 연결될 수 있으며;

$Ar_{11}$ 은 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 또는 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고;  $p$ 는 1 내지 12의 정수이고;  $r$ 은 0 내지 5의 정수이고; \*는 결합을 나타낸다.

[0025]

본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,  $R_1$ ,  $R_3$ ,  $R_4$ ,  $R_7$ ,  $R_{10}$ ,  $R_{12}$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소 또는 중수소이고,  $R_2$ ,  $R_5$ ,  $R_6$ ,  $R_8$ ,  $R_9$  및  $R_{11}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 하기 화학식 3a 내지 3f일 수 있다:



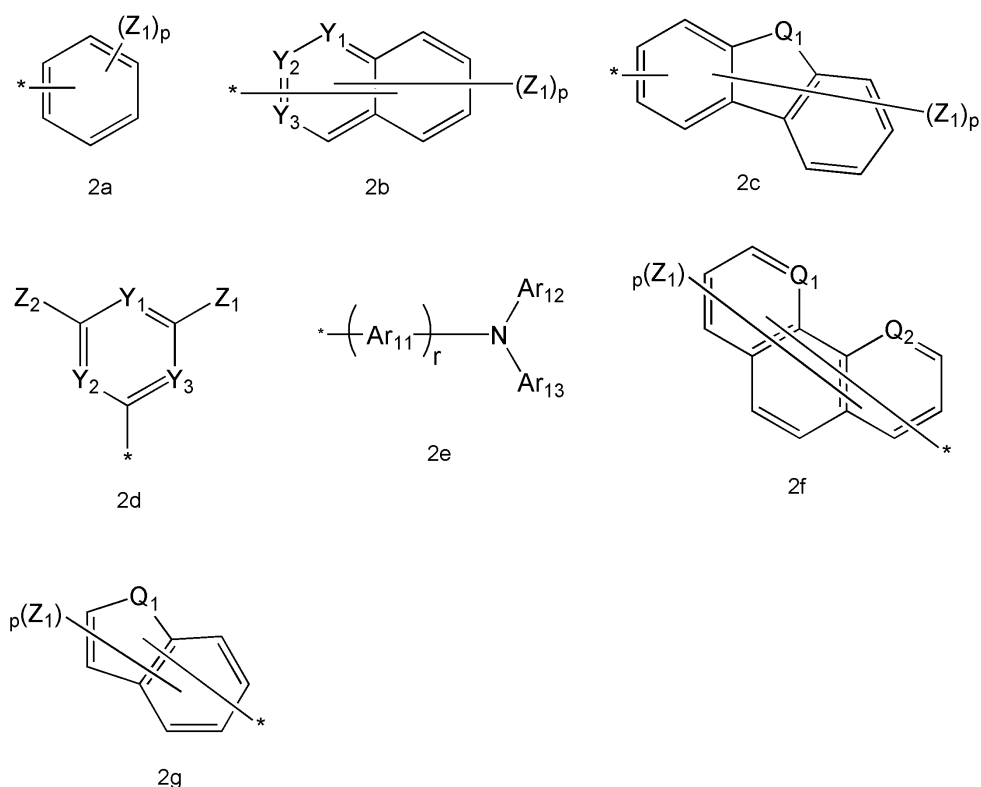
[0026]

[0027]

상기 화학식 3a 내지 3f 중,  $Z_1$ 는 수소 원자, 중수소 또는 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기이고;  $p$ 는 1 내지 5의 정수이고; \*는 결합을 나타낸다.

[0028]

본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,  $R_1$ ,  $R_3$ ,  $R_4$ ,  $R_7$ ,  $R_{10}$ ,  $R_{12}$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소 또는 중수소이고,  $R_2$ ,  $R_5$ ,  $R_6$ ,  $R_8$ ,  $R_9$  및  $R_{11}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 하기 화학식 2a 내지 2g이며,  $R_2$  및  $R_{11}$ 이 동일한 치환기일 수 있다:



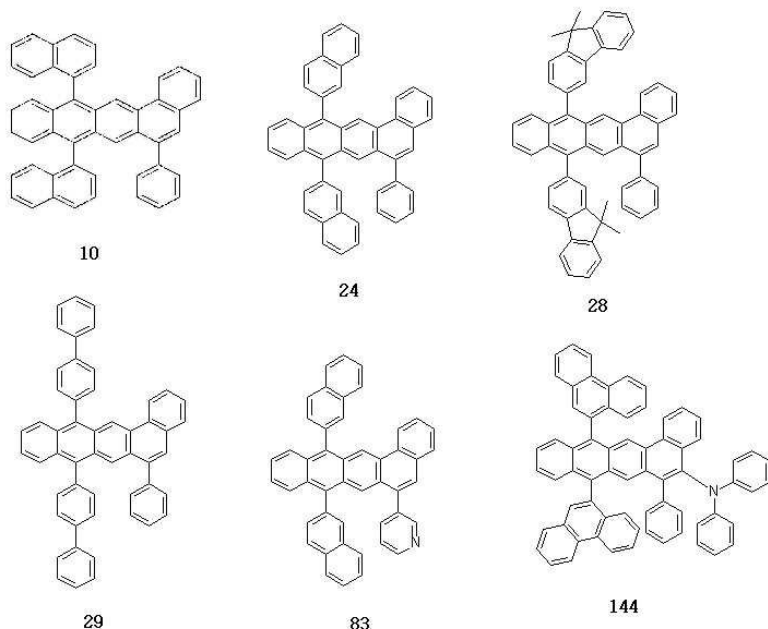
[0029]

[0030]

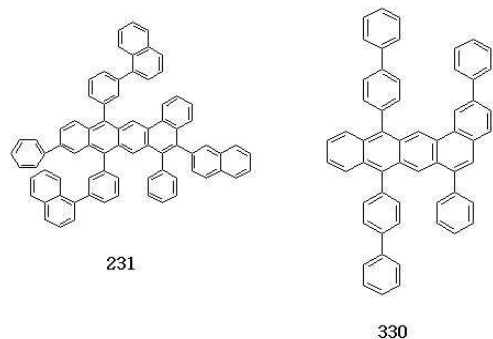
상기 화학식 2a 내지 2g 중,  $Q_1$  및  $Q_2$ 는  $-C(R_{20})(R_{21})-$ ,  $-N(R_{20})-$ ,  $-S-$  또는  $-O-$ 로 표시되는 연결기들이고;  $Y_1$ ,  $Y_2$  및  $Y_3$ 는 서로 독립적으로,  $-N=$  또는  $-C(R_{22})=$ 로 표시되는 연결기들이고;  $Z_1$ ,  $Z_2$ ,  $Ar_{12}$ ,  $Ar_{13}$ ,  $R_{20}$ ,  $R_{21}$ , 및  $R_{22}$ 은 서로 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 20의 치환 또는

비치환된 축합 다환기, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복시기 또는 치환된 실릴기이고, 여기서, 인접한  $Ar_{12}$  및  $Ar_{13}$  또는 인접한  $R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 서로 융합되거나 단일 결합으로 연결될 수 있으며;  $Ar_{11}$ 은 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 또는 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고;  $p$ 는 1 내지 12의 정수이고;  $r$ 은 0 내지 5의 정수이고; \*는 결합을 나타낸다.

[0031] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1의 화합물이 하기 화합물들 중 하나일 수 있다:



[0032]



[0033]

[0034] 본 발명의 다른 측면에 따라, 제 1 전극; 제 2 전극; 및 상기 제 1 전극 및 제 2 전극 사이에 개재된 유기층을 구비한 유기 발광 소자로서, 상기 유기층이 제 1 항의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자가 제공된다.

[0035] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 유기층이 정공주입층, 정공수송층, 정공주입 및 정공수송기능을 동시에 갖는 기능층, 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 전자수송기능을 동시에 갖는 기능층일 수 있다.

[0036] 본 발명의 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자가 전자 수송성 유기 물질 및 금속-함유 물질을 포함하는 전자 수송층을 포함할 수 있다.

[0037] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기층이 발광층이며 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 형광 또는 인광 호스트로 사용될 수 있다.

[0038] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자가 발광층, 정공수송층 및 전자수송층을 포함하고, 상기 발광층은 안트라센 화합물, 아릴아민 화합물 또는 스티릴 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0039] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자가 발광층, 정공수송층 및 전자수송층을 포함하고, 상기 발광층의 적색층, 녹색층, 청색층 또는 흰색층의 어느 한 층은 인광 화합물을 더 포함할 수 있다.

- [0040] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기층이 적색 발광층일 수 있다.
- [0041] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기층이 적색 발광층이며, 상기 화학식 1의 화합물이 적색 호스트로 사용될 수 있다.
- [0042] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기층이 상기 화학식 1의 화합물을 사용하여 습식 공정으로 형성될 수 있다.
- [0043] 본 발명의 또 다른 측면에 따라, 상기 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 유기 발광 소자의 제 1 전극이 박막 트랜지스터의 소스 전극 또는 드레인 전극과 전기적으로 연결된 평판 표시 장치가 제공된다.

### 발명의 효과

- [0044] 본 발명의 일 구현예에 따른 신규한 화합물은 기존 물질에 비하여 안정적이고 우수한 발광 특성을 가지므로 이를 포함하는 유기 발광 소자는 저전압 구동이 가능하고 발광 효율을 개선시킬 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

- [0045] 도 1은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 구조를 나타낸 도면이다.

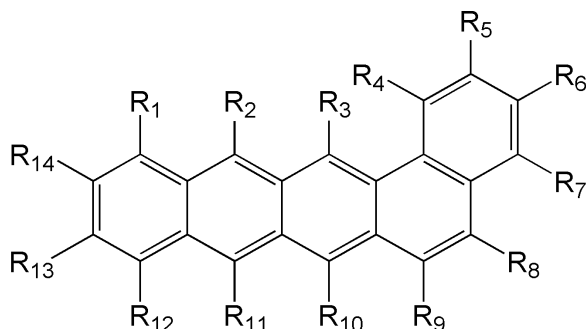
### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0046] 유기전계발광소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전자수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다. 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.
- [0047] 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 시스템을 사용할 수 있다.
- [0048] 그 원리는 발광층을 형성하는 호스트보다 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.
- [0049] 유기전계발광소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 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 유기전계발광소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서, 당 기술분야에서는 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있는 실정이다.

- [0050] 이하에서 본 발명을 상세하게 설명하기로 한다.

- [0051] 본 발명의 일 측면에 따라, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물이 제공된다:

- [0052] <화학식 1>



- [0053]

[0054] 상기 화학식 1 중,

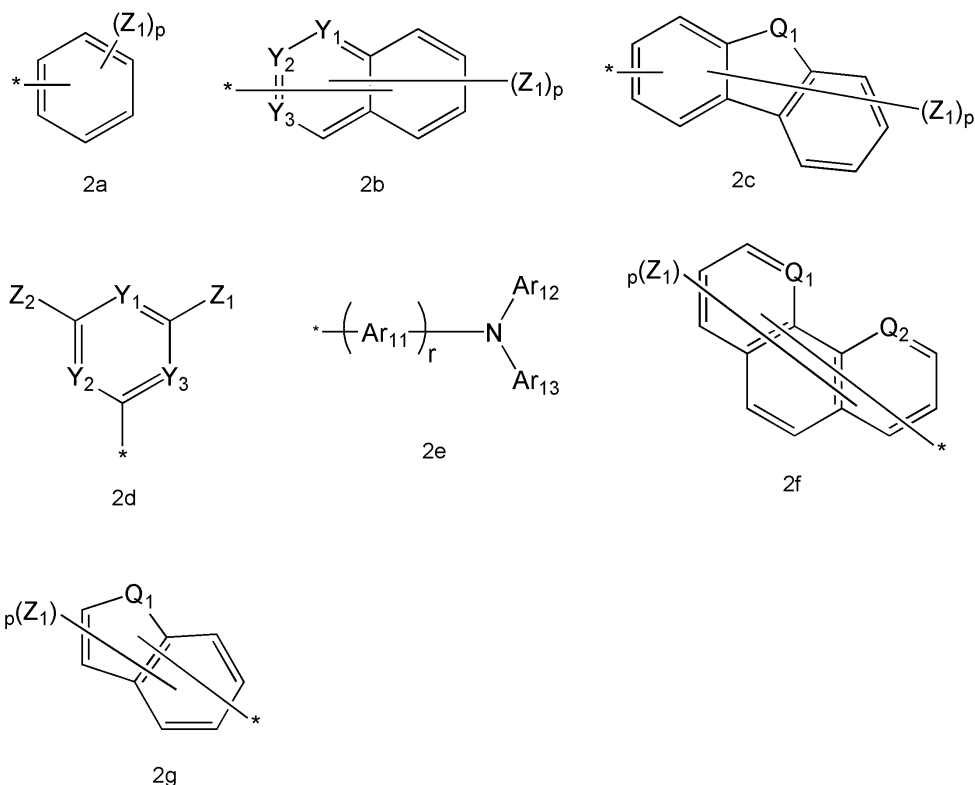
[0055]  $R_1$  내지  $R_{14}$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 탄소수 1 내지 60의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 2 내지 60의 치환 또는 비치환된 알케닐기, 탄소수 2 내지 60의 치환 또는 비치환된 알키닐기, 탄소수 3 내지 60의 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기, 탄소수 1 내지 60의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 탄소수 5 내지 60의 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 탄소수 5 내지 60의 치환 또는 비치환된 아릴싸이오기, 탄소수 5 내지 60의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 5 내지 60의 아릴기 또는 탄소수 3 내지 60의 헤테로아릴기로 치환된 아미노기, 탄소수 3 내지 60의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 60의 치환 또는 비치환된 축합 다환기, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 하이드록시기 또는 카르복시기이다.

[0056] 본 발명에 일 구현예에 따른 상기 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자용 발광 재료로서의 기능을 가진다. 상기 화학식 1과 같은 형태의 화합물들은 안정적이고 발광 특성이 우수하다. 본 발명에 일 구현예에 따른 상기 화학식 1의 화합물을 이용하여 제조된 유기 전계 발광 소자는 저전압 구동이 가능하고, 발광 효율이 개선된다.

[0057] 상기 화학식 1의 화합물의 치환기에 대해서 좀 더 상세히 서술한다.

[0058] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1식 중,  $R_1$  내지  $R_{14}$ 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 시아노기, 할로겐, 탄소수 1 내지 30의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 5 내지 30의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 5 내지 30의 아릴기 또는 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기로 치환된 아미노기, 또는 탄소수 6 내지 30의 치환 또는 비치환된 축합 다환기일 수 있다.

[0059] 본 발명의 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,  $R_1$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 하기 화학식 2a 내지 2g일 수 있다:



[0060]

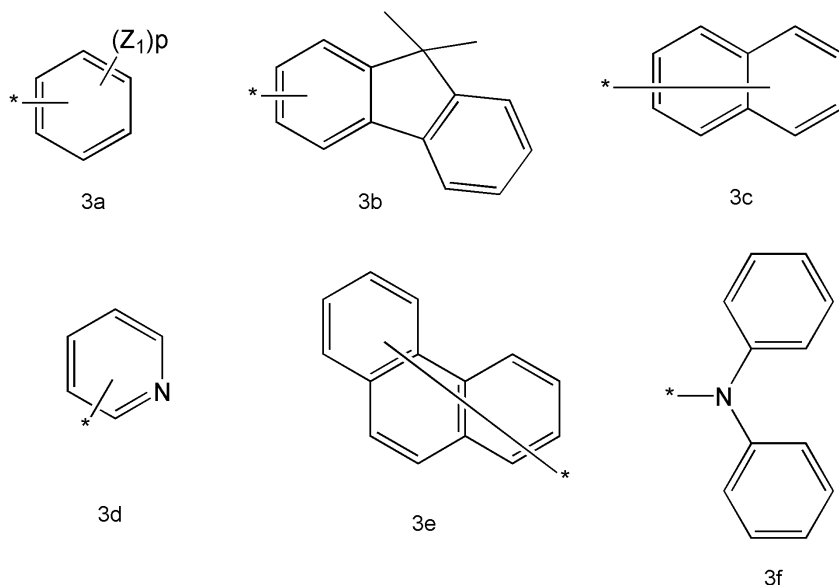
[0061] 상기 화학식 2a 내지 2g 중,  $Q_1$  및  $Q_2$ 는  $-C(R_{20})(R_{21})-$ ,  $-N(R_{20})-$ ,  $-S-$  또는  $-O-$ 로 표시되는 연결기들이고;  $Y_1$ ,  $Y_2$  및  $Y_3$ 는 서로 독립적으로,  $-N=$  또는  $-C(R_{22})=$ 로 표시되는 연결기들이고;  $Z_1$ ,  $Z_2$ ,  $Ar_{12}$ ,  $Ar_{13}$ ,  $R_{20}$ ,  $R_{21}$ , 및  $R_{22}$ 은 서로 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 20의 치환 또는 비치환된 축합 다환기, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복시기 또는 치환된 실릴기이고, 여기서, 인접한  $Ar_{12}$  및  $Ar_{13}$  또는 인접한  $R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 서로 융합되거나 단일 결합으로 연결될 수 있으며;  $Ar_{11}$ 은 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 또는 탄

소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고; p는 1 내지 12의 정수이고; r은 0 내지 5의 정수이고; \*는 결합을 나타낸다.

[0062] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,  $R_1$ ,  $R_3$ ,  $R_4$ ,  $R_7$ ,  $R_{10}$ ,  $R_{12}$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소 또는 중수소일 수 있다.

[0063] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,  $R_2$  및  $R_{11}$ 이 동일한 치환기일 수 있다.

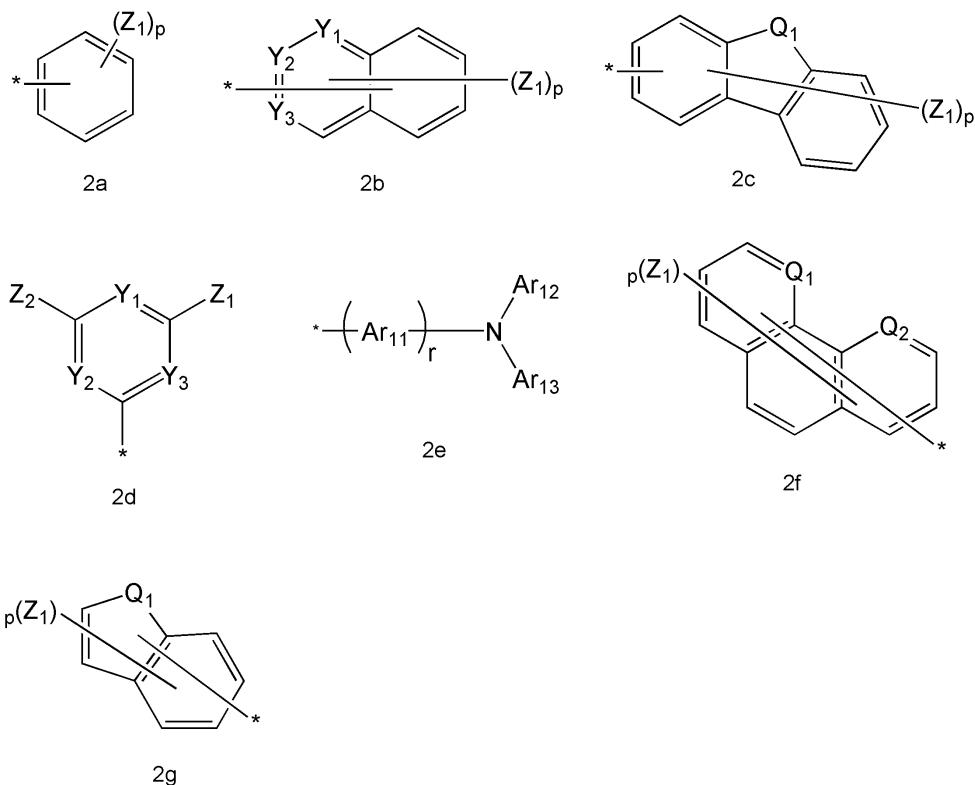
[0064] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면,  $R_1$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 30의 치환 또는 비치환된 축합 다환기, 또는 하기 화학식 3a 내지 3f일 수 있다:



[0065]

[0066] 상기 화학식 3a 내지 3f 중,  $Z_1$ 는 수소 원자, 중수소, 또는 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기이고; p는 1 내지 5의 정수이고; \*는 결합을 나타낸다.

[0067] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,  $R_1$ ,  $R_3$ ,  $R_4$ ,  $R_7$ ,  $R_{10}$ ,  $R_{12}$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소 또는 중수소이고,  $R_2$ ,  $R_5$ ,  $R_6$ ,  $R_8$ ,  $R_9$  및  $R_{11}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 하기 화학식 2a 내지 2g일 수 있다:



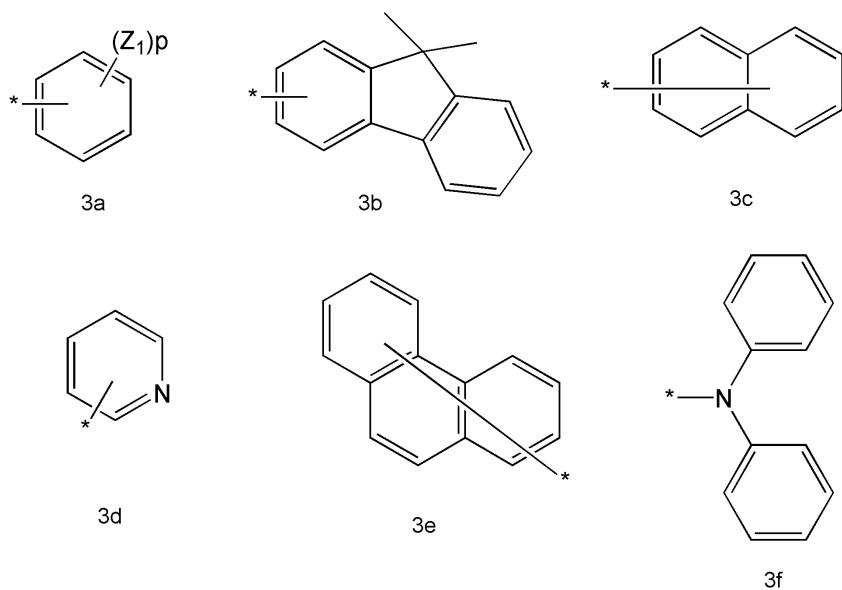
[0068]

[0069]

상기 화학식 2a 내지 2g 중,  $Q_1$  및  $Q_2$ 는  $-C(R_{20})(R_{21})-$ ,  $-N(R_{20})-$ ,  $-S-$  또는  $-O-$ 로 표시되는 연결기들이고;  $Y_1$ ,  $Y_2$  및  $Y_3$ 는 서로 독립적으로,  $-N=$  또는  $-C(R_{22})=$ 로 표시되는 연결기들이고;  $Z_1$ ,  $Z_2$ ,  $Ar_{12}$ ,  $Ar_{13}$ ,  $R_{20}$ ,  $R_{21}$ , 및  $R_{22}$ 은 서로 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 20의 치환 또는 비치환된 축합 다환기, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복시기 또는 치환된 실릴기이고, 여기서, 인접한  $Ar_{12}$  및  $Ar_{13}$  또는 인접한  $R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 서로 융합되거나 단일 결합으로 연결될 수 있으며;  $Ar_{11}$ 은 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 또는 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고;  $p$ 는 1 내지 12의 정수이고;  $r$ 은 0 내지 5의 정수이고; \*는 결합을 나타낸다.

[0070]

본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,  $R_1$ ,  $R_3$ ,  $R_4$ ,  $R_7$ ,  $R_{10}$ ,  $R_{12}$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소 또는 중수소이고,  $R_2$ ,  $R_5$ ,  $R_6$ ,  $R_8$ ,  $R_9$  및  $R_{11}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 하기 화학식 3a 내지 3f일 수 있다:



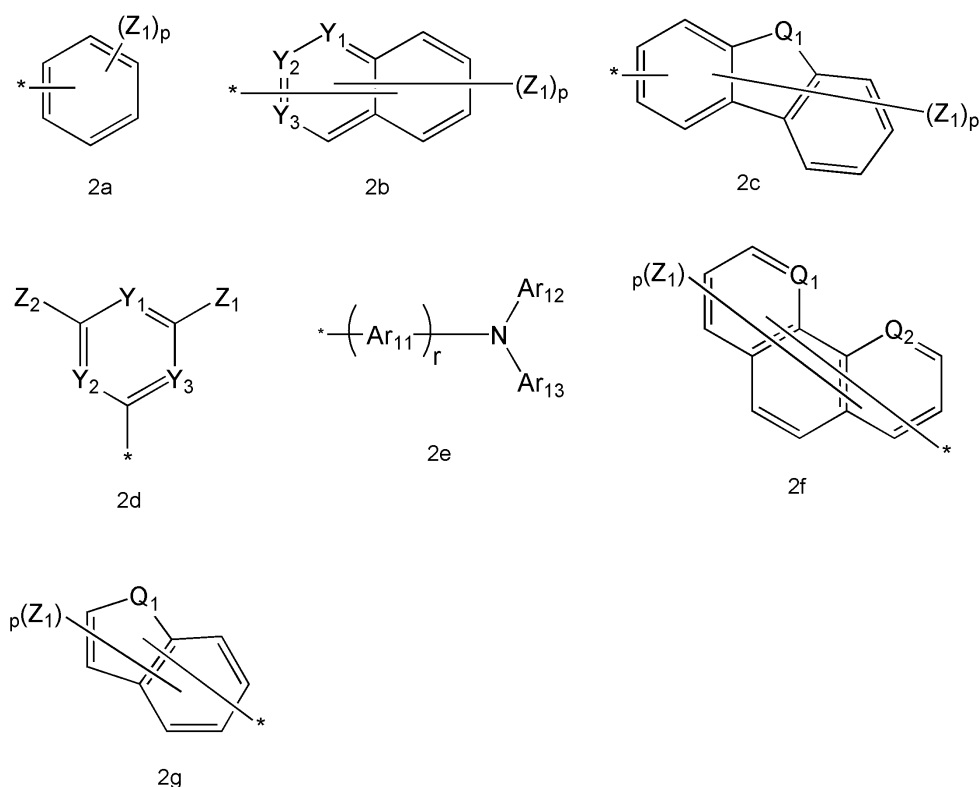
[0071]

[0072]

상기 화학식 3a 내지 3f 중,  $Z_1$ 는 수소 원자, 중수소 또는 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기이고;  $p$ 는 1 내지 5의 정수이고; \*는 결합을 나타낸다.

[0073]

본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,  $R_1$ ,  $R_3$ ,  $R_4$ ,  $R_7$ ,  $R_{10}$ ,  $R_{12}$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소 또는 중수소이고,  $R_2$ ,  $R_5$ ,  $R_6$ ,  $R_8$ ,  $R_9$  및  $R_{11}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 또는 하기 화학식 2a 내지 2g이며,  $R_2$  및  $R_{11}$ 이 동일한 치환기일 수 있다:



[0074]

[0075]

상기 화학식 2a 내지 2g 중,  $Q_1$  및  $Q_2$ 는  $-C(R_{20})(R_{21})-$ ,  $-N(R_{20})-$ ,  $-S-$  또는  $-O-$ 로 표시되는 연결기들이고;  $Y_1$ ,  $Y_2$  및  $Y_3$ 는 서로 독립적으로,  $-N=$  또는  $-C(R_{22})=$ 로 표시되는 연결기들이고;  $Z_1$ ,  $Z_2$ ,  $Ar_{12}$ ,  $Ar_{13}$ ,  $R_{20}$ ,  $R_{21}$ , 및  $R_{22}$ 은 서로 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 탄소수 6 내지 20의 치환 또는

비치환된 축합 다환기, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 하이드록시기, 카르복시기 또는 치환된 실릴기이고, 여기서, 인접한  $Ar_{12}$  및  $Ar_{13}$  또는 인접한  $R_{20}$  및  $R_{21}$ 은 서로 융합되거나 단일 결합으로 연결될 수 있으며(예를 들어, 상기 화학식 2c에서  $Q_1$ 이  $-C(R_{20})(R_{21})-$ 이고  $R_{20}$ ,  $R_{21}$ 이 페닐기이며,  $R_{20}$  및  $R_{21}$ 이 단일 결합으로 연결되면 스페어로 플로오오펜기를 형성하게 된다);  $Ar_{11}$ 은 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬렌기, 탄소수 5 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 또는 탄소수 3 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고;  $p$ 는 1 내지 12의 정수이고;  $r$ 은 0 내지 5의 정수이고; \*는 결합을 나타낸다.

[0076] 이하, 본 발명의 화학식들에서 사용된 그룹 중 대표적인 그룹의 정의를 살펴보면 다음과 같다 (치환기를 한정하는 탄소 수는 비제한적인 것으로서 치환기의 특성을 한정하지는 않는다).

[0077] 상기 화학식에서, 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬기는 선형 및 분지형일 수 있으며, 이의 비제한적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실, 헵틸, 옥틸, 노나닐, 도데실 등을 들 수 있고, 상기 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염, 또는 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알콕시기, 탄소수 2 내지 10의 알케닐기, 탄소수 2 내지 10의 알키닐기, 탄소수 6 내지 16의 아릴기, 또는 탄소수 4 내지 16의 헤테로아릴기로 치환될 수 있다.

[0078] 상기 화학식에서, 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기는 상기 비치환된 알킬기에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 에테닐, 프로페닐, 부테닐 등이 있다. 이들 비치환된 알케닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

[0079] 상기 화학식에서, 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐기는 상기 정의된 바와 같은 알킬기에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 아세틸렌, 프로필렌, 페닐아세틸렌, 나프틸아세틸렌, 이소프로필아세틸렌, t-부틸아세틸렌, 디페닐아세틸렌 등이 있다. 이들 알키닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

[0080] 상기 화학식에서, 비치환된 탄소수 3 내지 60의 사이클로알킬기는 탄소 수 3 내지 60의 고리 형태의 알킬기를 의미하며, 상기 사이클로알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 탄소수 1 내지 60의 알킬기의 치환기와 동일한 치환기로 치환 가능하다.

[0081] 상기 화학식에서, 탄소수 1 내지 60의 비치환된 알콕시기란  $-OA$ (여기서,  $A$ 는 상술한 바와 같은 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬기임)의 구조를 갖는 그룹으로서, 이의 비제한적인 예로서, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로필옥시, 부톡시, 펜톡시, 등을 들 수 있다. 이들 알콕시기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

[0082] 상기 화학식 중, 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기는 하나 이상의 고리를 포함하는 카보사이클 방향족 시스템을 의미하며, 2 이상의 고리를 가질 수 경우, 서로 융합되거나, 단일 결합 등을 통하여 연결될 수 있다. 아릴이라는 용어는 페닐, 나프틸, 안트라세닐과 같은 방향족 시스템을 포함한다. 또한, 상기 아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 탄소수 1 내지 60의 알킬기의 치환기와 동일한 치환기로 치환 가능하다.

[0083] 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴기의 예로는 페닐기, 탄소수 1 내지 10의 알킬페닐기(예를 들면, 에틸페닐기), 할로페닐기(예를 들면, o-, m- 및 p-플루오로페닐기, 디클로로페닐기), 시아노페닐기, 디시아노페닐기, 트리플루오로메톡시페닐기, 비페닐기, 할로비페닐기, 시아노비페닐기, 탄소수 1 내지 10의 알킬비페닐기, 탄소수 1 내지 10의 알콕시비페닐기, o-, m-, 및 p-토릴기, o-, m- 및 p-쿠메닐기, 메시틸기, 페녹시페닐기, ( $\alpha$ ,  $\alpha$ -디메틸벤젠)페닐기, (N,N'-디메틸)아미노페닐기, (N,N'-디페닐)아미노페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 할로나프틸기(예를 들면, 플루오로나프틸기), 탄소수 1 내지 10의 알킬나프틸기(예를 들면, 메틸나프틸기), 탄소수 1 내지 10의 알콕시나프틸기(예를 들면, 메톡시나프틸기), 시아로나프틸기, 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 안트라퀴놀일기, 메틸안트릴기, 페난트릴기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 크리세닐기, 에틸-크리세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 클로로페릴레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네릴기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기 등을 들 수 있다.

[0084] 상기 화학식 중, 탄소수 4 내지 60의 비치환된 헤테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1, 2 또는 3개의

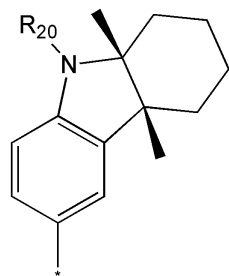
헤테로원자를 포함하고, 2 이상의 고리를 가질 경우, 이들은 서로 융합되거나, 단일 결합 등을 통하여 연결될 수 있다. 비치환된 탄소수 4 내지 60의 헤테로아릴기의 예에는, 피라졸일기, 이미다졸일기, 옥사졸일기, 티아졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 디벤조싸이오펜기 등을 들 수 있다. 또한 상기 헤테로아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 탄소수 1 내지 60의 알킬기의 치환기와 동일한 치환기로 치환 가능하다.

[0085] 상기 화학식 중, 탄소수 5 내지 60의 비치환된 아릴옥시기란  $-OA_1$ 으로 표시되는 그룹으로서, 이 때  $A_1$ 은 상기 탄소수 5 내지 60의 아릴기이다. 상기 아릴옥시기의 예로는 페녹시기 등을 들 수 있다. 상기 아릴 옥시기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 탄소수 1 내지 60의 알킬기의 치환기와 동일한 치환기로 치환 가능하다.

[0086] 상기 화학식 중, 탄소수 5 내지 60의 비치환된 아릴싸이오기는  $-SA_1$ 으로 표시되는 그룹으로서, 이 때  $A_1$ 은 상기 탄소수 5 내지 60의 아릴기이다. 상기 아릴싸이오기의 예로는 벤젠싸이오기, 나프틸싸이오기 등을 들 수 있다. 상기 아릴싸이오기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 탄소수 1 내지 60의 알킬기의 치환기와 동일한 치환기로 치환 가능하다.

[0087] 상기 화학식 중, 비치환된 탄소수 6 내지 60의 축합 다환기란, 하나 이상의 방향족 고리 및/또는 하나 이상의 비방향족 고리가 서로 융합된 2 이상의 고리를 포함한 치환기를 의미하며 전체적으로 방향성을 가지지 않는 면에서 아랄기 또는 헤테로아릴기 등과 구별된다. 상기 축합 다환기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 탄소수 1 내지 60의 알킬기의 치환기와 동일한 치환기로 치환 가능하다.

[0088] 본 발명의 일 구현예에서 상기 치환된 축합 다환기의 비제한적 예로 아래 화합물 구조를 들 수 있다.

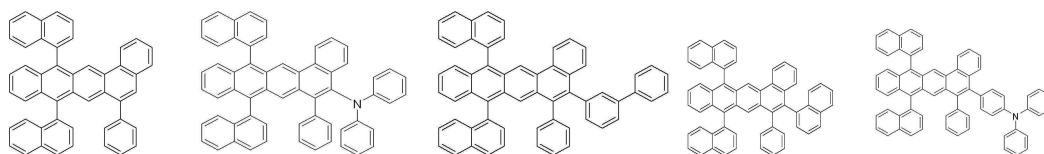


[0089]

[0090]  $R_{20}$  및 \*에 대한 설명은 상술한 바와 같다.

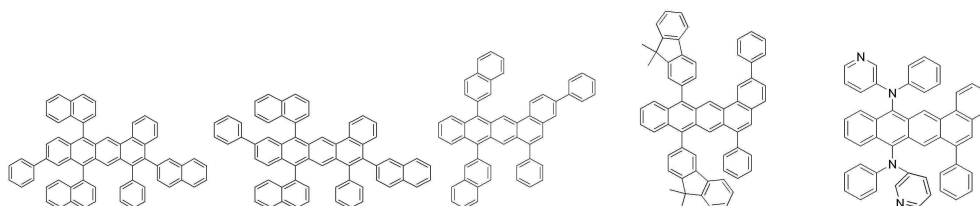
[0091] 이하 본 발명의 상기 화학식 1로 표현되는 화합물의 구체적인 예로서, 하기 화합물 10 내지 373을 들 수 있다. 그러나 본 발명의 화학식 1로 표현되는 화합물이 이들 화합물들로 한정되어서는 안 된다.

[0092] [화학식 10] [화학식 11] [화학식 12] [화학식 13] [화학식 14]



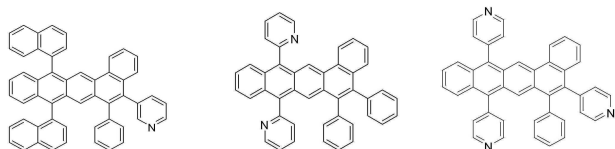
[0093]

[0094] [화학식 15] [화학식 16] [화학식 17] [화학식 18] [화학식 19]



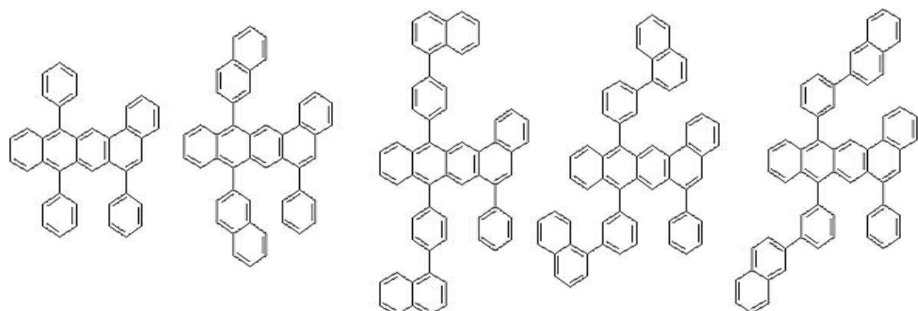
[0095]

[0096] [화학식 20] [화학식 21] [화학식 22]



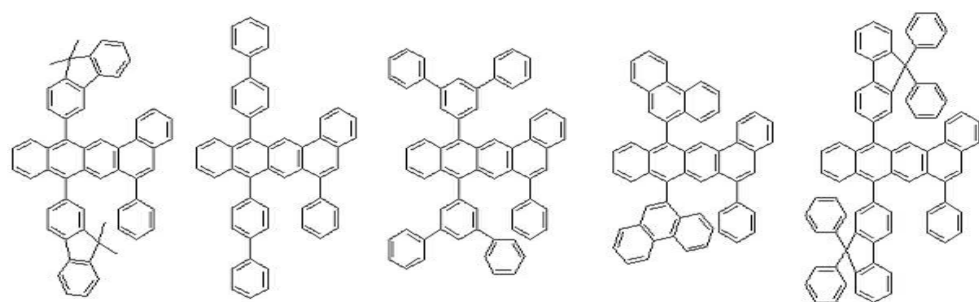
[0097]

[0098] [화학식 23] [화학식 24] [화학식 25] [화학식 26] [화학식 27]



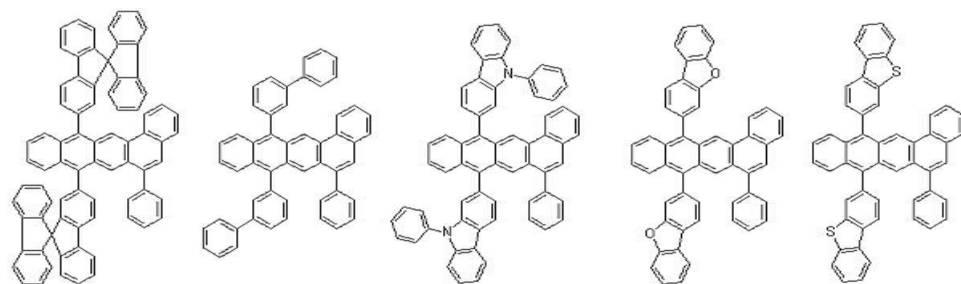
[0099]

[0100] [화학식 28] [화학식 29] [화학식 30] [화학식 31] [화학식 32]



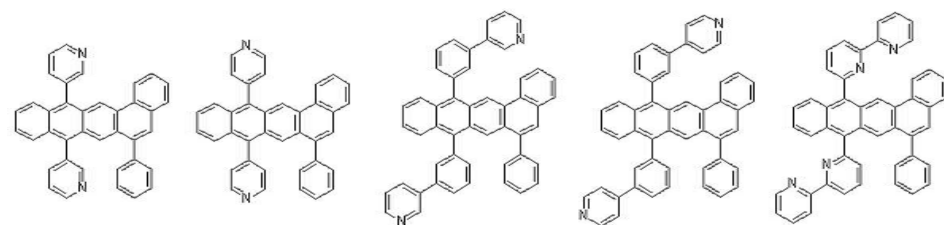
[0101]

[0102] [화학식 33] [화학식 34] [화학식 35] [화학식 36] [화학식 37]



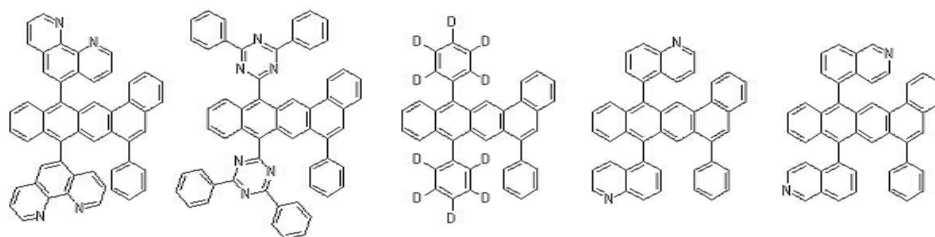
[0103]

[0104] [화학식 38] [화학식 39] [화학식 40] [화학식 41] [화학식 42]



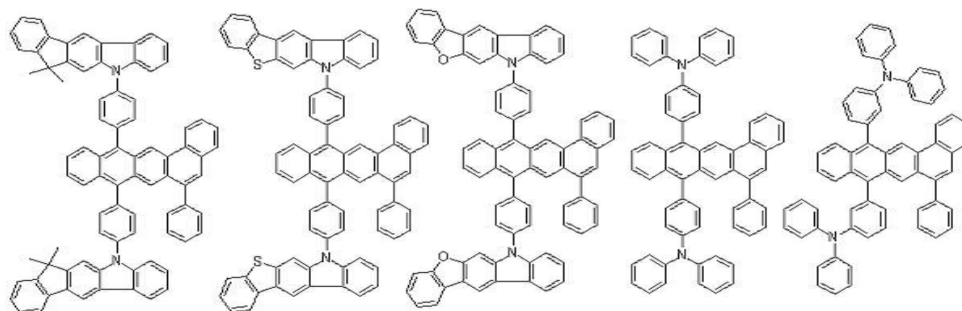
[0105]

[0106] [화학식 43] [화학식 44] [화학식 45] [화학식 46] [화학식 47]



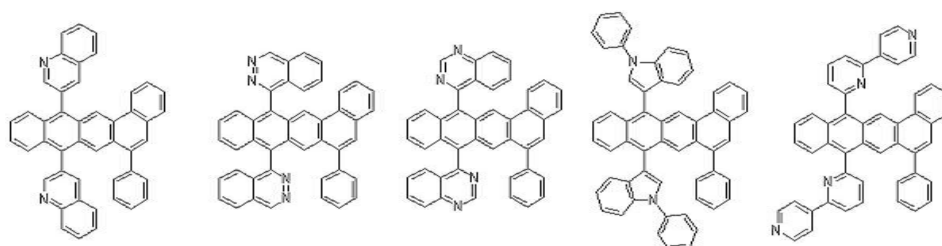
[0107]

[0108] [화학식 48] [화학식 49] [화학식 50] [화학식 51] [화학식 52]



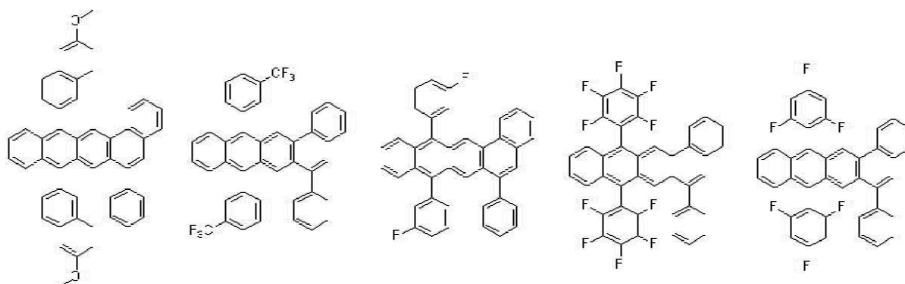
[0109]

[0110] [화학식 53] [화학식 54] [화학식 55] [화학식 56] [화학식 57]



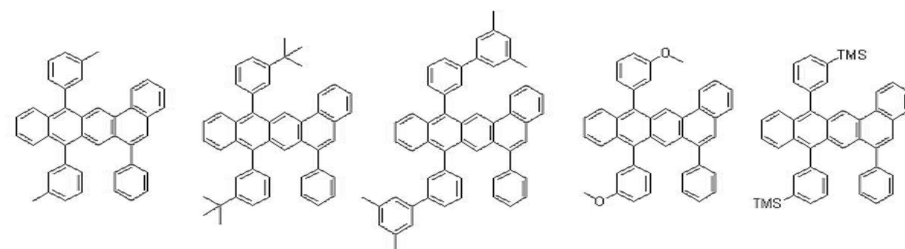
[0111]

[0112] [화학식 58] [화학식 59] [화학식 60] [화학식 61] [화학식 62]



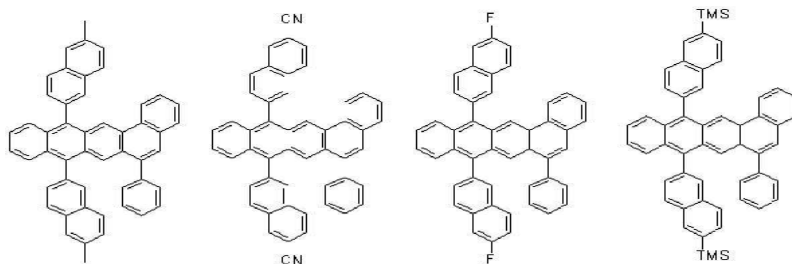
[0113]

[0114] [화학식 63] [화학식 64] [화학식 65] [화학식 66] [화학식 67]



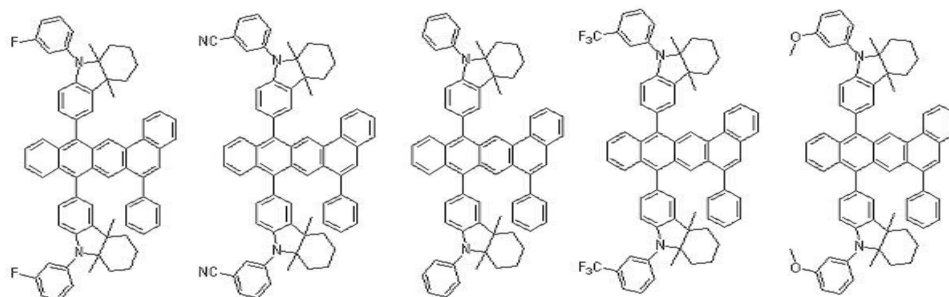
[0115]

[0116] [화학식 68] [화학식 69] [화학식 70] [화학식 71]



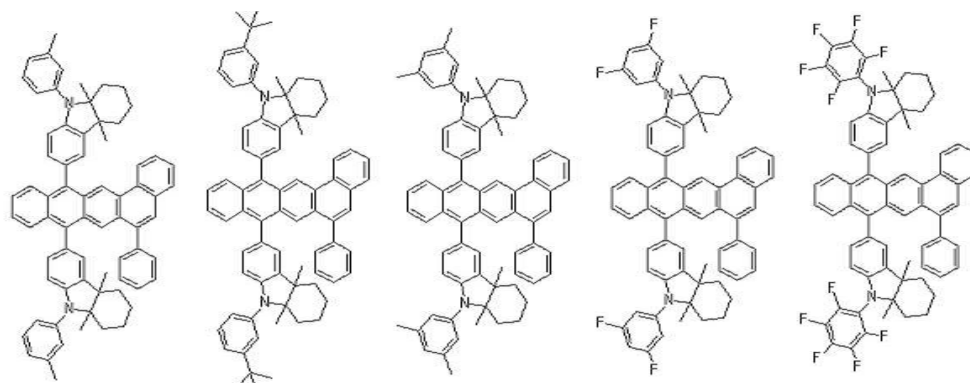
[0117]

[0118] [화학식 72] [화학식 73] [화학식 74] [화학식 75] [화학식 76]



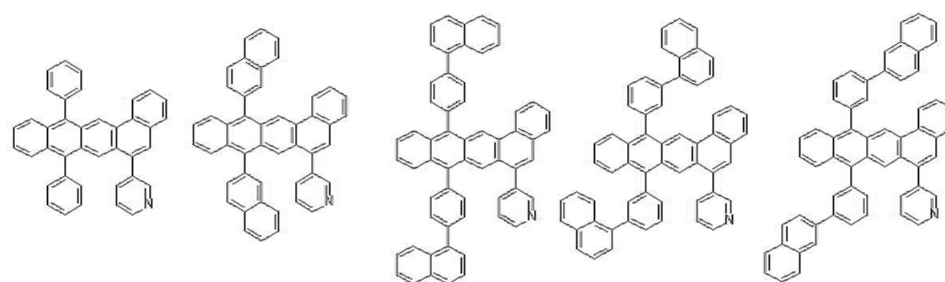
[0119]

[0120] [화학식 77] [화학식 78] [화학식 79] [화학식 80] [화학식 81]



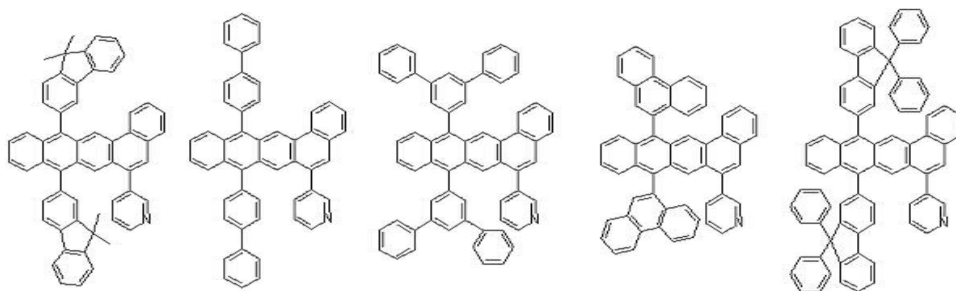
[0121]

[0122] [화학식 82] [화학식 83] [화학식 84] [화학식 85] [화학식 86]



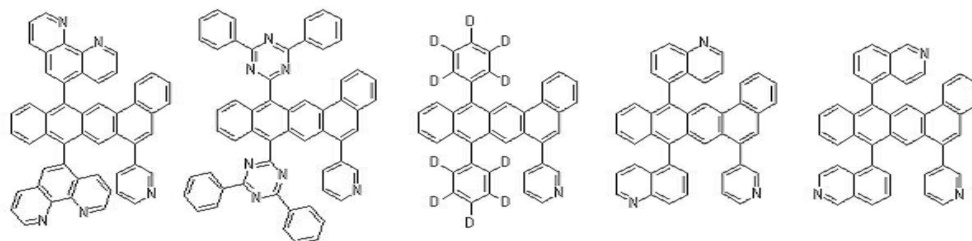
[0123]

[0124] [화학식 87] [화학식 88] [화학식 89] [화학식 90] [화학식 91]



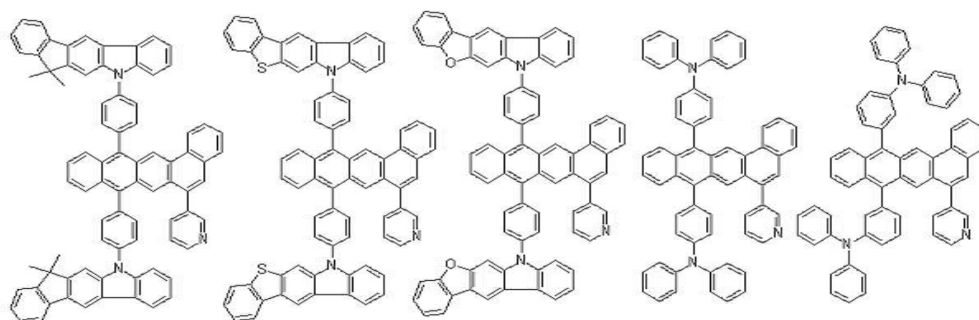
[0125]

[0126] [화학식 92] [화학식 93] [화학식 94] [화학식 95] [화학식 96]



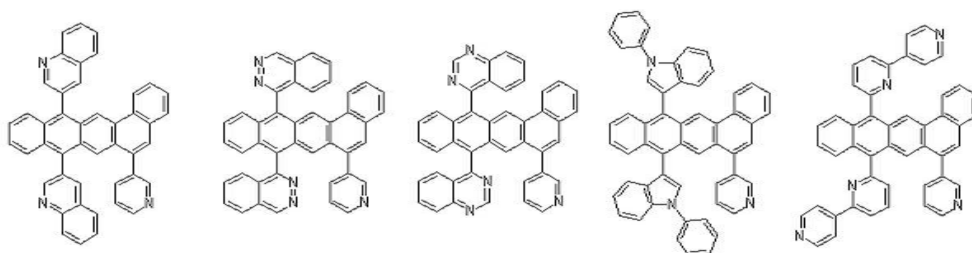
[0127]

[0128] [화학식 97] [화학식 98] [화학식 99] [화학식 100] [화학식 101]



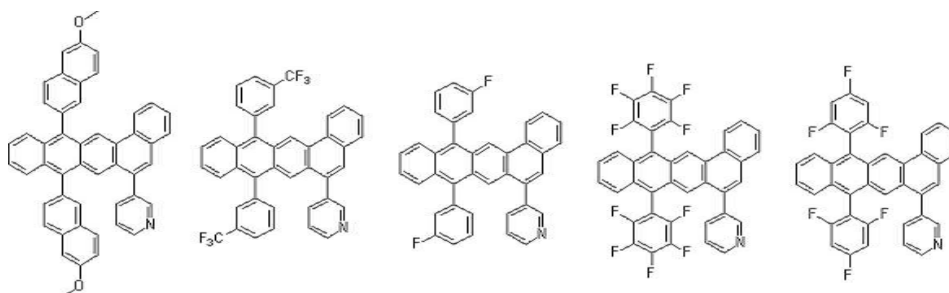
[0129]

[0130] [화학식 102] [화학식 103] [화학식 104] [화학식 105] [화학식 106]



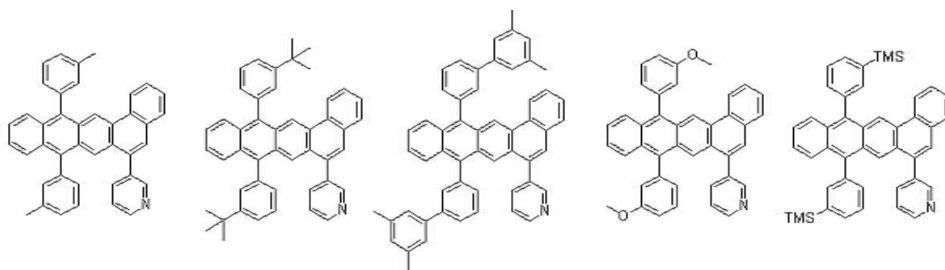
[0131]

[0132] [화학식 107] [화학식 108] [화학식 109] [화학식 110] [화학식 111]



[0133]

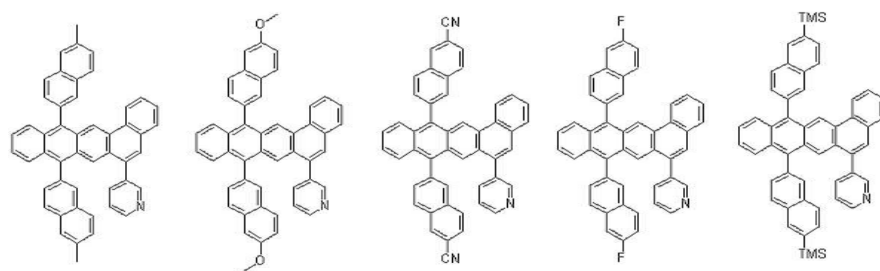
[0134] [화학식 112] [화학식 113] [화학식 114] [화학식 115] [화학식 116]



[0135]

[0136]

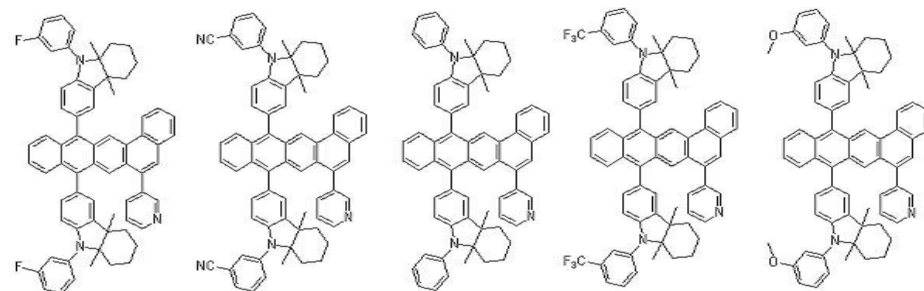
[화학식 117] [화학식 118] [화학식 119] [화학식 120] [화학식 121]



[0137]

[0138]

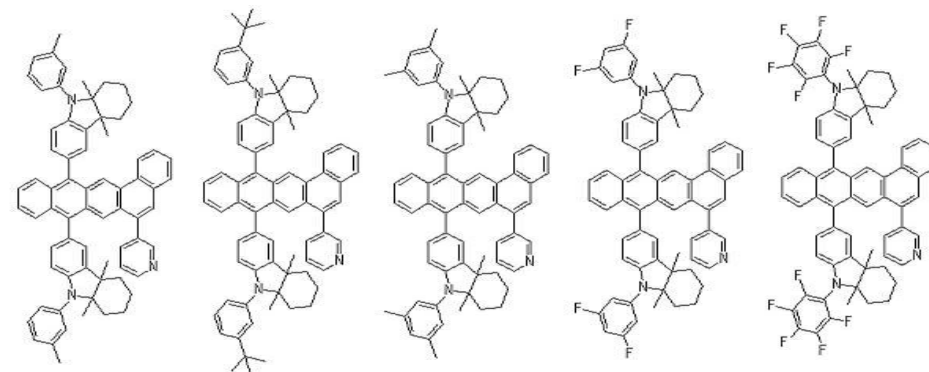
[화학식 122] [화학식 123] [화학식 124] [화학식 125] [화학식 126]



[0139]

[0140]

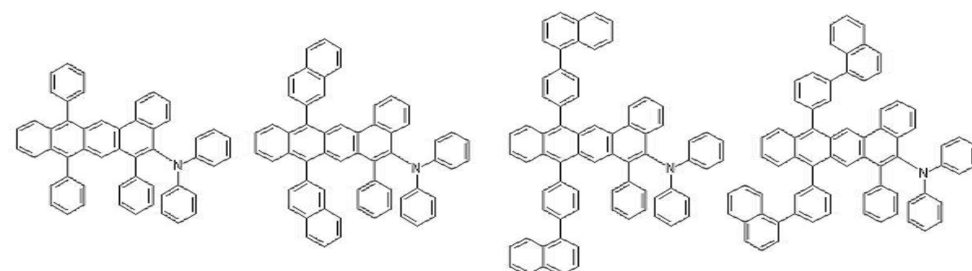
[화학식 127] [화학식 128] [화학식 129] [화학식 130] [화학식 131]



[0141]

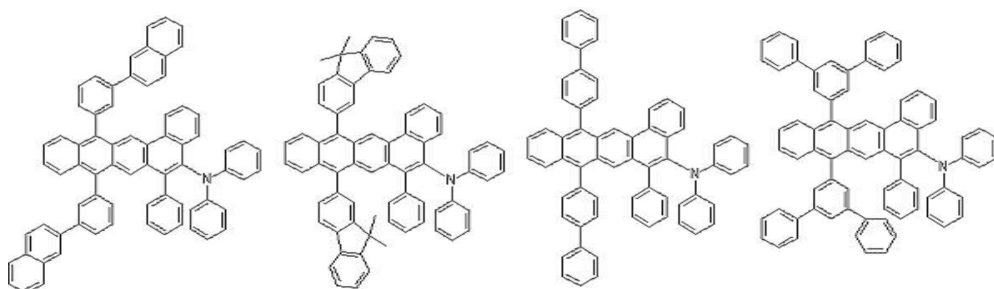
[0142]

[화학식 132] [화학식 133] [화학식 134] [화학식 135]



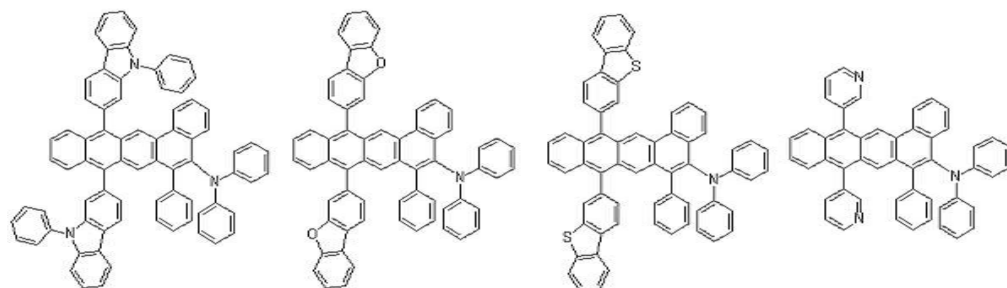
[0143]

[0144] [화학식 136] [화학식 137] [화학식 138] [화학식 139]



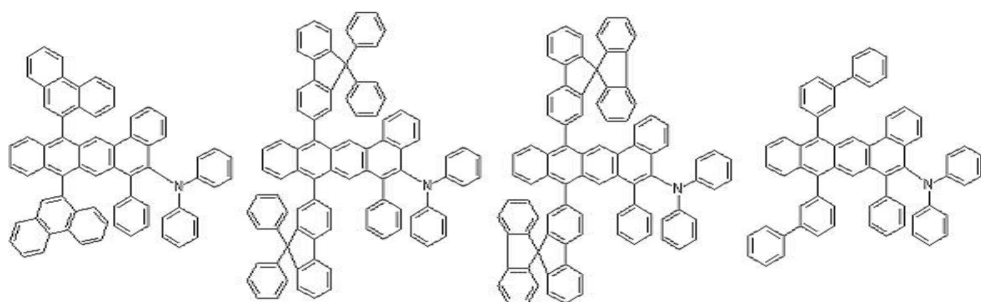
[0145]

[0146] [화학식 140] [화학식 141] [화학식 142] [화학식 143]



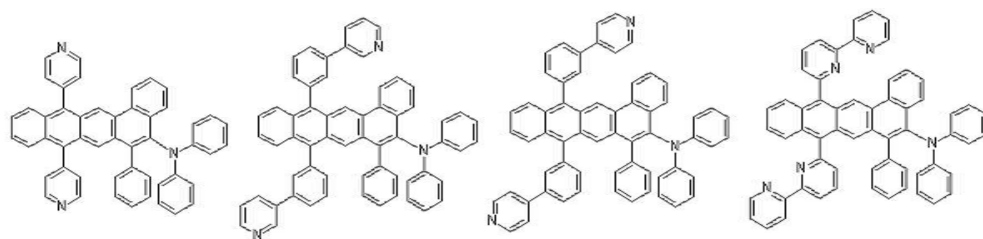
[0147]

[0148] [화학식 144] [화학식 145] [화학식 146] [화학식 147]



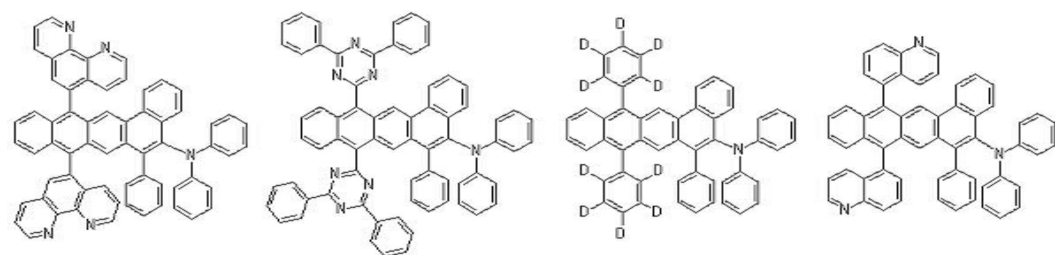
[0149]

[0150] [화학식 148] [화학식 149] [화학식 150] [화학식 151]



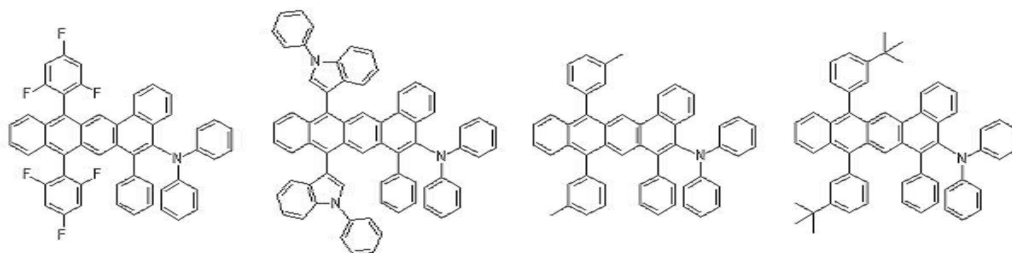
[0151]

[0152] [화학식 152] [화학식 153] [화학식 154] [화학식 155]

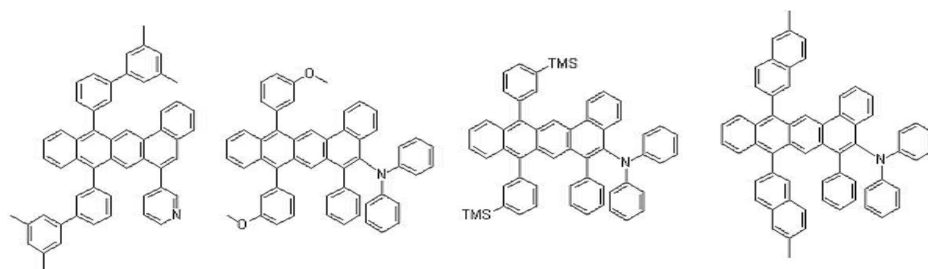


[0153]

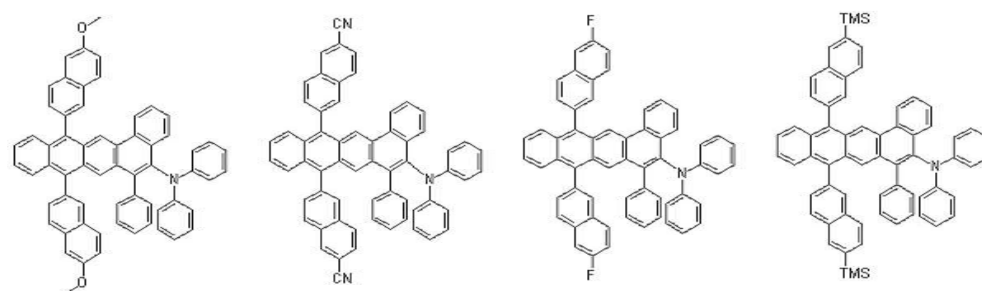
[0154] [화학식 156] [화학식 157] [화학식 158] [화학식 159]



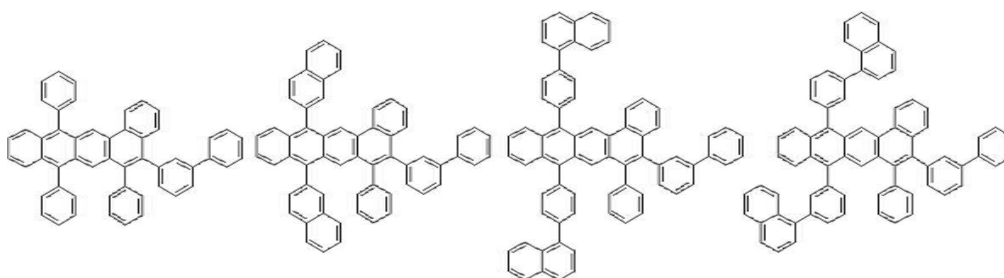
[0155] [화학식 160] [화학식 161] [화학식 162] [화학식 163]



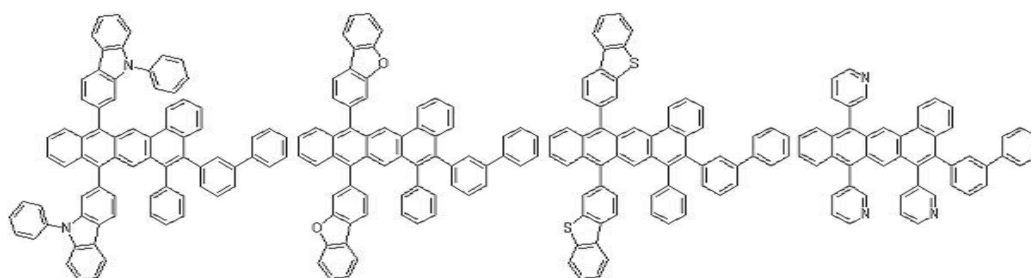
[0157] [화학식 164] [화학식 165] [화학식 166] [화학식 167]



[0159] [화학식 168] [화학식 169] [화학식 170] [화학식 171]

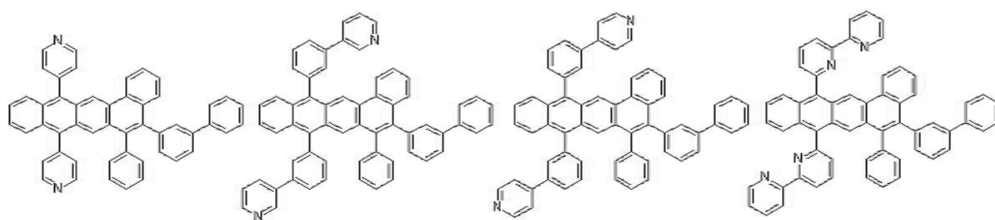


[0161] [화학식 172] [화학식 173] [화학식 174] [화학식 175]



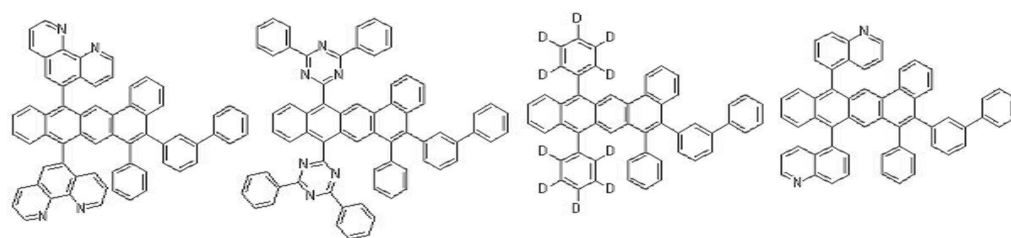
[0163]

[0164] [화학식 176] [화학식 177] [화학식 178] [화학식 179]



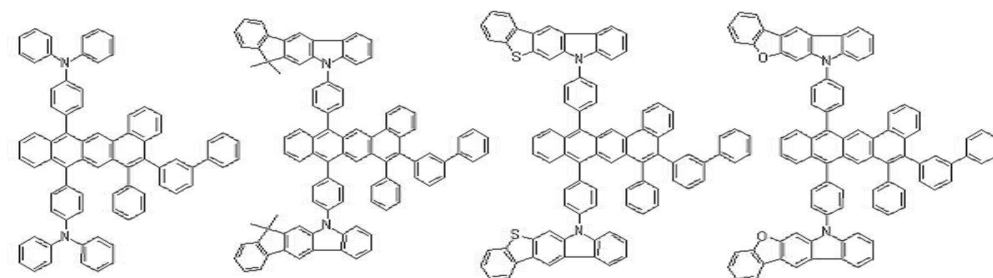
[0165]

[0166] [화학식 180] [화학식 181] [화학식 182] [화학식 183]



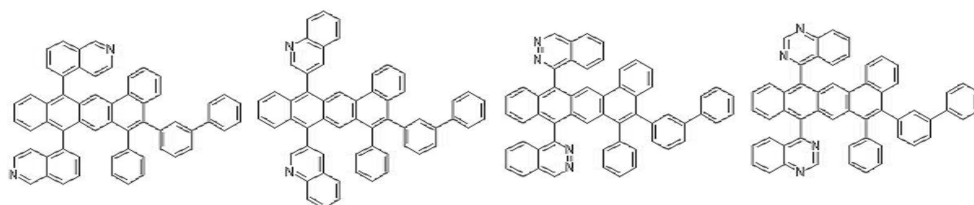
[0167]

[0168] [화학식 184] [화학식 185] [화학식 186] [화학식 187]



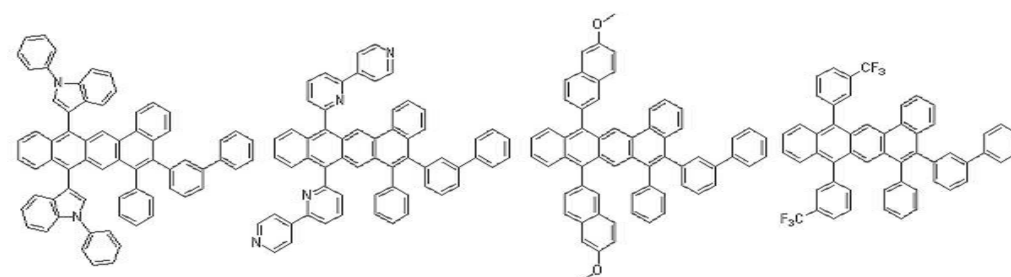
[0169]

[0170] [화학식 188] [화학식 189] [화학식 190] [화학식 191]



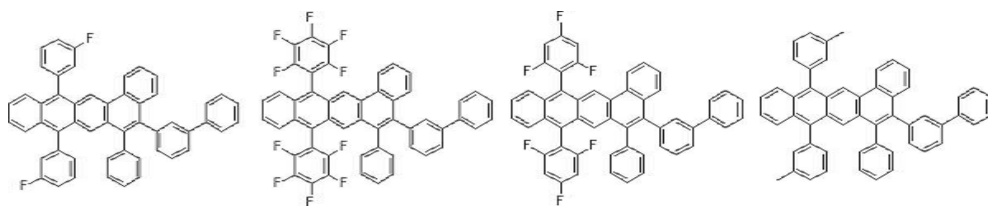
[0171]

[0172] [화학식 192] [화학식 193] [화학식 194] [화학식 195]



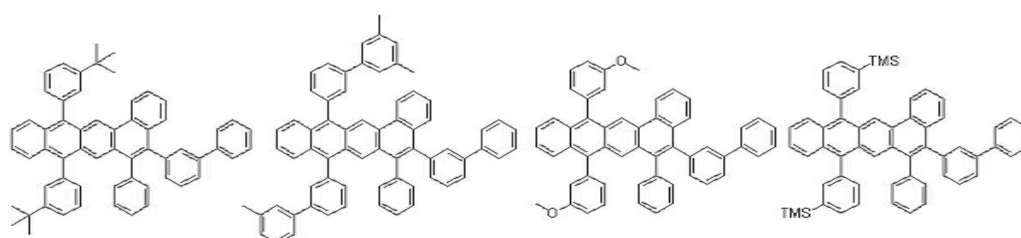
[0173]

[0174] [화학식 196] [화학식 197] [화학식 198] [화학식 199]



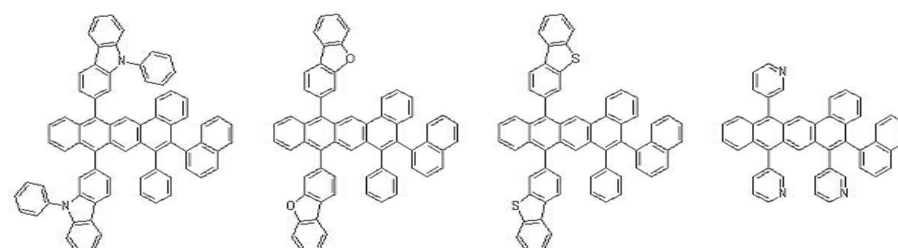
[0175]

[0176] [화학식 200] [화학식 201] [화학식 202] [화학식 203]



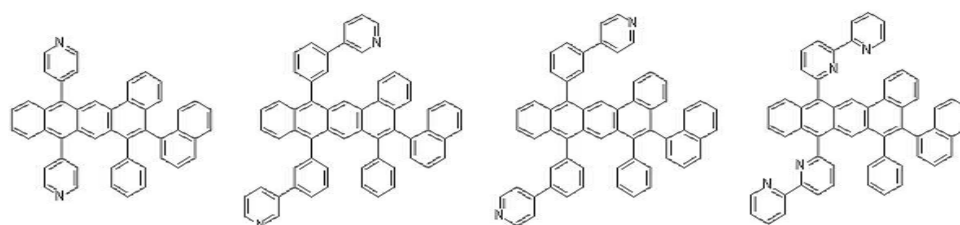
[0177]

[0178] [화학식 204] [화학식 205] [화학식 206] [화학식 207]



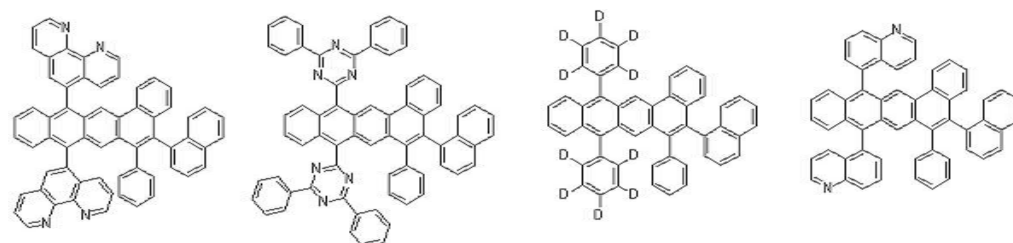
[0179]

[0180] [화학식 208] [화학식 209] [화학식 210] [화학식 211]



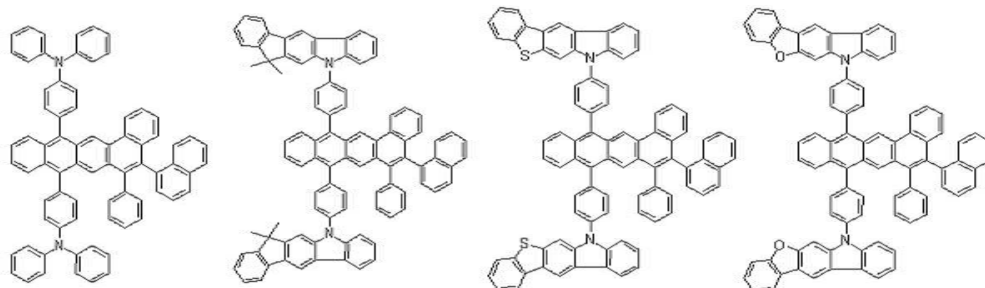
[0181]

[0182] [화학식 212] [화학식 213] [화학식 214] [화학식 215]



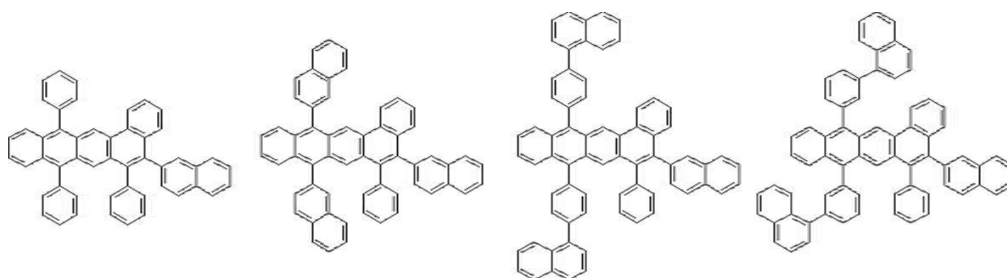
[0183]

[0184] [화학식 216] [화학식 217] [화학식 218] [화학식 219]



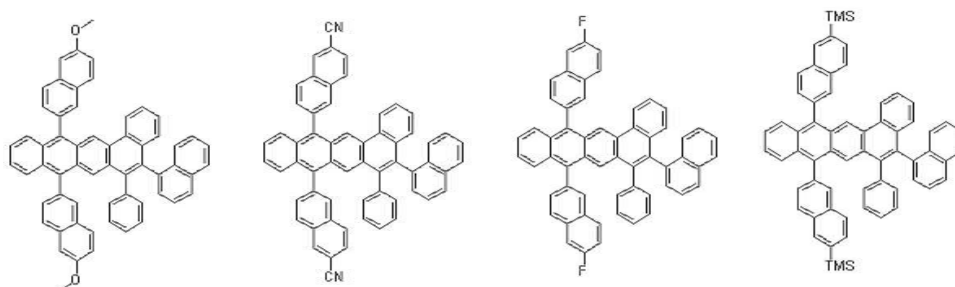
[0185]

[0186] [화학식 220] [화학식 221] [화학식 222] [화학식 223]



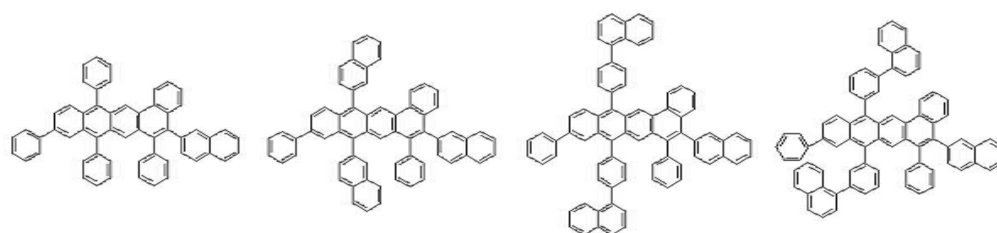
[0187]

[0188] [화학식 224] [화학식 225] [화학식 226] [화학식 227]



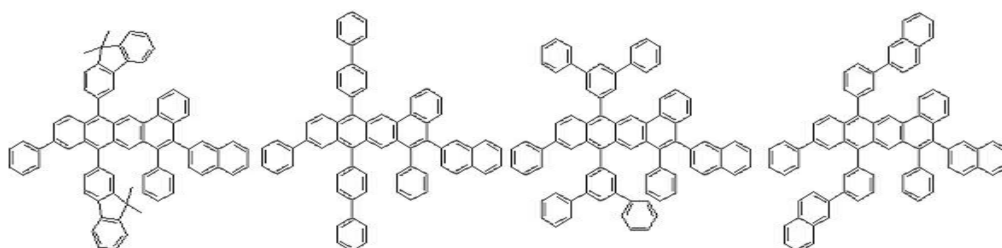
[0189]

[0190] [화학식 228] [화학식 229] [화학식 230] [화학식 231]



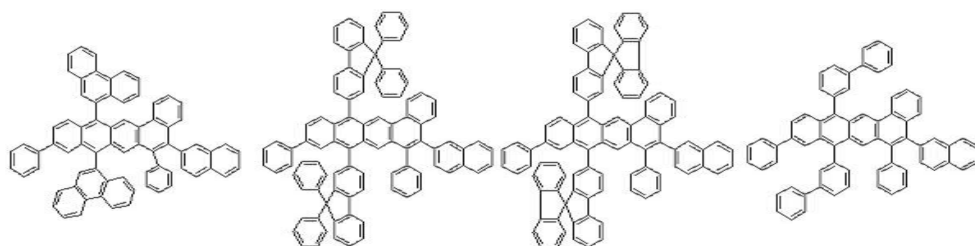
[0191]

[0192] [화학식 232] [화학식 233] [화학식 234] [화학식 235]



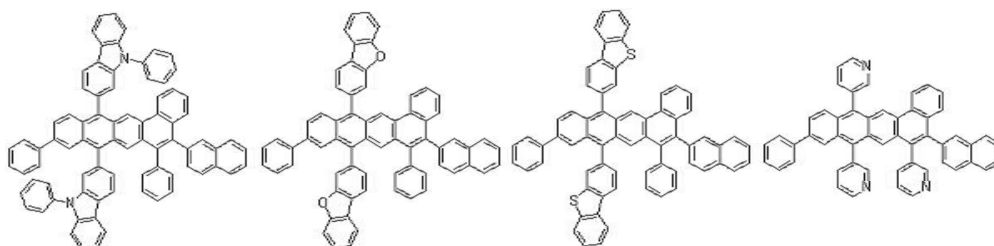
[0193]

[0194] [화학식 236] [화학식 237] [화학식 238] [화학식 239]



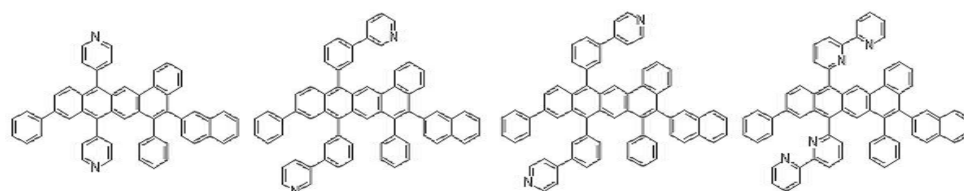
[0195]

[0196] [화학식 240] [화학식 241] [화학식 242] [화학식 243]



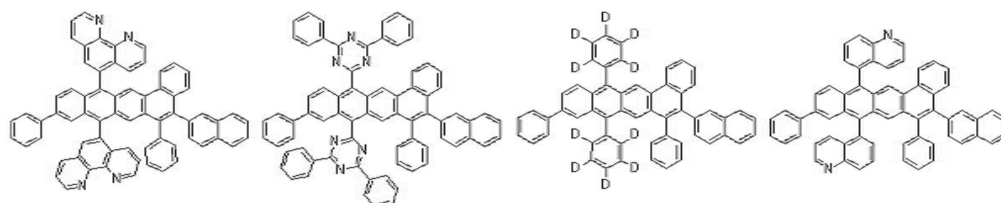
[0197]

[0198] [화학식 244] [화학식 245] [화학식 246] [화학식 247]



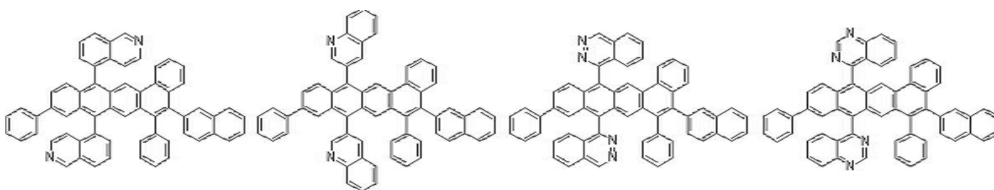
[0199]

[0200] [화학식 248] [화학식 249] [화학식 250] [화학식 251]



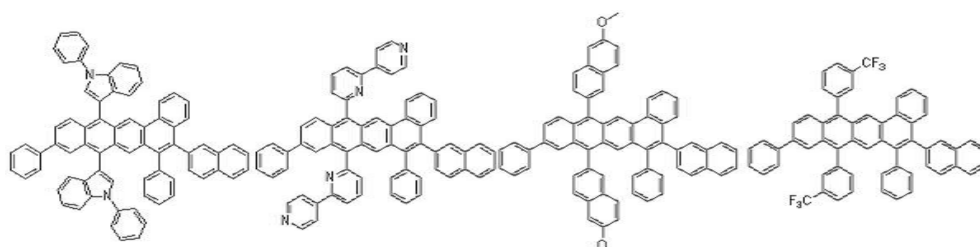
[0201]

[0202] [화학식 252] [화학식 253] [화학식 254] [화학식 255]



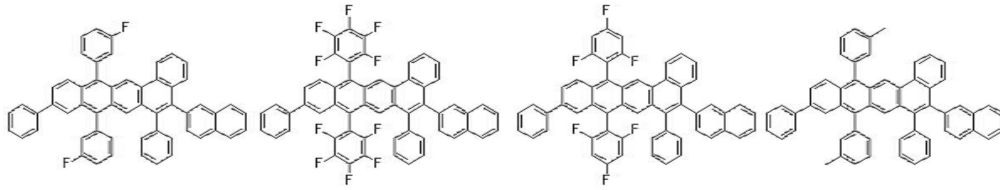
[0203]

[0204] [화학식 256] [화학식 257] [화학식 258] [화학식 259]

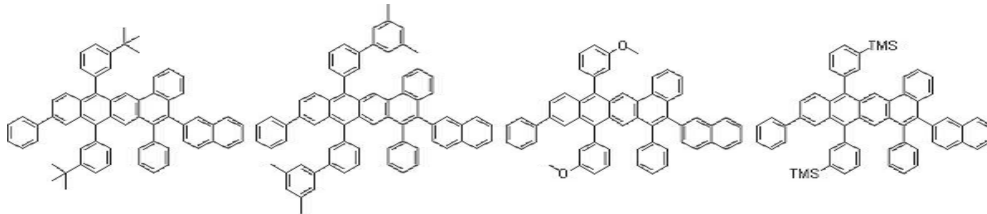


[0205]

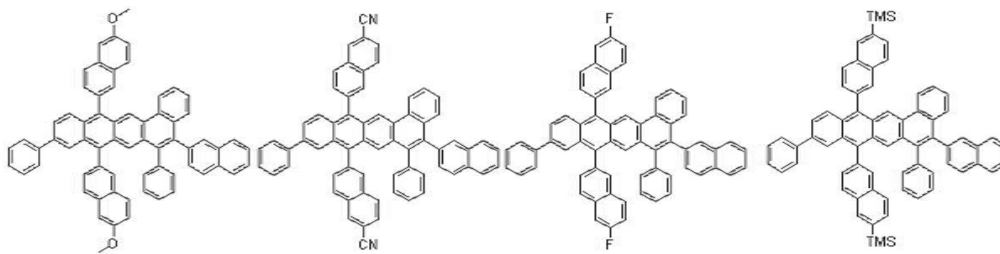
[0206] [화학식 260] [화학식 261] [화학식 262] [화학식 263]



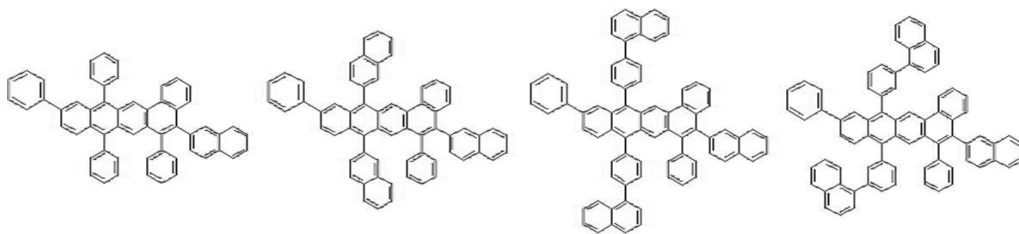
[0207]  
[0208] [화학식 264] [화학식 265] [화학식 266] [화학식 267]



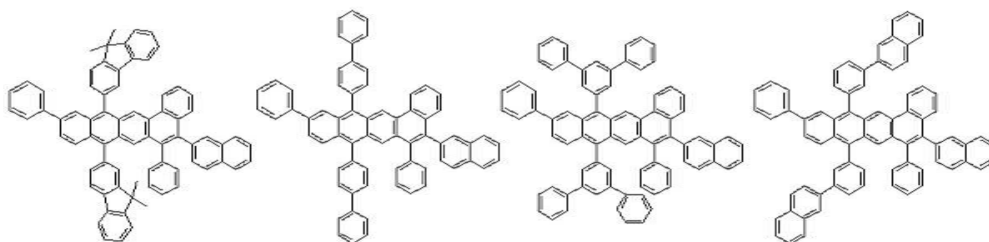
[0209]  
[0210] [화학식 268] [화학식 269] [화학식 270] [화학식 271]



[0211]  
[0212] [화학식 272] [화학식 273] [화학식 274] [화학식 275]

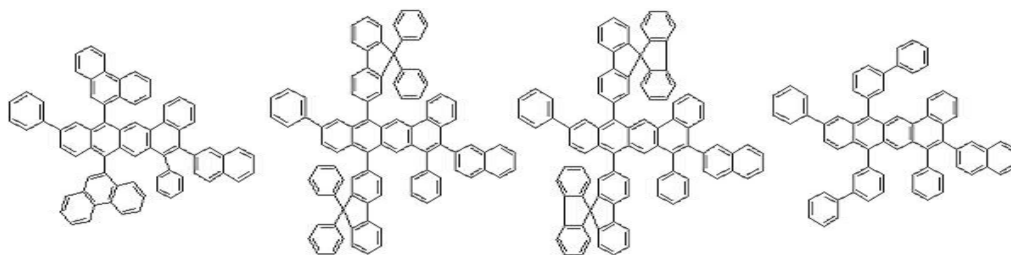


[0213]  
[0214] [화학식 276] [화학식 277] [화학식 278] [화학식 279]

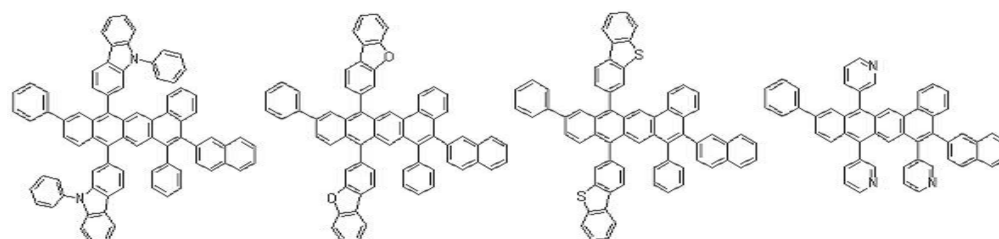


[0215]

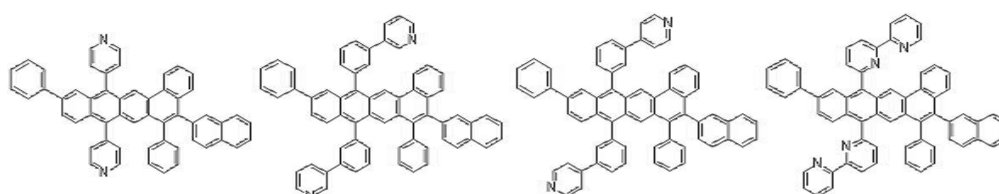
[0216] [화학식 280] [화학식 281] [화학식 282] [화학식 283]



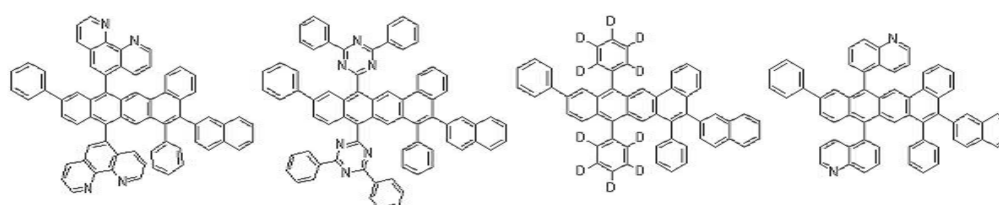
[0217]  
[0218] [화학식 284] [화학식 285] [화학식 286] [화학식 287]



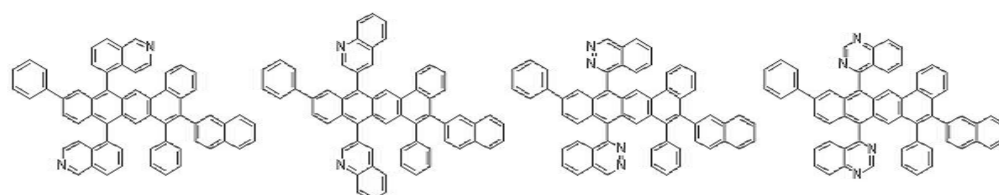
[0219]  
[0220] [화학식 288] [화학식 289] [화학식 290] [화학식 291]



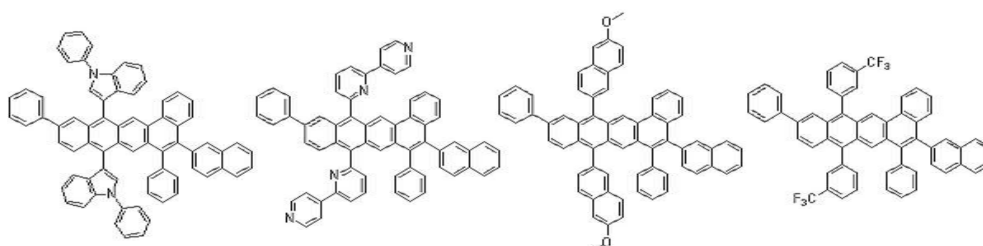
[0221]  
[0222] [화학식 292] [화학식 293] [화학식 294] [화학식 295]



[0223]  
[0224] [화학식 296] [화학식 297] [화학식 298] [화학식 299]

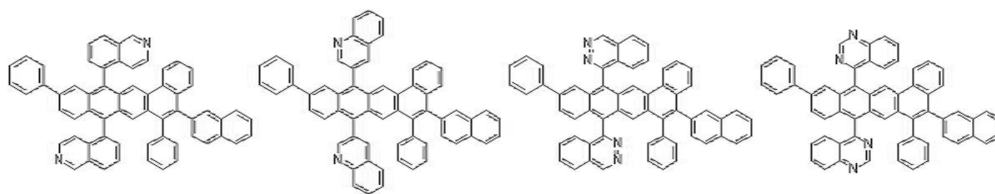


[0225]  
[0226] [화학식 300] [화학식 301] [화학식 302] [화학식 303]



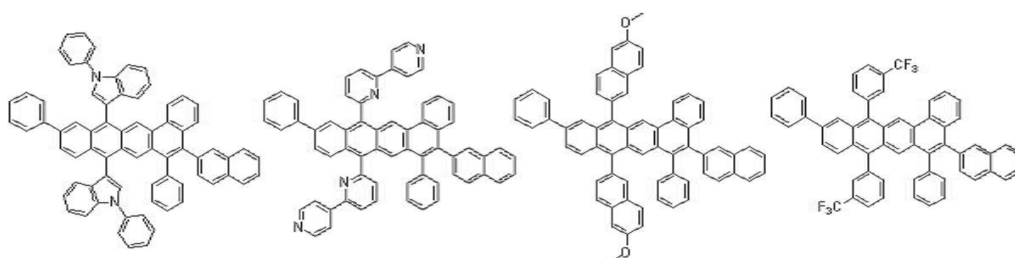
[0227]

[0228] [화학식 304] [화학식 305] [화학식 306] [화학식 307]



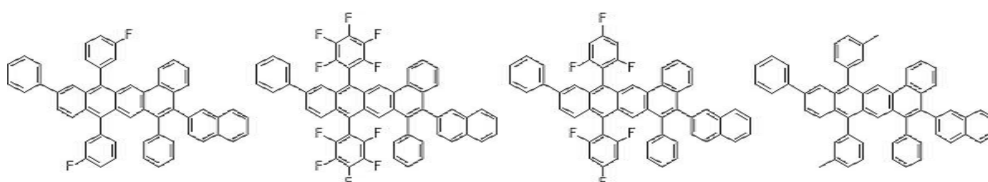
[0229]

[0230] [화학식 308] [화학식 309] [화학식 310] [화학식 311]



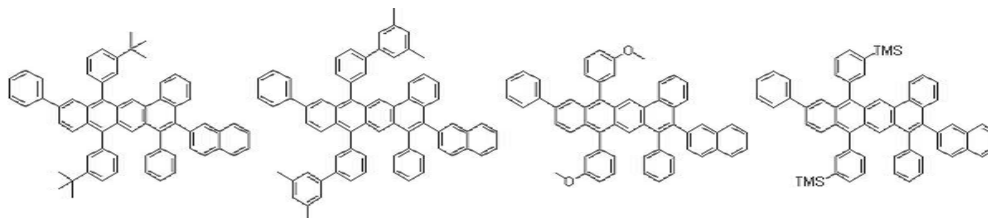
[0231]

[0232] [화학식 312] [화학식 313] [화학식 314] [화학식 315]



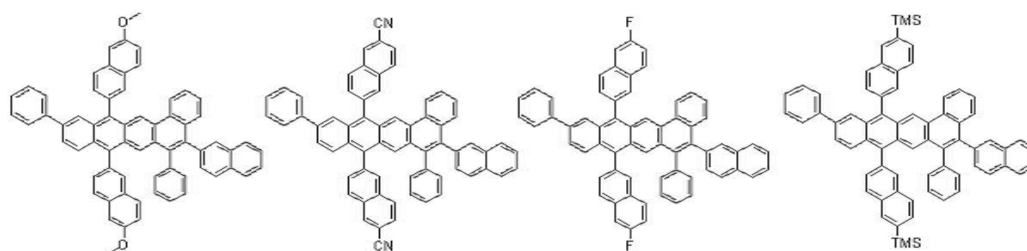
[0233]

[0234] [화학식 316] [화학식 317] [화학식 318] [화학식 319]



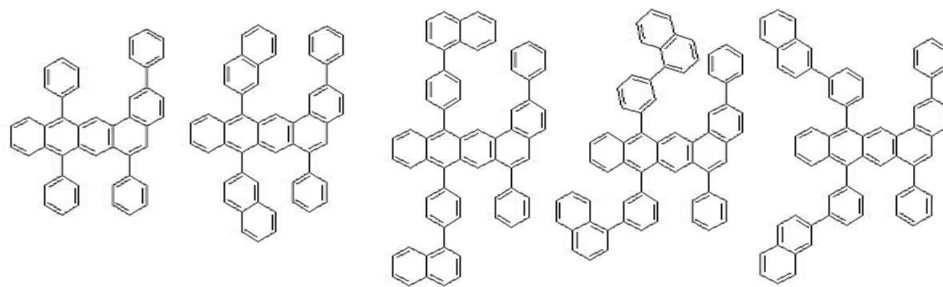
[0235]

[0236] [화학식 320] [화학식 321] [화학식 322] [화학식 323]



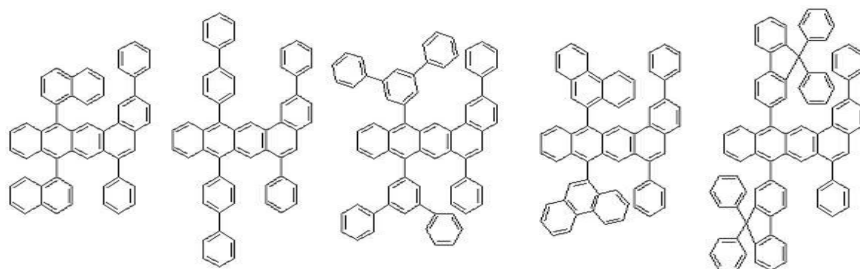
[0237]

[0238] [화학식 324] [화학식 325] [화학식 326] [화학식 327] [화학식 328]



[0239]

[0240] [화학식 329] [화학식 330] [화학식 331] [화학식 332] [화학식 333]



[0241]

[0242] 본 발명의 다른 일 측면에 따라, 제 1 전극; 제 2 전극; 및 상기 제 1 전극 및 제 2 전극 사이에 개재된 유기층을 구비한 유기 발광 소자로서, 상기 유기층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기층을 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.

[0243] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기층은 정공주입층, 정공수송층, 정공주입 및 정공수송기능을 동시에 갖는 기능층, 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 전자수송기능을 동시에 갖는 기능층일 수 있다.

[0244] 또는, 상기 유기층은 발광층이며 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 형광 또는 인광 호스트로 사용될 수 있다.

[0245] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 유기 발광 소자는 발광층, 정공수송층 및 전자수송층을 포함하고, 상기 발광층은 공지의 안트라센 화합물, 아릴아민 화합물 또는 스티릴 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0246] 상기 안트라센 화합물, 아릴아민 화합물 또는 스티릴 화합물 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 탄소수 1 내지 60의 알킬기의 치환기와 동일한 치환기로 치환 가능하다. 상기 아릴아민은 탄소수 5 내지 60의 아릴아민기를 의미한다.

[0247] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자가 발광층, 정공수송층 및 전자수송층을 포함하고, 상기 발광층의 적색층, 녹색층, 청색층 또는 흰색층의 어느 한 층은 인광 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0248] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 유기층은 적색 발광층일 수 있다. 상기 유기 발광 소자의 유기층이 적색 발광층인 경우, 상기 화학식 1의 화합물은 적색 호스트로 사용될 수 있다.

[0249] 한편, 상기 제 1 전극은 애노드이고, 상기 제 2 전극은 캐소드일 수 있는데, 이와 반대의 경우도 물론 가능하다.

[0250] 예를 들어, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자는, 제 1 전극/정공 주입층/발광층/제 2 전극, 제 1 전극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/제 2 전극 또는 제 1 전극/정공 주입층/정공 수송층/발광층 / 전자 수송층/전자 주입층/제 2 전극 구조를 가질 수 있다. 또는 상기 유기 발광 소자는 제 1 전극/정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 단일막 /발광층/전자 수송층/제 2 전극 또는 제 1 전극/정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 단일막/발광층/전자 수송층/전자 주입층/제 2 전극 구조를 가질 수 있다. 또는 상기 유기 발광 소자는 제 1 전극/정공 수송층/발광층/전자주입 및 전자수송기능을 동시에 갖는 단일막/제 2 전극, 제 1 전극/정공 주입층/발광층/전자주입 및 전자수송기능을 동시에 갖는 단일막/제 2 전극, 또는 제 1 전극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/전자주입 및 전자수송기능을 동시에 갖는 단일막/제 2 전극 구조를 가질 수

있다.

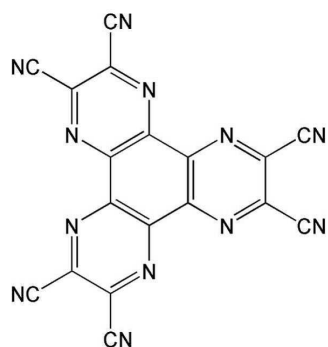
[0251] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자는 전면 발광형, 배면 발광형 등 다양한 구조로 적용 가능하다.

[0252] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입층 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 정공 지지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이들 중 2 이상의 조합을 더 포함할 수 있으나 이에 제한 되는 것은 아니다.

[0253] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 정공 주입층, 정공 수송층 또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나는, 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물, 공지된 정공 주입 재료 및 공지된 정공 수송 재료 외에, 막의 전도율 등을 향상시키기 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.

[0254] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라사이아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라사이아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 100 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0255] <화합물 100>

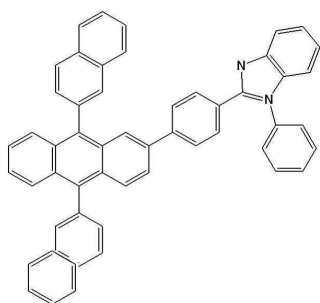


[0256]

[0257] 상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층이 상기 전하-생성 물질을 더 포함할 경우, 상기 전하-생성 물질은 상기 층들 중에 균일하게 분산되거나, 또는 불균일하게 분포되어 있을 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.

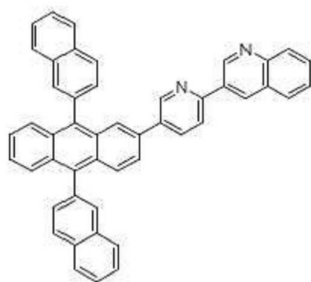
[0258] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 전자 수송층은 전자 수송성 유기 화합물 및 금속-함유 물질을 포함할 수 있다. 상기 전자 수송성 유기 화합물의 비제한적인 예로는, ADN(9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센); 및 하기 화합물 101 및 102와 같은 안트라센계 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0259] <화합물 101>



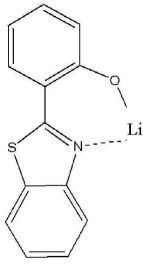
[0260]

<화합물 102>



[0261] 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체의 비제한적인 예로는, 리튬 퀴놀레이트 (LiQ) 또는 하기 화합물 103 등을 들 수 있다:

[0262] <화합물 103>



[0263]

[0264] 이하, 본 발명을 따르는 유기 발광 소자의 제조 방법을 도 1에 도시된 유기 발광 소자를 참조하여, 살펴보기로 한다. 도 1의 유기 발광 소자는 기판, 제 1 전극 (애노드), 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 제 2 전극 (캐소드)를 구비하고 있다.

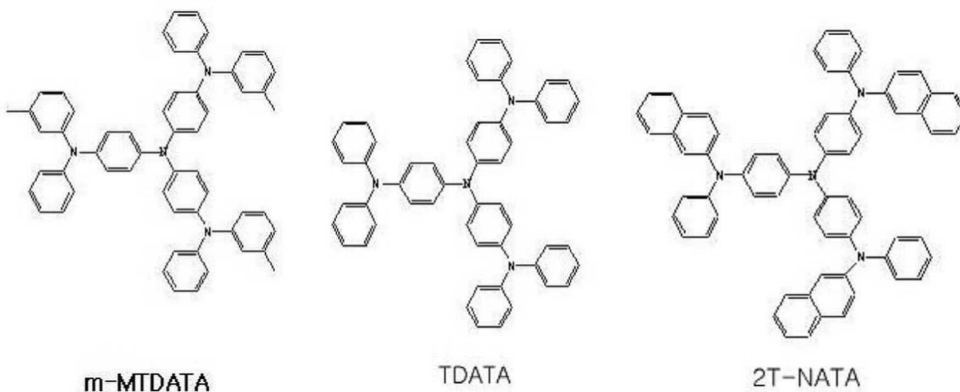
[0265] 먼저 기판 상부에 높은 일함수를 갖는 제 1 전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등에 의해 형성하여 제 1 전극을 형성한다. 상기 제 1 전극은 애노드 (Anode) 또는 캐소드 (cathode)일 수 있다. 여기에서 기판으로는 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용하는데 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 제 1 전극용 물질로는 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO<sub>2</sub>), 산화아연(ZnO), Al, Ag, Mg 등을 이용할 수 있으며, 투명 전극 또는 반사 전극으로 형성될 수 있다.

[0266] 다음으로, 상기 제 1 전극 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공 주입층(HIL)을 형성할 수 있다.

[0267] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 일반적으로 증착온도 100 내지 500℃, 진공도 10<sup>-8</sup> 내지 10<sup>-3</sup> torr, 증착속도 0.01 내지 100Å/sec의 범위에서 적절히 선택하는 것이 바람직하다.

[0268] 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공 주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80℃ 내지 200℃의 온도 범위에서 적절히 선택하는 것이 바람직하다.

[0269] 상기 정공 주입층 물질로는 공지된 정공 주입 재료를 사용할 수 있는데, 예를 들면, 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA [4,4',4''-tris (3-methylphenylphenylamino) triphenylamine], NPB(N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)), TDATA, 2T-NATA, Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonicacid: 폴리아닐린/캄페르술포산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트))등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.



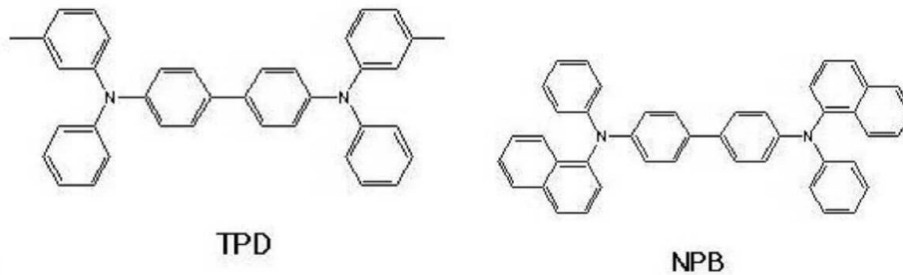
[0270]

[0271] 상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 10000Å, 바람직하게는 100Å 내지 1000Å일 수 있다. 상기 정공 주

입층의 두께가 상기 범위를 만족할 경우, 구동전압 상승없이, 우수한 정공주입 특성을 얻을 수 있다.

[0272] 다음으로 상기 정공 주입층 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공 수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의하여 정공 수송층을 형성하는 경우, 그 증착조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

[0273] 상기 정공 수송층 물질은 공지된 정공 수송층 물질을 이용할 수 있는데, 예를 들면, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸 유도체, NPB, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD) 등의 방향족 축합환을 갖는 아민 유도체 등을 사용할 수 있다.



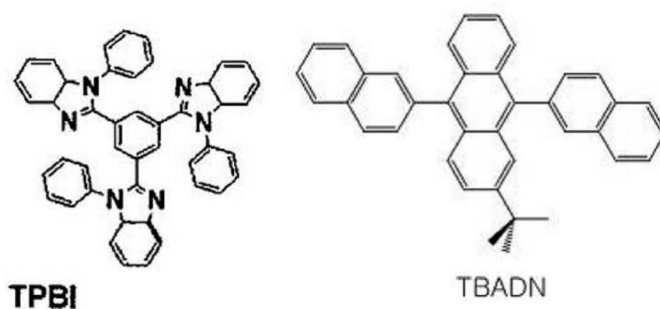
[0274]

[0275] 상기 정공 수송층의 두께는 약 50 Å 내지 1000 Å, 바람직하게는 100 Å 내지 600 Å 일 수 있다. 상기 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동전압 상승없이 우수한 정공수송 특성을 얻을 수 있다.

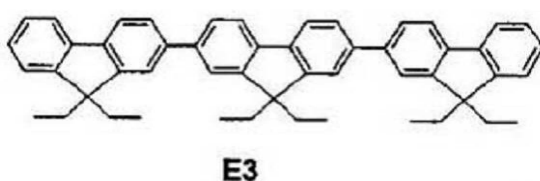
[0276] 다음으로 상기 정공 수송층 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

[0277] 상기 발광층은 전술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 예를 들어, 화학식 1로 표시되는 화합물은 호스트 또는 도펀트로서 사용될 수 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 외에, 발광층은 공지된 다양한 발광 물질을 이용하여 형성할 수 있는데, 공지의 호스트 및 도펀트를 이용하여 형성할 수도 있다. 상기 도펀트의 경우, 공지의 형광 도펀트 및 공지의 인광 도펀트를 모두 사용할 수 있다.

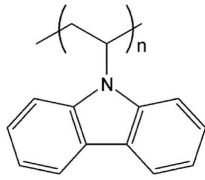
[0278] 예를 들어, 공지의 호스트로는 Alq<sub>3</sub>, CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), PVK(폴리(n-비닐카바졸)), 9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센(ADN), TPBI(1,3,5-트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene)), TBADN(3-tert-부틸-9,10-디(나프트-2-일) 안트라센), E3, DSA(디스티릴 아릴렌) 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0279]



[0280]



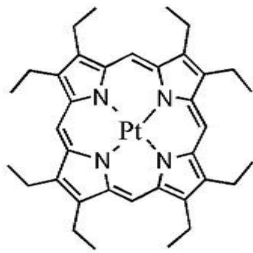
[0281]

[0282]

PVK

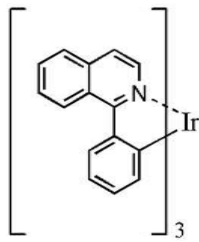
[0283]

한편, 공지된 적색 도펀트로서 PtOEP, Ir(piq)<sub>3</sub>, Btp<sub>2</sub>Ir(acac), DCJTb 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



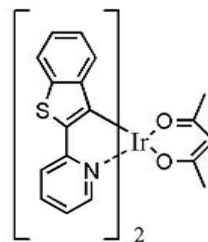
**PtOEP**

[0284]



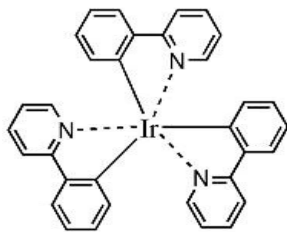
**Ir(piq)<sub>3</sub>**

[0285]



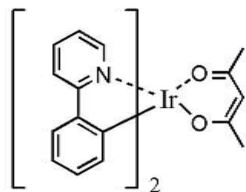
**Btp<sub>2</sub>Ir(acac)**

또한, 공지된 녹색 도펀트로서, Ir(ppy)<sub>3</sub> (ppy = 페닐피리딘), Ir(ppy)<sub>2</sub>(acac), Ir(mpyp)<sub>3</sub>, C545T 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

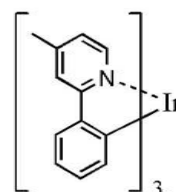


**Ir(ppy)<sub>3</sub>**

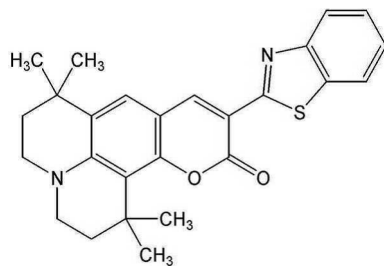
[0286]



**Ir(ppy)<sub>2</sub>(acac)**



**Ir(mpyp)<sub>3</sub>**



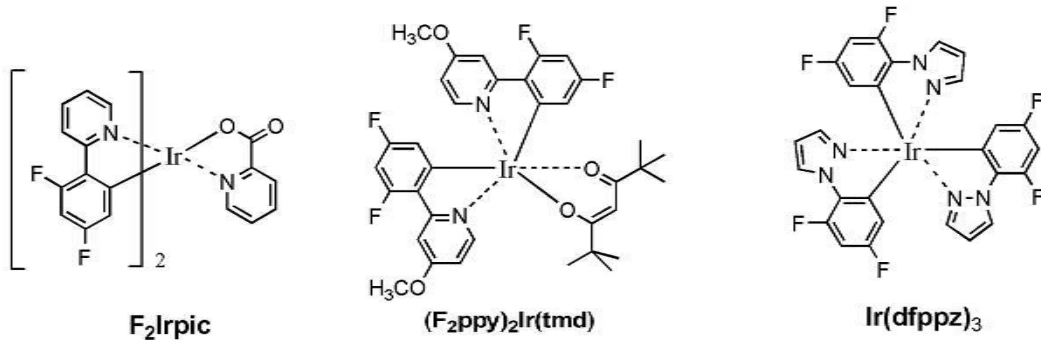
[0287]

[0288]

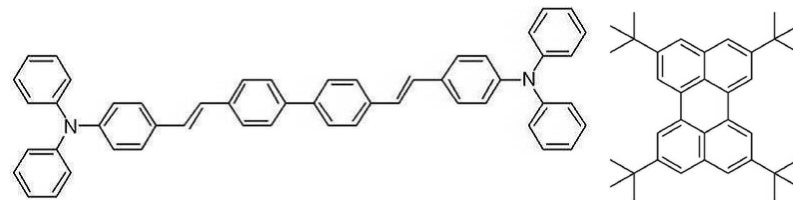
C545T

[0289]

한편, 공지된 청색 도펀트로서, F<sub>2</sub>Irpic, (F<sub>2</sub>ppy)<sub>2</sub>Ir(tmd), Ir(dfppz)<sub>3</sub>, ter-플루오렌(fluorene), 4,4'-비스(4-디페닐아미노스타릴) 비페닐 (DPAVBi), 2,5,8,11-테트라-*tert*-부틸 페릴렌 (TBP) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0290]



[0291]

[0292]

[0293]

상기 도펀트의 함량은 발광층 형성재료 100 중량부 (즉, 호스트와 도펀트의 총중량은 100중량부로 함)를 기준으로 하여 0.1 내지 20 중량부, 특히 0.5 ~ 12 중량부인 것이 바람직하다. 도펀트의 함량이 상기 범위를 만족하면, 농도 소광 현상이 실질적으로 방지될 수 있다.

[0294]

상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 1000Å, 바람직하게는 200Å 내지 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 상기 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동전압 상승없이 우수한 발광 특성을 얻을 수 있다.

[0295]

발광층이 인광 도펀트를 포함할 경우, 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여 정공 저지층 (HBL)을 발광층 상부에 형성할 수 있다 (도 1에는 미도시됨). 이 때 사용할 수 있는 정공 저지층 물질은 특별히 제한되지는 않으며, 공지된 정공 저지층 물질 중에서 임의로 선택하여 이용할 수 있다. 예를 들면 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, Balq, BCP 등을 이용할 수 있다.

[0296]

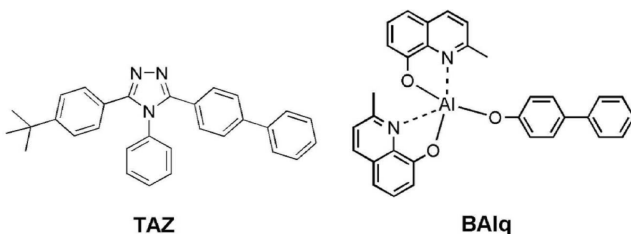
상기 정공 저지층의 두께는 약 50Å 내지 1000Å, 바람직하게는 100Å 내지 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 상기 범위인 경우 실질적인 구동 전압 상승없이 삼중항 여기자 또는 정공의 전자 수송층으로의 확산 방지가 가능하다.

[0297]

다음으로 전자 수송층(ETL)을 진공 증착법, 또는 스핀 코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 전자 수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

[0298]

상기 전자 수송층 물질은 공지된 전자 수송층 형성 재료 중에서 임의로 선택될 수 있다. 예를 들면, 이의 예로는, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq<sub>3</sub>), TAZ, Balq 등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0299]

[0300]

상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 1000Å, 바람직하게는 100Å 내지 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 전자수송특성을 얻을 수 있다.

[0301]

또한 전자 수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층 (EIL)

이 적층될 수 있다.

[0302] 전자 주입층으로서 LiF, NaCl, CsF, Li<sub>2</sub>O, BaO 등과 같은 전자 주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자 주입층의 증착조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

[0303] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 100Å, 바람직하게는 5Å 내지 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 상술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동전압 상승없이 우수한 전자주입 특성을 얻을 수 있다.

[0304] 마지막으로 전자 주입층 상부에 진공 증착법이나 스퍼터링법 등의 방법을 이용하여 제 2 전극을 형성할 수 있다. 상기 제 2 전극은 캐소드 또는 애노드로 사용될 수 있다. 상기 제 2 전극 형성용 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 들 수 있다. 또한, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 사용한 투명 캐소드를 사용할 수도 있다.

[0305] 본 발명을 따르는 유기 발광 소자는 다양한 형태의 평판 표시 장치, 예를 들면 수동 매트릭스 유기 발광 표시 장치 및 능동 매트릭스 유기 발광 표시 장치에 구비될 수 있다. 특히, 능동 매트릭스 유기 발광 표시 장치에 구비되는 경우, 기판 측에 구비된 제 1 전극은 화소 전극으로서 박막 트랜지스터의 소스 전극 또는 드레인 전극과 전기적으로 연결될 수 있다. 또한, 상기 유기 발광 소자는 양면으로 화면을 표시할 수 있는 평판 표시 장치에 구비될 수 있다.

[0306] 또한 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 유기층이 복수 개의 유기층으로 이루어지는 경우, 상기 유기층의 하나 이상의 층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하여 증착 방법으로 형성될 수 있거나, 또는 용액으로 제조된 화학식 1의 화합물을 코팅하는 습식 방법으로도 형성될 수 있다.

[0307] 이하에서, 본 발명의 화합물 10, 24, 28, 29, 83, 144, 231 및 330의 바람직한 합성에 및 실시예를 구체적으로 예시하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것을 의미하는 것은 아니다.

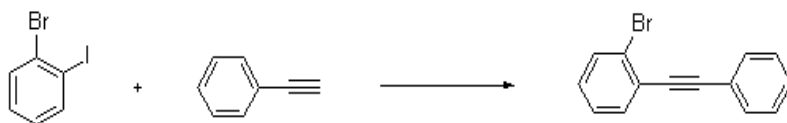
[0308] [실시예]

[0309] **합성예 1. 화학식 28의 합성**

[0310] 1-1. 1-a의 합성

[0311] 하기 반응식 1에 의하여 < 1-a >를 합성하였다.

[0312] [반응식 1]



[0313]

[0314] < 1-a >

[0315] 250 ml 둥근 바닥 플라스크에 1-브로모-2-아이오도벤젠 30.0 g (0.106 mol)과 구리(I) 요오드화물 1.01 g (0.0005 mol)과 Pd(pph<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 2.45 g(0.002 mol) 과 트리에틸아민 180 ml 를 넣고 교반시킨다. 반응물의 온도를 0도로 낮추고 페닐 아세틸렌 11.9 g(0.117 mol) 을 천천히 적가한다. 1시간 교반 후에 반응을 종료한다. 노르말-헥산을 1 L 넣고 교반한 후 여과하여 불순물을 제거하고 충분히 씻어 낸다. 여액을 농축하고 건조하여 <1-a>를 25.0 g (85.8 %) 얻었다.

[0316] 1-2. 1-b 의 합성

[0317] 하기 반응식 2에 의하여 <1-b>를 합성하였다.

[0318] [반응식 2]



[0319]

[0320]

< 1-b >

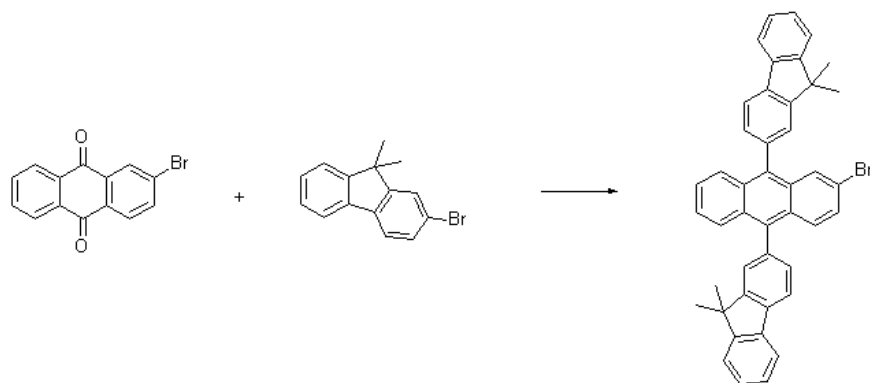
[0321]

500 ml 둥근 바닥 플라스크에 반응식 1로부터 얻은 <1-a> 25.0 g (0.097 mol)을 테트라하이드로퓨란 250 ml 에 녹인 후 질소 상태하에서 30분간 교반하고 반응물의 온도를 -78도까지 내리고 1.6몰 헥산용액의 노말 부틸리튬 79 ml 을 30분 동안 적가한다. 동일한 온도에서 2시간 동안 교반 후 트리메틸보레이트 83.3 ml (0.194 mol)을 30분 동안 적가한다. 적가 후 실온으로 온도를 올리고 3시간 동안 교반 후 2N 염산 수용액을 이용하여 pH 2로 맞춘다. 에틸에테르와 물을 이용하여 유기층을 분리하고 감압 농축한 후 노르말-헥산을 부어 1시간 동안 교반하고 여과하여 고체 <1-b>를 18.00 g (83.5 %) 얻었다.

[0322] 1-3. 1-c 의 합성

[0323] 하기 반응식 3에 의하여 <1-c>를 합성하였다.

[0324] [반응식 3]



[0325]

[0326]

< 1-c >

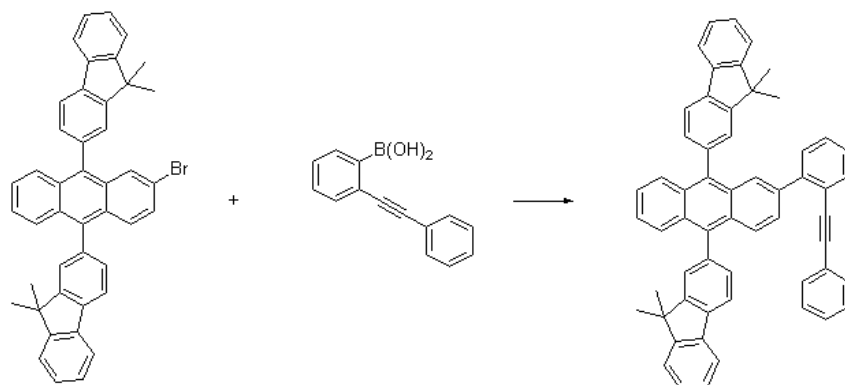
[0327]

2000 ml 둥근 바닥 플라스크에 2-브로모-9,9'-디메틸 플로렌 121.8 g (0.446 mol) 을 테트라하이드로퓨란 800 ml에 녹인 후 질소 상태하에서 20분간 교반을 시키고 반응물의 온도를 -78도까지 내리고 1.6몰 헥산용액의 노말 부틸리튬 263 ml 을 적가한다. 동일한 온도에서 2시간 동안 교반 후 2-브로모 안트라퀴논 40 g(0.139 mol) 넣는다. 동일한 온도에서 30 분 동안 교반 후 실온으로 온도를 올리고 3시간 동안 교반 후 2N 염산 수용액을 이용하여 pH 2로 맞춘다. 에틸에테르와 물을 이용하여 유기층을 분리하고 감압 농축한 후 건조한다. 건조 된 물질을 아세트산 600ml에 분산시키고 요오드화 칼륨 69.38 g(0.418 mol) 과 소듐 하이포포스파이트 88.60 g(0.836 mol) 을 넣고 2시간 동안 환류시킨다. 생성된 고체를 감압여과 후 물과 에탄올을 이용해 씻어준 후 톨루엔을 이용해 재결정을 실시하고 얻은 고체를 건조하여 <1-c>를 64.0 g (71.9 %) 얻었다.

[0328] 1-4. 1-d 의 합성

[0329] 하기 반응식 4에 의하여 <1-d>를 합성하였다.

[0330] [반응식 4]



[0331]

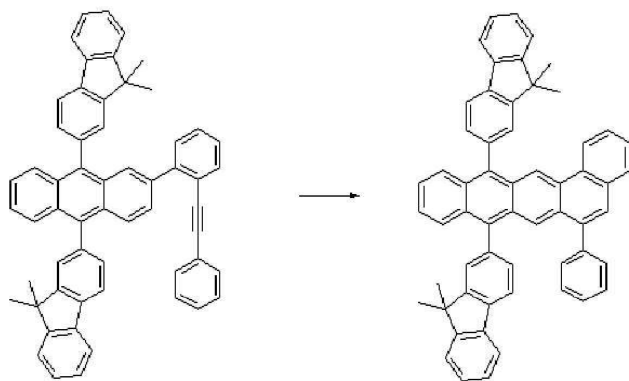
[0332] < 1-d >

[0333] 500 ml 둥근 바닥 플라스크에 상기반응 1-3 으로부터 얻은 <1-c>과 상기반응 1-2 으로부터 얻은 <1-b>, Pd(pph<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1.44 g (0.001 mol) 와 칼륨 카보네이트 17.23 g(0.125 mol)을 넣고 톨루엔 200 ml 과 다이옥산 200 ml 와 물 80 ml 를 넣고 12시간 환류시킨다. 반응이 종결되면 반응물을 감압하여 고체를 얻는다. 에틸에테르와 물을 이용하여 유기층을 분리하고 감압 농축한 후 헥산과 염화메틸렌을 전개용매로 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하고 고체를 건조하여 < 1-d >를 25.0 g ( 54.8 %) 얻었다.

[0334] 1-5. 화학식 28의 합성

[0335] 하기 반응식 5에 의하여 화학식 28을 합성하였다.

[0336] [반응식 5]



[0337]

[0338] <화학식 28>

[0339] 2000 ml 둥근 바닥 플라스크에 상기반응 1-4 으로부터 얻은 <1-e>을 넣고 디클로로에탄 800 ml를 넣고 교반한다. 철(II) 트리플로로메탄 설포네이트 17.0 g(0.034 mol) 를 넣고 12시간 환류한다. 반응이 종결되면 뜨거운 염화 메틸렌을 부어 감압한다. 여액을 농축하고 헥산과 염화메틸렌을 전개용매로 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하고 테트라하이드로퓨란으로 재결정하고 고체를 건조하여 화학식 28을 6.1 g ( 23.5 %) 얻었다.

[0340] MS(MALDI-TOF):m/z= 738.33 [M]<sup>+</sup>

[0341] EA(Elemental Analysis) : 이론값 - C. 94.27 % ; H. 5.73 %

[0342] 실제값 - C. 95.35 % ; H. 4.65 %

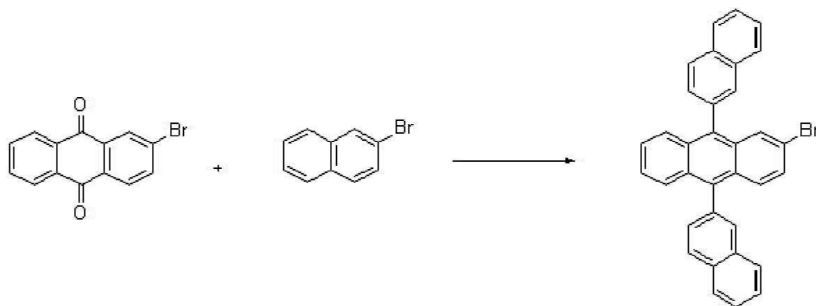
[0343] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) : δ 8.71(d, 1H, Ar-H), δ 8.3(s, 2H, Ar-H) , δ 8.12 (d, 1H, Ar-H), δ 7.91 ~ 7.69 (m, 10H, Ar-H), δ 7.59 ~ 7.32 (m, 16H, Ar-H), δ 1.59 (d, 12H, -CH<sub>3</sub>)

[0344] **합성예 2. 화학식 24의 합성**

[0345] 2-1. 2-a의 합성

[0346] 하기 반응식 6에 의하여 <2-a>를 합성하였다.

[0347] [반응식 6]



[0348]

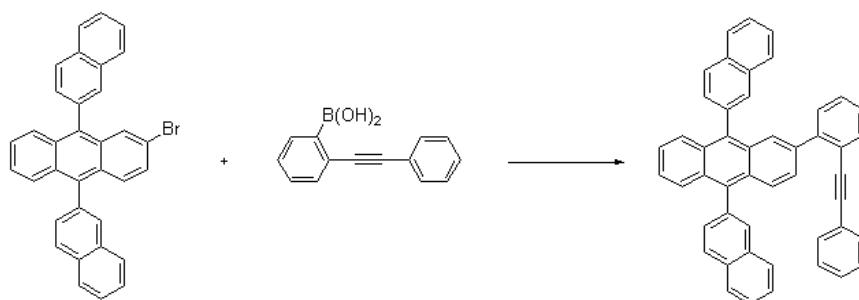
[0349] < 2-a >

[0350] 상기 반응식 3의 합성에서 사용 된 2-브로모-9,9'-디메틸플로렌 대신 2-브로모 나프탈렌을 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <2-a>를 6.5 g (38.0 %) 얻었다.

[0351] 2-2. 2-b의 합성

[0352] 하기 반응식 7에 의하여 <2-b>를 합성하였다.

[0353] [반응식 7]



[0354]

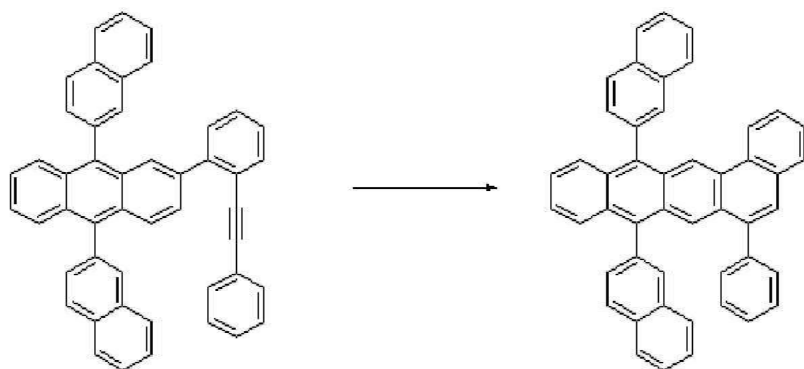
[0355] < 2-b >

[0356] 상기 반응식 4의 합성에서 사용 된 <1-d> 대신 <2-a>를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <2-b>를 8.8 g (44.1 %) 얻었다.

[0357] 2-2. 화학식 27의 합성

[0358] 하기 반응식 8에 의하여 화학식 24를 합성하였다.

[0359] [반응식 8]



[0360]  
[0361] <화학식 24 >

[0362] 상기 반응식 5의 합성에서 사용 된 <1-e> 대신 <2-b>를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 화학식 24를 1.3 g (13.3 %) 얻었다.

[0363] MS(MALDI-TOF): $m/z$ = 606.23 [M]<sup>+</sup>

[0364] EA(Elemental Analysis) : 이론값 - C. 95.02 % ; H. 4.98 %

[0365] 실제값 - C. 94.68 % ; H. 5.32 %

[0366] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) : δ 8.85(d, 1H, Ar-H), δ 8.28(s, 2H, Ar-H) , δ 8.11 (d, 1H, Ar-H), δ 7.96 ~ 7.72 (m, 8H, Ar-H), δ 7.61 ~ 7.36 (m, 14H, Ar-H)

[0367] **합성예 3. 화학식 83의 합성**

[0368] 3-1. 화학식 3-a의 합성

[0369] 하기 반응식 9에 의하여 <3-a> 를 합성하였다.

[0370] [반응식 9]



[0371]  
[0372] <3-a>

[0373] 상기 반응식 1의 합성에서 사용된 페닐 아세틸렌 대신 3-에티닐 피리딘을 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <3-a>를 10.4 g (95.0 %) 얻었다.

[0374] 3-2. 화학식 3-b의 합성

[0375] 하기 반응식 10에 의하여 <3-b> 를 합성하였다.

[0376] [반응식 10]



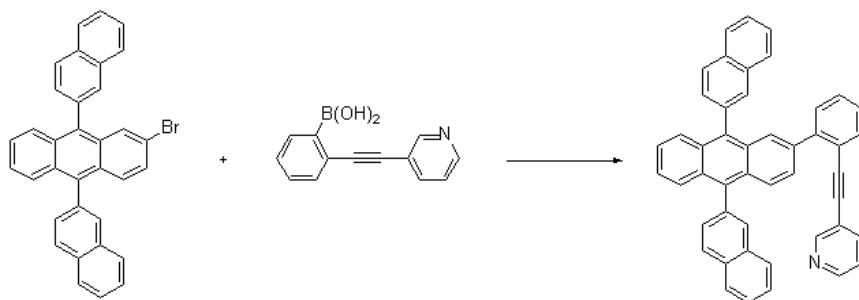
[0377]  
[0378] <3-b>

[0379] 상기 반응식 2의 합성에서 사용 된 <2-a> 대신 <3-a>를 사용한 것을 제외 하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <3-b>를 6.0 g, (66.8 %) 얻었다.

[0380] 3-3. 화학식 3-c의 합성

[0381] 하기 반응식 11에 의하여 <3-c> 를 합성하였다.

[0382] [반응식 11]



[0383]

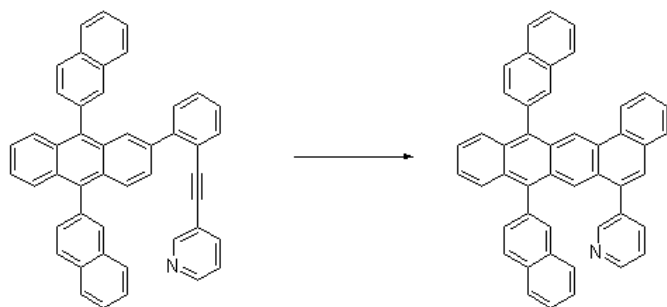
[0384] <3-c>

[0385] 상기 반응식 4의 합성에서 사용 된 <1-d> 대신 <3-b>를 사용한 것을 제외 하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <3-c>를 10.0 g, (64.5 %) 얻었다.

[0386] 3-4. 화학식 83의 합성

[0387] 하기 반응식 12에 의하여 화학식 83를 합성하였다.

[0388] [반응식 12]



[0389]

[0390] <화학식 83>

[0391] 상기 반응식 5의 합성에서 사용 된 <1-d> 대신 <3-c>를 사용한 것을 제외 하고는, 동일한 방법으로 합성하여 화학식 83를 1.5 g, (25.0 %) 얻었다.

[0392] MS(MALDI-TOF):m/z= 607.23 [M]<sup>+</sup>

[0393] EA(Elemental Analysis) : 이론값 - C. 92.89 % ; H. 4.81 % ; N. 2.30

[0394] 실제값 - C. 93.15 % ; H. 4.74 % ; N. 2.11

[0395] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) : δ 8.92(s, 1H, Ar-H), δ 8.83(d, 1H, Ar-H), δ 8.66(d, 1H, Ar-H), δ 8.30(s, 2H, Ar-H), δ 8.11 (d, 1H, Ar-H), δ 8.00 ~ 7.80 (m, 10H, Ar-H), δ 7.65 ~ 7.43 (m, 13H, Ar-H)

[0396] 합성예 4. 화학식 330의 합성

[0397] 4-1. 4-a의 합성

[0398] 하기 반응식 13에 의하여 <4-a>를 합성하였다.

[0399] [반응식 13]



[0400]

[0401] <4-a>

[0402] 1000 ml 둥근 바닥 플라스크에 3-브로모-4-아미노비페닐 54.0 g (0.21 mol)과 염산 300 ml 를 넣고 온도를 0 도로 낮춘다. 소듐 나이트리트 용액 24.4 g (0.21 mol) 을 천천히 적가한다. 동일한 온도에서 1시간 교반하고 100 도로 온도를 올려 1시간 동안 환류하고 반응을 종료한다. 클로로폼과 물로 유기화물을 분리하고 감압 농축한다. 헥산을 전개용매로 컬럼크로마토그래피로 분리하고 농축하여 건조하여 <4-a>를 34.5 g (47.0 %) 얻었다.

[0403] 4-2. 화학식 4-b 의 합성

[0404] 하기 반응식 14에 의하여 <4-b> 를 합성하였다.

[0405] [반응식 14]



[0406]

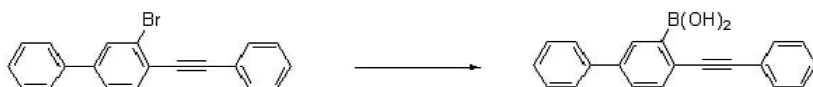
[0407] <4-b>

[0408] 상기 반응식 1의 합성에서 사용 된 1-브로모-2-아이오도벤젠 대신 3-브로모-4-아이오도비페닐을 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <4-b>를 26.3 g (82.0 %) 얻었다.

[0409] 4-3. 화학식 4-c의 합성

[0410] 하기 반응식 15에 의하여 <4-c> 를 합성하였다.

[0411] [반응식 15]



[0412]

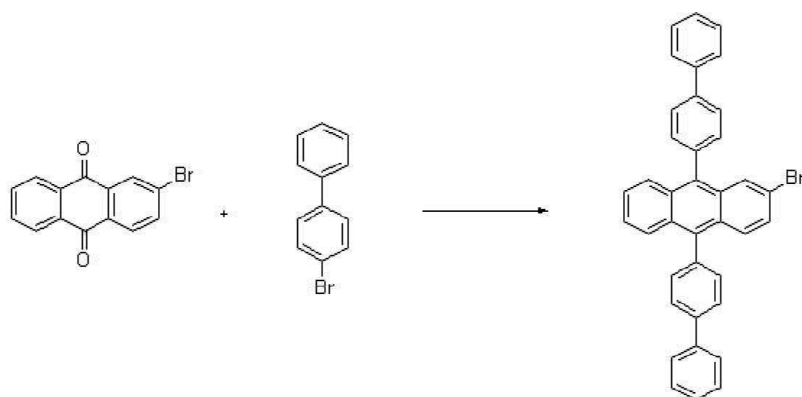
[0413] <4-c>

[0414] 상기 반응식 2의 합성에서 사용 된 <2-a> 대신 <4-b>를 사용한 것을 제외 하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <4-c>를 12.1 g, (51.3 %) 얻었다.

[0415] 4-4. 화학식 4-d의 합성

[0416] 하기 반응식 16에 의하여 <4-d> 를 합성하였다.

[0417] [반응식 16]



[0418]

[0419]

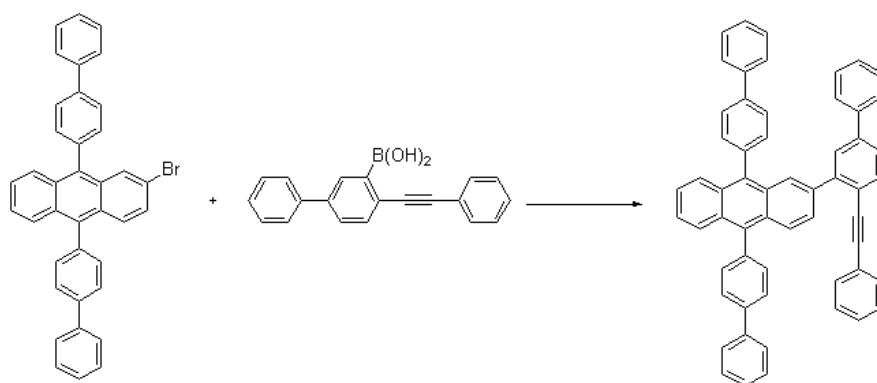
<4-d>

[0420] 상기 반응식 3의 합성에서 사용된 2-브로모-9,9-디메틸플로렌 대신 4-브로모 비페닐을 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <4-d>를 36.2 g (60.0 %) 얻었다.

[0421] 4-5. 화학식 4-e의 합성

[0422] 하기 반응식 17에 의하여 화학식 4-e를 합성하였다.

[0423] [반응식 17]



[0424]

[0425]

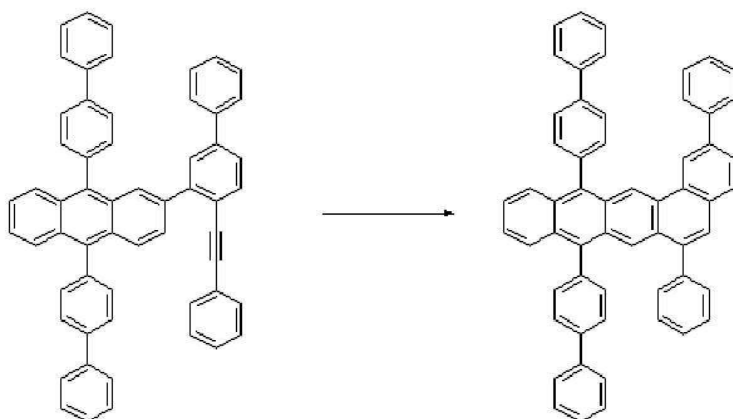
<화학식 4-e>

[0426] 상기 반응식 4의 합성에서 사용된 <1-b> 대신 <4-c>를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 화학식 4-e를 16.1 g, (34.1 %) 얻었다.

[0427] 4-6. 화학식 330의 합성

[0428] 하기 반응식 18에 의하여 화학식 330를 합성하였다.

[0429] [반응식 18]



[0430]

[0431] <화학식 330>

[0432] 상기 반응식 4에서 합성된 <1-d> 대신 <4-e>를 사용한 것을 제외 하고는, 동일한 방법으로 합성하여 화학식 330 을 3.38 g, (21.0 %) 얻었다.

[0433] MS(MALDI-TOF): $m/z$ = 734.30 [M]<sup>+</sup>

[0434] EA(Elemental Analysis) : 이론값 - C. 94.79 % ; H. 5.21 %

[0435] 실제값 - C. 95.24% ; H. 4.76 %

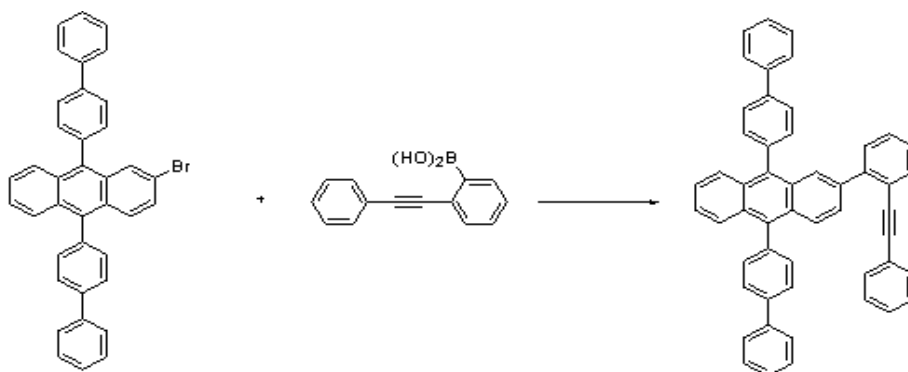
[0436] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) : δ 8.79(d, 1H, Ar-H), δ 8.31(s, 2H, Ar-H) , δ 8.20 (d, 1H, Ar- H), δ 8.04 (d, 1H, Ar- H), δ 7.88 ~ 7.70 (m, 12H, Ar-H), δ 7.56 ~ 7.21 (m, 21H, Ar-H)

[0437] **합성예 5. 화학식 29의 합성**

[0438] 5-1. 5-a의 합성

[0439] 하기 반응식 19에 의하여 <5-a>를 합성하였다.

[0440] [반응식 19]



[0441]

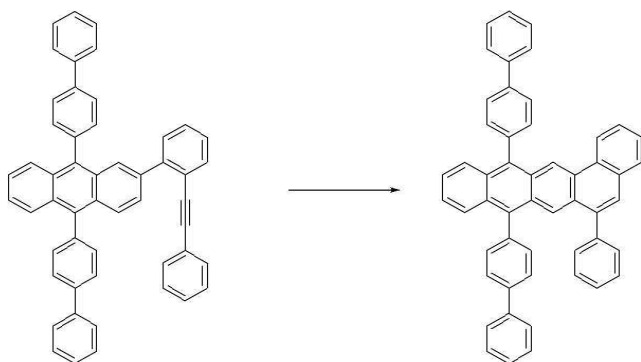
[0442] <5-a>

[0443] 상기 반응식 5의 합성에서 사용 된 <1-e> 대신 9,10-비페닐-2-브로모 안트라센을 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 5-a 를 16 g (57.8 %) 얻었다.

[0444] 5-2. 5-b의 합성

[0445] 하기 반응식 20에 의하여 화학식 29를 합성하였다.

[0446] [반응식 20]



<화학식 29>

상기 반응식 5의 합성에서 사용 된 <1-e> 대신 <5-a>를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 화학식 29를 4.5 g (13.3 %) 얻었다.

MS(MALDI-TOF):  $m/z = 658.27[M]^+$

EA(Elemental Analysis) : 이론값 - C. 94.80 % ; H. 5.20 %

실제값 - C. 94.99 % ; H. 5.01 %

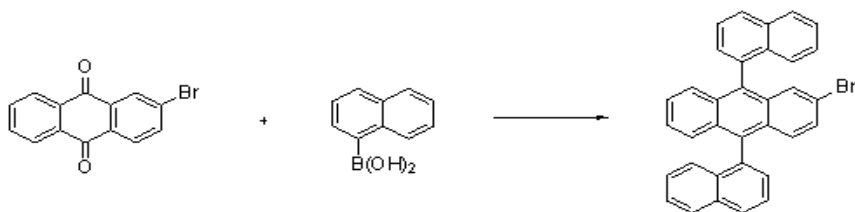
$^1H$  NMR ( $CDCl_3$ ) :  $\delta$  8.74(d, 1H, Ar-H),  $\delta$  8.32(s, 2H, Ar-H) ,  $\delta$  8.16 (d, 1H, Ar-H),  $\delta$  7.94 ~ 7.76 (m, 12H, Ar-H),  $\delta$  7.54 ~ 7.21 (m, 18H, Ar-H)

#### 합성예 6. 화학식 10의 합성

6-1. 6-a의 합성

하기 반응식 21에 의하여 <6-a>를 합성하였다.

[반응식 21]



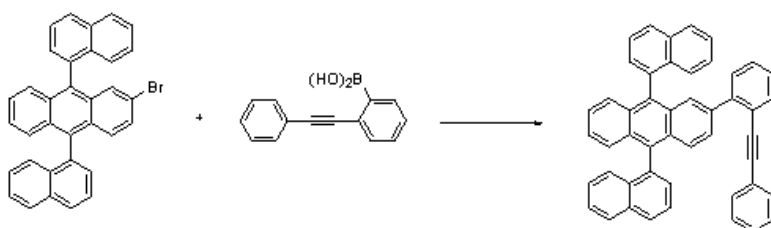
<6-a>

상기 반응식 3의 합성에서 사용 된 2-브로모-9,9-디메틸플로렌 대신 1-나프탈렌 보론산을 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 6-a 를 17.3 g (26.1 %) 얻었다.

6-2. 6-b의 합성

하기 반응식 22에 의하여 <6-b>를 합성하였다

[반응식 22]



[0465] <6-b>

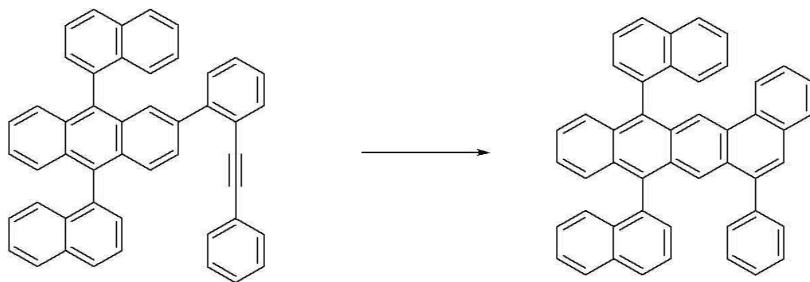
[0466] 상기 반응식 4의 합성에서 사용 된 <1-c> 대신 <6-a> 를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 6-b 를 8.8 g (42.7 %) 얻었다.

[0467] 6-3. 화학식 10의 합성

[0468] 하기 반응식 23에 의하여 화학식 10을 합성하였다.

[0469] [반응식 23]

[0470]



[0471]

[0472] <화학식 10>

[0473] 상기 반응식 5 합성에서 사용 된 <1-d> 대신 <6-b>를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 화학식 10을 1.4 g (16.5 %) 얻었다.

[0474] MS(MALDI-TOF): $m/z = 606.23[M]^+$

[0475] EA(Elemental Analysis) : 이론값 - C. 95.02 % ; H. 4.98 %

[0476] 실제값 - C. 94.99 % ; H. 5.01 %

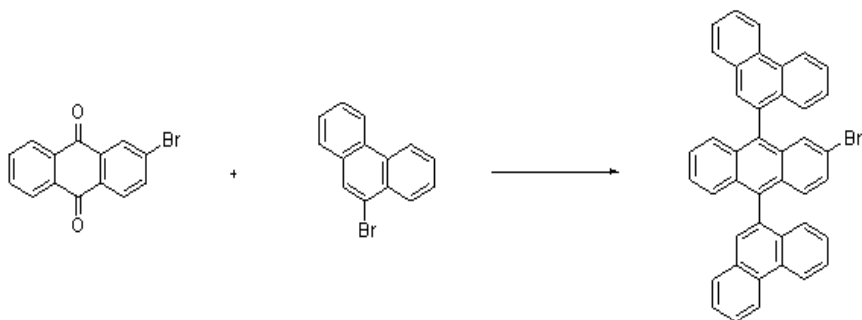
[0477]  $^1H$  NMR ( $CDCl_3$ ) :  $\delta$  8.81(d, 1H, Ar-H),  $\delta$  8.34 ~ 8.28 (m, 4H, Ar-H),  $\delta$  8.22(s, 2H, Ar-H) ,  $\delta$  7.94 ~ 7.76 (m, 14H, Ar-H),  $\delta$  7.54 ~ 7.21 (m, 9H, Ar-H)

[0478] **합성예 7. 화학식 144의 합성**

[0479] 7-1. 7-a의 합성

[0480] 하기 반응식 24에 의하여 <7-a>를 합성하였다.

[0481] [반응식 24]



[0482]

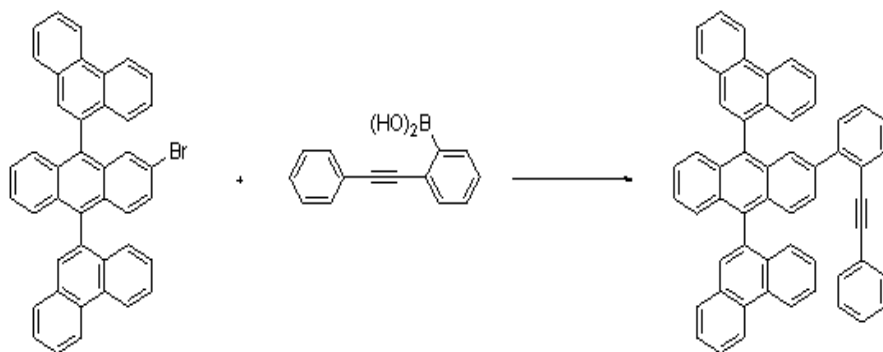
[0483] <7-a>

[0484] 상기 반응식 3 합성에서 사용 된 2-브로모-9,9-디메틸플로렌 대신 9-브로모 페난트렌을 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <7-a> 를 25.3 g (42.5 %) 얻었다.

[0485] 7-2. 7-b의 합성

[0486] 하기 반응식 25에 의하여 <7-b>를 합성하였다.

[0487] [반응식 25]



[0488]

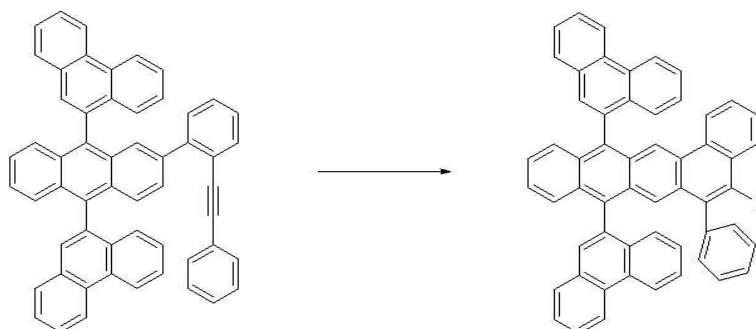
[0489] <7-b>

[0490] 상기 반응식 4의 합성에서 사용된 <1-c> 대신 <7-a> 를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 7-b 를 12.3 g (41.7 %) 얻었다.

[0491] 7-3. 7-c의 합성

[0492] 하기 반응식 26에 의하여 <7-c>를 합성하였다.

[0493] [반응식 26]



[0494]

[0495] <7-c>

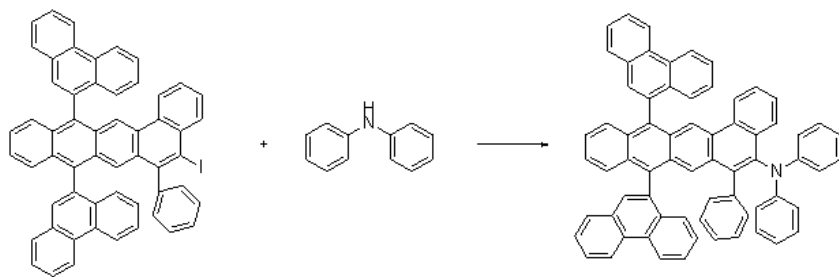
[0496] 250 ml 둥근바닥 플라스크에 질소기류 상태에서 <7-b> 를 넣고, 디클로로메탄 120 ml 를 넣는다. 반응물의 온도를 -78 도로 내린 후에 아이오도 모노클로라이드 1.0 몰 디클로로메탄 34 ml (0.034 mol)을 천천히 적가한다.

[0497] 4시간 교반하고 반응을 종료한다. 디클로로메탄과 물을 이용하여 유기층을 분리 하고 여액을 농축하고 헥산과 염화메틸렌을 전개용매로 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하고 헥산으로 재결정하여 고체를 건조 하여 <7-c> 를 11.5 g (79.3 %) 얻었다.

[0498] 7-3. 화학식 143 의 합성

[0499] 하기 반응식 27에 의하여 화학식 144를 합성하였다.

[0500] [반응식 27]



[0501]  
[0502] <화학식 144>

[0503] 500 ml 둥근바닥플라스크에 <7-c>, 디페닐 아민 3.5 g (0.021 mol), Pd(OAc)<sub>2</sub>, 0.062 g (0.00028 mol), BINAP 0.17 g (0.00038 mol), 소듐 터셜-부톡사이드 3.94 g (0.041 mol) 을 넣는다. 톨루엔 300 ml를 넣고 12시간 환류시킨다.

[0504] 뜨거운 톨루엔으로 필터하고 여액을 농축하여 헥산과 염화메틸렌을 전개용매로 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하고 헥산으로 재결정하여 고체를 건조 하여 화학식 144를 5.3 g (43.3 %) 얻었다.

[0505] MS(MALDI-TOF): m/z = 873.4 [M]<sup>+</sup>

[0506] EA(Elemental Analysis) : 이론값 - C. 93.44 % ; H. 4.96 % ; N 1.60 %

[0507] 실제값 - C. 93.42 % ; H. 5.01 % ; N 1.57 %

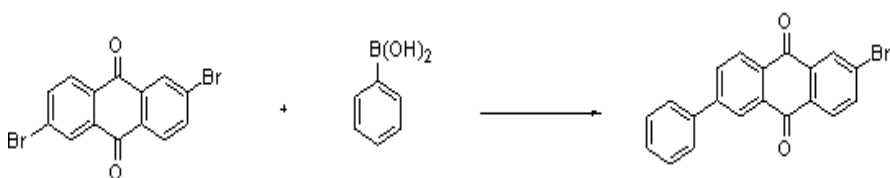
[0508] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) : δ 8.90(d, 1H, Ar-H), δ 8.24(s, 2H, Ar-H), δ 8.04 ~ 7.82 (m, 20H, Ar-H), δ 7.64 ~ 7.21 (m, 16H, Ar-H), δ 7.19 ~ 7.08 (m, 4H, Ar-H)

[0509] **합성예 8. 화학식 231의 합성**

[0510] 8-1. 8-a의 합성

[0511] 하기 반응식 28에 의하여 <8-a>를 합성하였다.

[0512] [반응식 28]



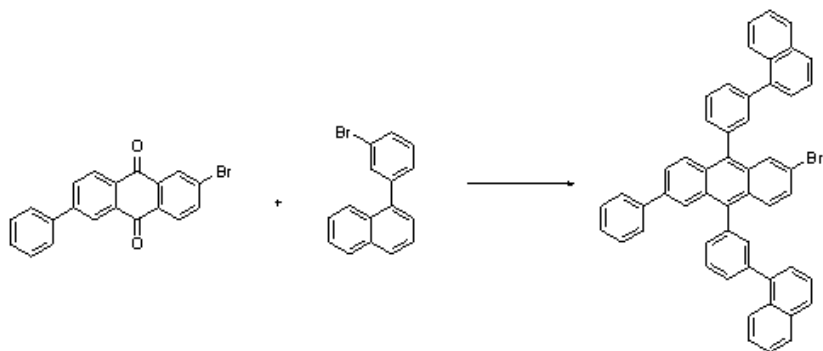
[0513]  
[0514] <8-a>

[0515] 2000 ml 둥근바닥플라스크에 2,6-디브로모 안트라퀴논 100 g (0.27 mol), 페닐 보론산 28.32 g (0.23 mol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 6.31 g (0.0055 mol), 탄산칼륨 75.52 g (0.55 mol)을 넣는다. 톨루엔 500 ml, 1,4-디옥산 500 ml, 물 200 ml 를 넣고 12시간 환류한다. 반응물을 식히고 에틸에테르와 물을 이용하여 유기층을 분리하고 감압 농축한 후 건조한다. 헥산과 염화메틸렌을 전개용매로 사용하여 컬럼크로마토 그래피로 분리하고 헥산으로 재결정하여 고체를 건조 하여 <8-a> 를 50.2 g (51.0 %) 얻었다.

[0516] 8-2. 8-b의 합성

[0517] 하기 반응식 29에 의하여 <8-b>를 합성하였다.

[0518] [반응식 29]



[0519]

[0520]

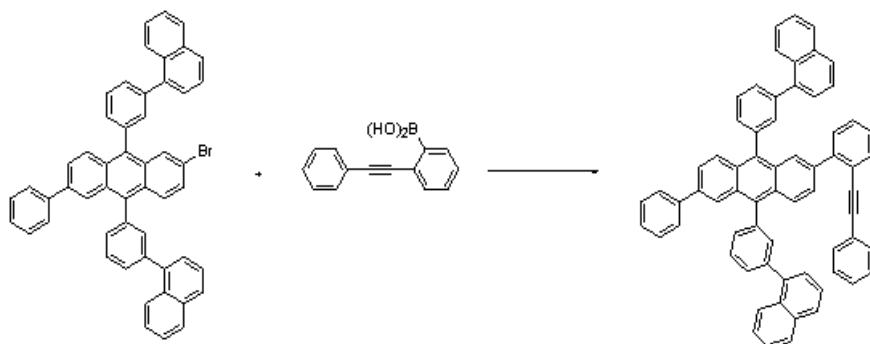
<8-b>

[0521] 상기 반응식 3 합성에서 사용 된 2-브로모-9,9-디메틸플로렌 대신 3-브로모 페닐-1-나프탈렌 사용한 것을 제외 하고는, 동일한 방법으로 합성하여 <8-b> 를 51.0 g (49.0 %) 얻었다.

[0522] 8-3. 8-c의 합성

[0523] 하기 반응식 30에 의하여 <8-c>를 합성하였다.

[0524] [반응식 30]



[0525]

[0526]

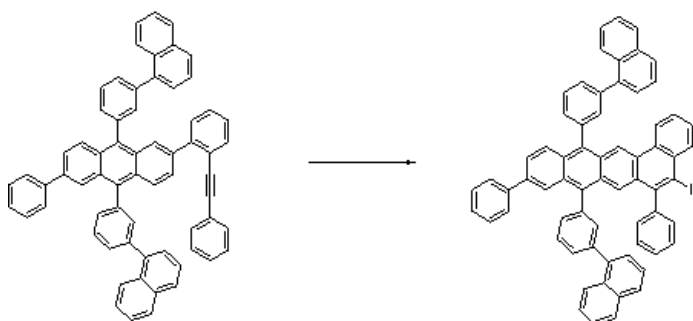
<8-c>

[0527] 상기 반응식 4의 합성에서 사용 된 <1-c> 대신 <8-b> 를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 8-b 를 31.2 g (53.6 %) 얻었다.

[0528] 8-4. 8-d의 합성

[0529] 하기 반응식 31에 의하여 <8-d>를 합성하였다.

[0530] [반응식 31]



[0531]

[0532]

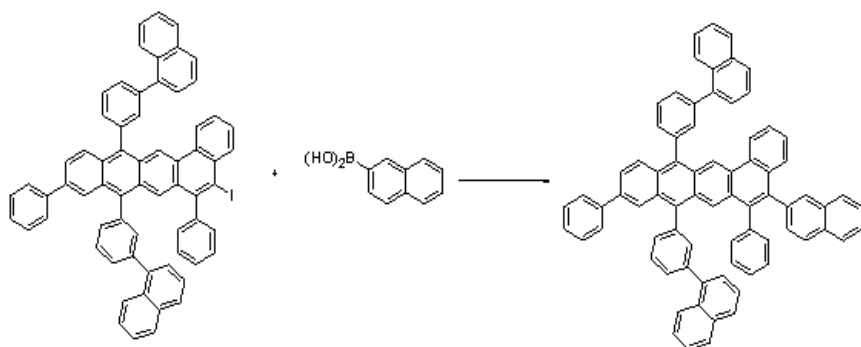
<8-d>

[0533] 상기 반응식 26의 합성에서 사용 된 <7-b> 대신 <8-c> 를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법으로 합성하여 8-d 를 12.8 g (35.9 %) 얻었다.

[0534] 8-5. 화학식 231의 합성

[0535] 하기 반응식 32에 의하여 화학식 231을 합성하였다.

[0536] [반응식 32]



[0537]

[0538] <화학식 231>

[0539] 250 ml 둥근 바닥 플라스크에 상기반응 31으로부터 얻은 <8-d>과 2-나프틸 보론산 2.92 g (0.017 mol), Pd(pph<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.64 g (0.005 mol) 와 칼륨 카보네이트 5.52 g(0.040 mol)을 넣고 톨루엔 60 ml 과 다이옥산 60 ml 와 물 40 ml 를 넣고 12시간 환류시킨다. 반응이 종결되면 반응물을 감압하여 고체를 얻는다. 에틸에테르와 물을 이용하여 유기층을 분리하고 감압 농축한 후 헥산과 염화메틸렌을 전개용매로 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하고 고체를 건조하여 화학식 231을 2.6 g (66.6 %) 얻었다.

[0540] MS(MALDI-TOF):m/z= 884.3[M]<sup>+</sup>

[0541] EA(Elemental Analysis) : 이론값 - C. 94.99 % ; H. 5.01 %

[0542] 실제값 - C. 94.97 % ; H. 5.03 %

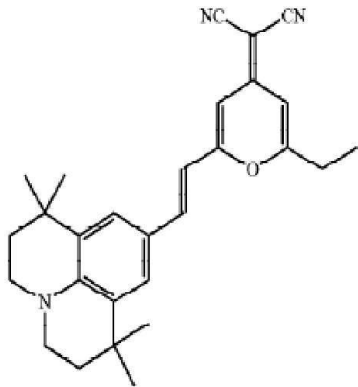
[0543] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) : δ 8.78(d, 1H, Ar-H), δ 8.40 ~ 8.34(m, 3H, Ar-H), δ 8.22(s, 2H, Ar-H) , δ 8.1 ~ 7.7 (m, 14H, Ar-H), δ 7.6 ~ 7.2 (m, 24H, Ar-H)

[0544] **실시예**

[0545] 유기 발광다이오드의 제조

[0546] ITO 글래스의 발광 면적이 2 mm x 2 mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1x10<sup>-6</sup> torr가 되도록 한 후 유기물을 상기 ITO위에 DNTPD(700Å), NPd(300Å), 본 발명에 따른 화합물 10, 24, 28, 29, 83, 144, 231 및 330 + RD (1.0%)(400Å), Alq3 (300Å), LiF(5Å), Al(1,000Å)의 순서로 성막하였으며, 0.4mA에서 측정을 하였다. 상기 RD의 구조는 다음과 같다.

[0547] [RD]



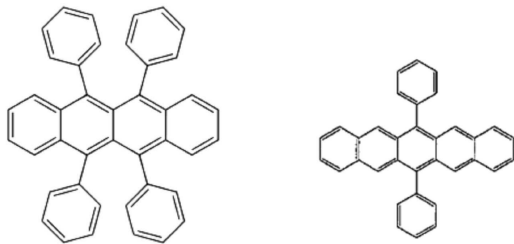
[0548]

[0549] DCJTB

[0550] **비교예**

[0551] 비교예를 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 대신 rubrene, 화합물 500을 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작하였다. 상기 rubrene 및 화합물 500의 구조는 다음과 같다.

[0552] [rubrene] [화합물 500]



[0553]

**표 1**

[0554]

| 구분   | 화합식     | 도펀트 | 도핑<br>농도% | V   | EL Eff.<br>(cd/A) | CIE <sub>x</sub> | CIE <sub>y</sub> |
|------|---------|-----|-----------|-----|-------------------|------------------|------------------|
| 실시예1 | 28      | RD  | 1.0%      | 3.8 | 6.33              | 0.63             | 0.36             |
| 실시예2 | 24      |     |           | 4.3 | 6.33              | 0.65             | 0.35             |
| 실시예3 | 83      |     |           | 4.1 | 7.78              | 0.63             | 0.36             |
| 실시예4 | 330     |     |           | 3.9 | 10.01             | 0.64             | 0.36             |
| 실시예5 | 29      |     |           | 3.7 | 8.01              | 0.64             | 0.36             |
| 실시예6 | 10      |     |           | 3.8 | 11.2              | 0.65             | 0.36             |
| 실시예7 | 144     |     |           | 4.1 | 12.5              | 0.63             | 0.35             |
| 실시예8 | 231     |     |           | 3.9 | 11.8              | 0.65             | 0.36             |
| 비교예1 | rubrene |     |           | 4.5 | 2.98              | 0.65             | 0.34             |
| 비교예2 | 화합물 500 |     |           | 4.3 | 5.76              | 0.64             | 0.36             |

[0555] 상기 표 1에서 보는 바와 같이 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물은 종래의 호스트 재료로 많이 쓰이는 rubrene, 화합물 500에 비하여 구동전압이 낮고, 발광효율이 우수한 특성을 보인다.

[0556] 본 발명에 대해 상기 합성예 및 실시예를 참고하여 설명하였으나, 이는 예시적인 것에 불과하며, 본 발명에 속하는 기술 분야의 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서 본 발명의 진정한 기술적 보호범위는 첨부된 특허청구범위의 기술적 사상에 의해 정해져야 할 것이다.

도면

도면1

|       |
|-------|
| 제2전극  |
| 전자주입층 |
| 전자수송층 |
| 발광층   |
| 정공수송층 |
| 정공주입층 |
| 제1전극  |

|                |                                                                                                                                                                                           |         |            |
|----------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|------------|
| 专利名称(译)        | 标题：新化合物和含有它的有机发光器件                                                                                                                                                                        |         |            |
| 公开(公告)号        | <a href="#">KR1020120125942A</a>                                                                                                                                                          | 公开(公告)日 | 2012-11-19 |
| 申请号            | KR1020110127858                                                                                                                                                                           | 申请日     | 2011-12-01 |
| [标]申请(专利权)人(译) | 三星显示有限公司<br>SFC股份有限公司                                                                                                                                                                     |         |            |
| 申请(专利权)人(译)    | 三星显示器有限公司<br>에스에프씨주식회사                                                                                                                                                                    |         |            |
| 当前申请(专利权)人(译)  | 三星显示器有限公司<br>에스에프씨주식회사                                                                                                                                                                    |         |            |
| [标]发明人         | PARK SOO JIN<br>박수진<br>NAIJO TSUYOSHI<br>나이조츠요시<br>CHOI KEON HA<br>최건하<br>SHIM JI HYE<br>심지혜<br>JE JONG TAE<br>제종태<br>KIM JEONG SOO<br>김정수<br>KWON HYUN JUNG<br>권현중<br>SHIN YOO NA<br>신유나 |         |            |
| 发明人            | 박수진<br>나이조츠요시<br>최건하<br>심지혜<br>제종태<br>김정수<br>권현중<br>신유나                                                                                                                                   |         |            |
| IPC分类号         | C09K11/06 H01L51/50                                                                                                                                                                       |         |            |
| CPC分类号         | H01L51/0052 H01L51/0055 H01L51/0058                                                                                                                                                       |         |            |
| 优先权            | 1020110043650 2011-05-09 KR                                                                                                                                                               |         |            |
| 外部链接           | <a href="#">Espacenet</a>                                                                                                                                                                 |         |            |

#### 摘要(译)

本发明涉及含有下述化学式1所示化合物的有机发光器件及含有该化合物的有机层：关于003c#化学式10 03e#图像存在（专业参考）化学式的描述参见详细信息发明的。

|       |
|-------|
| 제2전극  |
| 전자주입층 |
| 전자수송층 |
| 발광층   |
| 정공수송층 |
| 정공주입층 |
| 제1전극  |