



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2019년10월01일

(11) 등록번호 10-2026824

(24) 등록일자 2019년09월24일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C07D 495/04* (2006.01) *C07D 209/82* (2006.01)  
*C09K 11/06* (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2012-0069472  
 (22) 출원일자 2012년06월27일  
 심사청구일자 2017년06월26일  
 (65) 공개번호 10-2014-0001577  
 (43) 공개일자 2014년01월07일  
 (56) 선행기술조사문헌  
 JP2011251962 A  
 JP2012001538 A  
 KR1020110016047 A  
 WO2011081286 A2

(73) 특허권자  
 삼성디스플레이 주식회사  
 경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)  
 (72) 발명자  
 이정섭  
 경기 용인시 기흥구 삼성2로 95, (농서동)  
 양승각  
 경기 용인시 기흥구 삼성2로 95, (농서동)  
 (74) 대리인  
 리앤목특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항

심사관 : 지무근

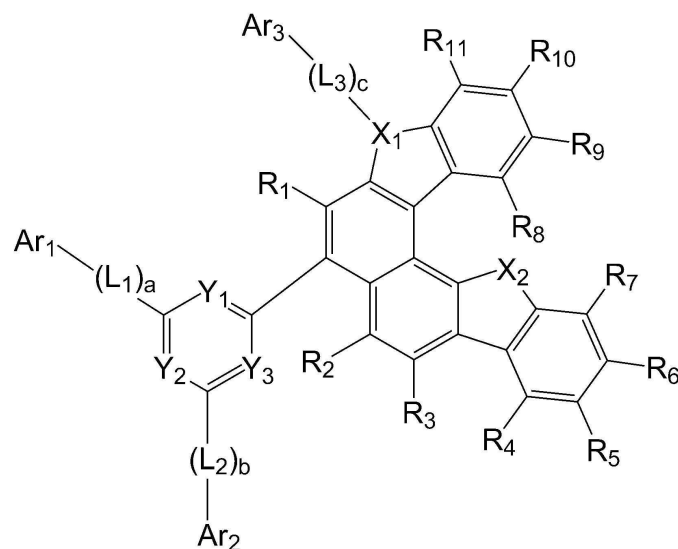
(54) 발명의 명칭 신규한 축합환 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

### (57) 요약

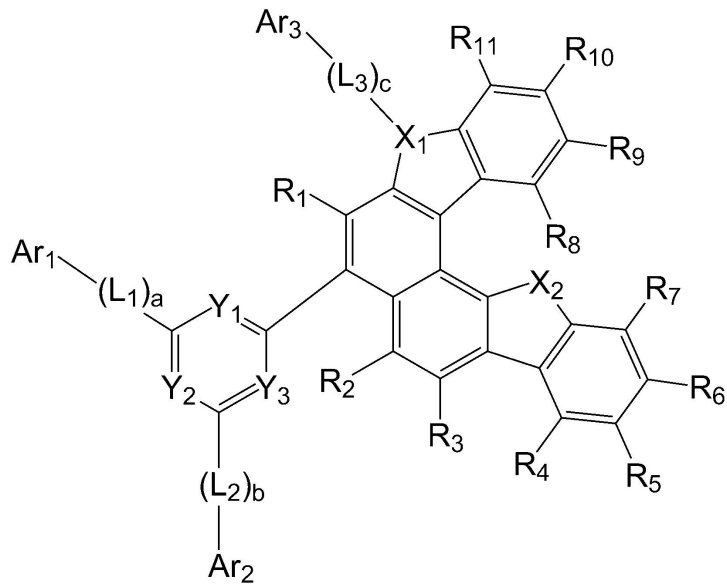
하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물(fused ring compound)이 제공된다:

(뒷면에 계속)

대표도 - 도2



<화학식 1>



상기 화학식 1 중,  $X_1$ ,  $X_2$ ,  $Y_1$  내지  $Y_3$ ,  $Ar_1$  내지  $Ar_3$ ,  $R_1$  내지  $R_{11}$ ,  $L_1$  내지  $L_3$ ,  $a$ ,  $b$  및  $c$ 는 발명의 상세한 설명의 해당 부분을 참조한다.

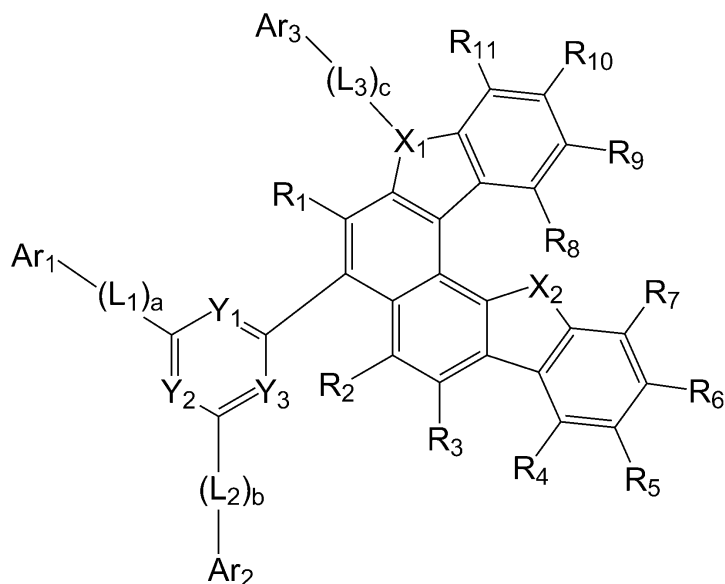
## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물(fused ring compound):

<화학식 1>



상기 식 중,

$X_1$ 은 N이고;

$X_2$ 는 S, O, 및 Si( $R_{12}$ )( $R_{13}$ ) 중 하나이고;

$Y_1$  내지  $Y_3$ 는 서로 독립적으로 CH 및 N 중 하나이며, 단  $Y_1$  내지  $Y_3$  중 적어도 하나는 N이고;

$Ar_1$  내지  $Ar_3$ 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴티오기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴아미노기, 및 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{40}$ 헤테로아릴기 중 1종이고;

$R_1$  내지  $R_{14}$ 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{40}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{40}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{40}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{40}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_3-C_{40}$ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_3-C_{40}$ 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴티오기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴아미노기, 및 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{40}$ 헤테로아릴기 중 1종이고;

$L_1$  내지  $L_3$ 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴렌기이고;

a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수 중 하나이다.

#### 청구항 2

삭제

### 청구항 3

제1항에 있어서,

상기 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>가 N이며 상기 Y<sub>3</sub>가 CH이거나; 상기 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>3</sub>가 N이며 상기 Y<sub>2</sub>가 CH이거나; 상기 Y<sub>2</sub> 및 Y<sub>3</sub>가 N이며 상기 Y<sub>1</sub>이 CH이거나; 또는 상기 Y<sub>1</sub>, Y<sub>2</sub> 및 Y<sub>3</sub>가 N인 축합환 화합물.

### 청구항 4

제1항에 있어서,

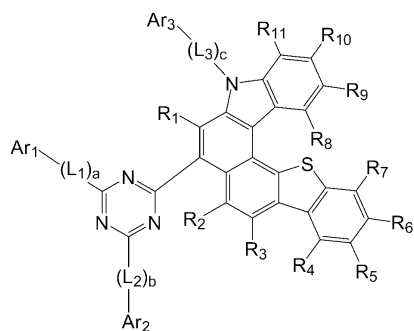
상기 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>3</sub>가 N이며 상기 Y<sub>2</sub>가 CH이거나; 또는 상기 Y<sub>1</sub>, Y<sub>2</sub> 및 Y<sub>3</sub>가 N인 축합환 화합물.

### 청구항 5

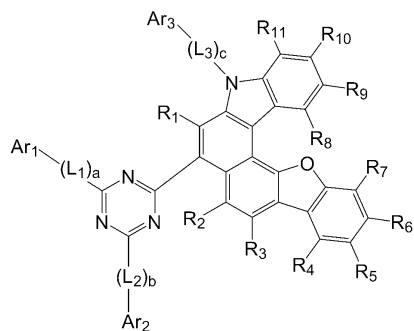
제1항에 있어서,

상기 축합환 화합물이 하기 화학식 2a 내지 2f로 표시되는 축합환 화합물:

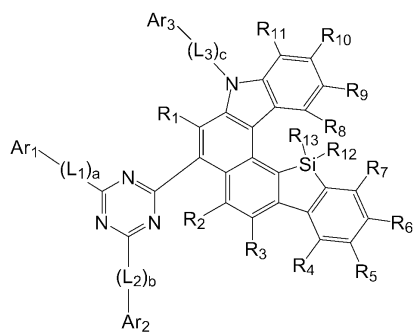
<화학식 2a>



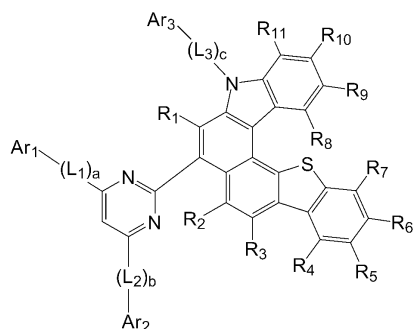
<화학식 2b>



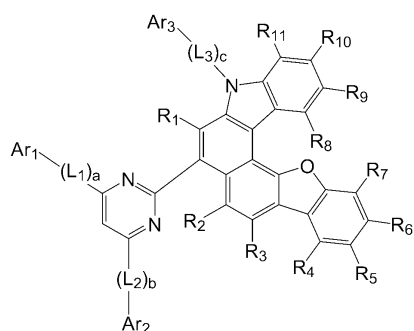
<화학식 2c>



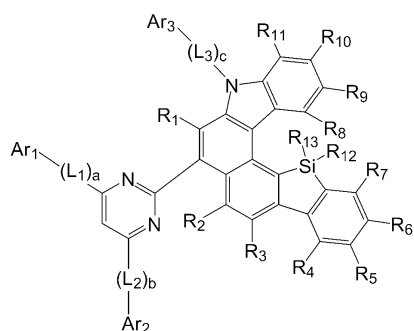
<화학식 2d>



<화학식 2e>



<화학식 2f>



상기 식 중,

Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>13</sub>, L<sub>1</sub>, 내지 L<sub>3</sub>, a, b 및 c는 상기 화학식 1에서 정의된 바와 동일하다.

## 청구항 6

제1항에 있어서,

상기 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>헤테로아릴기 중 1종이고;

상기 L<sub>1</sub> 내지 L<sub>3</sub>는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 및 치환 또는 비치환된 나프틸렌기 중 1종이고;

상기 a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 및 1 중 하나인 축합환 화합물.

## 청구항 7

제1항에 있어서,

상기 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기(phenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기

(naphthyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 페날레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 피레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크리세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 테트라세닐(tetraceny), 치환 또는 비치환된 테트라페닐(tetraphenyl), 치환 또는 비치환된 벤조안트릴기(benzoanthryl), 치환 또는 비치환된 벤조페난트레닐기(benzophenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 비페닐(biphenyl), 치환 또는 비치환된 터페닐(terphenyl), 치환 또는 비치환된 인데닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 벤조플루오레닐기(benzofluorenyl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluorantheny), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기(benzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기(dibenzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조나프토티오펜기(benzonaphthothiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기(benzofuranyl), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기(dibenzofuranyl), 치환 또는 비치환된 벤조나프토폴라닐기(benzonaphthofuranyl), 치환 또는 비치환된 벤조실릴기(benzosilyl), 치환 또는 비치환된 디벤조실릴기(dibenzosilyl), 치환 또는 비치환된 벤조나프토폴실릴기(benzonaphthosilyl), 치환 또는 비치환된 인돌기(indolyl), 치환 또는 비치환된 카바졸기(carbazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조카바졸기(benzocarbazolyl), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기(quinoliny), 및 치환 또는 비치환된 아크리디닐(acridiny), 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기(isoquinoliny), 및 치환 또는 비치환된 벤조이소퀴놀리닐기(benzoisoquinoliny) 중 1종이고;

상기  $L_1$  내지  $L_3$ 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 및 치환 또는 비치환된 나프틸렌기 중 1종이고;

상기 a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 및 1 중 하나인 축합환 화합물.

## 청구항 8

제1항에 있어서,

상기  $Ar_1$  내지  $Ar_3$ 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 테트라세닐, 치환 또는 비치환된 테트라페닐, 치환 또는 비치환된 벤조안트릴기, 치환 또는 비치환된 벤조페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조실릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조실릴기, 치환 또는 비치환된 인돌기, 치환 또는 비치환된 카바졸기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 및 치환 또는 비치환된 아크리디닐 중 1종이고;

상기  $L_1$  내지  $L_3$ 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 및 치환 또는 비치환된 나프틸렌기 중 1종이고;

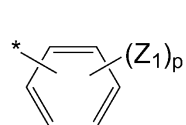
상기 a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 및 1 중 하나인 축합환 화합물.

## 청구항 9

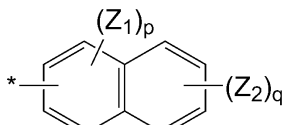
제8항에 있어서,

상기  $Ar_1$  내지  $Ar_3$ 가 서로 독립적으로 하기 화학식 3a 내지 3m으로 표시되는 축합환 화합물:

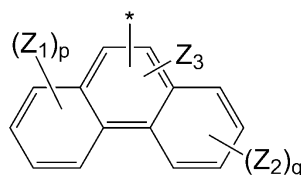
<화학식 3a>



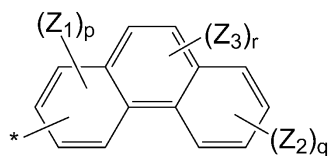
<화학식 3b>



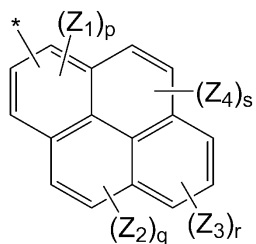
<화학식 3c>



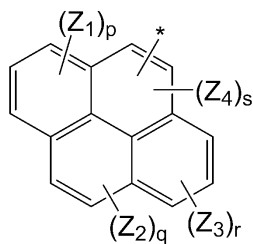
<화학식 3d>



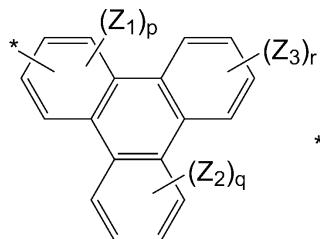
<화학식 3e>



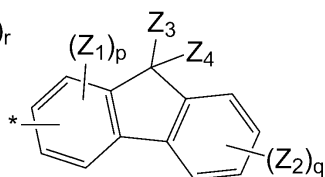
<화학식 3f>



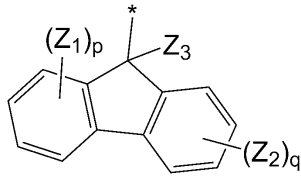
<화학식 3g>



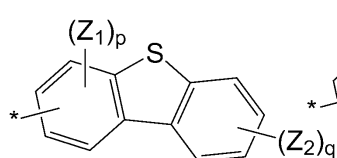
<화학식 3h>



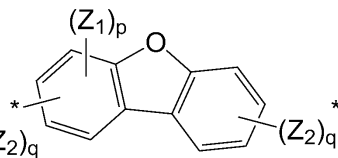
<화학식 3i>



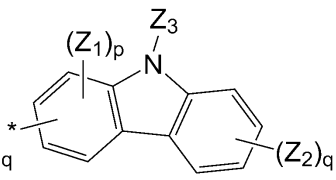
<화학식 3j>



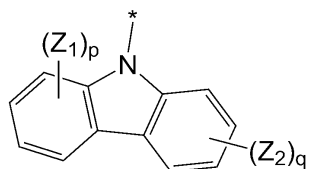
<화학식 3k>



<화학식 3l>



<화학식 3m>



상기 식 중,

$Z_1$  내지  $Z_4$ 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 및 치환 또는 비치환된 페닐기 중 1종이고;

$p$ ,  $q$ ,  $r$  및  $s$ 는 서로 독립적으로 1 내지 5의 정수 중 하나이고;

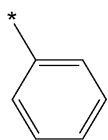
\*는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 중 상기 화학식 3a 내지 3m으로 표시되는 부분을 제외한 나머지 부분과의 결합을 나타낸다.

## 청구항 10

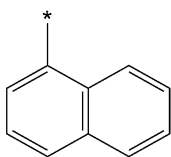
제8항에 있어서,

상기  $Ar_1$  내지  $Ar_3$ 가 서로 독립적으로 하기 화학식 4a 내지 4j로 표시되는 축합환 화합물:

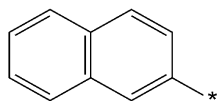
<화학식 4a>



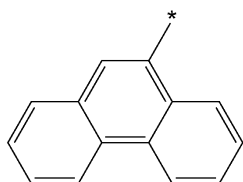
<화학식 4b>



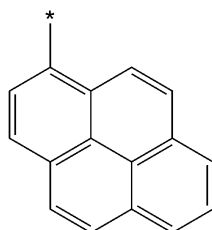
<화학식 4c>



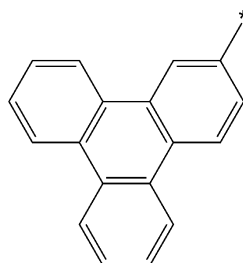
<화학식 4d>



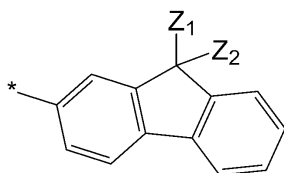
<화학식 4e>



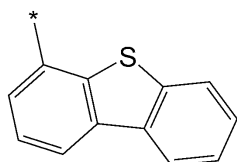
<화학식 4f>



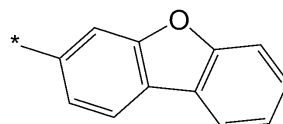
<화학식 4g>



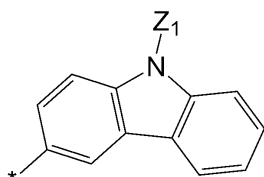
<화학식 4h>



<화학식 4i>



<화학식 4j>



상기 식 중,

$Z_1$  및  $Z_2$ 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 및 치환 또는 비치환된 페닐기 중 1종이고;

\*는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 중 상기 화학식 3a 내지 3m으로 표시되는 부분을 제외한 나머지 부분과의 결합을 나타낸다.

## 청구항 11

제1항에 있어서,

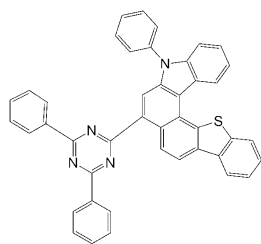
상기  $R_1$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 및 치환 또는 비치환된 페닐기 중 1종인 축합환 화합물.

## 청구항 12

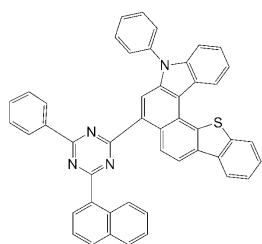
제1항에 있어서,



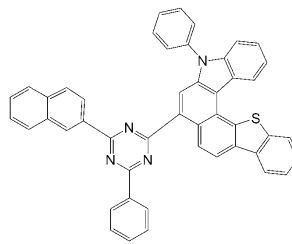
상기 축합환 화합물이 하기 화합물 1 내지 96 중 하나인 축합환 화합물:



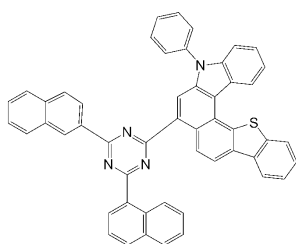
1



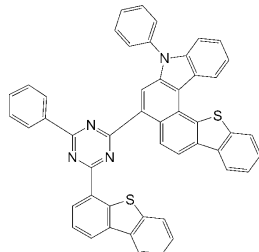
2



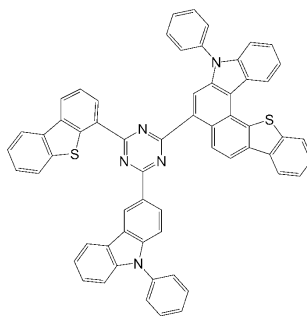
3



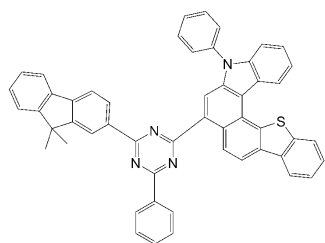
4



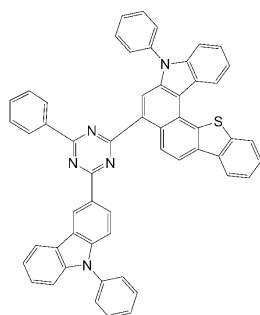
5



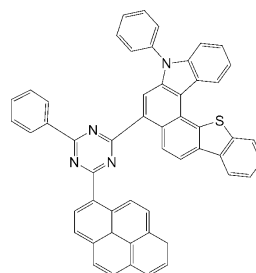
6



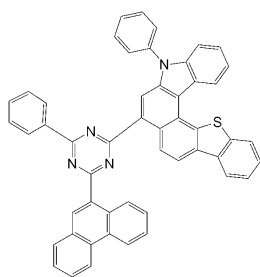
7



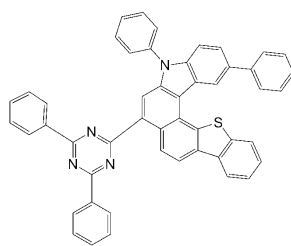
8



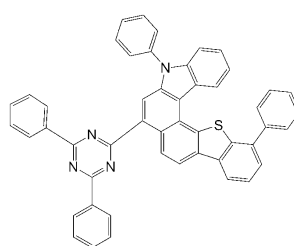
9



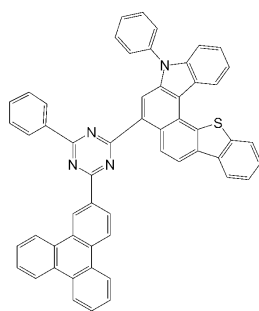
10



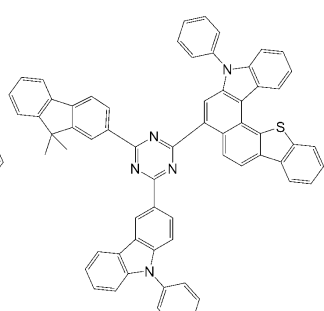
11



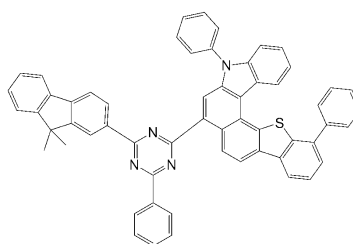
12



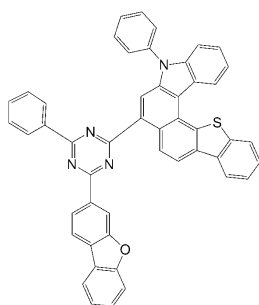
13



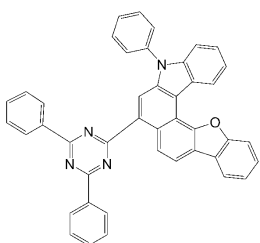
14



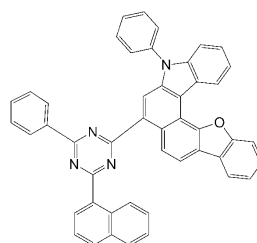
15



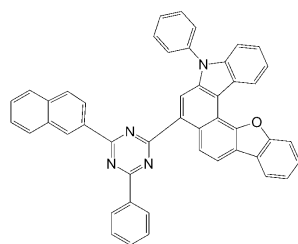
16



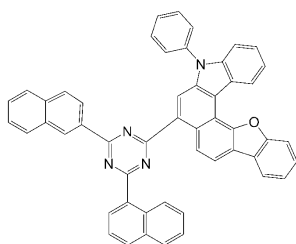
17



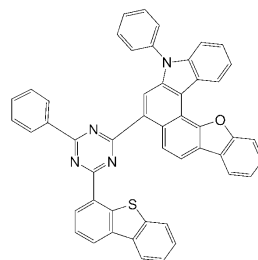
18



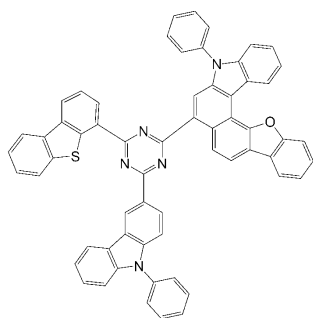
19



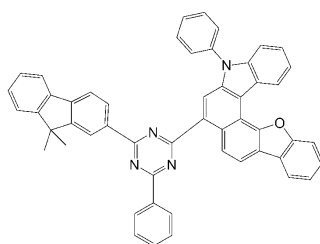
20



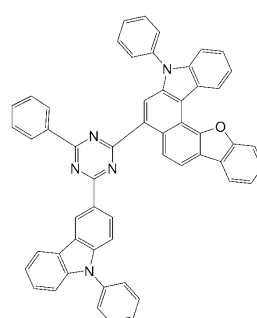
21



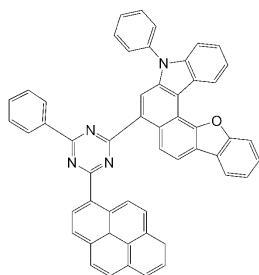
22



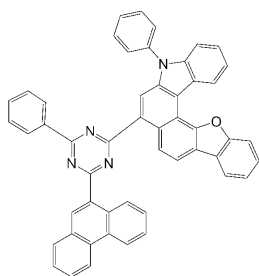
23



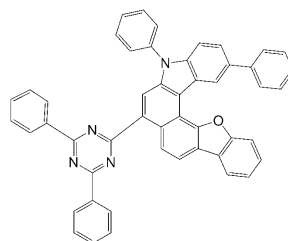
24



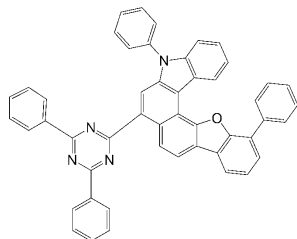
25



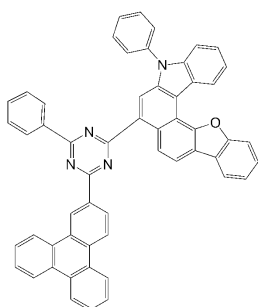
26



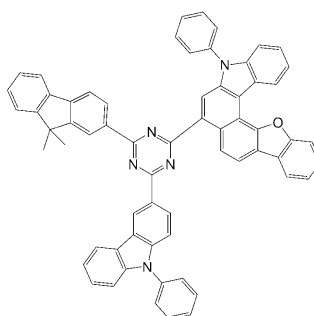
27



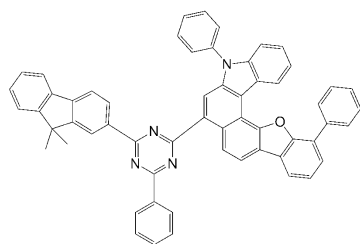
28



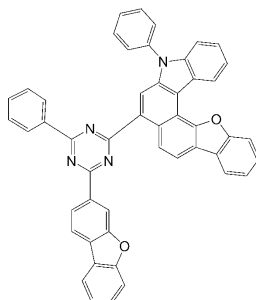
29



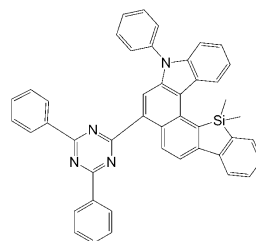
30



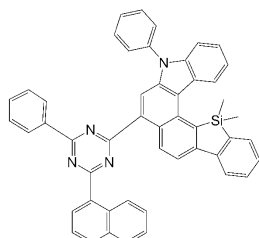
31



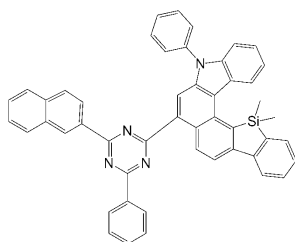
32



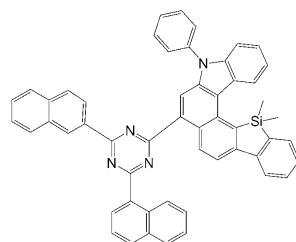
33



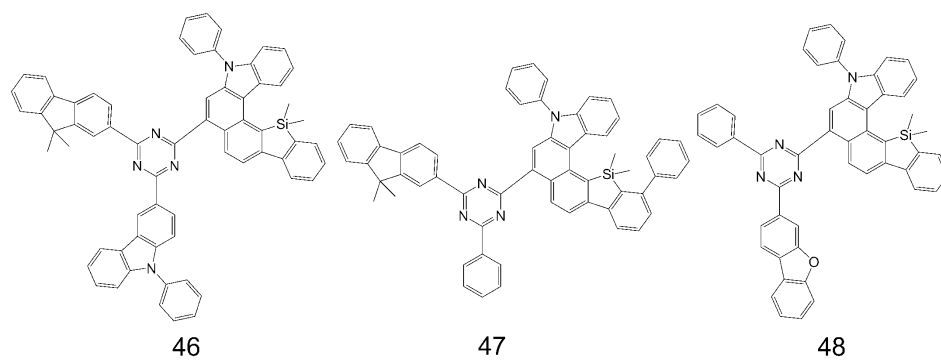
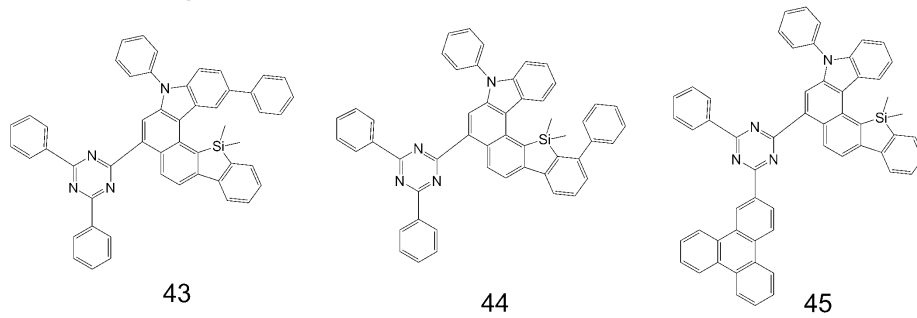
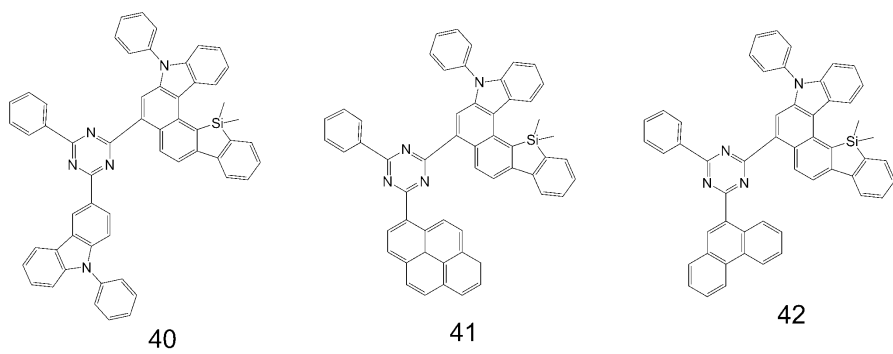
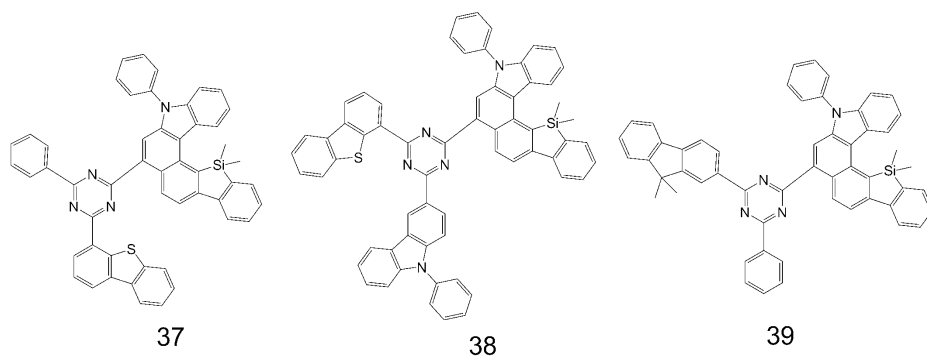
34

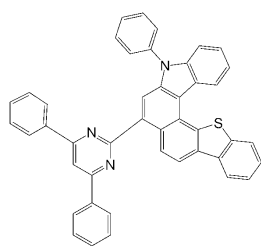


35

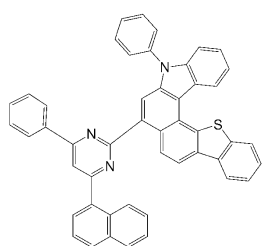


36

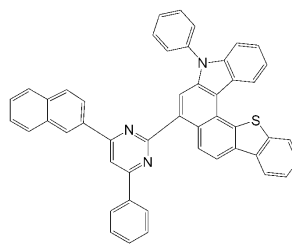




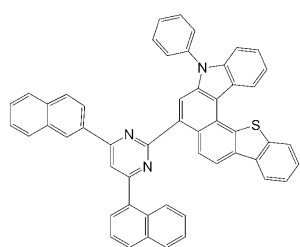
49



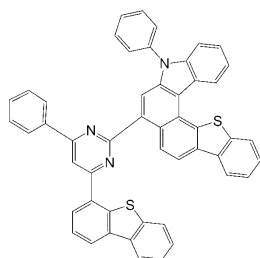
50



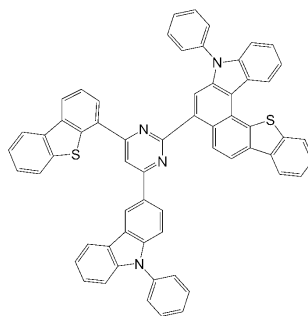
51



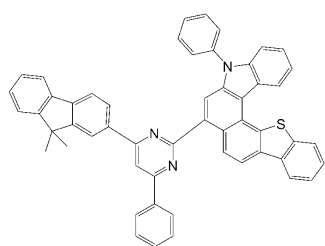
52



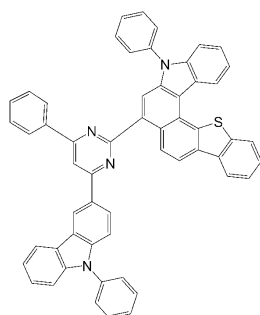
53



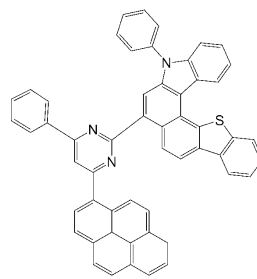
54



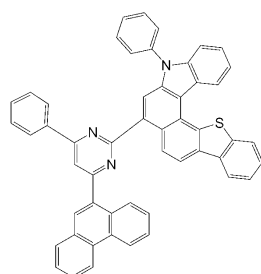
55



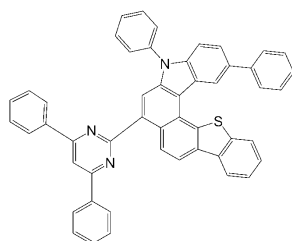
56



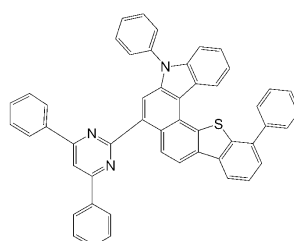
57



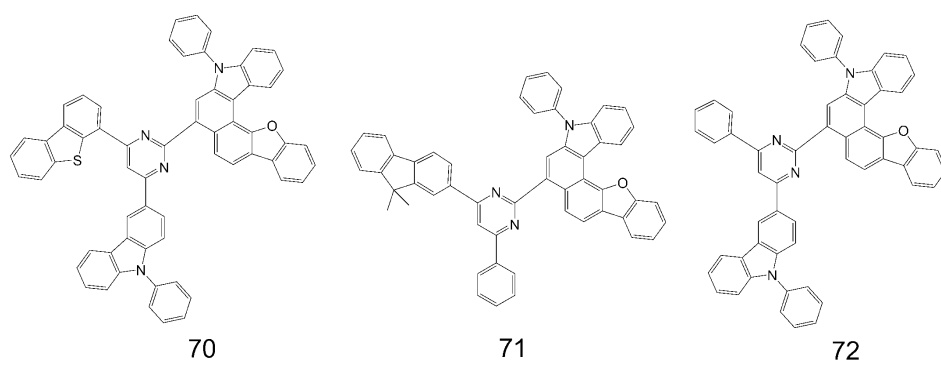
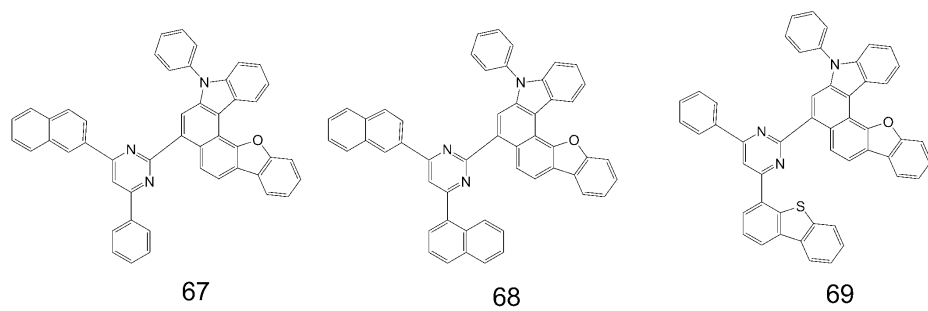
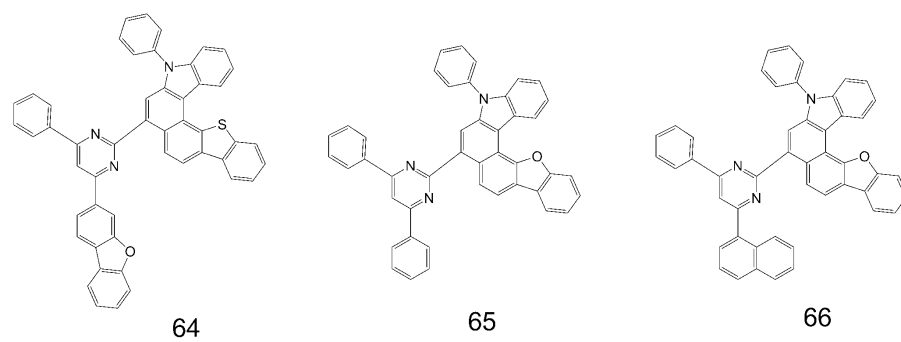
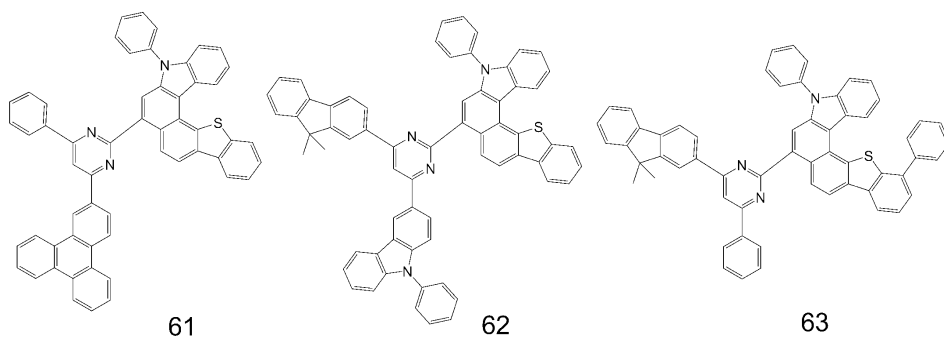
58

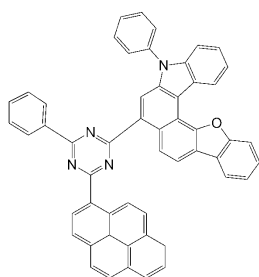


59

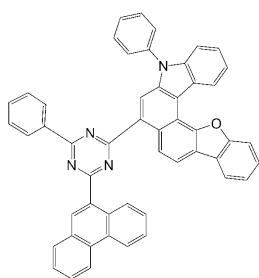


60

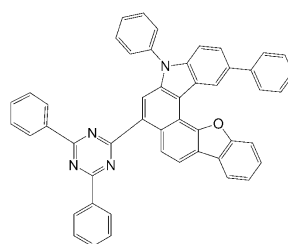




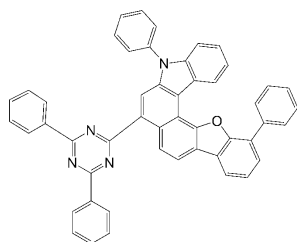
73



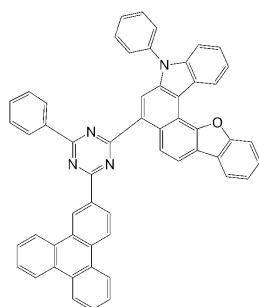
74



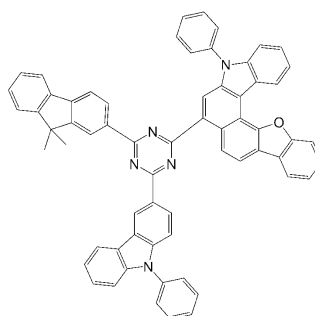
75



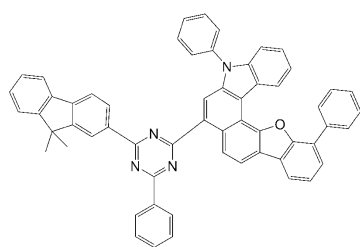
76



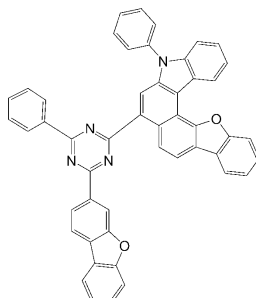
77



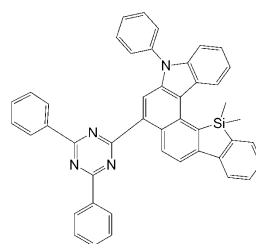
78



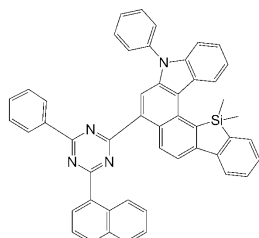
79



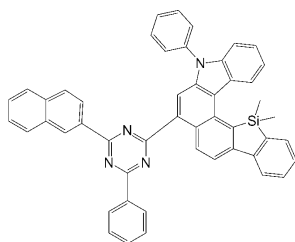
80



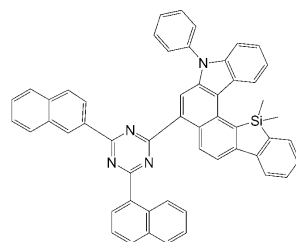
81



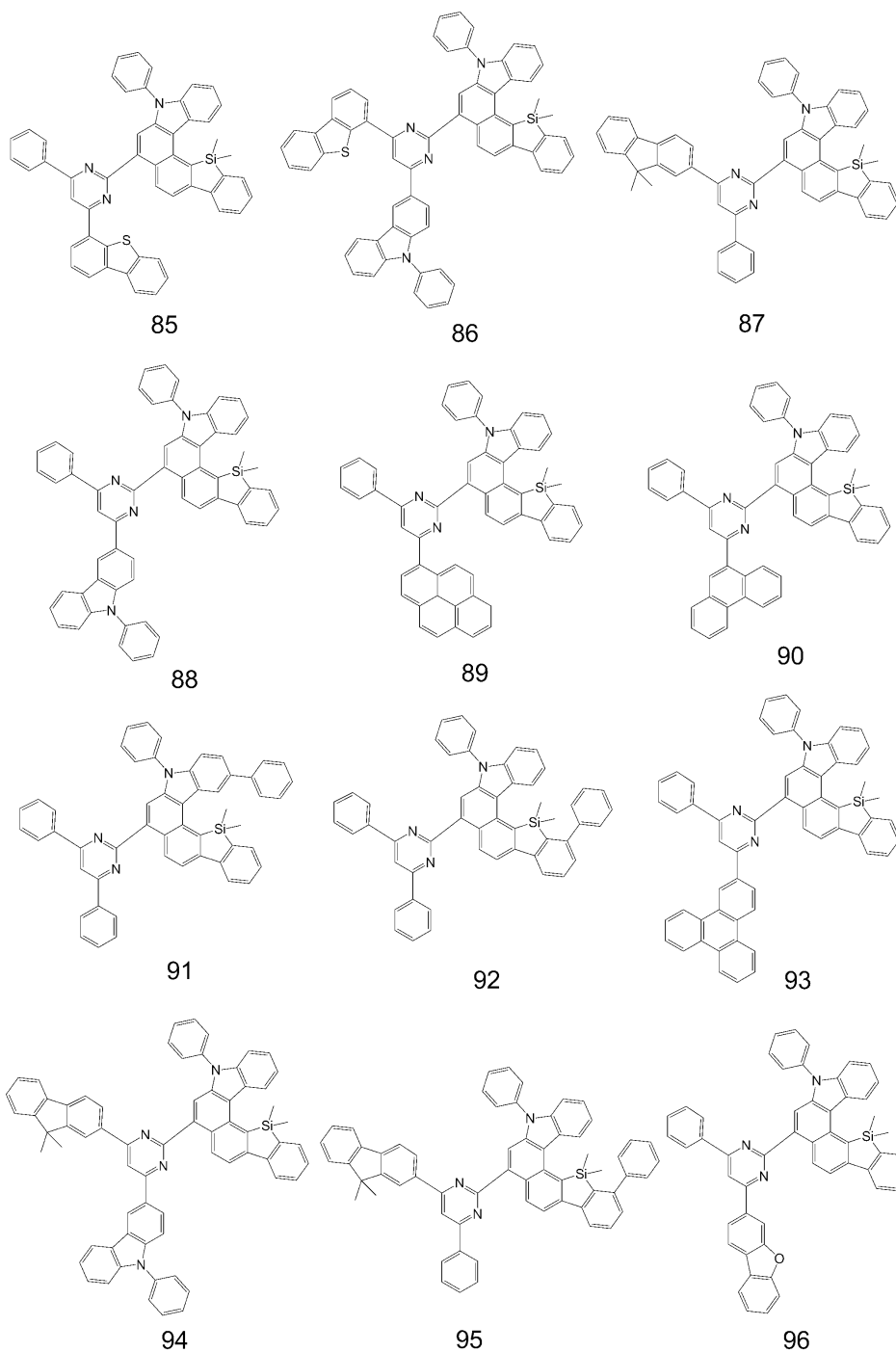
82



83



84



### 청구항 13

제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 제1항, 및 제3항 내지 제12항 중 어느 한 항의 축합환 화합물을 포함한 유기 발광 소자.

### 청구항 14

제13항에 있어서,

상기 유기층이 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층, 버퍼층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층, 및 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나를 포함한 유기 발광 소자.

### 청구항 15



제13항에 있어서,

상기 유기층이 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나가 상기 축합환 화합물을 포함한 유기 발광 소자.

#### 청구항 16

제15항에 있어서,

상기 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나가 전하 생성 물질을 더 포함하고, 상기 전하 생성 물질이 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기 함유 화합물 중 적어도 1종인 유기 발광 소자.

#### 청구항 17

제13항에 있어서,

상기 유기층이 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나가 상기 축합환 화합물을 포함한 유기 발광 소자.

#### 청구항 18

제13항에 있어서,

상기 유기층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 축합환 화합물을 포함한 유기 발광 소자.

#### 청구항 19

제18항에 있어서,

상기 축합환 화합물이 인광 호스트의 역할을 하는 유기 발광 소자.

#### 청구항 20

제13항에 있어서,

상기 유기층이 발광층; 및 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나;를 포함하고, 상기 발광층이 아릴아민 화합물을 포함한 유기 발광 소자.

#### 청구항 21

소스, 드레인, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 제13항의 유기 발광 소자를 구비하고,

상기 유기 발광 소자의 제1전극이 상기 소스 및 드레인 중 하나와 전기적으로 연결된 유기 발광 표시 장치.

### 발명의 설명

### 기술 분야

[0001]

축합환 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 신규한 축합환 화합물, 이를 유기층에 포함하여 수명이 향상된 유기 발광 소자 및 상기 유기 발광 소자를 포함하는 유기 발광 표시 장치에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0002]

유기 발광 소자(organic light emitting device)는 자발광형 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라, 응답시간이 빠르며, 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있어 널리 주목 받고 있다.

[0003]

일반적인 유기 발광 소자는 기판 상부에 애노드가 형성되어 있고, 애노드 상부에 정공 수송층, 발광층, 전자 수

송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가진다. 이 중에서 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층은 주로 유기 화합물로 이루어진다. 유기 발광 소자의 애노드와 캐소드 간에 전압을 인가하면, 애노드로부터 주입된 정공이 정공 수송층을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자가 전자 수송층을 경유하여 발광층으로 이동한다. 캐리어들(정공 및 전자)은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exciton)을 생성하고 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저 상태로 변하면서 광이 방출한다.

[0004] 유기 발광 소자의 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 형광 재료가 널리 사용되고 있으며, 전기발광 메커니즘상 이론적으로 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있는 인광 재료도 점차 널리 사용되고 있다.

[0005] 유기 발광 소자의 소비 전력을 낮추려면 전력 효율을 높여야 하는데, “전력 효율 =  $(\pi/\text{전압}) \times \text{전류 효율}$ ”인 관계에 있어 전력 효율을 높이려면 전압을 낮춰야 한다. 실제 인광 발광 재료를 사용한 유기 발광 소자는 형광 발광 재료를 사용한 유기 발광 소자에 비해 전류 효율은 상당히 높으나, 예를 들면 인광 발광 재료의 호스트로서 BA1q 나 CBP 등 종래의 재료를 사용한 경우에 형광재료를 사용한 경우보다 구동 전압이 높아져 결국 전력 효율 면에서 별다른 이점이 없게 된다.

[0006] 또한, 이러한 종래의 호스트 재료들을 사용한 유기 발광 소자는 수명 측면에서도 결코 만족할만한 수준이 되지 못하여 더욱 안정되고 더욱 뛰어난 호스트 재료의 개발이 요구되고 있다.

## 발명의 내용

### 해결하려는 과제

[0007] 종래의 발광 재료와 다르며 우수한 골격을 갖는 축합환 화합물을 제공하고자 한다.

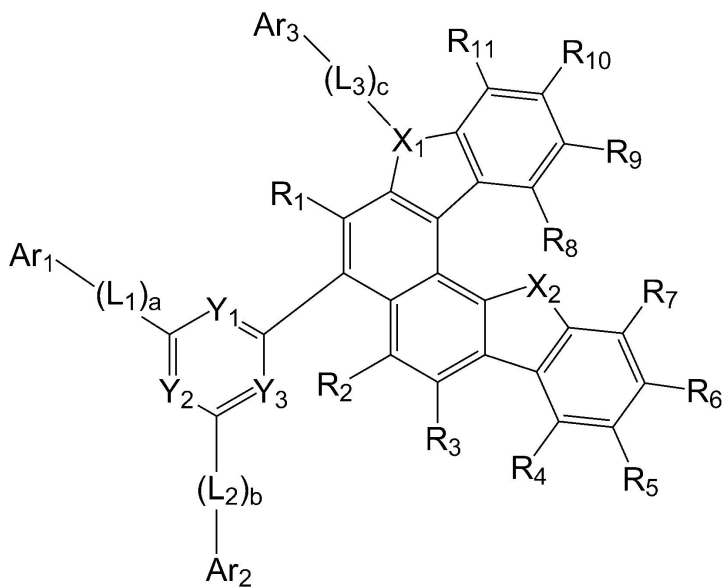
[0008] 상기 축합환 화합물을 유기층에 사용하여 발광 효율 및 소자 수명이 우수하고 적절한 색좌표를 갖는 유기 발광 소자를 제공하고자 한다.

[0009] 상기 유기 발광 소자를 포함한 고효율 및 장수명의 유기 발광 표시 장치를 제공하고자 한다.

### 과제의 해결 수단

[0010] 한 측면에 따라, 하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 제공된다:

[0011] <화학식 1>



[0012]

[0013] 상기 식 중,  $X_1$ 은 N이고;  $X_2$ 는 S, O,  $Si(R_{12})(R_{13})$  및  $N(R_{14})$  중 하나이고;  $Y_1$  내지  $Y_3$ 는 서로 독립적으로 C 및 N 중 하나이며, 단  $Y_1$  내지  $Y_3$  중 적어도 하나는 N이고;  $Ar_1$  내지  $Ar_3$ 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ -

C<sub>40</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴아미노기, 및 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>헤테로아릴기 중 1종이고; R<sub>1</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>40</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>40</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴아미노기, 및 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>헤테로아릴기 중 1종이며, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>14</sub> 중 서로 이웃한 2 이상은 선택적으로(optionally) 융합될 수 있고; L<sub>1</sub> 내지 L<sub>3</sub>는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴렌기이고; a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수 중 하나이다.

- [0014] 다른 한 측면에 따라, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0015] 상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층, 버퍼층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층, 및 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0016] 상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나가 상기 축합환 화합물을 포함할 수 있다.
- [0017] 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나는 전하 생성 물질을 더 포함하고, 상기 전하 생성 물질은 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기 함유 화합물 중 적어도 1종일 수 있다.
- [0018] 상기 유기층은 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나는 상기 축합환 화합물을 포함할 수 있다.
- [0019] 상기 유기층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 축합환 화합물을 포함할 수 있다.
- [0020] 상기 축합환 화합물은 인광 호스트의 역할을 할 수 있다.
- [0021] 상기 유기층은 발광층; 및 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나;를 포함하고, 상기 발광층은 아릴아민 화합물을 포함할 수 있다.
- [0022] 또 다른 한 측면에 따라, 소스, 드레인, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 상기 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 상기 소스 및 드레인 중 하나와 전기적으로 연결된 유기 발광 표시 장치가 제공된다.

### 발명의 효과

- [0023] 한 측면에 따른 축합환 화합물은 내열성이 우수하여 유기층에 사용시 발광 휘도 및 수명 향상에 기여한다.
- [0024] 다른 한 측면에 따른 유기 발광 소자는 종래의 유기 발광 소자에 비해 발광 효율이 좋고 유기층에 포함된 축합환 화합물의 수명 특성이 뛰어나 소자의 구동 수명이 매우 우수하다.
- [0025] 또 다른 한 측면에 따른 유기 발광 표시 장치는 수명이 증가하고 전력 효율이 상승하며 소비전력이 개선된다.

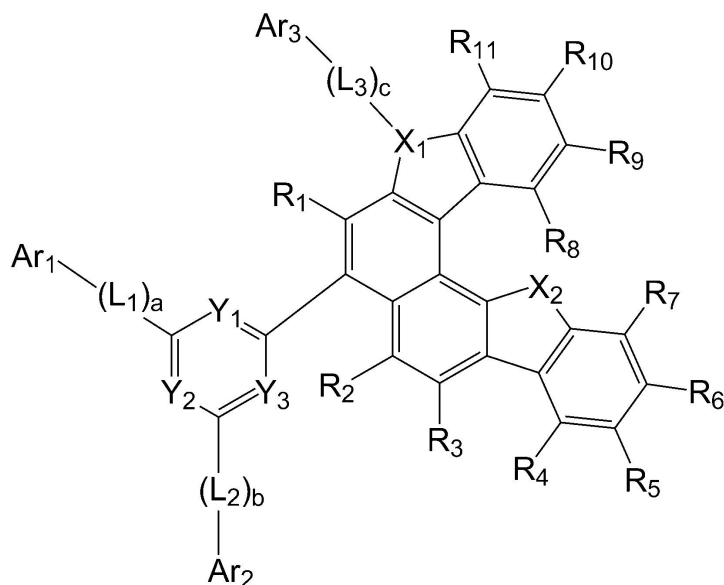
### 도면의 간단한 설명

- [0026] 도 1은 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 단면도를 개략적으로 나타낸 것이다.
- 도 2는 일 구현예에 따른 화학식 1의 구조를 나타낸 것이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0027] 한 측면에 따라, 하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 제공된다:

[0028] <화학식 1>



[0029]

[0030] 상기 화학식 1 중,  $X_1$ 은 N이고;  $X_2$ 는 S, O,  $Si(R_{12})(R_{13})$  및  $N(R_{14})$  중 하나이고;  $Y_1$  내지  $Y_3$ 는 서로 독립적으로 C 및 N 중 하나이며, 단  $Y_1$  내지  $Y_3$  중 적어도 하나는 N이고;  $Ar_1$  내지  $Ar_3$ 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴티오기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴아미노기, 및 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{40}$ 헤테로아릴기 중 1종이고;  $R_1$  내지  $R_{14}$ 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{40}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{40}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{40}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{40}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_3-C_{40}$ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_3-C_{40}$ 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴티오기, 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴아미노기, 및 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{40}$ 헤테로아릴기 중 1종이며,  $R_1$  내지  $R_{14}$  중 서로 이웃한 2 이상은 선택적으로(optionally) 융합될 수 있고;  $L_1$  내지  $L_3$ 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된  $C_6-C_{40}$ 아릴렌기이고; a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수 중 하나이다.

[0031] 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 분자 내에 카바졸기와 헤테로방향족기가 융합된 구조 또는 카바졸기와 실롤기가 융합된 구조를 가진다.

[0032] 화학식 1에서  $X_1$ 은 질소 원자(N)이며, 화학식 1에서  $X_1$ 을 포함하는 부분은 카바졸기를 나타낸다. 또한, 화학식 1에서  $X_2$ 는 S, O 및  $N(R_{14})$  및  $Si(R_{12})(R_{13})$  중 하나이며, 화학식 1에서  $X_2$ 를 포함하는 부분은 S, O 또는 N의 헤테로원자와 탄소 원자로 구성된 헤테로방향족기를 나타내거나 또는 Si 원자와 탄소 원자로 구성된 실롤기를 나타낸다. 즉, 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물에서  $X_1$  및  $X_2$ 를 포함하는 축합환 부분은 카바졸기와 헤테로방향족이 융합되거나 또는 카바졸기와 실롤기가 융합된 구조를 나타낸다.

[0033] 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 분자 내에 질소를 포함하는 헤테로환을 가진다.

[0034] 화학식 1에서  $Y_1$  내지  $Y_3$ 는 서로 독립적으로 C 및 N 중 하나이며,  $Y_1$  내지  $Y_3$  중 적어도 하나는 N이다. 화학식 1에서  $Y_1$  내지  $Y_3$ 는 포함하는 부분은 질소를 포함하는 헤테로환을 나타낸다. 즉, 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물에서  $Y_1$  내지  $Y_3$ 는 포함하는 부분은 트라이진기, 피리미딘기 또는 피리딘기 같은 헤테로환을 나타낸다.

[0035] 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은, 분자 내에 카바졸기와 헤테로방향족이 융합되거나 또는 카바졸기와 실롤기가 융합된 강직한 축합환 구조를 가져 유리전이온도와 융점이 높으며, 동시에 분자 내에 질소를 포함하는 헤테로환을 가진다.

테로환을 가져 전자 수송성 등 전기적 성질이 매우 우수하다.

[0036] 화학식 1 중,  $Ar_1$  내지  $Ar_3$ 는  $Y_1$  내지  $Y_3$ 는 포함하는 헤테로환 부분과 결합한 치환체로서 방향족기 또는 헤테로 방향족기를 나타내고,  $R_1$  내지  $R_{14}$ 는  $X_1$  및  $X_2$ 를 포함하는 축합환 부분과 결합한 치환체를 나타낸다.  $L_1$  내지  $L_3$ 는  $Ar_1$  내지  $Ar_3$ 와  $Y_1$  내지  $Y_3$ 는 포함하는 헤테로환 부분 사이에 존재할 수 있는 연결기를 나타내며  $a$ ,  $b$  및  $c$ 는 상기 연결기의 개수를 나타낸다.  $a$ 가 0인 경우  $-(L_1)_a-$ 는 단일결합을 나타내며  $a$ 가 2 이상인 경우 복수개로 존재하는  $L_1$ 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 마찬가지로,  $b$ 가 0인 경우  $-(L_2)_b-$ 는 단일결합을 나타내며  $b$ 가 2 이상인 경우 복수개로 존재하는  $L_2$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있으며,  $c$ 가 0인 경우  $-(L_3)_c-$ 는 단일결합을 나타내며  $c$ 가 2 이상인 경우 복수개로 존재하는  $L_3$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0037] 이하, 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물에 대해 보다 상세히 설명한다.

[0038] 화학식 1 중,  $X_1$ 은 질소 원자이다. 화학식 1에서  $X_1$ 을 포함하는 부분은 카바졸기를 나타낸다.  $X_1$ 이 S 또는 O일 경우에는 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물의 합성이 상대적으로 곤란하여 이러한 경우는 배제한다.

[0039] 화학식 1 중,  $X_2$ 는 S, O,  $Si(R_{12})(R_{13})$  및  $N(R_{14})$  중 하나이다.

[0040] 예를 들면,  $X_2$ 는 S, O 및  $Si(R_{12})(R_{13})$  중 하나일 수 있다.  $X_2$ 가 S, O 및  $Si(R_{12})(R_{13})$  중 하나인 경우 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 벌키하지 않아 유기층 형성이 용이해질 수 있다.  $X_2$ 가 페닐기로 치환된 N일 경우에는 축합환 화합물의 구조가 벌키하게 되어 이러한 축합환 화합물을 사용하여 유기 발광 소자의 유기층을 성막시 팩킹(packing)이 어려울 수 있어 바람직하지 않다.

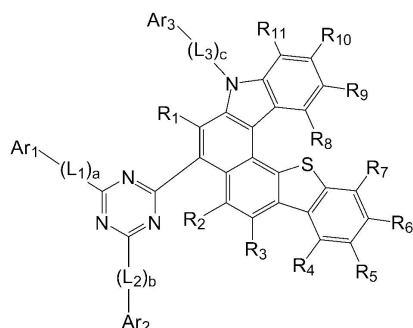
[0041] 화학식 1 중,  $Y_1$  내지  $Y_3$ 는 서로 독립적으로 C 및 N 중 하나이며,  $Y_1$  내지  $Y_3$  중 적어도 하나는 N이다.

[0042] 예를 들면,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 N이며  $Y_3$ 는 C일 수 있거나,  $Y_1$  및  $Y_3$ 는 N이며  $Y_2$ 는 C일 수 있거나, 또는  $Y_2$  및  $Y_3$ 는 N이며  $Y_1$ 은 C일 수 있다. 이 경우에  $Y_1$  내지  $Y_3$ 를 포함하는 헤테로환은 질소 원자가 2개이고 탄소 원자가 4개인 피리미딘기를 나타낸다. 또는,  $Y_1$ ,  $Y_2$  및  $Y_3$ 는 N일 수 있다. 이 경우에  $Y_1$  내지  $Y_3$ 를 포함하는 헤테로환은 질소 원자가 3개이고 탄소 원자가 3개인 트리아진기를 나타낸다.

[0043] 화학식 1 중,  $Y_1$  및  $Y_3$ 는 N이고  $Y_2$ 는 C일 수 있다. 이 경우  $Y_1$  내지  $Y_3$ 를 포함하는 헤테로환은 피리미딘기를 나타내고 상기 피리미딘기 중 2개의 질소 원자 사이에 위치하는 탄소 원자( $Y_1$  및  $Y_3$  사이에 위치하는 탄소 원자)가  $X_1$  및  $X_2$ 를 포함하는 축합환에 결합된다.

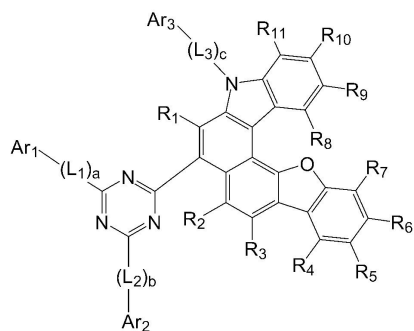
[0044] 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 하기 화학식 2a 내지 2f로 표시될 수 있다:

[0045] <화학식 2a>



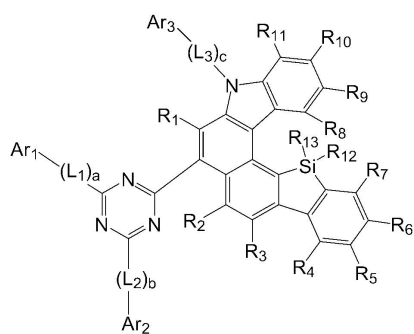
[0046]

[0047] <화학식 2b>



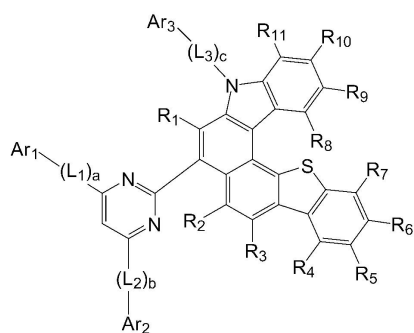
[0048]

[0049] <화학식 2c>



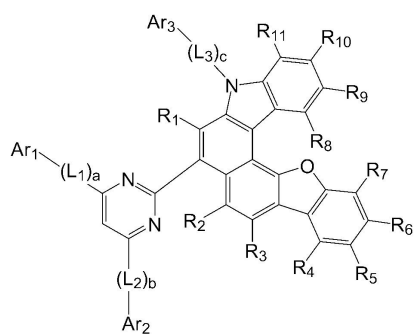
[0050]

[0051] <화학식 2d>



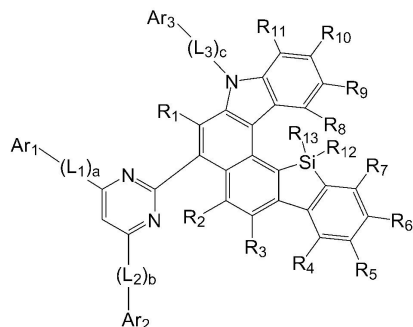
[0052]

[0053] <화학식 2e>



[0054]

[0055] <화학식 2f>



[0056]

[0057] 상기 화학식 2a 내지 2f 중, Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>13</sub>, L<sub>1</sub>, 내지 L<sub>3</sub>, a, b 및 c는 상기 화학식 1에서 정의된 바와 동일하다.

[0058] 화학식 1 중, Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>헤테로아릴기 중 1종일 수 있으며, L<sub>1</sub> 내지 L<sub>3</sub>는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 및 치환 또는 비치환된 나프틸렌기 중 1종일 수 있고, a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 및 1 중 하나일 수 있다.

[0059] 예를 들면, Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기(phenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphthyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 페날레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 피레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크리세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 테트라세닐기(tetraceny), 치환 또는 비치환된 테트라페닐(tetraphenyl), 치환 또는 비치환된 벤조안트릴기(benzoanthryl), 치환 또는 비치환된 벤조페난트레닐기(benzophenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 비페닐(biphenyl), 치환 또는 비치환된 터페닐(terphenyl), 치환 또는 비치환된 인데닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 벤조플루오레닐기(benzofluorenyl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기(benzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기(dibenzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조나프토티오펜기(benzonaphthothiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기(benzofuranyl), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기(dibenzofuranyl), 치환 또는 비치환된 벤조나프토포라닐기(benzonaphthofuranyl), 치환 또는 비치환된 벤조실릴기(benzosilyl), 치환 또는 비치환된 디벤조실릴기(dibenzosilyl), 치환 또는 비치환된 벤조나프토티실릴기(benzonaphthosilyl), 치환 또는 비치환된 인돌기(indolyl), 치환 또는 비치환된 카바졸기(carbazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조카바졸기(benzocarbazolyl), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기(quinolinyl), 및 치환 또는 비치환된 아크리디닐(acridinyl), 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기(isoquinolinyl), 및 치환 또는 비치환된 벤조이소퀴놀리닐기(benzoisoquinolinyl) 중 1종일 수 있다.

[0060] 예를 들면, L<sub>1</sub> 내지 L<sub>3</sub>는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 및 치환 또는 비치환된 나프틸렌기 중 1종일 수 있다. 예를 들면, a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 및 1 중 하나일 수 있다.

[0061] 상기 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 테트라세닐, 치환 또는 비치환된 테트라페닐, 치환 또는 비치환된 벤조안트릴기, 치환 또는 비치환된 벤조페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조실릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조실릴기, 치환 또는 비치환된 인돌기, 치환 또는 비치환된 카바졸기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 및 치환 또는 비치환된 아크리디닐 중 1종일 수 있다.

[0062] 구체적으로, Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>는 서로 독립적으로 하기 화학식 3a 내지 3m으로 표시될 수 있다:

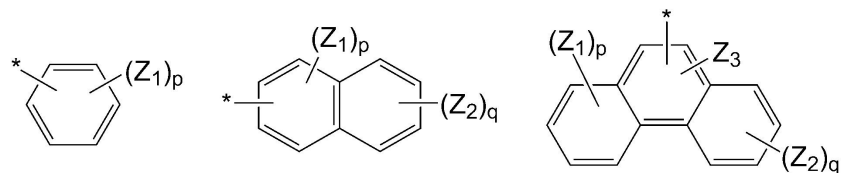


[0063]

<화학식 3a>

<화학식 3b>

<화학식 3c>



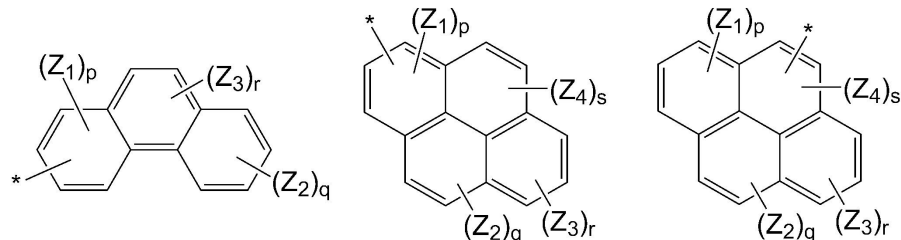
[0064]

[0065]

<화학식 3d>

<화학식 3e>

<화학식 3f>



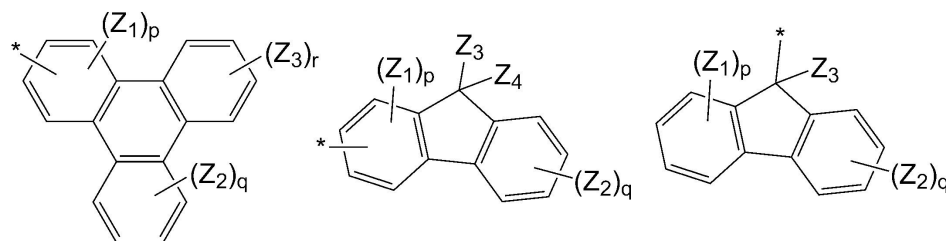
[0066]

[0067]

<화학식 3g>

<화학식 3h>

<화학식 3i>



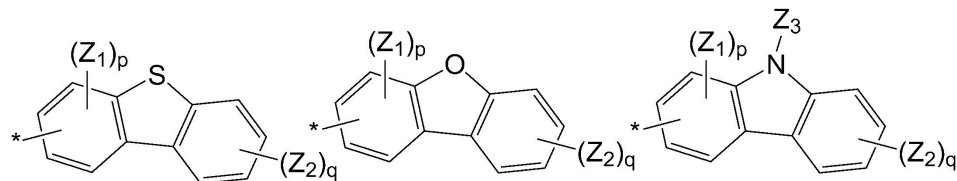
[0068]

[0069]

<화학식 3j>

<화학식 3k>

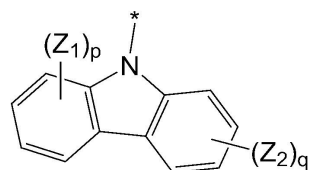
<화학식 3l>



[0070]

[0071]

<화학식 3m>



[0072]

[0073]

상기 화학식 3a 내지 3m 중, Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 및 치환 또는 비치환된 페닐기 중 1종이고; p, q, r 및 s는 서로 독립적으로 1 내지 5의 정수 중 하나이다. \*는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 중 상기 화학식 3a 내지 3m으로 표시되는 부분을 제외한 나머지 부분과의 결합을 나타낸다.

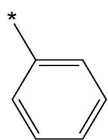
[0074]

또한, Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>는 서로 독립적으로 하기 화학식 4a 내지 4j로 표시될 수 있다:

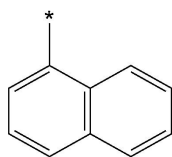


[0075]

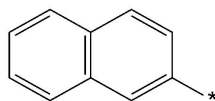
<화학식 4a>



<화학식 4b>



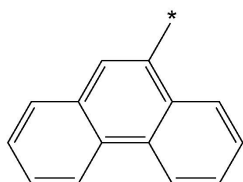
<화학식 4c>



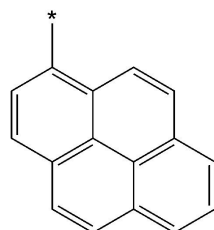
[0076]

[0077]

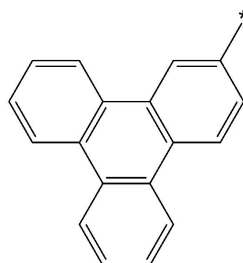
<화학식 4d>



<화학식 4e>



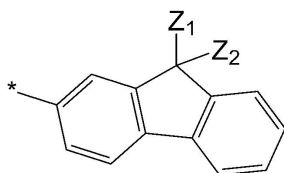
<화학식 4f>



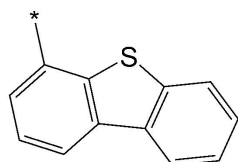
[0078]

[0079]

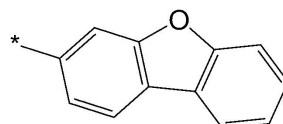
<화학식 4g>



<화학식 4h>



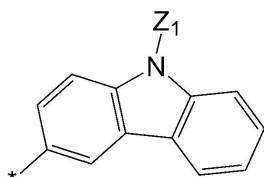
<화학식 4i>



[0080]

[0081]

<화학식 4j>



[0082]

[0083]

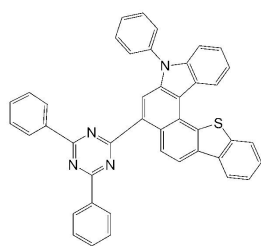
상기 화학식 4a 내지 4j 중,  $Z_1$  및  $Z_2$ 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 및 치환 또는 비치환된 페닐기 중 1종이다. 마찬가지로, \*는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 중 상기 화학식 3a 내지 3m으로 표시되는 부분을 제외한 나머지 부분과의 결합을 나타낸다.

[0084]

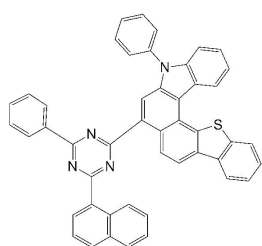
화학식 1 중,  $R_1$  내지  $R_{14}$ 는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 및 치환 또는 비치환된 페닐기 중 1종 일 수 있다.

[0085]

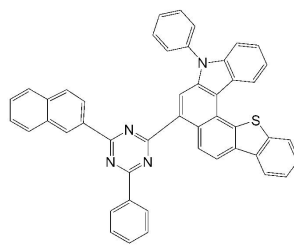
상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 하기 화합물 1 내지 96 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



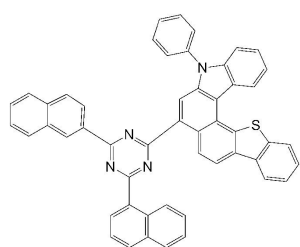
1



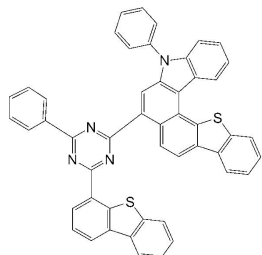
2



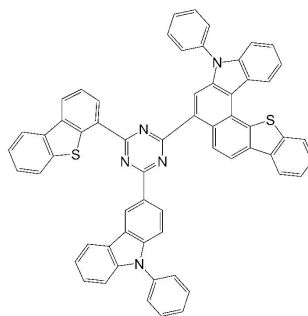
3



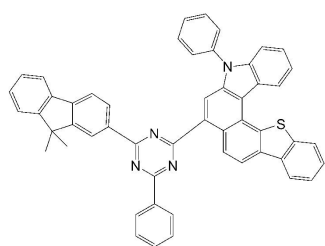
4



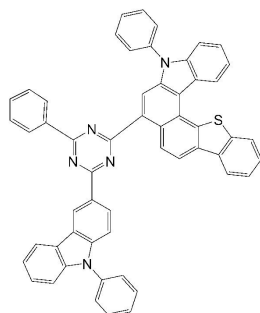
5



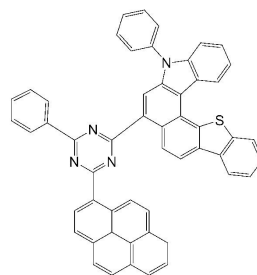
6



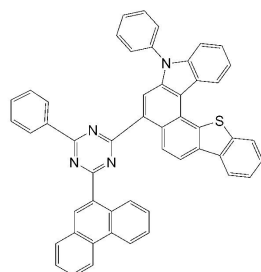
7



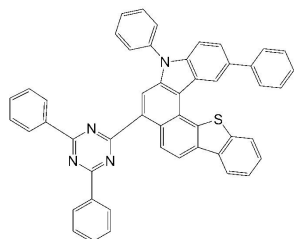
8



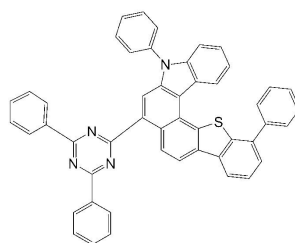
9



10

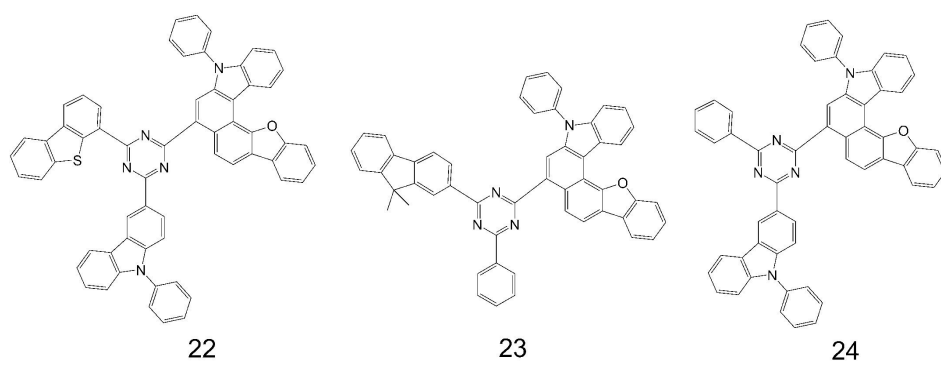
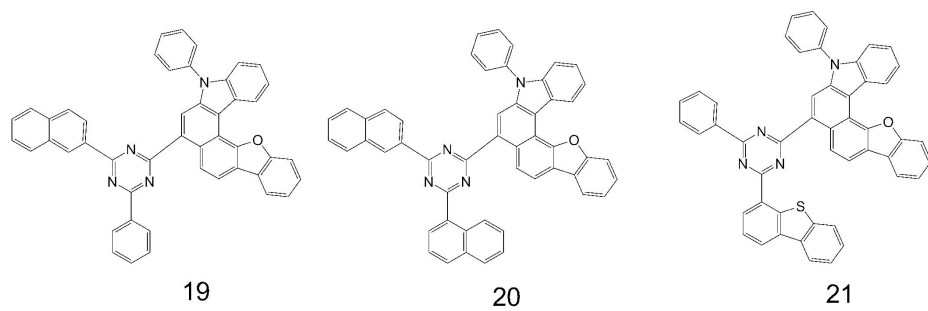
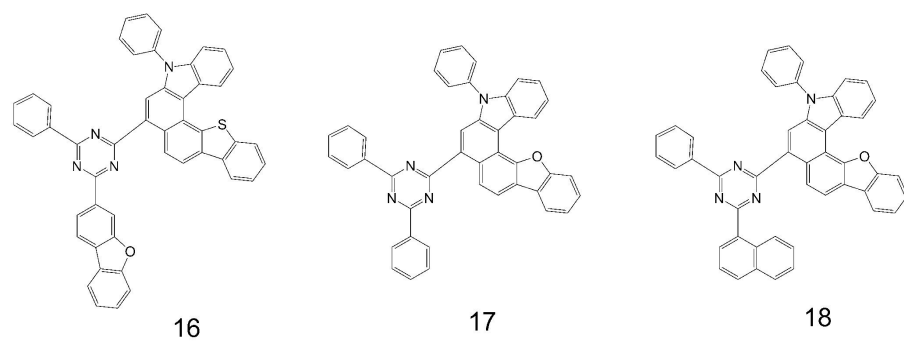
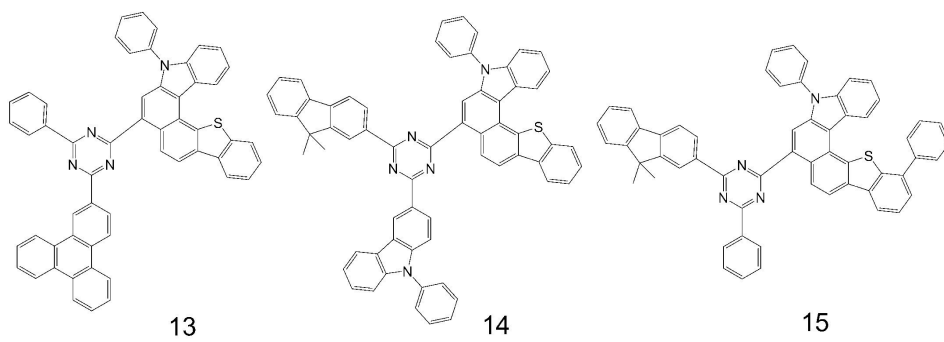


11

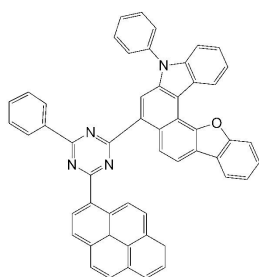


12

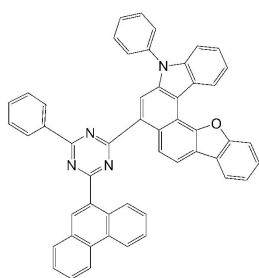
[0086]



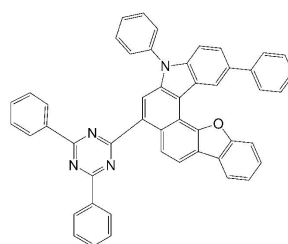
[0087]



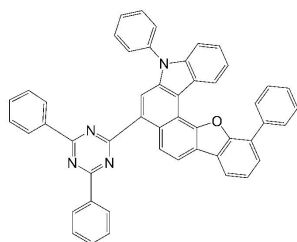
25



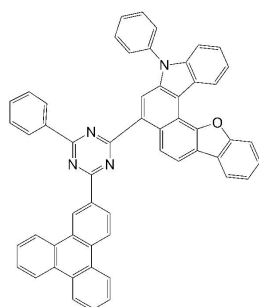
26



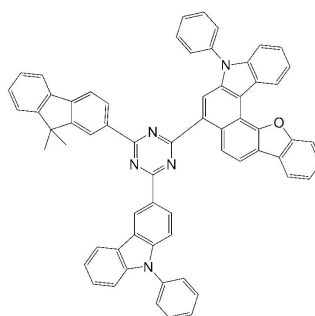
27



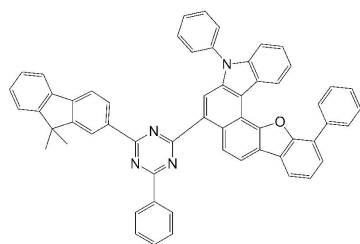
28



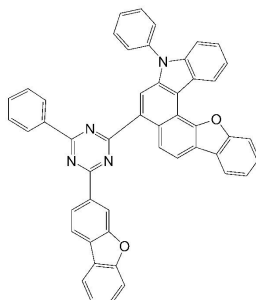
29



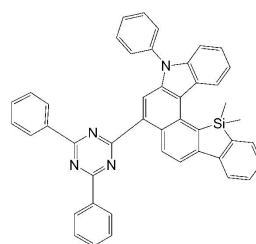
30



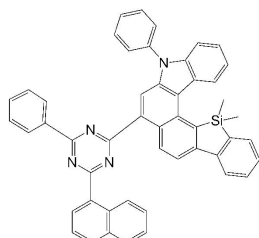
31



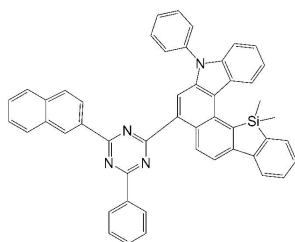
32



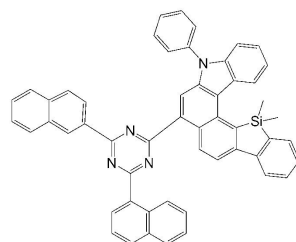
33



34

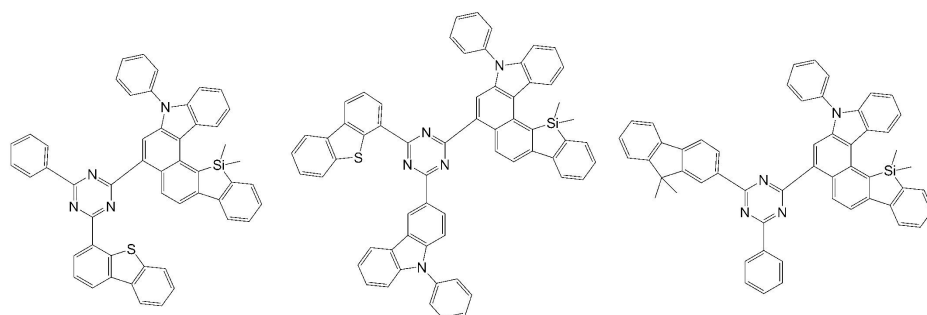


35



36

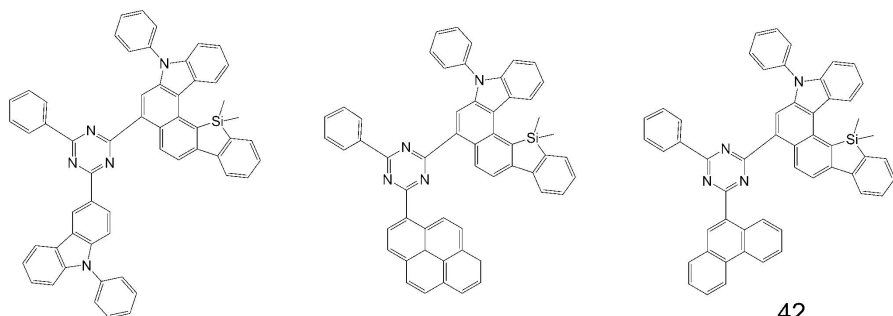
[0088]



37

38

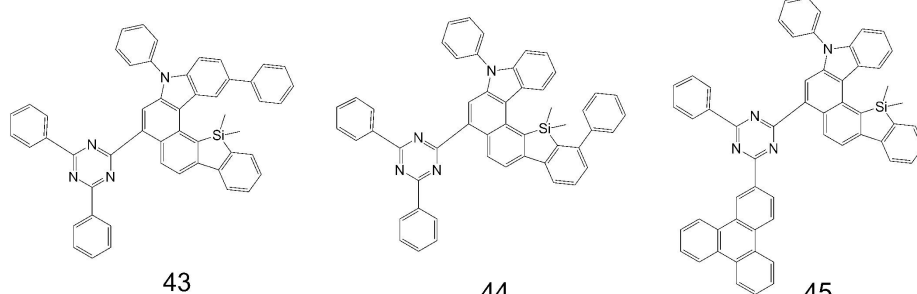
39



40

41

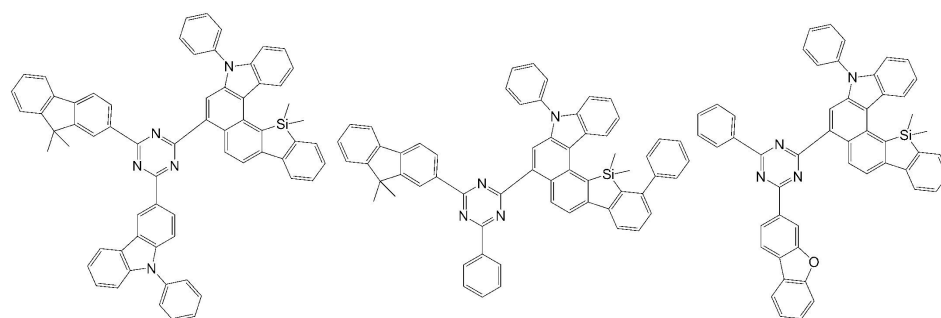
42



43

44

45

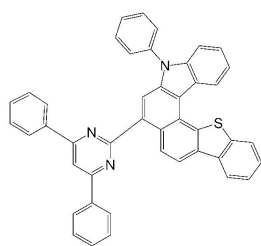


46

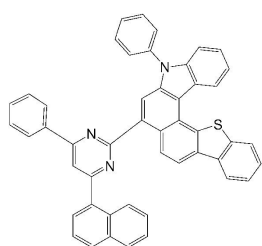
47

48

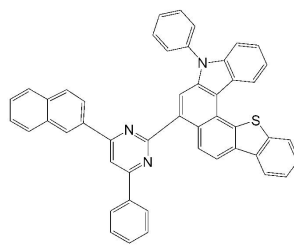
[0089]



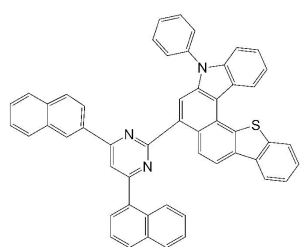
49



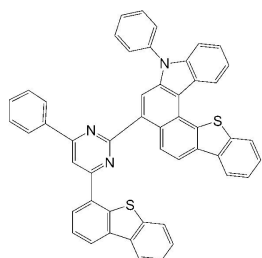
50



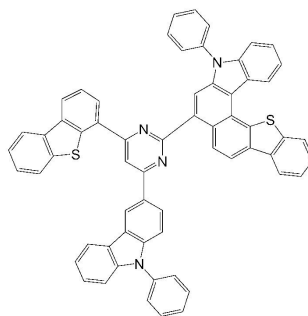
51



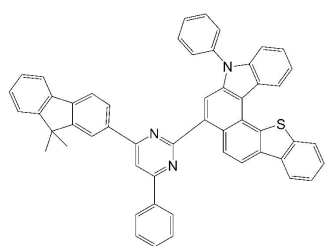
52



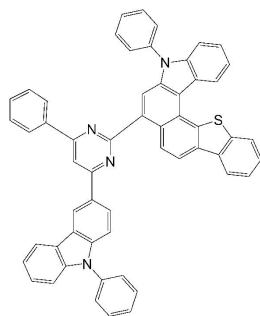
53



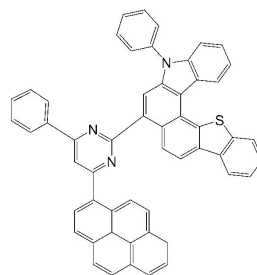
54



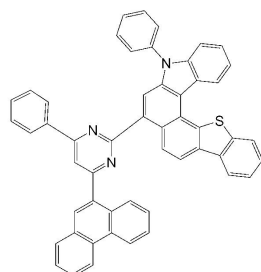
55



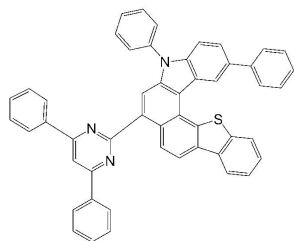
56



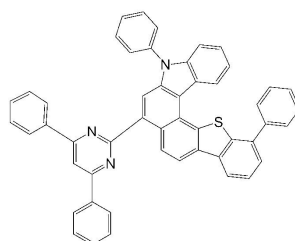
57



58

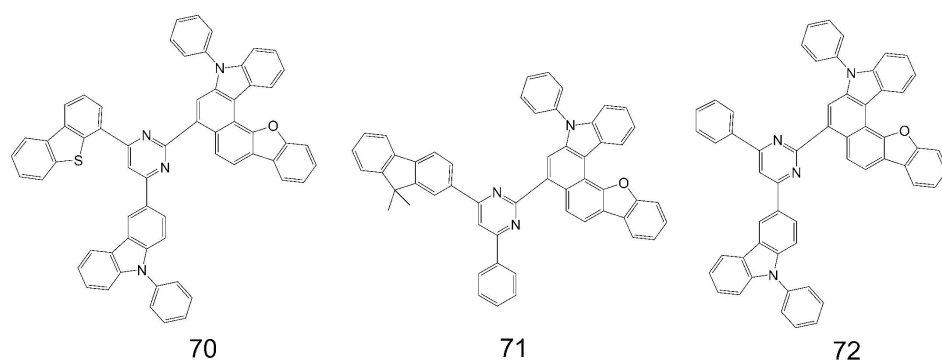
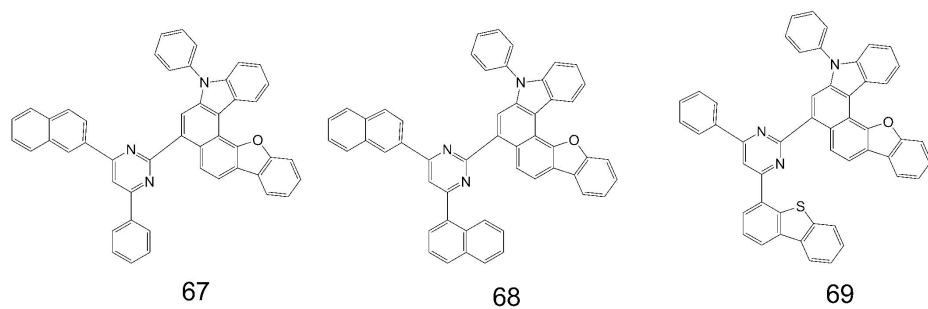
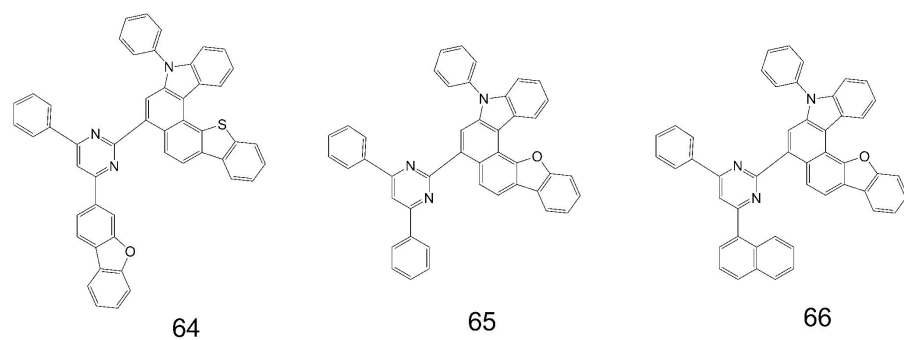
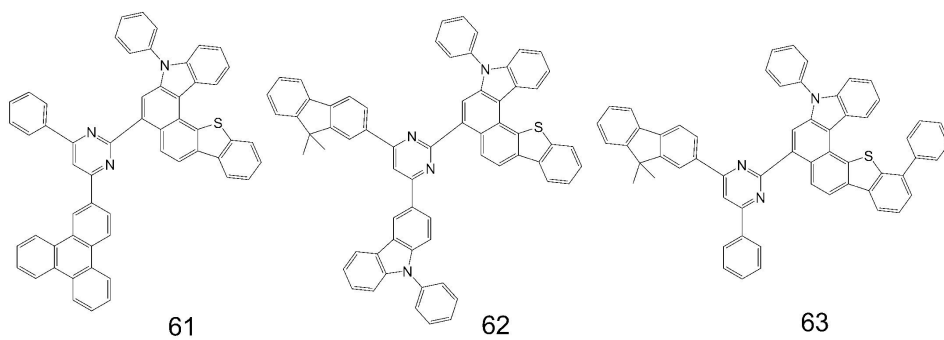


59

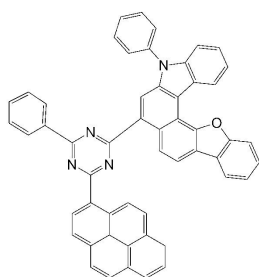


60

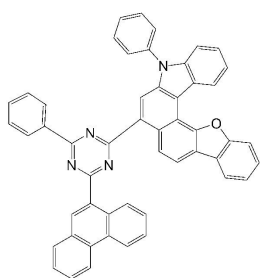
[0090]



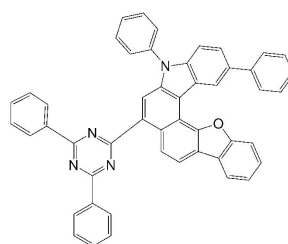
[0091]



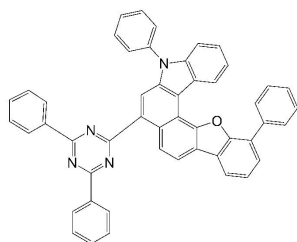
73



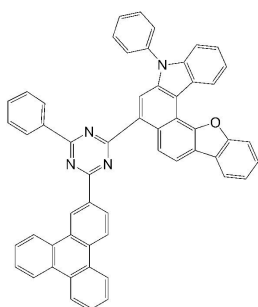
74



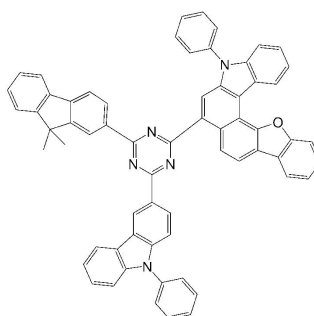
75



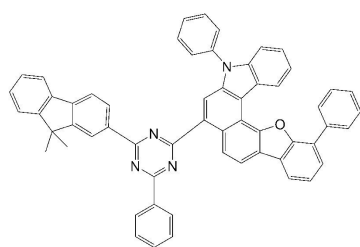
76



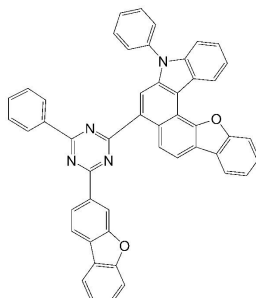
77



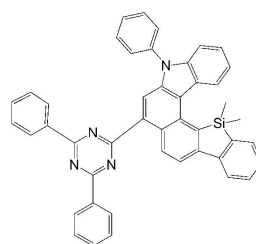
78



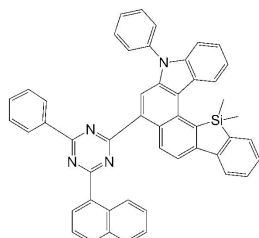
79



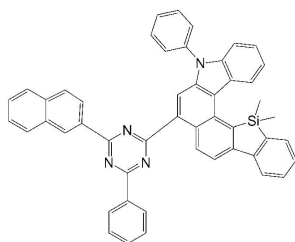
80



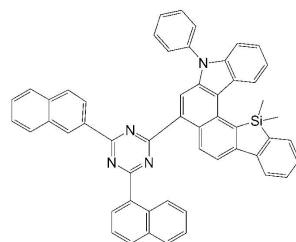
81



82



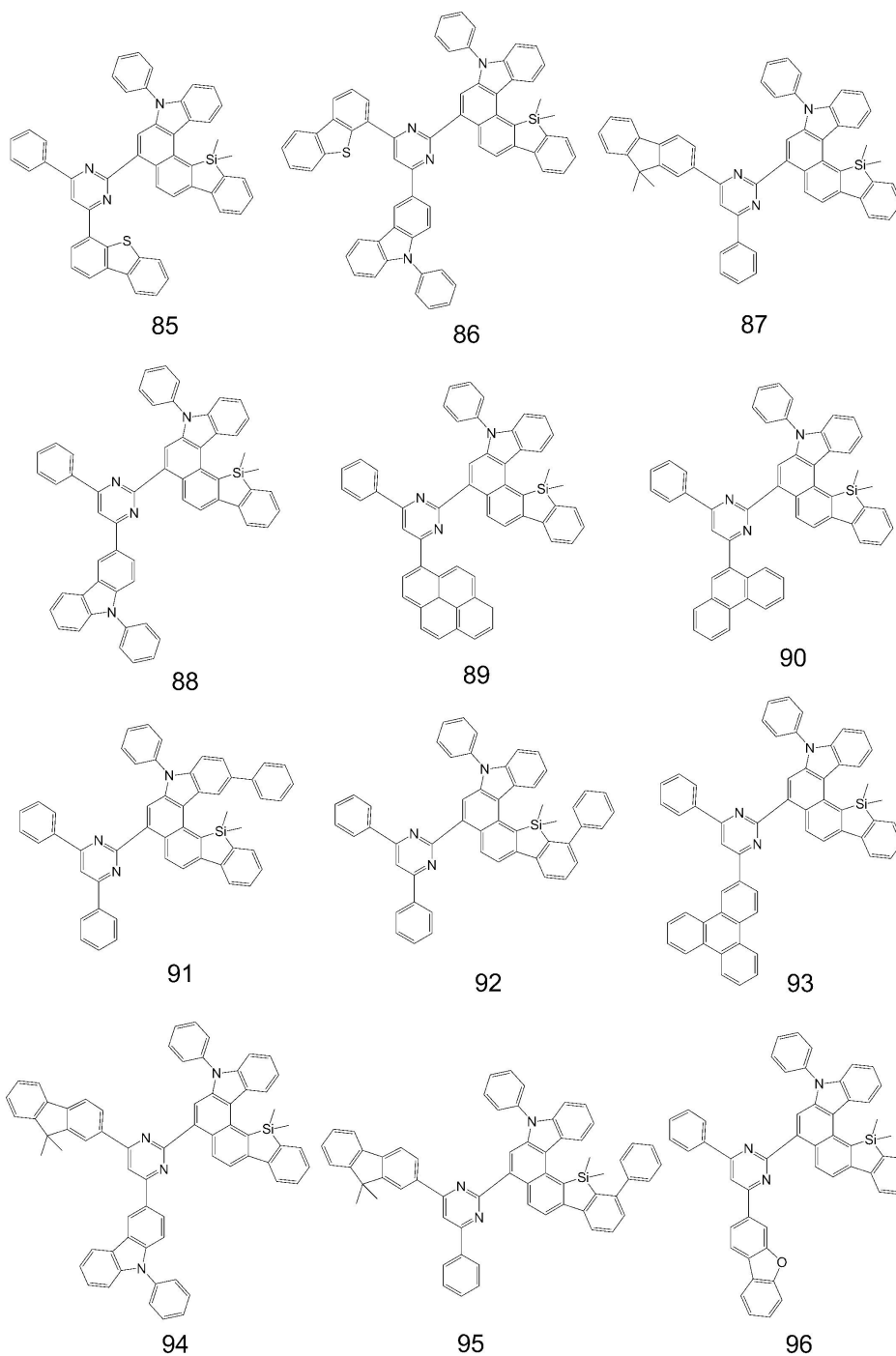
83



84

[0092]





[0093]

[0094]

화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 분자 내에 카바졸기와 헤테로방향족기가 융합된 구조 또는 카바졸기와 실롤기가 융합된 구조를 가지면서 동시에 질소를 포함하는 헤테로환을 가져 강직한 골격을 형성하고, 방향족기 또는 헤테로방향족기를 나타내는 치환체가 연결기를 통하여 상기 골격에 결합한 구조를 가지며, 이러한 구조로 인해 높은 유리전이온도와 용점을 가진다.

[0095]

화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 보관 및/또는 구동시에 유기층들 사이에서, 유기층 내부에서, 및/또는 발광층과 금속 전극 사이에서, 발생하는 줄 열에 대하여 우수한 내열성을 가진다. 따라서, 상기 축합환 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 시간이 지나도 고온 환경하에서 열적 안정성이 유지되어 높은 내구성과 장수명을 가진다.

[0096]

화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 축합환 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자에게 용이하게 인식될 수 있다.

[0097]

화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들면, 상기

축합환 화합물은 발광층, 애노드와 발광층 사이의 층(예를 들면, 정공 주입층, 정공 수송층, 또는 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 하는 기능층), 및/또는 캐소드와 발광층 사이의 층(예를 들면, 전자 주입층, 전자 수송층, 또는 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 하는 기능층)에 사용될 수 있다.

- [0098] 다른 한 측면에 따라, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상기 화학식 1로 표시된 축합환 화합물을 포함하는 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0099] 본 명세서 중 "유기층"은 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 층을 가리키는 것으로 해석될 수 있다.
- [0100] 본 명세서 중, "(유기층)이 상기 화학식 1로 표시된 축합환 화합물을 포함한다"는 것은 "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 축합환 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 축합환 화합물을 포함한다"는 것으로 해석될 수 있다.
- [0101] 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 버퍼층, 발광층, 정공 지지층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0102] 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나에는 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 포함될 수 있다.
- [0103] 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나는 전하 생성 물질을 더 포함하고, 상기 전하 생성 물질은 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기 함유 화합물 중 적어도 1종일 수 있다. 금속 산화물의 예로서는 산화 몰리브덴이나 산화 바나듐 등이 있다. 이러한 전하 생성 물질은 강한 엑셉터성을 가져 정공의 주입 및 수송을 원활하게 할 수 있다.
- [0104] 유기층은 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나에는 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 포함될 수 있다.
- [0105] 유기층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층에는 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 포함될 수 있다.
- [0106] 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은  $X_1$  및  $X_2$ 에서 컨쥬게이션(conjugation)이 끊어져 있어서 발광층 재료로 사용시 유용한 에너지 레벨을 가질 수 있어 발광층에 사용하기에 유리하다.
- [0107] 발광층에 포함된 상기 축합환 화합물은 인광 호스트로 사용될 수 있다. 발광층에 포함된 축합환 화합물은 적색광, 녹색광 또는 청색광을 방출하는 인광 호스트의 역할을 할 수 있으며, 특히 녹색광의 인광 호스트에 유용할 수 있다.
- [0108] 유기층이 발광층; 및 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나;를 포함하고, 상기 발광층은 아릴아민 화합물을 포함할 수 있다. 상기 아릴아민 화합물은 발광층에 사용되는 공지의 화합물로서 특별히 제한되지 않는다.
- [0109] 이하, 도 1을 참조하여 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하나, 상기 유기 발광 소자가 도 1에 한정되는 것은 아니다.
- [0110] 도 1은 일 구현예를 따른 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다.
- [0111] 기관(11)으로는, 통상적인 유기 발광 소자에 사용되는 기관을 사용할 수 있으며, 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기관 또는 투명 플라스틱 기관을 사용할 수 있다.
- [0112] 제1전극(13)은 기관 상부에 제1전극 형성 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 형성될 수 있다. 제1전극(13)이 애노드(anode)일 경우, 정공 주입이 용이하도록 제1전극 형성 물질은 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 제1전극(13)은 반사형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극 형성 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석( $\text{SnO}_2$ ) 또는 산화아연( $\text{ZnO}$ ) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 은(Ag), 알루미늄(Al), 알루미늄:리튬(Al:Li), 칼슘(Ca), 은:산화인듐주석(Ag:ITO), 마그네슘:인듐(Mg:In) 또는 마그네슘:은(Mg:Ag)등을 이용하여 제1전극(13)을 반사형 전극으로 형성할 수도

있다. 제1전극(13)은 단일층 또는 2 이상의 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들면, 제1전극(13)은 ITO:Ag:ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0113] 제1전극(13) 상부에는 유기층(15)이 구비되어 있다. 유기층(15)은 정공 주입층(미도시), 정공 수송층(미도시), 버퍼층(미도시), 발광층(16), 전자 수송층(미도시) 및 전자 주입층(미도시)을 포함할 수 있다.

[0114] 정공 주입층(HIL)은 제1전극(13) 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다. 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, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500℃, 진공도 약  $10^{-8}$  내지 약  $10^{-3}$  torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다. 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80℃ 내지 200℃의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다. 정공 주입층 형성 재료로는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 및 공지된 정공 주입층 형성 재료 중 적어도 1종을 사용할 수 있다. 공지된 정공 주입층 형성 재료는, 예를 들면, N,N'-디페닐-N,N'-비스-[4-(페닐-m-톨일-아미노)-페닐]-비페닐-4,4'-디아민(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine: DNTPD), 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA [4,4',4''-tris (3-methylphenylphe o) triphenylamine], NPB(N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)), TDATA, 2-TNATA, 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/캄퍼술포산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린)/폴리(4-스티렌술포네이트)) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 정공 주입층의 두께는 약 100 Å 내지 약 10000 Å, 예를 들면, 약 100 Å 내지 약 1000 Å일 수 있다. 정공 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스러운 정도의 정공 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0115] 다음으로 정공 주입층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공 수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀코팅법에 의하여 정공 수송층을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 정공 수송층 형성 재료로는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 및 공지된 정공 수송층 형성 재료 중 적어도 1종을 사용할 수 있다. 공지된 정공 수송층 형성 재료로는, 예를 들면, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), TCTA(4,4'-4''-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4'-4''-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)) 또는 NPB(N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 정공 수송층의 두께는 약 50 Å 내지 약 2000 Å, 예를 들면 약 100 Å 내지 약 1500 Å일 수 있다. 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0116] 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 갖는 기능층에는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물, 정공 주입층 형성 재료, 및 정공 수송층 형성 재료 중에서 적어도 1종이 포함될 수 있으며, 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 갖는 기능층의 두께는 약 500 Å 내지 약 10000 Å, 예를 들면, 약 100 Å 내지 약 1000 Å일 수 있다. 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 갖는 기능층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스러운 정도의 정공 주입 및 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0117] 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나는 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물, 공지된 정공 주입층 형성 재료, 및 공지된 정공 수송층 형성 재료 중 적어도 1종 이외에, 상기 층의 도전성 등을 향상시키기 위하여 상기 설명한 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다.

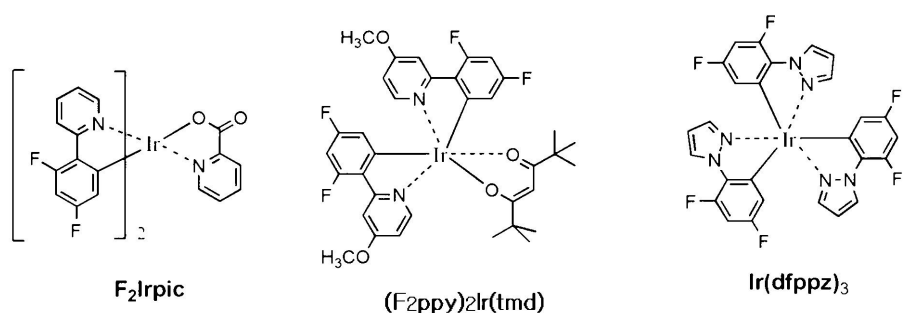
[0118] 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나와 발광층(16) 사이에는 버퍼층이 개재될 수 있다. 버퍼층은 발광층(16)에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 효율을 증가시키는 역할을 할 수 있다. 버퍼층은 공지된 정공 주입층 형성 재료, 정공 수송층 형성 재료를 포함할 수 있다.

[0119] 이어서, 정공 수송층, 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 또는 버퍼층 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(16)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 발광층(16)을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

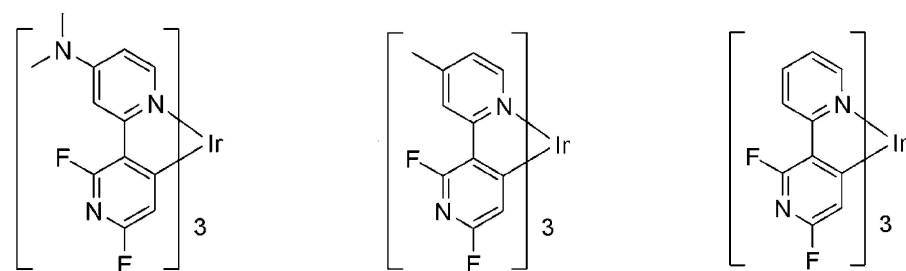
[0120] 발광층(16)의 호스트 재료로는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 사용할 수 있다. 또는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 외에 공지된 호스트 재료를 더 사용할 수 있다. 공지된 호스트 재료로는 Alq<sub>3</sub>, CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), PVK(폴리(n-비닐카바졸)), 9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센(ADN), TCTA, TPBI(1,3,5-트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene)), TBADN(3-tert-부틸-9,10-디(나프탈렌-2-일) 안트라센), E3, DSA(디스티릴아릴렌) 또는 dmCBP 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0121] 유기 발광 소자(10)가 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 중 적어도 하나를 포함하는 경우에, 발광층(16)에는 하기 도펀트를 사용할 수 있다(ppy = 페닐피리딘).

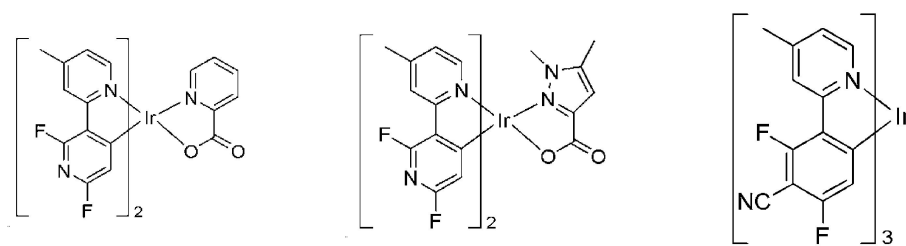
[0122] 청색 도펀트로서는 공지된 하기 화합물들 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



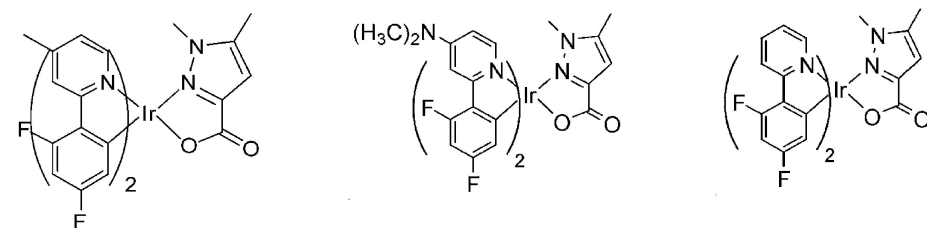
[0123]



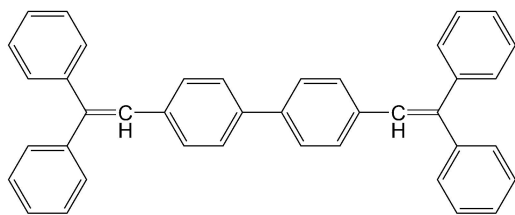
[0124]



[0125]

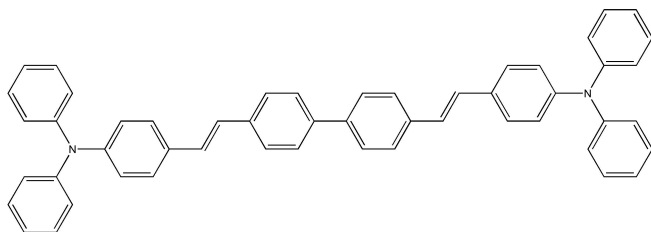


[0126]



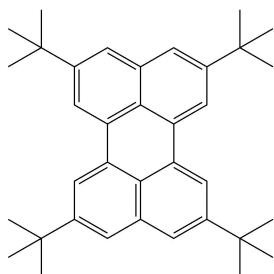
DPVBi

[0127]



DPAVB

[0128]

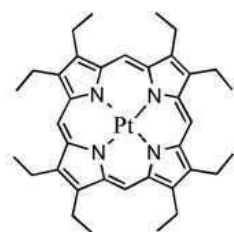


TBP

[0129]

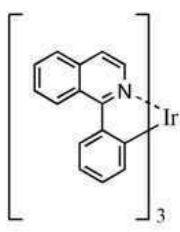
[0130]

적색 도펀트로서는 하기 화합물들 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

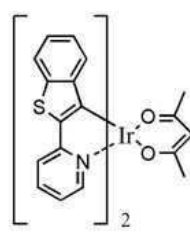


PtOEP

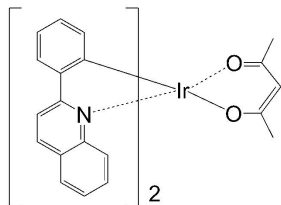
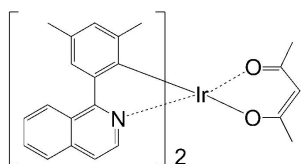
[0131]



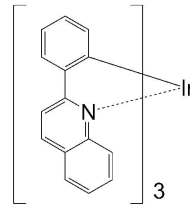
Ir(piq)<sub>3</sub>



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

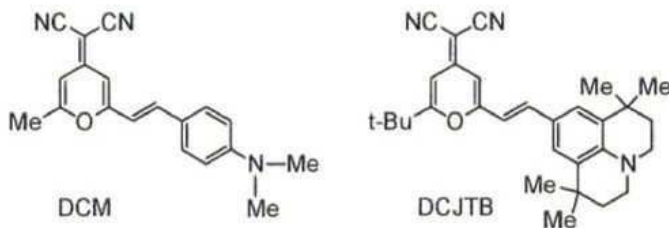
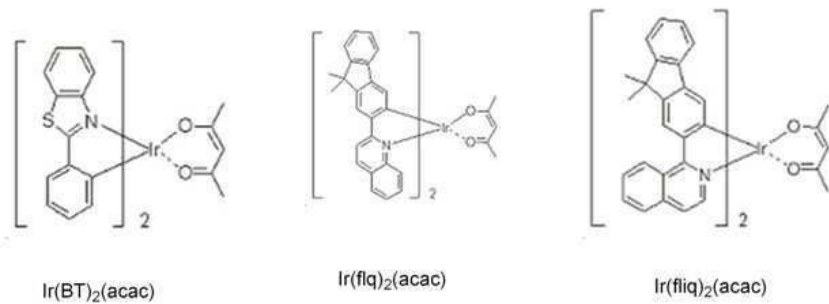


Ir(pq)<sub>2</sub>(acac)



Ir(2-phq)<sub>3</sub>

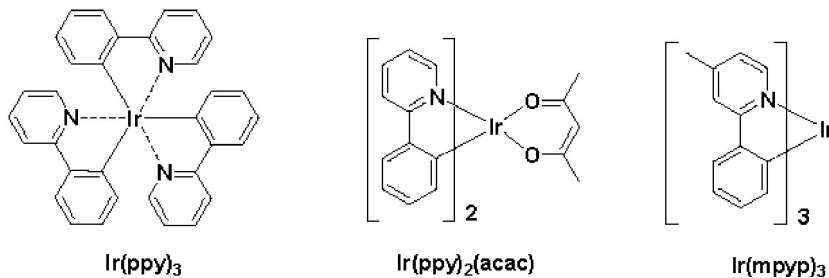
[0132]



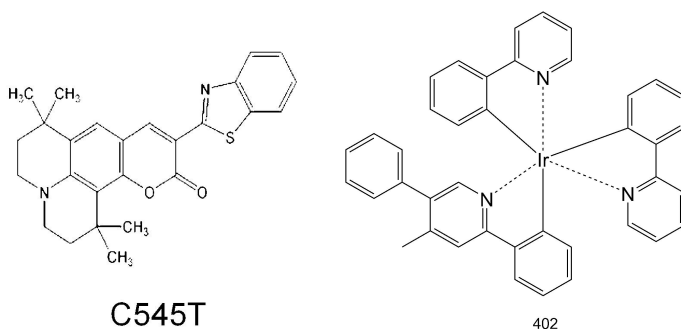
[0133]

[0134]

녹색 도펀트로서는 하기 화합물들 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0135]



[0136]

[0137]

[0138]

또한, 발광층(16)의 도펀트로는 공지된 Pt-착체, Os-착체 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

유기 발광 소자(10)의 발광층(16); 및 전자 주입층, 전자 수송층, 및 전자 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층 중 적어도 하나;가 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 경우, 발광층(16)은 공지의 아릴아민 화합물을 포함할 수 있다.

[0139]

발광층(16)이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0140]

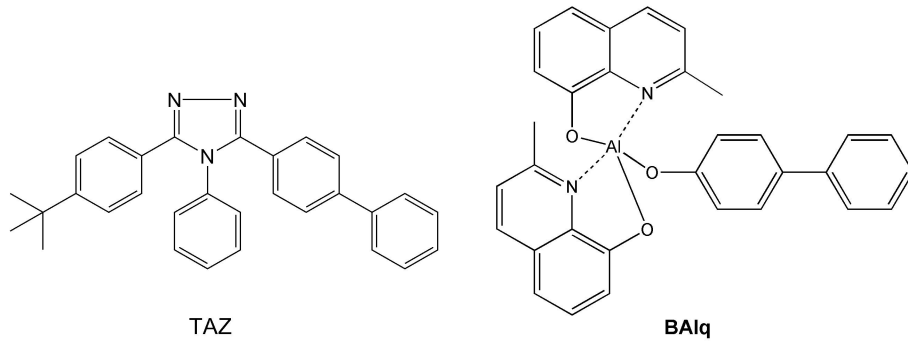
발광층(16)의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 발광층(16)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

[0141]

다음으로 발광층(16) 상부에 전자 수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스프인코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공증착법 및 스프인코팅법에 의해 전자 수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 전자 수송층 형성 재료로는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 및 전자주입전극(cathode)로부터 주입된 전자를 안

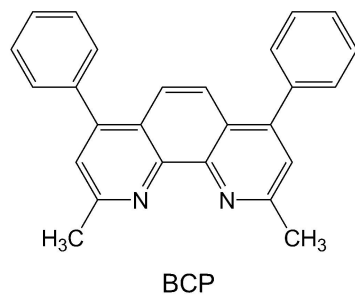
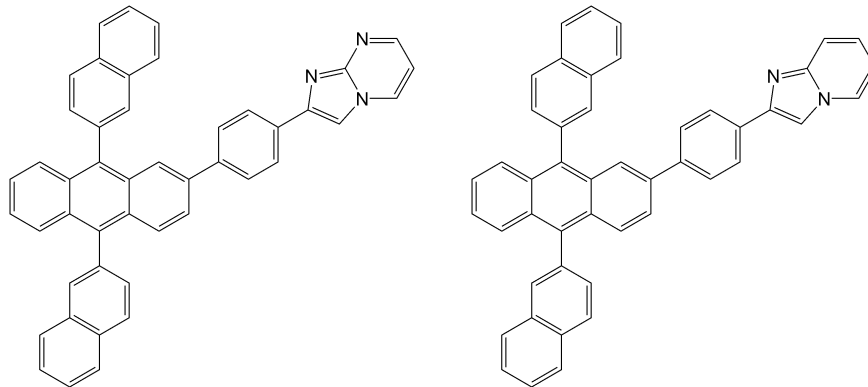


정하게 수송하는 기능을 하는 공지의 전자 수송층 형성 재료 중 적어도 1종을 사용할 수 있다. 공지의 전자 수송층 형성 재료로는, 예를 들면, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄( $\text{Alq}_3$ ), TAZ, Balq, 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate:  $\text{Bebq}_2$ ), ADN, 화합물 201, 또는 화합물 202 등과 같은 재료를 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



<화합물 201>

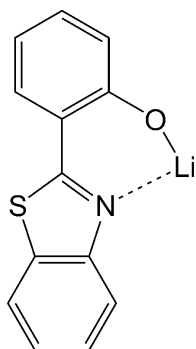
<화합물 202>



전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

전자 수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 및 공지의 전자 수송층 형성 재료 중 적어도 1종 이외에, 금속 착체를 더 포함할 수 있다. 상기 금속 착체는 Li 착체를 포함할 수 있다. Li 착체로는 예를 들면 리튬 퀴놀레이트(LiQ) 또는 하기 화합물 203 등을 들 수 있다:

[0148] <화합물 203>

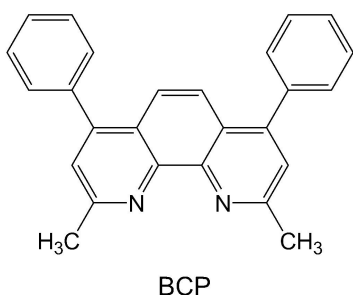


[0149]

[0150] 전자 수송층 상부에 캐소드로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 전자 주입층(EIL)이 적층될 수 있다. 전자 주입층 형성 재료로는 예를 들면 LiF, NaCl, CsF, Li<sub>2</sub>O 또는 BaO 등과 같은 공지된 전자 주입층 형성 재료를 사용할 수 있다. 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3 Å 내지 약 90Å일 수 있다. 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0151] 유기층(15) 상부에는 제2전극(19)이 구비되어 있다. 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드(cathode)일 수 있으며, 이 때 제2전극 형성 물질로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 또는 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 예를 들면, 제2전극은 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄:리튬(Al:Li), 칼슘(Ca), 마그네슘:인듐(Mg:In) 또는 마그네슘:은(Mg:Ag) 등을 박막으로 형성하여 투과형 전극을 얻을 수 있다. 한편, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO 또는 IZO를 이용하여 투과형 전극을 형성할 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0152] 한편, 발광층(16)에 인광 도펀트를 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 정공 수송층과 발광층(16) 사이에 또는 정공 주입 및 수송 기능을 동시에 가지는 기능층과 발광층 사이에, 진공증착법, 스퍼코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공 저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스퍼코팅법에 의해 정공 저지층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 될 수 있다. 정공 저지층은 공지의 정공 저지층 형성 재료를 사용하여 형성할 수 있으며, 옥사디아졸 유도체, 트리아졸 유도체 또는 페난트롤린 유도체 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들면, 하기와 같은 BCP를 사용하여 정공 저지층을 형성할 수 있다.



[0153]

[0154] 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 정공저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

[0155] 다른 한 측면에 따라, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 포함하는 유기 발광 표시 장치가 제공된다. 상기 유기 발광 표시 장치는 소스, 드레인, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 상기 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 상기 소스 및 드레인 중 하나와 전기적으로 연결되어 있다. 트랜지스터의 활성층은 비정질 실리콘층, 결정질 실리콘층, 유기 반도체층 또는 산화물 반도체층 등으로 다양한 변형이 가능하다.



- [0156] 본 명세서 중, 비치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀 또는 헥실 등과 같은 탄소수 1 내지 40의 선형 또는 분지형 알킬기를 들 수 있고, 치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기는 상기 비치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기 중 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염,  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기,  $C_2$ - $C_{40}$ 알케닐기,  $C_2$ - $C_{40}$ 알키닐기,  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴기,  $C_2$ - $C_{40}$ 헤테로아릴기,  $-N(Q_{101})(Q_{102})$ , 또는  $Si(Q_{103})(Q_{104})(Q_{105})(Q_{106})-$  (여기서,  $Q_{101}$  내지  $Q_{106}$ 은 서로 독립적으로 수소,  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기,  $C_2$ - $C_{40}$ 알케닐기,  $C_2$ - $C_{40}$ 알키닐기,  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴기, 또는  $C_2$ - $C_{40}$ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택됨)로 치환된 것이다.
- [0157] 본 명세서 중, 비치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알콕시기는  $-OA_1$ (단,  $A_1$ 은 상술한 바와 같은 비치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기임)의 화학식을 가지며, 이의 구체적인 예로서, 메톡시, 에톡시 또는 이소프로필옥시 등이 있다. 치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알콕시기는  $C_1$ - $C_{40}$ 알콕시기 중 적어도 하나의 수소가 상술한 치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기의 치환기와 동일한 부류의 것으로 치환된 것이다.
- [0158] 본 명세서 중 비치환된  $C_2$ - $C_{40}$ 알케닐기는 상기 비치환된  $C_2$ - $C_{40}$ 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 것을 의미하며, 예로서는 에테닐, 프로페닐 또는 부테닐 등이 있다. 치환된  $C_2$ - $C_{40}$ 알케닐기는  $C_2$ - $C_{40}$ 알케닐기 중 적어도 하나의 수소가 상술한 치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기의 치환기와 동일한 부류의 것으로 치환된 것이다.
- [0159] 본 명세서 중 비치환된  $C_2$ - $C_{40}$ 알키닐기는 상기 정의된 바와 같은  $C_2$ - $C_{40}$ 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 것을 의미하며, 예로서는 에티닐(ethynyl) 또는 프로피닐(propynyl) 등이 있다. 치환된  $C_2$ - $C_{40}$ 알키닐기는  $C_2$ - $C_{40}$ 알키닐기 중 적어도 하나의 수소가 상술한 치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기의 치환기와 동일한 부류의 것으로 치환된 것이다.
- [0160] 본 명세서 중 비치환된  $C_3$ - $C_{40}$ 시클로알킬기는 비치환된  $C_3$ - $C_{40}$ 알킬기에 해당하는 탄소 원자들이 고리를 이루고 있는 그룹을 의미하며, 치환된  $C_3$ - $C_{40}$ 시클로알킬기는  $C_3$ - $C_{40}$ 시클로알킬기 중 적어도 하나의 수소가 상술한 치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기의 치환기와 동일한 부류의 것으로 치환된 것이다.
- [0161] 본 명세서 중 치환 또는 비치환된  $C_3$ - $C_{40}$ 시클로알케닐기는 비치환된  $C_3$ - $C_{40}$ 알케닐기에 해당하는 탄소 원자들이 고리를 이루고 있는 그룹을 의미하며, 치환된  $C_3$ - $C_{40}$ 시클로알케닐기는  $C_3$ - $C_{40}$ 시클로알케닐기 중 적어도 하나의 수소가 상술한 치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기의 치환기와 동일한 부류의 것으로 치환된 것이다.
- [0162] 본 명세서 중 비치환된  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 6 내지 40개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 비치환된  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴렌기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 6 내지 40개의 카보시클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 아릴기 및 아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 치환된  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴기는  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴기 중 적어도 하나의 수소가 상술한 치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기의 치환기와 동일한 부류의 것으로 치환된 것이고, 치환된  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴렌기는  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴렌기 중 적어도 하나의 수소가 상술한 치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기의 치환기와 동일한 부류의 것으로 치환된 것이다.
- [0163] 본 명세서 중 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴알킬기는 알킬기와 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴기가 결합된 그룹을 가리키고, 치환된  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴알킬기는  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴알킬기 중 적어도 하나의 수소가 상술한 치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기의 치환기와 동일한 부류의 것으로 치환된 것이다.
- [0164] 본 명세서 중 비치환된  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴옥시기는  $-OA_2$ (여기서,  $A_2$ 는 상기 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴기임)를 가리키고, 치환된  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴옥시기는  $C_6$ - $C_{40}$ 아릴옥시기 중 적어도 하나의 수소가 상술한 치환된  $C_1$ - $C_{40}$ 알킬기의 치환기와 동일한 부류의 것으로 치환된 것이다.

[0165] 본 명세서 중 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴티오기는 -SA<sub>3</sub>(여기서, A<sub>3</sub>는 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴기임)를 가리키고, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴티오기는 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴티오기 중 적어도 하나의 수소가 상술한 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>알킬기의 치환기와 동일한 부류의 것으로 치환된 것이다.

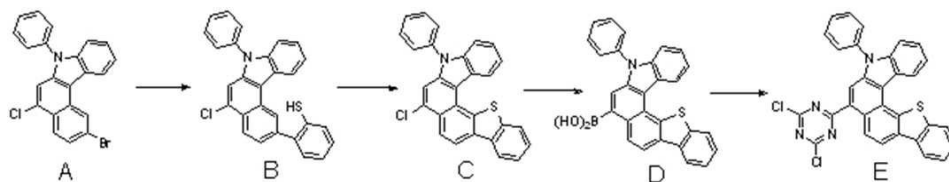
[0166] 본 명세서 중 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴아미노기는 -N(A<sub>4</sub>)(A<sub>5</sub>) (여기서, A<sub>4</sub> 및 A<sub>5</sub>는 서로 독립적으로 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴기임)를 가리키고, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴티오기는 C<sub>6</sub>-C<sub>40</sub>아릴티오기 중 적어도 하나의 수소가 상술한 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>알킬기의 치환기와 동일한 부류의 것으로 치환된 것이다.

[0167] 본 명세서 중 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>헤테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1개 이상의 헤테로원자와 2 내지 40개의 탄소 원자로 구성된 방향족 고리를 하나 이상 포함하는 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>헤테로아릴렌기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1개 이상의 헤테로원자와 2 내지 40개의 탄소 원자로 구성된 방향족 고리를 하나 이상 포함하는 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 여기서, C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>헤테로아릴기 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리는 서로 융합될 수 있다. 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>헤테로아릴기는 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>헤테로아릴기 중 적어도 하나의 수소가 상술한 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>알킬기의 치환기와 동일한 부류의 것으로 치환된 것이고, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>헤테로아릴렌기는 C<sub>2</sub>-C<sub>40</sub>헤테로아릴렌기 중 적어도 하나의 수소가 상술한 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>40</sub>알킬기의 치환기와 동일한 부류의 것으로 치환된 것이다.

[0168] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명한다. 그러나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0169] 먼저, 하기와 같은 반응 도식(reaction sheme) 1에 따라, 화합물 A로부터 중간체 B, C 및 D를 거쳐 중간체 E를 제조하였다.

[0170] <반응 도식 1>



[0171]

[0172] 중간체 E 합성

[0173] <단계 1> 중간체 B 합성

[0174] 2-브로모-5-클로로-7-페닐-7H-벤조[c]카바졸(2-bromo-5-chloro-7-phenyl-7H-benzo[c]carbazole) 10g (1eq, 0.024mol) 및 2-메르캅토펜일보론산(2-mercaptophenylboronic acid) 4.5g (1.2eq, 0.029mol)을 400ml의 톨루엔(toluene)과 용해시켰다. 여기에 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.95g (0.02eq, 0.001mmol) 및 2M K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 포화 용액 100ml을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다.

[0175] 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트(celite)를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 중간체 B를 7.57 g (수율 = 72.4%) 얻었다.

[0176] GC-Mass (이론치: 435.2g/mol, 측정치: 434g/mol)

[0177] <단계 1-1> 중간체 C 합성

[0178] 중간체 B 10g (1eq, 0.022mol)를 플라스크에 넣고 여기에 에테르(ether) 100ml 첨가 후 과산화수소(32%) 25ml를 서서히 첨가 하였다. 상온에서 5시간 교반 후 증류수 과량을 씻어준 후 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조한 후 컬럼크로마토그래피를 통하여 중간체 C를 5.1g (수율 = 52.1%) 얻었다.

[0179] GC-Mass (이론치: 433.07g/mol, 측정치: 432g/mol)

[0180] <단계 1-2> 중간체 D 합성

[0181] 중간체 C 5g (1eq, 0.0115mol) 및 THF 100ml 첨가 후 반응용기를 -78℃ (아세톤+드라이아이스)하강시켰다. 30 분 경과 후 n-BuLi (1.6M in Hex) 12.2ml를 서서히 첨가 하였다. 1시간 경과 후 2-이소프로필 보레이트(2-isopropyl borate) 17.3ml 서서히 첨가 하였다.

[0182] 상온으로 온도 상승 후 1시간 교환 시킨다.

[0183] 반응이 종료된 반응용액을 과량의 증류수로 세척한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 중간체 D를 3.9 g (수율 = 77.6%) 얻었다.

[0184] GC-Mass (이론치: 443.12g/mol, 측정치: 442g/mol)

[0185] <단계 1-3> 중간체 E 합성

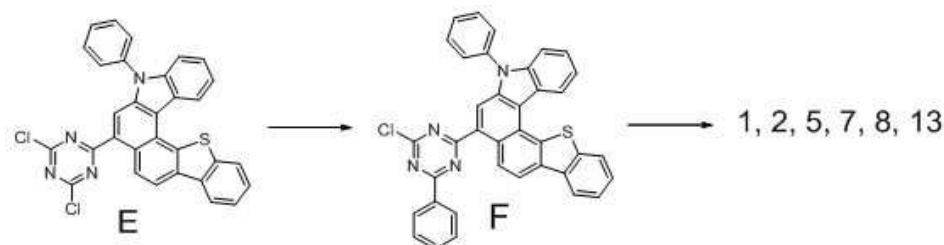
[0186] 중간체 D 10g (1eq, 0.022mol) 및 2,4,6-트리클로로-1,3,5-트리아진(2,4,6-trichloro-1,3,5-triazine) 3.7g (0.9eq, 0.02mol)을 400ml의 톨루엔과 용해시켰다. 여기에 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.95g (0.01eq, 0.001mmol) 및 2M K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 포화 용액 100ml을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다.

[0187] 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 중간체 E를 6.63g (수율 = 55.1%) 얻었다.

[0188] GC-Mass (이론치: 546.05g/mol, 측정치: 545g/mol)

[0189] 다음으로, 하기와 같은 반응 도식 2에 따라, 중간체 E로부터 중간체 F를 거쳐 화합물 1, 2, 5, 7, 8 및 13을 제조하였다.

[0190] <반응 도식 2>



[0191]

[0192] 중간체 F 합성

[0193] 중간체 E 10g (1eq, 0.018mol) 및 페닐보론산 2g (0.9eq, 0.016mol)을 600ml 톨루엔과 용해시켰다. 여기에 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.5g (0.01eq, 0.0005mmol), 2M K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 포화 용액 75ml을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다.

[0194] 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 중간체 F를 5.51g (수율 = 52%) 얻었다.

[0195] GC-Mass (이론치: 598.12g/mol, 측정치: 597g/mol)

[0196] 화합물 1 합성

[0197] 중간체 E 10g (1eq, 0.018mol), 페닐 보론산 4.8g (2.2eq, 0.0396mol)을 1000ml 톨루엔과 용해시켰다. 여기에 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.9g (0.007eq, 0.0009mmol), 2M K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 포화 용액 150ml을 각각 첨가한 후 12시간동안 가열교반하였다.

[0198] 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 중간체 E를 9.5g (수율

= 84%) 얻었다.

[0199] GC-Mass (이론치: 598.12g/mol, 측정치: 597g/mol)

[0200] Elemental Analysis: C, 81.88; H, 4.15; N, 8.88; S, 5.08

[0201] **화합물 2 합성**

[0202] 화합물 1의 합성에서 중간체 E 대신 중간체 F를 사용하고 페닐 보론산 대신 나프탈렌-1-일 보론산(naphthalen-1-yl boronic acid)을 사용하여 동일한 방법으로 화합물 2를 8.1g (수율 = 79.5%) 얻었다.

[0203] GC-Mass (이론치: 680.82g/mol, 측정치: 679g/mol)

[0204] Elemental Analysis: C, 82.92; H, 4.15; N, 8.23; S, 4.71

[0205] **화합물 5 합성**

[0206] 화합물 2의 합성에서 나프탈렌-1-일 보론산 대신 디벤조[b,d]-티오펜-4-일 보론산(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl boronic acid)을 사용하여 동일한 방법으로 화합물 5를 9.2g (수율 = 82.1%) 얻었다.

[0207] GC-Mass (이론치: 736.90g/mol, 측정치: 735g/mol)

[0208] Elemental Analysis: C, 79.86; H, 3.83; N, 7.60; S, 8.70

[0209] **화합물 7 합성**

[0210] 화합물 2의 합성에서 나프탈렌-1-일 보론산 대신 9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일 보론산(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl boronic acid)을 사용하여 동일한 방법으로 화합물 7을 8.1g (수율 = 72.2%) 얻었다.

[0211] GC-Mass (이론치: 746.92/mol, 측정치: 745g/mol)

[0212] Elemental Analysis: C, 83.62; H, 4.59; N, 7.50; S, 4.29

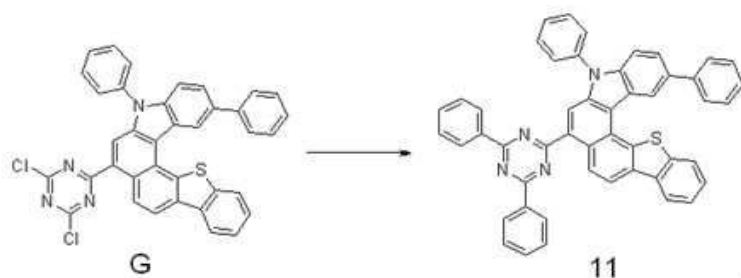
[0213] **화합물 8 합성**

[0214] 화합물 2의 합성에서 나프탈렌-1-일 보론산 대신 9-페닐-9H-카바졸-3-일 보론산(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl boronic acid)를 사용하여 동일한 방법으로 화합물 8을 9.3g (수율 = 75.9%) 얻었다.

[0215] GC-Mass (이론치: 795.95g/mol, 측정치: 798g/mol)

[0216] Elemental Analysis: C, 82.99; H, 4.18; N, 8.80; S, 4.03

[0217] **화합물 11 합성**



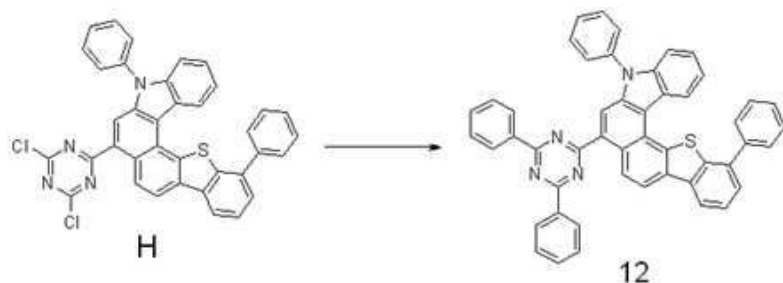
[0218]

[0219] 중간체 G를 사용하여 화합물 1의 합성에서 사용한 방법과 동일한 방법으로 화합물 11을 7.9g (수율 = 71.4%) 얻었다.

[0220] GC-Mass (이론치: 706.22g/mol, 측정치: 705g/mol)

[0221] Elemental Analysis: C, 83.26; H, 4.28; N, 7.93; S, 4.54

[0222] **화합물 12 합성**



[0223]

[0224] 중간체 H를 사용하여 화합물 1의 합성에서 사용한 방법과 동일한 방법으로 화합물 12를 7.2g (수율 = 70.6%) 얻었다.

[0225] GC-Mass (이론치: 706.22g/mol, 측정치: 705g/mol)

[0226] Elemental Analysis: C, 83.26; H, 4.28; N, 7.93; S, 4.54

[0227] **화합물 13 합성**

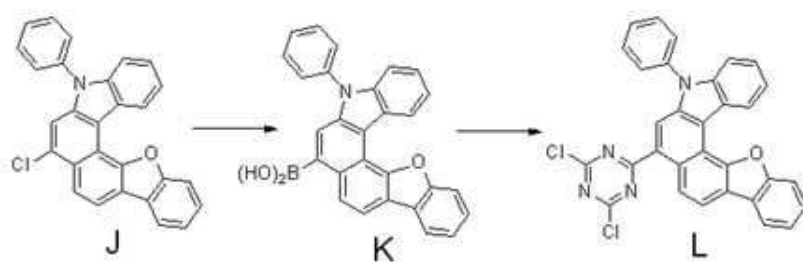
[0228] 화합물 2의 합성에서 나프탈렌-1-일 보론산 대신 트리페닐렌-2-일 보론산(triphenylen-2-yl boronic acid)을 사용하여 동일한 방법으로 화합물 13을 8.7g (수율 = 77.9%) 얻었다.

[0229] GC-Mass (이론치: 780.93g/mol, 측정치: 779g/mol)

[0230] Elemental Analysis: C, 84.59; H, 4.13; N, 7.17; S, 4.11

[0231] 하기와 같은 반응 도식 3에 따라, 중간체 J로부터 중간체 K를 거쳐 중간체 L을 제조하였다.

[0232] <반응 도식 3>



[0233]

[0234] **중간체 L 합성**

[0235] <단계 2> 중간체 K 합성

[0236] 중간체 J 6.3g (1eq, 0.0115mol) 및 THF 150ml 첨가 후 반응 용기를 -78℃(아세톤+드라이아이스)로 하강시켰다. 30분 경과 후 n-BuLi (1.6M in Hex) 15.8ml를 서서히 첨가 하였다. 1시간 경과 후 2-이소프로필 보레이트 20.1ml를 서서히 첨가하였다.

[0237] 상온으로 온도 상승 후 1시간 교환 시킨다.

[0238] 반응이 종료된 반응용액을 과량의 증류수로 세척한 다음, 헥산 과량으로 세척하여 중간체 K를 4.1 g (수율 = 72.7%) 얻었다.

[0239] GC-Mass (이론치: 427.14g/mol, 측정치: 426g/mol)

[0240] <단계 2-1> 중간체 L 합성

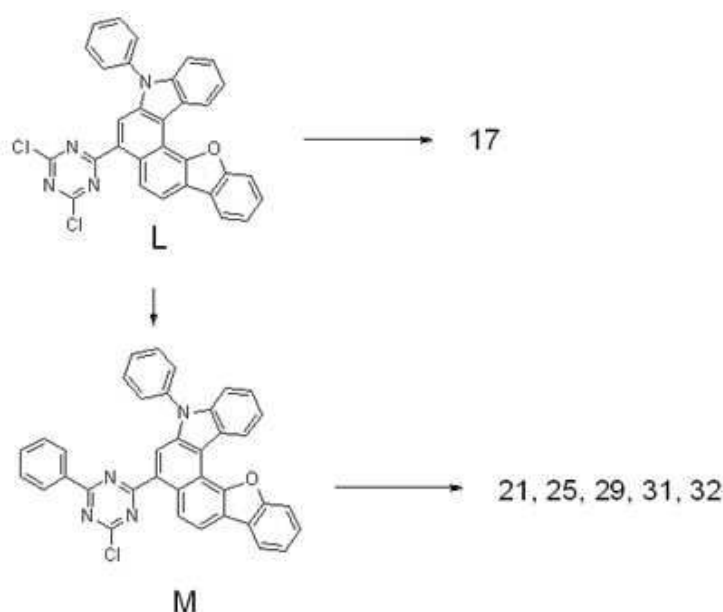
[0241] 중간체 K 10g (1eq, 0.022mol) 및 2,4,6-트리클로로-1,3,5-트리아진 3.7g (0.9eq, 0.02mol)을 400ml의 Toluene 과 용해시켰다. 여기에 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.95g (0.01eq, 0.001mmol) 및 2M K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 포화 용액 100ml을 각각 첨가한 후 12 시간 동안 가열교반하였다.

[0242] 반응이 종료된 반응용액을 셀라이트를 통해 여과한 다음, 컬럼크로마토그래피를 통하여 중간체 L를 6.63g (수율 = 55.1%) 얻었다.

[0243] GC-Mass (이론치: 530.07g/mol, 측정치: 529g/mol)

[0244] 다음으로, 하기와 같은 반응 도식 4에 따라, 중간체 L로부터 중간체 M을 제조하였다.

[0245] <반응 도식 4>



[0246]

[0247] 중간체 M 합성

[0248] 중간체 L을 이용하여 중간체 E의 합성 방법과 동일한 방법으로 중간체 M을 5.1g (수율 = 47%) 얻었다.

[0249] GC-Mass (이론치: 572.14g/mol, 측정치: 571g/mol)

[0250] 화합물 17 합성

[0251] 중간체 L을 이용하여 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법으로 화합물 17을 8.7g (수율 = 81%) 얻었다.

[0252] GC-Mass (이론치: 614.21g/mol, 측정치: 613g/mol)

[0253] Elemental Analysis: C, 84.02; H, 4.26; N, 9.11; O, 2.60

[0254] 화합물 21 합성

[0255] 중간체 M을 이용하여 화합물 5의 합성 방법과 동일한 방법으로 화합물 21을 7.7g (수율 = 73.6%) 얻었다.

[0256] GC-Mass (이론치: 720.2g/mol, 측정치: 719g/mol)

[0257] Elemental Analysis: C, 81.64; H, 3.92; N, 7.77; O, 2.22; S, 4.45

[0258] **화합물 33 합성**

[0259] 화합물 21의 합성에서 피렌-1-일 보론산(pyren-1-ylboronic acid)을 사용하여 동일한 방법으로 화합물 33을 8.3g (수율 = 79.5%) 얻었다.

[0260] GC-Mass (이론치: 740.26g/mol, 측정치: 739g/mol)

[0261] Elemental Analysis: C, 85.92; H, 4.35; N, 7.56; O, 2.16

[0262] **화합물 37 합성**

[0263] 중간체 M을 이용하여 화합물 13의 합성 방법과 동일한 방법으로 화합물 37을 7.9g (수율 = 69.1%) 얻었다.

[0264] GC-Mass (이론치: 764.26/mol, 측정치: 763g/mol)

[0265] Elemental Analysis: C, 86.37; H, 4.22; N, 7.33; O, 2.09

[0266] **화합물 39 합성**

[0267] 화합물 33의 합성에서 피렌-1-일 보론산 대신 9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일 보론산을 사용하여 동일한 방법으로 화합물 39를 8.87g (수율 = 72.5%) 얻었다.

[0268] GC-Mass (이론치: 730.27g/mol, 측정치: 729g/mol)

[0269] Elemental Analysis: C, 85.46; H, 4.69; N, 7.67; O, 2.19

[0270] **화합물 40 합성**

[0271] 화합물 33의 합성에서 피렌-1-일 보론산 대신 디벤조[b,d]푸란-3-일 보론산(dibenzo[b,d]furan-3-yl boronic acid)을 사용하여 동일한 방법으로 화합물 40을 7.14g (수율 = 62.5%) 얻었다.

[0272] GC-Mass (이론치: 704.22g/mol, 측정치: 703g/mol)

[0273] Elemental Analysis: C, 83.51; H, 4.00; N, 7.95; O, 4.54

[0274] **실시예 1**

[0275] 애노드로는 코닝(corning)사의 15Ω/cm<sup>2</sup>(500Å) ITO 유리 기판을 50mm×50mm×0.5mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각각 10분 동안 초음파 세정한 후 10분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정한 다음, 진공 증착 장치에 장착하였다.

[0276] 상기 유리 상부에 2-TNATA를 진공 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성한 다음, 상기 정공 주입층 상부에 NPB를 진공 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0277] 상기 정공 수송층 상부에 녹색 인광 도펀트로서 Ir(ppy)<sub>3</sub>와 호스트로서 상기 화합물 1을 87:13의 중량비로 동시 증착함으로써 300Å 두께의 녹색 발광층을 형성하였다.

[0278] 이어서, 상기 발광층 상부에 Alq<sub>3</sub>를 진공 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성하였다.

[0279] 상기 전자 수송층 상부에 Al를 진공 증착하여 1200Å 두께의 캐소드를 형성하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0280] **실시예 2**

[0281] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 2를 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을



이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0282] 실시예 3

[0283] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 5를 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0284] 실시예 4

[0285] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 7을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0286] 실시예 5

[0287] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 8을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0288] 실시예 6

[0289] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 11을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0290] 실시예 7

[0291] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 12를 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0292] 실시예 8

[0293] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 13을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0294] 실시예 9

[0295] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 17을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0296] 실시예 10

[0297] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 21을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0298] 실시예 11

[0299] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 33을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.



- [0300] **실시예 12**
- [0301] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 37을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.
- [0302] **실시예 13**
- [0303] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 39를 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.
- [0304] **실시예 14**
- [0305] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 40을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.
- [0306] **실시예 15**
- [0307] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 상기 화합물 53을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.
- [0308] **비교예 1**
- [0309] 발광층 형성시 상기 화합물 1 대신 CBP를 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제조하였다.
- [0310] **평가예**
- [0311] 실시예 1~15 및 비교예 1의 유기 발광 소자에 대하여, PR650(Spectroscan) Source Measurement Unit(PhotoResearch사 제품)을 이용하여 구동 전압, 발광 효율, 색좌표, 발광 휘도 및 수명을 평가하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

**표 1**

구분	전류밀도 (mA/cm <sup>2</sup> )	구동전압 (V)	발광효율 (cd/A)	색좌표	발광휘도 (cd/m <sup>2</sup> )	T95수명 (hr@100mA/cm <sup>2</sup> )
실시예1	5.4	4.0	71.2	(0.32,0.62)	3,500	397
실시예2	5.1	4.7	61.9	(0.32,0.6)	3,500	332
실시예3	5.5	4.9	61.7	(0.33,0.63)	3,500	275
실시예4	5.7	3.9	69.3	(0.32,0.61)	3,500	259
실시예5	5.4	4.2	68.2	(0.33,0.62)	3,500	264
실시예6	5.9	4.1	66.6	(0.31,0.60)	3,500	247
실시예7	5.5	3.8	72.4	(0.32,0.60)	3,500	219
실시예8	5.4	3.7	65.5	(0.32,0.62)	3,500	337
실시예9	5.8	3.7	60.7	(0.30,0.62)	3,500	356
실시예10	5.2	4.2	62.9	(0.31,0.65)	3,500	287
실시예11	5.5	3.8	72.4	(0.32,0.60)	3,500	225
실시예12	5.4	3.7	65.5	(0.32,0.62)	3,500	377
실시예13	5.8	3.7	60.7	(0.30,0.62)	3,500	295
실시예14	5.2	4.2	62.9	(0.31,0.65)	3,500	319
실시예15	5.2	4.2	62.9	(0.31,0.65)	3,500	278
비교예1	6.2	5.1	51.2	(0.32,0.62)	3,500	175

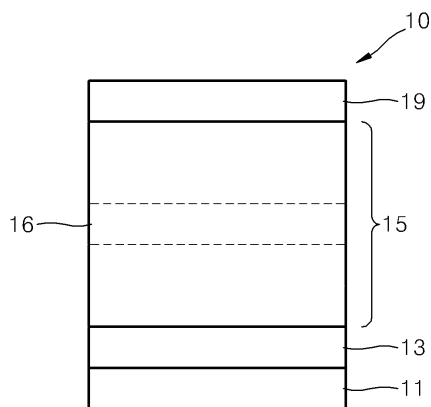
- [0313] 상기 표 1을 참조하면, 실시예 1~15에 따른 유기 발광 소자는 비교예 1에 따른 유기 발광 소자에 비해 구동 전압이 낮아지고, 발광 효율이 향상되었으며, 수명이 크게 증가하였음을 알 수 있다.
- [0314] 정량적으로 살펴보면, 실시예 1~15에 따른 유기 발광 소자는 비교예 1에 따른 유기 발광 소자에 비해 구동 전압이 약 15~25% 가량 낮아졌고 발광 효율은 약 10~20% 가량 상승하였다. 특히, 수명 특성에 있어서, 실시예 1~15에 따른 유기 발광 소자는 비교예 1에 따른 유기 발광 소자에 비해 T95 수명이 약 30~130% 가량 증가하였다. 이것은 실시예 1~15에 따른 유기 발광 소자에 사용된 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 우수한 열적 안정성을 가진 것에서 기인한 것으로 볼 수 있다.
- [0315] 본 발명에 대하여 상기 실시예를 참조하여 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 보호 범위는 첨부된 특허청구범위의 기술적 사항에 의하여 정해져야 할 것이다.

### 부호의 설명

- [0316] 10: 유기 발광 소자  
11: 기판  
13: 제1전극  
15: 유기층  
16: 발광층  
19: 제2전극

### 도면

#### 도면1



도면2

