



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2024년03월11일  
(11) 등록번호 10-2645708  
(24) 등록일자 2024년03월05일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07C 211/54 (2006.01) C07C 211/57 (2006.01)  
C07D 307/77 (2006.01) C07D 333/50 (2006.01)  
H10K 50/00 (2023.01)  
(52) CPC특허분류  
C07C 211/54 (2013.01)  
C07C 211/57 (2013.01)  
(21) 출원번호 10-2021-0067637  
(22) 출원일자 2021년05월26일  
심사청구일자 2021년05월26일  
(65) 공개번호 10-2021-0146820  
(43) 공개일자 2021년12월06일  
(30) 우선권주장  
1020200063632 2020년05월27일 대한민국(KR)  
(56) 선행기술조사문헌  
KR1020150066202 A\*  
(뒷면에 계속)  
전체 청구항 수 : 총 7 항

(73) 특허권자  
주식회사 엘지화학  
서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)  
(72) 발명자  
서상덕  
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
김민준  
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
유미특허법인

심사관 : 지무근

(54) 발명의 명칭 **신규한 화합물 및 이를 이용한 유기발광 소자**

(57) 요약

본 발명은 신규한 화합물 및 이를 이용한 유기발광 소자를 제공한다.

대표도 - 도1

6
5
4
3
2
1

(52) CPC특허분류

*C07D 307/77* (2013.01)

*C07D 333/50* (2013.01)

*H10K 50/00* (2023.02)

*C07C 2603/12* (2017.05)

(72) 발명자

**김영석**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**김동희**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**오중석**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**김서연**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**이다정**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**최승원**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**이동훈**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

(56) 선행기술조사문헌

KR1020210101554 A\*

KR1020150034390 A

KR1020160073285 A

CN109748802 A

CN110498765 A

\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

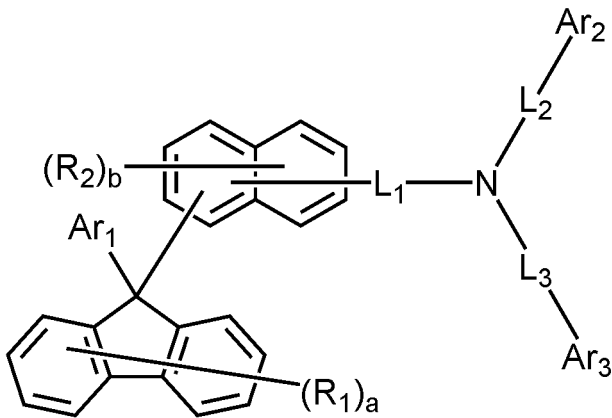
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

L<sub>1</sub>은 단일결합이고,

L<sub>2</sub> 및 L<sub>3</sub>는 각각 독립적으로, 단일결합; 치환 또는 비치환된 C<sub>6-60</sub> 아릴렌; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C<sub>2-60</sub> 헤테로아릴렌이고,

Ar<sub>1</sub>은 비치환되거나, 또는 중수소로 치환된 페닐이고,

Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>는 각각 독립적으로, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 트리페닐레닐, 플루오레닐, 벤조나프토피라닐, 벤조나프토티오페닐, 또는 벤조카바졸일이고,

여기서, Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>는 비치환되거나, 또는 중수소, C<sub>1-10</sub> 알킬 및 C<sub>6-20</sub> 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되고,

R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 각각 독립적으로, 수소; 또는 중수소이고,

a는 0 내지 8의 정수이고,

b는 0 내지 6의 정수이다.

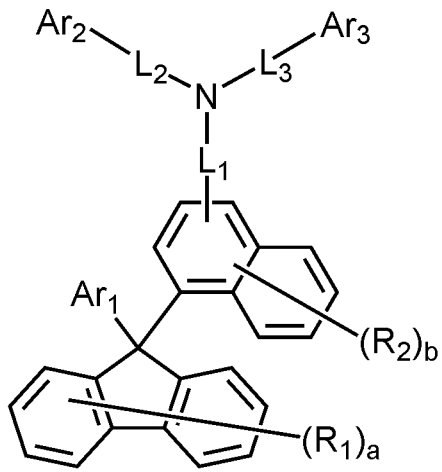
청구항 2

제1항에 있어서,

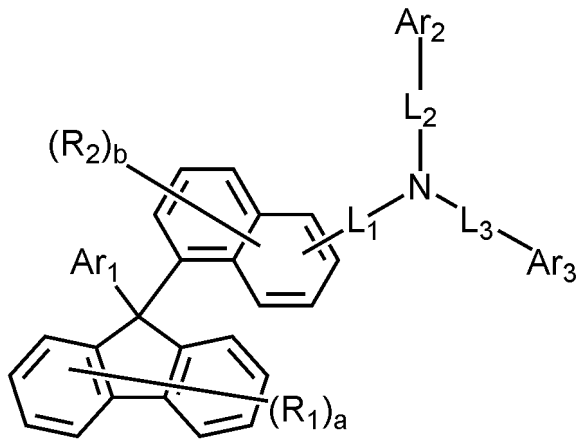
상기 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-4 중 어느 하나로 표시되는,

화합물:

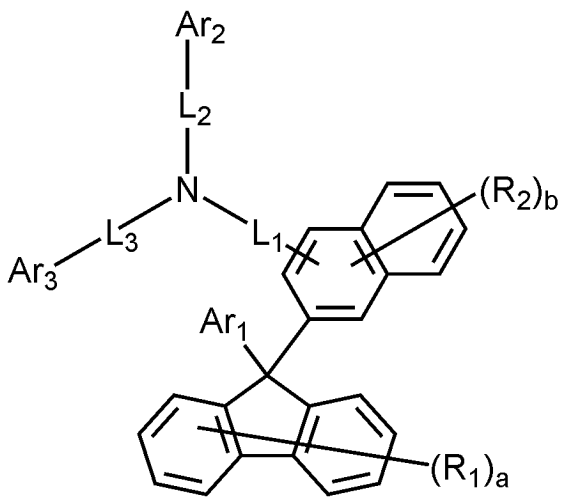
[화학식 1-1]



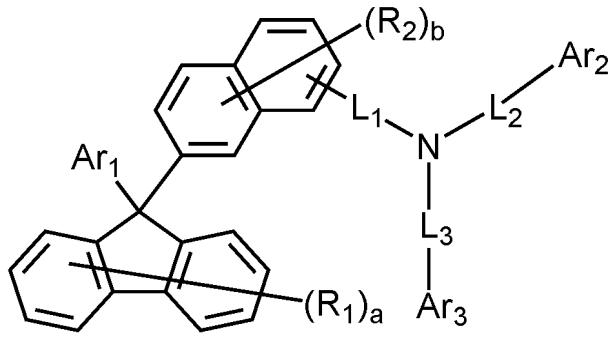
[화학식 1-2]



[화학식 1-3]



[화학식 1-4]



상기 화학식 1-1 내지 1-4에서,

L<sub>1</sub> 내지 L<sub>3</sub>, Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 제1항에서 정의한 바와 같다.

### 청구항 3

제1항에 있어서,

L<sub>2</sub> 및 L<sub>3</sub>는 각각 독립적으로, 단일결합; 비치환되거나, 또는 중수소로 치환된 페닐렌; 또는 비치환되거나 또는 중수소로 치환된 나프틸렌인, 화합물.

### 청구항 4

삭제

### 청구항 5

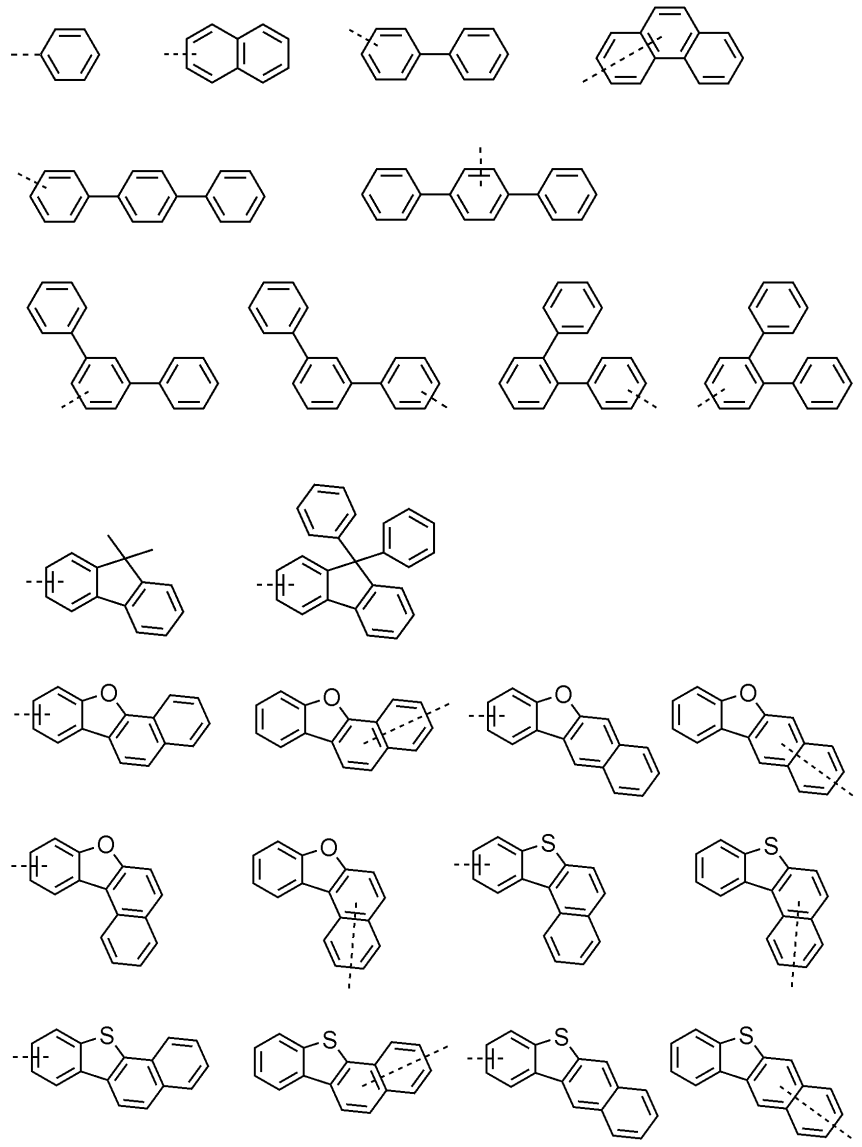
삭제

### 청구항 6

제1항에 있어서,

Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>는 각각 독립적으로, 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나인,

화합물:



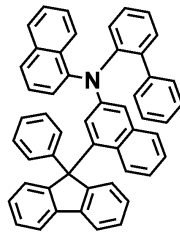
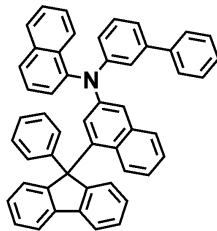
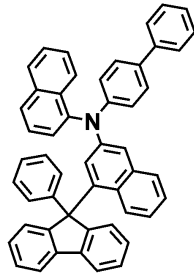
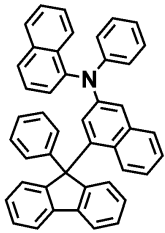
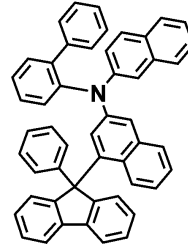
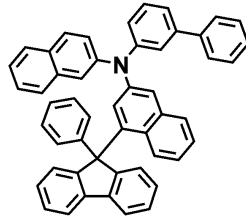
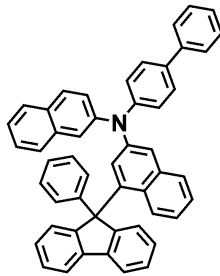
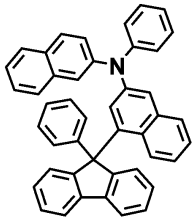
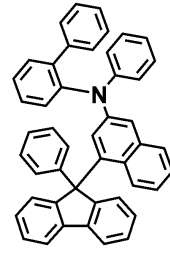
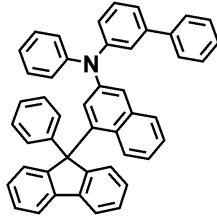
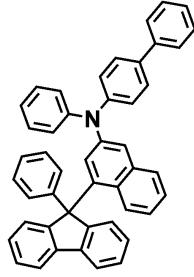
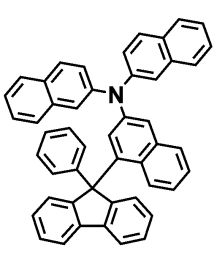
청구항 7

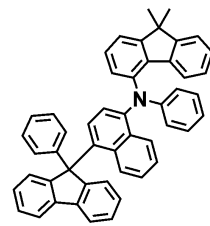
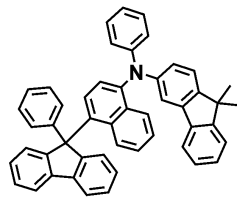
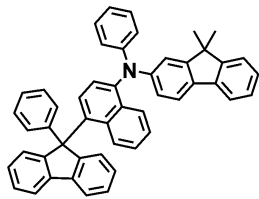
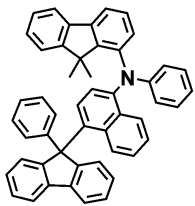
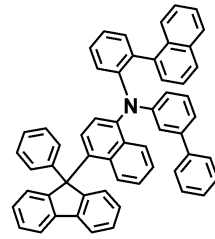
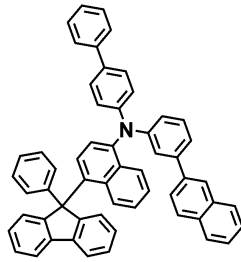
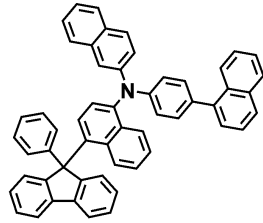
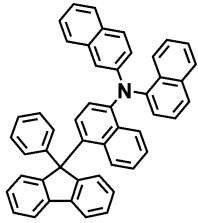
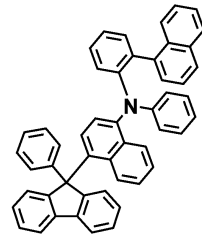
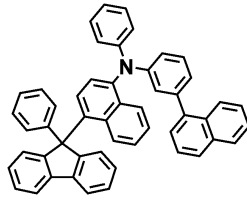
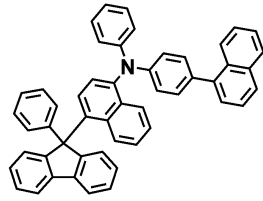
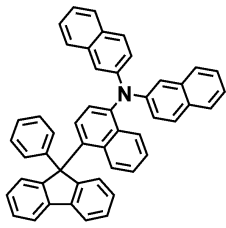
삭제

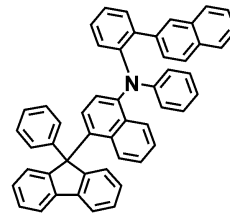
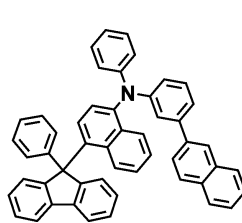
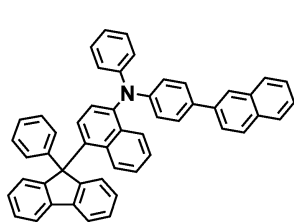
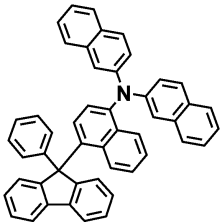
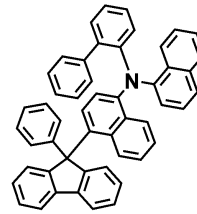
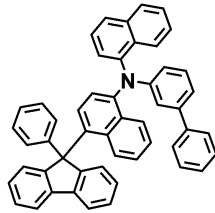
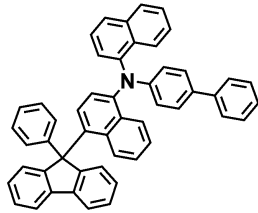
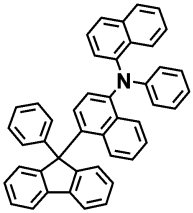
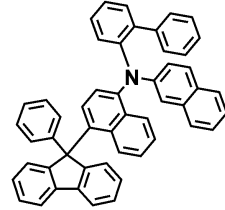
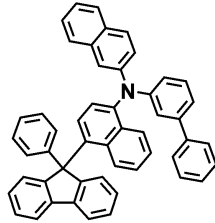
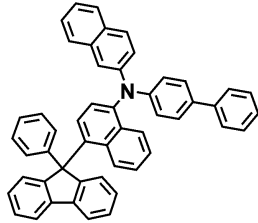
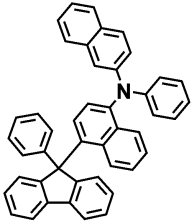
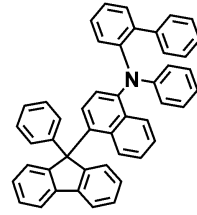
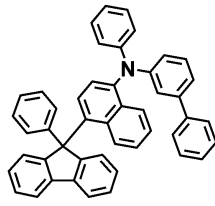
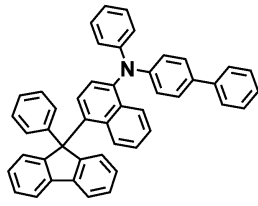
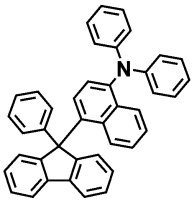
청구항 8

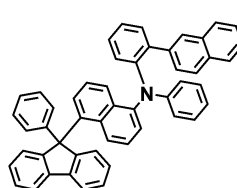
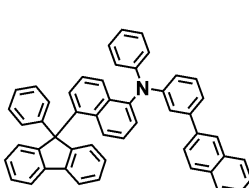
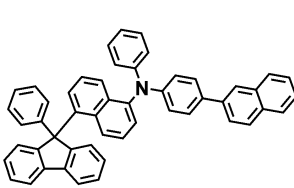
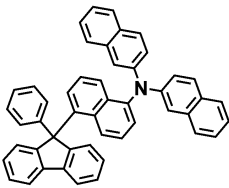
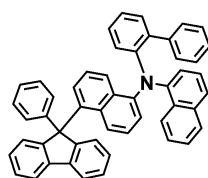
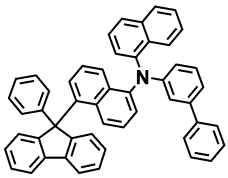
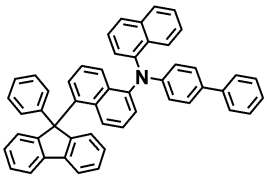
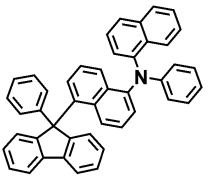
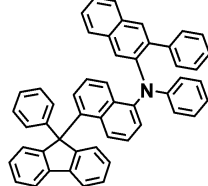
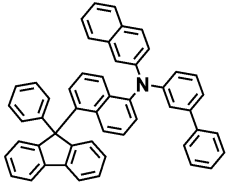
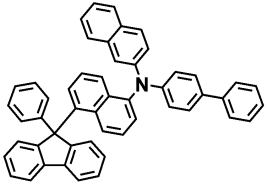
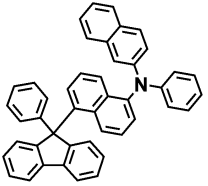
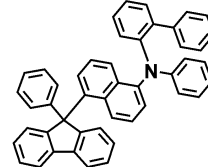
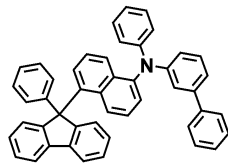
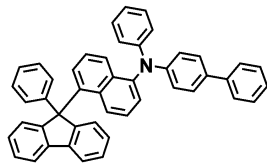
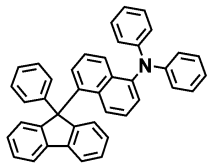
제1항에 있어서,

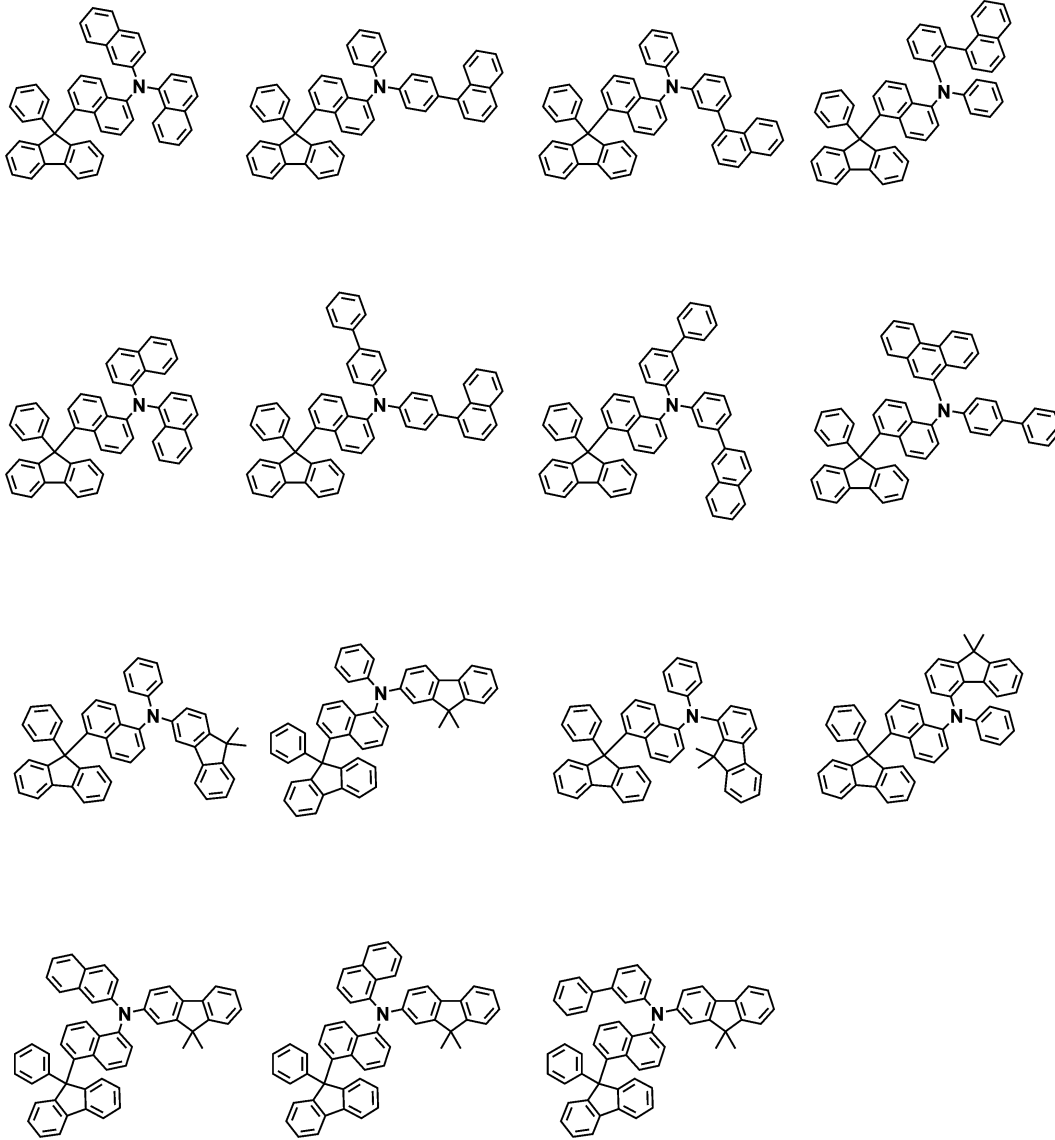
상기 화합물은 하기 화합물로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나인, 화합물:

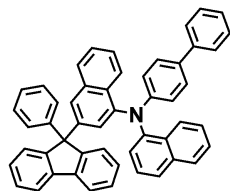
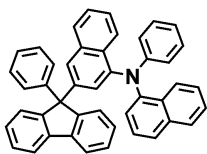
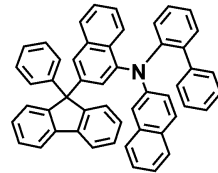
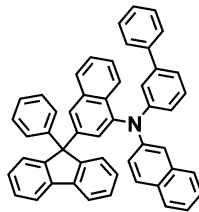
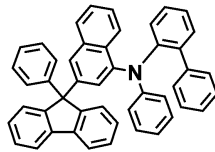
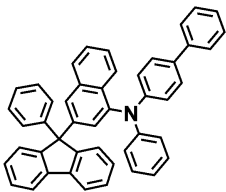
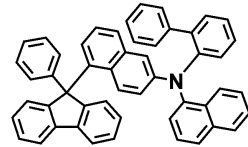
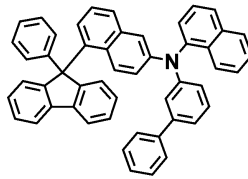
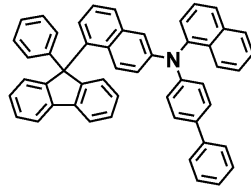
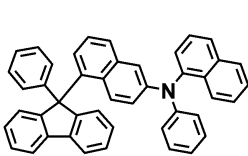
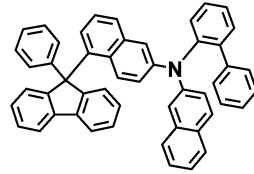
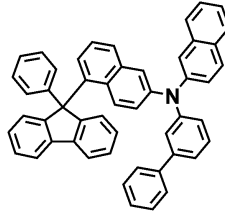
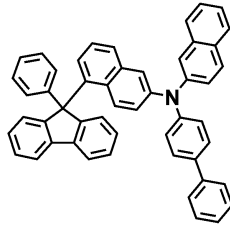
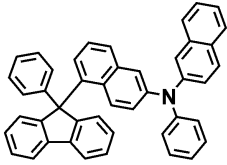
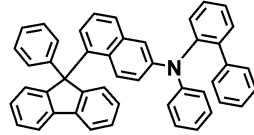
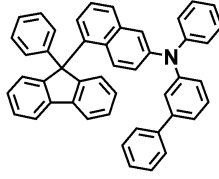
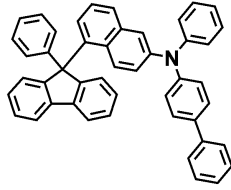
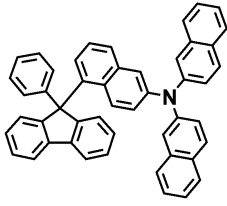


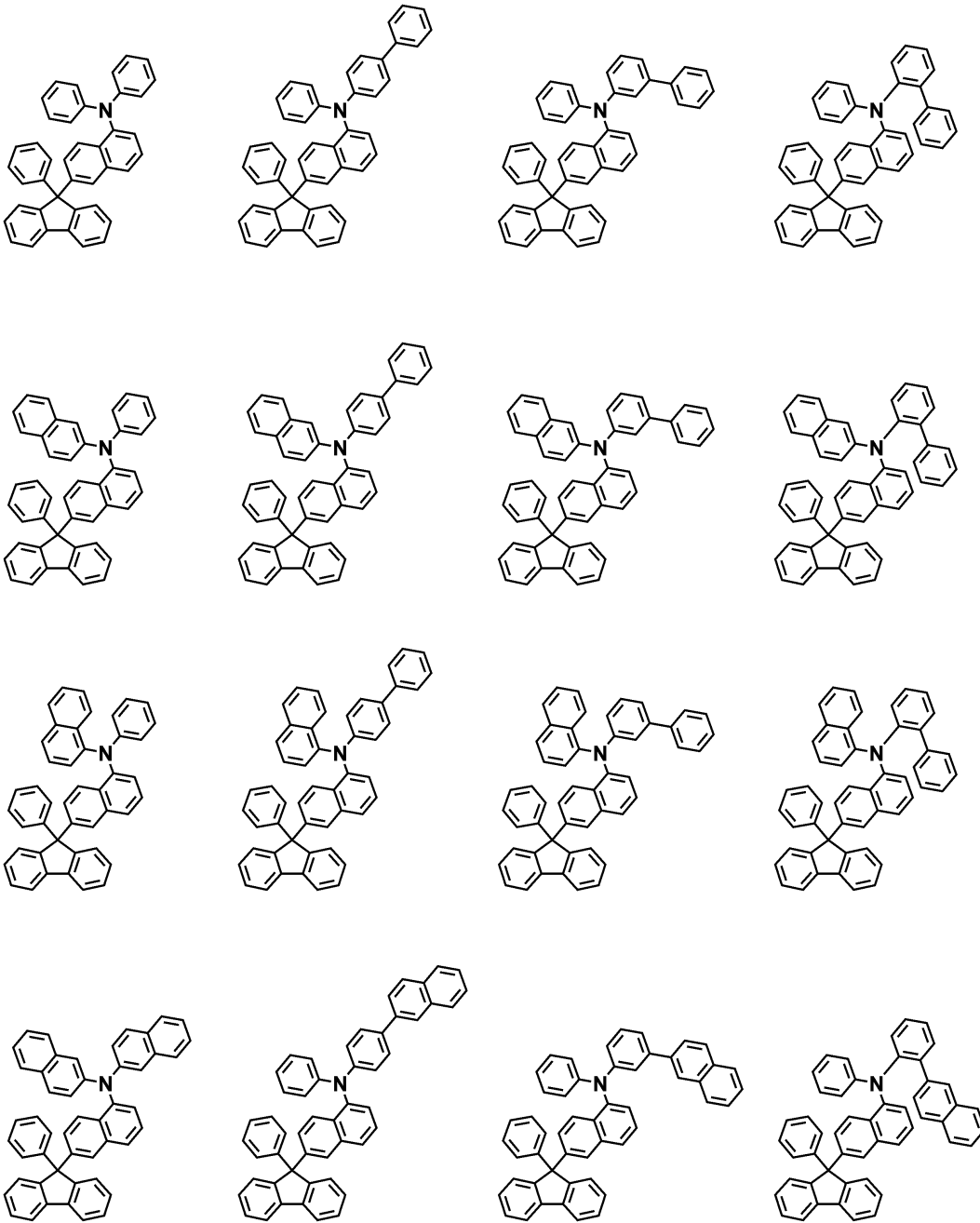


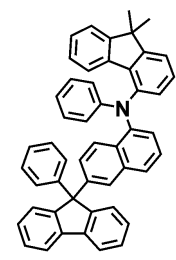
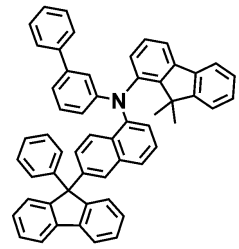
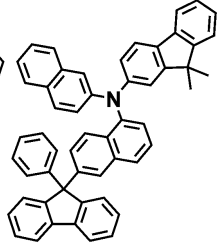
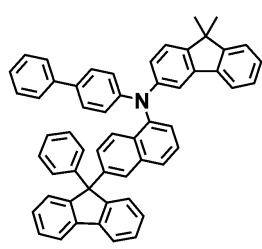
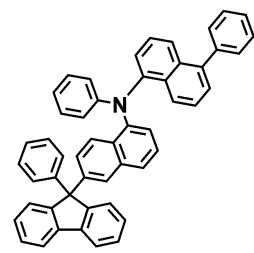
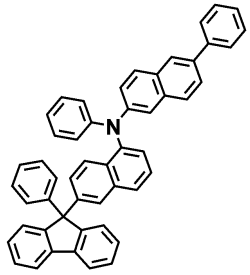
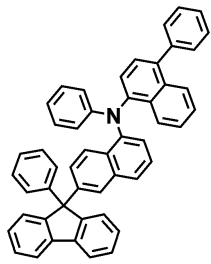
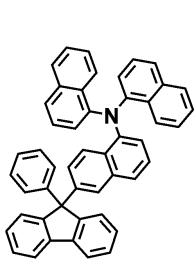
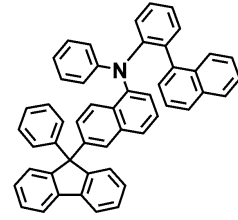
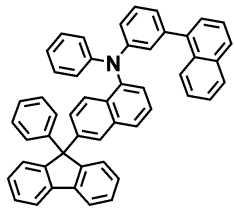
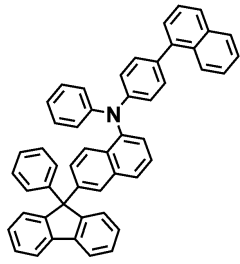
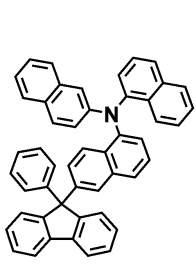


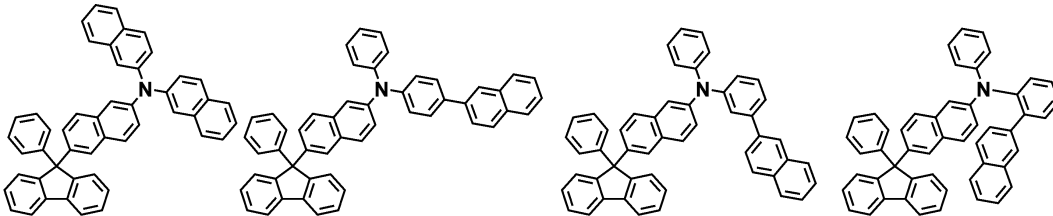
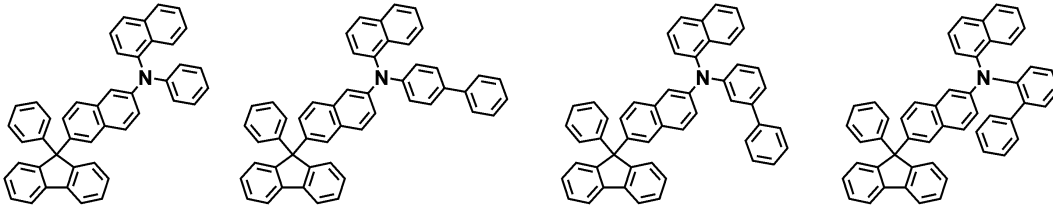
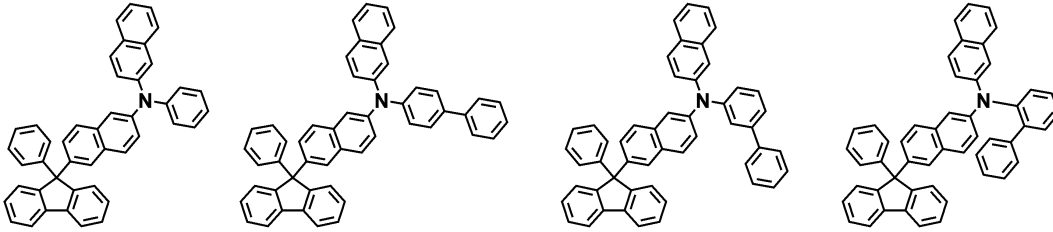
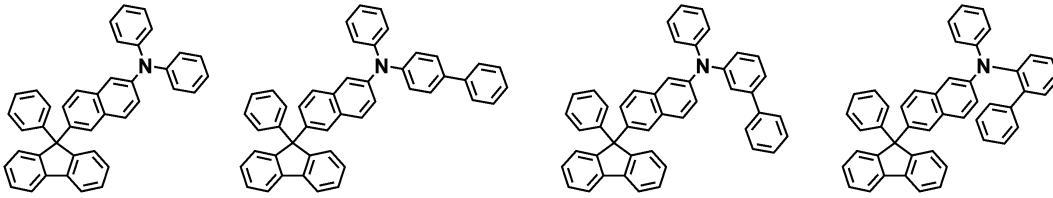


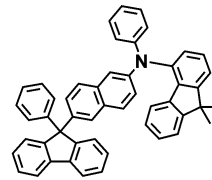
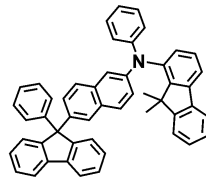
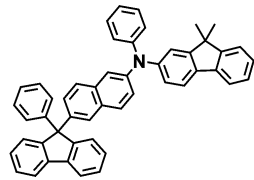
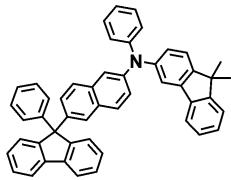
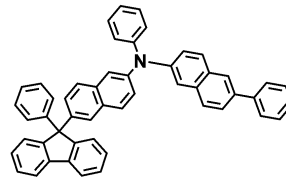
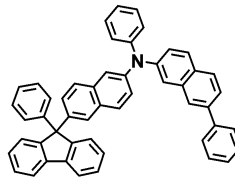
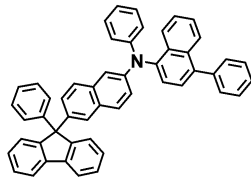
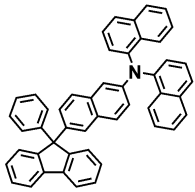
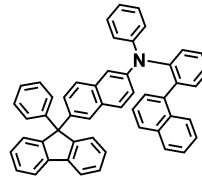
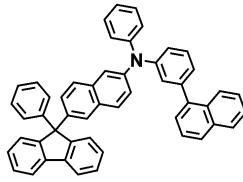
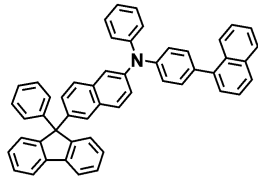
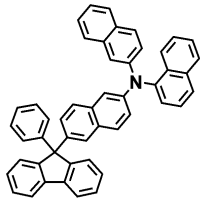


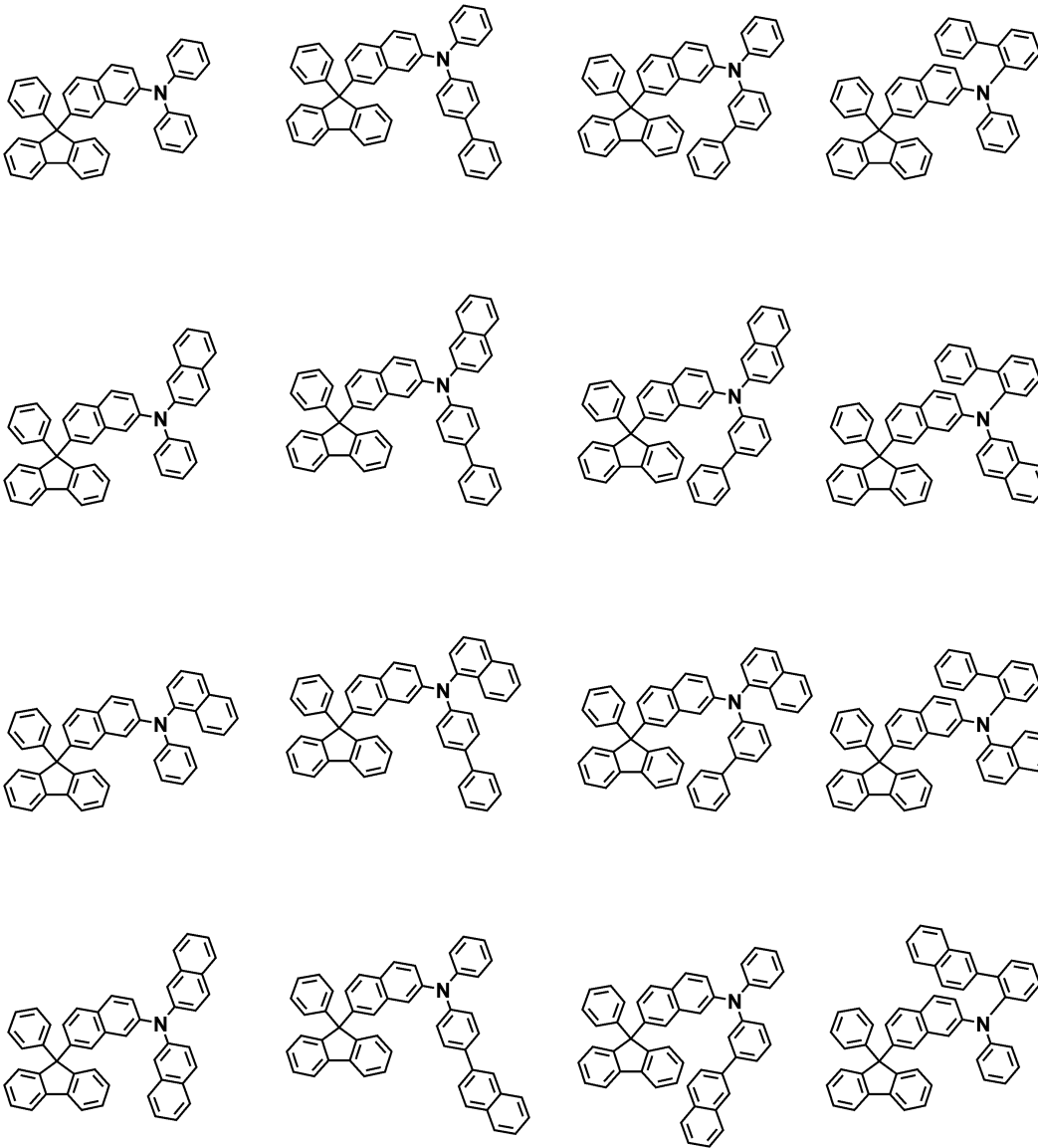


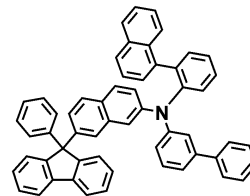
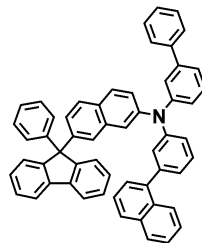
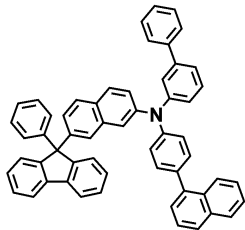
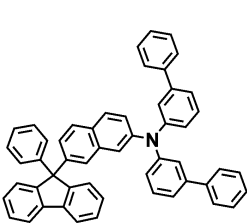
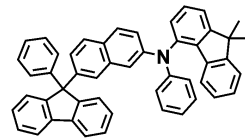
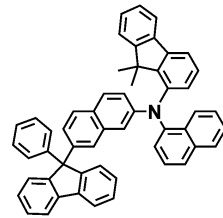
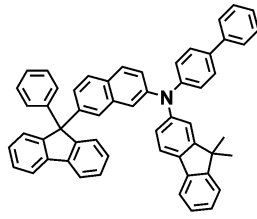
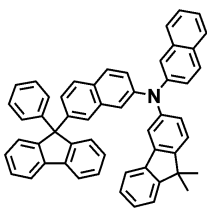
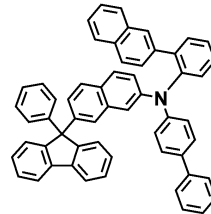
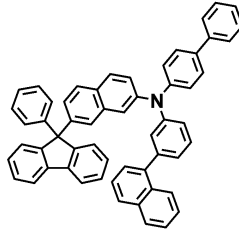
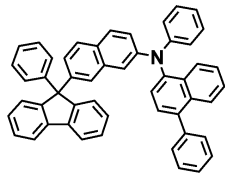
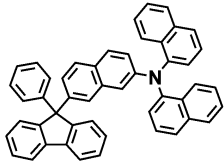
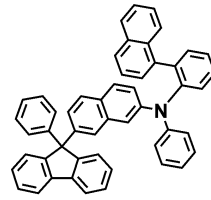
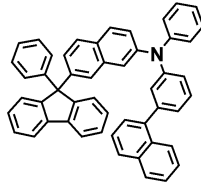
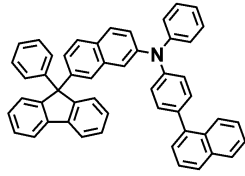
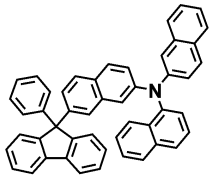


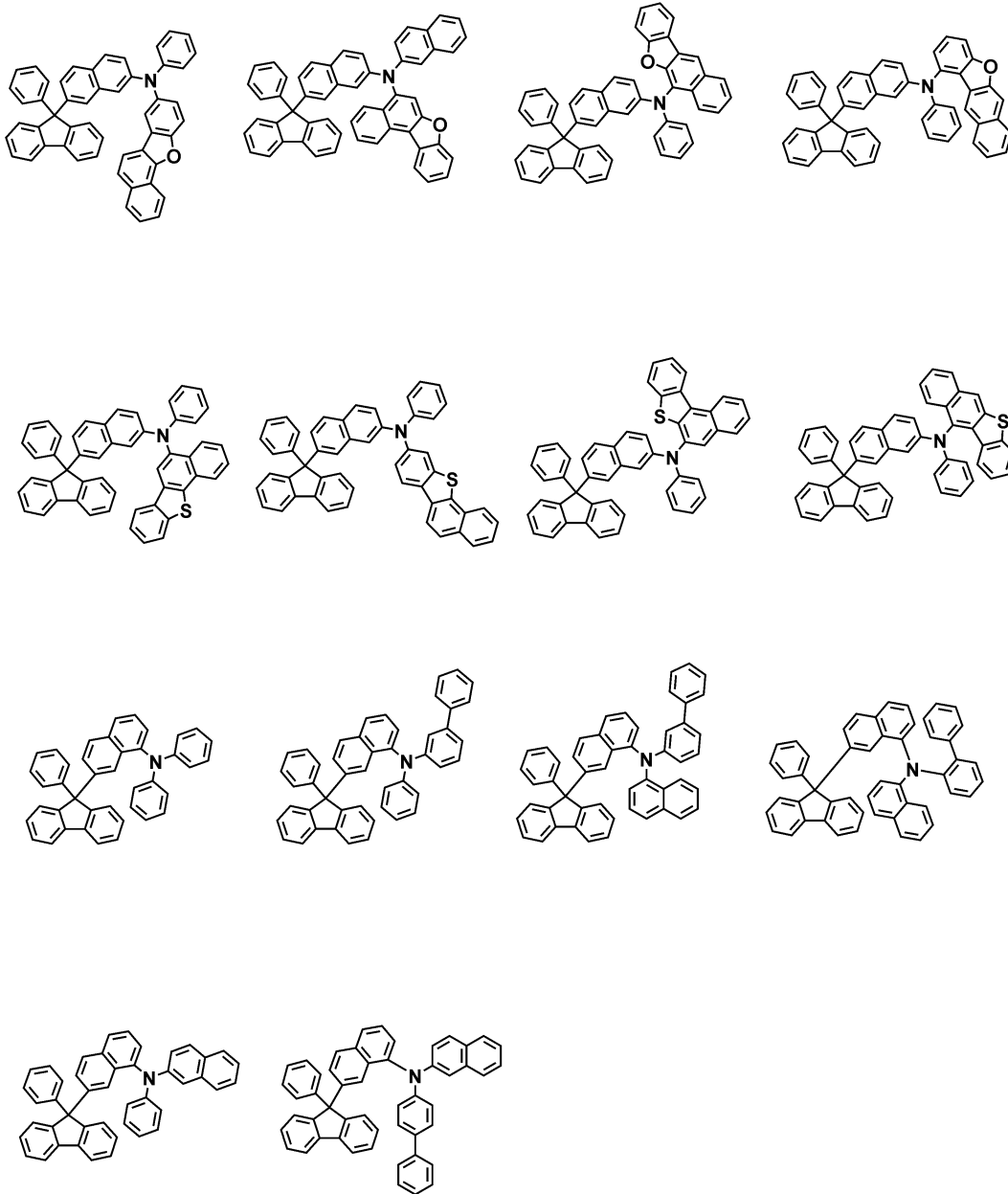












**청구항 9**

제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 제1항 내지 제3항, 제6항 및 제8항 중 어느 하나의 항에 따른 화합물을 포함하는 것인, 유기 발광 소자.

**청구항 10**

제9항에 있어서,  
 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 정공수송층 또는 전자저지층인,  
 유기 발광 소자.

**발명의 설명**

**기술분야**

[0001] 본 발명은 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

**배경기술**

[0003] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 넓은 시야각, 우수한 콘트라스트, 빠른 응답 시간을 가지며, 휘도, 구동 전압 및 응답 속도 특성이 우수하여 많은 연구가 진행되고 있다.

[0005] 유기 발광 소자는 일반적으로 양극과 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 상기 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.

[0007] 상기와 같은 유기 발광 소자에 사용되는 유기물에 대하여 새로운 재료의 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0009] (특허문헌 0001) 한국특허 공개번호 제10-2000-0051826호

**발명의 내용**

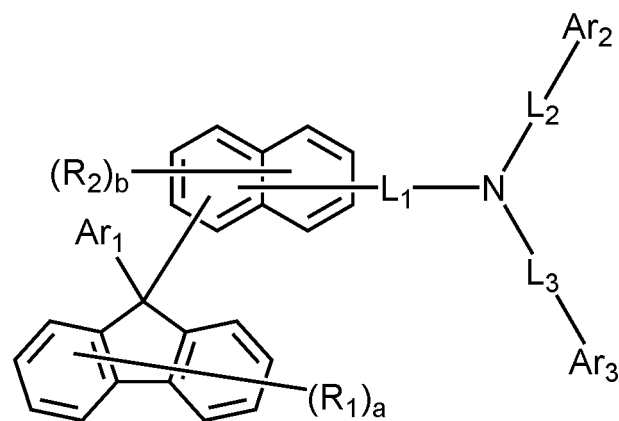
**해결하려는 과제**

[0010] 본 발명은 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

**과제의 해결 수단**

[0012] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:

[0013] [화학식 1]



[0014] [0015] 상기 화학식 1에서,

[0016] L<sub>1</sub> 내지 L<sub>3</sub>는 각각 독립적으로, 단일결합; 치환 또는 비치환된 C<sub>6-60</sub> 아릴렌; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C<sub>2-60</sub> 헤테로아릴렌이고,

[0017] Ar<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 C<sub>6-60</sub> 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는

C<sub>2-60</sub> 헤테로아릴이고,

[0018] Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>6-60</sub> 아릴; 치환 또는 비치환된 벤조나프토피라닐; 치환 또는 비치환된 벤조나프토티오펜; 또는 치환 또는 비치환된 벤조카바졸일이고,

[0019] R<sub>1</sub>은 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 C<sub>1-60</sub> 알킬; 치환 또는 비치환된 C<sub>6-60</sub> 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C<sub>2-60</sub> 헤테로아릴이고,

[0020] R<sub>2</sub>는 수소; 또는 중수소이고,

[0021] a는 0 내지 8의 정수이고,

[0022] b는 0 내지 6의 정수이고,

[0023] a 및 b가 2 이상인 경우, 괄호 안의 치환기는 서로 동일하거나 또는 상이하다.

[0025] 또한, 본 발명은 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자를 제공한다.

**발명의 효과**

[0026] 상술한 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있으며, 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동전압 및/또는 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

[0028] 도 1은 기판(1), 양극(2), 정공수송층(3), 발광층(4), 전자주입 및 수송층(5) 및 음극(6)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

도 2는 기판(1), 양극(2), 정공주입층(7), 정공수송층(3), 전자저지층(8), 발광층(4), 전자주입 및 수송층(5) 및 음극(6)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

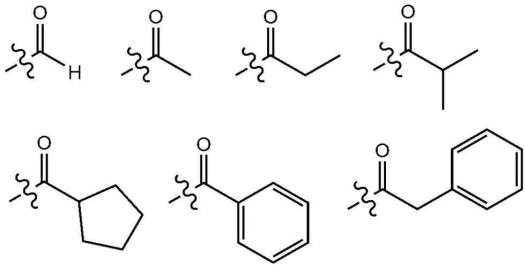
[0029] 이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 보다 상세히 설명한다.

**(용어의 정의)**

[0032] 본 명세서에서,  $\begin{matrix} \circ \\ \parallel \\ \circ \end{matrix}$  및  $\begin{matrix} \vdots \\ | \\ \vdots \end{matrix}$ 는 다른 치환기에 연결되는 결합을 의미한다.

[0034] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 포스핀옥사이드기; 알콕시기; 아릴옥시기; 알킬티옥시기; 아릴티옥시기; 알킬술폰시기; 아릴술폰시기; 실릴기; 붕소기; 알킬기; 사이클로알킬기; 알케닐기; 아릴기; 아르알킬기; 아르알케닐기; 알킬아릴기; 알킬아민기; 아랄킬아민기; 헤테로아릴아민기; 아릴아민기; 아릴포스핀기; 또는 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환 또는 비치환된 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 비페닐기일 수 있다. 즉, 비페닐기기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수도 있다.

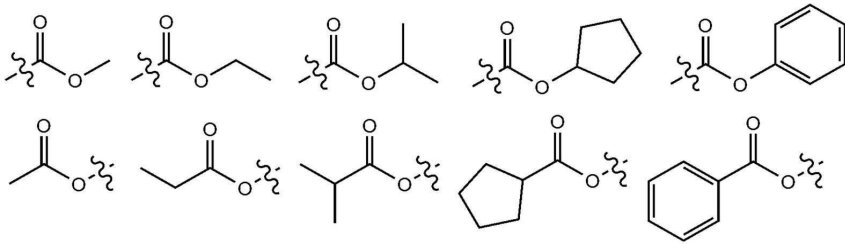
[0036] 본 명세서에서 카보닐기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 치환기가 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0037]

[0039]

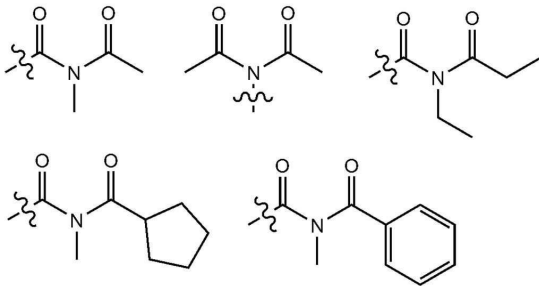
본 명세서에 있어서, 에스테르기는 에스테르기의 산소가 탄소수 1 내지 25의 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄 알킬기 또는 탄소수 6 내지 25의 아릴기로 치환될 수 있다. 구체적으로, 하기 구조식의 치환기가 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0040]

[0042]

본 명세서에 있어서, 이미드기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 25인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 치환기가 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0043]

[0045]

본 명세서에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

[0047]

본 명세서에 있어서, 붕소기는 구체적으로 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

[0049]

본 명세서에 있어서, 할로겐기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.

[0051]

본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 6이다. 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, n-프로필, 이소프로필, 부틸, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, sec-부틸, 1-메틸-부틸, 1-에틸-부틸, 펜틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, 헥실, n-헥실, 1-메틸헥실, 2-메틸헥실, 4-메틸-2-헥실, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 1-메틸헵틸, 사이클로헵틸메틸, 사이클로헵틸에틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헵틸, 2-프로필헵틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸-프로필, 1,1-디메틸-프로필, 이소헵틸, 2-메틸헵틸, 4-메틸헵틸, 5-메틸헵틸 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0053]

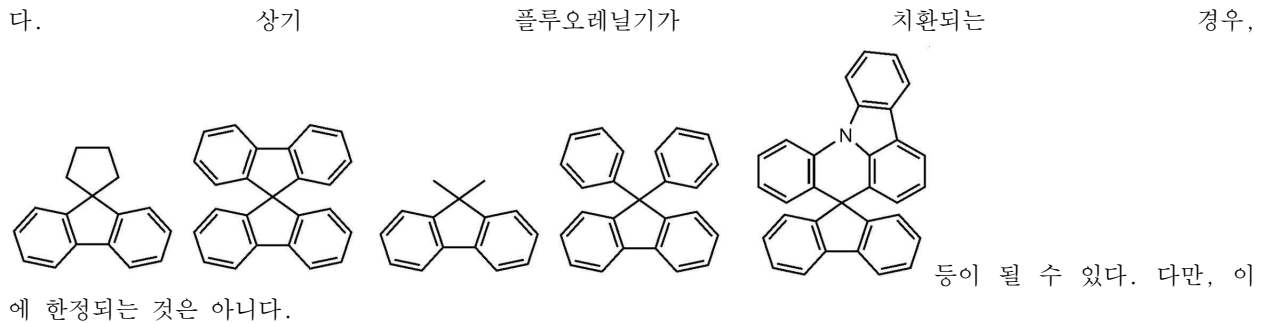
본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 6이다. 구체적인 예로는 비닐, 1-프로페닐, 이소프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-펜테닐, 2-펜테닐, 3-펜테닐, 3-메틸-1-부테닐, 1,3-부타디에닐, 알릴, 1-페닐비닐-1-일, 2-페닐비닐-1-일, 2,2-디페닐비닐-

1-일, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.

[0055] 본 명세서에 있어서, 사이클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 일 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 6이다. 구체적으로 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 3-메틸사이클로펜틸, 2,3-디메틸사이클로펜틸, 사이클로헥실, 3-메틸사이클로헥실, 4-메틸사이클로헥실, 2,3-디메틸사이클로헥실, 3,4,5-트리메틸사이클로헥실, 4-tert-부틸사이클로헥실, 사이클로헵틸, 사이클로옥틸, 아다만틸 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0057] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 60인 것이 바람직하며, 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 20이다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기로는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트릴기, 페난트릴기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0059] 본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있다.



[0061] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴은 이종 원소로 O, N, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 헤테로아릴의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 아크리딘기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난스롤린기 (phenanthroline), 이소옥사졸릴기, 티아디아졸릴기, 페노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0063] 본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 아르알케닐기, 알킬아릴기, 아릴아민기, 아릴실릴기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 알킬아릴기, 알킬아민기 중 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민 중 헤테로아릴은 전술한 헤테로아릴에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 아르알케닐기 중 알케닐기는 전술한 알케닐기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 아릴렌은 2가지인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴렌은 2가지인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 탄화수소 고리는 1가지가 아니고, 2개의 치환기가 결합하여 형성한 것을 제외하고는 전술한 아릴기 또는 사이클로알킬기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 헤테로고리는 1가지가 아니고, 2개의 치환기가 결합하여 형성한 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0065] **(화합물)**

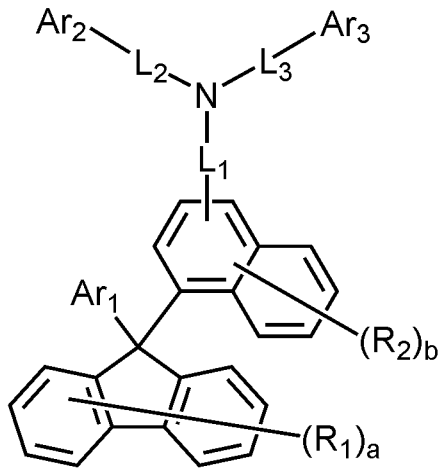
[0066] 한편, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0068] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 플루오렌의 9번 위치와 아미노기가 나프탈렌 링커에 의해 연결된 화합물로, 상기 아미노기의 치환기는 아릴기, 벤조나프토피라닐기, 벤조나프토티오펜기 및 벤조카바졸일기로 구성되는 군에서 선택되는 것에 그 특징이 있다. 이러한 화학식 1로 표시되는 화합물을 채용한 유기 발광 소자는, 다른 치환기를 갖는 아미노기를 포함하는 화합물 및 플루오렌의 9번 위치와 아미노기가 페닐렌 링커에 의해 연결된 화합물을 채용한 유기 발광 소자에 비하여, 고효율, 저 구동 전압 및 장수명 등의 특성을 나타낼 수

있다.

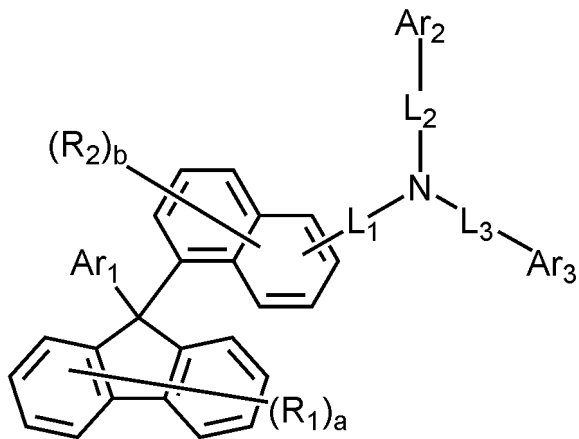
[0070] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 나프탈렌 링커의 연결 위치에 따라 하기 화학식 1-1 내지 1-4 중 어느 하나로 표시될 수 있다:

[0071] [화학식 1-1]



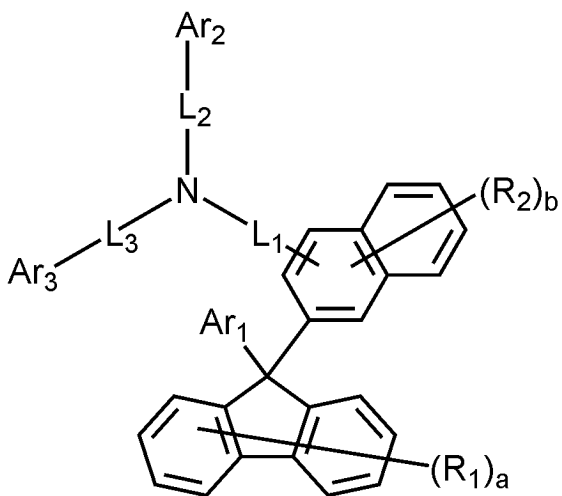
[0072]

[0073] [화학식 1-2]



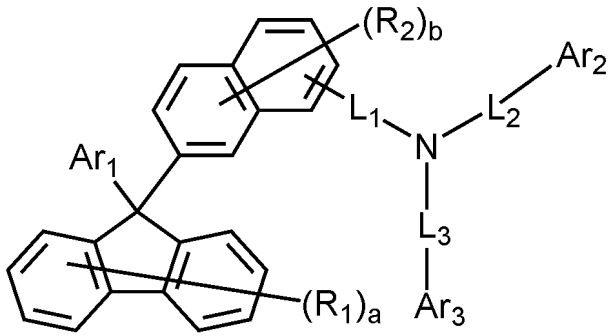
[0074]

[0075] [화학식 1-3]



[0076]

[0077] [화학식 1-4]



[0078]

[0079]

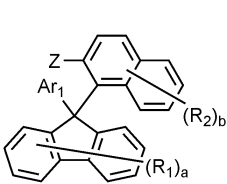
상기 화학식 1-1 내지 1-4에서,

[0080]

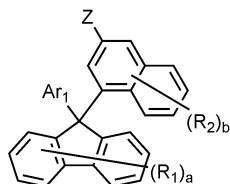
L<sub>1</sub> 내지 L<sub>3</sub>, Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

[0082]

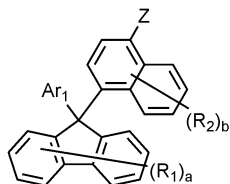
보다 구체적으로는, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 1-1-1 내지 1-1-3, 1-2-1 내지 1-2-4, 1-3-1 내지 1-3-4 및 1-4-1 내지 1-4-4 중 어느 하나로 표시될 수 있다:



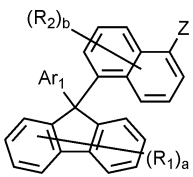
1-1-1



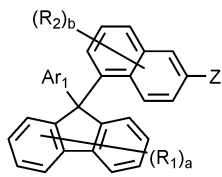
1-1-2



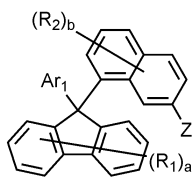
1-1-3



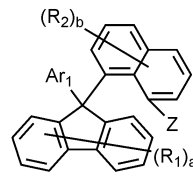
1-2-1



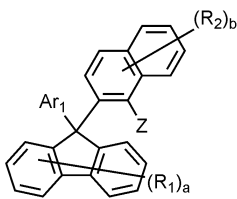
1-2-2



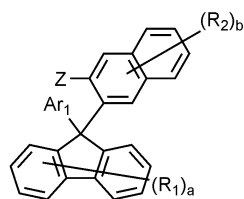
1-2-3



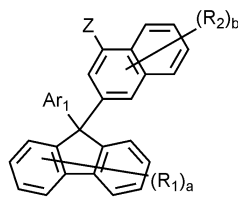
1-2-4



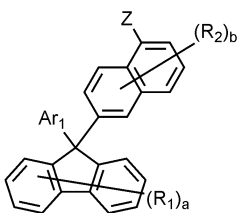
1-3-1



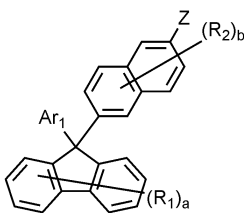
1-3-2



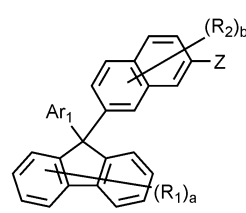
1-3-3



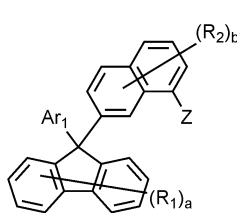
1-4-1



1-4-2



1-4-3

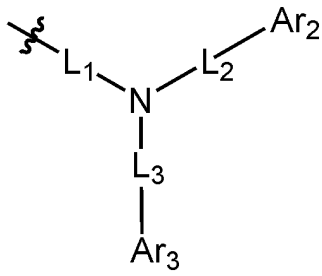


1-4-4

[0084]

[0085]

상기 화학식 1-1-1 내지 1-1-3, 1-2-1 내지 1-2-4, 1-3-1 내지 1-3-4 및 1-4-1 내지 1-4-4에서,



[0086] Z는 이고,

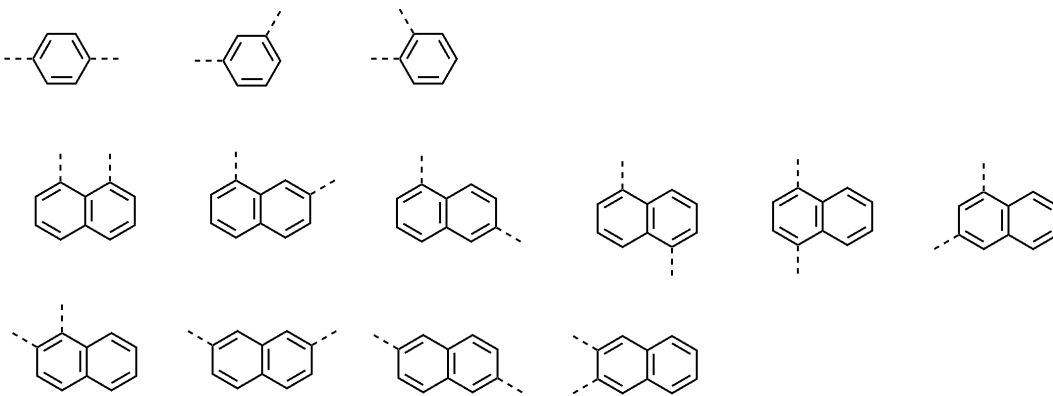
[0087] L<sub>1</sub> 내지 L<sub>3</sub>, Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

[0089] 또한, 상기 화학식 1에서, L<sub>1</sub> 내지 L<sub>3</sub>는 각각 독립적으로, 단일결합; 또는 비치환되거나, 또는 중수소, C<sub>1-10</sub> 알킬 및 C<sub>6-20</sub> 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환된 C<sub>6-20</sub> 아릴렌일 수 있다.

[0091] 구체적으로, L<sub>1</sub> 내지 L<sub>3</sub>는 각각 독립적으로, 단일결합; 비치환되거나, 또는 중수소로 치환된 페닐렌; 또는 비치환되거나 또는 중수소로 치환된 나프틸렌일 수 있다.

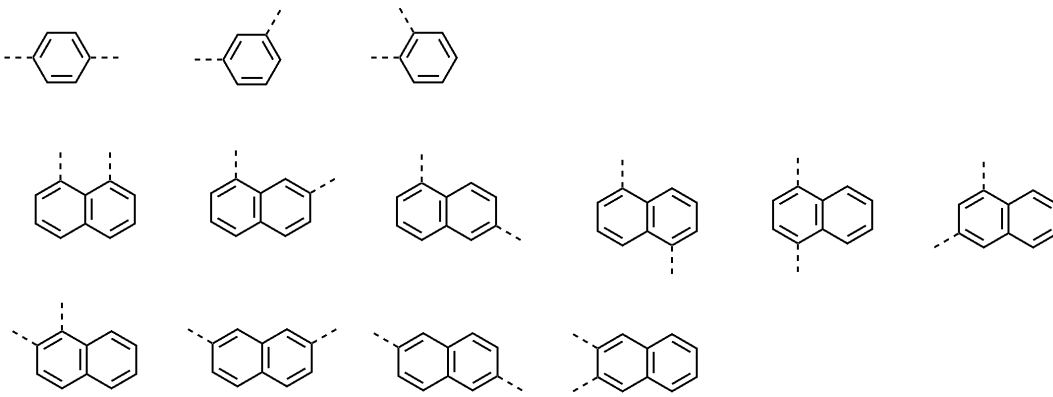
[0093] 보다 구체적으로는, L<sub>1</sub>은 단일결합이고,

[0094] L<sub>2</sub> 및 L<sub>3</sub>는 각각 독립적으로, 단일결합, 또는 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나일 수 있다:



[0095] 또는, L<sub>1</sub> 내지 L<sub>3</sub>는 모두 단일결합이거나; 또는

[0098] L<sub>1</sub>은 단일결합이고, L<sub>2</sub> 및 L<sub>3</sub> 중 하나는 단일결합이고, 나머지 하나는 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나일 수 있다:



[0099] 또한, 상기 화학식 1에서, Ar<sub>1</sub>은 비치환되거나, 또는 중수소, 할로젠, C<sub>1-10</sub> 알킬 및 C<sub>6-20</sub> 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되는 C<sub>6-20</sub> 아릴일 수 있다.

[0103] 보다 구체적으로는, Ar<sub>1</sub>은 비치환되거나, 또는 중수소로 치환된 페닐일 수 있다.

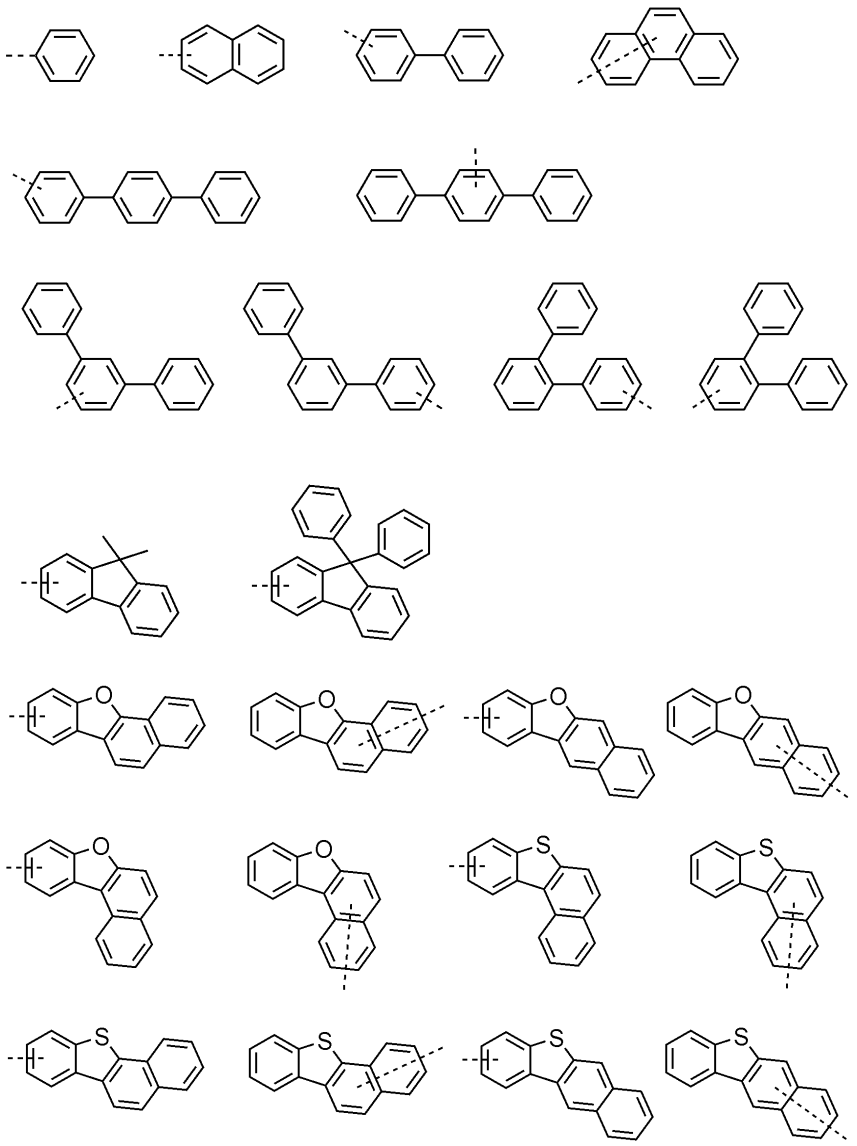
[0105] 또한, 상기 화학식 1에서, Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>는 각각 독립적으로, C<sub>6-30</sub> 아릴, 벤조나프토피라닐, 벤조나프토티오펜, 또는 벤조카바졸일이고,

[0106] 여기서, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 비치환되거나, 또는 중수소, C<sub>1-10</sub> 알킬 및 C<sub>6-20</sub> 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

[0108] 구체적으로, Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>는 각각 독립적으로, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 트리페닐레닐, 플루오레닐, 벤조나프토피라닐, 벤조나프토티오펜, 또는 벤조카바졸일이고,

[0109] 여기서, Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>는 비치환되거나, 또는 중수소, C<sub>1-10</sub> 알킬 및 C<sub>6-20</sub> 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기, 예를 들어, 중수소, 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필, 부틸, tert-부틸 및 페닐로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

[0111] 보다 구체적으로는, Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>는 각각 독립적으로, 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나일 수 있다:



[0112]

[0113]

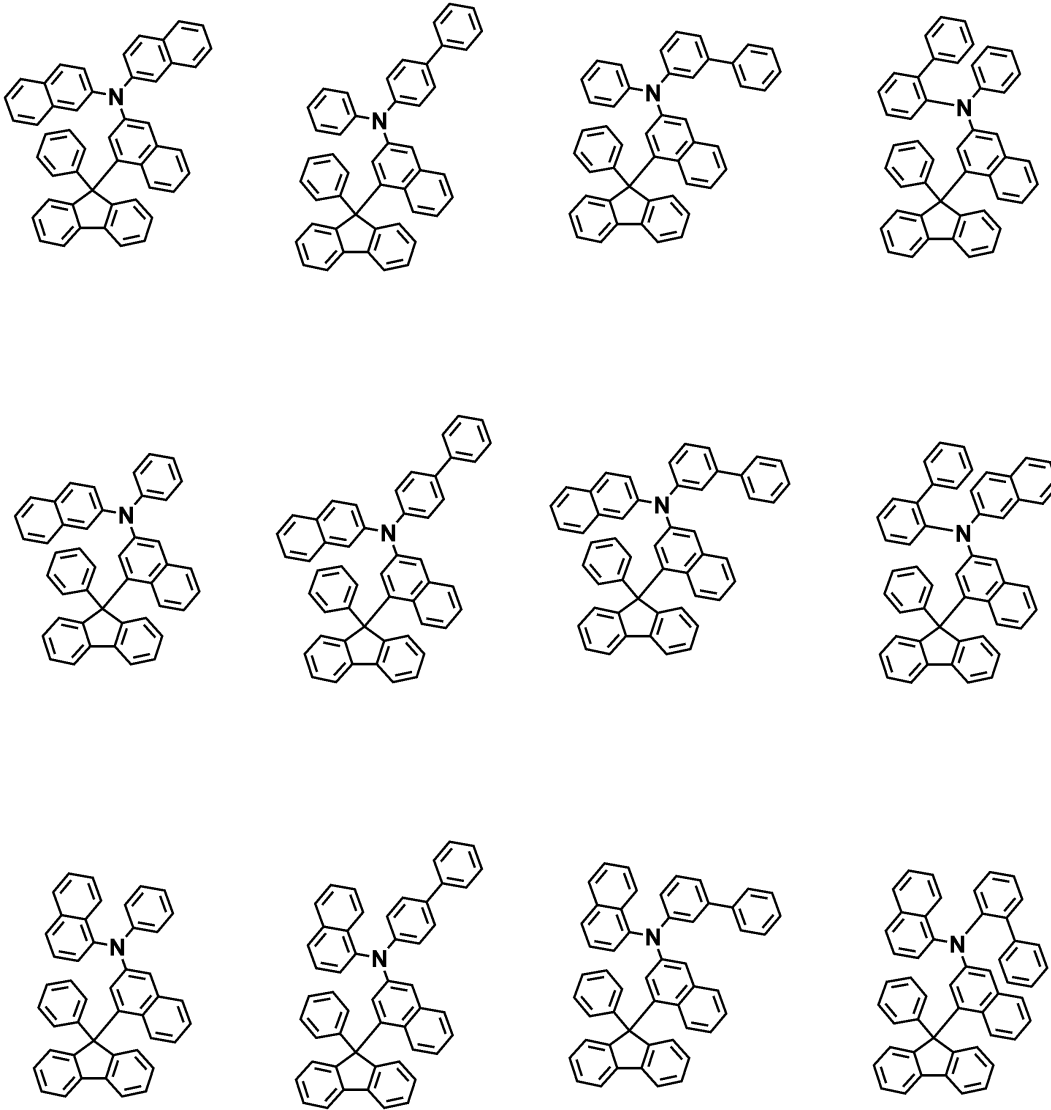
[0115] 이때, Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>는 서로 동일할 수 있다. 다르게는, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 상이할 수 있다.

[0117] 또한, Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub> 모두가 페닐은 아닐 수 있다.

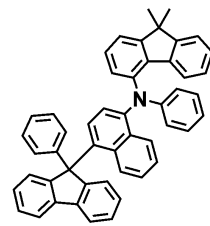
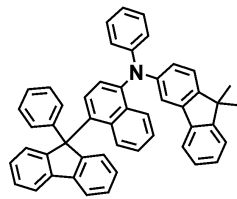
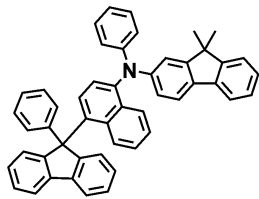
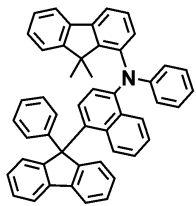
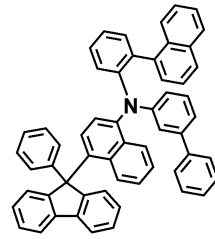
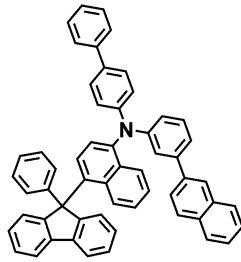
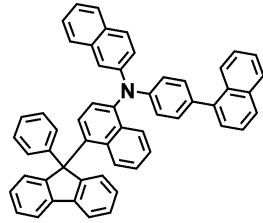
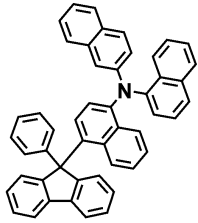
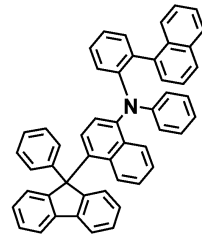
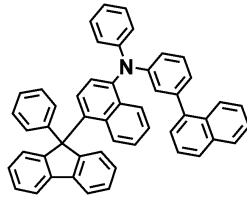
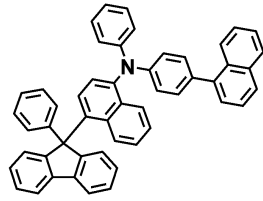
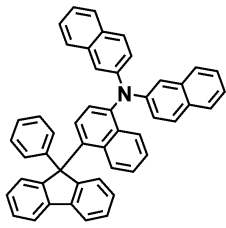
[0119] 또한, R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 각각 독립적으로, 수소 또는 중수소일 수 있고,

[0120] 이때, a는 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 또는 8이고, b는 0, 1, 2, 3, 4, 5, 또는 6이다.

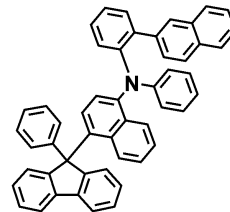
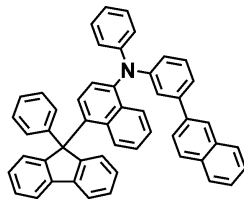
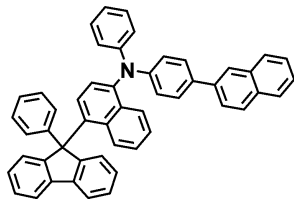
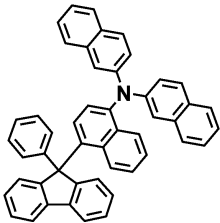
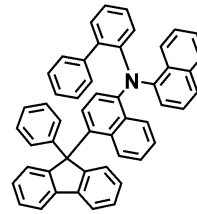
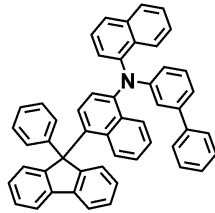
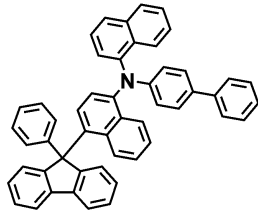
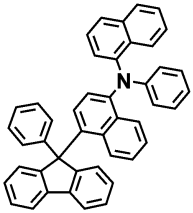
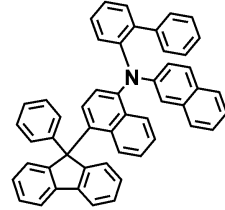
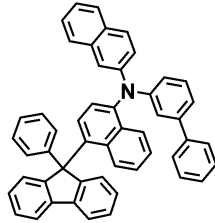
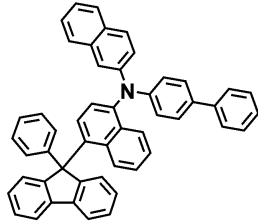
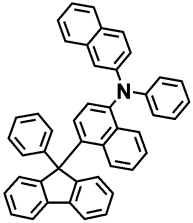
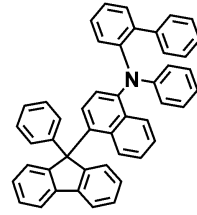
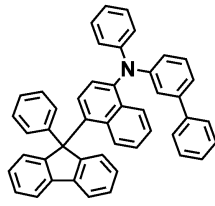
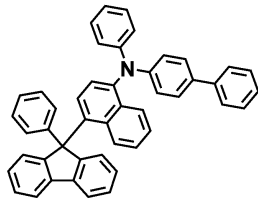
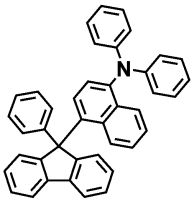
[0122] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 대표적인 예는 하기와 같다:



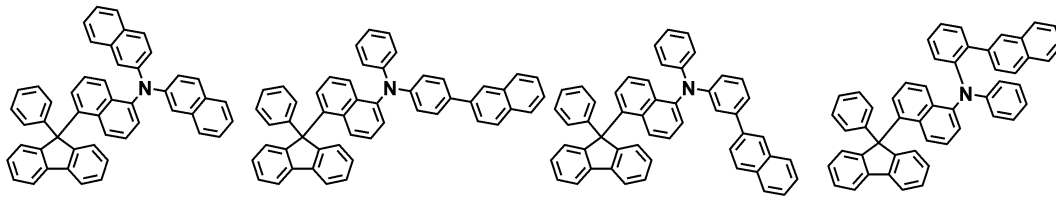
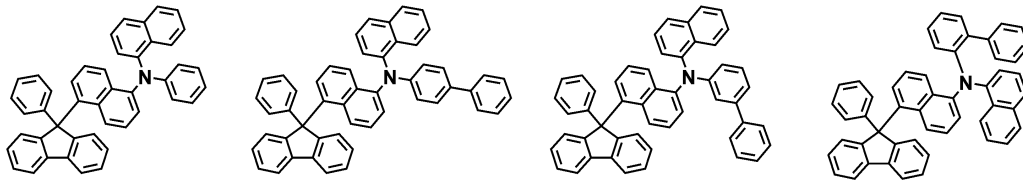
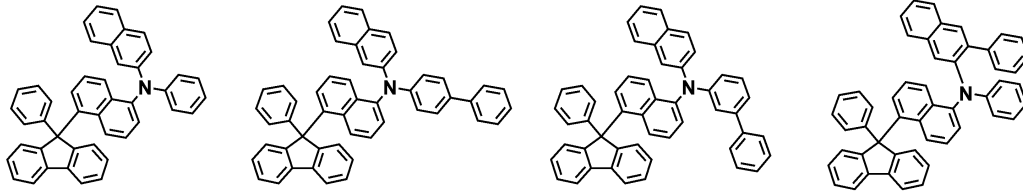
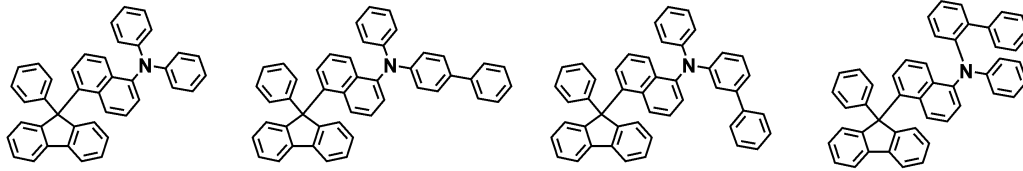
[0124]



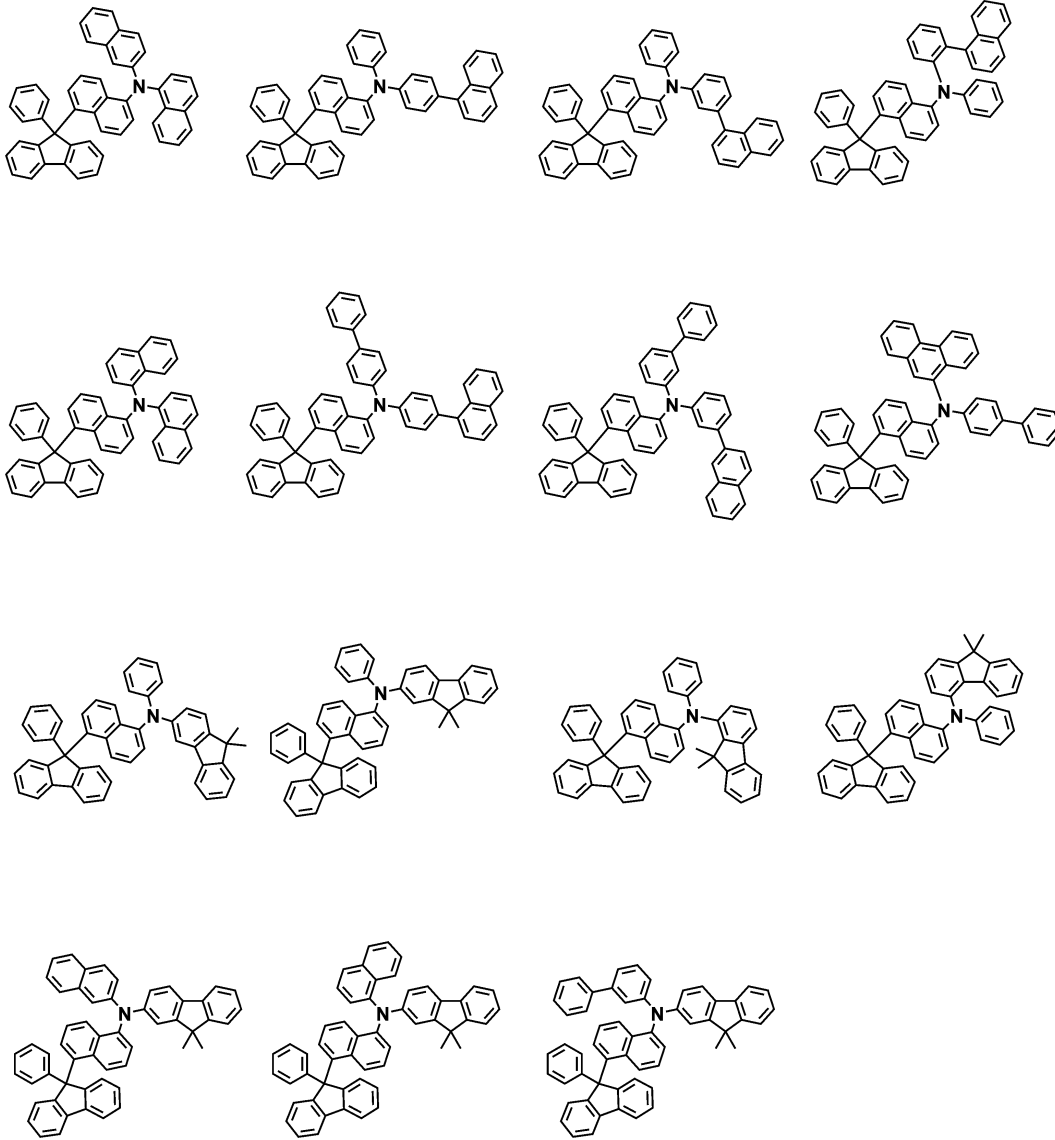
[0125]



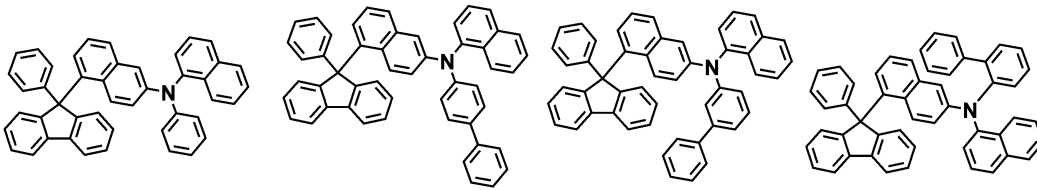
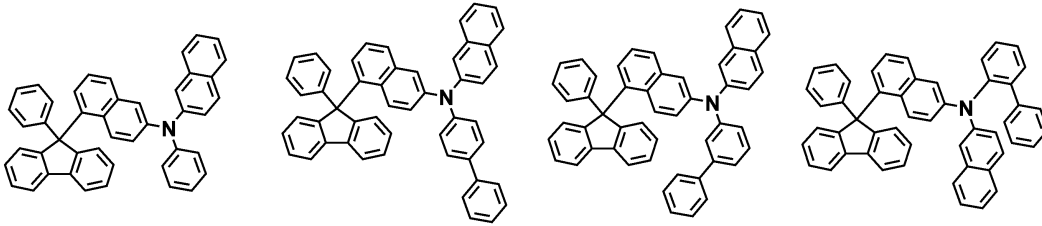
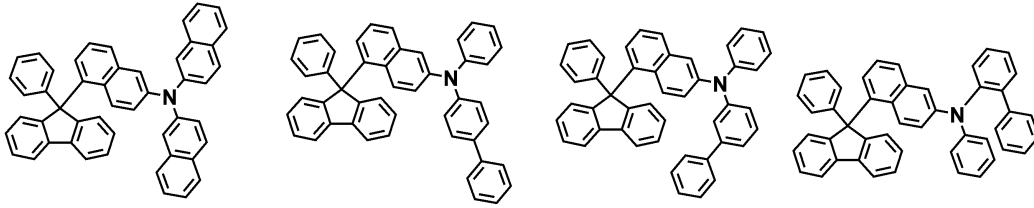
[0126]



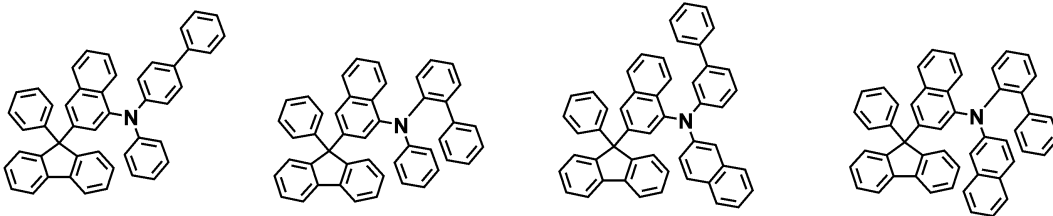
[0127]



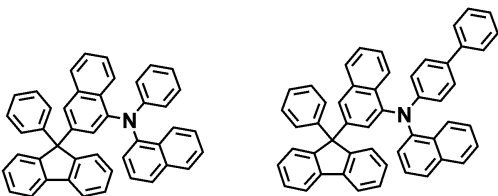
[0128]

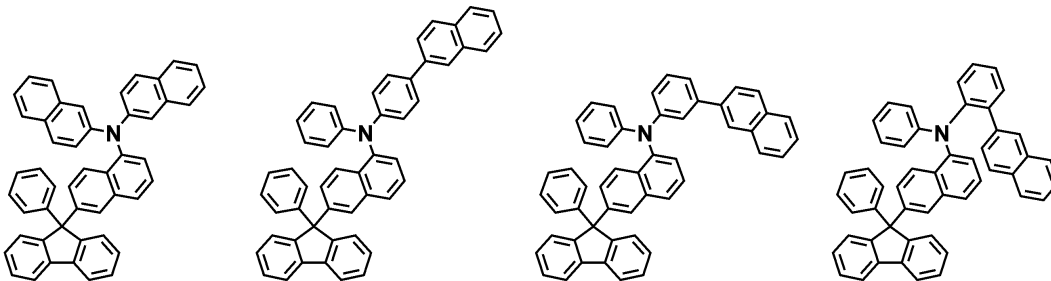
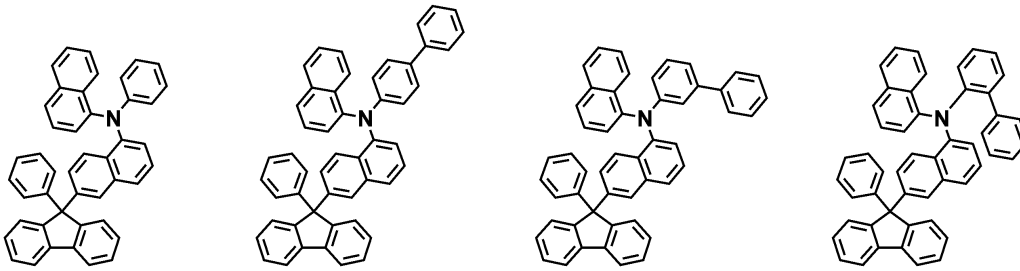
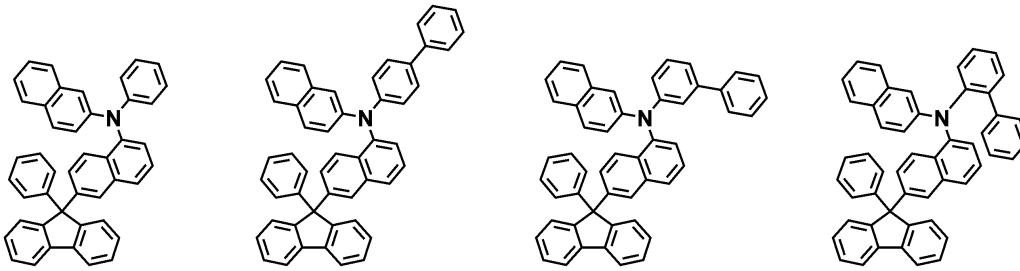
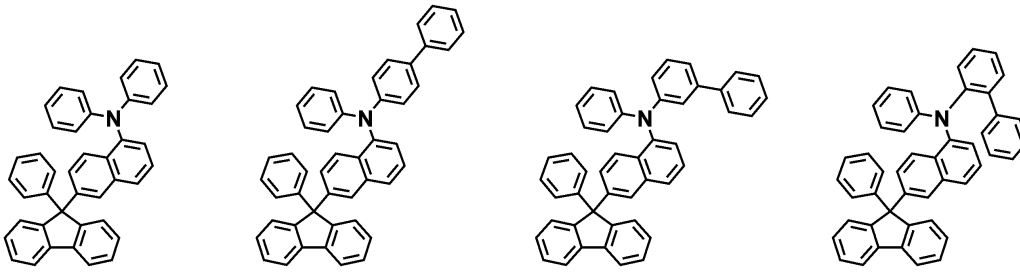


[0129]

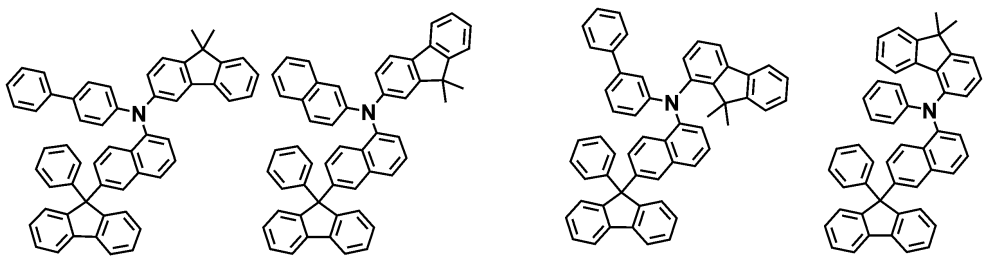
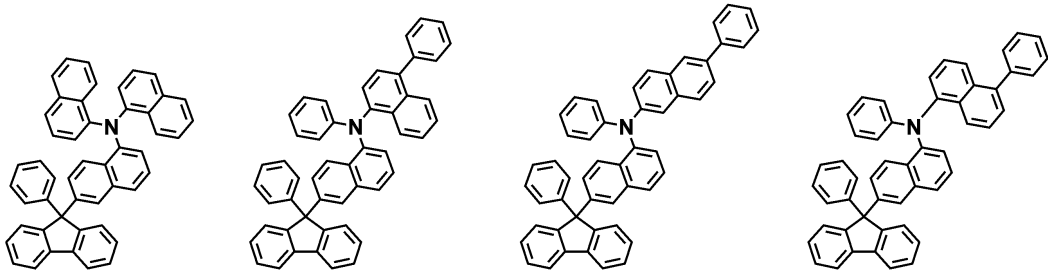
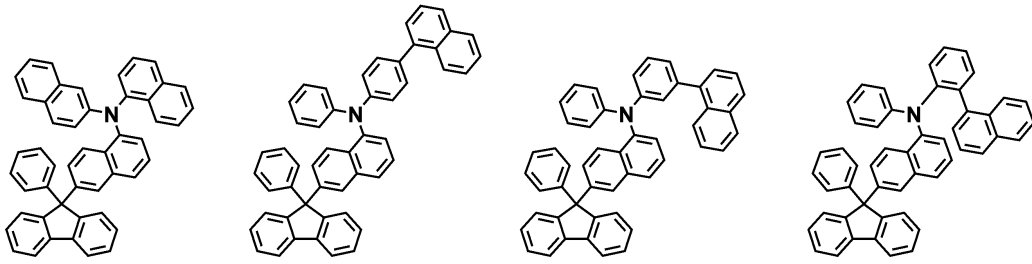


[0130]

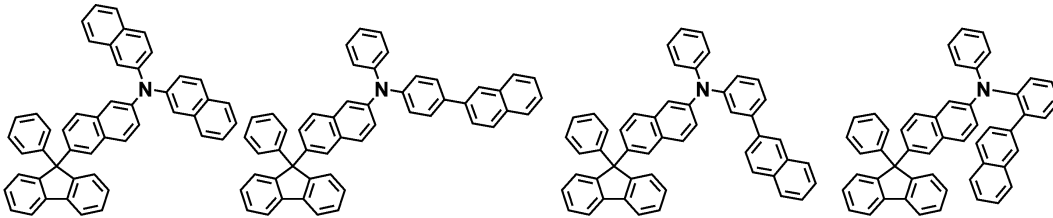
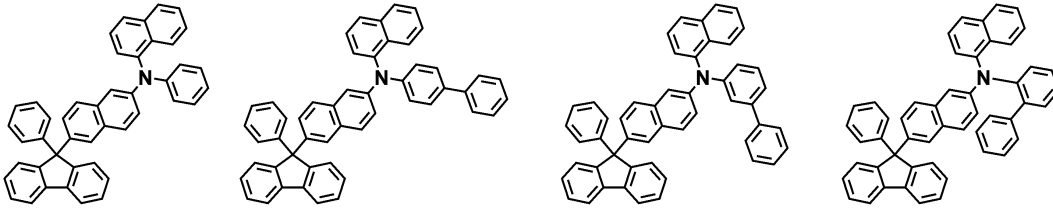
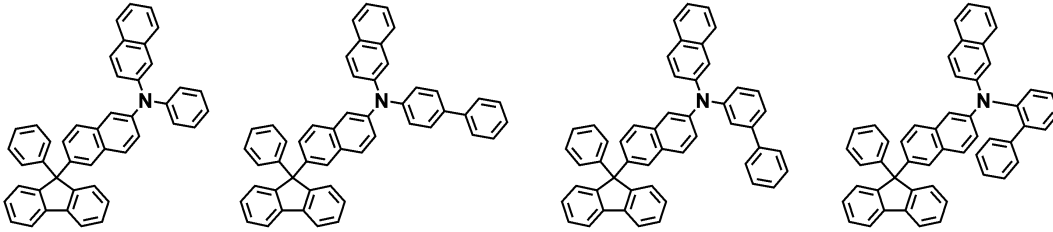
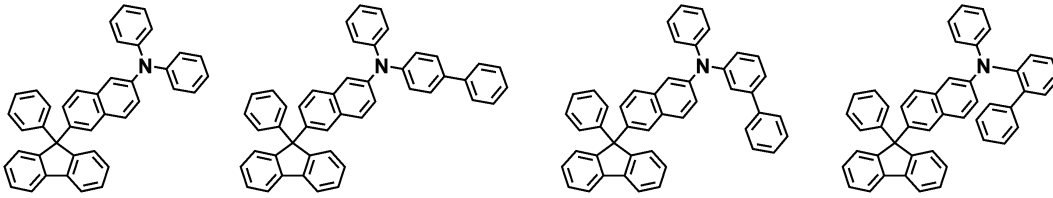




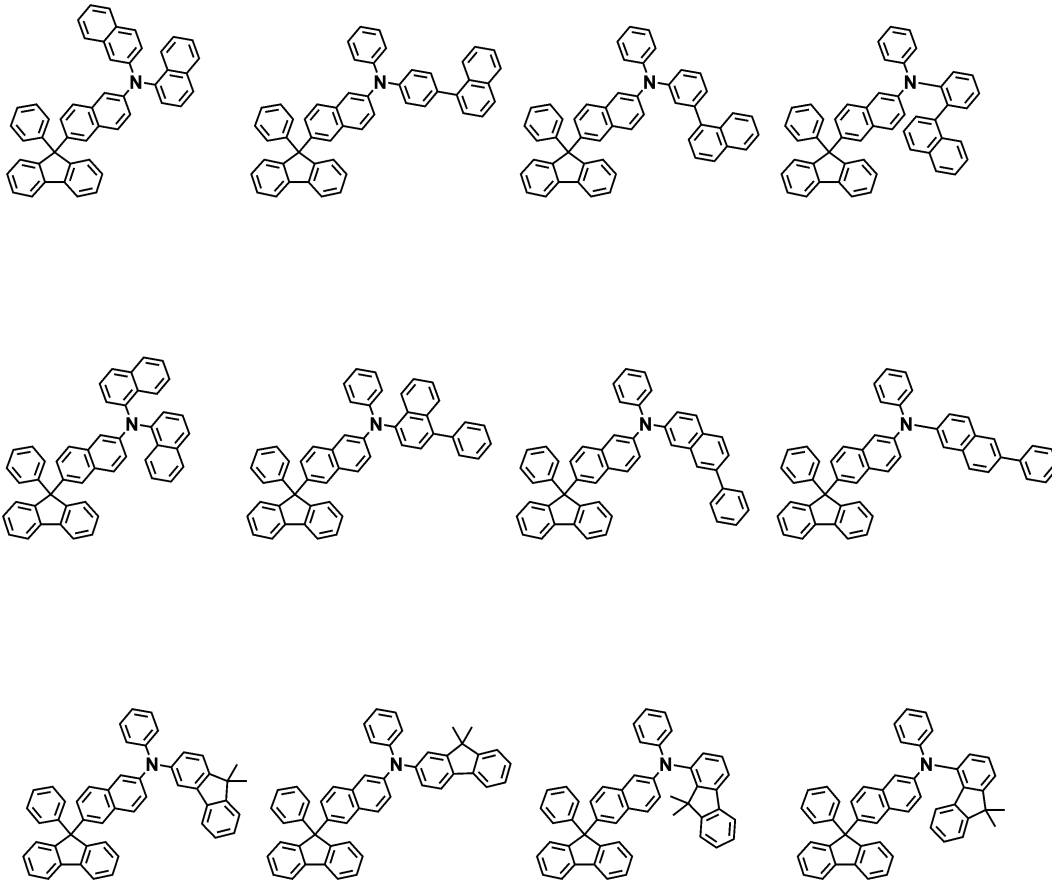
[0131]



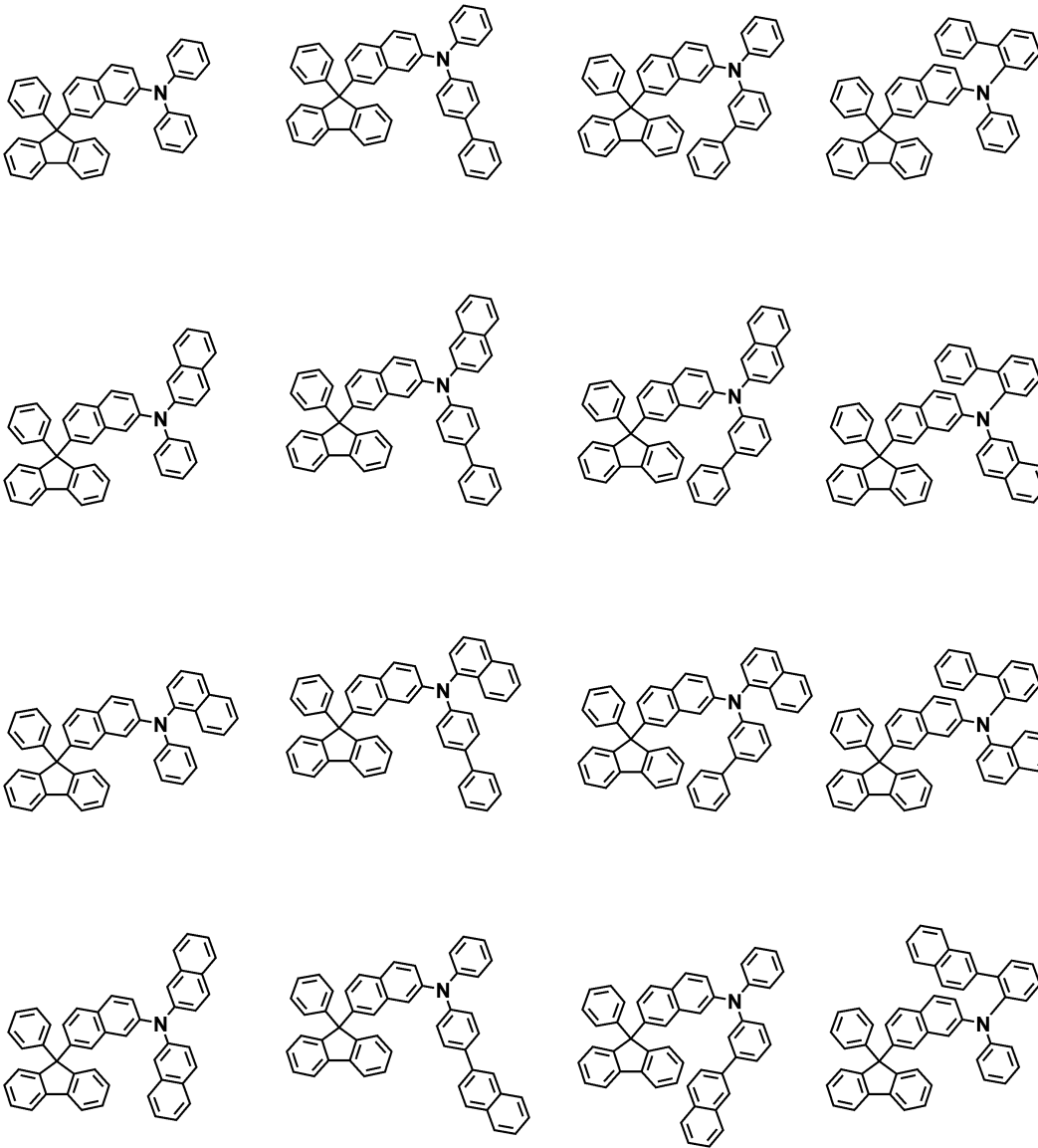
[0132]



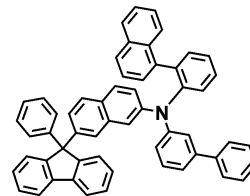
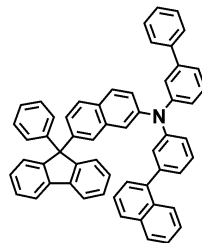
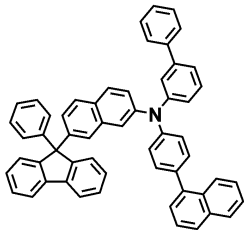
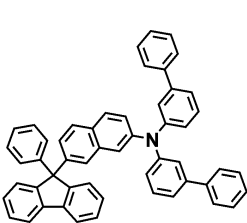
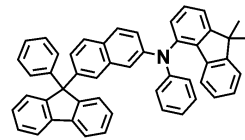
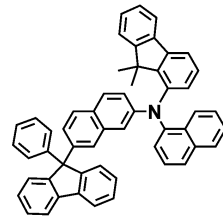
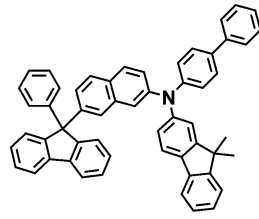
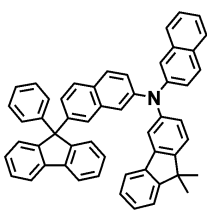
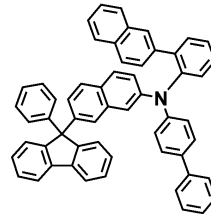
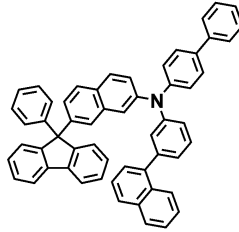
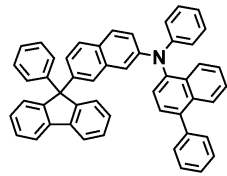
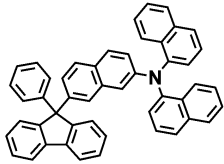
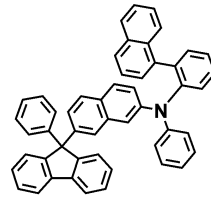
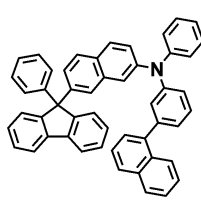
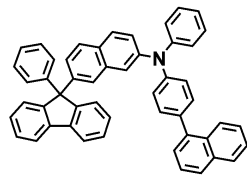
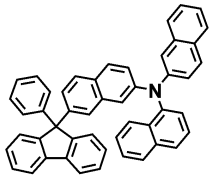
[0133]



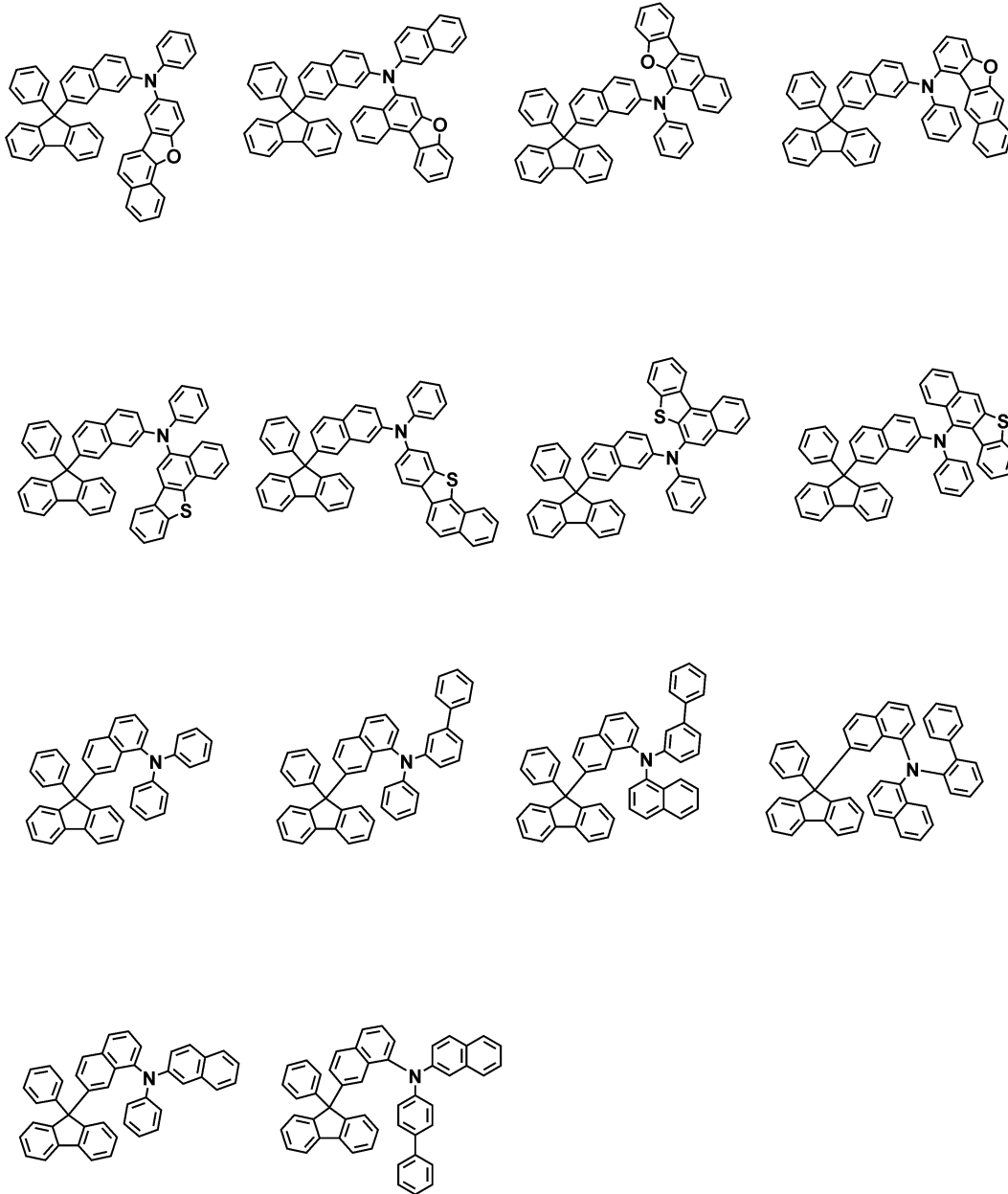
[0134]



[0135]



[0136]

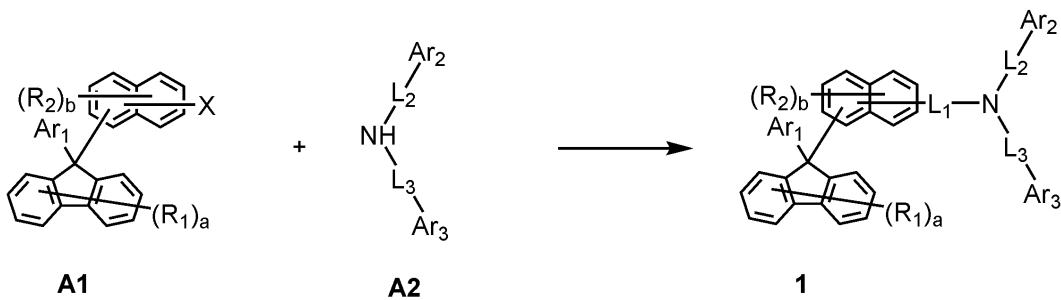


[0137]

[0138]

[0140] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 일례로 L<sub>1</sub>이 단일 결합인 경우 하기 반응식 1과 같은 제조 방법으로 제조할 수 있다.

[0141] [반응식 1]



[0142]

[0143] 상기 반응식 1에서, X는 할로젠이고, 바람직하게는 브로모, 또는 클로로이며, 다른 치환기에 대한 정의는 앞서 설명한 바와 같다.

- [0144] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 출발물질 A1 및 A2의 아민 치환 반응을 통해 제조될 수 있다. 이러한 아민 치환 반응은 팔라듐 촉매와 염기의 존재 하에 수행하는 것이 바람직하며, 상기 아민 치환 반응을 위한 반응기는 적절히 변경될 수 있다. 이러한 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 제조 방법은 후술할 제조에서 보다 구체화될 수 있다.
- [0146] (유기 발광 소자)
- [0147] 한편, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다. 일례로, 본 발명은 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자를 제공한다.
- [0149] 본 발명의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기층을 포함할 수 있다.
- [0151] 일 구현예에서, 상기 유기물층은 정공수송층, 발광층 및 전자주입 및 수송층을 포함할 수 있고, 이때 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 정공수송층일 수 있다.
- [0153] 다른 구현예에서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층 및 전자주입 및 수송층을 포함할 수 있고, 이때 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 정공수송층 또는 전자저지층일 수 있다.
- [0155] 또 다른 구현예에서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층 및 전자주입 및 수송층을 포함할 수 있고, 이때 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 정공수송층 또는 전자저지층일 수 있다.
- [0157] 본 발명의 유기 발광 소자의 유기물 층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물 층으로서 발광층 이외에, 상기 제1전극과 상기 발광층 사이의 정공주입층 및 정공수송층, 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이의 전자수송층 및 전자주입층을 더 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수 또는 더 많은 수의 유기층을 포함할 수 있다.
- [0159] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 상기 제1 전극이 양극이고 상기 제2 전극은 음극인, 기관 상에 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조(normal type)의 유기 발광 소자일 수 있다. 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 상기 제1 전극이 음극이고 상기 제2 전극은 양극인, 기관 상에 음극, 1층 이상의 유기물층 및 양극이 순차적으로 적층된 역방향 구조(inverted type)의 유기 발광 소자일 수 있다. 예컨대, 본 발명의 일실시예에 따른 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 2에 예시되어 있다.
- [0161] 도 1은 기관(1), 양극(2), 정공수송층(3), 발광층(4), 전자주입 및 수송층(5) 및 음극(6)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 정공수송층에 포함될 수 있다.
- [0163] 도 2는 기관(1), 양극(2), 정공주입층(7), 정공수송층(3), 전자저지층(8), 발광층(4), 전자주입 및 수송층(5) 및 음극(6)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 정공수송층, 또는 전자저지층에 포함될 수 있다.
- [0165] 본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다. 또한, 상기 유기 발광 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.
- [0167] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 기관 상에 제1 전극, 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층시켜 제조할 수 있다. 이때, 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical Vapor Deposition)방법을 이용하여, 기관 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시켜 제조할 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기관 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수 있다.
- [0169] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의

하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.

- [0171] 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질로부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 제조할 수 있다(WO 2003/012890). 다만, 제조 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0173] 일례로, 상기 제1 전극은 양극이고, 상기 제2 전극은 음극이거나, 또는 상기 제1 전극은 음극이고, 상기 제2 전극은 양극이다.
- [0175] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 상기 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO<sub>2</sub>:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0177] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 상기 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0179] 상기 정공주입층은 전극으로부터 정공을 주입하는 층으로, 정공 주입 물질로는 정공을 수송하는 능력을 가져 양극에서의 정공 주입효과, 발광층 또는 발광재료에 대하여 우수한 정공 주입 효과를 갖고, 발광층에서 생성된 여기자의 전자주입층 또는 전자주입재료에의 이동을 방지하며, 또한, 박막 형성 능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrin), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone)계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정 되는 것은 아니다.
- [0181] 상기 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층으로, 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 상기 정공 수송 물질로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하거나, 또는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0183] 상기 전자저지층은 상기 정공수송층 상에 형성되어, 바람직하게는 발광층에 접하여 구비되어, 정공이동도를 조절하고, 전자의 과도한 이동을 방지하여 정공-전자간 결합 확률을 높여줌으로써 유기 발광 소자의 효율을 개선하는 역할을 하는 층을 의미한다. 상기 전자저지층은 전자저지물질을 포함하고, 이러한 전자저지물질의 예로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하거나, 또는 아릴아민 계열의 유기물 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0185] 상기 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq<sub>3</sub>); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BA1q; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0187] 상기 발광층은 상술한 바와 같이 호스트 재료 및 도펀트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하거나, 또는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등을 더 포함할 수 있다. 구체적으로 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0189] 도펀트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스트릴아민 화합물, 붕소 착체, 플루오란텐 화합물, 금속 착체 등이 있다. 구체적으로 방향족 아민 유도체로는 치환 또는 비치환된 아릴아미노기를 갖는 축합 방향족환 유도체로서,

아릴아미노기를 갖는 피렌, 안트라센, 크리센, 페리플란텐 등이 있으며, 스티릴아민 화합물로는 치환 또는 비치환된 아릴아민에 적어도 1개의 아릴비닐기가 치환되어 있는 화합물로, 아릴기, 실릴기, 알킬기, 사이클로알킬기 및 아릴아미노기로 이루어진 군에서 1 또는 2 이상 선택되는 치환기가 치환 또는 비치환된다. 구체적으로 스티릴아민, 스티릴디아민, 스티릴트리아민, 스티릴테트라아민 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또한, 금속 착체로는 이리듐 착체, 백금 착체 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0191] 상기 정공저지층은 발광층 상에 형성되어, 바람직하게는 발광층에 접하여 구비되어, 전자이동도를 조절하고 정공의 과도한 이동을 방지하여 정공-전자간 결합 확률을 높여줌으로써 유기 발광 소자의 효율을 개선하는 역할을 하는 층을 의미한다. 상기 정공저지층은 정공저지물질질을 포함하고, 이러한 정공저지물질질의 예로 트리아진을 포함한 아진류유도체; 트리아졸 유도체; 옥사디아졸 유도체; 페난트롤린 유도체; 포스핀옥사이드 유도체 등의 전자흡인기가 도입된 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0193] 상기 전자 주입 및 수송층은 전극으로부터 전자를 주입하고, 수취된 전자를 발광층까지 수송하는 전자수송층 및 전자주입층의 역할을 동시에 수행하는 층으로, 상기 발광층 또는 상기 정공저지층 상에 형성된다. 이러한 전자 주입 및 수송물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 전자 주입 및 수송물질의 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq<sub>3</sub>를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물; 트리아진 유도체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 또는 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀴논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다이하졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물, 또는 질소 함유 5원환 유도체 등과 함께 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0195] 상기 전자 주입 및 수송층은 전자주입층 및 전자수송층과 같은 별개의 층으로도 형성될 수 있다. 이와 같은 경우, 전자 수송층은 상기 발광층 또는 상기 정공저지층 상에 형성되고, 상기 전자 주입층에 포함되는 전자 수송 물질로는 상술한 전자 주입 및 수송 물질이 사용될 수 있다. 또한, 전자 주입층은 상기 전자 수송층 상에 형성되고, 상기 전자 주입층에 포함되는 전자 주입 물질로는 LiF, NaCl, CsF, Li<sub>2</sub>O, BaO, 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀴논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다이하졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 질소 함유 5원환 유도체 등이 사용될 수 있다.

[0197] 상기 금속 착체 화합물로서는 8-하이드록시퀴놀리나토 리튬, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)아연, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)구리, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)망간, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(2-메틸-8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)갈륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)아연, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)클로로갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(o-크레졸라토)갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(1-나프톨라토)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(2-나프톨라토)갈륨 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

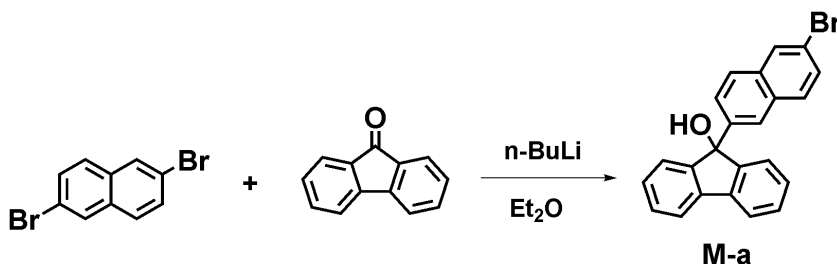
[0199] 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 배면 발광(bottom emission) 소자, 전면 발광(top emission) 소자, 또는 양면 발광 소자일 수 있으며, 특히 상대적으로 높은 발광 효율이 요구되는 배면 발광 소자일 수 있다.

[0201] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자 외에도 유기 태양 전지 또는 유기 트랜지스터에 포함될 수 있다.

[0203] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 일례로 하기 반응식 1과 같은 제조 방법으로 제조할 수 있다.

[0205] **합성예 A: 중간체 M-1의 합성**

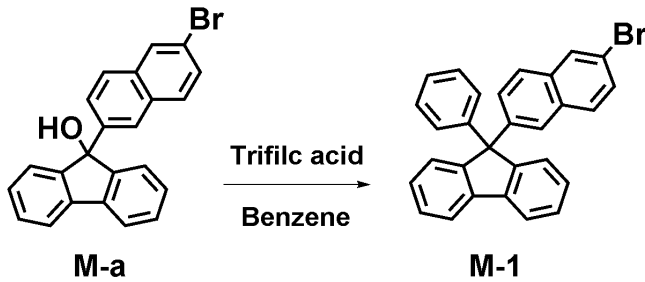
[0206] 단계 1) 중간체 M-a의 합성



[0207]

[0208] 건조된 둥근바닥 플라스크에 2,6-dibromonaphthalene(20.0 g, 69.9 mmol)을 diethylether 200 mL에 넣어 녹이고, -78℃로 냉각한 후 질소분위기 하에서 교반하였다. 여기에 n-butyllithium 2.5M n-hexane 용액 30.8 mL(76.9 mmol)을 천천히 가한 후, -78℃, 질소 분위기 하에서 2시간 동안 교반 하였다. 여기에 THF 40 mL에 녹인 9H-fluoren-9-one(13.9 g, 76.9 mmol)을 천천히 가한 후 상온, 질소분위기 하에서 8시간 동안 교반하였다. 반응액을 0℃로 냉각하고 여기에 1.0M 염암모늄크로라이드 수용액 100 mL을 넣고 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 중간체 M-a를 23.0g 제조하였다. (수율 85%, MS:  $[M+H]^+ = 388$ )

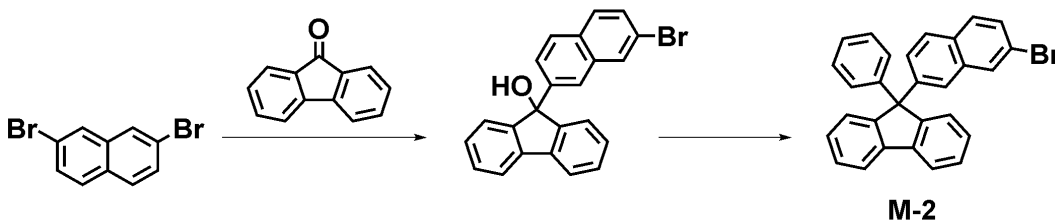
[0210] 단계 2) 중간체 M-1의 합성



[0211]

[0212] 둥근바닥 플라스크에 중간체 M-a(20.0 g, 51.6 mmol)를 넣고 벤젠 138.5 mL를 가하여 용해시켰다. 여기에 트리플루오로메탄설폰산(8.5 g, 56.8 mmol)을 천천히 가한 후 질소 분위기 하에서 24시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 반응액에 1.0M 탄산수소나트륨 수용액 70 mL를 천천히 가하고 에틸아세테이트와 물을 이용하여 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 중간체 M-1을 9.9g 제조하였다. (수율 43%, MS:  $[M+H]^+ = 448$ )

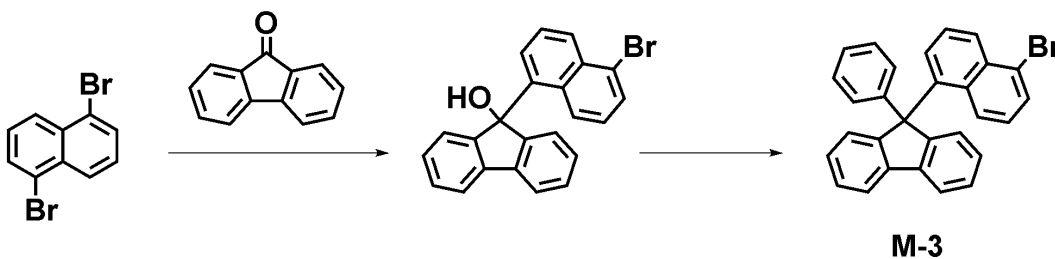
[0214] 합성예 B: 중간체 M-2의 합성



[0215]

[0216] 합성예 A에서, 2,6-dibromonaphthalene을 2,7-dibromonaphthalene으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 중간체 M-1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 중간체 M-2를 제조하였다. (MS:  $[M+H]^+ = 448$ )

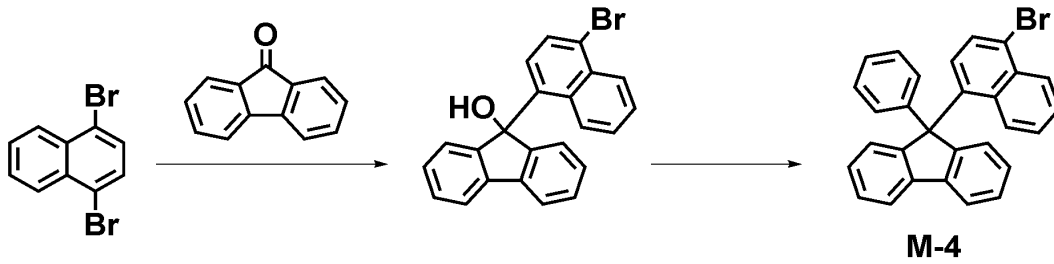
[0218] 합성예 C: 중간체 M-3의 합성



[0219]

[0220] 합성예 A에서, 2,6-dibromonaphthalene을 1,5-dibromonaphthalene으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 중간체 M-1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 중간체 M-3을 제조하였다. (MS:  $[M+H]^+ = 448$ )

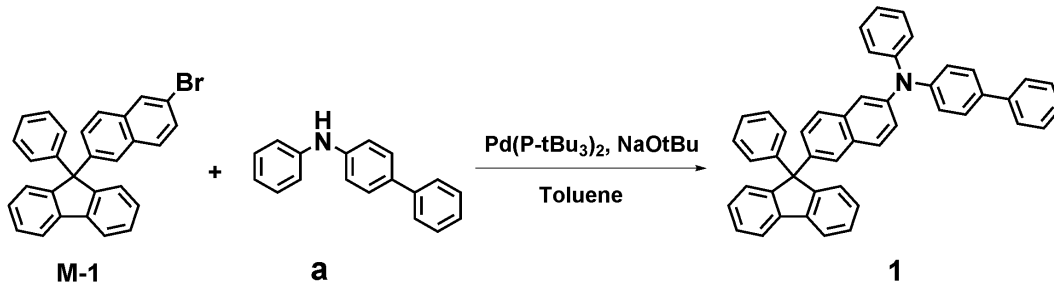
[0222] 합성예 D: 중간체 M-4의 합성



[0223]

[0224] 합성예 A에서, 2,6-dibromonaphthalene을 1,4-dibromonaphthalene으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 중간체 M-1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 중간체 M-4를 제조하였다. (MS:  $[M+H]^+ = 448$ )

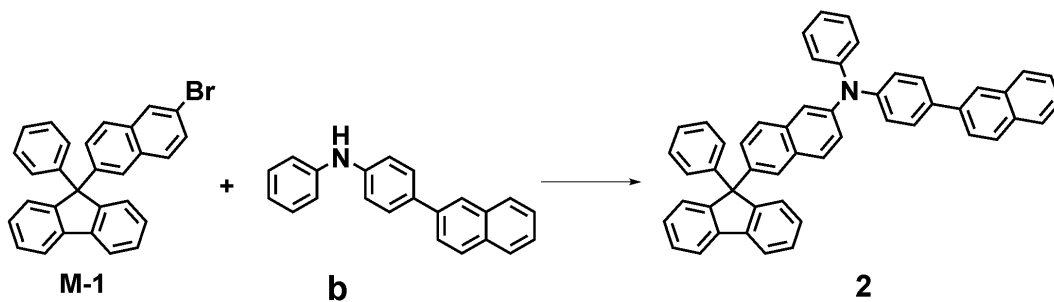
[0226] 합성예 1: 화합물 1의 합성



[0227]

[0228] 질소 분위기에서 중간체 M-1(15.0 g, 33.5 mmol)과 화합물 a(9.1 g, 36.9 mmol)를 toluene 300 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 sodium tert-butoxide(4.8 g, 50.3 mmol), bis(tri-tert-butylphosphine)palladium(0)(0.5 g, 1 mmol)을 투입하였다. 12시간 반응 후 상온으로 식히고 클로로포름과 물을 이용하여 유기층을 분리 후 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제한 후, 승화정제를 통해 화합물 1을 14.2g 제조하였다. (수율 69%, MS:  $[M+H]^+ = 613$ )

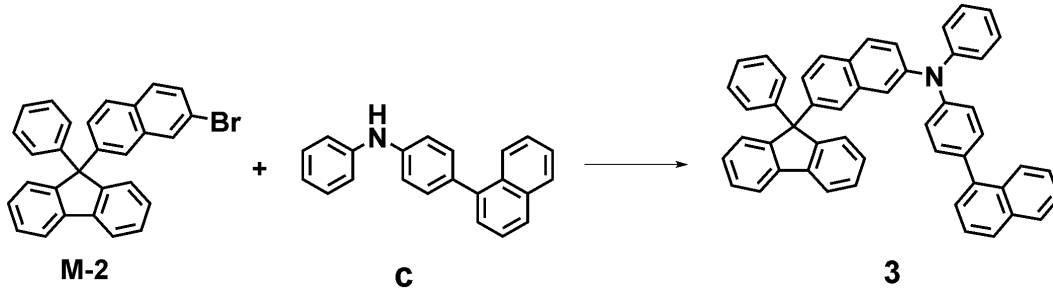
[0230] 합성예 2: 화합물 2의 합성



[0231]

[0232] 합성예 1에서, 화합물 a를 화합물 b로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 2를 제조하였다. (MS:  $[M+H]^+ = 663$ )

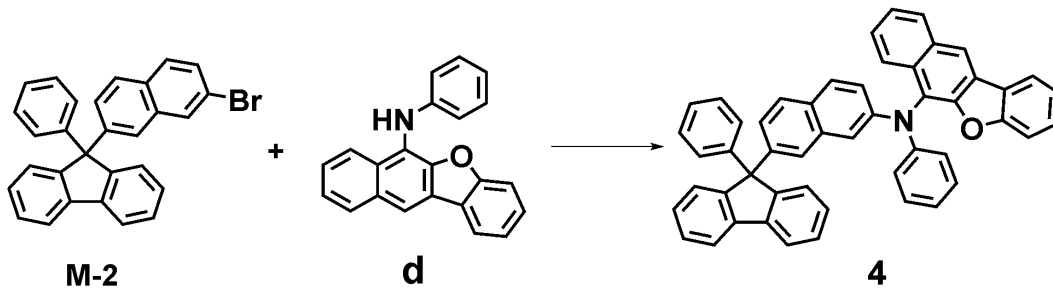
[0234] 합성예 3: 화합물 3의 합성



[0235]

[0236] 합성예 1에서, 중간체 M-1을 중간체 M-2로, 화합물 a를 화합물 c로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 3을 제조하였다. (MS:  $[M+H]^+ = 663$ )

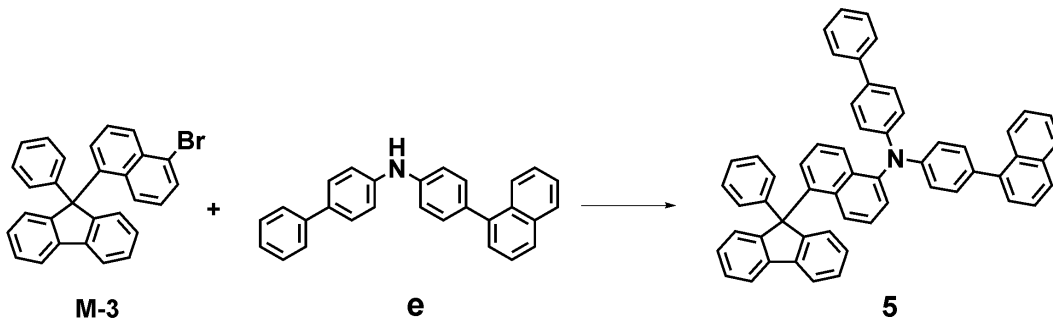
[0238] 합성예 4: 화합물 4의 합성



[0239]

[0240] 합성예 1에서, 중간체 M-1을 중간체 M-2로, 화합물 a를 화합물 d로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 4를 제조하였다. (MS:  $[M+H]^+ = 677$ )

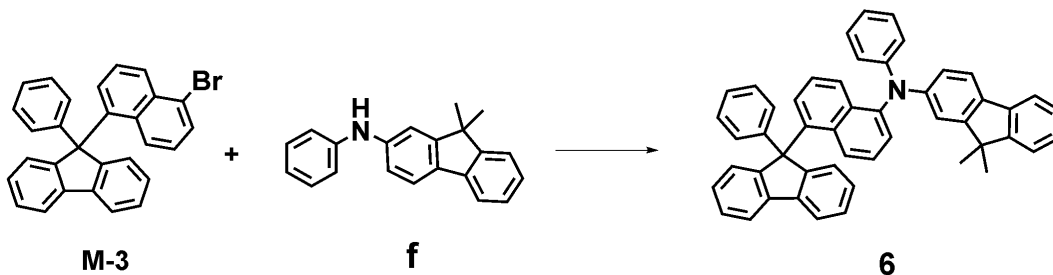
[0242] 합성예 5: 화합물 5의 합성



[0243]

[0244] 합성예 1에서, 중간체 M-1을 중간체 M-3으로, 화합물 a를 화합물 e로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 5를 제조하였다. (MS:  $[M+H]^+ = 739$ )

[0246] 합성예 6: 화합물 6의 합성

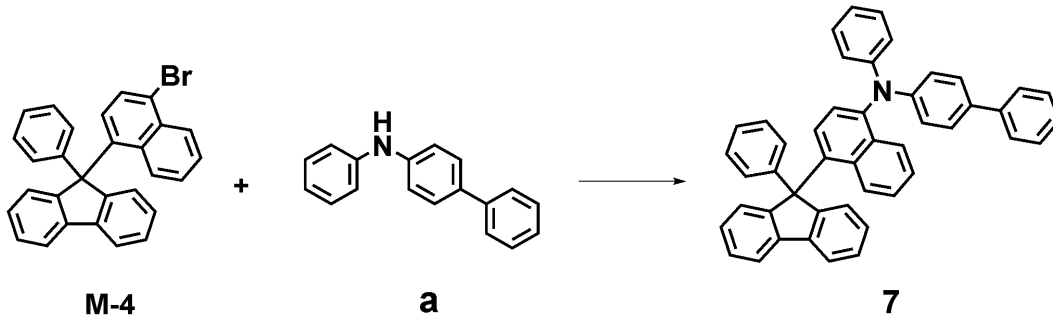


[0247]

[0248] 합성예 1에서, 중간체 M-1을 중간체 M-3으로, 화합물 a를 화합물 f로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1

1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 6을 제조하였다. (MS:  $[M+H]^+ = 653$ )

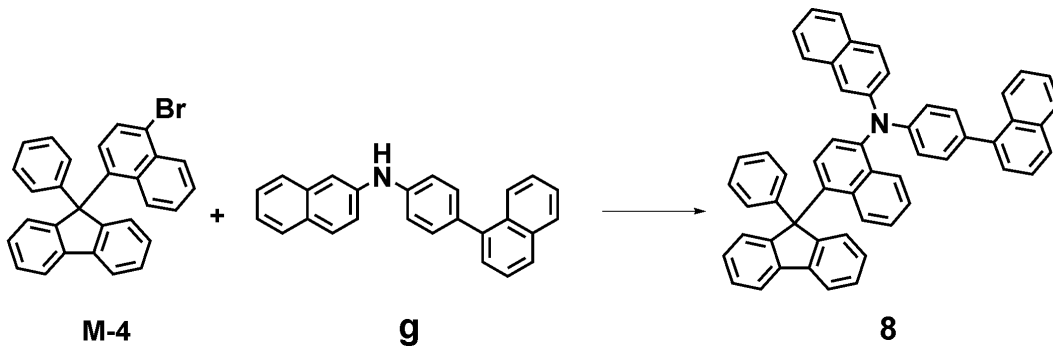
[0250] 합성예 7: 화합물 7의 합성



[0251]

[0252] 합성예 1에서, 중간체 M-1을 중간체 M-4로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 7을 제조하였다. (MS:  $[M+H]^+ = 613$ )

[0254] 합성예 8: 화합물 8의 합성



[0255]

[0256] 합성예 1에서, 중간체 M-1을 중간체 M-4로, 화합물 a를 화합물 g로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 8을 제조하였다. (MS:  $[M+H]^+ = 713$ )

[0258] [실시예]

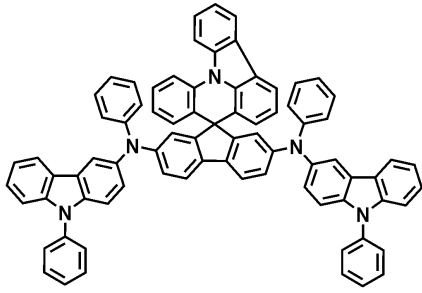
[0259] 비교예 1

[0260] ITO(Indium Tin Oxide)가 1,400Å의 두께로 박막 코팅된 유리기판을 세제에 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이때 세제로는 피셔사(Fischer Co.)의 Decon™ CON705 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀러포어사(Millipore Co.) 제품의 0.22µm sterilizing filter로 2차 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필 알코올, 아세톤 및 메탄올의 용제로 각각 10분간 초음파 세척하고, 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후, 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

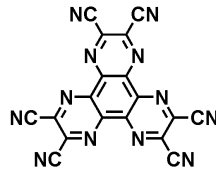
[0261] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 HI-A과 LG-101을 각각 800Å, 50Å의 두께로 순차적으로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다. 그 위에 정공수송층으로 하기 HT-A를 800Å 두께로 진공 증착한 후 전자저지층으로 하기 EB-A를 600Å의 두께로 열 진공 증착하였다.

[0262] 상기 전자저지층 상에 발광층 호스트 하기 RH-A 및 발광층 도펀트 하기 RD-A를 98:2의 중량비로 400Å의 두께로 진공 증착하여 발광층을 형성하였다.

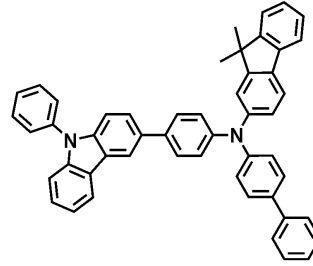
[0263] 이어서, 상기 발광층 상에 전자 수송 및 주입층으로 하기 ET-A와 Liq를 1:1의 비율로 360Å의 두께로 열 진공 증착하고 이어서 Liq를 5Å의 두께로 진공 증착하였다.



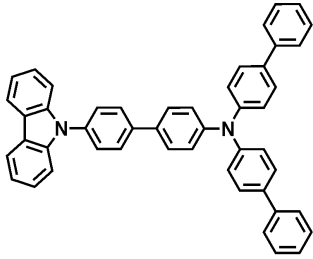
HI - A



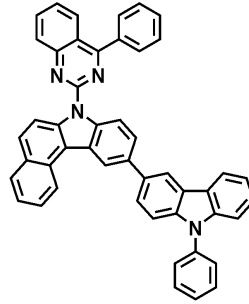
LG-101



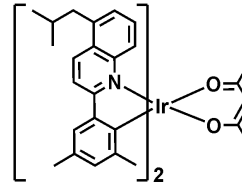
HT - A



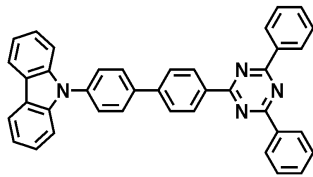
EB - A



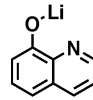
RH - A



RD - A



ET - A



Liq

[0264]

[0265]

상기 전자 수송 및 주입층 위에 순차적으로 마그네슘과 은을 10:1의 비율로 220Å의 두께로, 알루미늄을 1000Å 두께로 증착하여 음극을 형성하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0267]

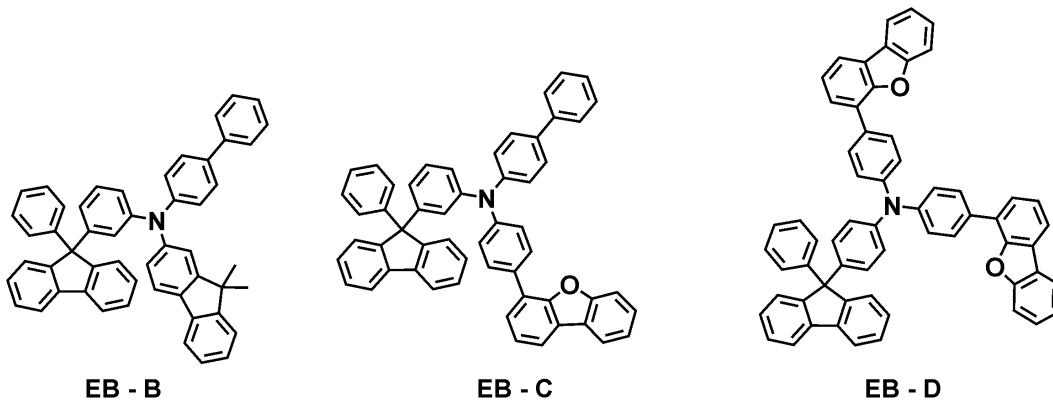
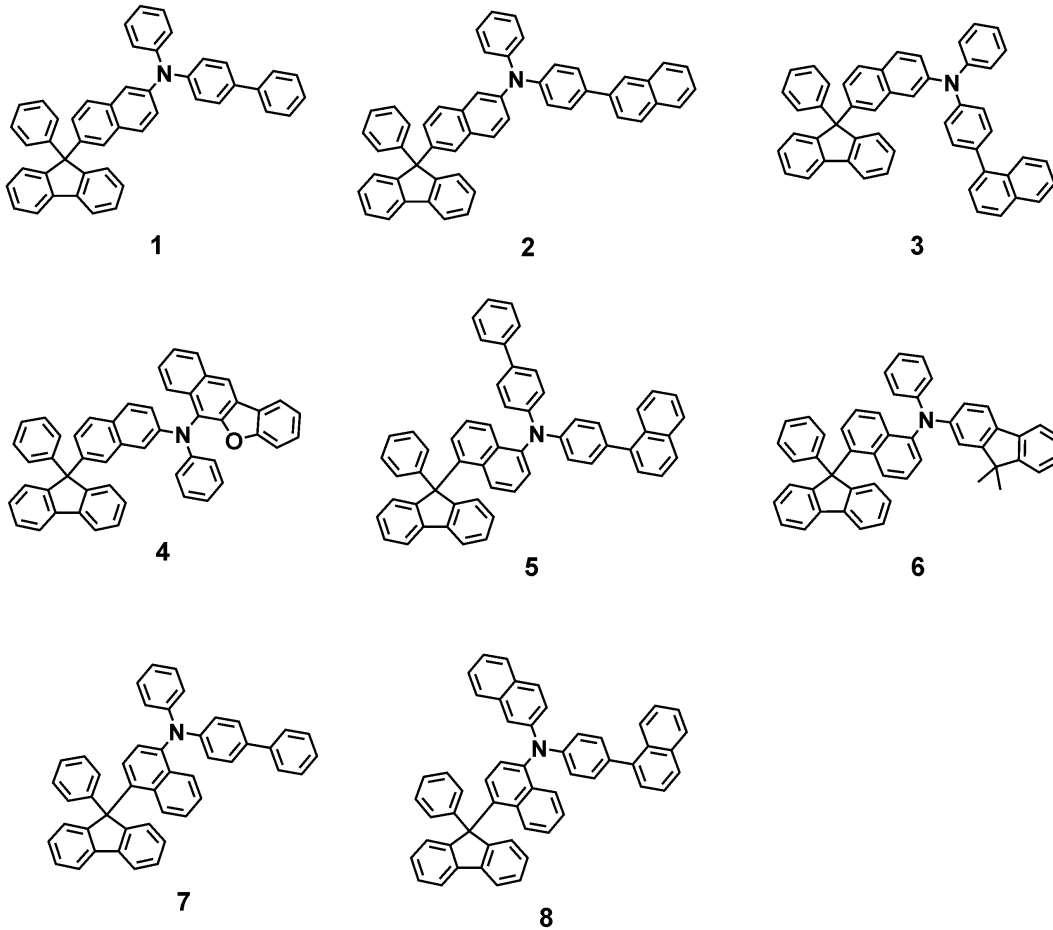
실시예 1 내지 실시예 8 비교예 2 내지 비교예 4

[0268]

상기 비교예 1에서 화합물 1 대신 표 1과 같이 변경하였다는 점을 제외하고는, 상기 비교예 1과 동일한 방법을 이용하여 실시예 1 내지 실시예 8 및 비교예 2 내지 비교예 4의 유기 발광 소자를 각각 제작하였다.

[0269]

한편, 실시예 1 내지 8에 각각 사용된 화합물 1 내지 8 및 비교예 2 내지 4에 각각 사용된 화합물 EB-B, EB-C 및 EB-D의 구조는 하기와 같다.



실험예

상기 실시예 1 내지 실시예 8 및 비교예 1 내지 비교예 4에서 제작된 유기 발광 소자에 전류를 인가하여, 전압, 효율, 수명을 측정하고 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 이때, 전압, 효율은 10 mA/cm<sup>2</sup>의 전류 밀도를 인가하여 측정되었으며, LT97은 전류 밀도 20 mA/cm<sup>2</sup>에서 초기 휘도가 97%로 저하할 때까지의 시간을 의미한다.

표 1

	화합물 (전자저지층)	전압 (V @10mA/cm <sup>2</sup> )	효율 (cd/A @10mA/cm <sup>2</sup> )	LT97 (hr @20mA/cm <sup>2</sup> )
실시예 1	화합물 1	4.51	20.1	93
실시예 2	화합물 2	4.60	21.3	91
실시예 3	화합물 3	4.53	20.8	97
실시예 4	화합물 4	4.45	21.9	90



도면2

6
5
4
8
3
7
2
1