



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2017-0101577  
 (43) 공개일자 2017년09월06일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C07D 209/56* (2006.01) *C07C 211/54* (2006.01)  
*C09K 11/06* (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)  
*H01L 51/50* (2006.01) *H05B 33/14* (2006.01)

(52) CPC특허분류  
*C07D 209/56* (2013.01)  
*C07C 211/54* (2013.01)

(21) 출원번호 10-2016-0024290  
 (22) 출원일자 2016년02월29일  
 심사청구일자 없음

(71) 출원인  
**주식회사 엘지화학**  
 서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)

(72) 발명자  
**차용범**  
 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
**홍성길**  
 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
 (뒷면에 계속)

(74) 대리인  
**정순성**

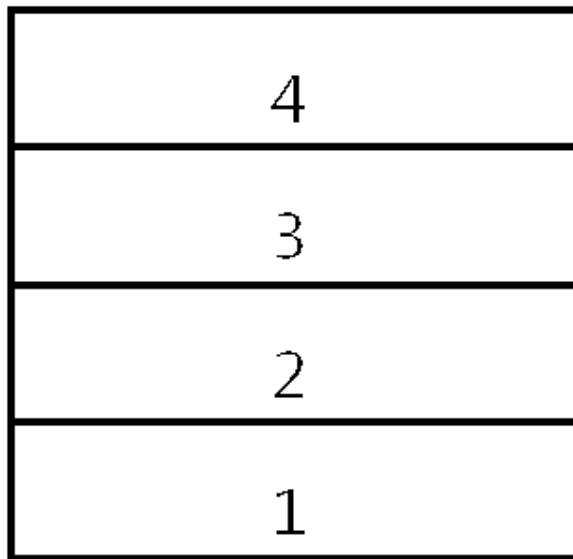
전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 **함질소 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자**

**(57) 요약**

본 명세서는 함질소 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

**대표도** - 도1



(52) CPC특허분류

*C09K 11/06* (2013.01)  
*H01L 51/0072* (2013.01)  
*H01L 51/5012* (2013.01)  
*H01L 51/5048* (2013.01)  
*H05B 33/14* (2013.01)  
*C09K 2211/1003* (2013.01)  
*C09K 2211/1014* (2013.01)  
*C09K 2211/1029* (2013.01)

(72) 발명자

**김정범**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**이성재**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

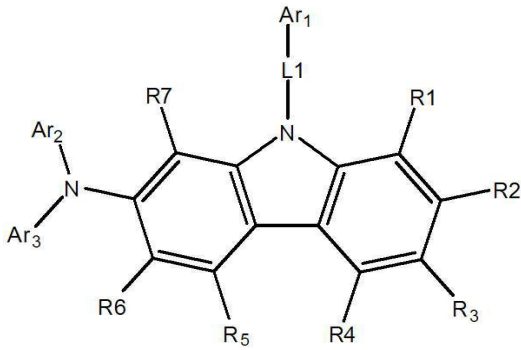
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1 로 표시되는 합질소 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub> 및 R<sub>7</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠계; 니트로기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,

R<sub>3</sub>과 R<sub>4</sub>가 결합하여 고리를 형성하거나, R<sub>5</sub>와 R<sub>6</sub>는 결합하여 고리를 형성하며, 고리를 형성하지 않는 기는 R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub> 및 R<sub>7</sub>의 정의와 같고,

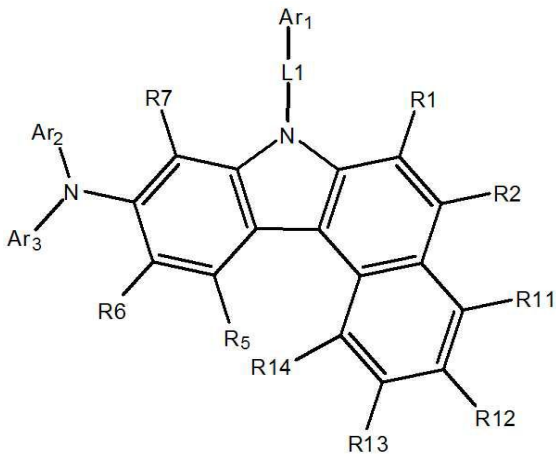
L<sub>1</sub>은 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이며,

Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 니트로기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

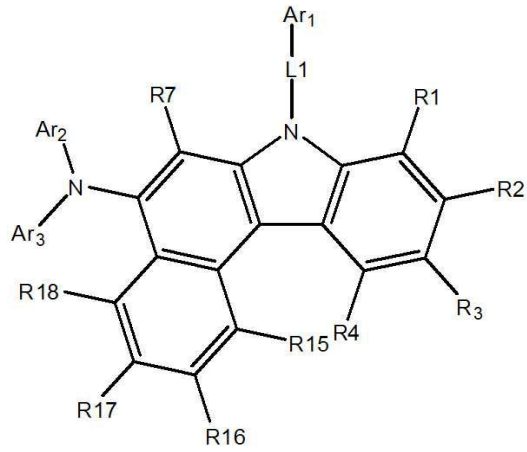
청구항 2

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 것인 합질소 화합물:

[화학식 2]



[화학식 3]



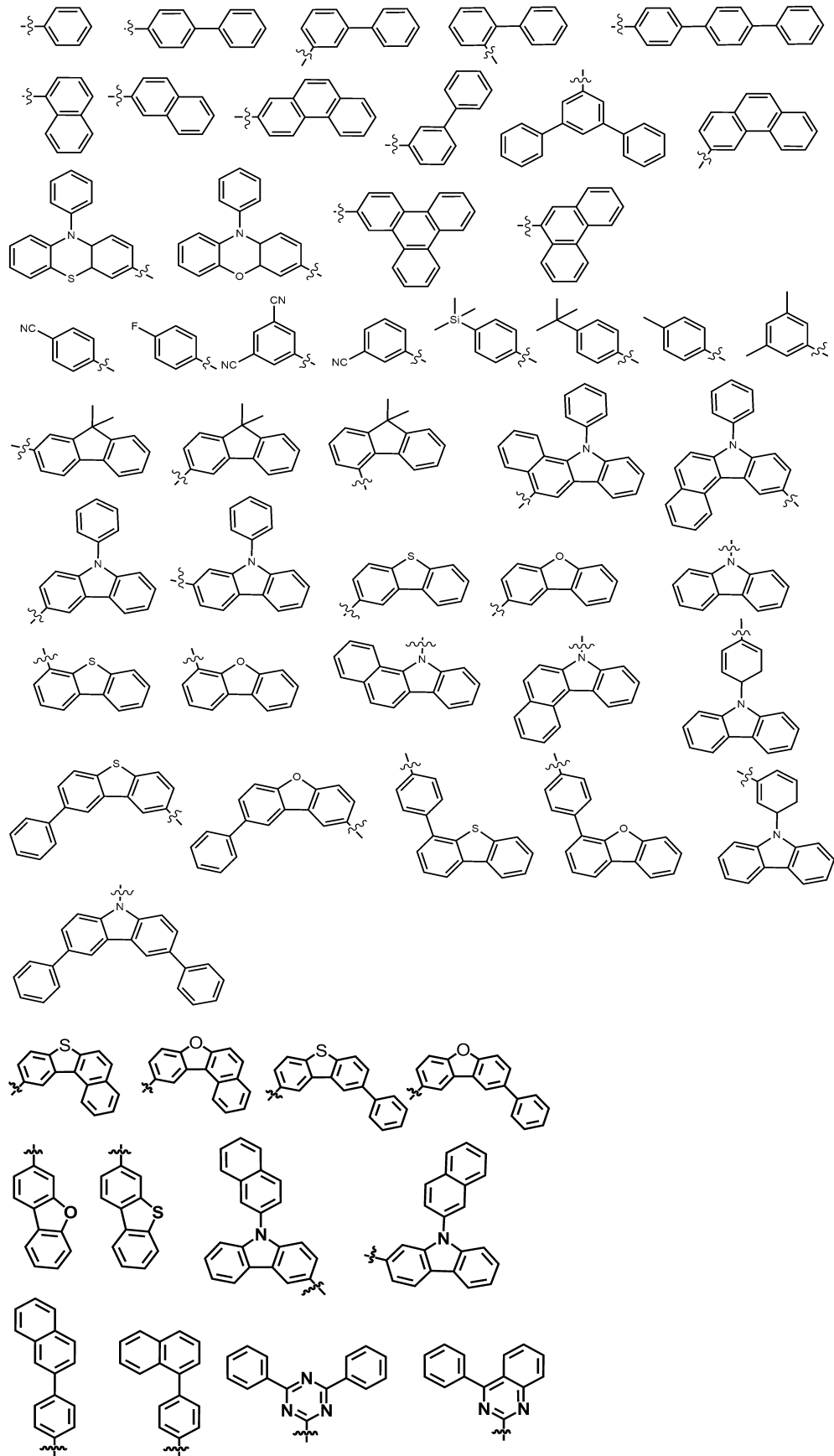
상기 화학식 2 및 3에 있어서,

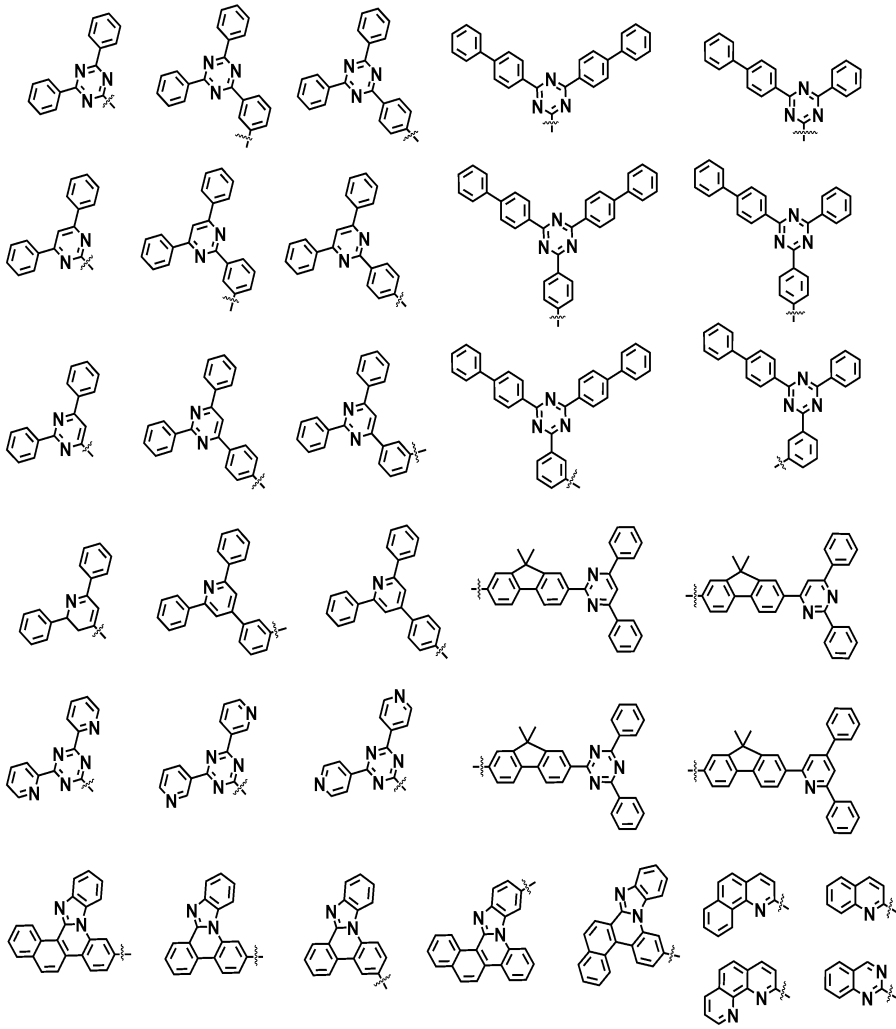
상기 R1 내지 R7, L1 및 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>는 화학식 1에서의 정의와 같고,

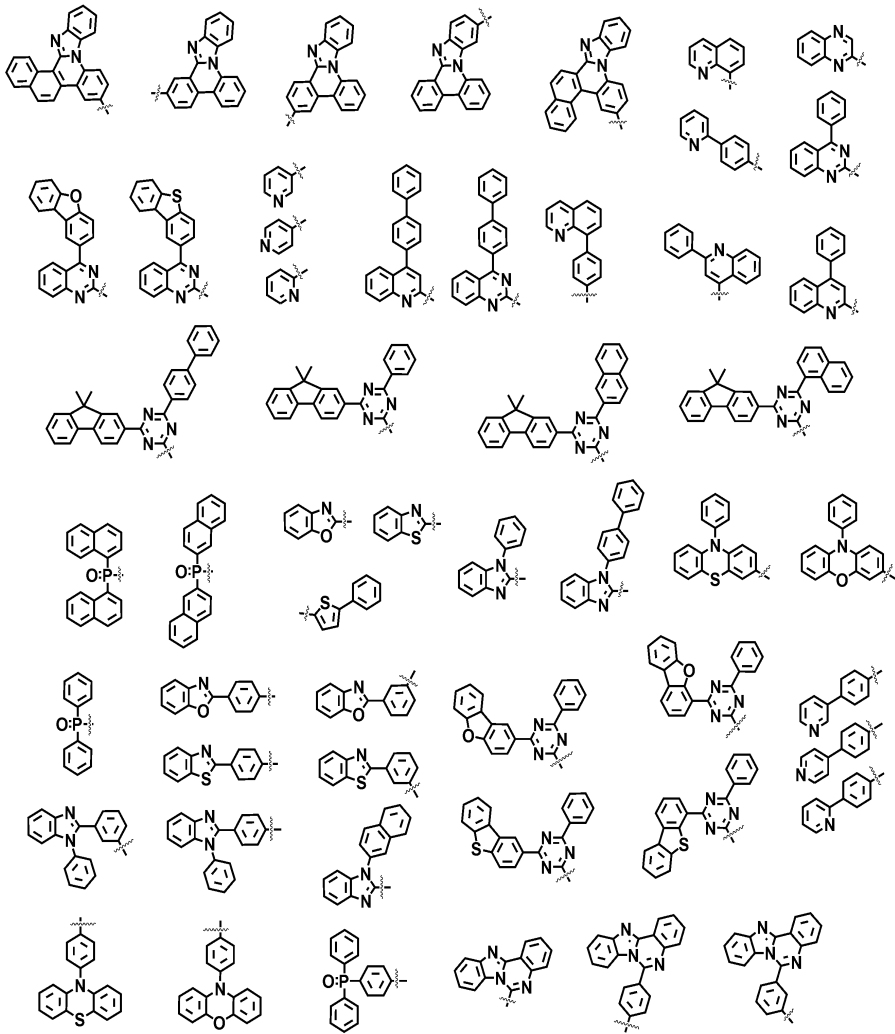
R11 내지 R18은 상기 R1, R2 및 R7의 정의와 같다.

청구항 3

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1에서 -L1-Ar<sub>1</sub> 은 하기 구조식들 중에서 선택되는 것인 합질소 화합물:

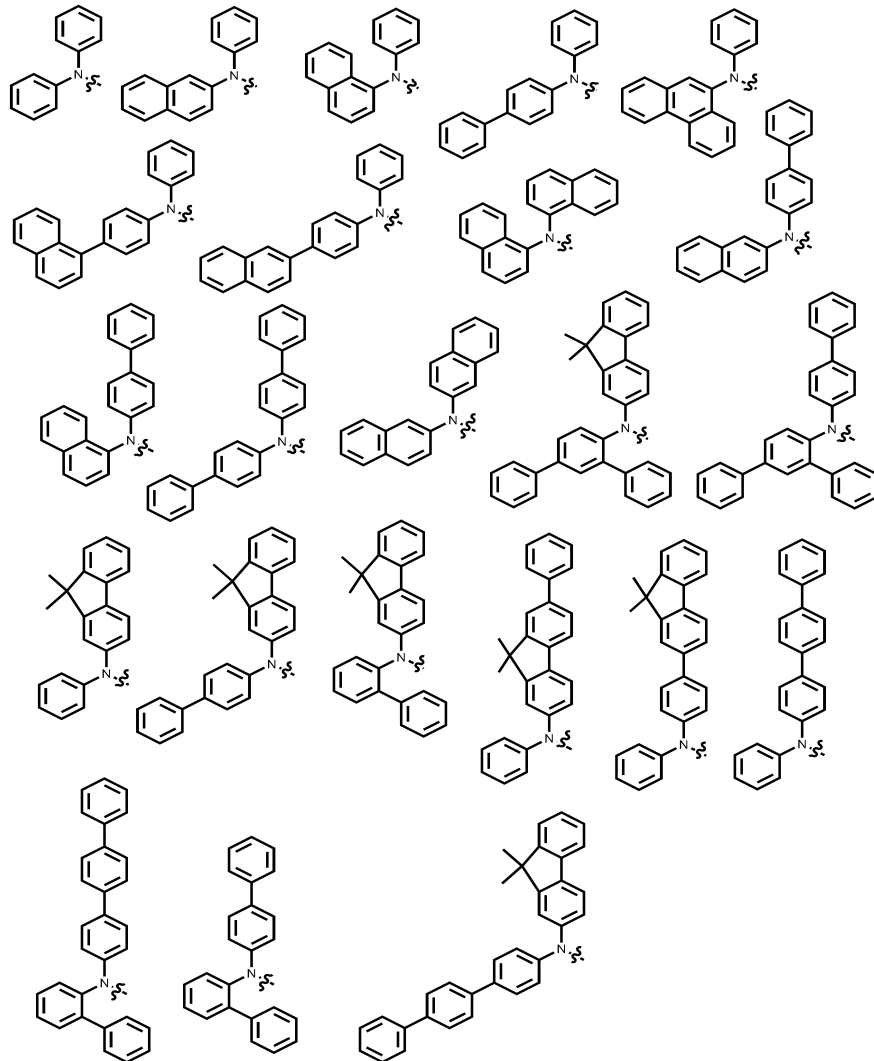


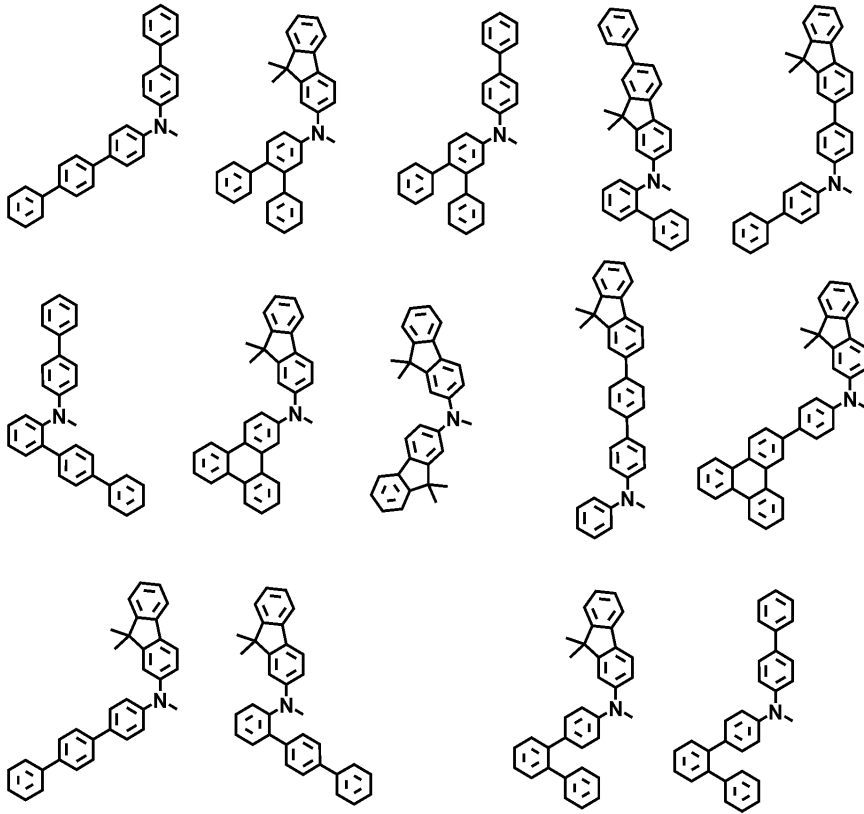




청구항 4

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1에서  $-N(Ar_2Ar_3)$ 은 하기 구조식들 중에서 선택되는 것인 합질소 화합물:





**청구항 5**

청구항 1에 있어서, 상기 L1은 직접결합인 것인 함질소 화합물.

**청구항 6**

청구항 1에 있어서, 상기 L1은 치환 또는 비치환된 아틸렌기인 것인 함질소 화합물.

**청구항 7**

청구항 1에 있어서, 상기 L1은 페닐렌기; 비페닐기; 터페닐기; 쿼터페닐기; 나프탈렌기; 안트라센기; 플루오렌기; 페난쓰렌기; 파이렌기; 또는 트리페닐렌기인 것인 함질소 화합물.

**청구항 8**

청구항 1에 있어서, 상기 L1은 헤테로아틸렌기인 것인 함질소 화합물.

**청구항 9**

청구항 1에 있어서, 상기 L1은 페노티아진기(phenothiazine); 페녹사이진기(phenoxazine); 카바졸기; 벤조카바졸기; 벤즈이미다졸기; 티오펜기; 퓨란기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 트리아진기; 피리딘기; 피리미딘기; 퀴놀린기; 또는 퀴나졸린기인 것인 함질소 화합물.

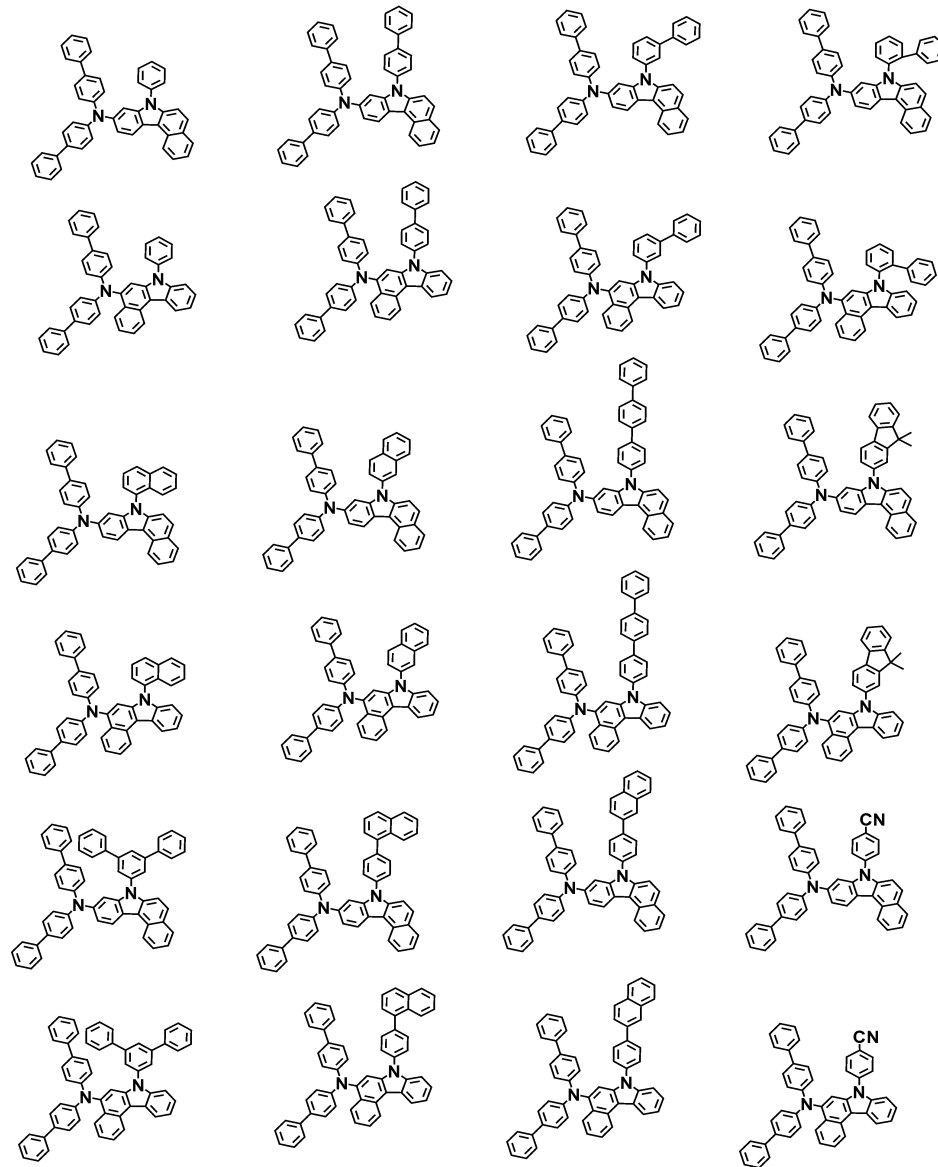
**청구항 10**

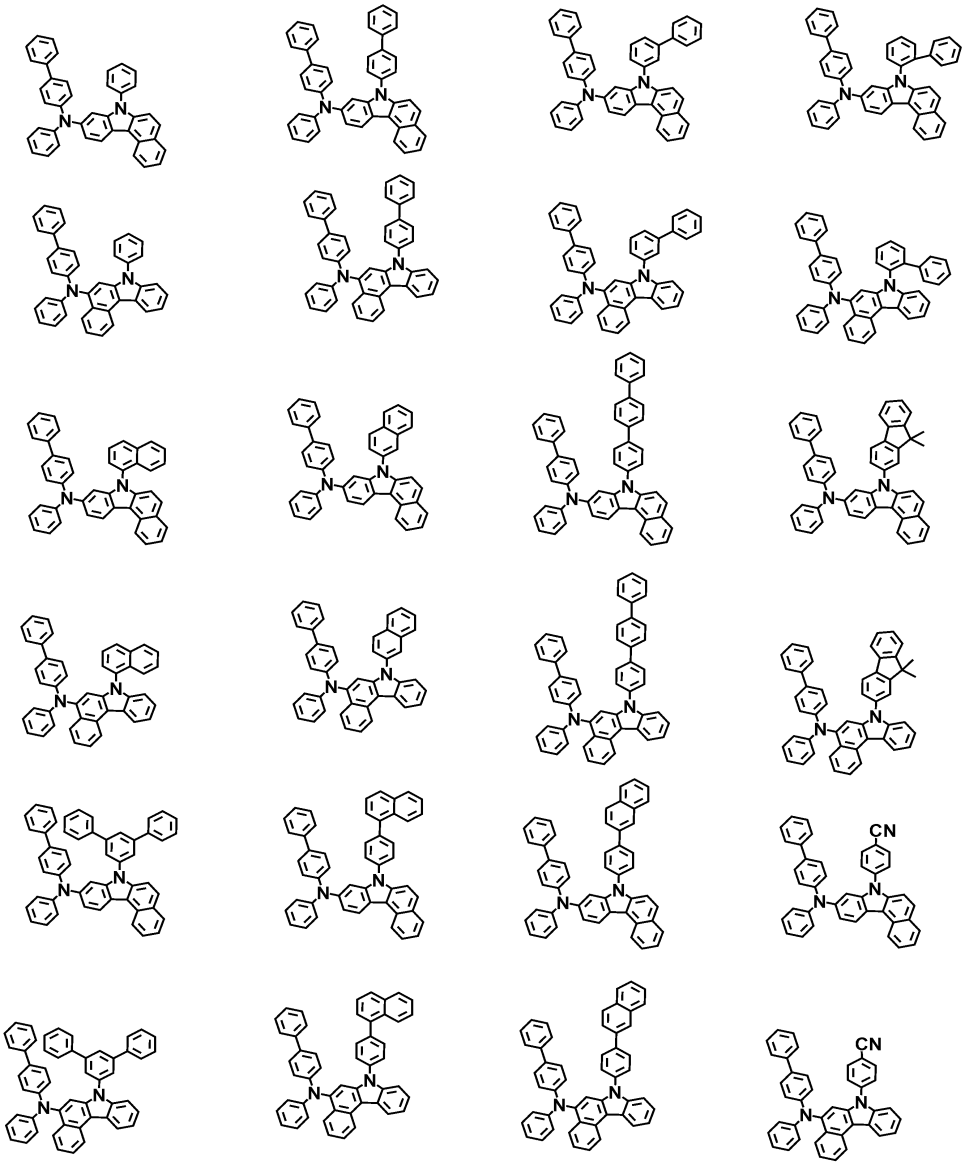
청구항 1에 있어서, 상기 R1, R2 및 R7은 수소이고,

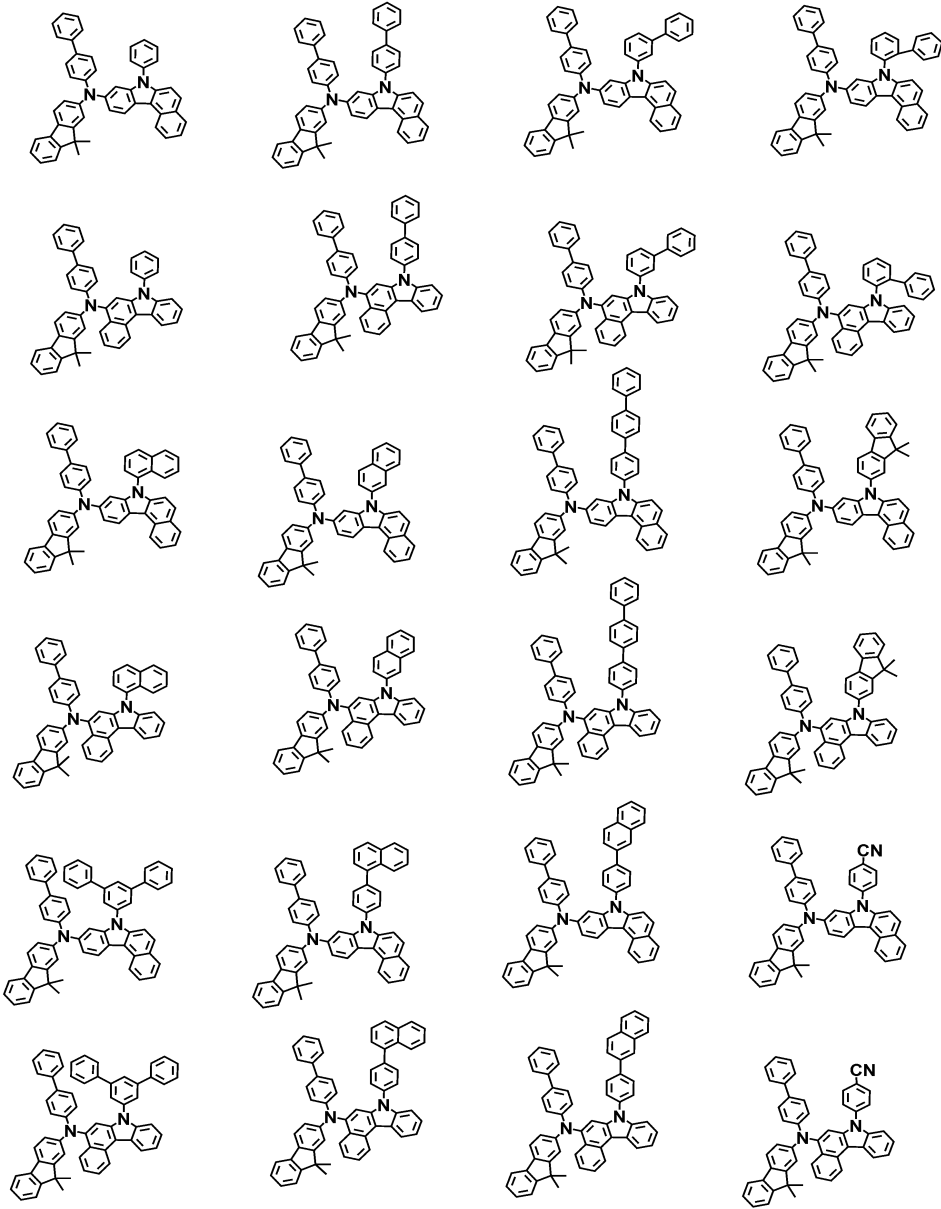
상기 R3와 R4 또는 R5와 R6 중 고리를 형성하지 않는 기는 수소인 것인 함질소 화합물.

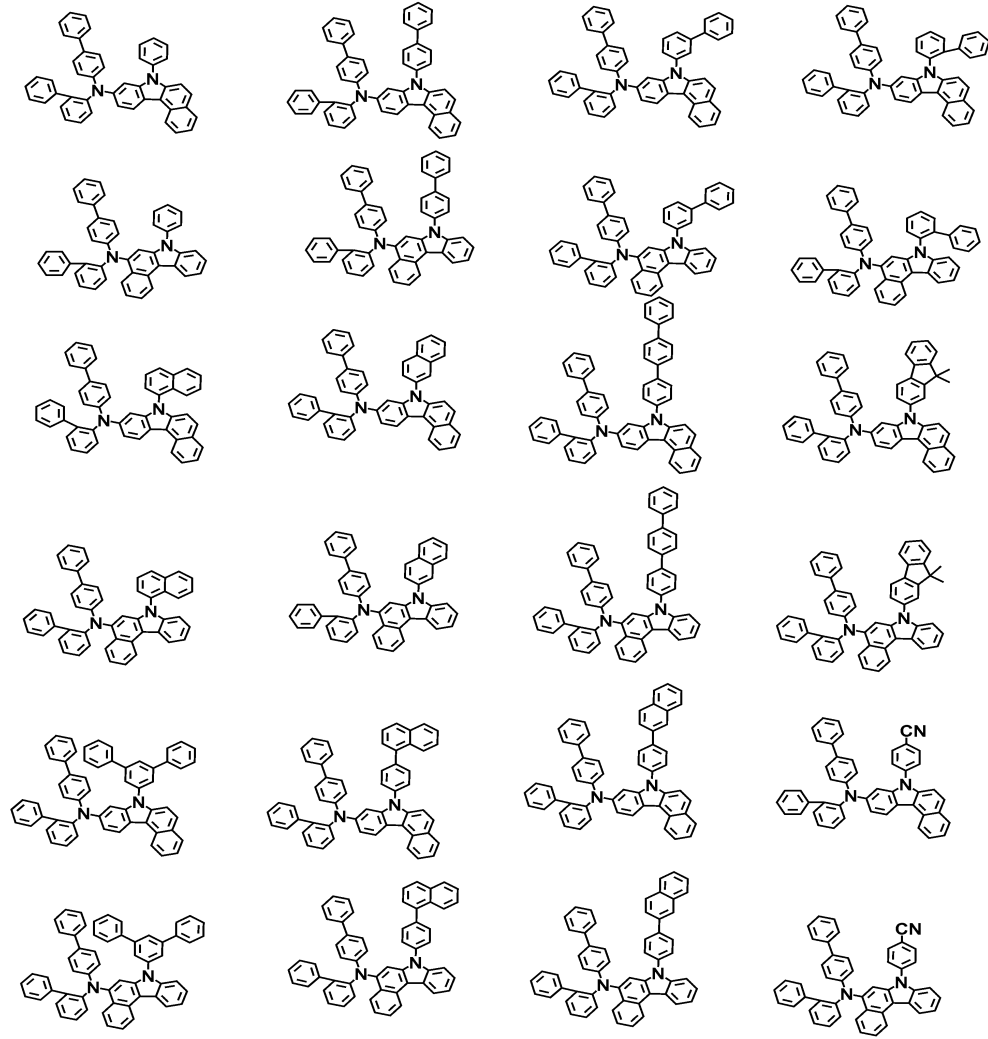
청구항 11

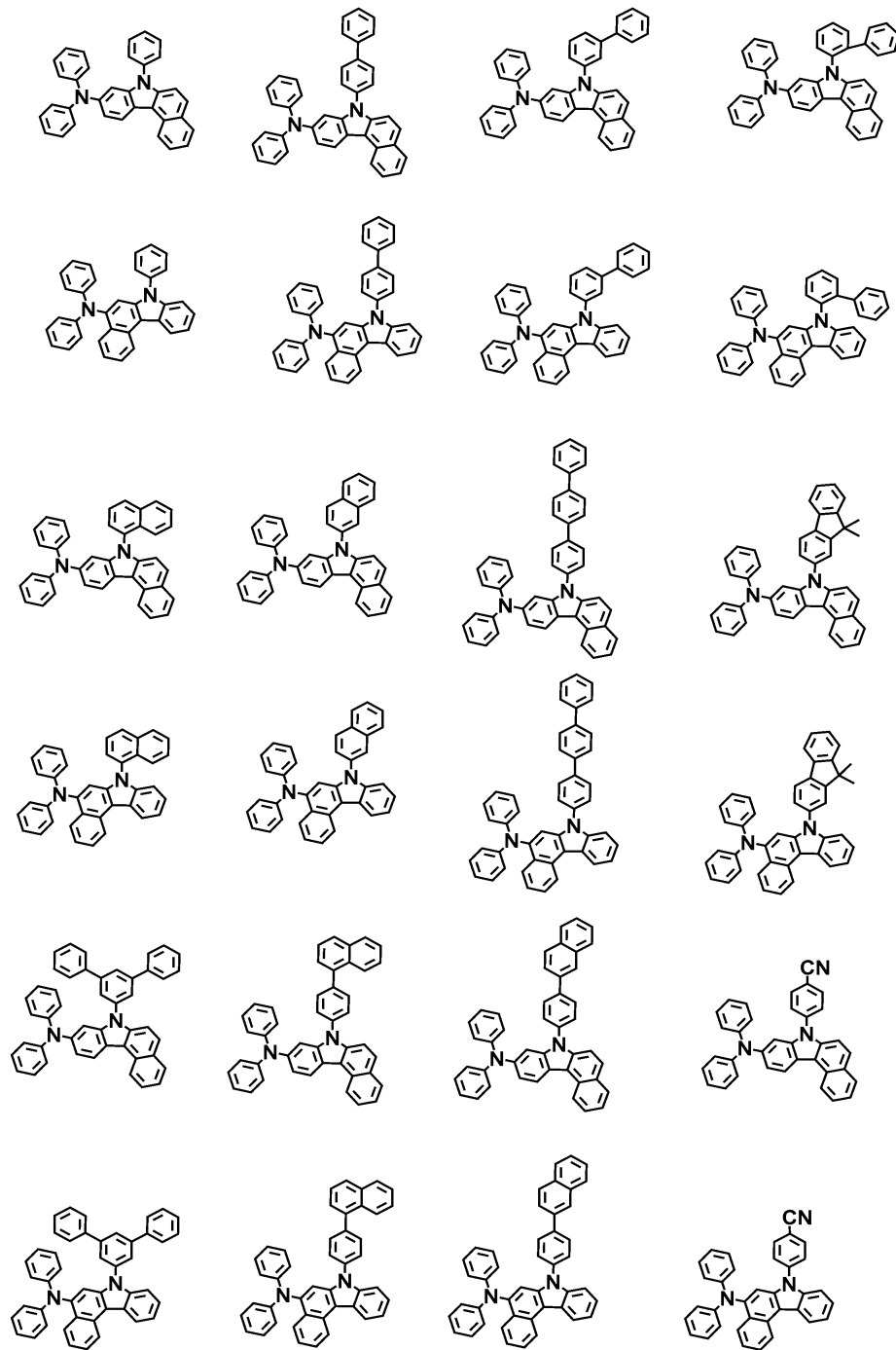
청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 구조식들 중에서 선택되는 것인 합질소 화합물:

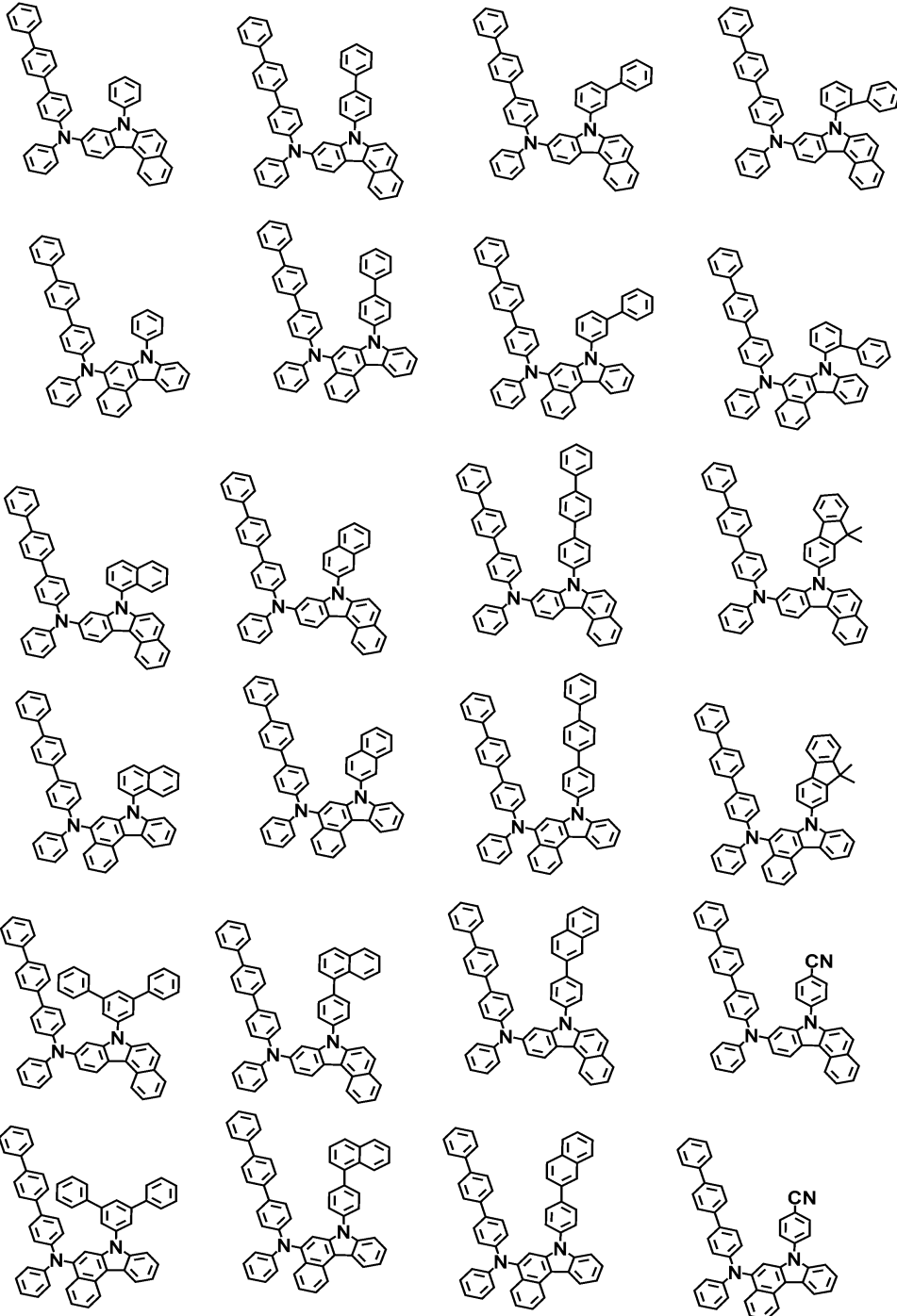


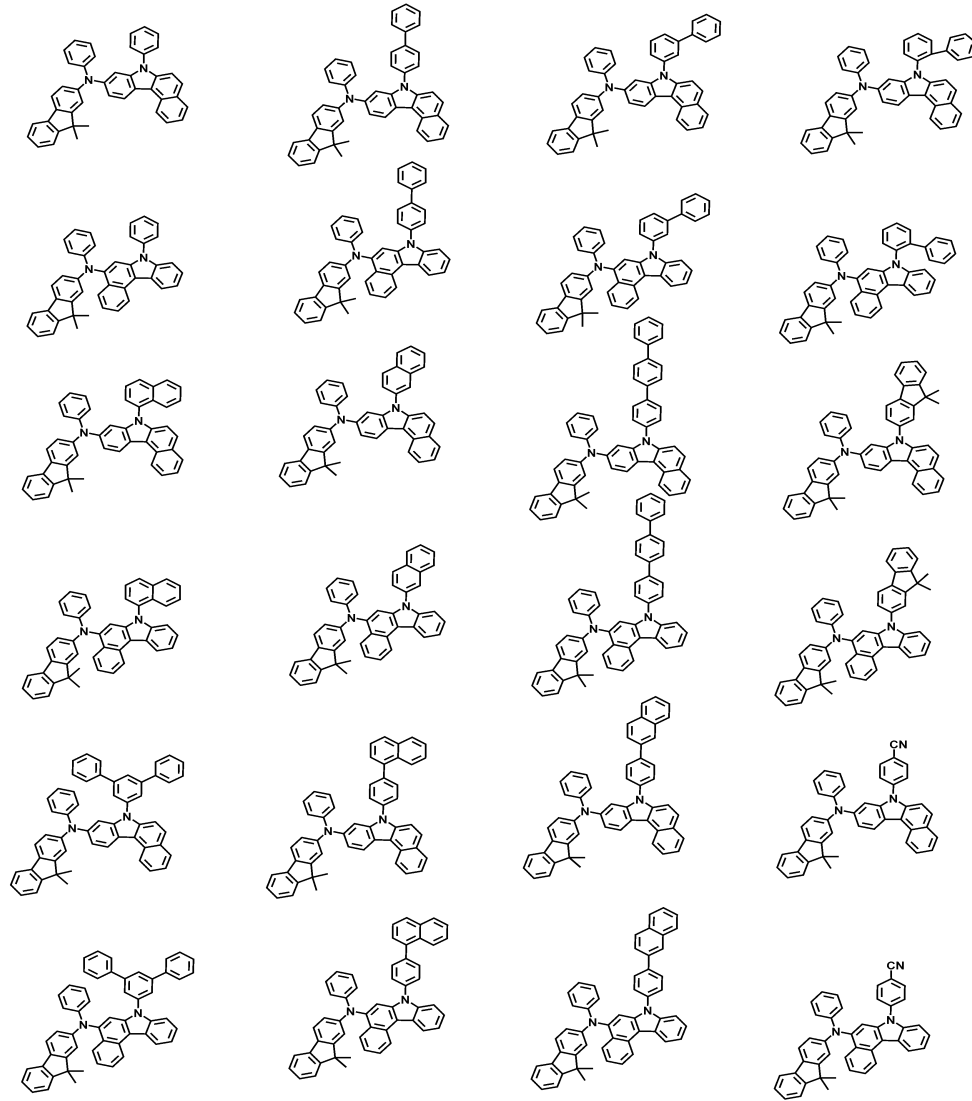


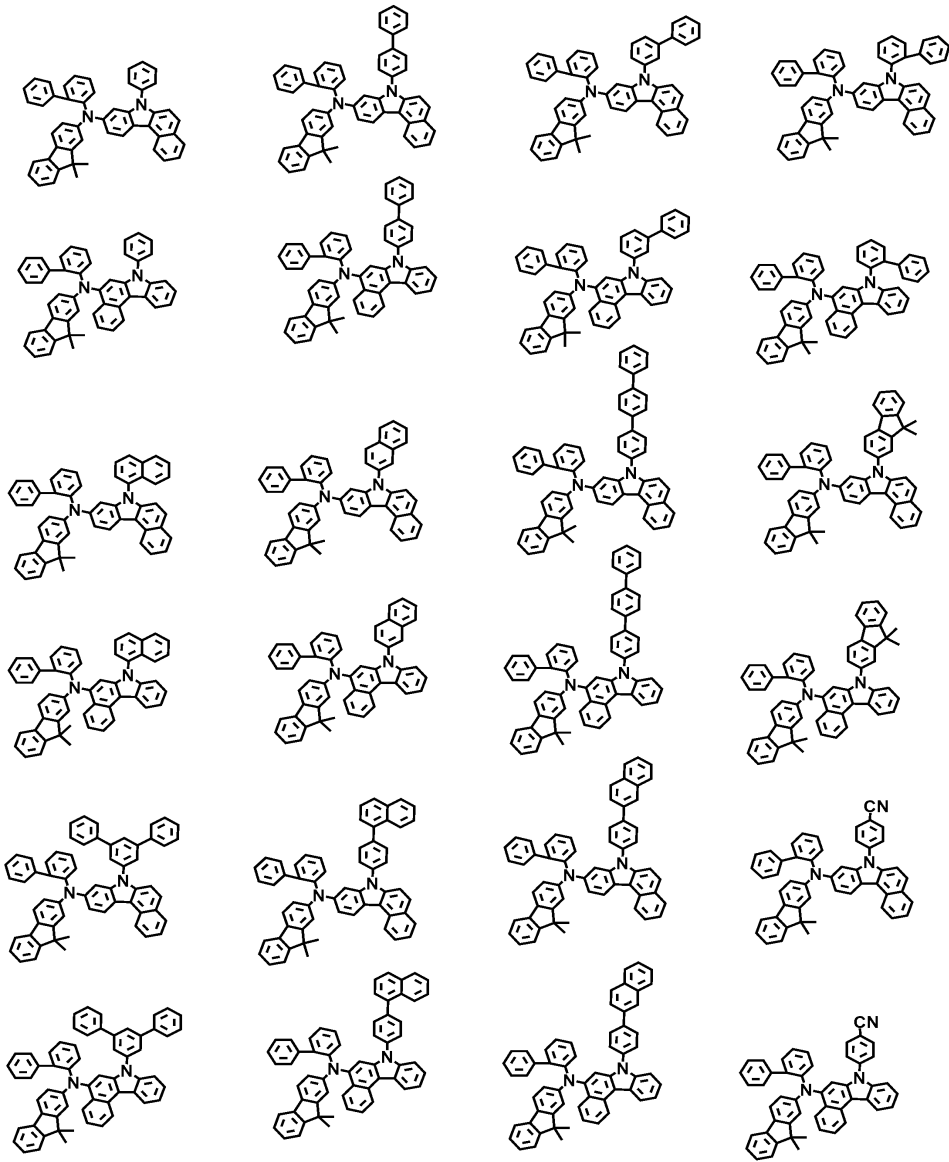


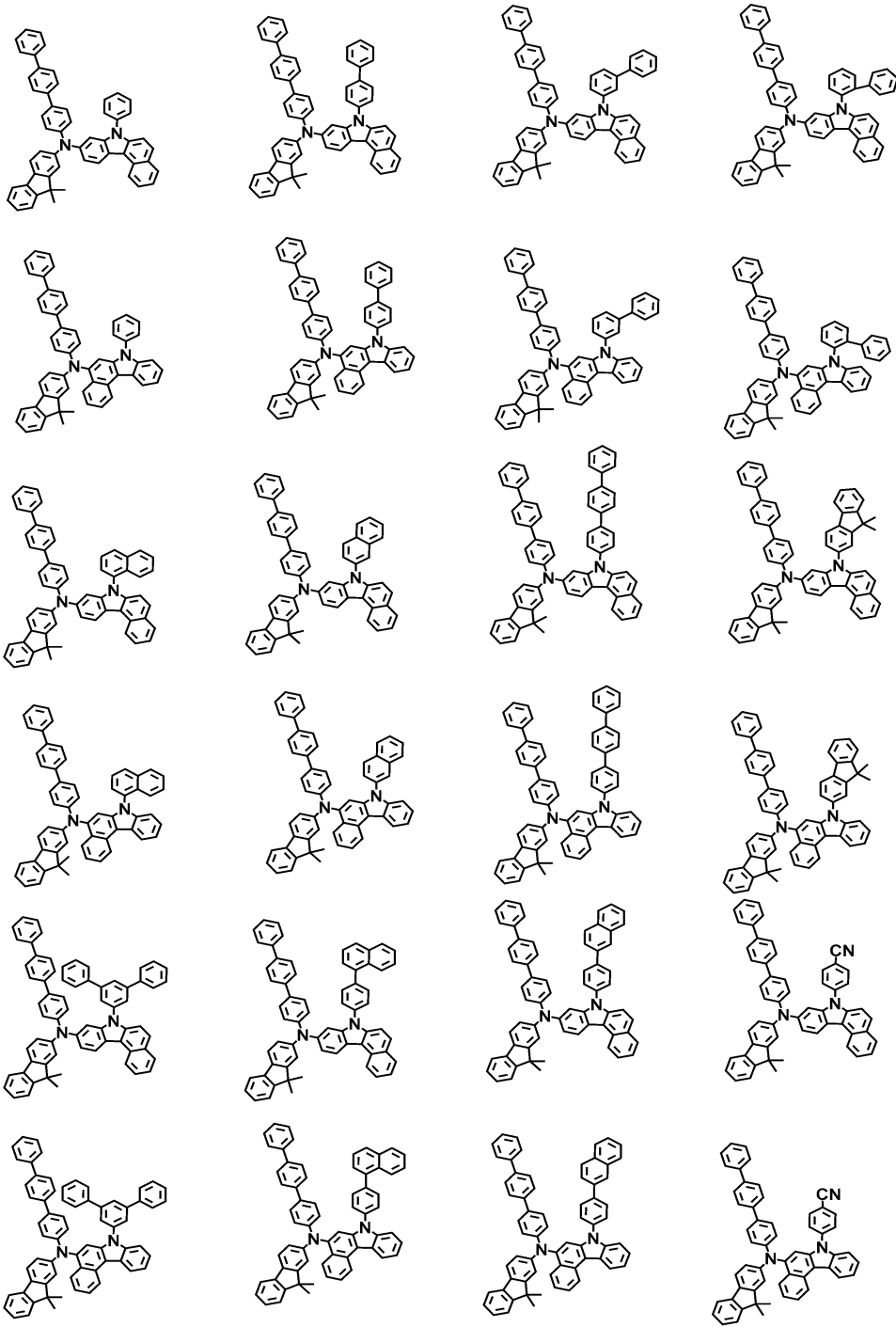


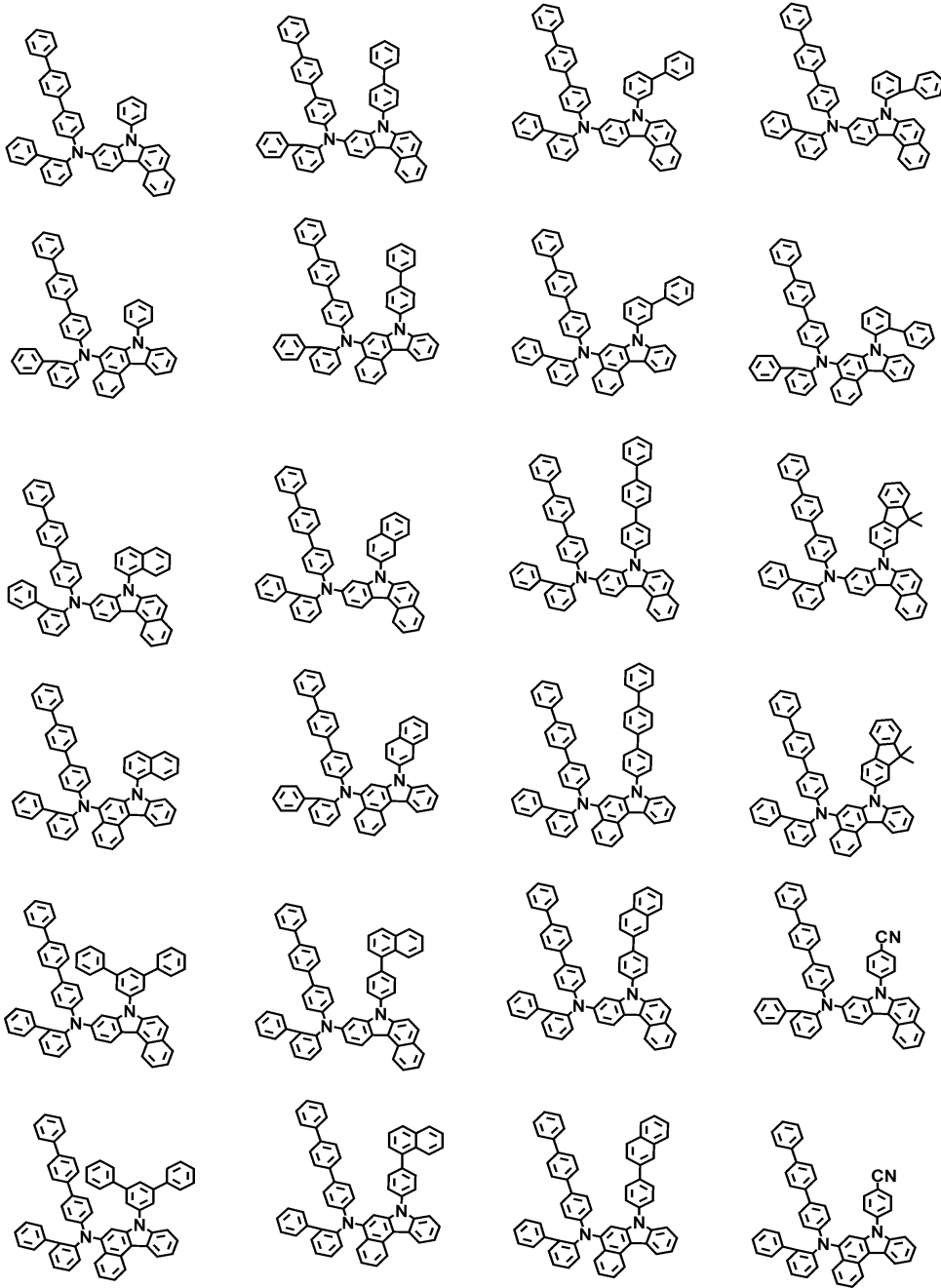


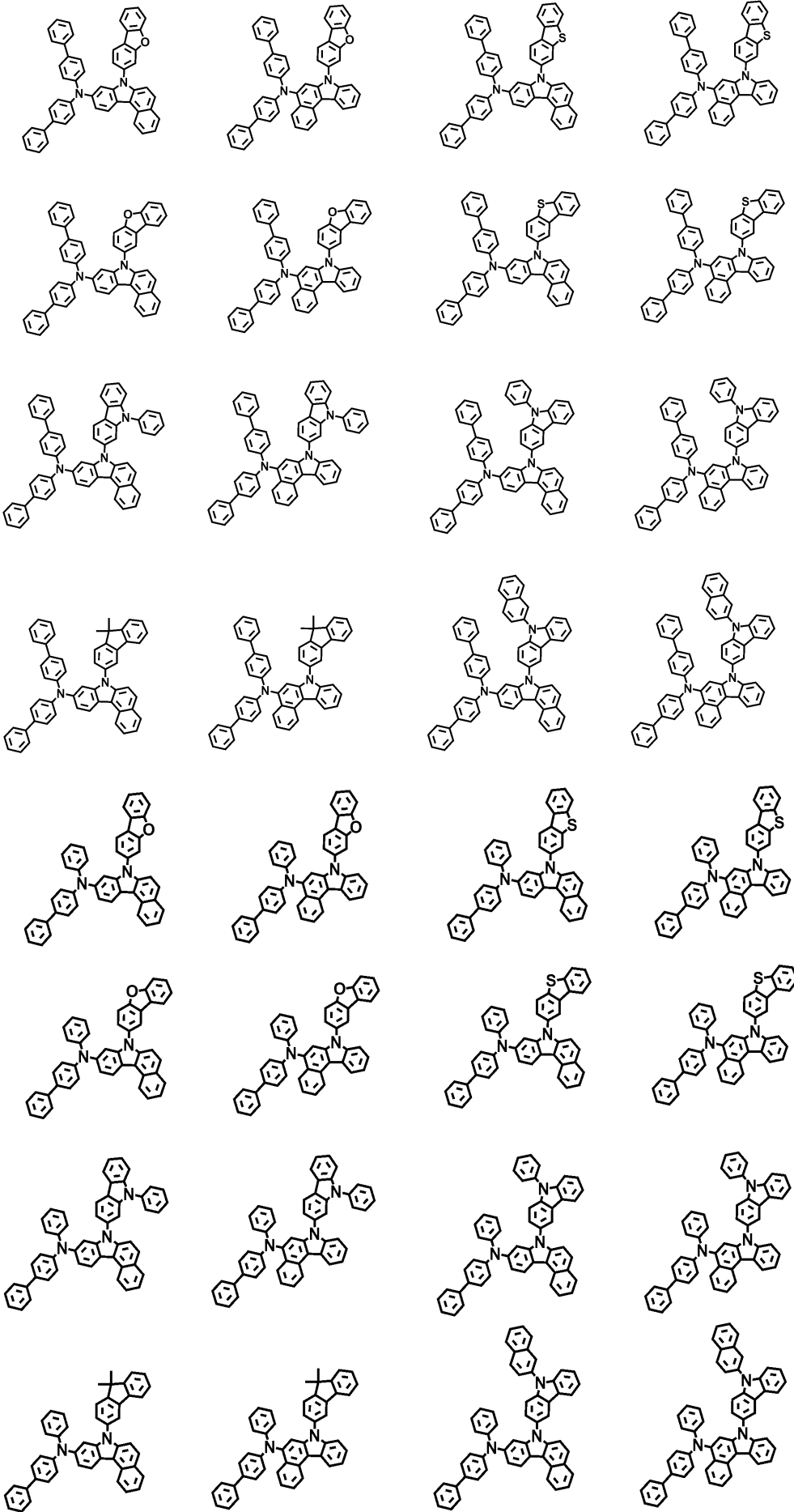


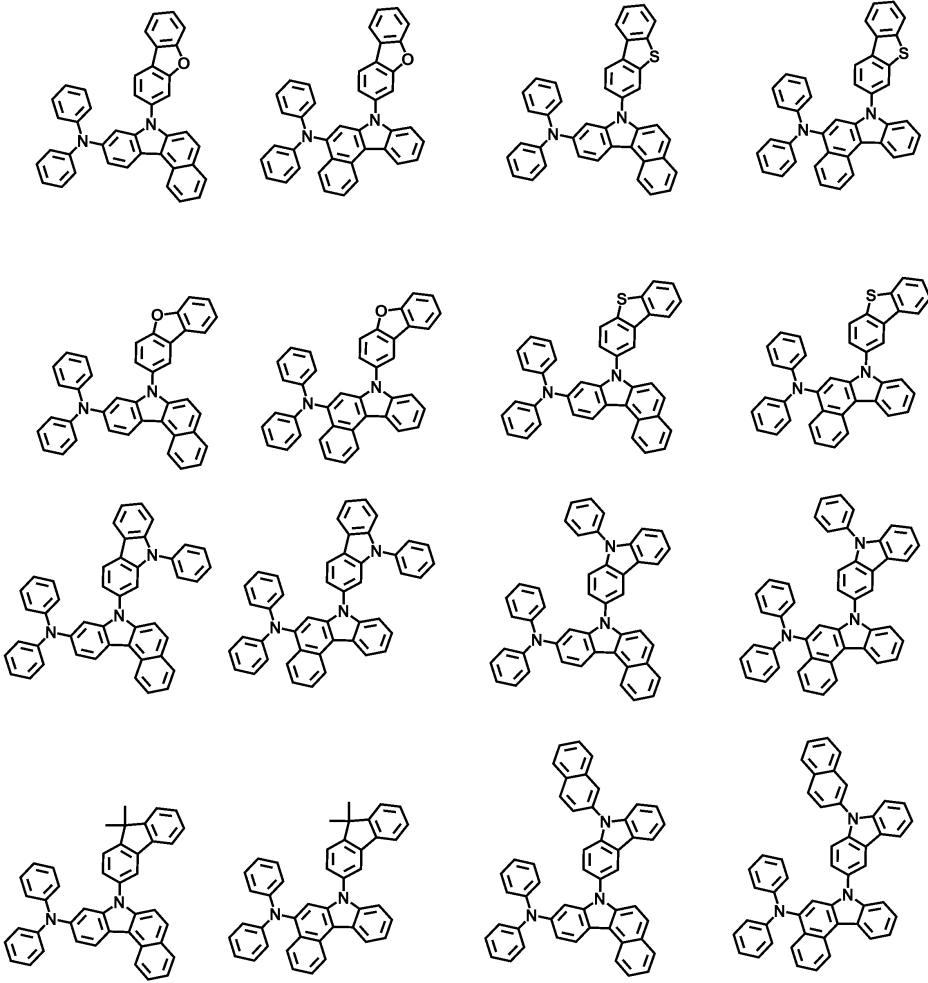


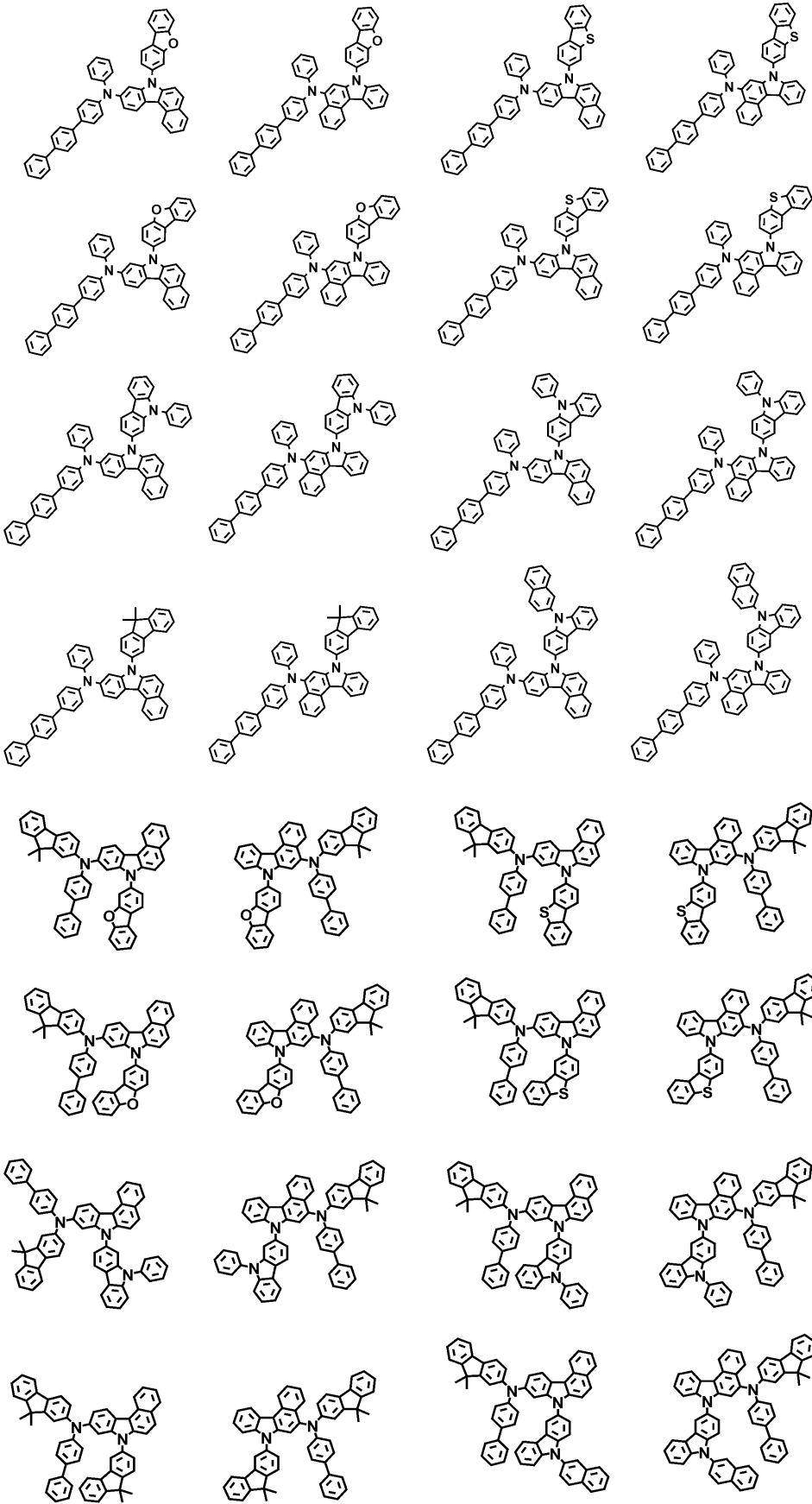


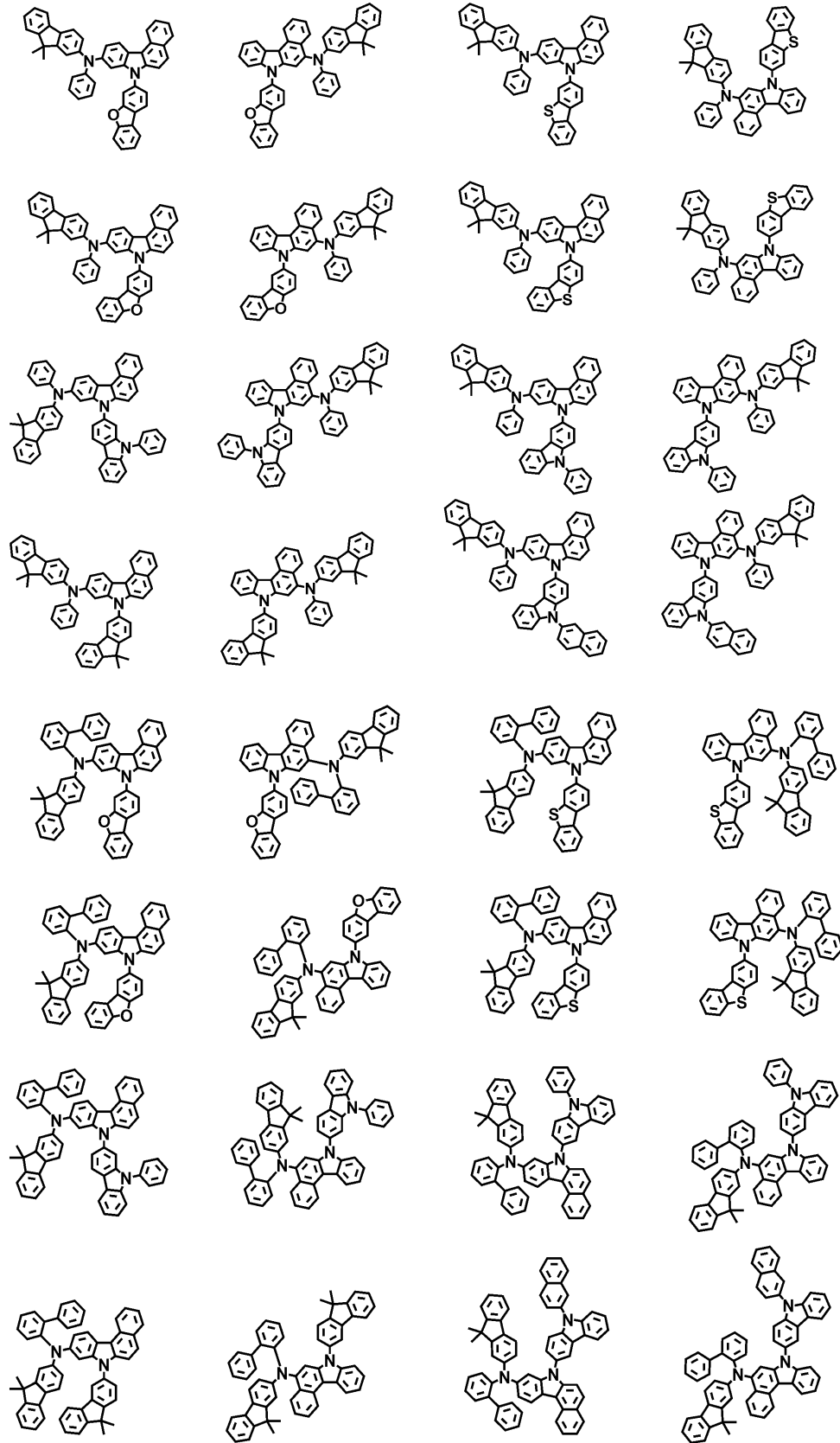


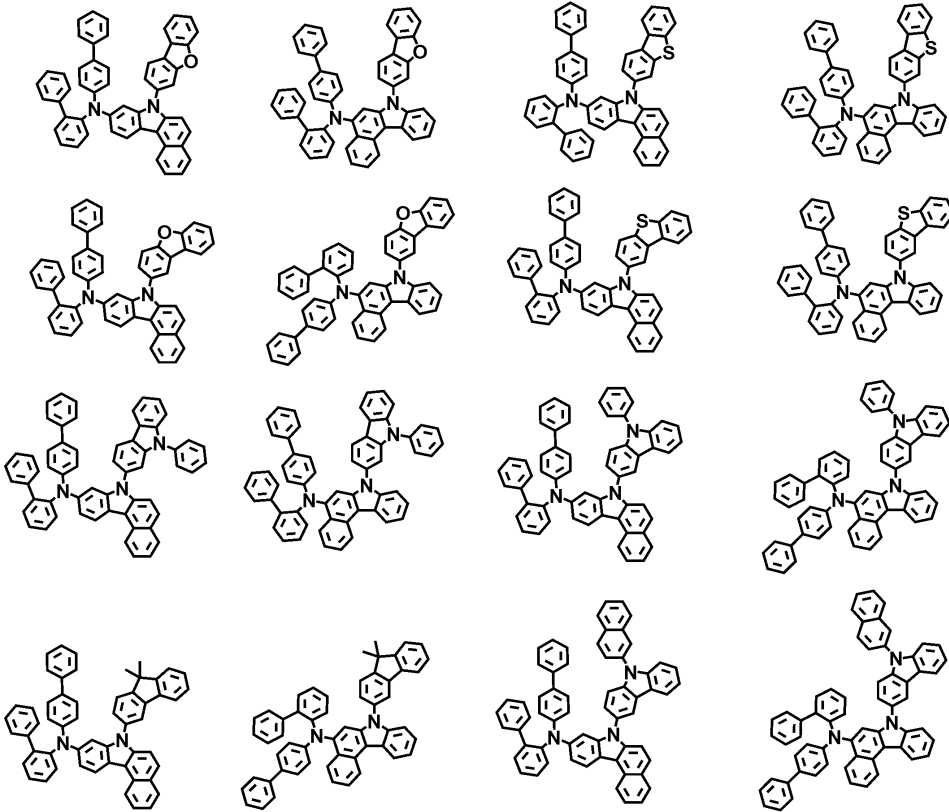


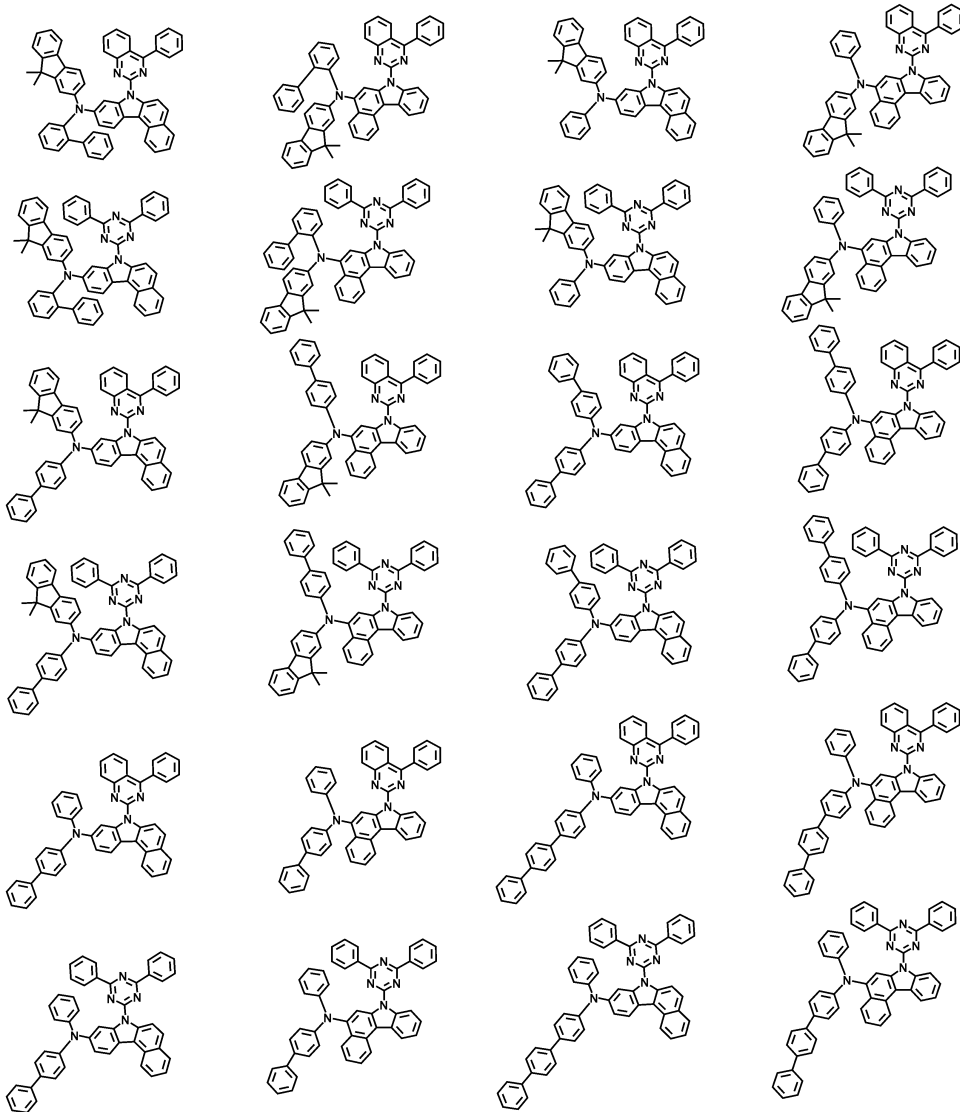












**청구항 12**

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 청구항 1 내지 11의 함질소 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

**청구항 13**

청구항 12에 있어서, 상기 함질소 화합물을 포함하는 유기물층은 정공주입층, 정공수송층 또는 정공 주입과 정공 수송을 동시에 하는 층인 것인 유기 발광 소자.

**청구항 14**

청구항 12에 있어서, 상기 함질소 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층인 것인 유기 발광 소자.

**청구항 15**

청구항 12에 있어서, 상기 함질소 화합물을 포함하는 유기물층은 전자저지층인 것인 유기 발광 소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

본 명세서는 함질소 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

[0001]

**배경 기술**

[0002] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 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.

[0003] 상기와 같은 유기 발광 소자를 위한 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0004] (특허문헌 0001) 국제 특허 출원 공개 제2003-012890호

**발명의 내용**

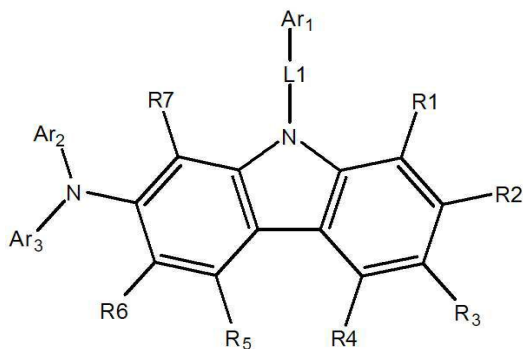
**해결하려는 과제**

[0005] 본 명세서에는 합질소 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자가 기재된다.

**과제의 해결 수단**

[0006] 본 명세서의 일 실시상태는 하기 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물을 제공한다:

[0007] [화학식 1]



[0008]  
[0009] 상기 화학식 1에서,

[0010] R1, R2 및 R7은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠계; 니트로기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,

[0011] R3과 R4가 결합하여 고리를 형성하거나, R5와 R6는 결합하여 고리를 형성하며, 고리를 형성하지 않는 기는 R1, R2 및 R7의 정의와 같고,

[0012] L1은 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이며,

[0013] Ar1 내지 Ar3은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 니트로기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

[0014] 또한, 본 명세서의 일 실시상태는 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 1의 합질소 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

**발명의 효과**

[0015] 본 명세서에 기재된 합질소 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있다. 적어도 하나의 실시상태에 따른 화합물은 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동전압 및/또는 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

[0016] 도 1은 기관(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.  
 도 2는 기관 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자수송층(8) 및 음극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0017] 이하 본 명세서에 대하여 더욱 상세히 설명한다.

[0018] 본 명세서의 일 실시상태는 상기 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물을 제공한다.

[0019] 상기 치환기들의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0020] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 아민기; 실릴기; 포스핀 옥사이드기; 알킬기; 시클로알킬기; 알케닐기; 아릴기; 헤테로고리기; 아르알킬기; 아르알케닐기; 알킬아릴기; 알킬아민기; 헤테로아릴아민기; 및 아릴아민기로 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 바이페닐기일 수 있다. 즉, 바이페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다.

[0021] 본 명세서에 있어서, 할로젠기는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 될 수 있다.

[0022] 본 명세서에 있어서, 아민기는 -NH<sub>2</sub>; 모노알킬아민기; 디알킬아민기; N-알킬아릴아민기; 모노아릴아민기; 디아릴아민기; N-아릴헤테로아릴아민기; N-알킬헤테로아릴아민기, 모노헤테로아릴아민기 및 디헤테로아릴아민기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으며, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 내지 30인 것이 바람직하다. 아민기의 구체적인 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 에틸아민기, 디에틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 바이페닐아민기, 안트라세닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐아민기, 디톨릴아민기, N-페닐톨릴아민기, 트리페닐아민기, N-페닐바이페닐아민기; N-페닐나프틸아민기; N-바이페닐나프틸아민기; N-나프틸플루오레닐아민기; N-페닐페난트레닐아민기; N-바이페닐페난트레닐아민기; N-페닐플루오레닐아민기; N-페닐터페닐아민기; N-페난트레닐플루오레닐아민기; N-바이페닐플루오레닐아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0023] 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-메틸펜틸, 2-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 1-메틸헥실, 시클로헵틸메틸, 시클로헥틸메틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸-프로필, 1,1-디메틸-프로필, 이소헥실, 4-메틸헥실, 5-메틸헥실 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0024] 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 있

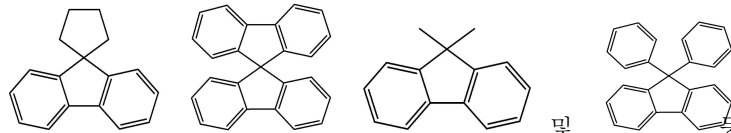
나 이들에 한정되지 않는다.

[0025] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 일 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 6이다. 구체적으로 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 3-메틸시클로펜틸, 2,3-디메틸시클로펜틸, 시클로헥실, 3-메틸시클로헥실, 4-메틸시클로헥실, 2,3-디메틸시클로헥실, 3,4,5-트리메틸시클로헥실, 4-tert-부틸시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0026] 본 명세서에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0027] 본 명세서에 있어서, 포스핀옥사이드기는 구체적으로 디페닐포스핀옥사이드기, 디나프틸포스핀옥사이드 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0028] 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, 바이페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0029] 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우, , , 및 등이 될 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0030] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리기는 이종 원소로 O, N, S, Si 및 Se 중 1개 이상을 포함하는 헤테로고리기로, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 헤테로고리기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딘기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난쓰롤린기(phenanthroline), 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0031] 본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 아르알케닐기, 알킬아릴기, 아릴아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0032] 본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 알킬아릴기, 알킬아민기 중 알킬기는 전술한 알킬기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0033] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민 중 헤테로아릴은 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0034] 본 명세서에 있어서, 아르알케닐기 중 알케닐기는 전술한 알케닐기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0035] 본 명세서에 있어서, 아릴렌은 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0036] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴렌은 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0037] 본 명세서에 있어서, 서로 결합하여 고리를 형성한다는 의미는 인접하는 기가 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 지방족 탄화수소고리; 치환 또는 비치환된 방향족 탄화수소고리; 치환 또는 비치환된 지방족 헤테로고리; 또는 치환 또는 비치환된 방향족 헤테로고리를 형성하는 것을 의미한다.

[0038] 본 명세서에 있어서, 지방족 탄화수소고리란 방향족이 아닌 고리로서 탄소와 수소 원자로만 이루어진 고리를 의

미한다.

[0039] 본 명세서에 있어서, 방향족 탄화수소고리의 예로는 벤젠, 나프탈렌, 안트라센 등이 있으나 이들에만 한정되는 것은 아니다.

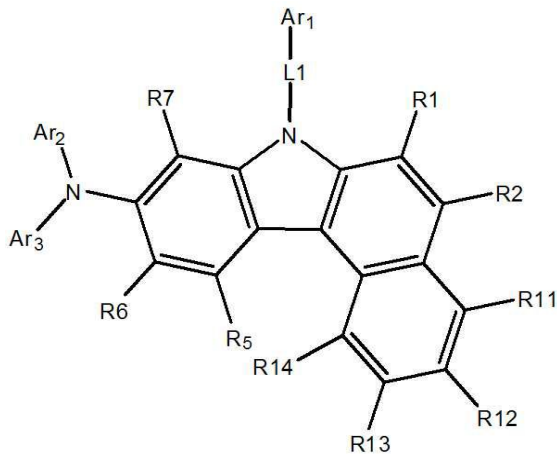
[0040] 본 명세서에 있어서, 지방족 헤테로고리란 헤테로 원자로 중 1개 이상을 포함하는 지방족 고리를 의미한다.

[0041] 본 명세서에 있어서, 방향족 헤테로고리란 헤테로 원자 중 1개 이상을 포함하는 방향족 고리를 의미한다.

[0042] 본 명세서에 있어서, 상기 지방족 탄화수소고리, 방향족 탄화수소고리, 지방족 헤테로고리 및 방향족 헤테로고리는 단환 또는 다환일 수 있다.

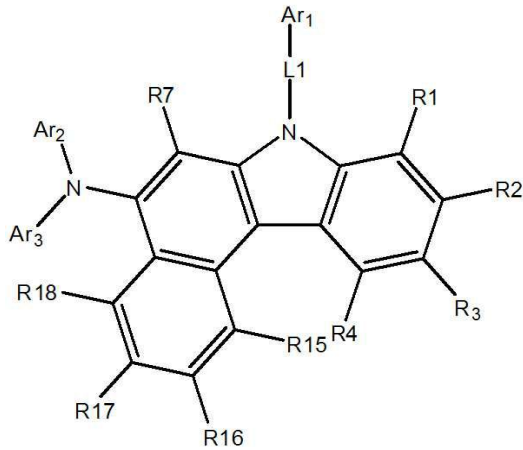
[0043] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 3으로 표시된다.

[0044] [화학식 2]



[0045]

[0046] [화학식 3]



[0047]

[0048] 상기 화학식 2 및 3에 있어서,

[0049] 상기 R1 내지 R7, L1 및 Ar1 내지 Ar3는 화학식 1에서의 정의와 같고,

[0050] R11 내지 R18은 상기 R1, R2 및 R7의 정의와 같다.

[0051] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1 내지 Ar3은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 니트로기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리이다.

[0052] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 L1은 직접결합; 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 나프틸렌기; 치환 또는 비치환된 페노티아진기(phenothiazine); 치환 또는 비치환된 페녹사이진기(phenoxazine); 치환 또는 비치환된 카바졸기; 치환 또는 비치환된 벤조카바졸기; 치환 또는 비치환된 벤즈이미

다졸기; 치환 또는 비치환된 티오펜기; 치환 또는 비치환된 퓨란기; 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기; 치환 또는 비치환된 트리아진기; 치환 또는 비치환된 피리딘; 치환 또는 비치환된 피리미딘; 치환 또는 비치환된 퀴놀린기; 또는 치환 또는 비치환된 퀴나졸린기이다.

[0053] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 L1은 직접결합; 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 페노티아진기(phenothiazine); 치환 또는 비치환된 페녹사이진(phenoxazine); 치환 또는 비치환된 카바졸기; 치환 또는 비치환된 벤조카바졸기; 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸기; 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기; 치환 또는 비치환된 트리아진기; 또는 치환 또는 비치환된 퀴나졸린기이다.

[0054] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 L1은 직접결합; 페닐렌기; 나프틸렌기; 페노티아진기(phenothiazine); 페녹사이진기(phenoxazine); 카바졸기; 벤조카바졸기; 벤즈이미다졸기; 티오펜기; 퓨란기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 트리아진기; 피리딘; 피리미딘; 퀴놀린기; 또는 퀴나졸린기이다.

[0055] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 L1은 직접결합; 페닐렌기; 페노티아진기(phenothiazine); 페녹사이진(phenoxazine); 카바졸기; 벤조카바졸기; 벤즈이미다졸기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 트리아진기; 또는 퀴나졸린기이다.

[0056] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 L1은 직접결합; 페닐렌기; 카바졸기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 트리아진기; 또는 퀴나졸린기이다.

[0057] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, L1은 직접결합이다.

[0058] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 치환 또는 비치환된 아릴렌기이다.

[0059] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, L1은 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이다.

[0060] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, L1은 페닐렌기; 비페닐기; 터페닐기; 쿼터페닐기; 나프탈렌기; 안트라센기; 플루오렌기; 페난쓰렌기; 파이렌기; 또는 트리페닐렌기이다.

[0061] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, L1은 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 비페닐기; 치환 또는 비치환된 터페닐기; 치환 또는 비치환된 쿼터페닐기; 치환 또는 비치환된 나프탈렌기; 치환 또는 비치환된 안트라센기; 치환 또는 비치환된 플루오렌기; 치환 또는 비치환된 페난쓰렌기; 치환 또는 비치환된 파이렌기; 또는 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기이다.

[0062] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, L1은 치환 또는 비치환된 페노티아진기(phenothiazine); 치환 또는 비치환된 페녹사이진기(phenoxazine); 치환 또는 비치환된 카바졸기; 치환 또는 비치환된 벤조카바졸기; 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸기; 치환 또는 비치환된 티오펜기; 치환 또는 비치환된 퓨란기; 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기; 치환 또는 비치환된 트리아진기; 치환 또는 비치환된 피리딘; 치환 또는 비치환된 피리미딘; 치환 또는 비치환된 퀴놀린기; 또는 치환 또는 비치환된 퀴나졸린기이다.

[0063] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, L1은 페노티아진기(phenothiazine) 페녹사이진기(phenoxazine); 카바졸기; 벤조카바졸기; 벤즈이미다졸기; 티오펜기; 퓨란기 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 트리아진기; 피리딘; 피리미딘; 퀴놀린기; 또는 퀴나졸린기이다.

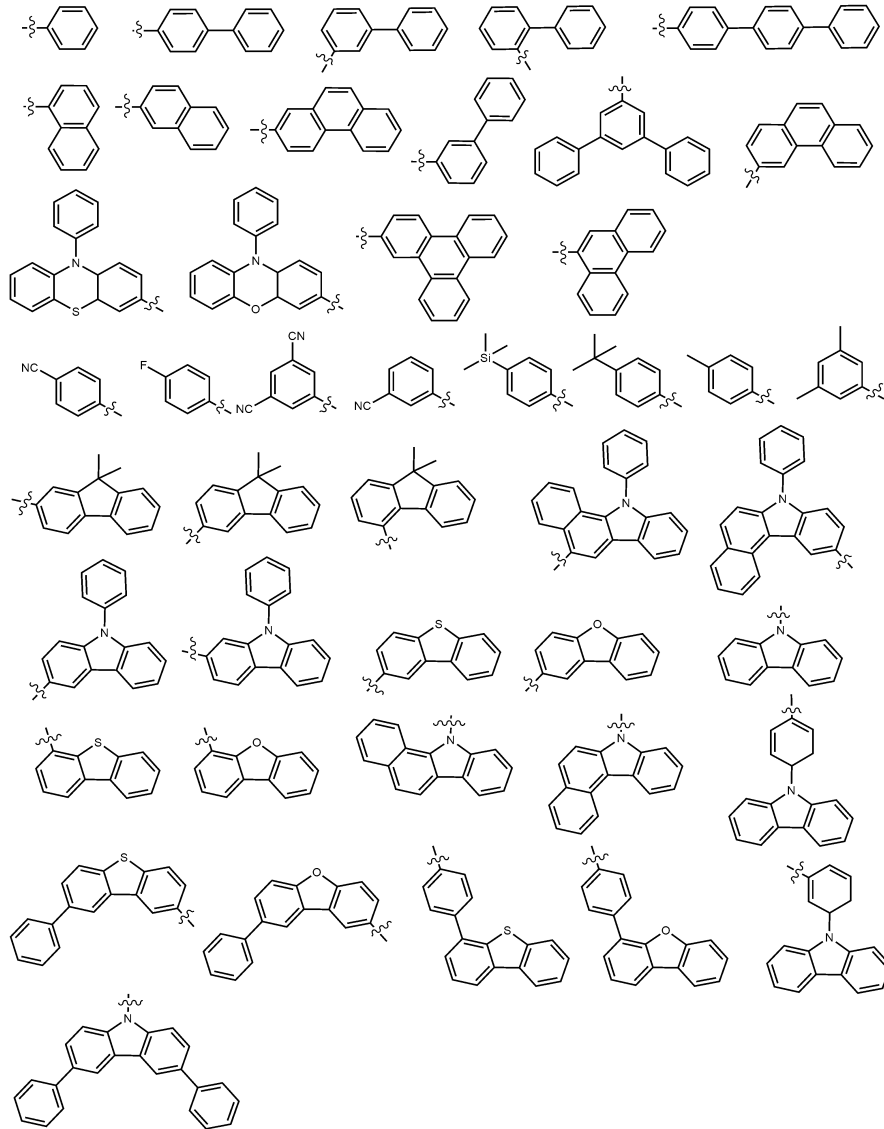
[0064] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 Ar<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 비페닐기; 치환 또는 비치환된 터페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 페난트렌기; 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기; 치환 또는 비치환된 플루오렌기; 치환 또는 비치환된 카바졸기; 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기; 치환 또는 비치환된 벤조나프토피란기; 치환 또는 비치환된 벤조나프토티오펜기; 치환 또는 비치환된 페노티아진기(phenothiazine); 치환 또는 비치환된 페녹사이진(phenoxazine); 치환 또는 비치환된 퀴나졸기; 치환 또는 비치환된 피리딘기; 치환 또는 비치환된 피리미딘기; 치환 또는 비치환된 트리아진기; 치환 또는 비치환된 페난쓰롤린기; 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸기; 치환 또는 비치환된 벤조티아졸기; 또는 치환 또는 비치환된 벤즈옥사졸기이다.

[0065] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 Ar<sub>1</sub>은 포스핀옥사이드기; 페닐기; 비페닐기; 터페닐기; 나프틸기; 페난트렌기; 트리페닐렌기; 플루오렌기; 카바졸기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 벤조나프토피란기; 벤조나프토티오펜기; 페노티아진기(phenothiazine); 페녹사이진(phenoxazine); 퀴나졸기; 피

리딘기; 피리미딘기; 트리아진기; 페난쓰롤린기; 벤조이미다졸기; 벤조티아졸기; 또는 벤즈옥사졸기이다.

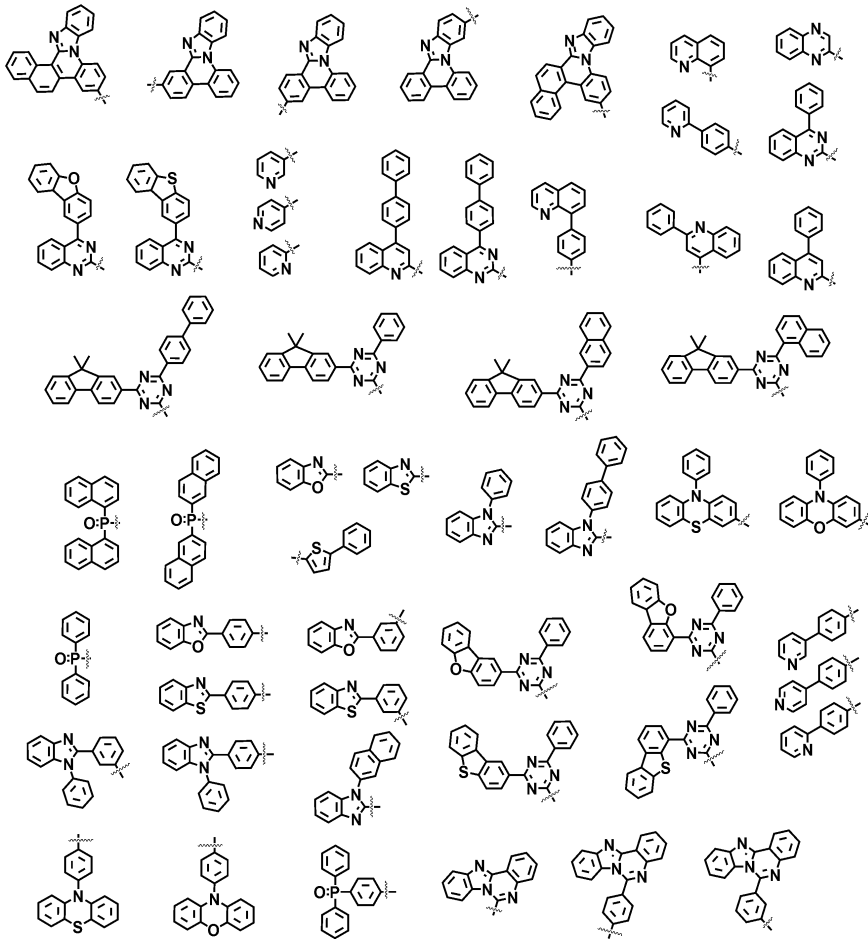
[0066] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 Ar<sub>1</sub>은 페닐기; 비시아노기, 실릴기, 알킬기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 터페닐기; 나프틸기; 플루오렌기; 아릴기로 치환 또는 비치환된 카바졸기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 아릴기로 치환 또는 비치환된 퀴나졸기; 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 트리아진기이다.

[0067] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 -L1-Ar<sub>1</sub>은 하기 구조식들 중에서 선택된다.



[0068]





[0071]

[0072]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리기이다.

[0073]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기이다.

[0074]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 비페닐기; 치환 또는 비치환된 터페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 페난트렌기; 치환 또는 비치환된 트레페닐렌기; 또는 치환 또는 비치환된 플루오렌기이다.

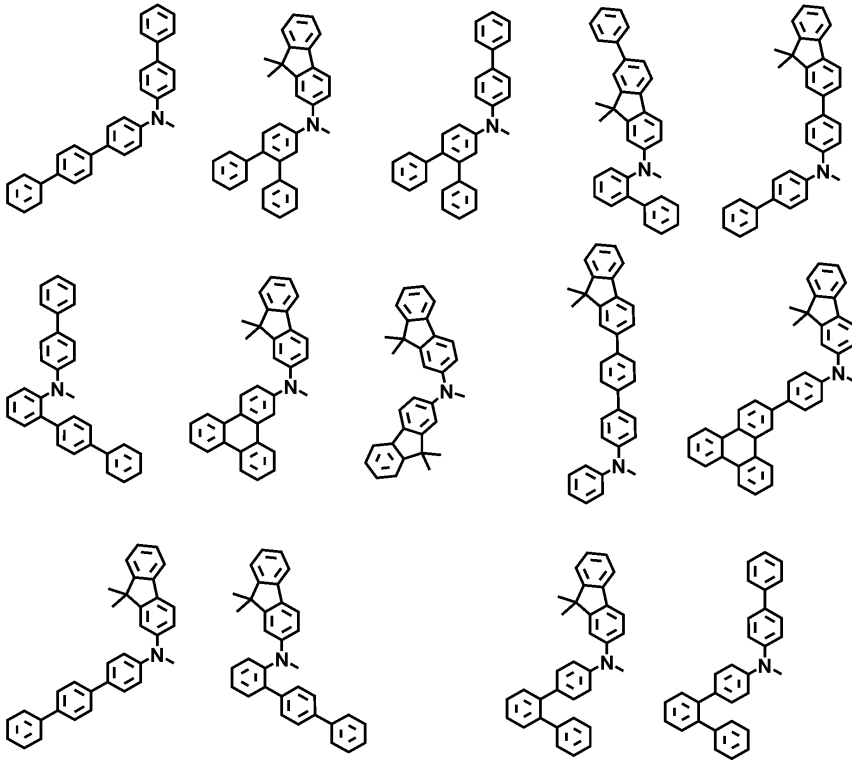
[0075]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 아릴기로 치환 또는 비치환된 비페닐기; 아릴기로 치환 또는 비치환된 터페닐기; 아릴기로 치환 또는 비치환된 나프틸기; 아릴기로 치환 또는 비치환된 페난트렌기; 아릴기로 치환 또는 비치환된 트레페닐렌기; 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 플루오렌기이다.

[0076]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1에서 Ar<sub>2</sub> 및 Ar<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 페닐기; 비페닐기; 터페닐기; 나프틸기; 페난트렌기; 트리페닐렌기; 또는 플루오렌기이다.





[0079]

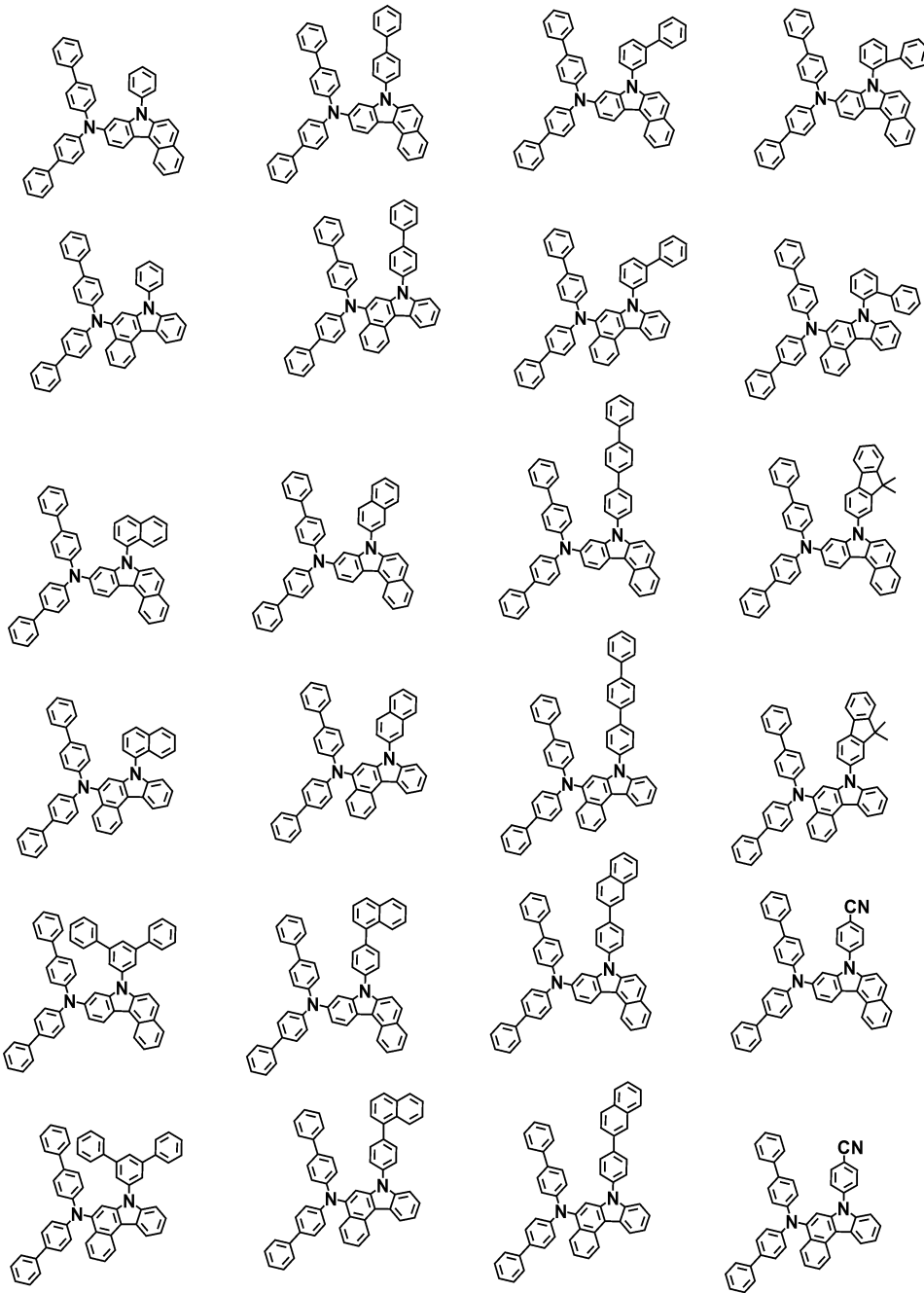
[0080]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1, R2 및 R7은 수소이고, 상기 R3와 R4 또는 R5와 R6 중 고리를 형성하지 않는 기는 수소이다.

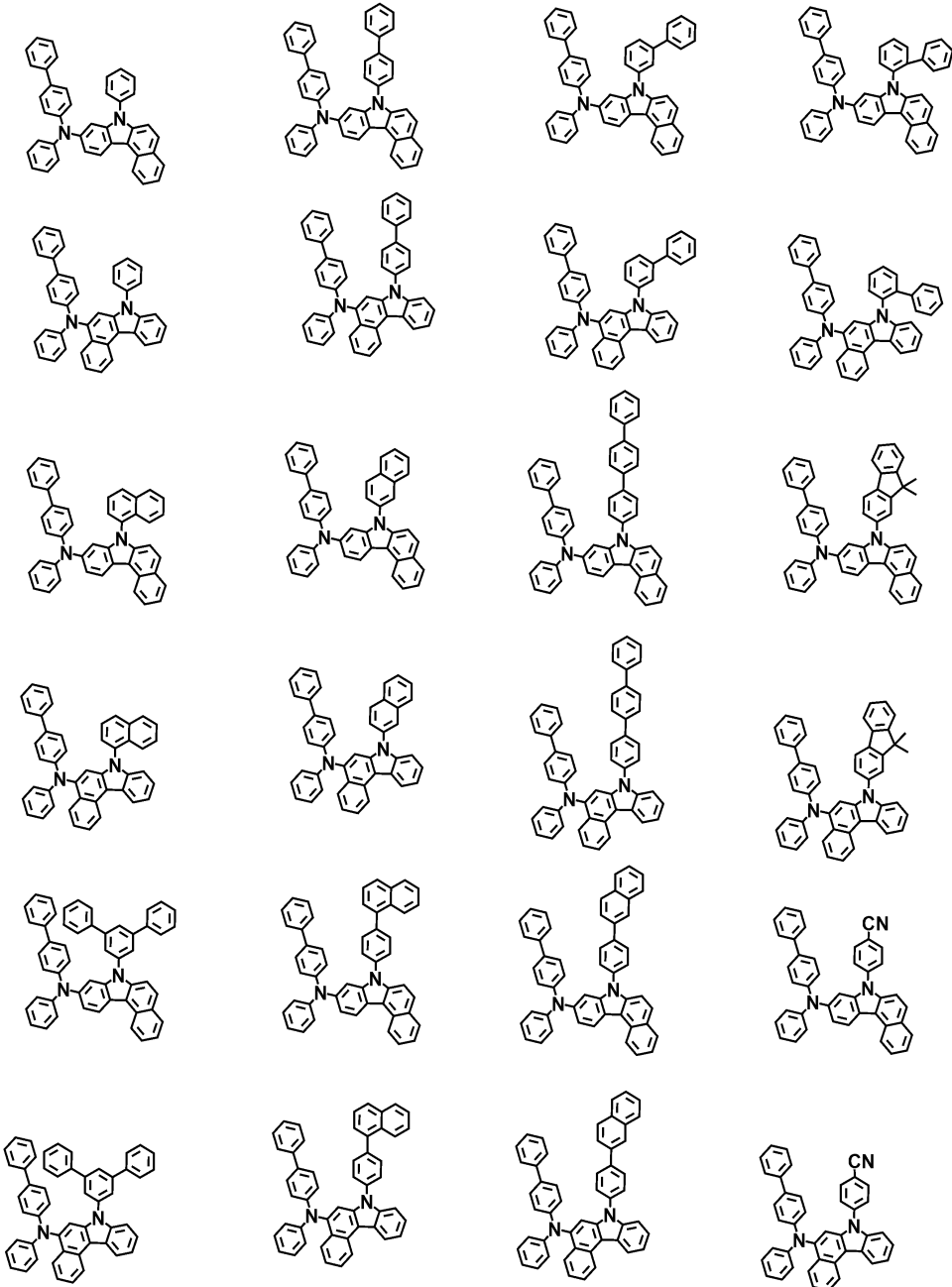
[0081]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R11 내지 R18은 수소이다.

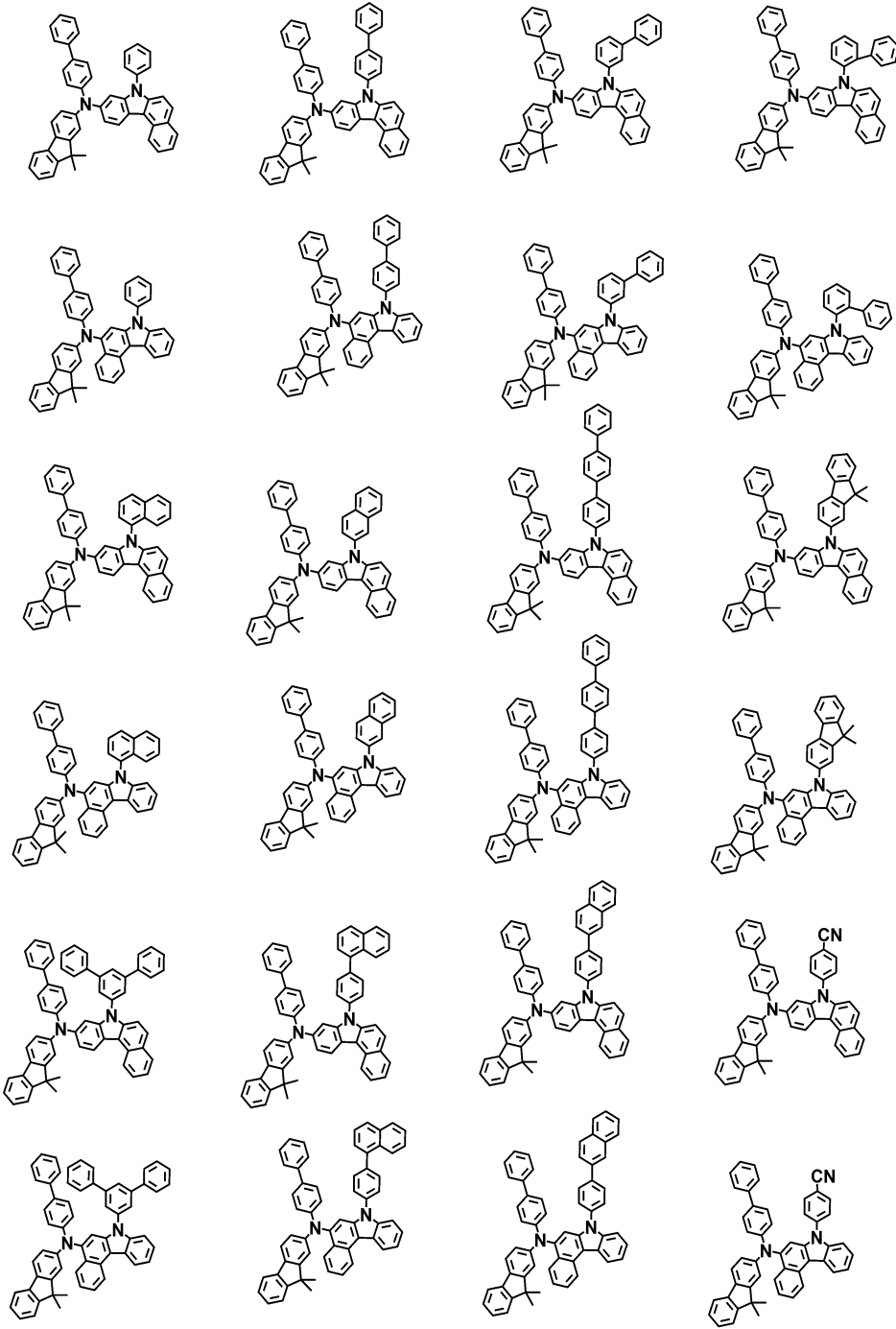
[0082] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 구조식들 중에서 선택될 수 있다.



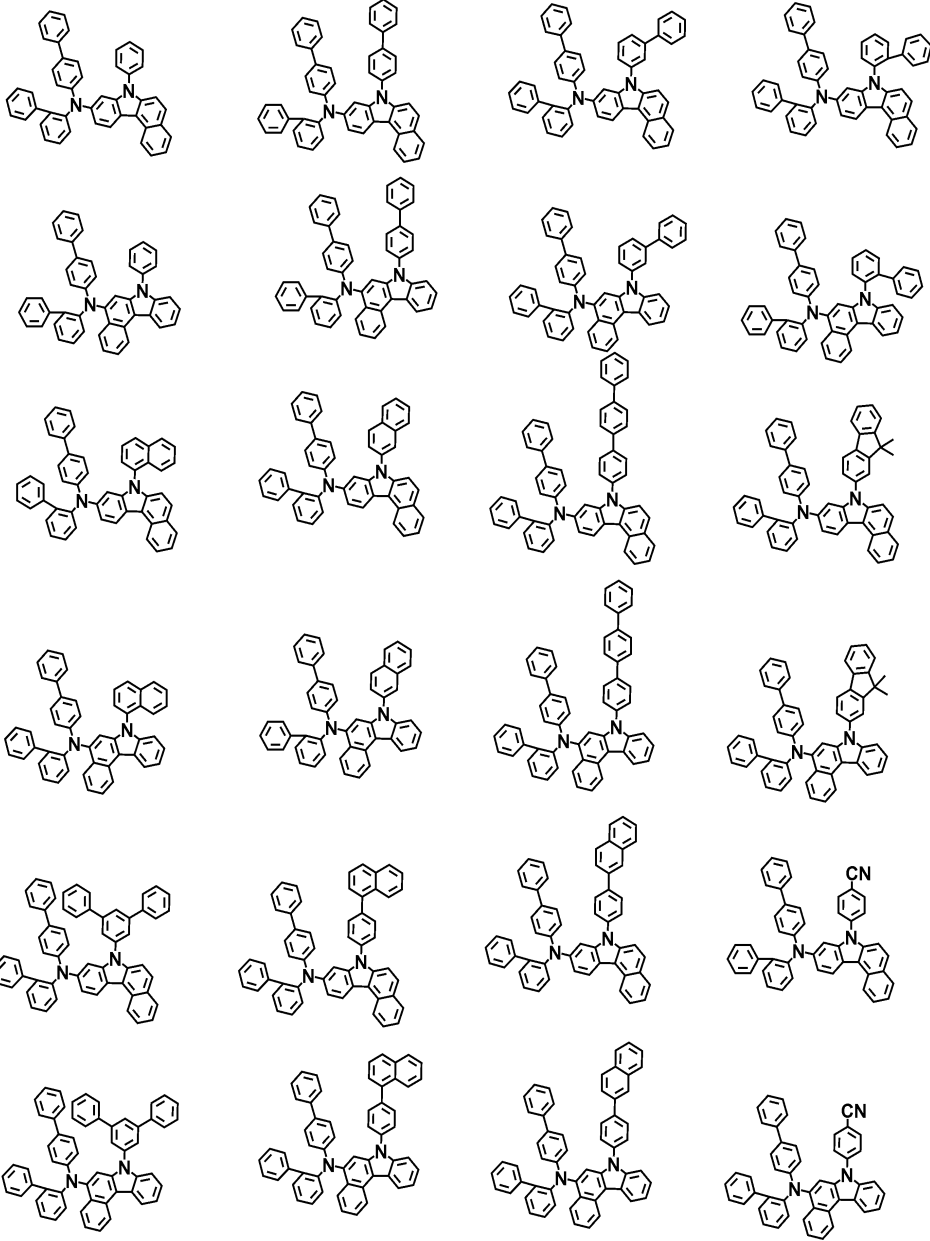
[0083]



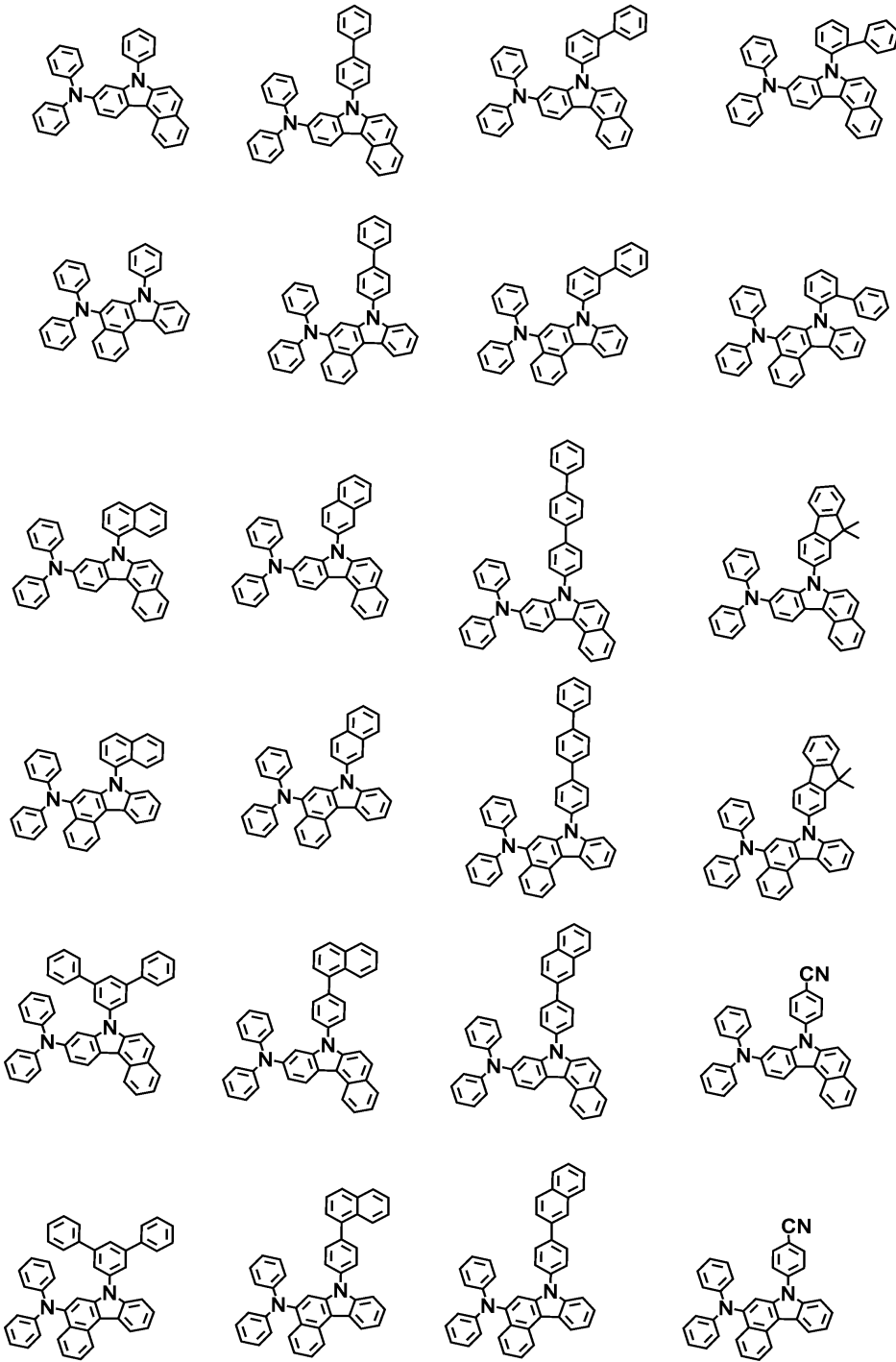
[0084]



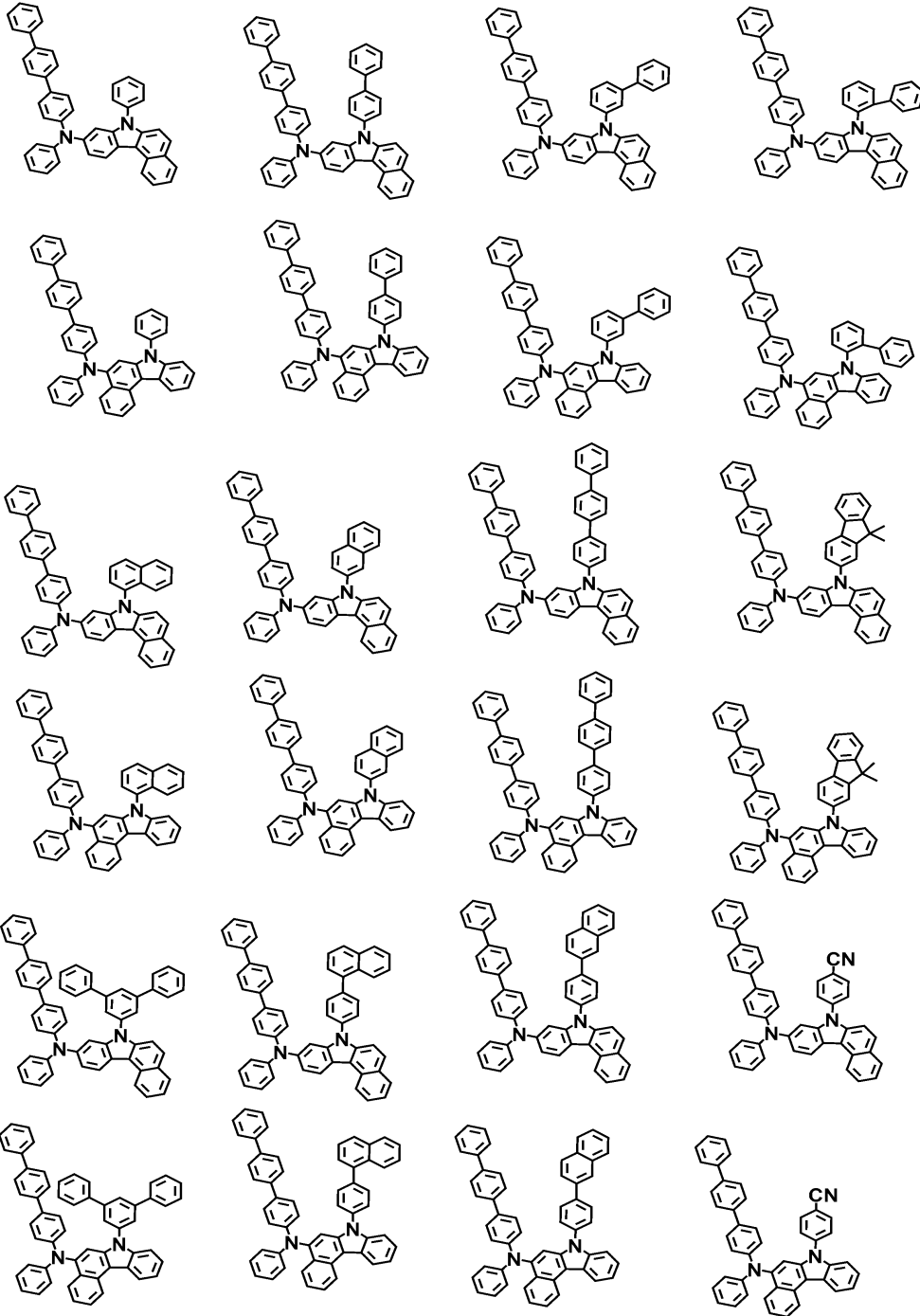
[0085]



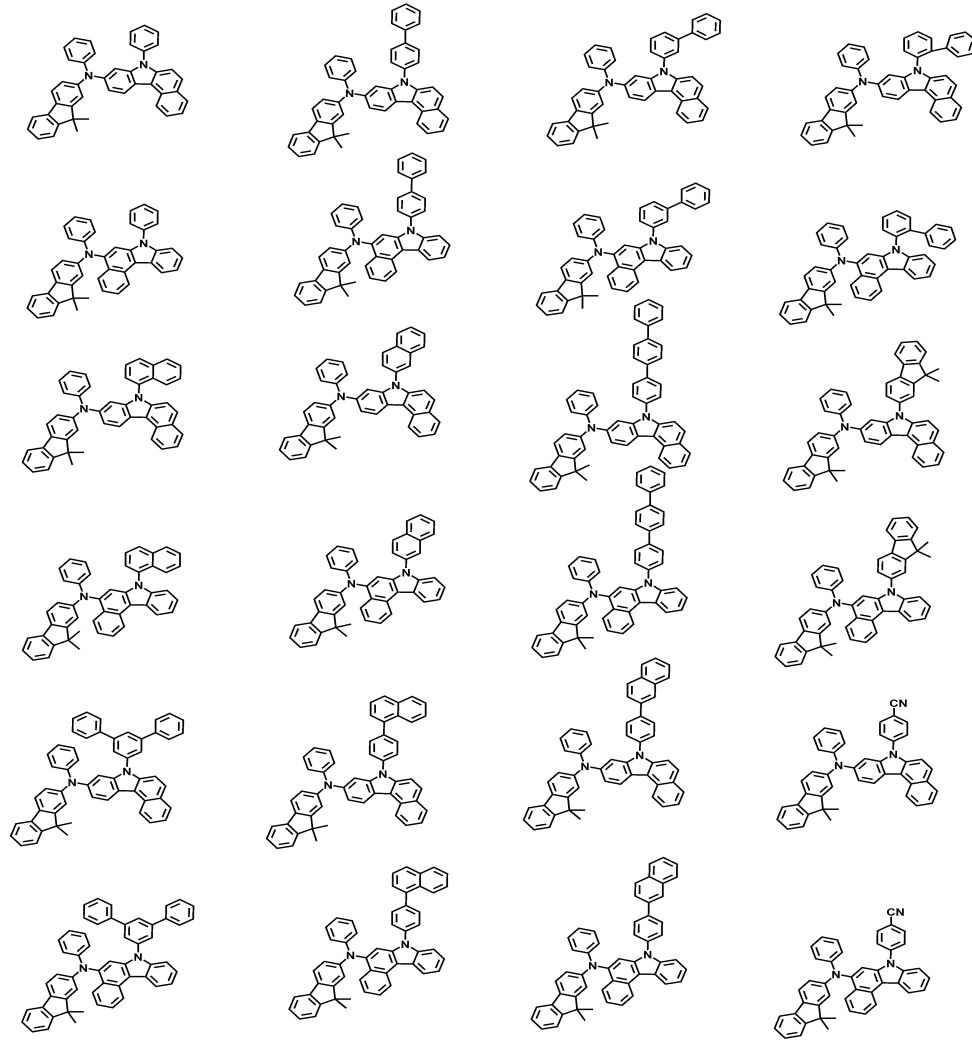
[0086]



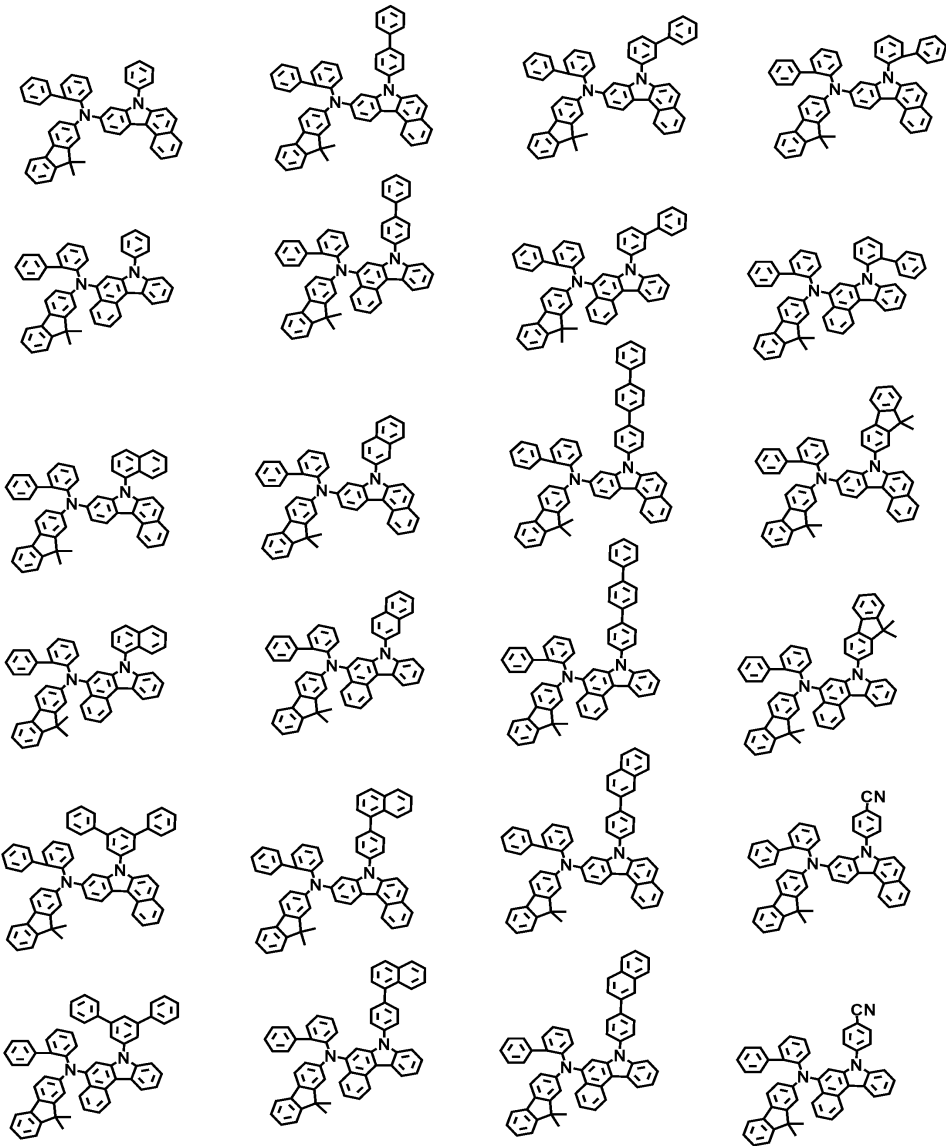
[0087]



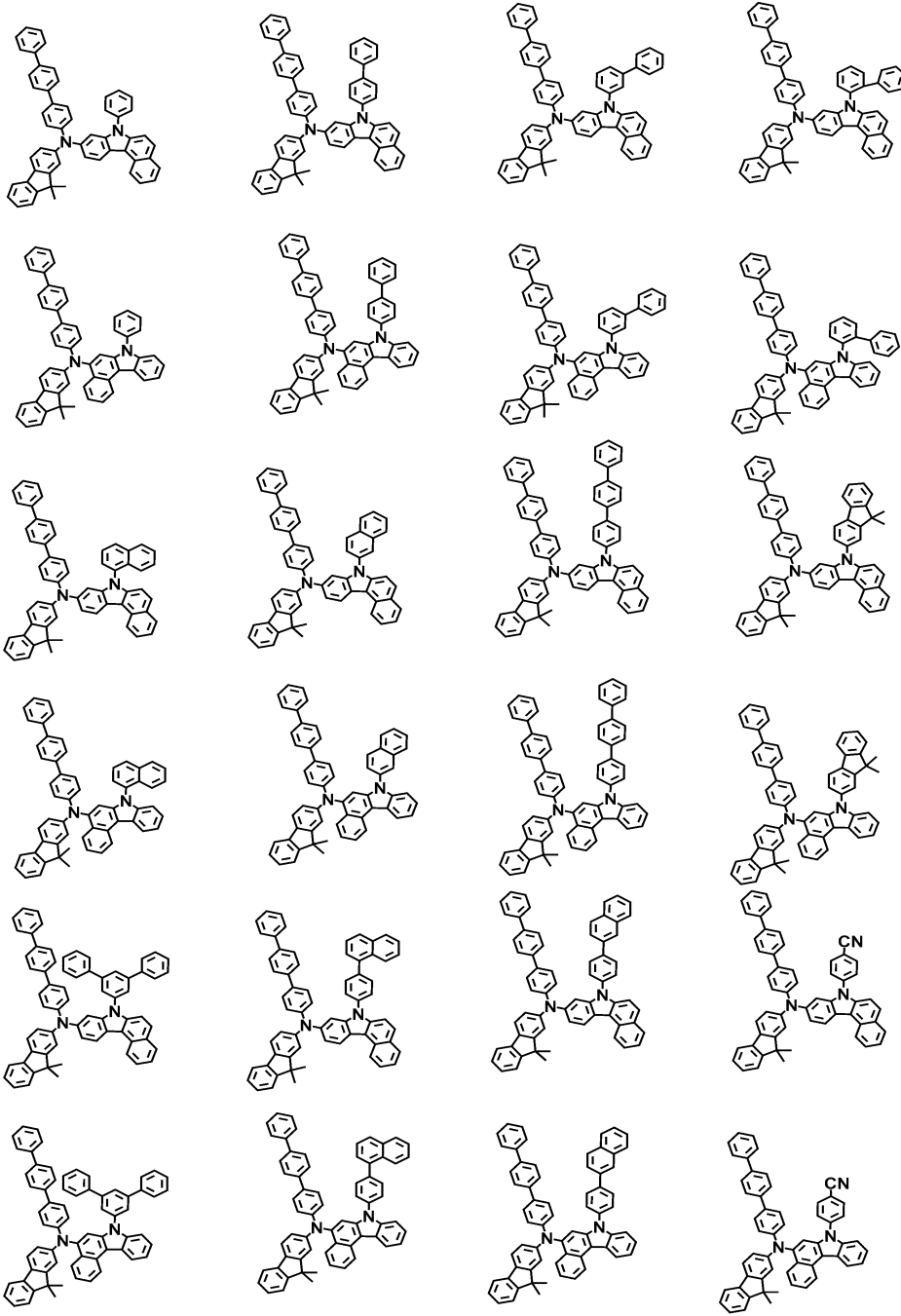
[0088]



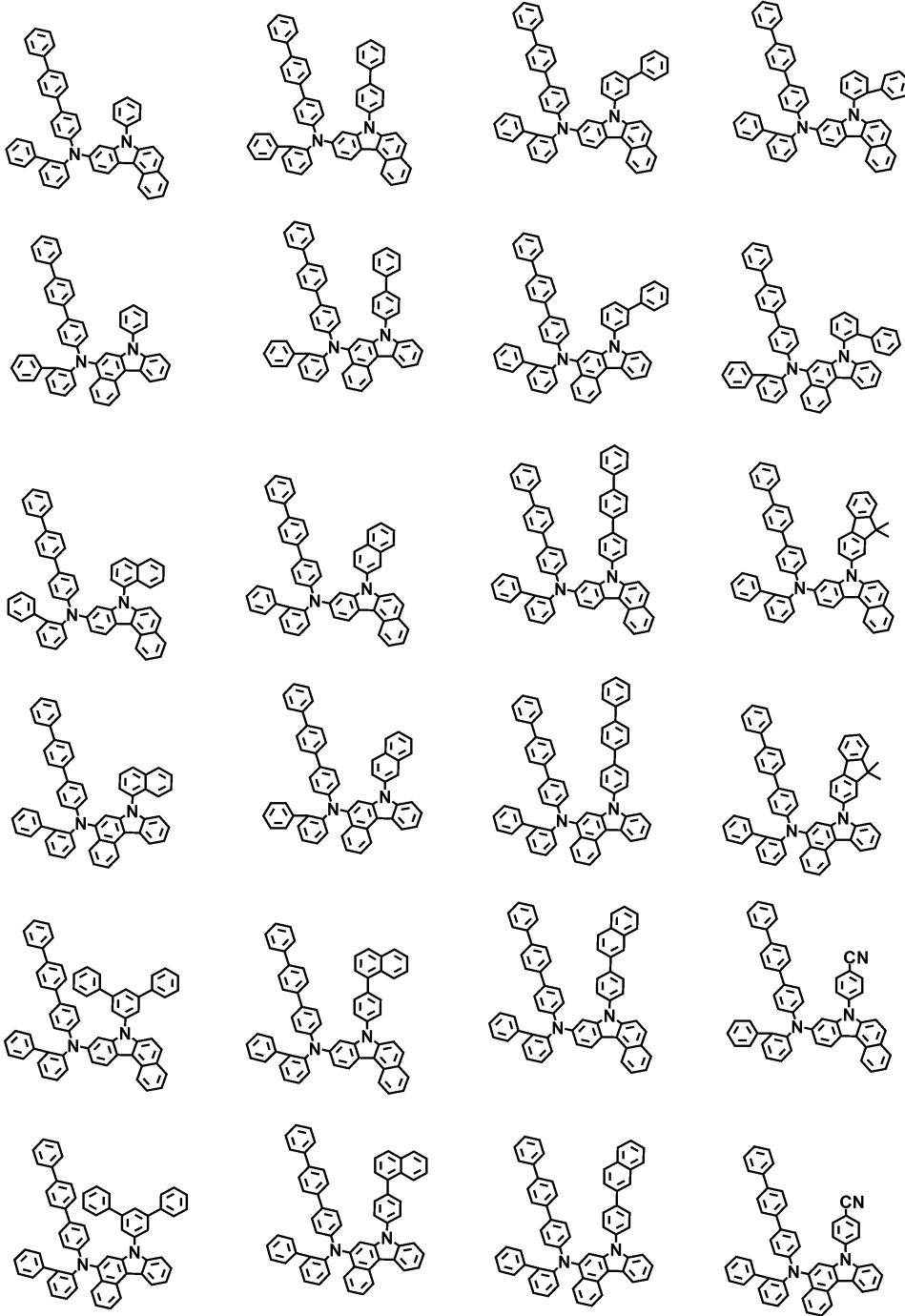
[0089]



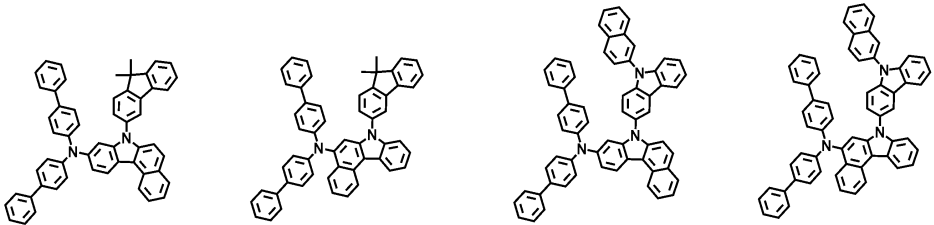
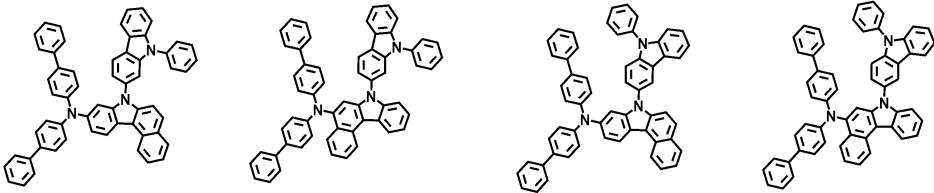
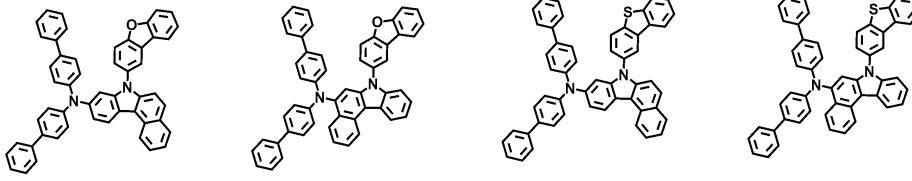
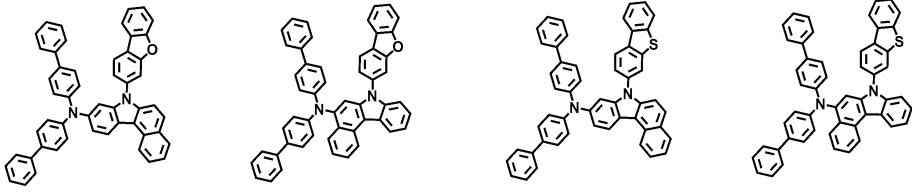
[0090]



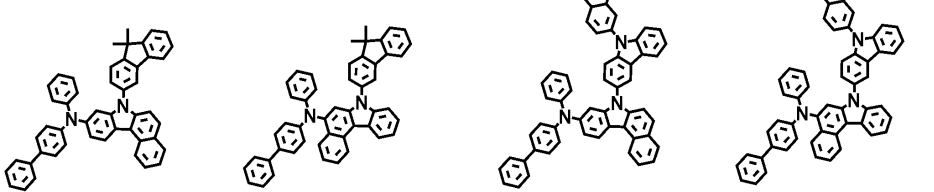
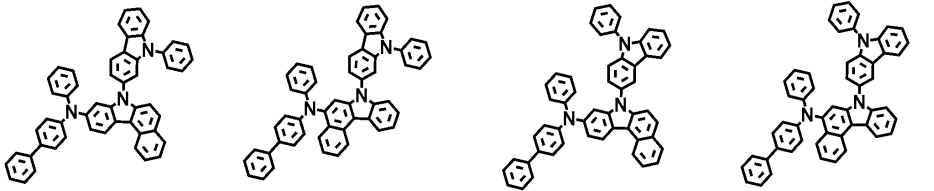
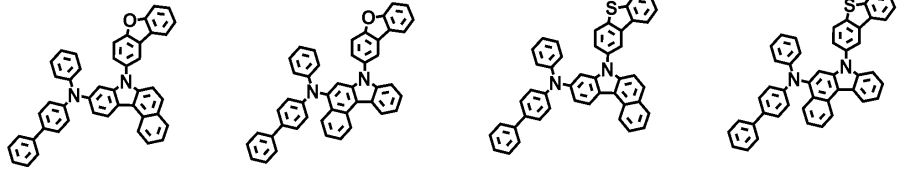
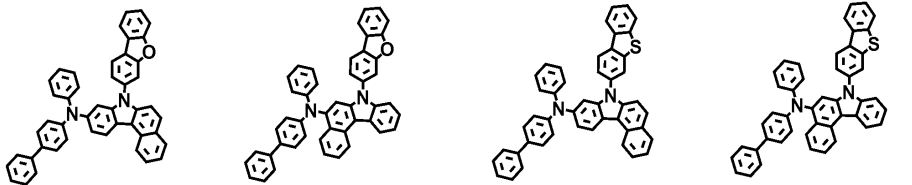
[0091]



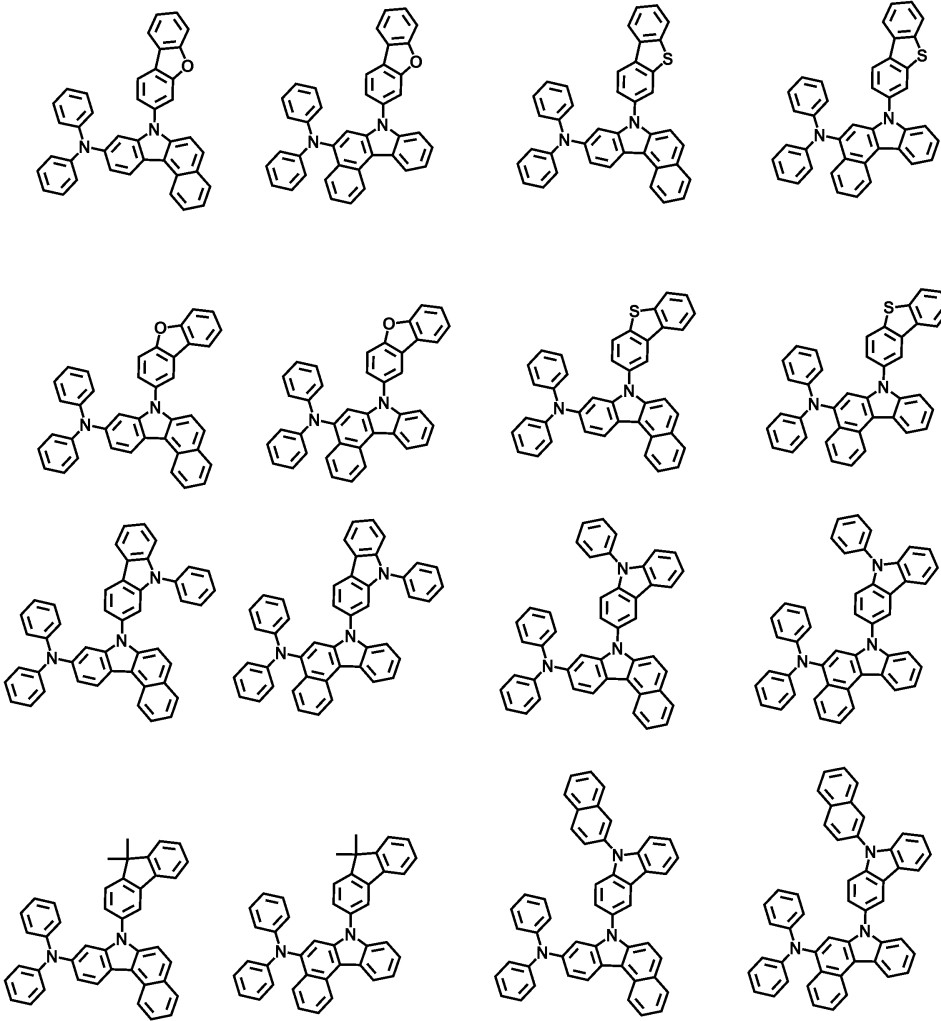
[0092]



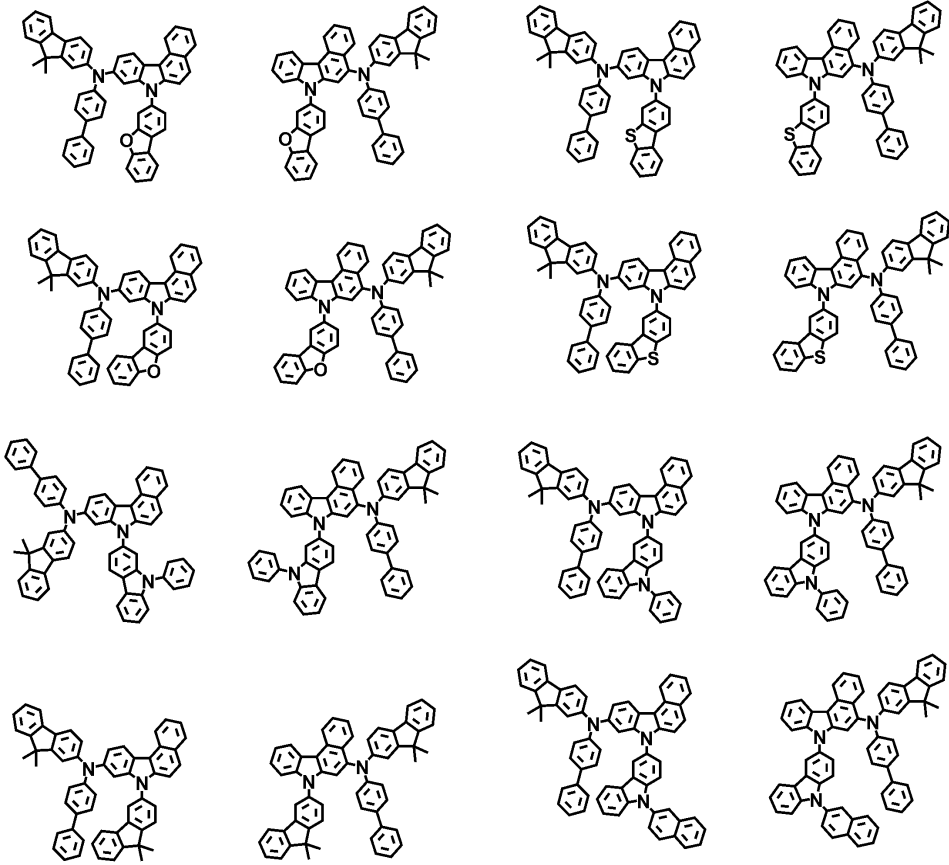
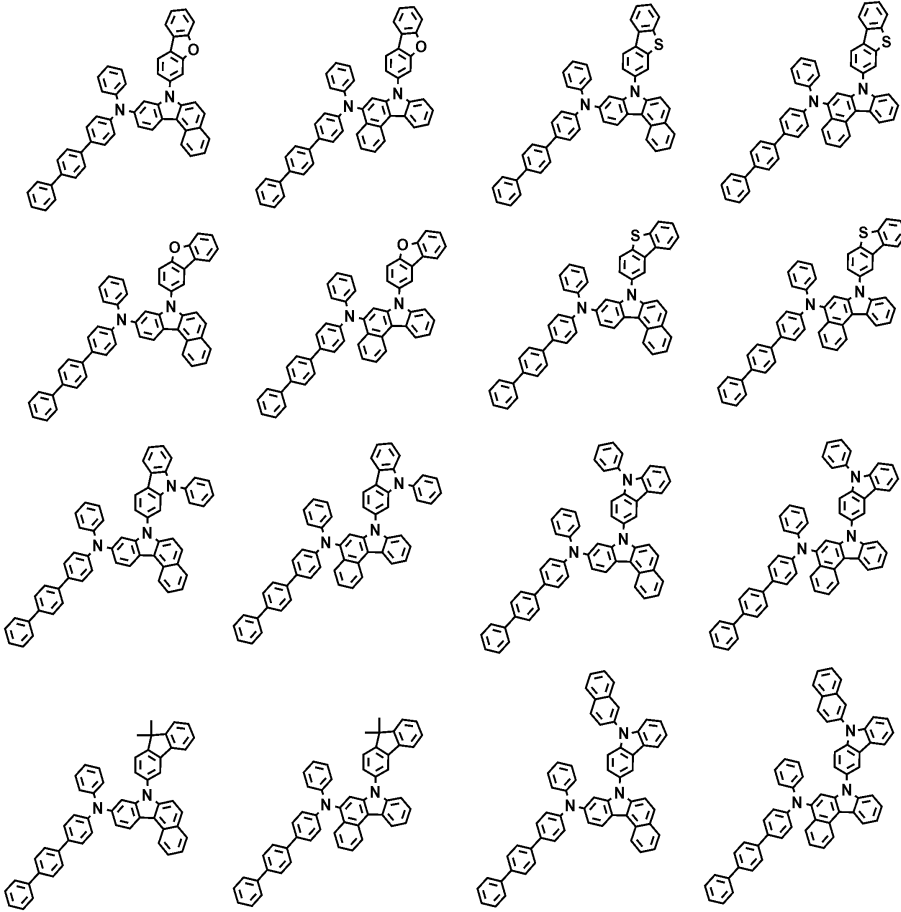
[0093]

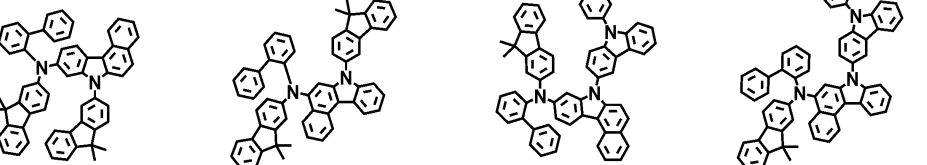
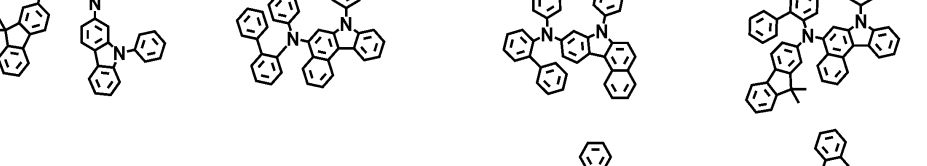
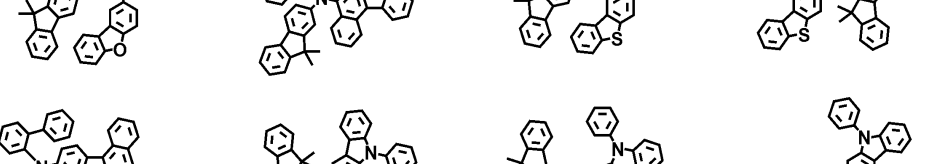
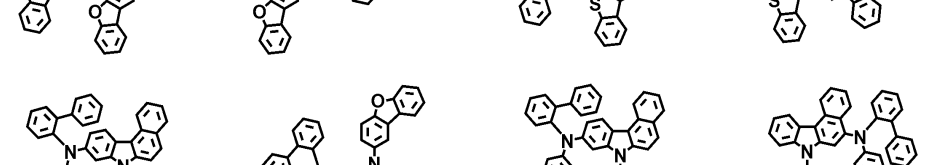
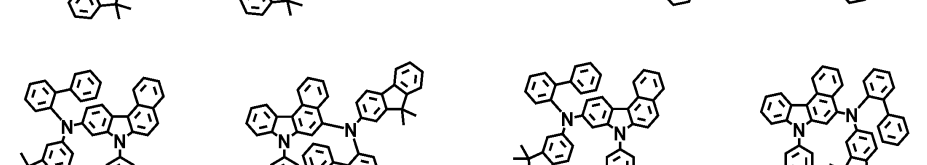
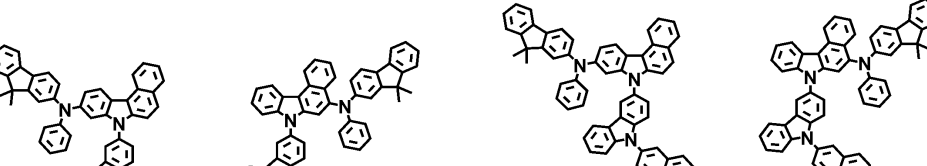
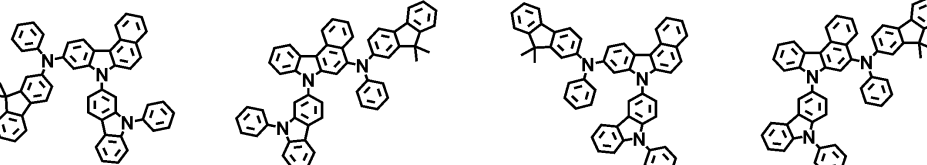
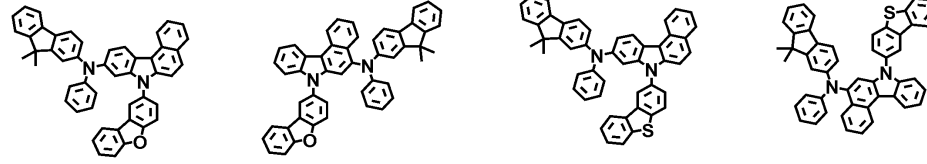
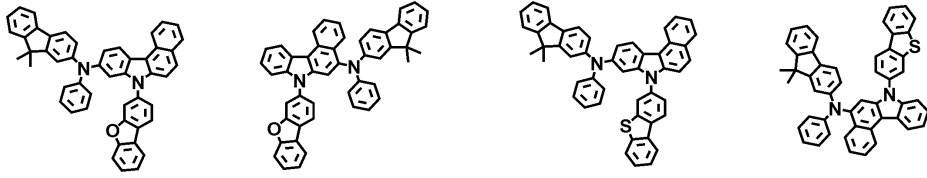


[0094]



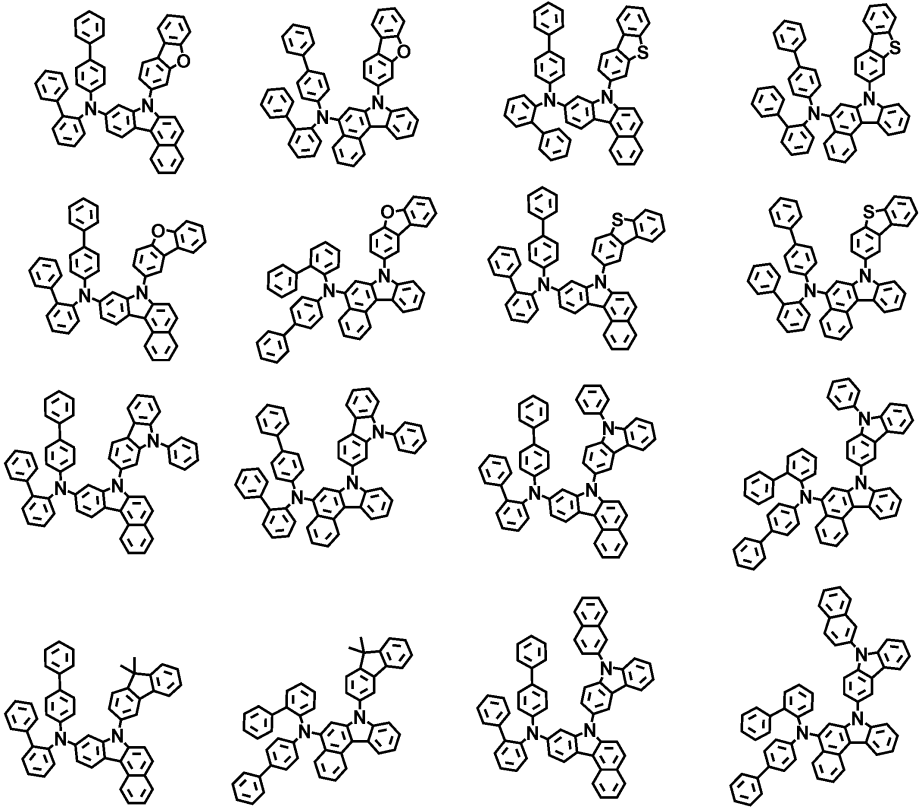
[0095]



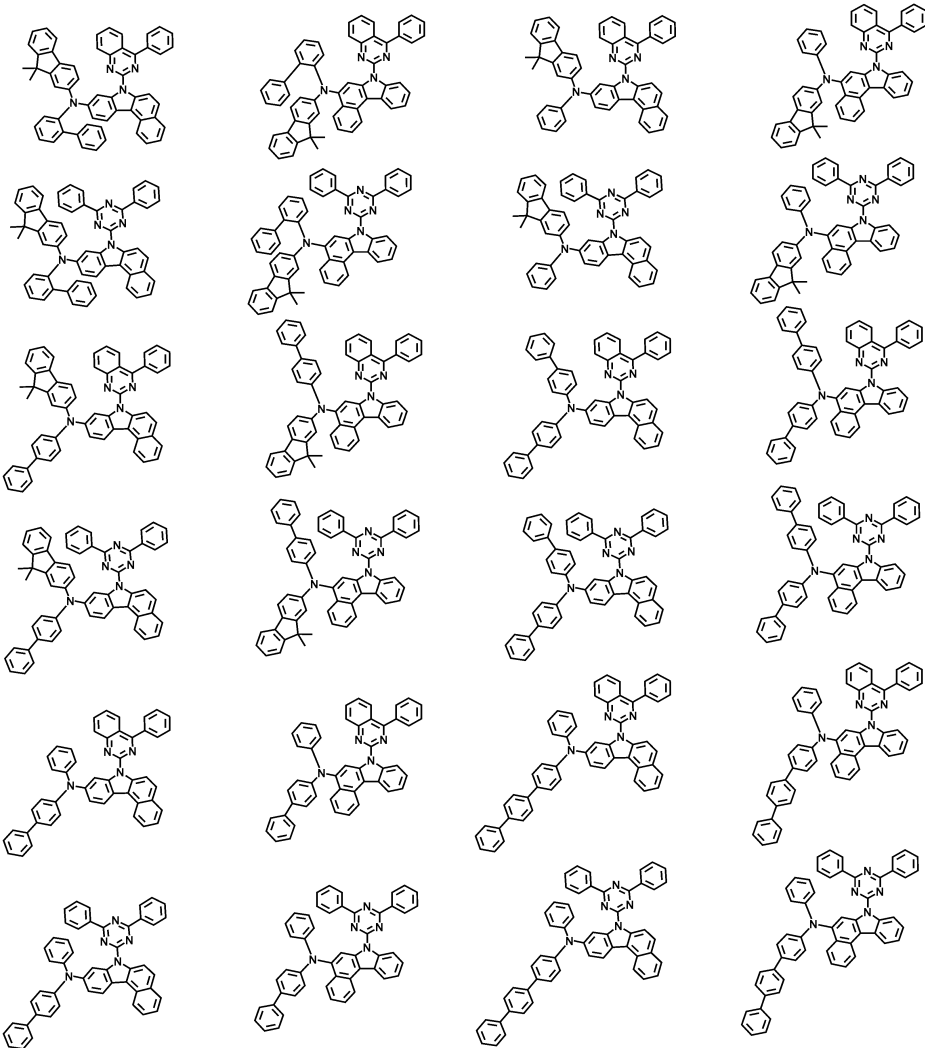


[0098]

[0099]



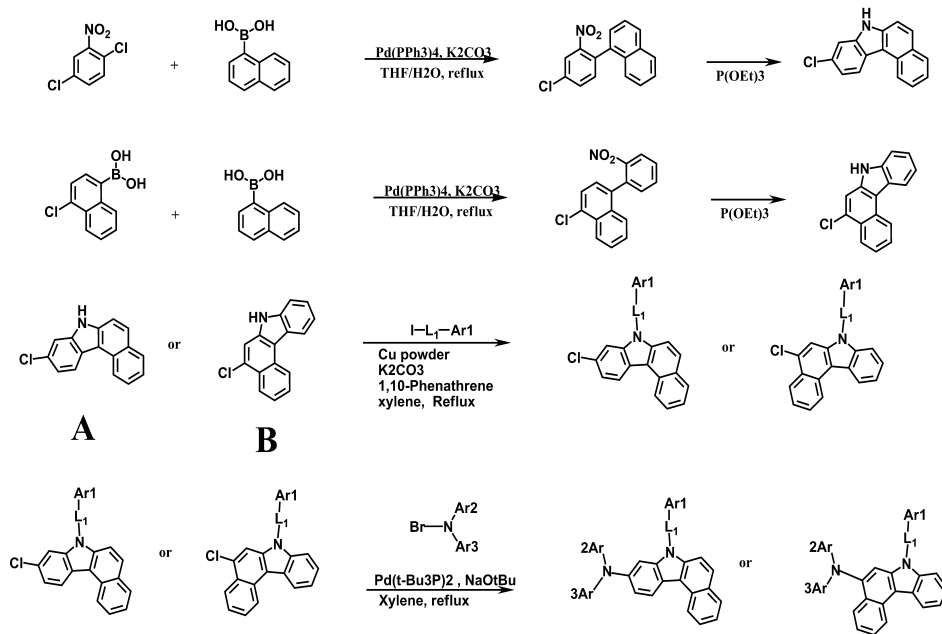
[0100]



[0101]

[0102] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 헤테로환 화합물은 후술하는 제조 방법으로 제조될 수 있다.

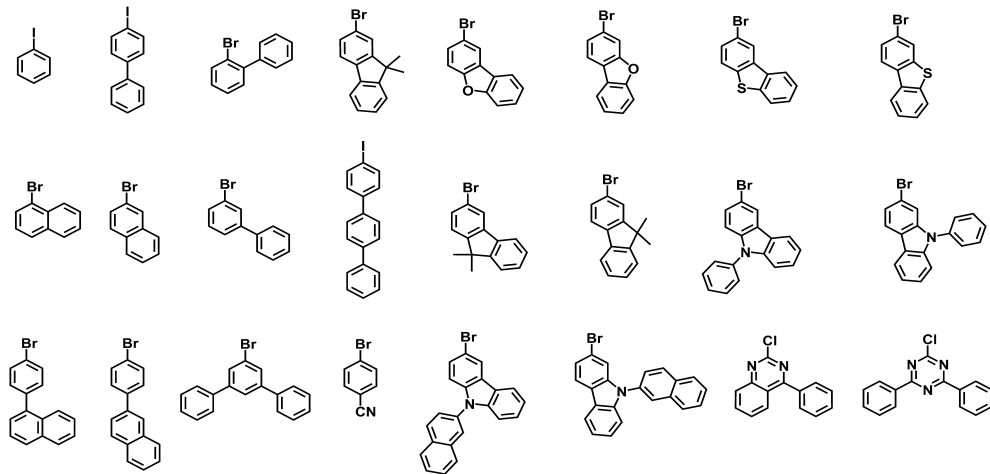
[0103] [반응식]



[0104]

[0105] 상기 반응식에 기재되는 반응조건, 재료는 당 기술분야에 알려진 것들로 사용할 수 있으며, 상기 반응식에 기재되지 않은 치환기의 종류 또는 개수도 당 기술분야에 알려진 반응조건 및 재료에 의하여 변경될 수 있다.

[0106] 상기 반응식에서, Ar<sub>1</sub> 은 하기 화합물 중에서 선택되는 화합물의 할로겐원자를 제외한 치환기를 의미할 수 있다.



[0107]

[0108] 또한, 본 명세서는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

[0109] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 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 1의 합질소 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

[0110] 본 명세서의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한 정되지 않고 더 적은 수의 유기층을 포함할 수 있다.

[0111] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층 또는 정공 주입과 수송을 동시에 하는 층을 포함하고, 상기 정공주입층, 정공수송층, 또는 정공 주입과 수송을 동시에 하는 층은 상기 화학식 1의 합질소 화합물을 포함한다.

- [0112] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1의 합질소 화합물을 포함한다.
- [0113] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 전자수송층 또는 전자주입층을 포함하고, 상기 전자수송층 또는 전자주입층은 상기 화학식 1의 합질소 화합물을 포함한다.
- [0114] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물 층은 전자저지층을 포함하고, 상기 전자저지층은 상기 화학식 1의 합질소 화합물을 포함한다.
- [0115] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 전자수송층, 전자주입층 또는 전자수송 및 전자주입을 동시에 하는 층은 상기 화학식 1의 합질소 화합물을 포함한다.
- [0117] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층 및 전자수송층을 포함하고, 상기 전자수송층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다.
- [0118] 또 하나의 실시상태에 있어서, 유기 발광 소자는 기관 상에 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조(normal type)의 유기 발광 소자일 수 있다.
- [0119] 또 하나의 실시상태에 있어서, 유기 발광 소자는 기관 상에 음극, 1층 이상의 유기물층 및 양극이 순차적으로 적층된 역방향 구조(inverted type)의 유기 발광 소자일 수 있다.
- [0120] 예컨대, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 2에 예시되어 있다.
- [0121] 도 1은 기관(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다.
- [0122] 도 2는 기관 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자수송층(8) 및 음극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화합물은 상기 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층 중 1층 이상에 포함될 수 있다.
- [0123] 본 명세서의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 본 명세서의 화합물, 즉 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.
- [0124] 상기 유기 발광 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.
- [0125] 본 명세서의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1의 화합물, 즉 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.
- [0126] 예컨대, 본 명세서의 유기 발광 소자는 기관 상에 제1 전극, 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층시킴으로써 제조할 수 있다. 이 때 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical Vapor Deposition)방법을 이용하여, 기관 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기관 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수 있다.
- [0127] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.
- [0128] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 양극이고, 상기 제2 전극은 음극이다.
- [0129] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 음극이고, 상기 제2 전극은 양극이다.
- [0130] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 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.

- [0131] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0132] 상기 정공 주입 물질로는 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.
- [0133] 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. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0134] 상기 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq<sub>3</sub>); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAlq; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0135] 상기 발광층은 호스트 재료 및 도펀트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 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 한정되지 않는다.
- [0136] 도펀트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스티릴아민 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, 시클로알킬기 및 아릴아미노기로 이루어진 군에서 1 또는 2 이상 선택되는 치환기가 치환 또는 비치환된다. 구체적으로 스티릴아민, 스티릴디아민, 스티릴트리아민, 스티릴테트라아민 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 또한, 금속 착체로는 이리듐 착체, 백금 착체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0137] 상기 전자 수송 물질로는 전자주입층으로부터 전자를 수취하여 발광층까지 전자를 수송하는 층으로 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al착물; Alq<sub>3</sub>를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 전자 수송층은 종래기술에 따라 사용된 바와 같이 임의의 원하는 캐소드 물질과 함께 사용할 수 있다. 특히, 적절한 캐소드 물질의 예는 낮은 일함수를 가지고 알루미늄층 또는 실버층이 뒤따르는 통상적인 물질이다. 구체적으로 세슘, 바륨, 칼슘, 이테르븀 및 사마륨이고, 각 경우 알루미늄 층 또는 실버층이 뒤따른다.
- [0138] 상기 전자주입층은 전극으로부터 전자를 주입하는 층으로, 전자를 수송하는 능력을 갖고, 음극으로부터의 전자 주입 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 전자주입 효과를 가지며, 발광층에서 생성된 여기자의 정공 주입층에의 이동을 방지하고, 또한, 박막형성능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 구체적으로는 플루오레논, 안트라퀴논다이메탄, 다이페노퀴논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다리아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌 테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 합질소 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0139] 상기 금속 착체 화합물로서는 8-하이드록시퀴놀리나토 리튬, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)아연, 비스(8-하이드

록시퀴놀리나토)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 한정되지 않는다.

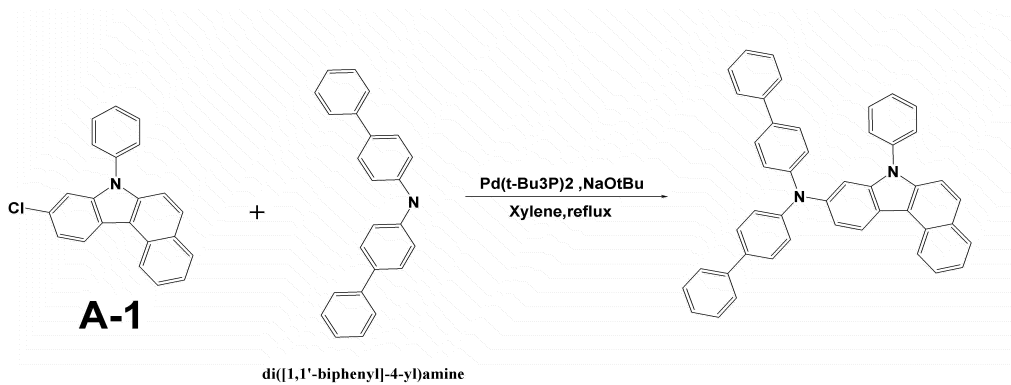
[0140] 본 명세서에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0141] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자 외에도 유기 태양 전지 또는 유기 트랜지스터에 포함될 수 있다.

[0142] 이하, 본 명세서를 구체적으로 설명하기 위해 실시예를 들어 상세하게 설명하기로 한다. 그러나, 본 명세서에 따른 실시예들은 여러가지 다른 형태로 변형될 수 있으며, 본 명세서의 범위가 아래에서 상술하는 실시예들에 한정되는 것으로 해석되지 않는다. 본 명세서의 실시예들은 당업계에서 평균적인 지식을 가진 자에게 본 명세서를 보다 완전하게 설명하기 위해서 제공되는 것이다.

[0143] <제조예 1> 하기 화합물 1의 화합물 합성

[0144] [화합물 1]



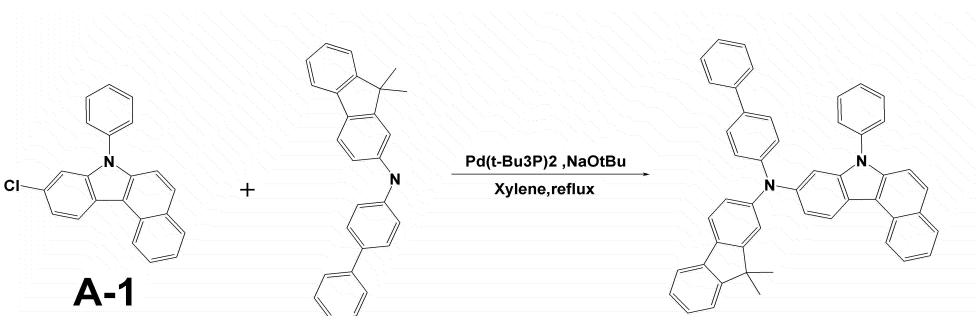
[0145]

[0146] 상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 페닐을 사용하면 상기 화합물 A-1을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A-1 (10.0g, 30.58mmol), 디([1,1'-비페닐]-4-일)아민 (10.80g, 33.64mmol)을 자일렌 180ml에 완전히 녹인 후 소듐 *tert*-부톡사이드 (3.82g, 39.76mmol)을 첨가하고, 비스(트리-*tert*-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.16g, 0.31mmol)을 넣은 후 3 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 250ml로 재결정하여 상기 화합물 1 (13.38g, 수율: 71%)를 제조하였다.

[0147] MS[M+H]<sup>+</sup> = 613

[0148] <제조예 2> 하기 화합물 2의 화합물 합성

[0149] [화합물 2]



[0150]

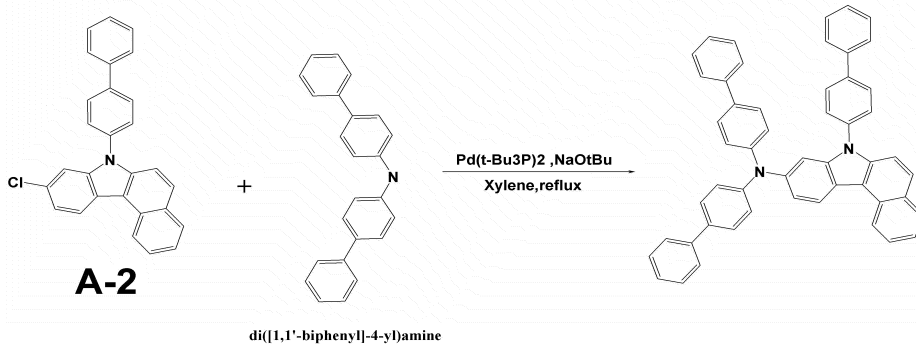
[0151] 상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 페닐을 사용하면 상기 화합물 A-1을 얻을 수 있다.

질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A-1 (10.0g, 30.58mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-yl)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민 (12.14g, 38.53mmol)을 자일렌 160ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(3.82g, 39.76mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.16g, 0.31mmol)을 넣은 후 2 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 200ml로 재결정하여 상기 화합물 2 (12.27g, 수율: 61%)를 제조하였다.

[0152] MS[M+H]<sup>+</sup> = 653

[0153] <제조예 3> 하기 화합물 3 의 화합물 합성

[0154] [화합물 3]



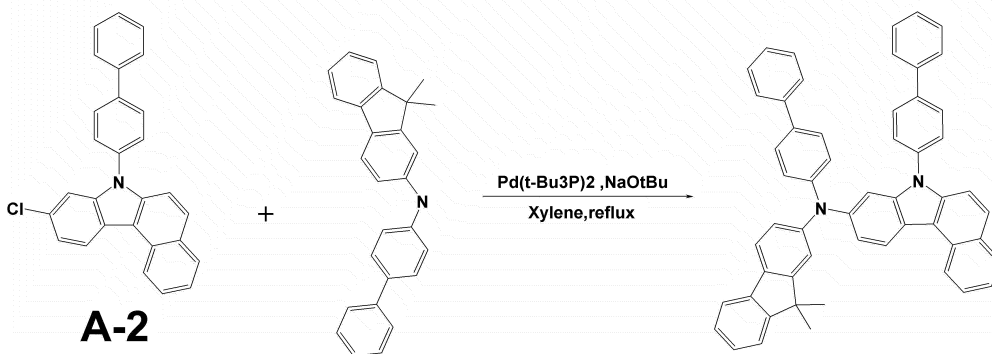
[0155]

[0156] 상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 비페닐을 사용하면 상기 화합물 A-2을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A-2 (10.0g, 24.81mmol), 디([1,1'-비페닐]-4-yl)아민 (8.76g, 27.30mmol)을 자일렌 240ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(3.10g, 32.26mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.13g, 0.25mmol)을 넣은 후 6 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 테트라하이드로퓨란 220ml로 재결정하여 상기 화합물 3 (15.92g, 수율: 93%)를 제조하였다.

[0157] MS[M+H]<sup>+</sup> = 689

[0158] <제조예 4> 하기 화합물 4 의 화합물 합성

[0159] [화합물 4]



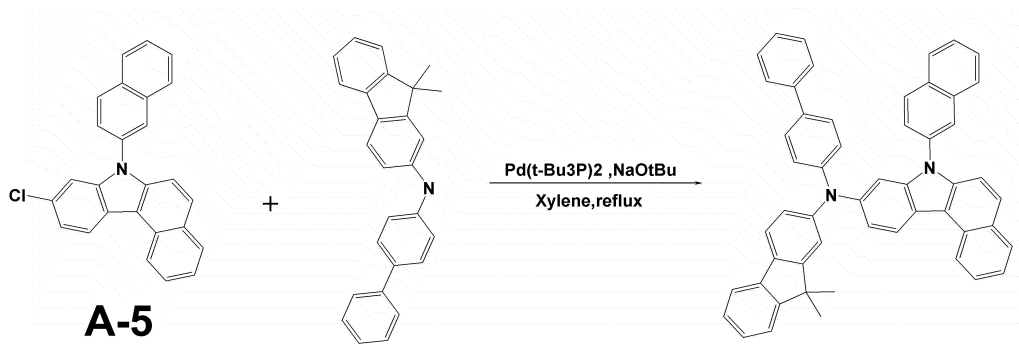
[0160]

[0161] 상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 비페닐을 사용하면 상기 화합물 A-2을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A-2 (10.0g, 24.81mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-yl)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민 (8.76g, 27.30mmol)을 자일렌 220ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드 (3.10g, 32.26mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.13g, 0.25mmol)을 넣은 후 4 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 350ml로 재결정하여 상기 화합물 4 (14.64g, 수율: 81%)를 제조하였다.

[0162] MS[M+H]<sup>+</sup> = 729

[0163] <제조예 5> 하기 화합물 5 의 화합물 합성

[0164] [화합물 5]



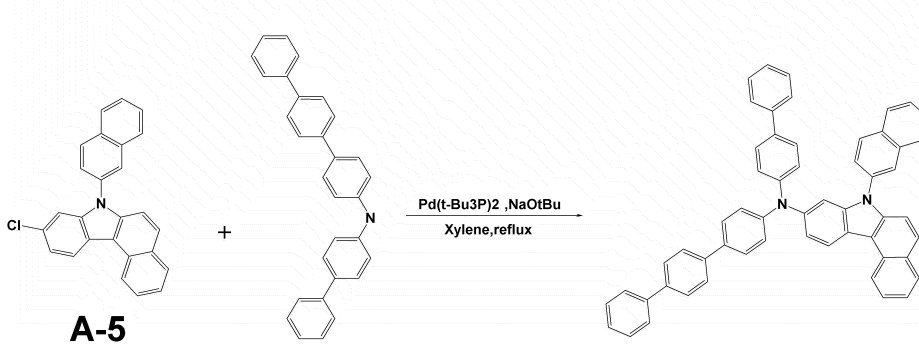
[0165]

[0166] 상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 2-Naphthylphenyl을 사용하면 상기 화합물 A-5을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A-5 (10.0g, 26.53mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-yl)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민 (10.53g, 34.48mmol)을 자일렌 180ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(3.31g, 47.71mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.14g, 0.27mmol)을 넣은 후 2 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 에 틸아세테이트 200ml로 재결정하여 상기 화합물 5 (12.35g, 수율: 66%)를 제조하였다.

[0167] MS[M+H]<sup>+</sup> = 703

[0168] <제조예 6> 하기 화합물 6 의 화합물 합성

[0169] [화합물 6]



[0170]

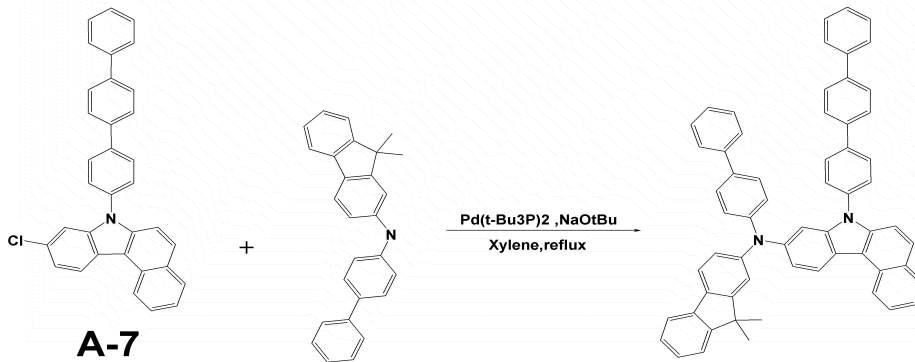
[0171] 상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 2-Naphthylphenyl을 사용하면 상기 화합물 A-5을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A-5 (10.0g, 26.53mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-yl)-[1,1':4',1''-터페닐]-4-아민 (11.58g, 29.18mmol)을 자일렌 260ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(3.31g, 47.71mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.14g, 0.27mmol)을 넣은 후 9 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 테트라하이드로퓨란 300ml로 재결정하여 상기 화합물 6 (17.71g, 수율: 91%)를 제조하였다.

[0172] MS[M+H]<sup>+</sup> = 703

[0173] <제조예 7> 하기 화합물 7 의 화합물 합성

[0174]

[화합물 7]



[0175]

[0176]

상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 비페닐을 사용하면 상기 화합물 A-7을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A-7 (10.0g, 24.81mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-yl)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민 (8.76g, 27.30mmol)을 자일렌 220ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드 (2.62g, 27.31mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.11g, 0.21mmol)을 넣은 후 4 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 350ml로 재결정하여 상기 화합물 7 (14.26g, 수율: 84%)를 제조하였다.

[0177]

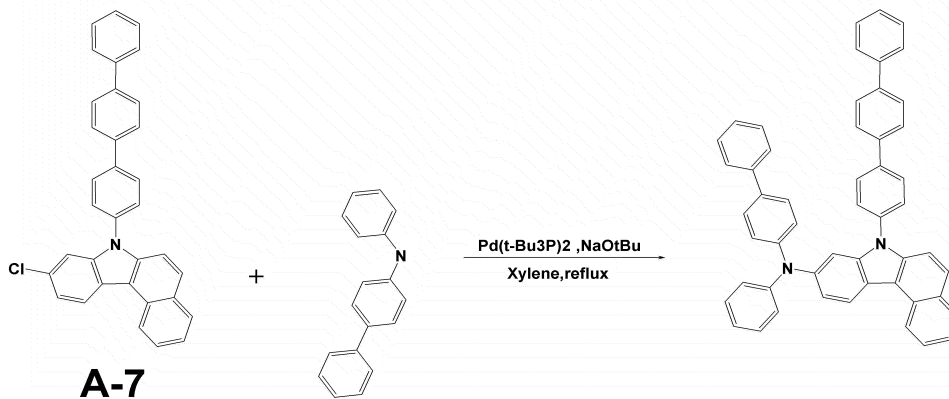
MS[M+H]<sup>+</sup> = 805

[0178]

<제조예 8> 하기 화합물 8 의 화합물 합성

[0179]

[화합물 8]



[0180]

[0181]

상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 비페닐을 사용하면 상기 화합물 A-7을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A-7 (10.0g, 24.81mmol), N-페닐-[1,1'-비페닐]-4-아민(5.66g, 23.11mmol)을 자일렌 280ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(2.62g, 27.31mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.11g, 0.21mmol)을 넣은 후 6 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 350ml로 재결정하여 상기 화합물 8 (10.08g, 수율: 70%)를 제조하였다.

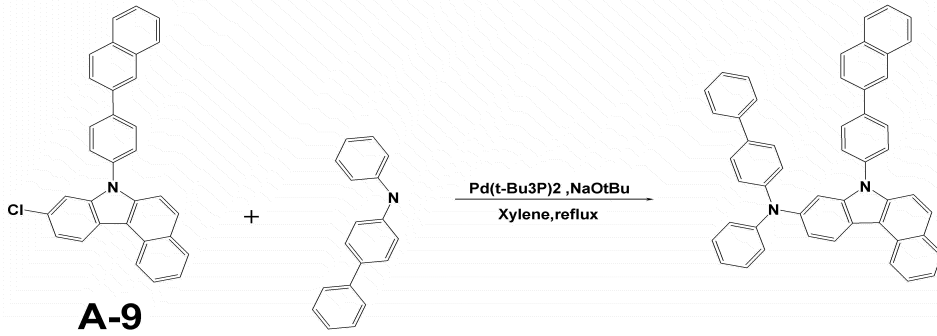
[0182]

MS[M+H]<sup>+</sup> = 689

[0183]

<제조예 9> 하기 화합물 9 의 화합물 합성

[0184] [화합물 9]



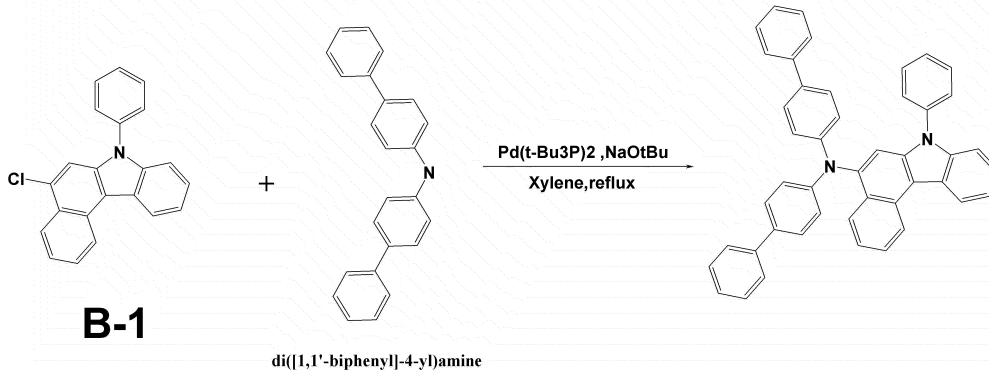
[0185]

[0186] 상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 비페닐을 사용하면 상기 화합물 A-9을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A-9 (10.0g, 22.08mmol), N-페닐-[1,1'-비페닐]-4-아민(5.95g, 24.28mmol)을 자일렌 230ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(2.62g, 27.31mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.11g, 0.21mmol)을 넣은 후 8 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 350ml로 재결정하여 상기 화합물 9 (9.47g, 수율: 65%)를 제조하였다.

[0187] MS[M+H]<sup>+</sup> = 663

[0188] <제조예 10> 하기 화합물 10의 화합물 합성

[0189] [화합물 10]



[0190]

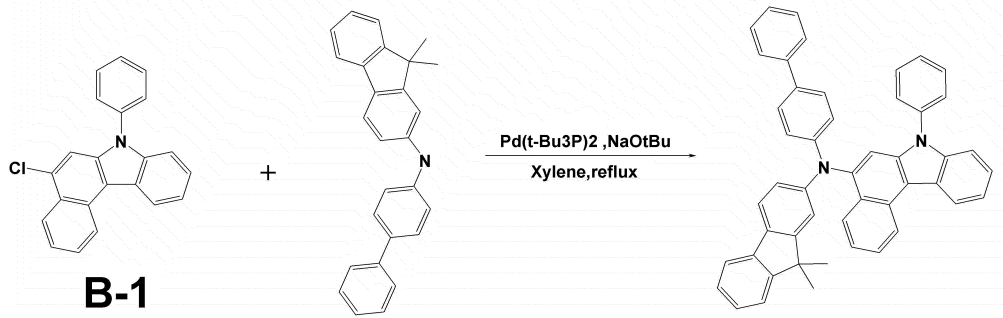
[0191] 상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 B를 사용하고, Ar1 = 페닐을 사용하면 상기 화합물 B-1을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-1 (10.0g, 30.58mmol), 디([1,1'-비페닐]-4-일)아민 (10.80g, 33.64mmol)을 자일렌 220ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(3.82g, 39.76mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.16g, 0.31mmol)을 넣은 후 5 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 260ml로 재결정하여 상기 화합물 10 (12.05g, 수율: 63%)를 제조하였다.

[0192] MS[M+H]<sup>+</sup> = 613

[0193] <제조예 11> 하기 화합물 11의 화합물 합성

[0194]

[화합물 11]



[0195]

[0196]

상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 B를 사용하고, Ar1 = 페닐을 사용하면 상기 화합물 B-1을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-1 (10.0g, 30.58mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-yl)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민 (12.14g, 38.53mmol)을 자일렌 200ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(3.82g, 39.76mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.16g, 0.31mmol)을 넣은 후 4 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 210ml로 재결정하여 상기 화합물 11 (11.05g, 수율: 55%)를 제조하였다.

[0197]

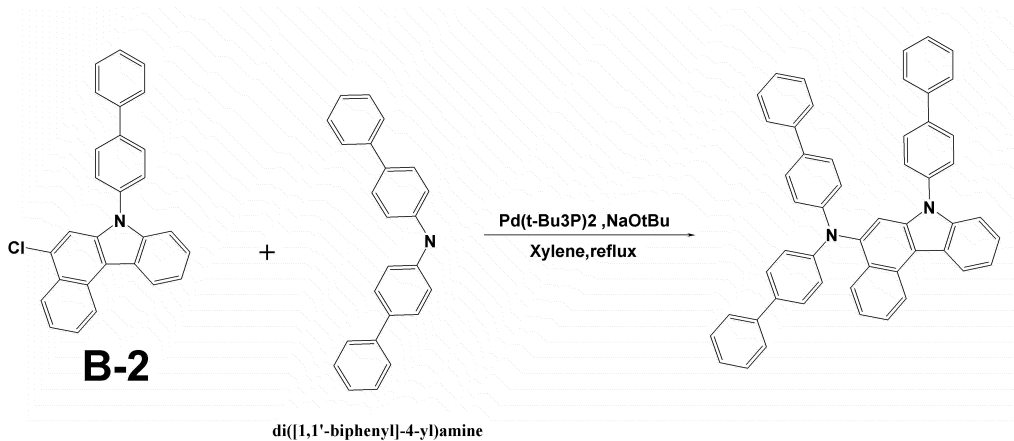
MS[M+H]<sup>+</sup> = 653

[0198]

<제조예 12> 하기 화합물 12 의 화합물 합성

[0199]

[화합물 12]



[0200]

[0201]

상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 B를 사용하고, Ar1 = 4-비페닐을 사용하면 상기 화합물 B-2을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-2 (10.0g, 24.81mmol), 디([1,1'-비페닐]-4-yl)아민 (8.76g, 27.30mmol)을 자일렌 280ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(3.10g, 32.26mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.13g, 0.25mmol)을 넣은 후 8 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 테트라하이드로퓨란 230ml로 재결정하여 상기 화합물 12 (14.33g, 수율: 84%)를 제조하였다.

[0202]

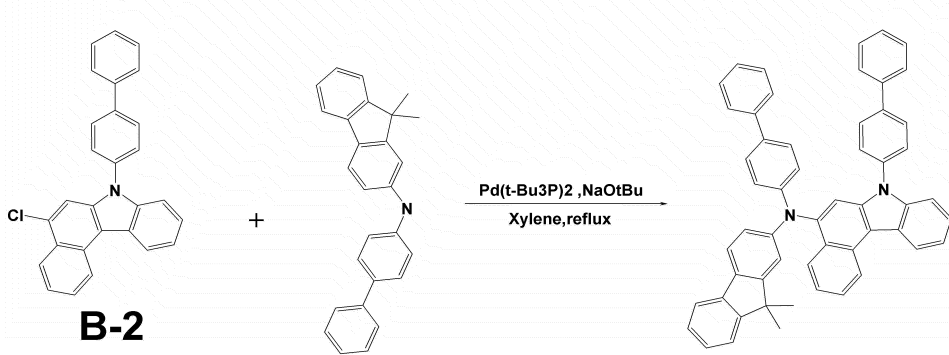
MS[M+H]<sup>+</sup> = 689

[0203]

<제조예 13> 하기 화합물 13 의 화합물 합성

[0204]

[화합물 13]



[0205]

[0206]

상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 B를 사용하고, Ar1 = 4-비페닐을 사용하면 상기 화합물 B-2을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-2 (10.0g, 24.81mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-yl)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민 (8.76g, 27.30mmol)을 자일렌 260ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드 (3.10g, 32.26mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.13g, 0.25mmol)을 넣은 후 6 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 360ml로 재결정하여 상기 화합물 13 (13.18g, 수율: 72%)를 제조하였다.

[0207]

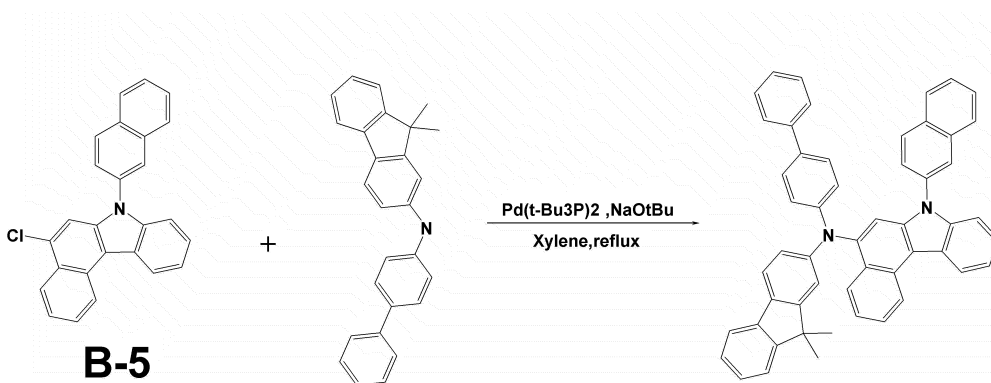
MS[M+H]<sup>+</sup> = 729

[0208]

<제조예 14> 하기 화합물 14 의 화합물 합성

[0209]

[화합물 14]



[0210]

[0211]

상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 B를 사용하고, Ar1 = 2-나프틸을 사용하면 상기 화합물 B-5을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-5 (10.0g, 26.53mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-yl)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민 (10.53g, 34.48mmol)을 자일렌 220ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드 (3.31g, 47.71mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.14g, 0.27mmol)을 넣은 후 4 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 210ml로 재결정하여 상기 화합물 14 (12.35g, 수율: 66%)를 제조하였다.

[0212]

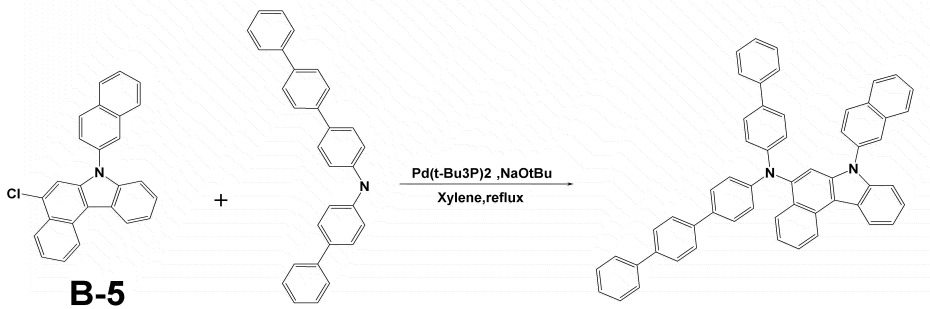
MS[M+H]<sup>+</sup> = 703

[0213]

<제조예 15> 하기 화합물 15 의 화합물 합성

[0214]

[화합물 15]



[0215]

[0216]

상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 B를 사용하고, Ar1 = 2-나프틸을 사용하면 상기 화합물 B-5을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-5 (10.0g, 26.53mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-일)-[1,1':4',1''-터페닐]-4-아민 (11.58g, 29.18mmol)을 자일렌 300ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드 (3.31g, 47.71mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.14g, 0.27mmol)을 넣은 후 11 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 테트라하이드로퓨란 310ml로 재결정하여 상기 화합물 15 (15.94g, 수율: 82%)를 제조하였다.

[0217]

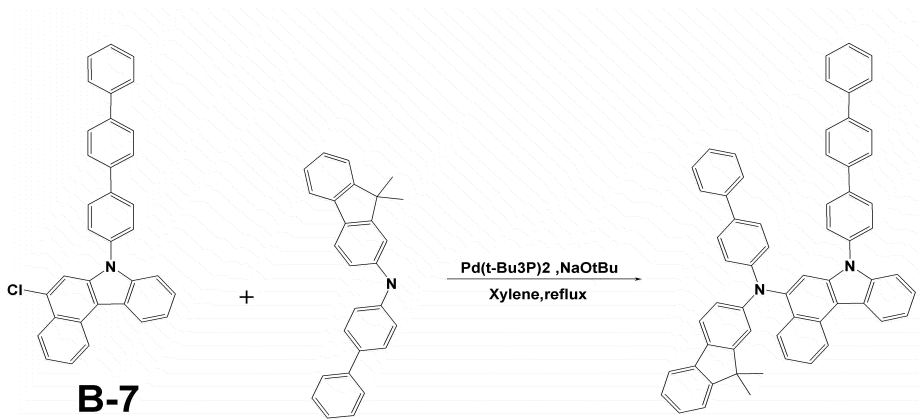
MS[M+H]<sup>+</sup> = 703

[0218]

<제조예 16> 하기 화합물 16 의 화합물 합성

[0219]

[화합물 16]



[0220]

[0221]

상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 B를 사용하고, Ar1 = 터페닐을 사용하면 상기 화합물 B-7을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-7 (10.0g, 24.81mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-yl)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민 (8.76g, 27.30mmol)을 자일렌 260ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드 (2.62g, 27.31mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.11g, 0.21mmol)을 넣은 후 6 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 360ml로 재결정하여 상기 화합물 16 (12.82g, 수율: 76%)를 제조하였다.

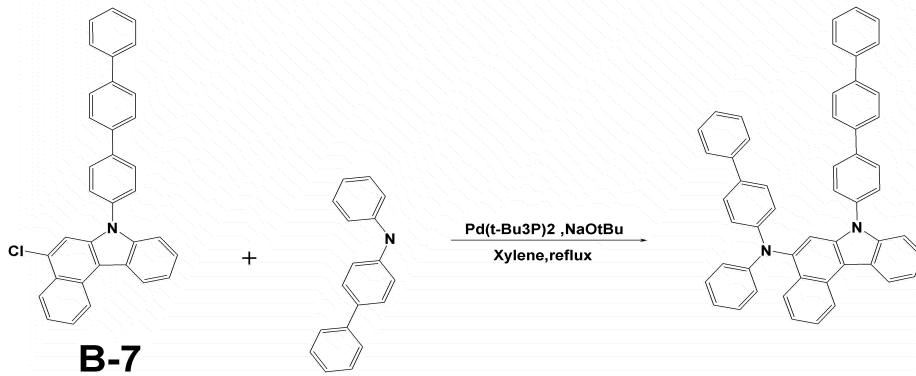
[0222]

MS[M+H]<sup>+</sup> = 805

[0223]

<제조예 17> 하기 화합물 17 의 화합물 합성

[0224] [화합물 17]



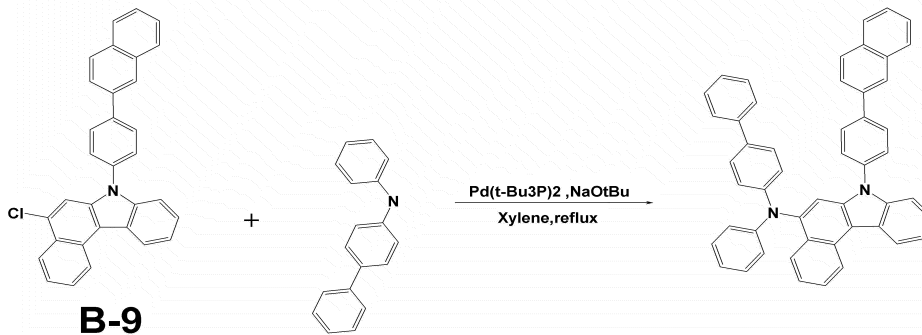
[0225]

[0226] 상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 B를 사용하고, Ar1 = 터페닐을 사용하면 상기 화합물 B-7을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-7 (10.0g, 24.81mmol), N-페닐-[1,1'-비페닐]-4-아민(5.66g, 23.11mmol)을 자일렌 320ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(2.62g, 27.31mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.11g, 0.21mmol)을 넣은 후 8 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 360ml로 재결정하여 상기 화합물 17 (9.97g, 수율: 62%)를 제조하였다.

[0227] MS[M+H]<sup>+</sup> = 689

[0228] <제조예 18> 하기 화합물 18 의 화합물 합성

[0229] [화합물 18]



[0230]

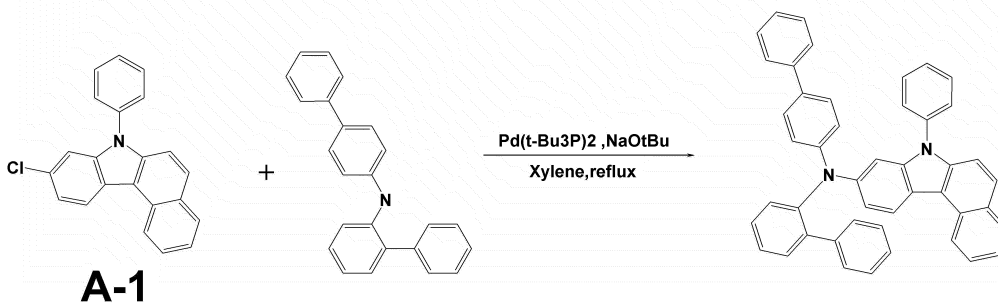
[0231] 상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 B를 사용하고, Ar1 = 2-페닐나프탈렌을 사용하면 상기 화합물 B-9을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-9 (10.0g, 22.08mmol), N-페닐-[1,1'-비페닐]-4-아민(5.95g, 24.28mmol)을 자일렌 270ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(2.62g, 27.31mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.11g, 0.21mmol)을 넣은 후 10 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 370ml로 재결정하여 상기 화합물 1 (10.42g, 수율: 72%)를 제조하였다.

[0232] MS[M+H]<sup>+</sup> = 663

[0233] <제조예 19>하기 화합물 19의 화합물 합성

[0234]

[화합물 19]



[0235]

[0236]

상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 페닐을 사용하면 상기 화학물 A-1을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A-1 (10.0g, 30.58mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-yl)-[1,1'-비페닐]-2-아민 (10.80g, 33.64mmol)을 자일렌 180ml에 완전히 녹인 후 소듐 *tert*-부톡사이드(3.82g, 39.76mmol)을 첨가하고, 비스(트리-*tert*-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.16g, 0.31mmol)을 넣은 후 3 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 250ml로 재결정하여 상기 화학물 19 (14.72g, 수율: 78%)를 제조하였다.

[0237]

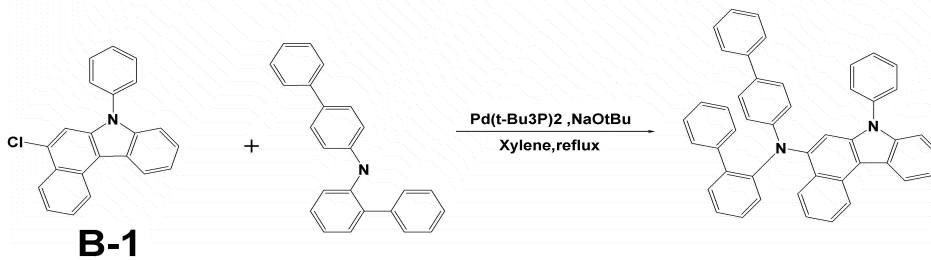
MS[M+H]<sup>+</sup> = 613

[0238]

<제조예 20>하기 화합물 20의 화합물 합성

[0239]

[화합물 20]



[0240]

[0241]

상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 B를 사용하고, Ar1 = 페닐을 사용하면 상기 화학물 B-1을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-1 (10.0g, 30.58mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-yl)-[1,1'-비페닐]-2-아민 (10.80g, 33.64mmol)을 자일렌 220ml에 완전히 녹인 후 소듐 *tert*-부톡사이드(3.82g, 39.76mmol)을 첨가하고, 비스(트리-*tert*-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.16g, 0.31mmol)을 넣은 후 5 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후에 자일렌을 감압농축 시키고 에틸아세테이트 270ml로 재결정하여 상기 화학물 20 (14.72g, 수율: 78%)를 제조하였다.

[0242]

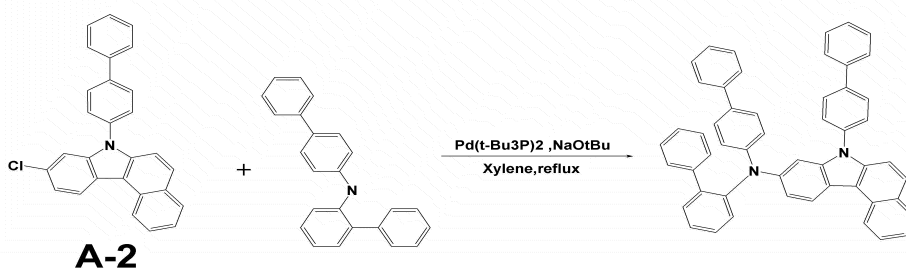
MS[M+H]<sup>+</sup> = 613

[0243]

<제조예 21>하기 화합물 21의 화합물 합성

[0244]

[화합물 21]



[0245]

[0246]

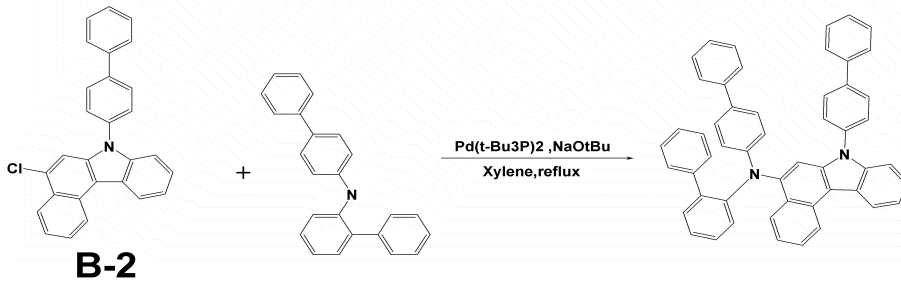
상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 4-비페닐을 사용하면 상기 화학물 A-2을 얻을 수 있다.

다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A-2 (10.0g, 24.81mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-일)-[1,1'-비페닐]-2-아민 (8.76g, 27.30mmol)을 자일렌 270ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(3.10g, 32.26mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.13g, 0.25mmol)을 넣은 후 5 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 테트라하이드로퓨란 230ml로 재결정하여 상기 화합물 21 (14.33g, 수율: 83%)를 제조하였다.

[0247] MS[M+H]<sup>+</sup> = 689

[0248] <제조예 22> 하기 화합물 22 의 화합물 합성

[0249] [화합물 22]



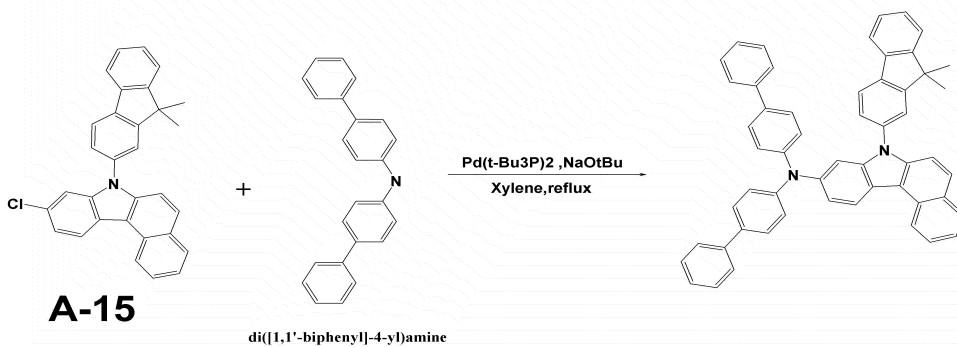
[0250]

[0251] 상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 B를 사용하고, Ar1 = 4-비페닐을 사용하면 상기 화합물 B-2을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-2 (10.0g, 24.81mmol), N-([1,1'-비페닐]-4-일)-[1,1'-비페닐]-2-아민 (8.76g, 27.30mmol)을 자일렌 270ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(3.10g, 32.26mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.13g, 0.25mmol)을 넣은 후 4 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 테트라하이드로퓨란 230ml로 재결정하여 상기 화합물 22 (11.51g, 수율: 67%)를 제조하였다.

[0252] MS[M+H]<sup>+</sup> = 689

[0253] <제조예 23> 하기 화합물 23 의 화합물 합성

[0254] [화합물 23]



[0255]

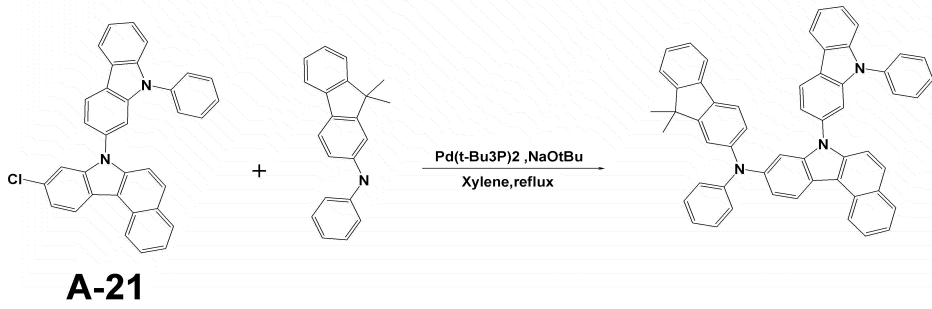
[0256] 상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 2-플루오렌을 사용하면 상기 화합물 A-15을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A-15 (10.0g, 22.57mmol), 디([1,1'-비페닐]-4-일)아민 (7.97g, 24.83mmol)을 자일렌 200ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(2.82g, 29.35mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.12g, 0.23mmol)을 넣은 후 4 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 테트라하이드로퓨란 220ml로 재결정하여 상기 화합물 23 (10.78g, 수율: 66%)를 제조하였다.

[0257] MS[M+H]<sup>+</sup> = 729

[0258] <제조예 24> 하기 화합물 24 의 화합물 합성

[0259]

[화합물 24]



[0260]

[0261]

상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 2-9-페닐-9H-카바졸을 사용하면 상기 화합물 A-21을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 A-21 (10.0g, 20.33mmol), 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민 (6.37g, 22.36mmol)을 자일렌 220ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드 (2.54g, 26.42mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.10g, 0.20mmol)을 넣은 후 4 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 테트라하이드로퓨란 260ml로 재결정하여 상기 화합물 24 (11.59g, 수율:77%)를 제조하였다.

[0262]

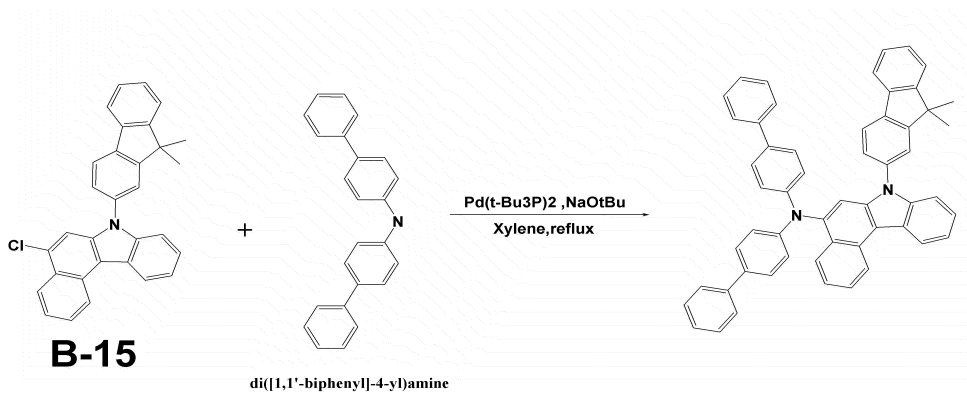
MS[M+H]<sup>+</sup> = 742

[0263]

<제조예 25> 하기 화합물 25 의 화합물 합성

[0264]

[화합물 25]



[0265]

[0266]

상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 B를 사용하고, Ar 1 = 2-플루오렌을 사용하면 상기 화합물 B-15을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-15 (10.0g, 22.57mmol), 디([1,1'-비페닐]-4-일)아민 (7.97g, 24.83mmol)을 자일렌 220ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드(2.82g, 29.35mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.12g, 0.23mmol)을 넣은 후 3 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 테트라하이드로퓨란 200ml로 재결정하여 상기 화합물 25 (8.66g, 수율: 55%)를 제조하였다.

[0267]

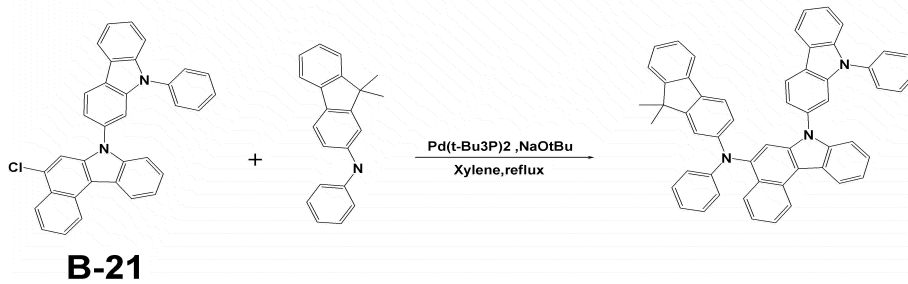
MS[M+H]<sup>+</sup> = 729

[0268]

<제조예 26> 하기 화합물 26 의 화합물 합성

[0269]

[화합물 26]



[0270]

[0271]

상기 반응식 1 step 3에서 출발물질로 A를 사용하고, Ar1 = 2-9-페닐-9H-카바졸을 사용하면 상기 화합물 B-21을 얻을 수 있다. 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-21 (10.0g, 20.33mmol), 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민 (6.37g, 22.36mmol)을 자일렌 220ml에 완전히 녹인 후 소듐 tert-부톡사이드 (2.54g, 26.42mmol)을 첨가하고, 비스(트리-tert-부틸포스핀) 팔라듐(0) (0.10g, 0.20mmol)을 넣은 후 3 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 여과하여 염을 제거한 후 에 자일렌을 감압농축 시키고 테트라하이드로퓨란 235ml로 재결정하여 상기 화합물 26 (10.44g, 수율:69%)를 제조하였다.

[0272]

MS[M+H]<sup>+</sup> = 742

[0273]

<실험예 1-1>

[0274]

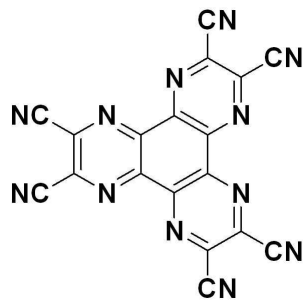
ITO(indium tin oxide)가 1,000Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이 때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀러포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(여과)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소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

[0275]

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

[0276]

[HAT]

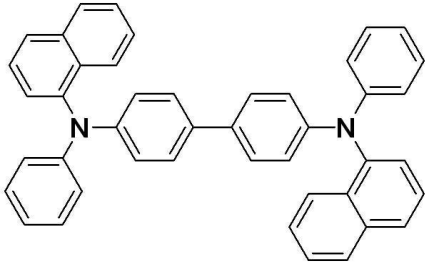


[0277]

[0278]

상기 정공 주입층 위에 정공을 수송하는 물질인 하기 화합물 4-4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 (NPB)(300Å)를 진공 증착하여 정공 수송층을 형성하였다.

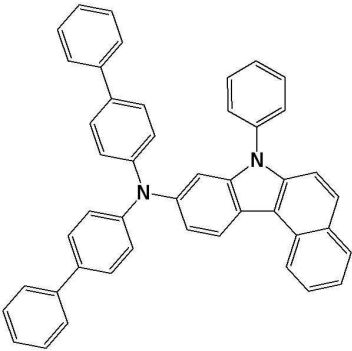
[0279] [NPB]



[0280]

[0281] 이어서, 상기 정공 수송층 위에 막 두께 100Å으로 하기 화합물 1 를 진공 증착하여 전자 저지층을 형성하였다.

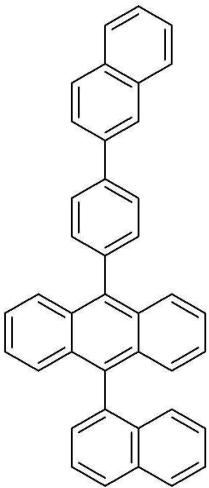
[0282] [화합물 1]



[0283]

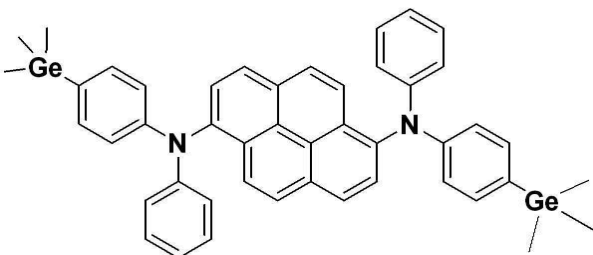
[0284] 이어서, 상기 전자 저지층 위에 막 두께 300Å으로 아래와 같은 BH와 BD를 25:1의 중량비로 진공증착하여 발광층을 형성하였다.

[0285] [BH]



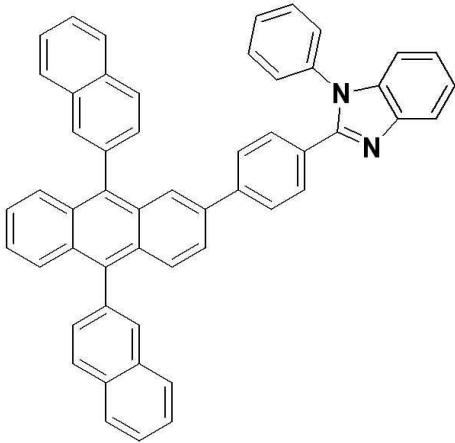
[0287]

[0288] [BD]



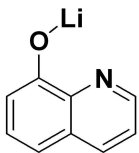
[0289]

[0290] [ET1]



[0291]

[0292] [LiQ]



[0293]

[0294] 상기 발광층 위에 상기 화합물 ET1과 상기 화합물 LiQ(Lithium Quinolinate)를 1:1의 중량비로 진공증착하여 300 Å의 두께로 전자 주입 및 수송층을 형성하였다. 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 12Å두께로 리튬플로라이드(LiF)와 2,000Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

[0295] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4~ 0.7Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플로라이드는 0.3Å/sec, 알루미늄은 2Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는  $2 \times 10^{-7}$  ~  $5 \times 10^{-6}$  torr를 유지하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0296] <실험예 1-2>

[0297] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 상기 화합물 2 을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0298] <실험예 1-3>

[0299] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 상기 화합물 3 을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0300] <실험예 1-4>

[0301] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 상기 화합물 4 을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0302] <실험예 1-5>

[0303] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 상기 화합물 6 을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0304] <실험예 1-6>

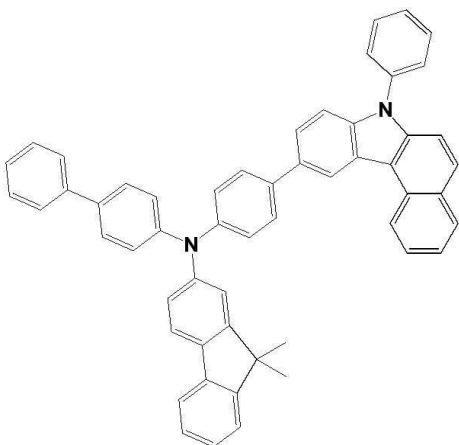
[0305] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 상기 화합물 8 을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0306] <실험예 1-7>

[0307] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 상기 화합물 9 을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

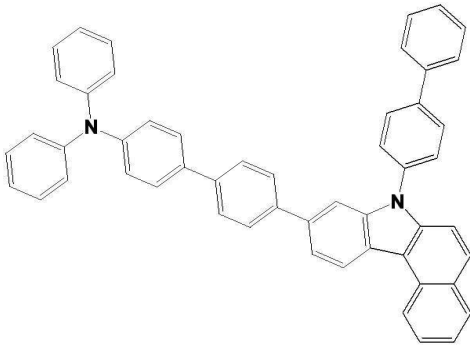
- [0308] <실험예 1-8>
- [0309] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 상기 화합물 10 을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0310] <실험예 1-9>
- [0311] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 상기 화합물 12 을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0312] <실험예 1-10>
- [0313] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 상기 화합물 15 을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0314] <실험예 1-11>
- [0315] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 상기 화합물 17 을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0316] <실험예 1-12>
- [0317] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 상기 화합물 22 을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0318] <실험예 1-13>
- [0319] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 상기 화합물 23 을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0320] <실험예 1-14>
- [0321] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 상기 화합물 24 을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0322] <비교예 1>
- [0323] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 하기 EB1의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0324] [EB1]



- [0325]
- [0326] <비교예 2>
- [0327] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 하기 EB2의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0328] [EB2]

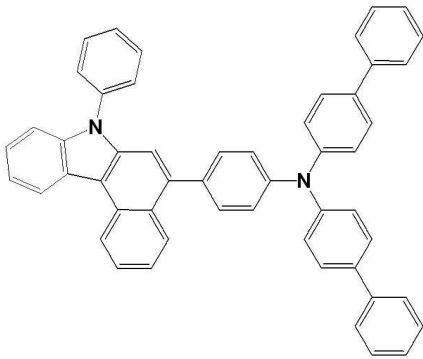


[0329]

[0330] <비교예 3>

[0331] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 하기 EB3의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0332] [EB3]

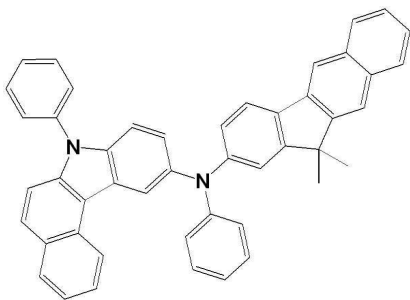


[0333]

[0334] <비교예 4>

[0335] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 하기 EB4의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0336] [EB4]



[0337]

[0338] 실험예 1-1 내지 1-4 및 비교예 1 내지 4에 의해 제작된 유기 발광 소자에 전류를 인가하였을 때, 표 1의 결과를 얻었다.

표 1

[0339]

	화합물 (전자저지층)	전압 (V@10mA/cm <sup>2</sup> )	효율 (cd/A@10mA/cm <sup>2</sup> )	색좌표 (x,y)
실험예 1-1	화합물 1	3.68	6.64	(0.138, 0.127)
실험예 1-2	화합물 2	3.73	6.56	(0.139, 0.125)
실험예 1-3	화합물 3	3.64	6.65	(0.138, 0.126)
실험예 1-4	화합물 4	3.75	6.52	(0.138, 0.127)

실험예 1-5	화합물 6	3.72	6.51	(0.137, 0.125)
실험예 1-6	화합물 8	3.61	6.68	(0.136, 0.125)
실험예 1-7	화합물 9	3.59	6.90	(0.136, 0.127)
실험예 1-8	화합물 10	3.66	6.66	(0.136, 0.125)
실험예 1-9	화합물 12	3.65	6.63	(0.137, 0.125)
실험예 1-10	화합물 15	3.64	6.62	(0.138, 0.125)
실험예 1-11	화합물 17	3.65	6.64	(0.136, 0.125)
실험예 1-12	화합물 22	3.50	6.71	(0.137, 0.125)
실험예 1-13	화합물 23	3.68	6.68	(0.136, 0.125)
실험예 1-14	화합물 24	3.69	6.65	(0.138, 0.126)
비교예 1	EB1	4.08	5.91	(0.136, 0.127)
비교예 2	EB2	4.12	6.07	(0.136, 0.127)
비교예 3	EB3	4.04	5.94	(0.135, 0.125)
비교예 4	EB4	4.36	5.59	(0.136, 0.126)

[0340] 상기 표 1에서 보는 바와 같이, 본원 발명의 화합물을 전자저지층으로 사용하여 제조된 유기 발광 소자는 본원 발명의 코어의 다른 위치에 치환기가 연결된 비교예 1 및 링커로 페닐기, 비페닐기가 치환된 비교예 2, 3의 물질을 사용한 경우와 비교하였을 때 본원 발명의 화합물은 전자 차단역할을 하므로 유기 발광 소자의 효율, 구동 전압 및/또는 안정성 면에서 우수한 특성을 나타낸다.

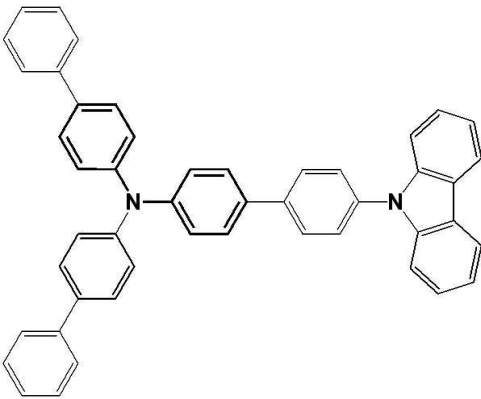
[0341] 실험예 1-1~ 1-14는 이러한 비교예들보다 전압은 10% ~ 12% 감소하며, 효율 또한 10% 이상 높은 특성을 보인다.

[0342] 상기 표 1의 결과와 같이, 본 발명에 다른 화합물은 전자 차단 능력이 우수하여 유기 발광 소자에 적용 가능함을 확인할 수 있었다.

[0343] <실험예 2-1 내지 2-14>

[0344] 상기 실험예 1에서 전자저지층으로 하기 EB5 물질을 사용하고, 상기 정공 수송층으로 NPB 대신 실험예 1-1 내지 1-14의 화합물들을 사용한 것을 제외하고는 동일하게 실험하였다.

[0345] [EB5]

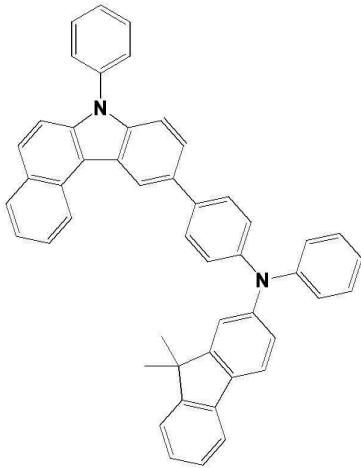


[0346]

[0347] <비교예 5>

[0348] 상기 실험예 2-1에서 화합물 1 대신 하기 HT1의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 2과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0349] [HT1]

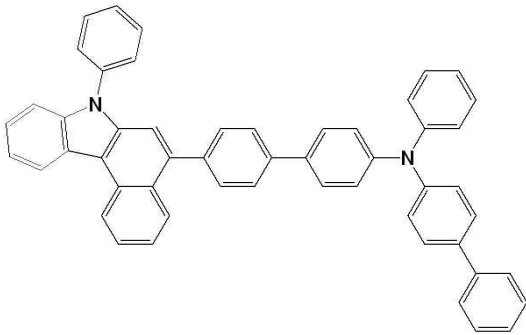


[0350]

[0351] <비교예 6>

[0352] 상기 실험예 2-1에서 화합물 1 대신 하기 HT2의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 2과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0353] [HT2]



[0354]

[0355] 실험예 2 및 실험예 2-1 내지 14 및 비교예 5 및 6에 의해 제작된 유기 발광 소자에 전류를 인가하였을 때, 표 2의 결과를 얻었다.

표 2

[0356]

	화합물 (정공수송층)	전압 (V@10mA/cm <sup>2</sup> )	효율 (cd/A@10mA/cm <sup>2</sup> )	색좌표 (x,y)
실험예 2-1	화합물 1	4.45	5.45	(0.138, 0.127)
실험예 2-2	화합물 2	4.52	5.35	(0.139, 0.122)
실험예 2-3	화합물 3	4.48	5.36	(0.138, 0.126)
실험예 2-4	화합물 4	4.43	5.52	(0.138, 0.127)
실험예 2-5	화합물 6	4.57	5.58	(0.137, 0.125)
실험예 2-6	화합물 8	4.56	5.55	(0.136, 0.125)
실험예 2-7	화합물 9	4.44	5.51	(0.136, 0.127)
실험예 2-8	화합물 10	4.41	5.59	(0.136, 0.125)
실험예 2-9	화합물 12	4.58	5.46	(0.137, 0.125)
실험예 2-10	화합물 15	4.49	5.45	(0.138, 0.125)
실험예 2-11	화합물 17	4.57	5.46	(0.136, 0.125)
실험예 2-12	화합물 22	4.52	5.44	(0.137, 0.125)
실험예 2-13	화합물 23	4.43	5.40	(0.136, 0.125)
실험예 2-14	화합물 24	4.50	5.50	(0.138, 0.126)
비교예 5	HT1	5.06	4.91	(0.136, 0.127)
비교예 6	HT2	5.18	4.52	(0.135, 0.125)

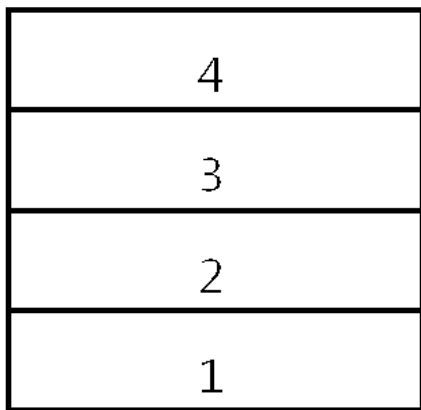
- [0357] 상기 표 2에서 보는 바와 같이, 본원 발명의 화합물을 정공수송층으로 사용하여 제조된 유기 발광 소자의 본원 발명의 코어의 다른 위치에 치환기가 연결된 비교예 링커로 페닐기, 비페닐기가 치환된 비교예 4 및 5의 물질을 사용한 경우와 비교하였을 때 본원 발명의 화합물은 정공 수송 역할을 하므로 유기 발광 소자의 효율, 구동 전압 및/또는 안정성 면에서 우수한 특성을 나타낸다.
- [0358] 구체적으로 실험예 2-1 내지 2-14는 이러한 비교예보다 전압은 10% 이상 감소하고, 효율 또한 7~10% 이상 높은 특성을 보인다.
- [0359] 상기 표 1, 2의 결과와 같이, 본 발명에 다른 화합물은 전자 차단 능력 뿐만 아니라 정공 수송 능력이 우수하여 유기 발광 소자에 적용 가능함을 확인할 수 있었다.
- [0360] 이상을 통해 본 발명의 바람직한 실시예(전자저지층, 정공수송층)에 대하여 설명하였지만, 본 발명은 이에 한정되는 것이 아니고 특허청구범위와 발명의 상세한 설명의 범위 안에서 여러 가지로 변형하여 실시하는 것이 가능하고 이 또한 발명의 범주에 속한다.

**부호의 설명**

- [0361] 1: 기관
- 2: 양극
- 3: 발광층
- 4: 음극
- 5: 정공주입층
- 6: 정공수송층
- 7: 발광층
- 8: 전자수송층

**도면**

**도면1**



도면2

4
8
7
6
5
2
1