



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

(11) 공개번호 10-2020-0042808  
(43) 공개일자 2020년04월24일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07C 13/72 (2006.01) C07D 307/91 (2006.01)  
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)  
H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류  
C07C 13/72 (2013.01)  
C07D 307/91 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2018-0123423

(22) 출원일자 2018년10월16일  
심사청구일자 없음

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

(72) 발명자  
백이현  
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
배재순  
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
(뒷면에 계속)

(74) 대리인  
유미특허법인

전체 청구항 수 : 총 7 항

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

**(57) 요약**

본 발명은 신규한 화합물 및 이를 이용한 유기 발광 소자를 제공한다. 본 발명에 따른 상기 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물 층의 재료로서 사용될 수 있으며, 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동 전압 및/또는 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

**대표도** - 도1

4
3
2
1

(52) CPC특허분류

*C09K 11/06* (2013.01)

*H01L 51/0058* (2013.01)

*H01L 51/50* (2013.01)

*C09K 2211/1011* (2013.01)

(72) 발명자

**이재철**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**유소영**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**김영광**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**임병윤**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**김예별**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

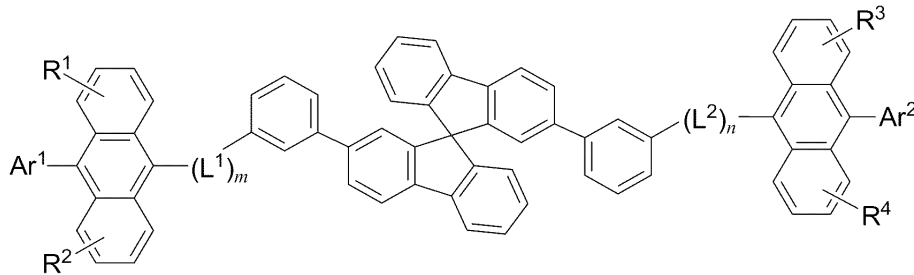
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C<sub>1-30</sub>의 알킬기, C<sub>2-30</sub>의 알케닐기, C<sub>2-30</sub>의 알키닐기, C<sub>1-30</sub>의 알콕시기, C<sub>6-30</sub>의 아릴옥시기, 또는 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>6-50</sub>의 아릴기; 또는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>2-60</sub>의 헤테로아릴기이고,

R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup>는 각각 독립적으로 수소; 중수소; C<sub>1-30</sub>의 알킬기; 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C<sub>1-30</sub>의 알킬기, C<sub>2-30</sub>의 알케닐기, C<sub>2-30</sub>의 알키닐기, C<sub>1-30</sub>의 알콕시기, C<sub>6-30</sub>의 아릴옥시기, 또는 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>6-50</sub>의 아릴기; 또는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>2-60</sub>의 헤테로아릴기이고,

L<sup>1</sup> 및 L<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C<sub>1-30</sub>의 알킬기, C<sub>2-30</sub>의 알케닐기, C<sub>2-30</sub>의 알키닐기, C<sub>1-30</sub>의 알콕시기, C<sub>6-30</sub>의 아릴옥시기, 또는 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>6-50</sub>의 아릴렌기; 또는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>2-60</sub>의 헤테로아릴렌기이고,

m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수이다.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 벤조푸라닐기, 또는 플루오레닐기이고,

상기 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필, 부틸, 이소부틸, tert부틸, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 부톡시, 이소부톡시, 또는 네오부톡시로 치환되거나 비치환된,

화합물.

**청구항 3**

제 1 항에 있어서,

상기  $L^1$  및  $L^2$ 는 각각 독립적으로 페닐렌기, 나프틸렌기 또는 안트라세닐렌기이고,

상기  $L^1$  및  $L^2$ 는 각각 독립적으로 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필, 부틸, 이소부틸, tert부틸, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 부톡시, 이소부톡시, 또는 네오부톡시로 치환되거나 비치환된,

화합물.

**청구항 4**

제 1 항에 있어서,

상기 m 및 n은 각각 0 또는 1인, 화합물.

**청구항 5**

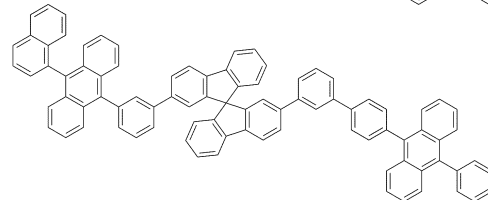
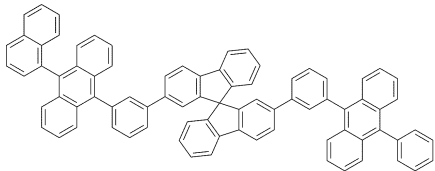
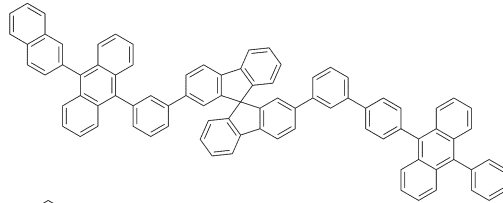
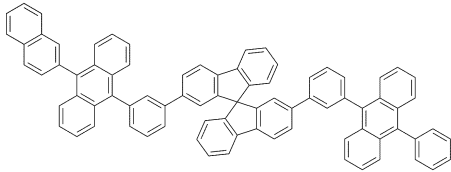
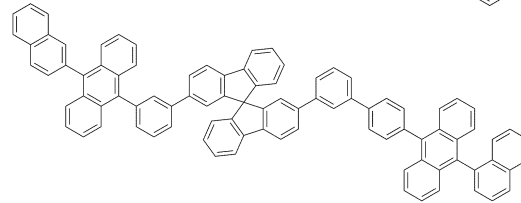
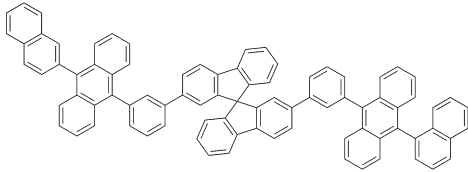
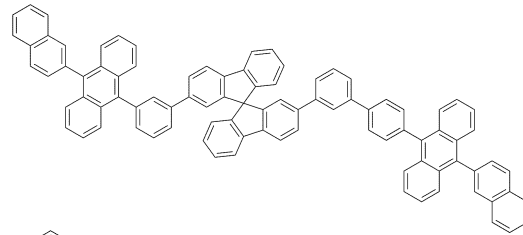
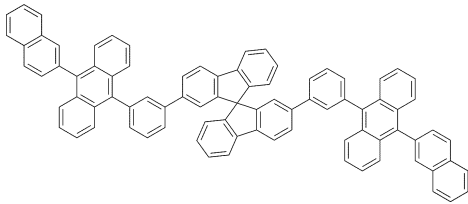
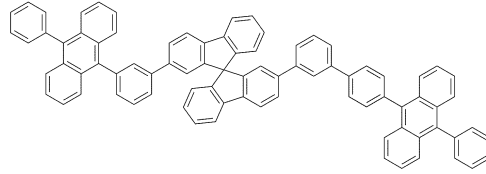
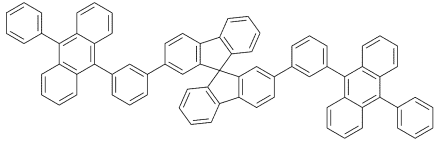
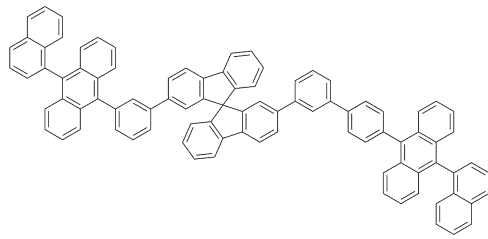
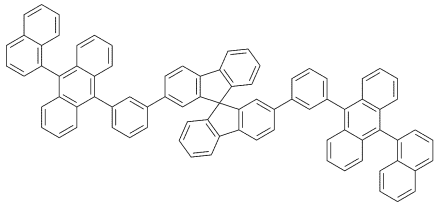
제 1 항에 있어서,

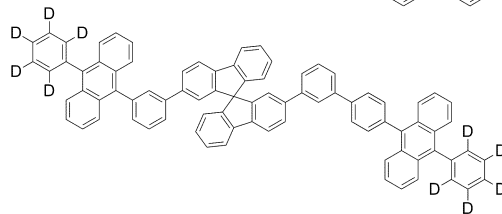
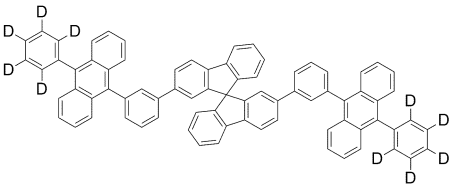
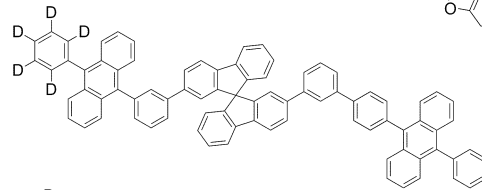
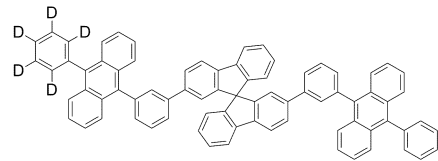
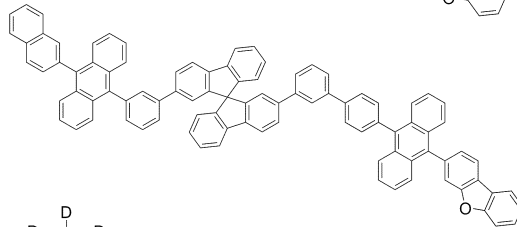
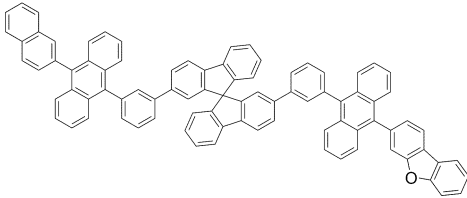
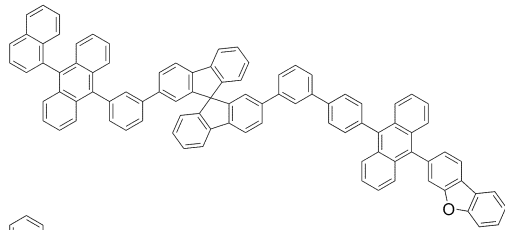
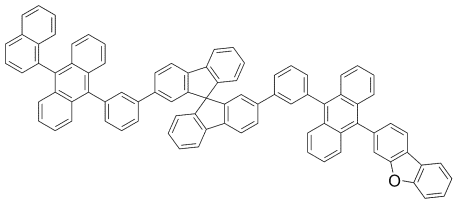
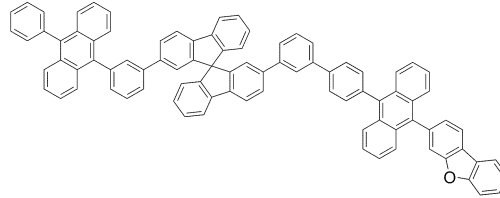
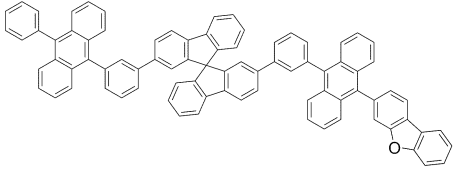
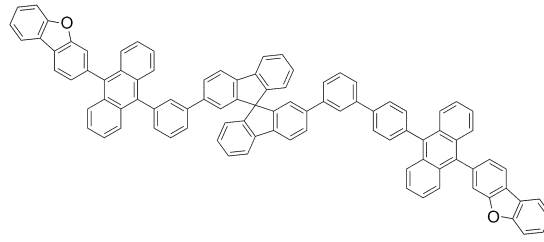
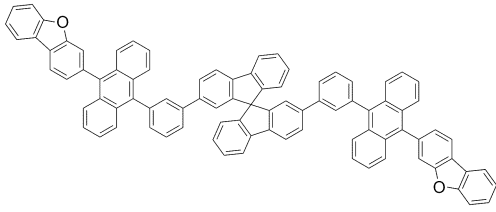
상기  $R^1$  내지  $R^4$ 는 각각 독립적으로 수소 또는  $C_{1-30}$ 의 알킬기인, 화합물.

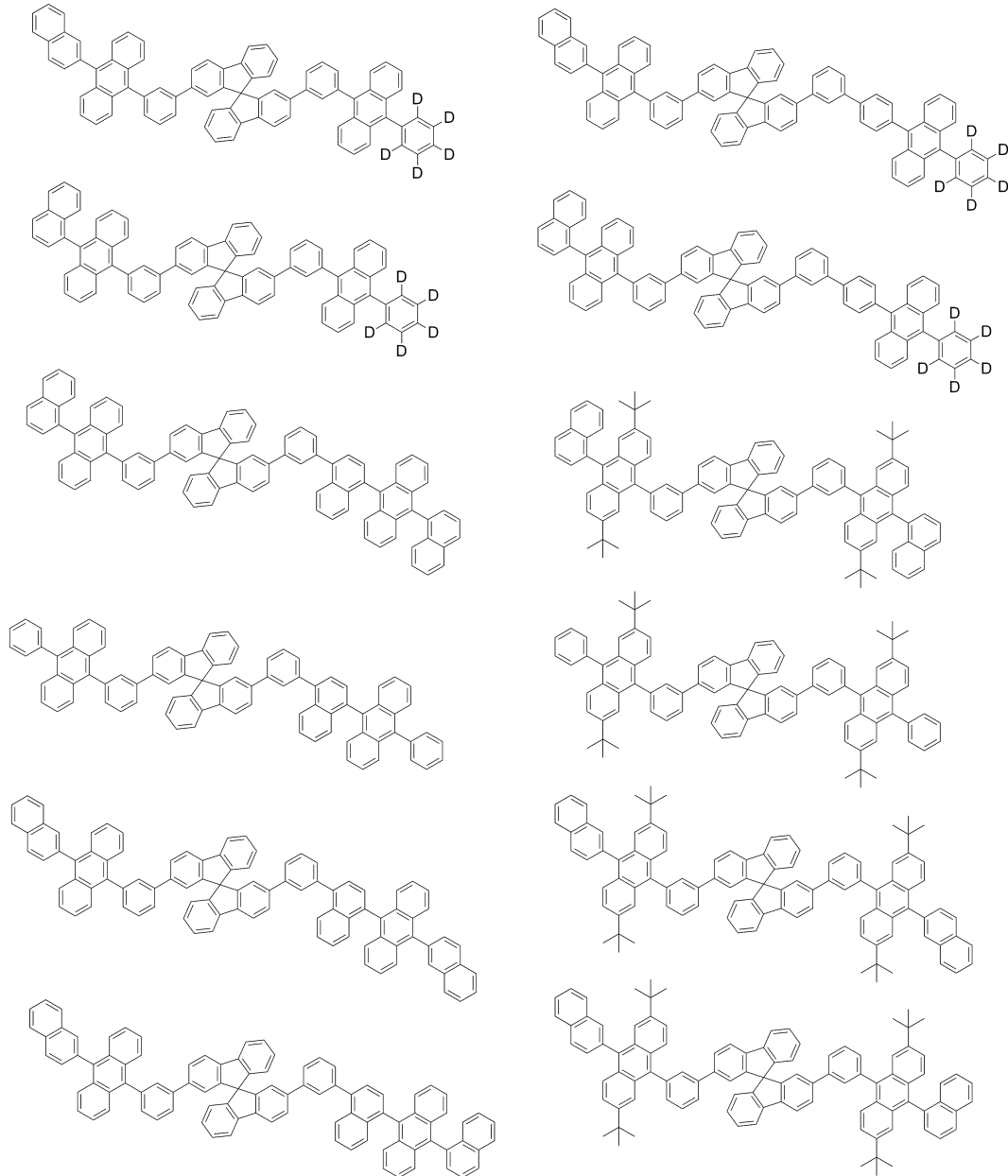
**청구항 6**

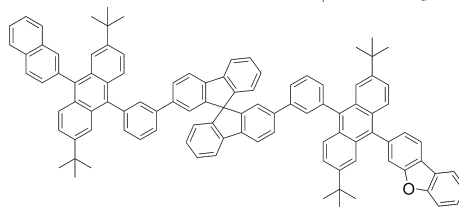
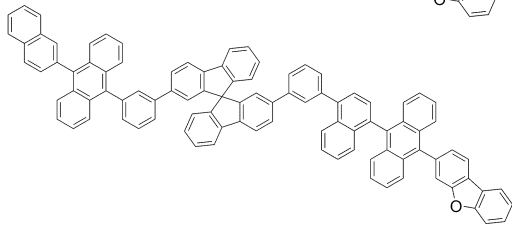
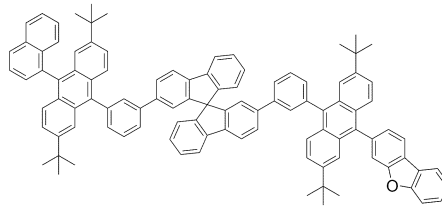
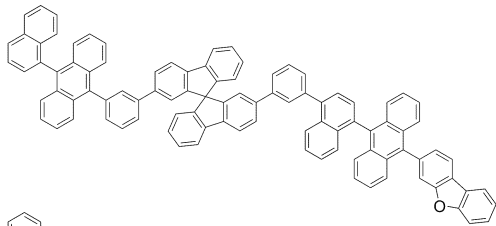
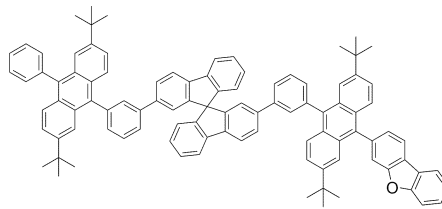
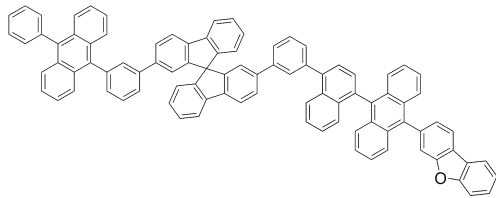
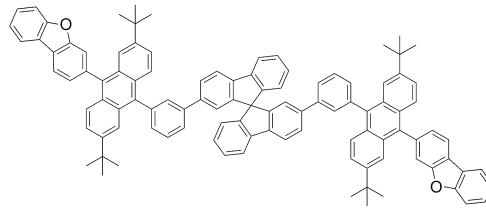
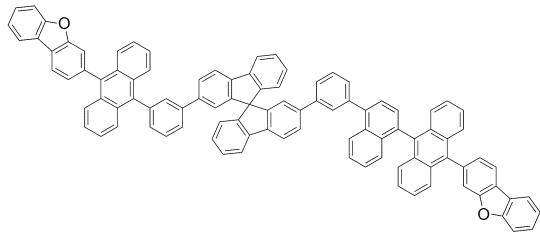
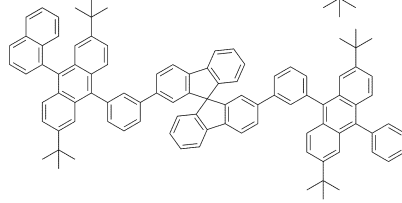
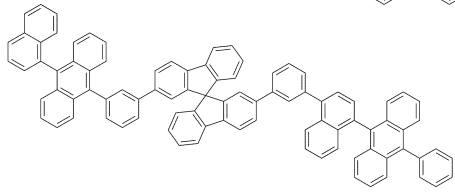
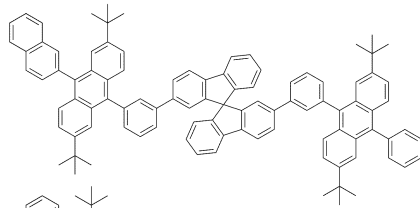
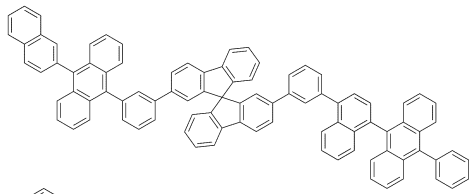
제 1 항에 있어서,

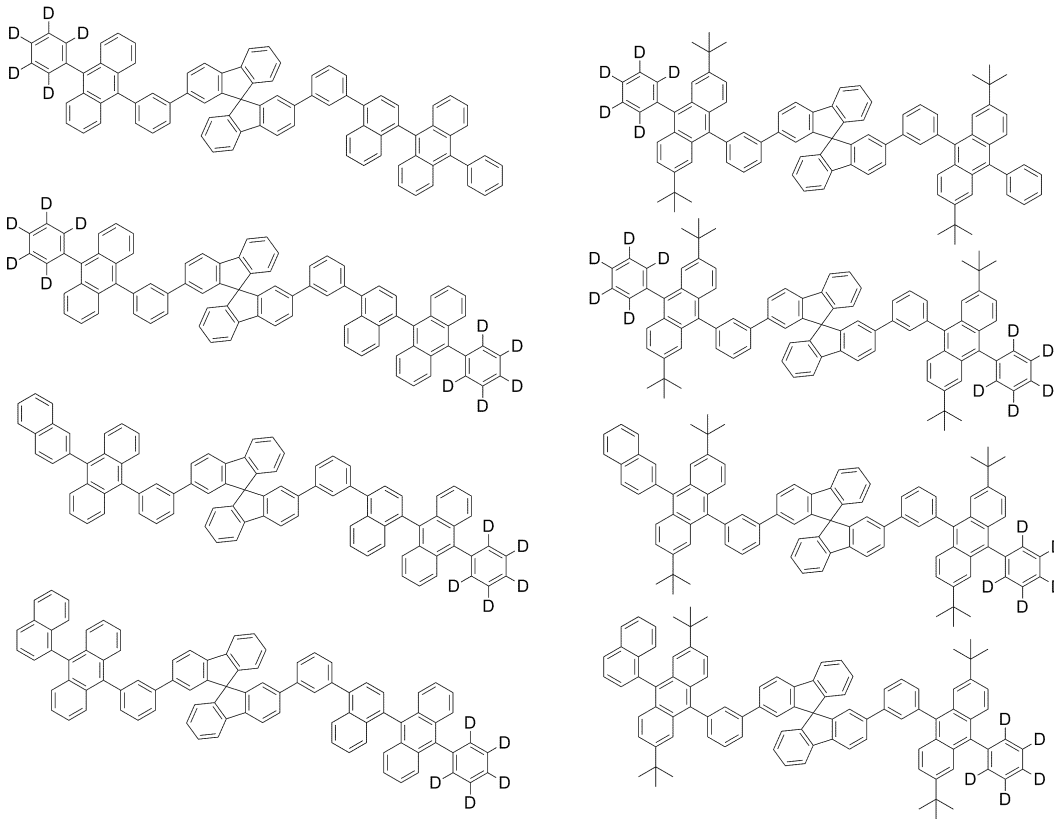
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식의 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나인, 화합물.











**청구항 7**

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 적어도 한 층은 제 1 항의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것인, 유기 발광 소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

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

**배경 기술**

[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 유기물 층을 포함하는 구조를 가진다. 상기 유기물 층은 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.

[0007] 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.

- [0009] 한편, 최근에는 공정 비용 절감을 위하여 기존의 증착 공정 대신 용액 공정, 특히 잉크젯 공정을 이용한 유기 발광 소자가 개발되고 있다.
- [0010] 초기에는 모든 유기 발광 소자 층의 형성에 용액 공정을 적용하여 제조된 유기 발광 소자를 개발하려 하였으나, 현재 기술로는 한계가 있다. 그에 따라, 정구조 형태에서 정공주입층(HIL), 정공수송층(HTL), 발광층(EML) 등의 형성을 용액 공정으로 진행하고, 이외의 층은 기존의 증착 공정을 적용하여 형성하는 하이브리드 공정이 연구 중이다. 또한, 상기 전자수송층(ETL)의 형성에도 용액 공정을 적용하려는 시도가 이루어지고 있다.
- [0012] 상기와 같은 유기 발광 소자에 사용되는 유기물에 대하여 새로운 재료의 개발이 지속적으로 요구되고 있다.
- [0014] 이에 본 발명에서는 유기 발광 소자에 사용될 수 있으면서 동시에 용액 공정에 적용 가능한 신규한 유기 발광 소자의 소재를 제공한다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

- [0016] (특허문헌 0001) 한국특허 공개번호 제10-2000-0051826호 (2000.08.16)

**발명의 내용**

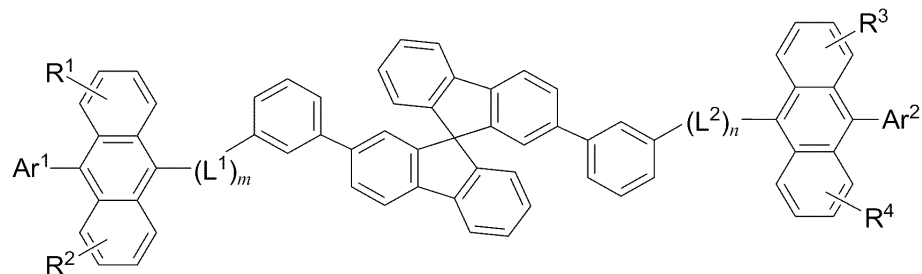
**해결하려는 과제**

- [0017] 본 발명은 용액 공정용 유기 발광 재료로 사용 가능한 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

**과제의 해결 수단**

- [0019] 본 발명에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물이 제공된다:

- [0020] [화학식 1]



- [0021]
- [0022] 상기 화학식 1에서,

- [0023] Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C<sub>1-30</sub>의 알킬기, C<sub>2-30</sub>의 알케닐기, C<sub>2-30</sub>의 알킬닐기, C<sub>1-30</sub>의 알콕시기, C<sub>6-30</sub>의 아릴옥시기, 또는 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>6-50</sub>의 아릴기; 또는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치

환되거나 치환되지 않은  $C_{2-60}$ 의 헤테로아릴기이고,

[0024]  $R^1$  내지  $R^4$ 는 각각 독립적으로 수소; 중수소;  $C_{1-30}$ 의 알킬기; 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기,  $C_{1-30}$ 의 알킬기,  $C_{2-30}$ 의 알케닐기,  $C_{2-30}$ 의 알키닐기,  $C_{1-30}$ 의 알콕시기,  $C_{6-30}$ 의 아릴옥시기, 또는  $C_{6-30}$ 의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은  $C_{6-50}$ 의 아릴기; 또는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고  $C_{6-30}$ 의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은  $C_{2-60}$ 의 헤테로아릴기이고,

[0025]  $L^1$  및  $L^2$ 는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기,  $C_{1-30}$ 의 알킬기,  $C_{2-30}$ 의 알케닐기,  $C_{2-30}$ 의 알키닐기,  $C_{1-30}$ 의 알콕시기,  $C_{6-30}$ 의 아릴옥시기, 또는  $C_{6-30}$ 의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은  $C_{6-50}$ 의 아릴렌기; 또는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고  $C_{6-30}$ 의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은  $C_{2-60}$ 의 헤테로아릴렌기이고,

[0026] m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수이다.

[0028] 또한, 본 발명에 따르면, 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 적어도 한 층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것인, 유기 발광 소자가 제공된다.

### 발명의 효과

[0030] 본 발명에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 유기물 층의 재료로서 사용될 수 있으며, 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동전압 및/또는 수명 특성을 향상시킬 수 있다. 특히, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 정공주입, 정공수송, 정공주입 및 수송, 발광, 전자수송, 또는 전자주입 재료로 사용될 수 있다.

[0031] 본 발명에 따른 화합물은 1,3-페닐렌 구조를 포함하여 유기 용매에 대한 우수한 용해도를 나타낼 수 있다. 그리고, 본 발명에 따른 화합물은 spirofluorene을 중심으로 발광단이 연결된 구조를 가짐으로써 용액 공정에 적합한 코팅성을 나타낼 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

[0033] 도 1은 기관(1), 양극(2), 발광층(3), 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

도 2는 기관(1), 양극(2), 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7), 전자 수송층(8), 및 음극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

도 3은 제조예 1의 화합물 A에 대한 mass 스펙트럼이다.

도 4는 제조예 4의 화합물 D에 대한 mass 스펙트럼이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0034] 이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 발명의 구현 예들에 따른 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 대해 상세히 설명하기로 한다.

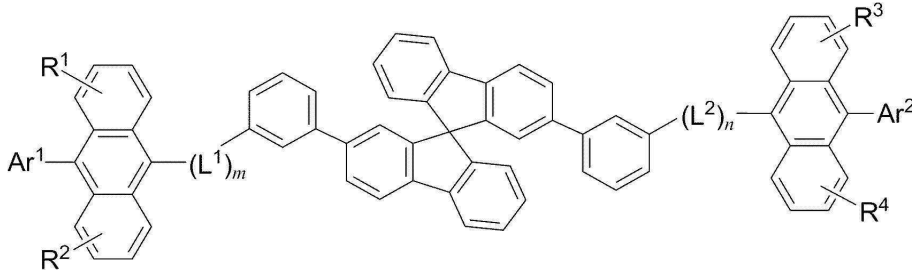
[0036] 본 명세서에서 명시적인 언급이 없는 한, 전문용어는 단지 특정 실시예를 언급하기 위한 것이며, 본 발명을 한정하는 것을 의도하지 않는다.

[0037] 본 명세서에서 사용되는 단수 형태들은 문구들이 이와 명백히 반대의 의미를 나타내지 않는 한 복수 형태들도 포함한다.

[0038] 본 명세서에서 사용되는 "포함"의 의미는 특정 특성, 영역, 정수, 단계, 동작, 요소 및/또는 성분을 구체화하며, 다른 특정 특성, 영역, 정수, 단계, 동작, 요소, 성분 및/또는 균의 존재나 부가를 제외시키는 것은 아니다.

[0040] 발명의 일 구현 예에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물이 제공된다:

[0041] [화학식 1]



[0042]

[0043] 상기 화학식 1에서,

[0044] Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C<sub>1-30</sub>의 알킬기, C<sub>2-30</sub>의 알케닐기, C<sub>2-30</sub>의 알킬닐기, C<sub>1-30</sub>의 알콕시기, C<sub>6-30</sub>의 아릴옥시기, 또는 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>6-50</sub>의 아릴기; 또는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>2-60</sub>의 헤테로아릴기이고,

[0045] R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup>는 각각 독립적으로 수소; 중수소; C<sub>1-30</sub>의 알킬기; 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C<sub>1-30</sub>의 알킬기, C<sub>2-30</sub>의 알케닐기, C<sub>2-30</sub>의 알킬닐기, C<sub>1-30</sub>의 알콕시기, C<sub>6-30</sub>의 아릴옥시기, 또는 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>6-50</sub>의 아릴기; 또는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>2-60</sub>의 헤테로아릴기이고,

[0046] L<sup>1</sup> 및 L<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C<sub>1-30</sub>의 알킬기, C<sub>2-30</sub>의 알케닐기, C<sub>2-30</sub>의 알킬닐기, C<sub>1-30</sub>의 알콕시기, C<sub>6-30</sub>의 아릴옥시기, 또는 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>6-50</sub>의 아릴렌기; 또는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>2-60</sub>의 헤테로아릴렌기이고,

[0047] m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수이다.

[0049] 본 발명자들의 계속적인 연구 결과, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 다양한 용매에 대해 큰 용해도를 나타내어, 용액 공정을 통한 유기 발광 소자의 제조에 적합한 특성을 갖는다.

[0050] 상기 용액 공정은 유기 발광 소자의 재료들을 포함한 층을 잉크젯 프린팅, 스핀 코팅 등을 통해 원하는 곳에 형성할 수 있는 공법이다. 상기 용액 공정은 진공 챔버에서 유기 재료를 기화시키는 기존의 진공 증착 공정에 비하여 유기 재료의 소모량을 줄일 수 있을 뿐만 아니라, 설비 투자 비용이 적고 공정 시간이 짧다는 장점을 갖는다.

[0051] 이러한 용액 공정에는 대표적으로 잉크젯 프린팅 및 스핀 코팅 등과 같은 기법이 활용된다. 그러므로, 상기 용액 공정에 적합한 용매에 대해 큰 용해도를 갖는 유기 재료의 개발이 중요하게 여겨진다.

[0052] 그런데, 기존의 진공 증착용 유기 재료는 용매에 대한 용해도가 매우 낮거나 특정 용매에 대해서만 용해되는 특성을 가져서, 용액 공정에 적용되기 어려운 한계가 있다.

[0053] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 잉크젯 프린팅 및 스핀 코팅 등에 적합한 용매들에 대해 큰 용해도를 가져

서, 용액 공정을 통한 유기 발광 소자의 제조를 가능케 한다.

[0054] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 높은 유리전이온도( $T_g$ )를 가져, 이를 적용한 유기 발광 소자에 높은 열안정성의 제공을 가능하게 한다. 특히, 상기 화합물은 9,9'-spirobifluorene 그룹을 중심으로 좌측과 우측에 각각 메타(meta) 위치에 결합손을 갖는 1,3-페닐렌 그룹이 도입된 구조를 가짐에 따라 유기 용매에 대한 우수한 용해도를 나타낼 수 있다.

[0056] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 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 헤테로아릴기로 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, 비페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다.

[0058] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 30인 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-메틸헥틸, 2-메틸헥틸, 4-메틸-2-헥틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 1-메틸헥실, 사이클로헵틸메틸, 사이클로헥틸메틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필헵틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸-프로필, 1,1-디메틸-프로필, 이소헥실, 2-메틸헵틸, 4-메틸헥실, 5-메틸헥실 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

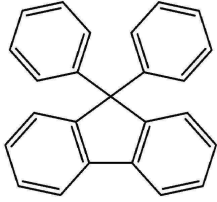
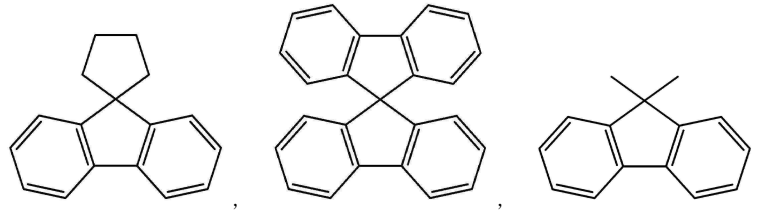
[0060] 본 명세서에서, 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 30인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 6이다. 알케닐기의 구체적인 예로는 비닐, 1-프로페닐, 이소프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-펜테닐, 2-펜테닐, 3-펜테닐, 3-메틸-1-부테닐, 1,3-부타디에닐, 알릴, 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.

[0062] 본 명세서에서, 알킬닐기는 탄소수 2 내지 30의 알킨 혹은 그 유도체로부터 수소 1 원자를 제거한 형태의 1가 그룹이다.

[0064] 본 명세서에서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 50인 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, 피아레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0066] 본 명세서에서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있다.

상기 플루오레닐기가 치환되는 경우,



등이 될 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0068] 본 명세서에서, 헤테로아릴기는 이중 원자로 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 2 내지 30의 아릴기이다. 헤테로아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 아크리딘기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴놀살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난쓰롤린기(phenanthroline), 이소옥사졸릴기, 티아디아졸릴기, 페노티아지닐기, 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0070] 본 명세서에서, 아릴렌은 2가 그룹인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 헤테로아릴렌은 2가 그룹인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0072] 상기 화학식 1에서,  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기,  $C_{1-30}$ 의 알킬기,  $C_{2-30}$ 의 알케닐기,  $C_{2-30}$ 의 알키닐기,  $C_{1-30}$ 의 알콕시기,  $C_{6-30}$ 의 아릴옥시기, 또는  $C_{6-30}$ 의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은  $C_{6-50}$ 의 아릴기; 또는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고  $C_{6-30}$ 의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은  $C_{2-60}$ 의 헤테로아릴기이다.

[0073] 바람직하게는, 상기  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는 각각 독립적으로 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 벤조퓨라닐기, 또는 플루오레닐기 동일 수 있다. 그리고, 상기  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는 각각 독립적으로 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필, 부틸, 이소부틸, 터트부틸, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 부톡시, 이소부톡시, 또는 네오부톡시로 치환되거나 비치환된 것일 수 있다.

[0075] 상기 화학식 1에서, 상기  $R^1$  내지  $R^4$ 는 각각 독립적으로 수소; 중수소;  $C_{1-30}$ 의 알킬기; 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기,  $C_{1-30}$ 의 알킬기,  $C_{2-30}$ 의 알케닐기,  $C_{2-30}$ 의 알키닐기,  $C_{1-30}$ 의 알콕시기,  $C_{6-30}$ 의 아릴옥시기, 또는  $C_{6-30}$ 의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은  $C_{6-50}$ 의 아릴기; 또는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고  $C_{6-30}$ 의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은  $C_{2-60}$ 의 헤테로아릴기이다.

[0076] 바람직하게는, 상기  $R^1$  내지  $R^4$ 는 각각 독립적으로 수소 또는  $C_{1-30}$ 의 알킬기이다.

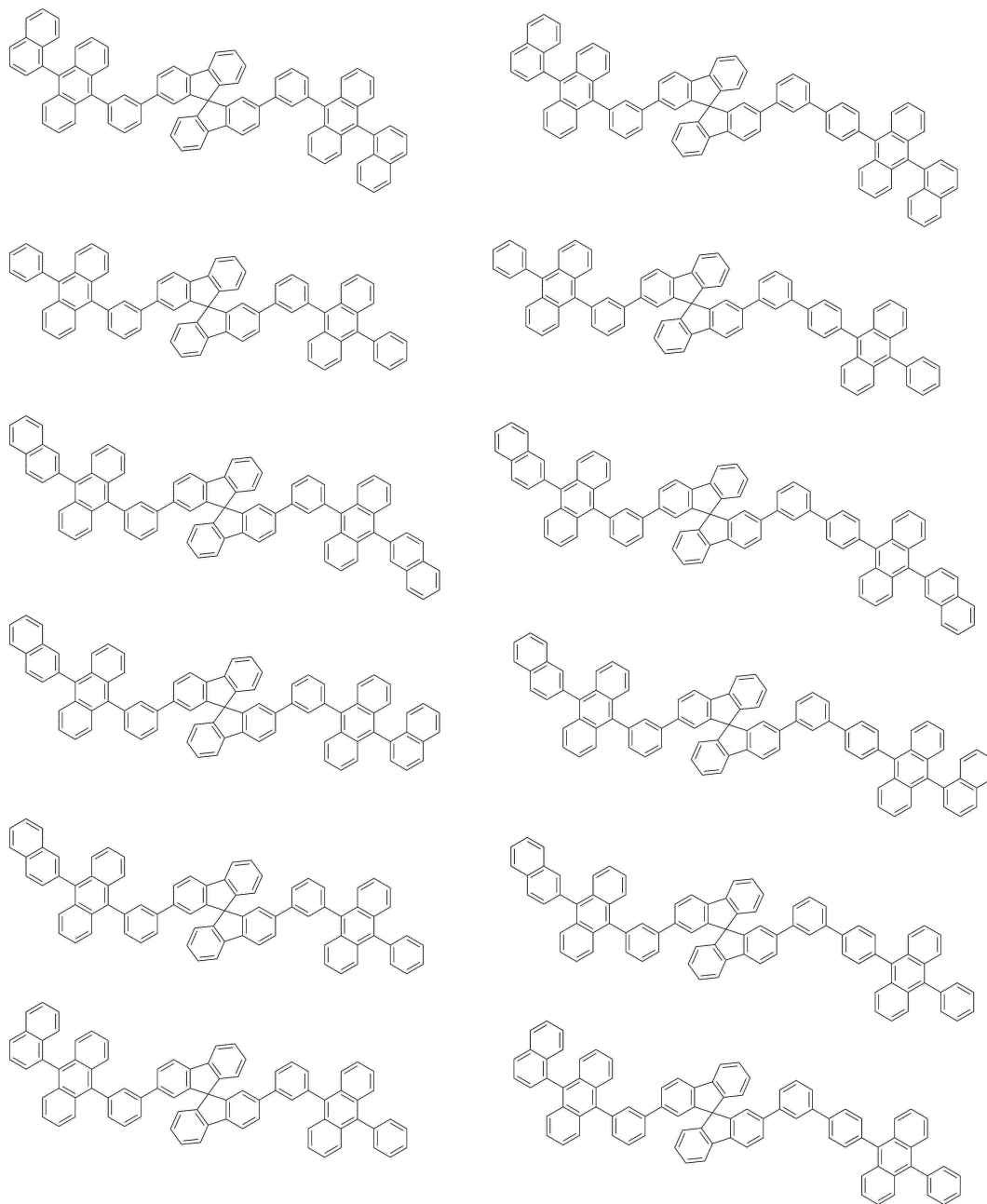
[0078] 상기 화학식 1에서, 상기  $L^1$  및  $L^2$ 는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기,  $C_{1-30}$ 의 알킬기,  $C_{2-30}$ 의 알케닐기,  $C_{2-30}$ 의 알키닐기,  $C_{1-30}$ 의 알콕시기,  $C_{6-30}$ 의 아릴옥시기, 또는  $C_{6-30}$ 의 아릴기로 치환되

거나 치환되지 않은 C<sub>6-50</sub>의 아릴렌기; 또는 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고 C<sub>6-30</sub>의 아릴기로 치환되거나 치환되지 않은 C<sub>2-60</sub>의 헤테로아릴렌기이다.

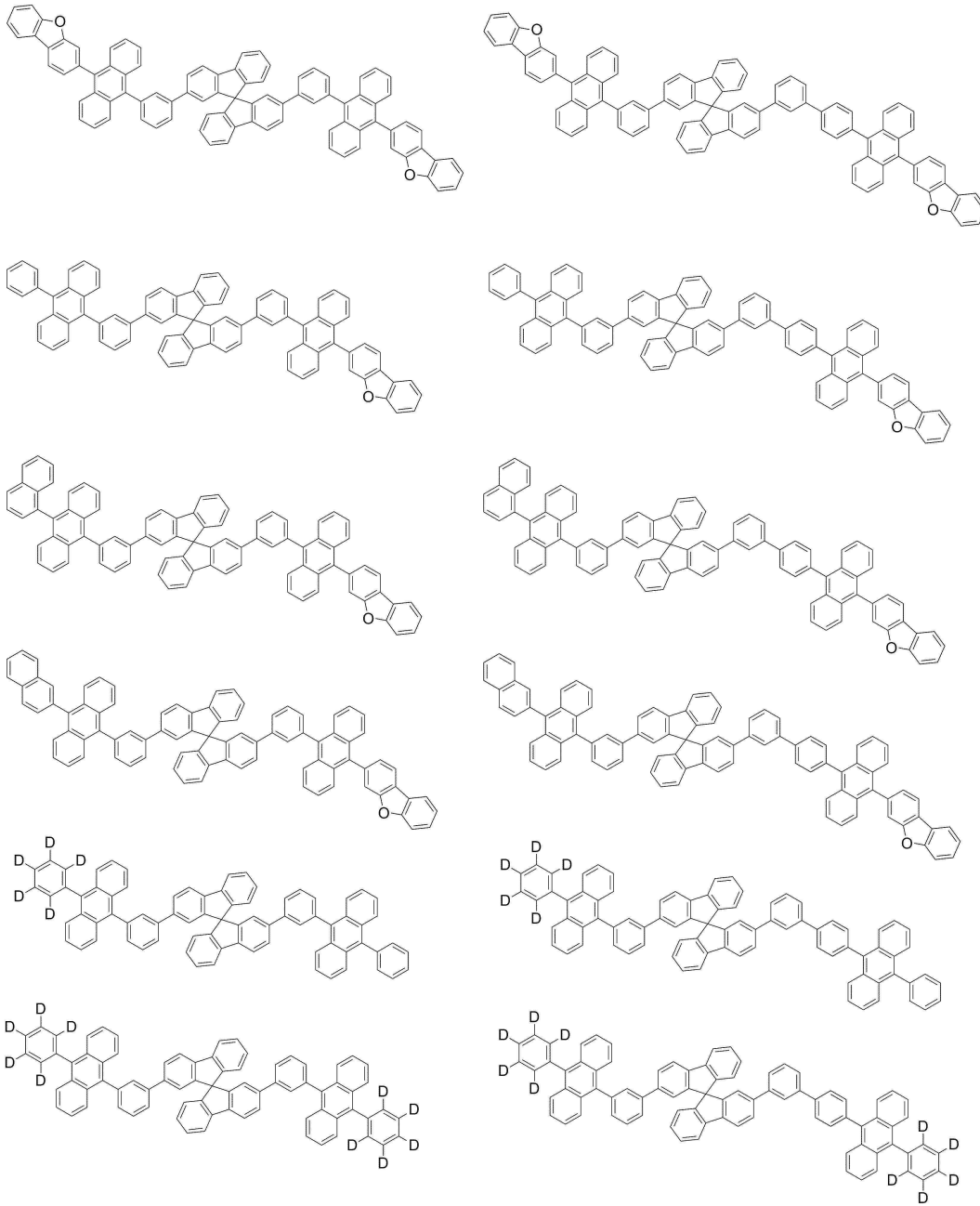
[0079] 바람직하게는, 상기 L<sup>1</sup> 및 L<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 페닐렌기, 나프틸렌기 또는 안트라세닐렌기 등일 수 있다. 그리고, 상기 L<sup>1</sup> 및 L<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필, 부틸, 이소부틸, tert부틸, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 부톡시, 이소부톡시, 또는 네오부톡시로 치환되거나 비치환된 것일 수 있다.

[0081] 상기 화학식 1에서, 상기 m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수이다. 바람직하게는, 상기 m 및 n은 각각 0 또는 1이다.

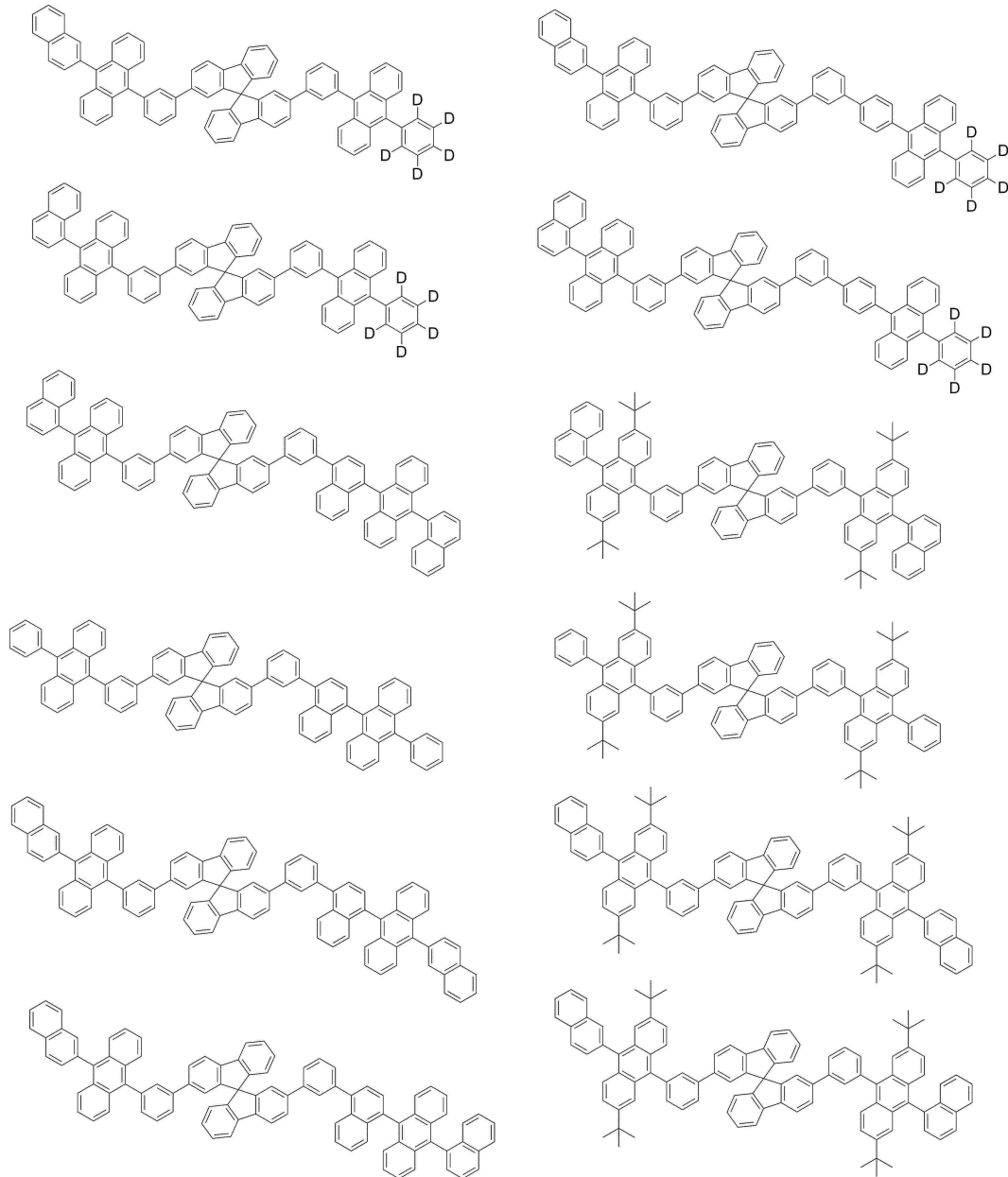
[0083] 바람직하게는, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식의 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 어느 하나의 화합물일 수 있다.



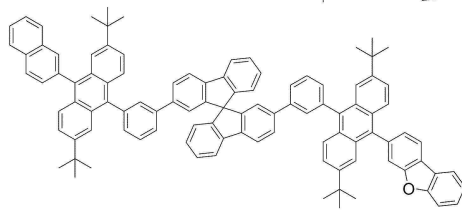
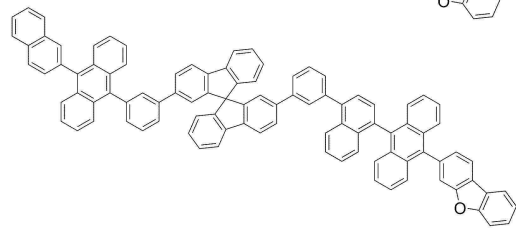
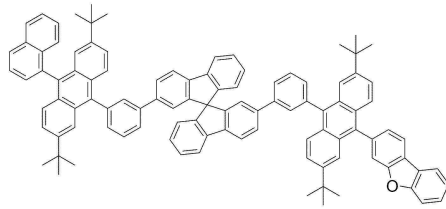
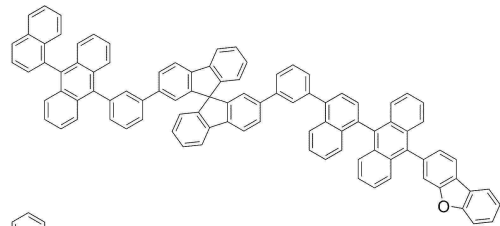
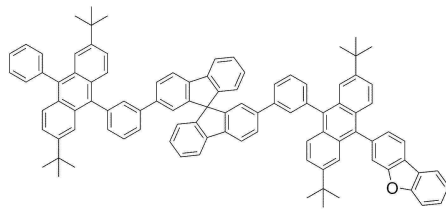
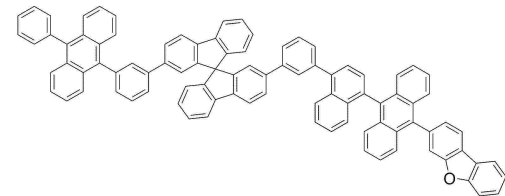
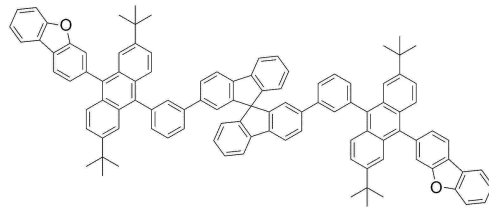
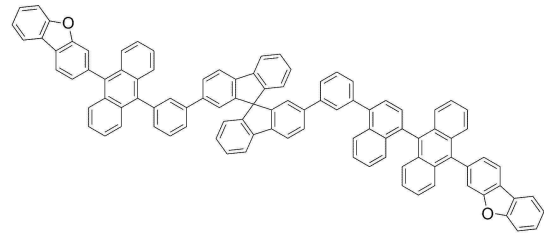
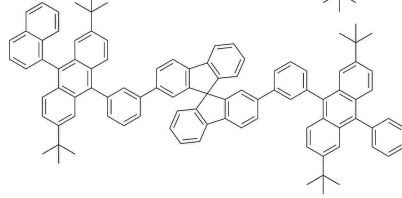
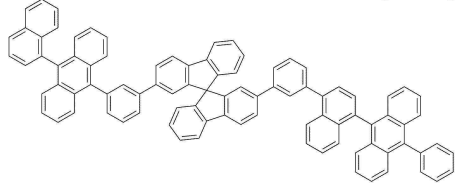
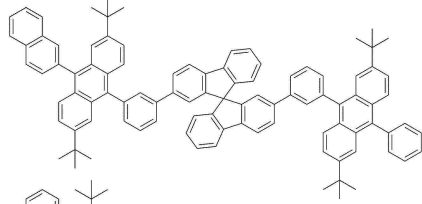
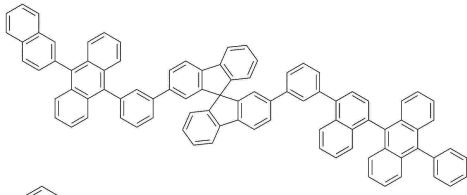
[0084]



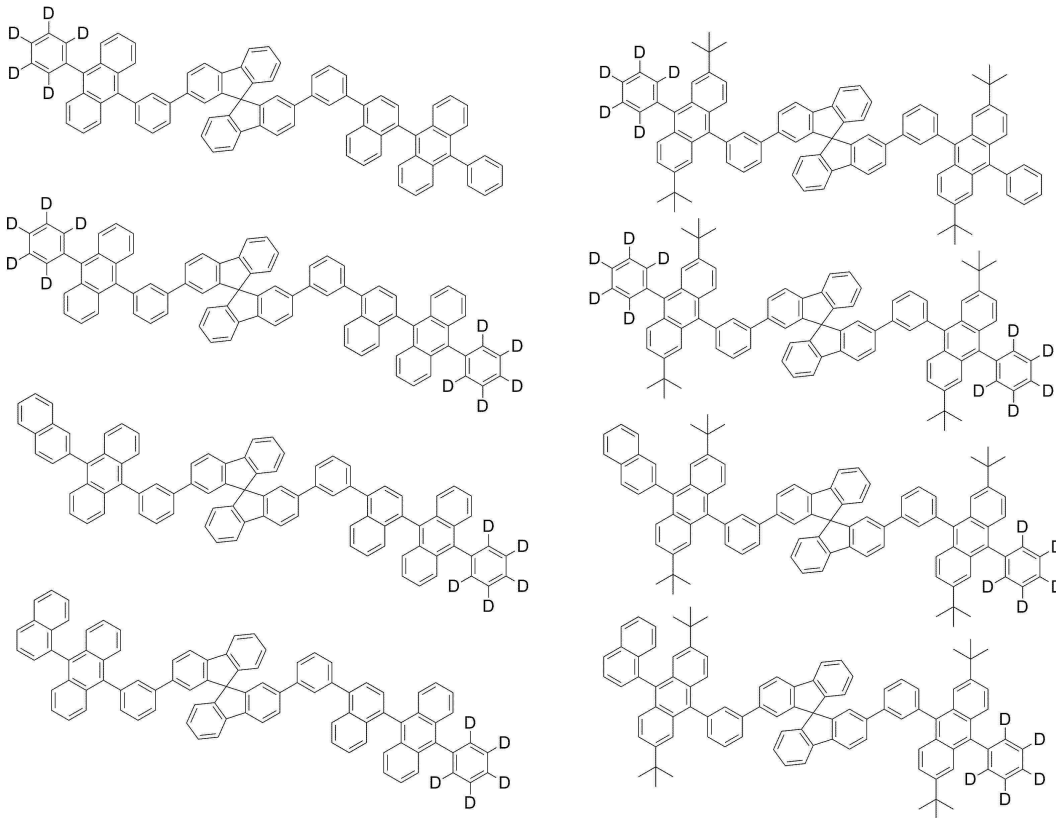
[0086]



[0088]



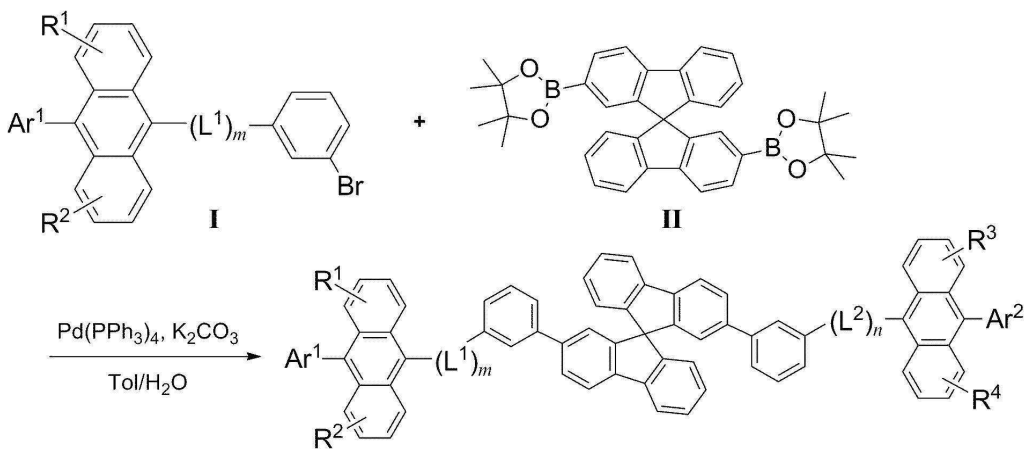
[0090]



[0092]

[0094] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 반응식 1과 같은 방법으로 제조될 수 있다.

[0095] [반응식 1]



[0096]

[0097] 상기 반응식 1에서, Ar<sup>1</sup>, Ar<sup>2</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, L<sup>1</sup>, L<sup>2</sup>, m, 및 n은 각각 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[0098] 일 예로, 상기 화학식 1로 표시되는 비대칭 화합물의 합성은 서로 다른 구조의 중간체 I를 중간체 II의 양쪽에 각각 커플링하는 두 번의 Suzuki coupling 합성으로 진행될 수 있다.

[0099] 상기 화합물의 제조 방법은 후술할 제조예에서 보다 구체화될 수 있다.

[0101] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 용액 공정에 의해 유기 발광 소자의 유기물층에 포함될 수 있다. 이를 위하여, 본 발명에 따르면 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 및 용매를 포함하는 코팅 조성물이 제공된다.

- [0102] 상기 용매는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 용해 또는 분산시킬 수 있는 용매이면 특별히 제한되지 않는다.
- [0103] 일례로, 상기 용매로는 클로로포름, 염화메틸렌, 1,2-디클로로에탄, 1,1,2-트리클로로에탄, 클로로벤젠, o-디클로로벤젠 등의 염소계 용매; 테트라하이드로퓨란, 디옥산 등의 에테르계 용매; 톨루엔, 크실렌, 트리메틸벤젠, 메시틸렌 등의 방향족 탄화수소계 용매; 시클로헥산, 메틸시클로헥산, n-헵탄, n-헥산, n-헵탄, n-옥탄, n-노난, n-데칸 등의 지방족 탄화수소계 용매; 아세톤, 메틸에틸케톤, 시클로헥사논 등의 케톤계 용매; 아세트산에틸, 아세트산부틸, 에틸셀로솔브아세테이트 등의 에스테르계 용매; 에틸렌글리콜, 에틸렌글리콜모노부틸에테르, 에틸렌글리콜모노에틸에테르, 에틸렌글리콜모노메틸에테르, 디메톡시에탄, 프로필렌글리콜, 디에톡시메탄, 트리에틸렌글리콜모노에틸에테르, 글리세린, 1,2-헥산디올 등의 다가 알코올 및 그의 유도체; 메탄올, 에탄올, 프로판올, 이소프로판올, 시클로헥산올 등의 알코올계 용매; 디메틸술폰사이드 등의 술폰사이드계 용매; 및 N-메틸-2-피롤리돈, N,N-디메틸포름아미드 등의 아미드계 용매; 이소아밀벤조에이트, 메틸벤조에이트, 에틸벤조에이트, 부틸벤조에이트, 메틸-2-메톡시벤조에이트 등의 벤조에이트계 용매; 테트라린; 3-phenoxy-toluene 등의 용매를 들 수 있다. 또한, 상술한 용매를 1종 단독으로 사용하거나 2종 이상의 용매를 혼합하여 사용할 수 있다.
- [0104] 비제한적인 예로, 상기 용매의 비점은 40 내지 350 °C, 바람직하게는 80 내지 330 °C일 수 있다.
- [0105] 비제한적인 예로, 상기 단독 혹은 혼합 용매의 점도는 1 내지 10 CP, 바람직하게는 3 내지 8 CP일 수 있다.
- [0106] 비제한적인 예로, 상기 코팅 조성물의 농도는 0.1 내지 20 wt/v%, 바람직하게는 0.5 내지 10 wt/v%일 수 있다.
- [0108] 한편, 발명의 다른 일 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0109] 일례로, 본 발명에 따르면, 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 적어도 한 층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것인, 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0111] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 유기물 층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으며, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다.
- [0112] 예컨대, 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 유기물 층으로서 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 전계 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기층을 포함할 수 있다.
- [0113] 또한, 상기 유기물 층은 정공 주입층, 정공 수송층, 또는 정공 주입과 수송을 동시에 하는 층을 포함할 수 있고, 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 또는 정공 주입과 수송을 동시에 하는 층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.
- [0114] 또한, 상기 유기물 층은 발광층을 포함할 수 있고, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.
- [0115] 또한, 상기 유기물 층은 전자 수송층, 또는 전자 주입층을 포함할 수 있고, 상기 전자 수송층 또는 전자 주입층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.
- [0116] 또한, 상기 전자 수송층, 전자 주입층, 또는 전자수송 및 전자주입을 동시에 하는 층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.
- [0117] 또한, 상기 유기물 층은 발광층 및 전자 수송층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0118] 또한, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는, 기판 상에 양극, 1층 이상의 유기물 층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조(normal type)의 유기 전계 발광 소자일 수 있다.
- [0119] 또한, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 기판 상에 음극, 1층 이상의 유기물 층 및 양극이 순차적으로 적

층된 역방향 구조(inverted type)의 유기 전계 발광 소자일 수 있다.

- [0120] 예컨대, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자의 구조는 도 1 및 도 2에 예시되어 있다.
- [0121] 도 1은 기관(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 전계 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 도 1과 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다.
- [0122] 도 2는 기관(1), 양극(2), 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7), 전자 수송층(8), 및 음극(4)로 이루어진 유기 전계 발광 소자의 예를 도시한 것이다.
- [0123] 도 2와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층 중 1층 이상; 바람직하게는 상기 발광층에 포함될 수 있다.
- [0125] 한편, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는, 상기 유기물 층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.
- [0126] 또한, 상기 유기 전계 발광 소자가 복수개의 유기물 층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.
- [0127] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 기관 상에 제1 전극, 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층시켜 제조할 수 있다.
- [0128] 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 전자 수송층을 포함하는 유기물 층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시켜 제조할 수 있다.
- [0129] 이와 같은 방법 외에도, 기관 상에 음극 물질부터 유기물 층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 전계 발광 소자를 만들 수 있다.
- [0130] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 전계 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물 층으로 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.
- [0132] 또한 발명의 구현 예에 따르면, 상술한 코팅 조성물을 사용하여 발광층을 형성하는 방법이 제공된다.
- [0133] 구체적으로, 양극 상에, 또는 양극 상에 형성된 정공 수송층 상에 상기 발광층을 용액 공정으로 코팅하는 단계; 및 상기 코팅된 코팅 조성물을 건조하는 단계를 포함한다.
- [0134] 상기 건조하는 단계는 질소, 아르곤 분위기 또는 공기 중에서 행해질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0135] 상기 건조하는 단계는 열처리를 통하여 행해질 수 있으며, 열처리 온도는 85 °C 내지 250 °C, 바람직하게는 100 °C 내지 150 °C 이다.
- [0136] 상기 열처리하여 건조하는 단계의 열처리 시간은 1 분 내지 2 시간, 바람직하게는 1 분 내지 30 분이다.
- [0138] 이와 같은 방법 외에도, 기관 상에 음극 물질로부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다(WO 2003/012890).
- [0140] 일례로, 상기 제1 전극은 양극이고, 상기 제2 전극은 음극이거나, 또는 상기 제1 전극은 음극이고, 상기 제2 전극은 양극이다.
- [0141] 상기 양극 물질로는 통상 유기물 층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다.
- [0142] 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.

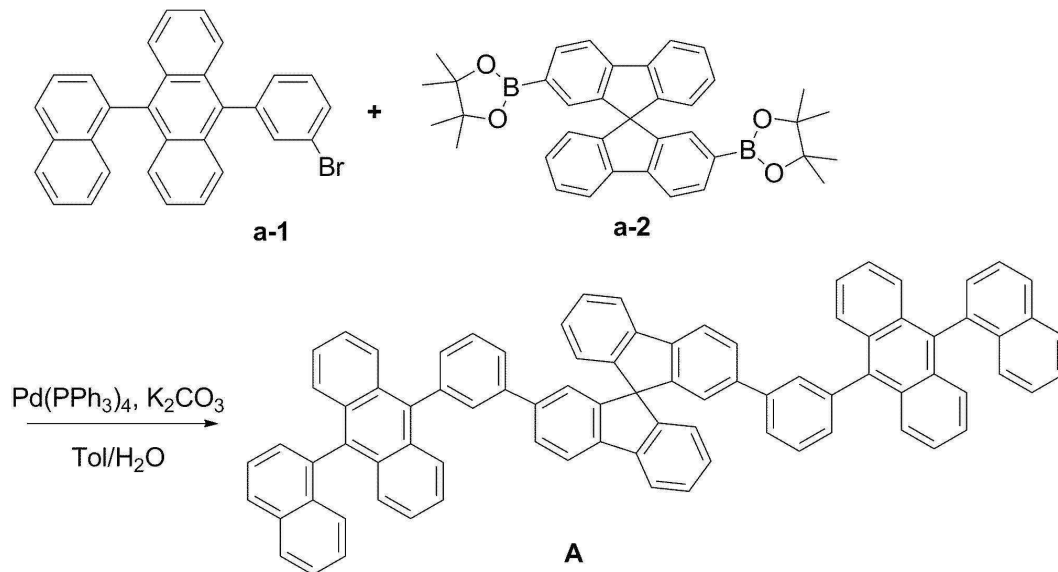
- [0143] 상기 음극 물질로는 통상 유기물 층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다.
- [0144] 상기 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0145] 상기 정공 주입 물질로는 전극으로부터 정공을 주입하는 층으로, 정공 주입 물질로는 정공을 수송하는 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.
- [0146] 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물 층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다.
- [0147] 상기 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.
- [0148] 상기 정공 수송층은 정공 주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층으로, 정공 수송 물질로 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다.
- [0149] 상기 정공 수송 물질의 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0150] 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.
- [0151] 상기 발광 물질의 구체적인 예로 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.
- [0152] 상기 발광층은 호스트 재료 및 도펀트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 있다.
- [0153] 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.
- [0154] 도펀트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스티릴아민 화합물, 붕소 착체, 플루오란텐 화합물, 금속 착체 등이 있다.
- [0155] 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 한정되지 않는다. 또한, 금속 착체로는 이리듐 착체, 백금 착체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0156] 상기 전자 수송 물질로는 전자 주입층으로부터 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.
- [0157] 상기 전자 수송 물질의 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq<sub>3</sub>를 포함한 착물; 유기 라디칼

화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

- [0158] 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.
- [0159] 상기 전자 주입층은 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, 박막 형성 능력이 우수한 화합물이 바람직하다.
- [0160] 상기 전자 주입층의 구체적인 예로는 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀴논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다이아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페틸렌테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 질소 함유 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0161] 상기 금속 착체 화합물로는 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 한정되지 않는다.
- [0162] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.
- [0163] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 전계 발광 소자 외에도 유기 태양 전지 또는 유기 트랜지스터에 적용될 수 있다.
- [0165] 이하, 발명의 이해를 돕기 위하여 바람직한 실시예들을 제시한다. 그러나 하기의 실시예들은 발명을 예시하기 위한 것일 뿐, 발명을 이들만으로 한정하는 것은 아니다.

[0167] 제조예 1

[0168] (화합물 A의 제조)



- [0169]
- [0170] 2,2'-Bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9,9'-spirobifluorene 1.5 g(2.64 mmol, 1.0 eq), 9-(3-bromophenyl)-10-(naphthalen-1-yl)anthracene 2.67 g(5.81 mmol, 2.2 eq), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.24 g(0.2 mmol, 0.08 eq), 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 2.19 g(15.85 mmol, 6.0 eq)를 250 mL two-neck round-bottom flask에 넣고 질소를 charge

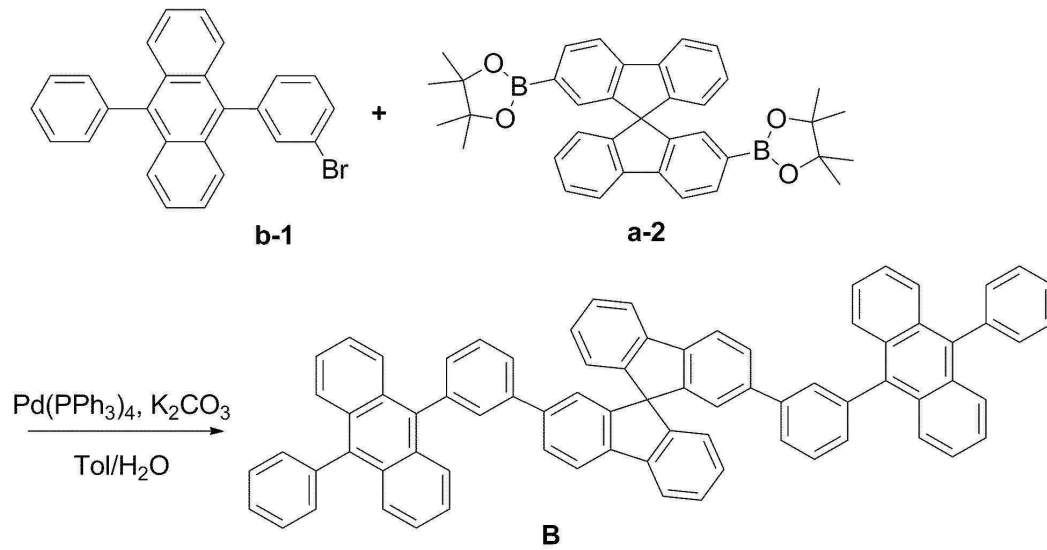
한다. Toluene 100 mL와 H<sub>2</sub>O 15 mL를 넣고 교반하며 110 °C로 승온하며 overnight으로 반응시킨다. 디클로로메탄/H<sub>2</sub>O로 extraction하고 유기층을 분리하여 MgSO<sub>4</sub>와 charcoal을 넣어 30 분 간 교반한 뒤 silica pad를 통과시킨다. Filtrate의 용매를 진공 건조시키고 헥산/디클로로메탄으로 컬럼 정제하여 백색 고체의 화합물 A (2.1 g, 수율 74 %)을 얻었다.

[0171] 상기 제조예 1의 화합물 A에 대한 mass 스펙트럼을 도 3에 나타내었다.

[0172] MS: [M+H]<sup>+</sup> = 1073.8

[0174] 제조예 2

[0175] (화합물 B의 제조)



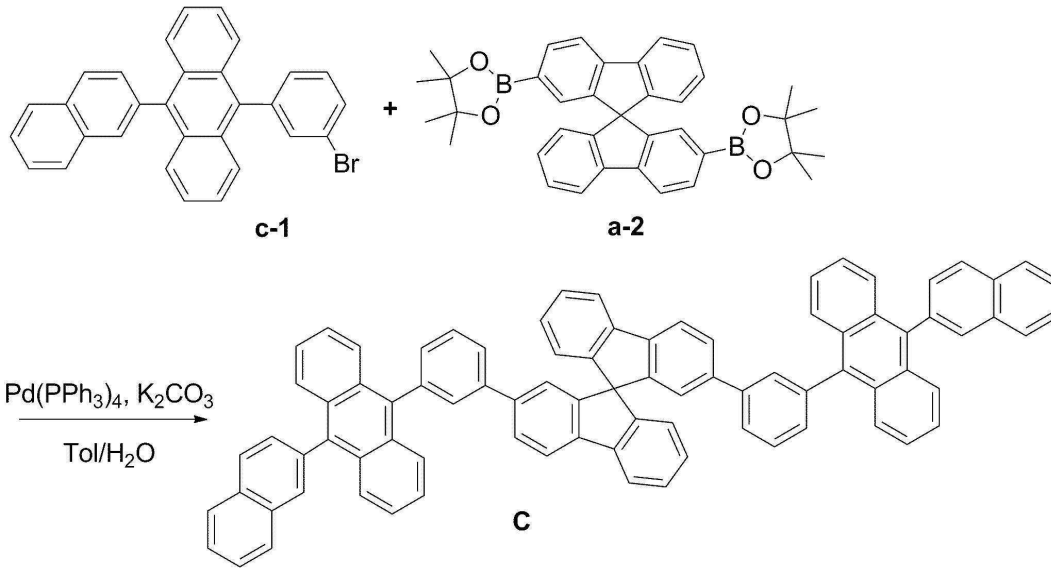
[0176]

[0177] 상기 화합물 9-(3-bromophenyl)-10-(naphthalen-1-yl)anthracene 대신 9-(3-bromophenyl)-10-phenylanthracene를 사용한 것을 제외하고, 상기 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화합물 B를 얻었다.

[0178] MS: [M+H]<sup>+</sup> = 973.8

[0180] 제조예 3

[0181] (화합물 C의 제조)



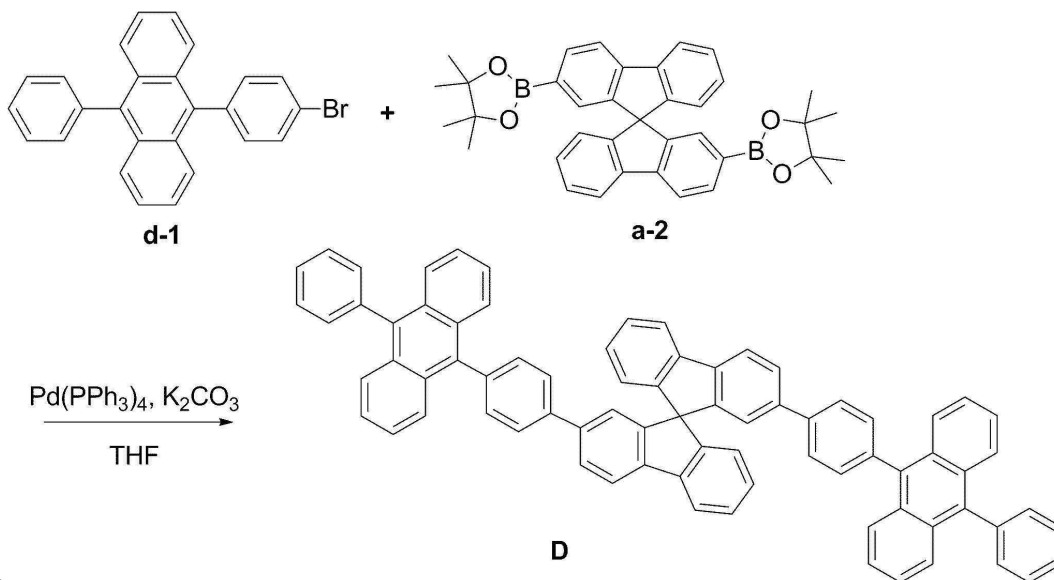
[0182]

[0183] 상기 화합물 9-(3-bromophenyl)-10-(naphthalen-1-yl)anthracene 대신 9-(3-bromophenyl)-10-(naphthalen-2-yl)anthracene를 사용한 것을 제외하고, 상기 제조에 1과 동일한 방법으로 상기 화합물 C를 얻었다.

[0184] MS:  $[\text{M}+\text{H}]^+ = 1073.9$

[0186] 제조예 4

[0187] (화합물 D의 제조)



[0189] \*

[0190] 상기 화합물 9-(3-bromophenyl)-10-(naphthalen-1-yl)anthracene 대신 9-(4-bromophenyl)-10-phenylanthracene를 사용한 것을 제외하고, 상기 제조에 1과 동일한 방법으로 상기 화합물 D를 얻었다.

[0191] 상기 제조예 4의 화합물 D에 대한 mass 스펙트럼을 도 4에 나타내었다.

[0192] MS:  $[\text{M}+\text{H}]^+ = 973.5$

[0194] 시험예 1 (용해도 실험)

[0195] 상기 화합물 A 내지 D를 각각 톨루엔에 넣은 후, 상온(25 °C)에서 30분 간 1500 rpm으로 stirring하였다. 이후, 레이저를 상기 용액에 통과시켜 탁달 효과를 통해 침전물이 생겼는지 확인하여 용해되는 양을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

**표 1**

	용질	용해도 (wt%)
실시예 1	화합물 A	9
실시예 2	화합물 B	10
실시예 3	화합물 C	9
비교예 1	화합물 D	< 1

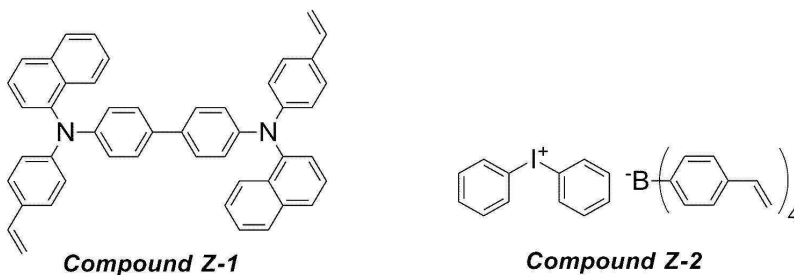
[0198] 상기 표 1을 참고하면, 상기 화합물 A 내지 C는 상기 화합물 D에 비해 톨루엔에 대한 용해도가 현저히 높음을 확인할 수 있다.

[0199] \*

[0200] 실시예 4 (유기 발광 소자의 제조)

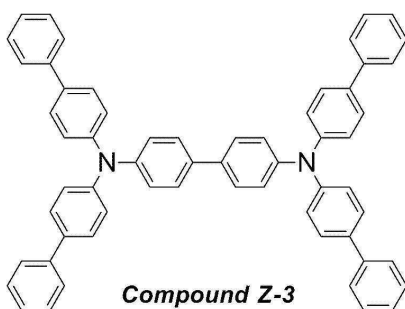
[0201] ITO(indium tin oxide)가 500 Å의 두께로 박막 증착된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이 때, 세제로는 피셔사(Fisher Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀리포어사(Millipore Co.) 제품의 필터로 2 차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30 분간 세척한 후, 증류수로 2 회 반복하여 초음파 세척을 10 분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 아세톤, 증류수, 이소프로필알콜 용제로 초음파 세척을 하고 건조하여, 세정된 ITO 유리 기판을 준비하였다.

[0203] 상기 ITO 투명 전극 위에 하기 화합물 Z-1과 하기 화합물 Z-2의 비율을 무게비 8:2로 혼합한 조성물을 스핀 코팅하고 질소 분위기 하에 핫 플레이트에서 220 °C, 30 분 조건으로 경화시켜 400 Å 두께의 정공 주입층을 형성하였다.



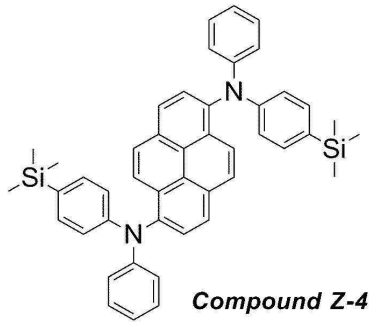
[0204]

[0206] 상기 정공 주입층 위에, 하기 화합물 Z-3을 톨루엔에 1 %의 무게비로 녹인 조성물을 스핀 코팅하고 핫 플레이트에서 200 °C, 30 분 조건에서 열처리하여 200 Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.



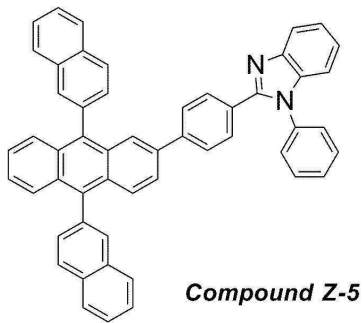
[0207]

[0209] 상기 정공 수송층 위에 상기 제조예 1에 따른 화합물 A와 하기 화합물 Z-4를 94:6의 비율로 톨루엔에 0.5 %의 무게비로 녹인 조성물을 스핀 코팅하여 200 Å 두께의 발광층을 형성하고 N<sub>2</sub> 분위기 하에 핫 플레이트에서 120 °C, 10 분 조건으로 코팅 조성물을 건조시켰다.



[0210]

[0212] 이후, 진공 증착기로 옮겨 하기 화합물 Z-5 (350 Å), LiF (10 Å), Al (1000 Å)을 순차적으로 증착하여 유기 발광 소자를 제작하였다. 상기 과정에서 캐소드인 LiF의 증착 속도는 0.1 Å/sec, 알루미늄(Al)의 증착 속도는 2 Å/sec를 유지하였으며, 증착시 진공도는 2x10<sup>-7</sup> 내지 5x10<sup>-8</sup> torr를 유지하였다.



[0213]

[0215] 실시예 5-6 및 비교예 2

[0216] 상기 제조예 1에 따른 화합물 A 대신 하기 표 2에 기재된 화합물을 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 4와 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0218] 시험예 2 (유기 발광 소자의 특성 평가)

[0219] 상기 실시예 4 내지 6 및 비교예 2에 따른 유기 발광 소자에 전류를 인가하였을 때, 구동전압, 전류 효율, 전력 효율, 및 수명(T90)을 측정하였다. 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0220] 상기 수명(T90)은 휘도가 초기 휘도에서 90%로 감소하는데 소요되는 시간을 의미한다.

**표 2**

	발광층 호스트	구동 전압 (V@10mA /cm <sup>2</sup> )	전류 효율 (cd/A@10mA /cm <sup>2</sup> )	전력 효율 (lm/W)	T90 (hr) @ 20mA/cm <sup>2</sup>
실시예 4	화합물 A, 화합물 4	4.55	8.21	5.67	41
실시예 5	화합물 B, 화합물 4	4.88	7.53	4.85	34

[0222]

실시예 6	화합물 C, 화합물 4	4.85	8.03	5.20	38
비교예 2	화합물 D, 화합물 4	5.10	5.46	3.36	13

[0223] 상기 표 2를 참고하면, 상기 화합물 A 내지 C를 발광층의 호스트로 사용한 유기 발광 소자는 상기 화합물 D를 발광층의 호스트로 사용한 것에 비하여 구동 전압, 전류 효율 및 수명의 측면에서 모두 우수한 특성을 나타내었다.

**부호의 설명**

- [0225]
- 1: 기관
  - 2: 양극
  - 3: 발광층
  - 4: 음극
  - 5: 정공 주입층
  - 6: 정공 수송층
  - 7: 발광층
  - 8: 전자 수송층

**도면**

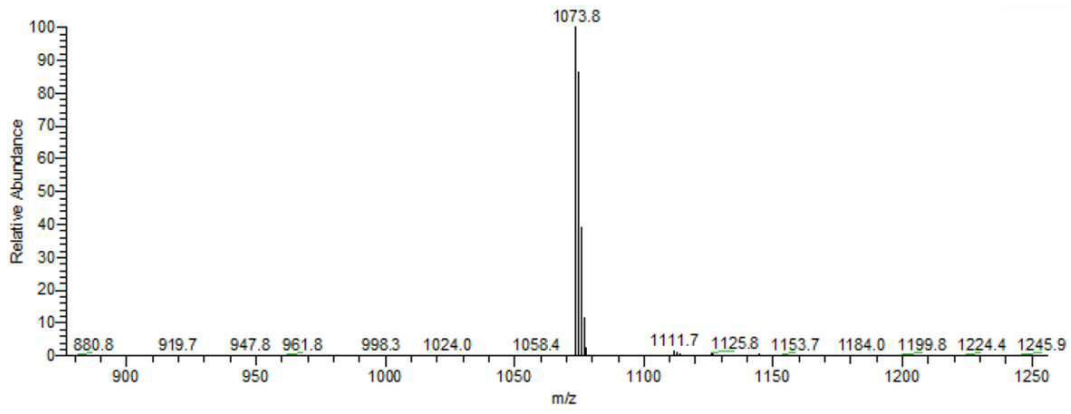
**도면1**

4
3
2
1

**도면2**

4
8
7
6
5
2
1

도면3



도면4

