

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2012년 7월 26일 (26.07.2012)



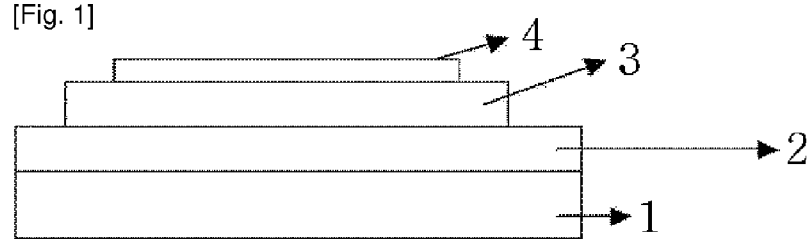
(10) 국제공개번호
WO 2012/099376 A2

- (51) 국제특허분류: C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
 - (21) 국제출원번호: PCT/KR2012/000396
 - (22) 국제출원일: 2012년 1월 17일 (17.01.2012)
 - (25) 출원언어: 한국어
 - (26) 공개언어: 한국어
 - (30) 우선권정보: 10-2011-0004715 2011년 1월 17일 (17.01.2011) KR
 - (71) 출원인 (US 을(를) 제외한 모든 지정국에 대하여): **주식회사 엘지화학 (LG CHEM, LTD.)** [KR/KR]; 서울특별시 영등포구 여의도동 20, 150-721 Seoul (KR).
 - (72) 발명자; 겸
 - (75) 발명자/출원인 (US 에 한하여): **홍성길 (HONG, Sung Kil)** [KR/KR]; 대전광역시 유성구 도룡동 LG 사원아파트 9동 204호, 305-340 Daejeon (KR). **김연환 (KIM, Yun Hwan)** [KR/KR]; 서울특별시 양천구 목5동 목동 6단지아파트 610동 1801호, 158-756 Seoul (KR). **박태윤 (PARK, Tae Yoon)** [KR/KR]; 대전광역시 유성구 관평동 테크노밸리 쌍용 APT 408동 1402호, 305-509 Daejeon (KR). **장혜영 (JANG, Hye Young)** [KR/KR]; 대전광역시 서구 둔산동 939번지 매그놀리아 1210호, 302-120 Daejeon (KR). **장분재 (JANG, Boonjae)** [KR/KR]; 대전광역시 대덕구 범2동 선비마을 1단지 아파트 103동 1001호, 306-062 Daejeon (KR).
 - (74) 대리인: **정순성 (CHUNG, Soon-Sung)**; 서울시 강남구 역삼동 735-10 삼흥역삼빌딩 2층, 135-080 Seoul (KR).
 - (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
 - (84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).
- 공개:
— 국제조사보고서 없이 공개하며 보고서 접수 후 이를 별도 공개함 (규칙 48.2(g))

WO 2012/099376 A2

(54) Title: NOVEL COMPOUND AND ORGANIC LIGHT-EMITTING DEVICE COMPRISING SAME

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



(57) Abstract: The present invention relates to a novel compound and to an organic light-emitting device comprising same. The compound according to the present invention may inject and transport holes and electrons, and serves as a luminescent material in an organic light-emitting device. The organic light-emitting device according to the present invention may exhibit superior characteristics in terms of efficiency, required driving voltage, and lifespan.

(57) 요약서: 본 발명은 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명에 따른 화합물은 유기 발광 소자에서 정공 주입, 정공 수송, 전자 주입 및 수송, 발광 물질 역할 등을 할 수 있으며, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 효율, 구동전압 및 수명 면에서 우수한 특성을 나타낸다.

명세서

발명의 명칭: 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자 기술분야

- [1] 본 발명은 유기 발광 소자의 수명, 효율, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성을 크게 향상시킬 수 있는 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다. 본 출원은 2011년 1월 17일에 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제10-2011-0004715호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.

배경기술

- [2] 유기 발광 현상은 특정 유기 분자의 내부 프로세스에 의하여 전류가 가시광으로 전환되는 예의 하나이다. 유기 발광 현상의 원리는 다음과 같다. 양극과 음극 사이에 유기물 층을 위치시켰을 때 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 음극과 양극으로부터 각각 전자와 정공이 유기물층으로 주입된다. 유기물층으로 주입된 전자와 정공은 재결합하여 엑시톤(exciton)을 형성하고, 이 엑시톤이 다시 바닥 상태로 떨어지면서 빛이 나게 된다. 이러한 원리를 이용하는 유기 발광 소자는 일반적으로 음극과 양극 및 그 사이에 위치한 유기물층, 예컨대 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층을 포함하는 유기물층으로 구성될 수 있다.
- [3] 유기 발광 소자에서 사용되는 물질로는 순수 유기 물질 또는 유기 물질과 금속이 착물을 이루는 착화합물이 대부분을 차지하고 있으며, 용도에 따라 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 발광 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 구분될 수 있다. 여기서, 정공 주입 물질이나 정공 수송 물질로는 p-타입의 성질을 가지는 유기 물질, 즉 쉽게 산화가 되고 산화시에 전기화학적으로 안정한 상태를 가지는 유기물이 주로 사용되고 있다. 한편, 전자 주입 물질이나 전자 수송 물질로는 n-타입 성질을 가지는 유기 물질, 즉 쉽게 환원이 되고 환원시에 전기화학적으로 안정한 상태를 가지는 유기물이 주로 사용되고 있다. 발광층 물질로는 p-타입 성질과 n-타입 성질을 동시에 가진 물질, 즉 산화와 환원 상태에서 모두 안정한 형태를 갖는 물질이 바람직하며, 엑시톤이 형성되었을 때 이를 빛으로 전환하는 발광 효율이 높은 물질이 바람직하다.
- [4] 위에서 언급한 외에, 유기 발광 소자에서 사용되는 물질은 다음과 같은 성질을 추가적으로 갖는 것이 바람직하다.
- [5] 첫째로 유기 발광 소자에서 사용되는 물질은 열적 안정성이 우수한 것이 바람직하다. 유기 발광 소자 내에서는 전하들의 이동에 의한 줄열(joule heating)이 발생하기 때문이다. 현재 정공 수송층 물질로 주로 사용되는 NPB는 유리 전이 온도가 100°C 이하의 값을 가지므로, 높은 전류를 필요로 하는 유기 발광 소자에서는 사용하기 힘든 문제가 있다.

- [6] 둘째로 저전압 구동 가능한 고효율의 유기 발광 소자를 얻기 위해서는 유기 발광 소자 내로 주입된 정공 또는 전자들이 원활하게 발광층으로 전달되는 동시에, 주입된 정공과 전자들이 발광층 밖으로 빠져나가지 않도록 하여야 한다. 이를 위해서 유기 발광 소자에 사용되는 물질은 적절한 밴드갭(band gap)과 HOMO 또는 LUMO 에너지 준위를 가져야 한다. 현재 용액 도포법에 의해 제조되는 유기 발광 소자에서 정공 수송 물질로 사용되는 PEDOT : PSS의 경우, 발광층 물질로 사용되는 유기물의 LUMO 에너지 준위에 비하여 LUMO 에너지 준위가 낮기 때문에 고효율 장수명의 유기 발광 소자 제조에 어려움이 있다.
- [7] 이외에도 유기 발광 소자에서 사용되는 물질은 화학적 안정성, 전하이동도, 전극이나 인접한 층과의 계면 특성 등이 우수하여야 한다. 즉, 유기 발광 소자에서 사용되는 물질은 수분이나 산소에 의한 물질의 변형이 적어야 한다. 또한, 적절한 정공 또는 전자 이동도를 가짐으로써 유기 발광 소자의 발광층에서 정공과 전자의 밀도가 균형을 이루도록 하여 엑시톤 형성을 극대화할 수 있어야 한다. 그리고, 소자의 안정성을 위해 금속 또는 금속 산화물을 포함한 전극과의 계면을 좋게 할 수 있어야 한다.
- [8] 따라서, 당 기술분야에서는 상기와 같은 요건을 갖춘 유기물의 개발이 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

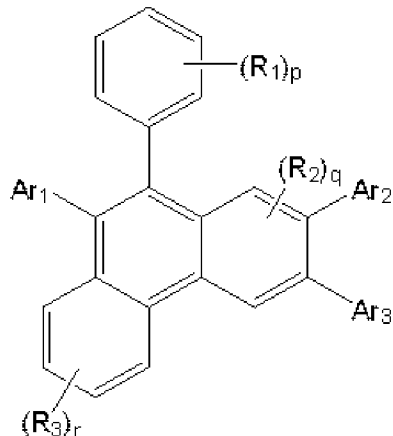
- [9] 이에 본 발명자들은 유기 발광 소자에서 사용 가능한 물질에 요구되는 조건, 예컨대 적절한 에너지 준위, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성 등을 만족시킬 수 있으며, 치환기에 따라 유기 발광 소자에서 요구되는 다양한 역할을 할 수 있는 화학 구조를 갖는 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

- [10] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[11] [화학식 1]

[12]



- [13] 상기 화학식 1에서,
 [14] Ar_1 내지 Ar_3 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알킬기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알콕시기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기, 아세틸렌기 및 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기; 및 알킬기, 알케닐기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아민기로 이루어진 군에서 선택되고,
 [15] Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나는 아릴기, 헤테로고리기 또는 플루오레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기; 또는 아릴기, 헤테로고리기 또는 플루오레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 아릴기이고, 이는 추가로 아릴기, 플루오렌기 또는 아릴아민기로 치환될 수 있고,
 [16] R_1 , R_2 및 R_3 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 할로젠기; 알킬기; 알케닐기; 알콕시기; 아릴기; 헤테로고리기; 및 알킬기, 아릴기 또는 헤테로고리기로 치환 또는 비치환된 아민기로 이루어진 군에서 선택되고,
 [17] p 는 1 내지 5의 정수이고, q 는 1 또는 2의 정수이며, r 은 1 내지 4의 정수이다.
 [18] 또한, 본 발명은 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

- [19] 본 발명에 따른 신규한 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층 재료로서 사용될 수 있다. 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 발광 소자에 사용하는 경우 소자의 구동전압을 낮출 수 있고, 광효율을 향상시킬 수 있으며, 화합물의 열적 안정성에 의하여 소자의 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

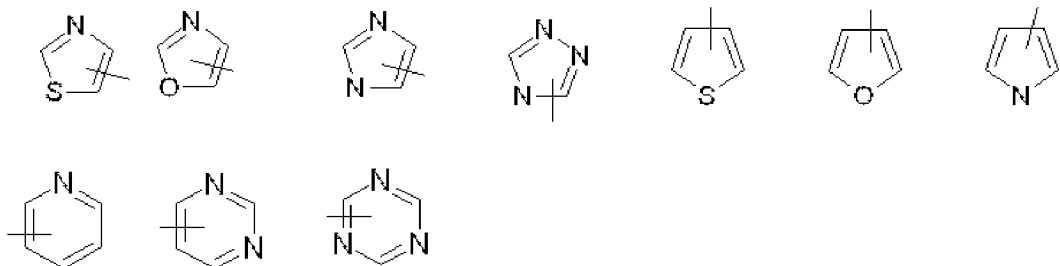
도면의 간단한 설명

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

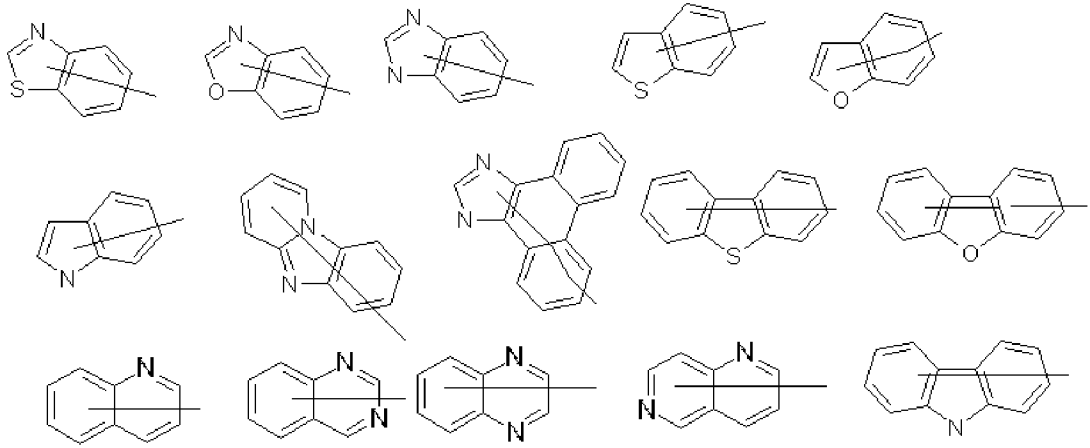
발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [21] 이하 본 발명을 더욱 구체적으로 설명한다.
- [22] 본 발명에 따른 신규한 화합물은 상기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다.
- [23] 본 발명에 따른 화합물에 있어서, 상기 화학식 1의 치환기들을 보다 구체적으로 설명하면 하기와 같다.
- [24] 상기 할로젠기로는 불소, 염소, 브롬, 요오드 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [25] 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 6인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기 등이 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [26] 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있으며, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 2 내지 6인 것이 바람직하나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [27] 상기 시클로알킬기는 탄소수 3 내지 12의 입체적 방해를 주지 않는 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등이 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [28] 상기 알콕시기는 탄소수 1 내지 6인 것이 바람직하고, 보다 구체적으로 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [29] 상기 아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 6 내지 20인 것이 바람직하다. 단환식 아릴기의 예로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 스틸벤 등을 들 수 있고, 다환식 아릴기의 예로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [30] 상기 헤테로고리기는 이종 원자로 O, N, S 또는 P를 포함하는 고리기로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 2 내지 20인 것이 바람직하다. 헤테로고리기의 예로는 카바졸기, 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딜기, 피라다진기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 아크리딜기 등이 있으며, 하기 구조식과 같은 화합물들이 바람직하나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[31]



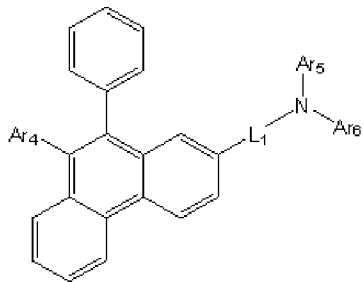
[32]



- [33] 상기 아민기는 탄소수 1 내지 30인 것이 바람직하고, 보다 구체적으로 메틸아민기, 디메틸아민기, 에틸아민기, 디에틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 비페닐아민기, 안트라세닐아민기, 3-메틸-페닐아민기, 4-메틸-나프틸아민기, 2-메틸-비페닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐아민기, 페닐나프틸 아민기, 디톨릴아민기, 페닐톨릴아민기, 트리페닐아민기 등을 들 수 있으나 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [34] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 바람직하게는 하기 화학식 2 내지 5로 표시되는 화합물일 수 있다.

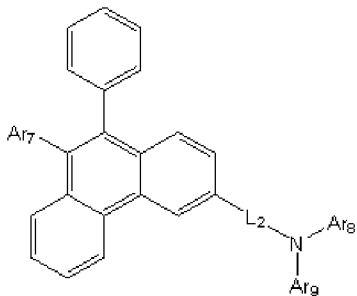
[35] [화학식 2]

[36]



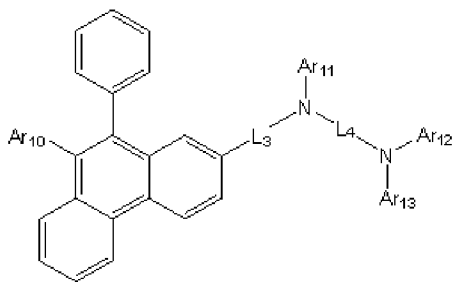
[37] [화학식 3]

[38]



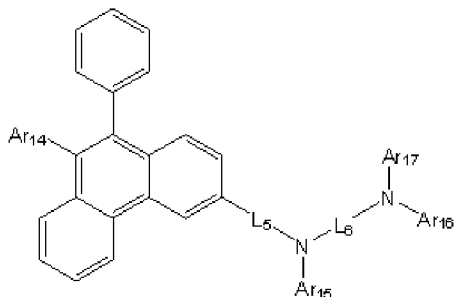
[39] [화학식 4]

[40]



[41] [화학식 5]

[42]



[43] 상기 화학식 2 내지 5에서,

[44] Ar₄, Ar₇, Ar₁₀ 및 Ar₁₄는 각각 독립적으로 수소; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알킬기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알콕시기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기, 아세틸렌기 및 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기; 및 알킬기, 알케닐기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

[45] Ar₅, Ar₆, Ar₈, Ar₉, Ar₁₁, Ar₁₂, Ar₁₃, Ar₁₅, Ar₁₆, 및 Ar₁₇은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기이며,

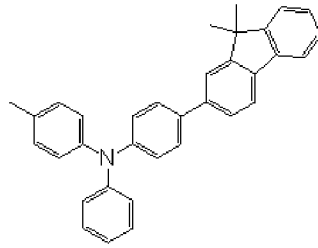
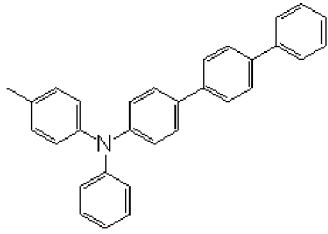
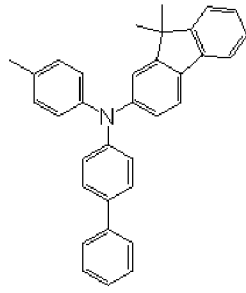
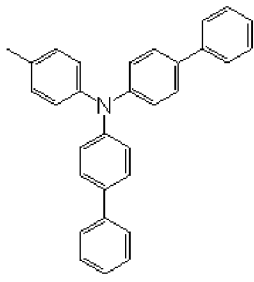
[46] L₁, L₂, L₃ 및 L₅는 직접결합, 아릴렌기 또는 플루오레닐렌기이고,

[47] L₄ 및 L₆은 아릴렌기이다.

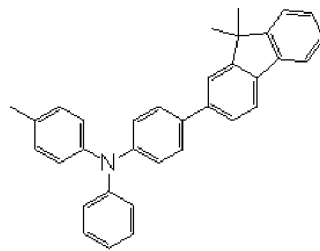
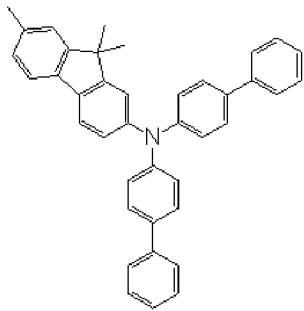
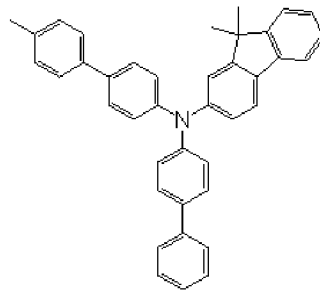
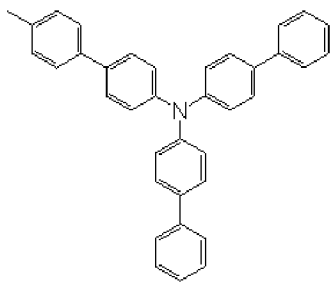
[48] 또한, 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소, 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 실릴기, 아릴알케닐기, 아릴기, 헤테로고리기, 카바졸기, 아릴아민기, 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기

및 니트릴기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되었거나 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다.

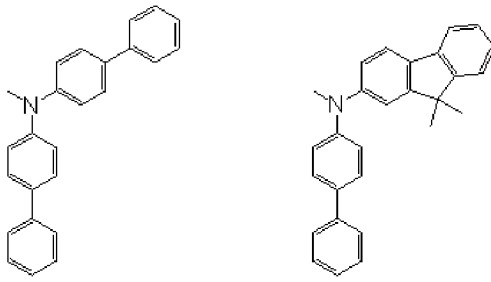
- [49] 상기 화학식 1 내지 5의 Ar_1 내지 Ar_7 에 추가적으로 더 치환될 수 있는 치환기로는 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 실릴기, 아릴알케닐기, 아릴기, 헤테로고리기, 카바졸기, 아릴아민기, 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 또는 니트릴기 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [50] 상기 화학식 1에서 Ar_1 은 수소 또는 페닐기일 수 있다.
- [51] 상기 화학식 1에서 Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기일 수 있다.
- [52] 상기 화학식 1에서 Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 페닐기; 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 바이페닐기; 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 플루오레닐기; 또는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 나프틸기일 수 있다.
- [53] 다른 실시예에 있어서는 Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 페닐기; 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 바이페닐기; 또는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 플루오레닐기일 수 있다.
- [54] 상기 화학식 1에서 Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나는 하기의 치환기일 수 있다.
- [55]



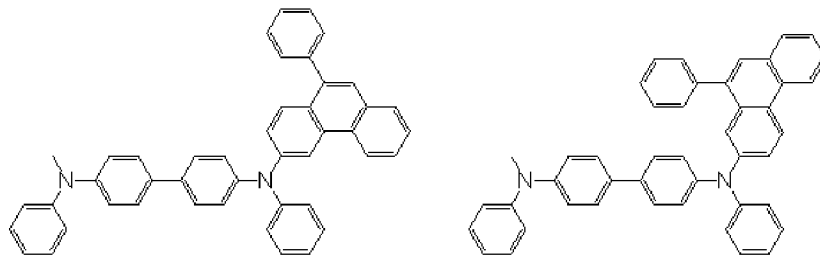
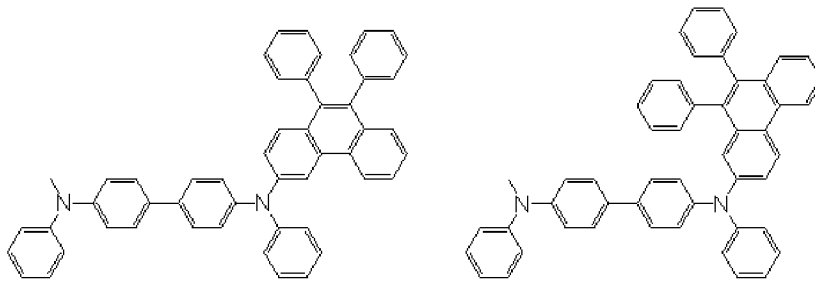
[56]



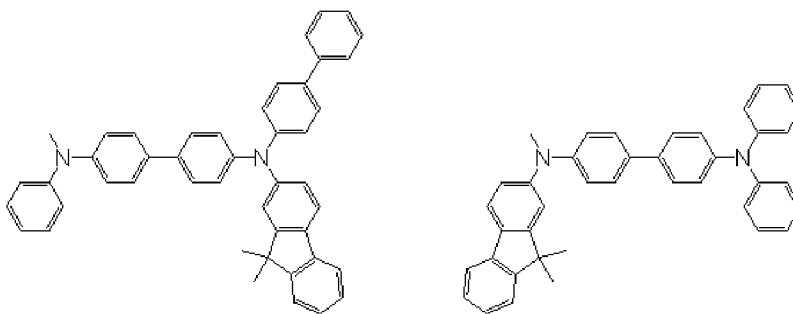
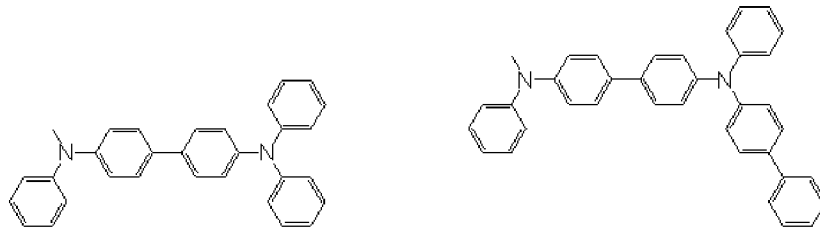
[57]



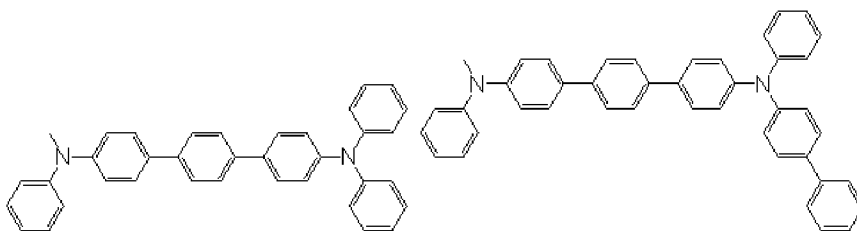
[58]

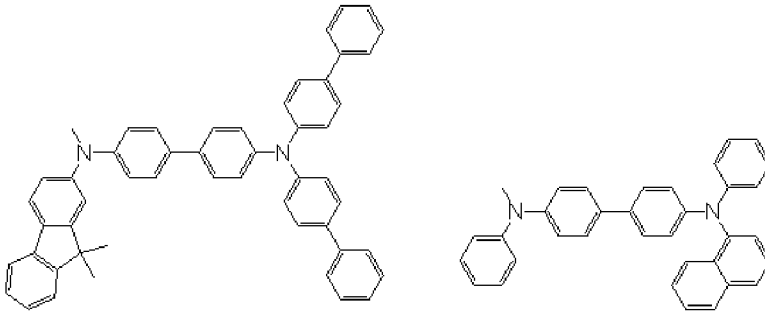
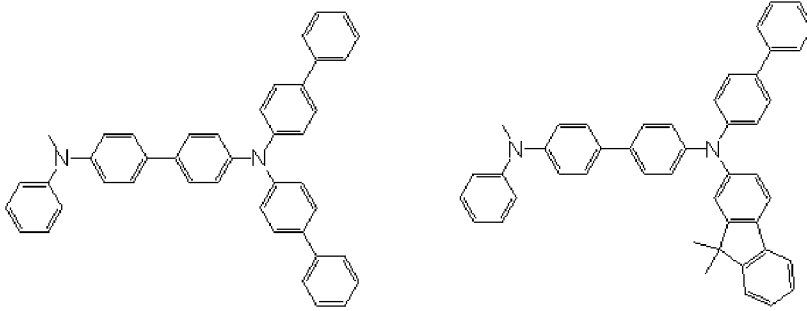


[59]

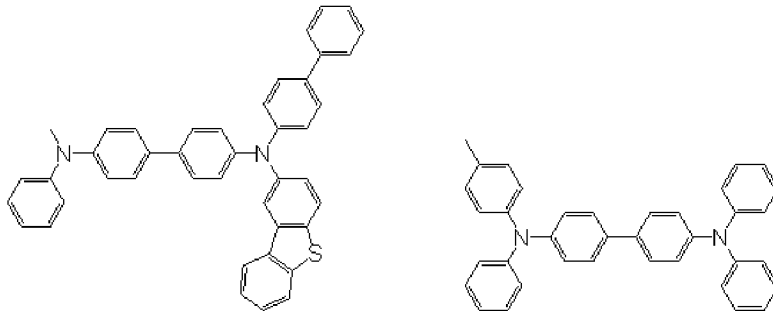
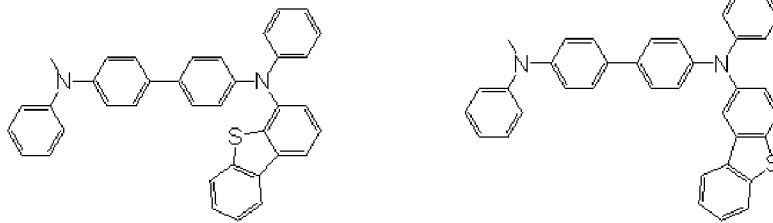


[60]

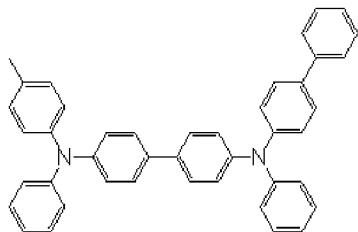




[61]



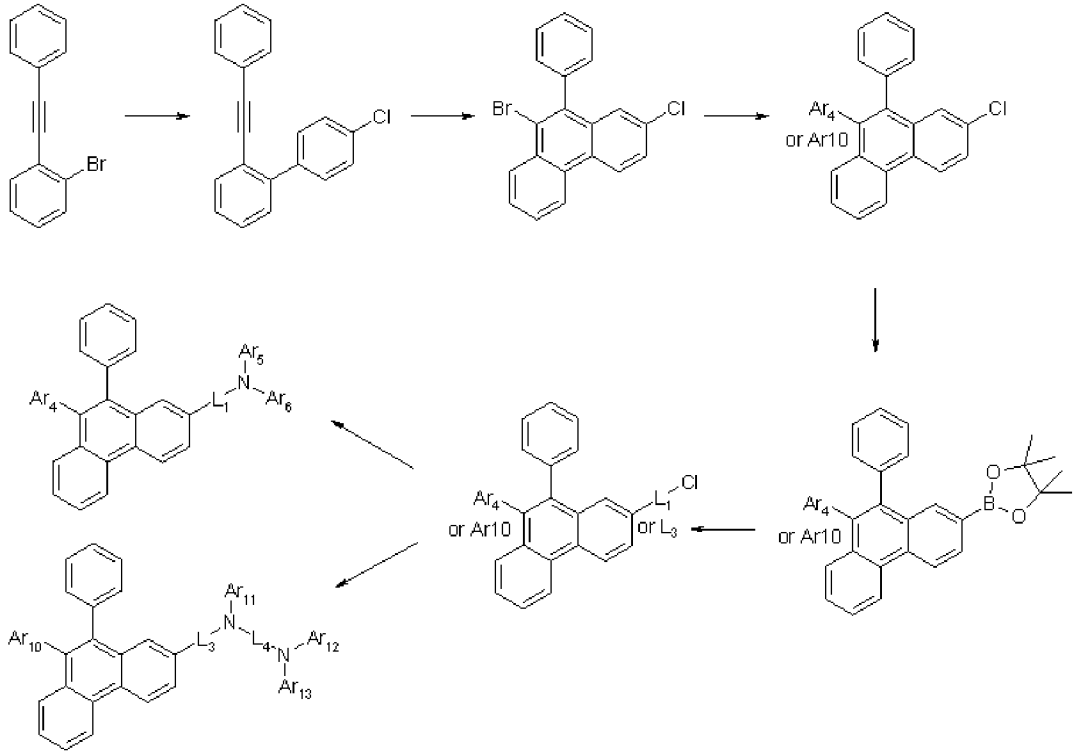
[62]



[63] 또한, 상기 화학식 1에서 Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나가 Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오펜기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기; Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오펜기 또는 페난트레닐기로 치환

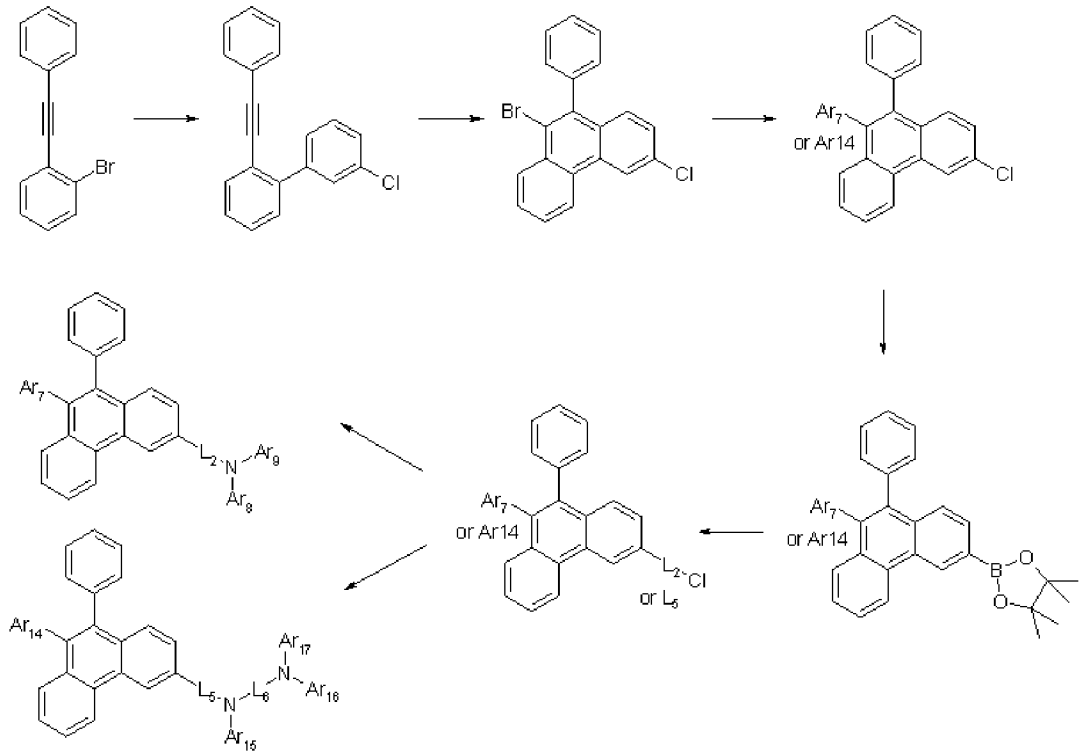
또는 비치환된 아민기로 치환된 페닐기; Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 바이페닐기; 또는 Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 플루오레닐기일 때 나머지 하나는 수소일 수 있다.

- [64] 상기 화학식 2 내지 5에서 Ar_4 , Ar_7 , Ar_{10} 및 Ar_{14} 는 수소 또는 페닐기일 수 있다.
- [65] 상기 화학식 2 내지 5에서 Ar_5 , Ar_6 , Ar_8 , Ar_9 , Ar_{11} , Ar_{12} , Ar_{13} , Ar_{15} , Ar_{16} , 및 Ar_{17} 은 각각 독립적으로 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기일 수 있다.
- [66] 상기 화학식 2 내지 5에서 L_1 , L_2 , L_3 및 L_5 는 각각 독립적으로 직접결합, 페닐렌기, 바이페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기일 수 있다.
- [67] 다른 실시예에 있어서는 L_1 , L_2 , L_3 및 L_5 는 각각 독립적으로 직접결합, 페닐렌기, 바이페닐렌기 또는 플루오레닐렌기일 수 있다.
- [68] 상기 화학식 2 내지 5에서 L_4 및 L_6 은 각각 독립적으로 페닐렌기, 바이페닐렌기, 터페닐렌기 또는 나프틸렌기일 수 있다.
- [69] 다른 실시예에 있어서는 L_4 및 L_6 은 각각 독립적으로 바이페닐렌기 또는 터페닐렌기일 수 있다.
- [70] 상기 화학식 2 또는 4로 표시되는 화합물은 하기 반응식 1에 따라 제조될 수 있고, 상기 화학식 3 또는 5로 표시되는 화합물은 하기 반응식 2에 따라 제조될 수 있다.
- [71] [반응식 1]
- [72]

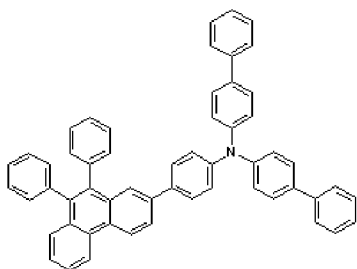


[74]

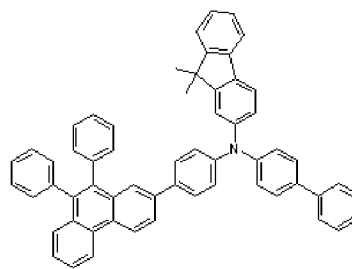
[74]



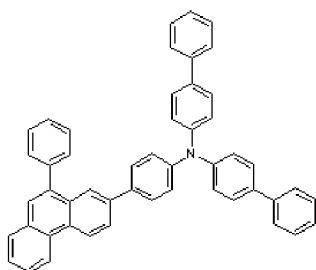
화학식 1-1



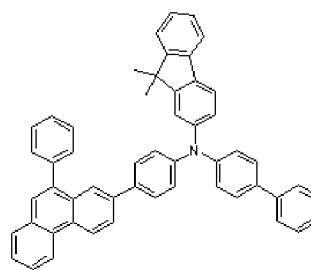
화학식 1-2



화학식 1-3

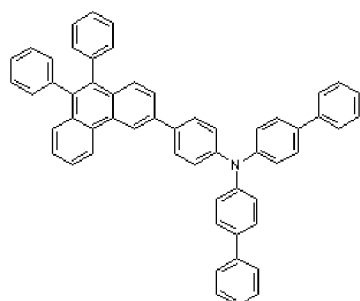


화학식 1-4

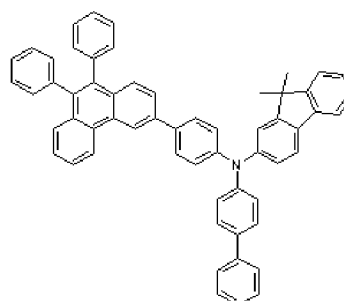


[77]

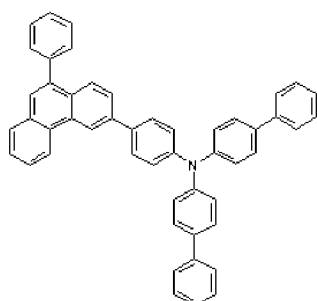
화학식 1-5



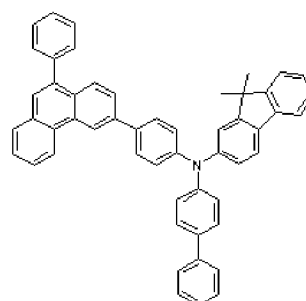
화학식 1-6



화학식 1-7

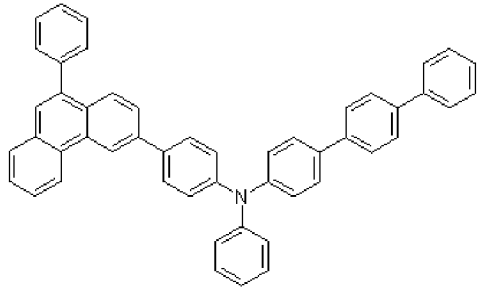


화학식 1-8

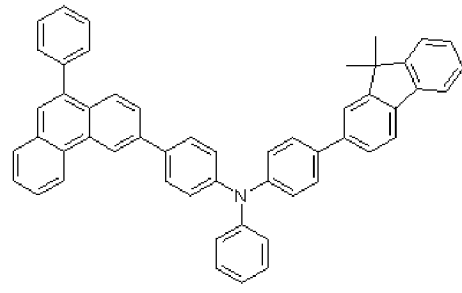


[78]

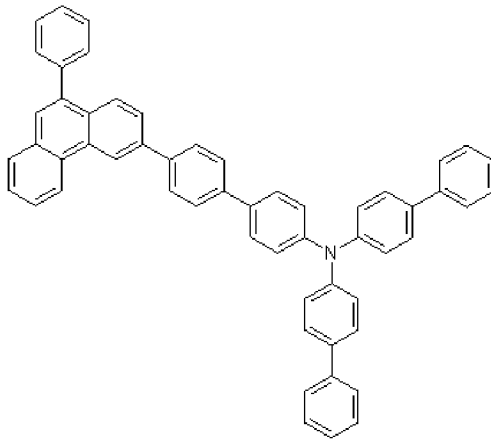
화학식 1-9



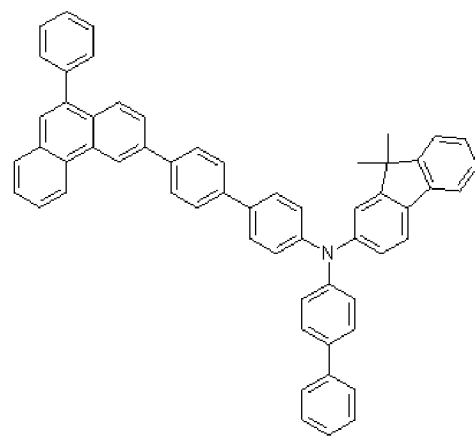
화학식 1-10



화학식 1-11

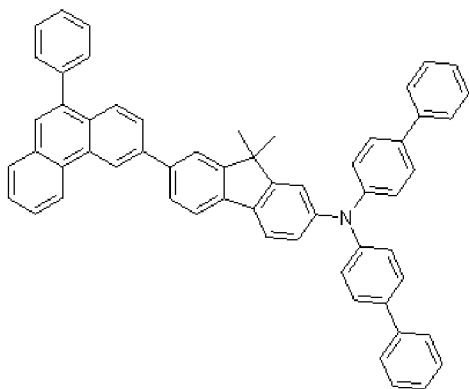


화학식 1-12

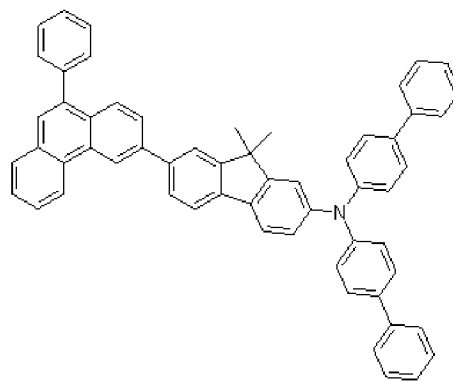


[79]

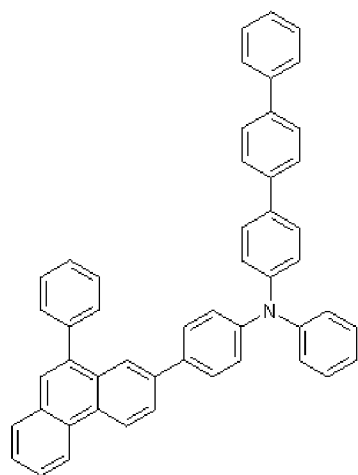
화학식 1-13



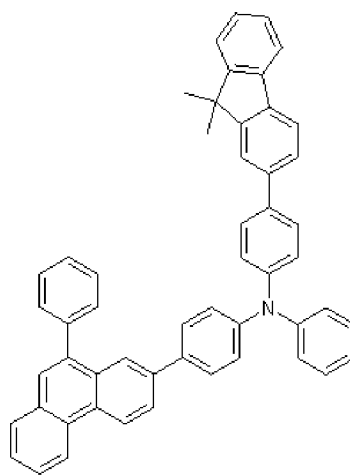
화학식 1-14



화학식 1-15

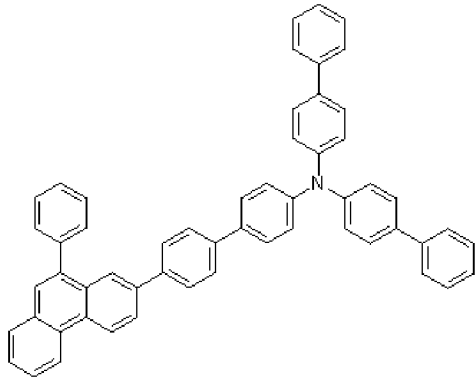


화학식 1-16

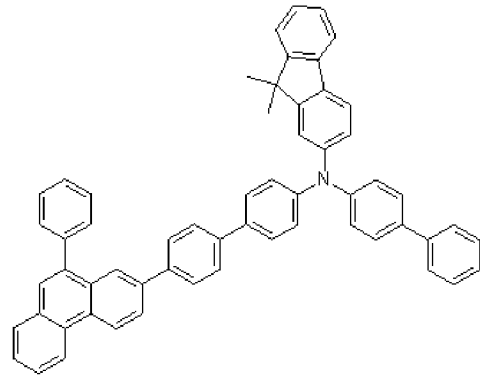


[80]

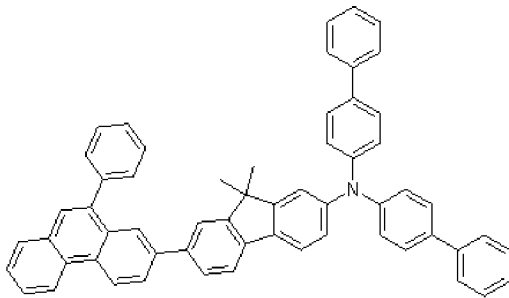
화학식 1-17



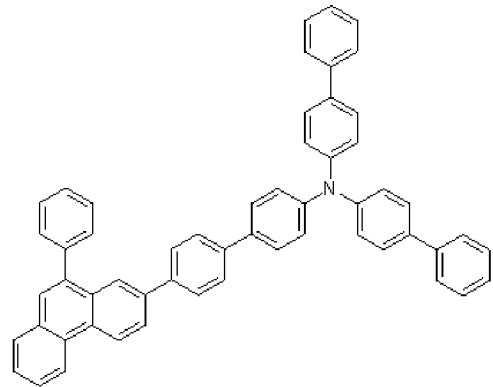
화학식 1-18



화학식 1-19

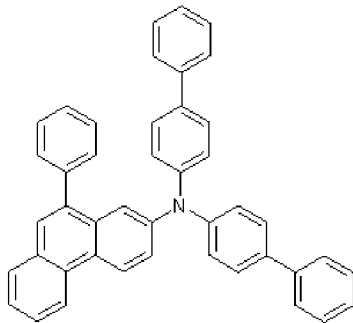


화학식 1-20

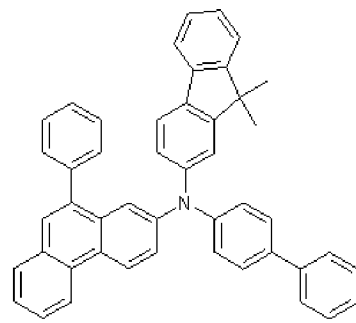


[81]

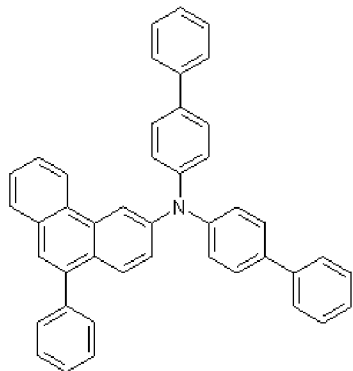
화학식 1-21



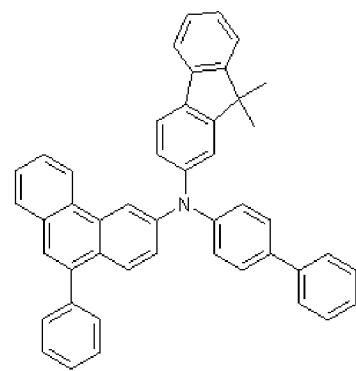
화학식 1-22



화학식 1-23



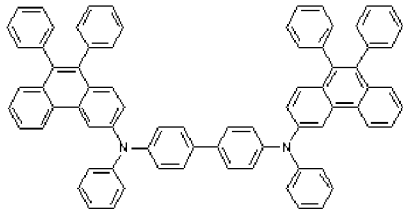
화학식 1-24



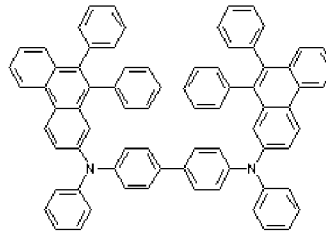
[82] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 바람직한 구체적인 예로는 하기의 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[83]

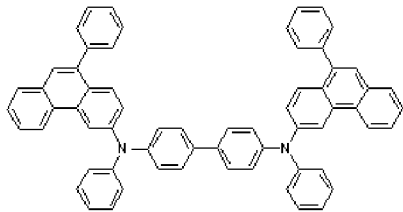
화학식 2-1



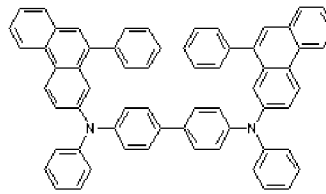
화학식 2-2



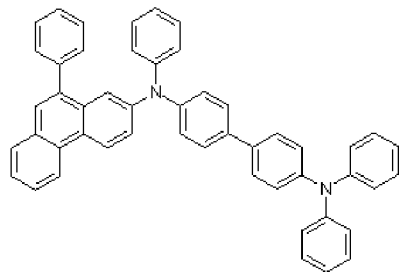
화학식 2-3



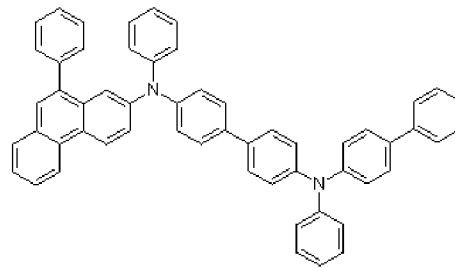
화학식 2-4



화학식 2-5

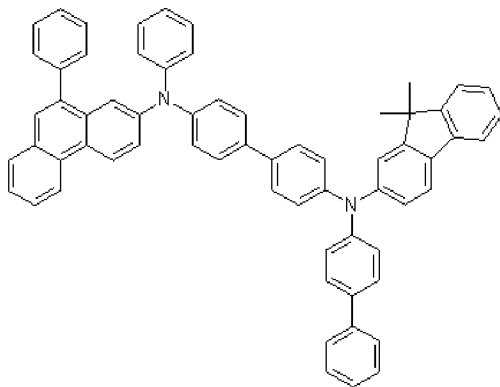


화학식 2-6

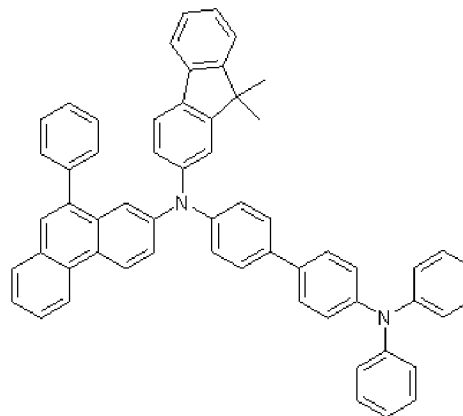


[84]

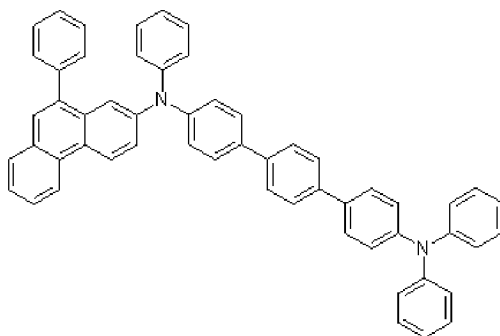
화학식 2-7



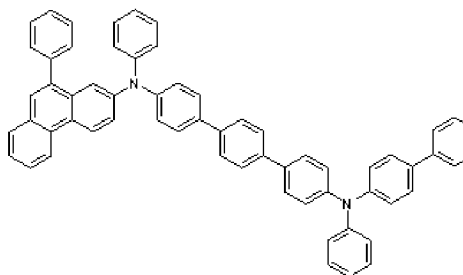
화학식 2-8



화학식 2-9

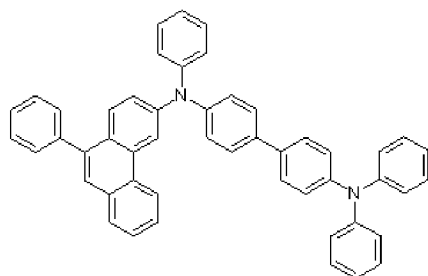


화학식 2-10

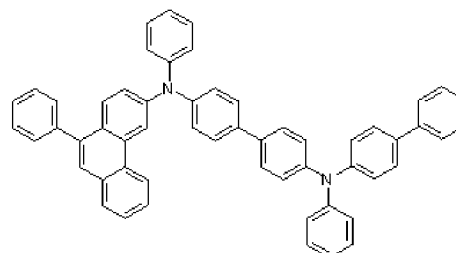


[85]

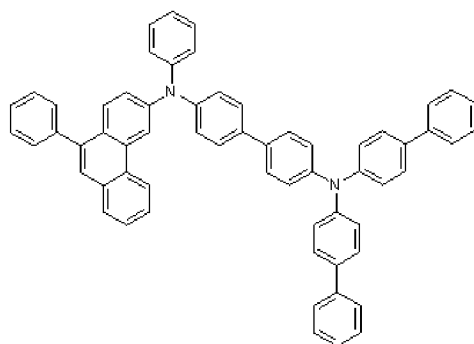
화학식 2-11



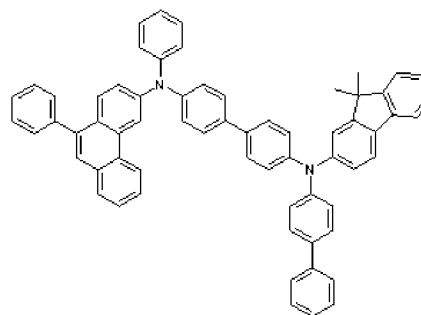
화학식 2-12



화학식 2-13

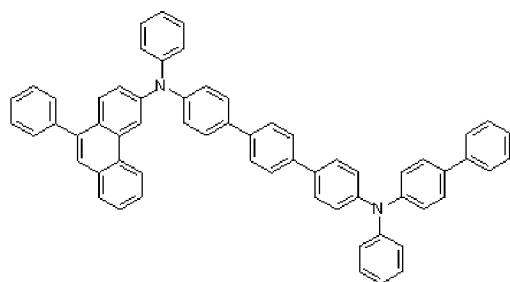


화학식 2-14

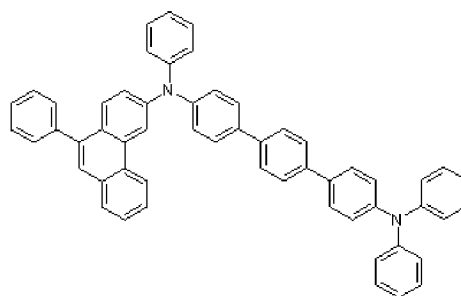


[86]

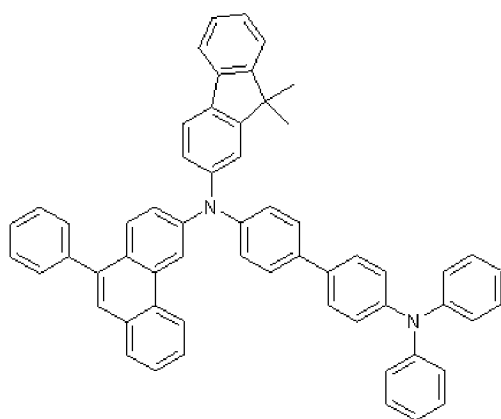
화학식 2-15



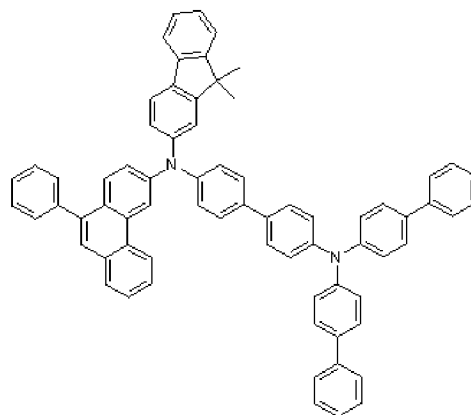
화학식 2-16



화학식 2-17

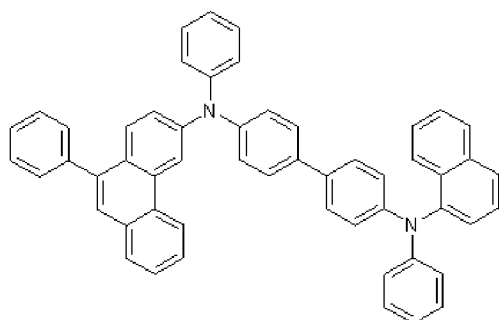


화학식 2-18

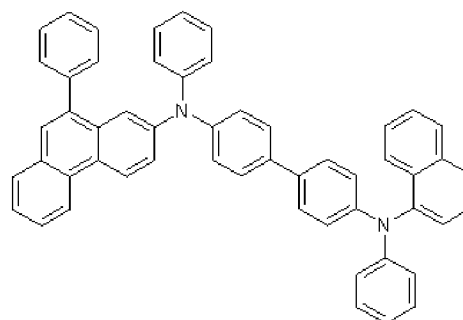


[87]

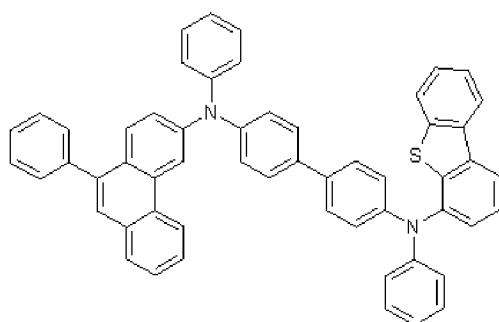
화학식 2-19



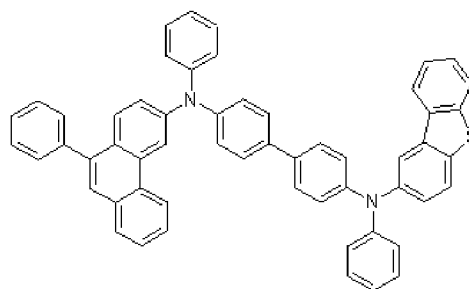
화학식 2-20



화학식 2-21

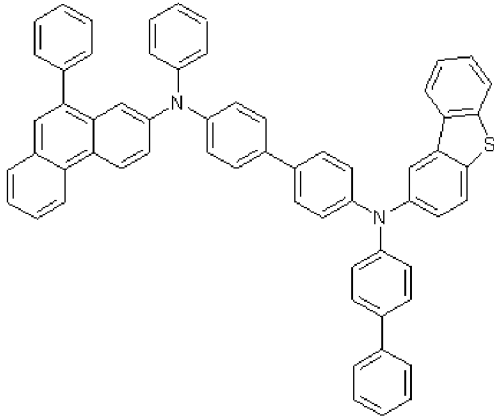


화학식 2-22

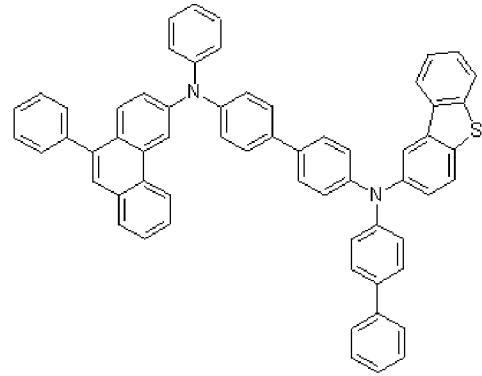


[88]

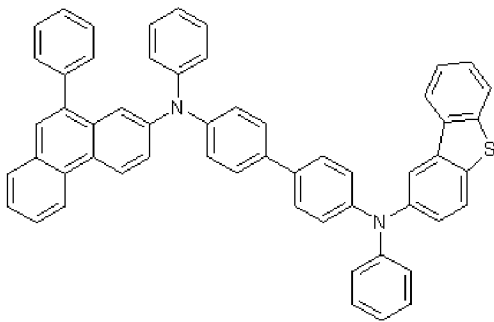
화학식 2-23



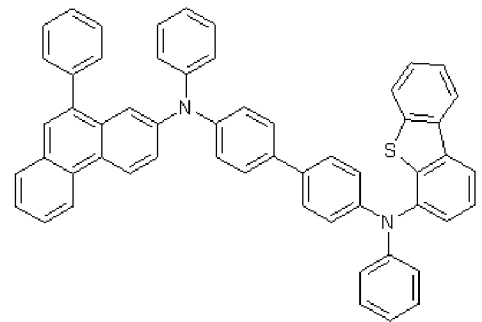
화학식 2-24



화학식 2-25

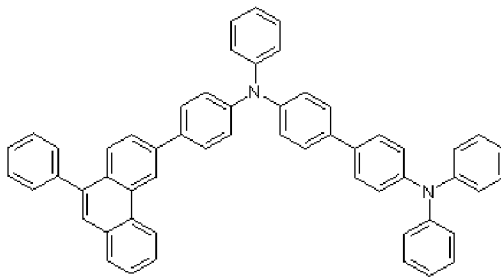


화학식 2-26

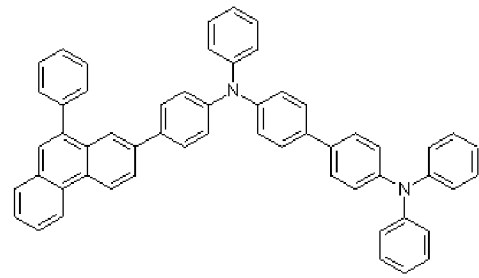


[89]

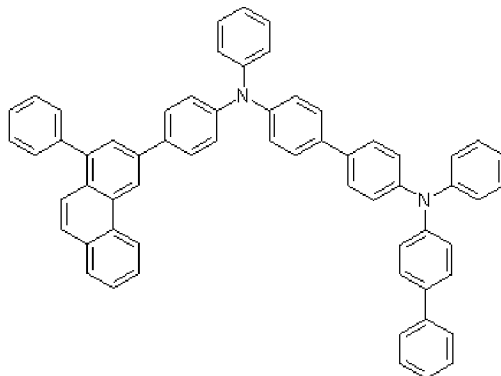
화학식 2-27



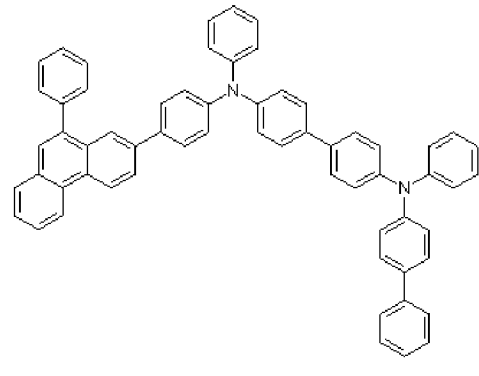
화학식 2-28



화학식 2-29



화학식 2-30



[90] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 정공

- 수송층에 적용되는 것이 바람직하나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [91] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유리 전이 온도(Tg)가 높아 열적 안정성이 우수하다. 이러한 열적 안정성의 증가는 소자에 구동 안정성을 제공하는 중요한 요인이 된다.
- [92] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [93] 본 발명의 유기 발광 소자는 전술한 화합물들을 이용하여 한 층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기 발광 소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- [94] 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, 딥 코팅, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.
- [95] 본 발명의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층을 포함할 수 있다.
- [96] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 정공 수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [97] 또한, 상기 유기물층은 발광층을 포함할 수 있고, 상기 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [98] 또한, 상기 유기물층은 정공수송층을 포함할 수 있고, 상기 정공수송층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [99] 또한, 상기 유기물층은 전자 수송층, 전자 주입층, 및 전자 수송 및 전자 주입을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [100] 이와 같은 다층 구조의 유기물층에서 상기 화학식 1의 화합물은 발광층, 정공 주입/정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 또는 전자 수송과 발광을 동시에 하는 층 등에 포함될 수 있다.
- [101] 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자의 구조는 도 1에 나타낸 것과 같은 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [102] 도 1에는 기판(1) 위에 양극(2), 발광층(3) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 발광층(3)에 포함될 수 있다.

- [103] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기판 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, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수도 있다.
- [104] 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용매 공정(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.
- [105] 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 SnO₂ : Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸화합물의), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)화합물의](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [106] 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 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [107] 상기 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입 받을 수 있는 물질로서, 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(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리화합물의 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [108] 상기 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.

[109] 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_3); 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.

[110] 상기 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq_3 를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

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

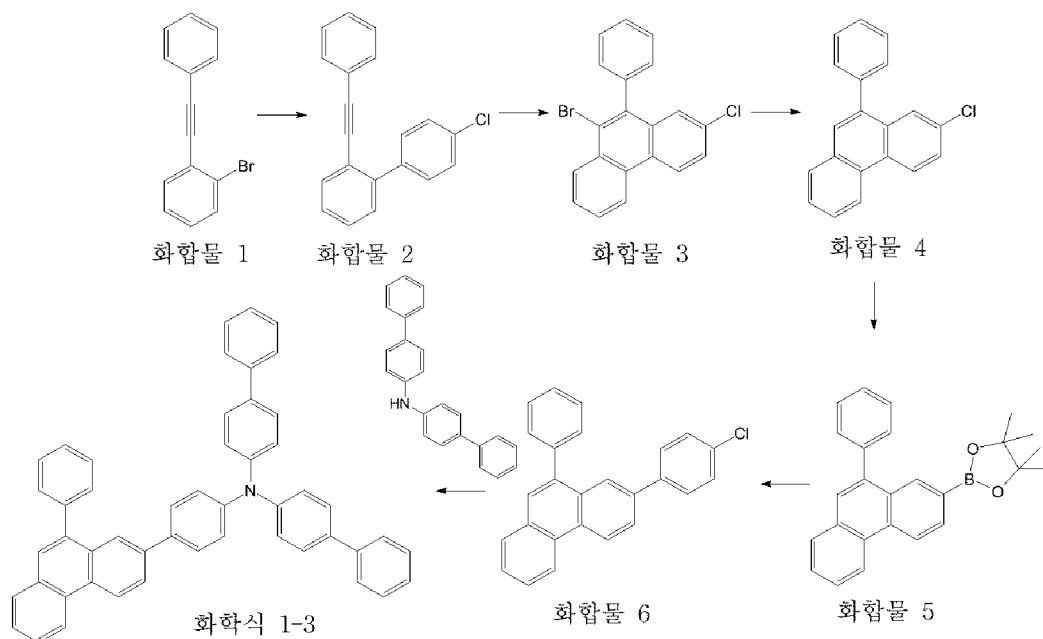
발명의 실시를 위한 형태

[112] 이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 바람직한 실시예를 제시한다. 그러나, 하기의 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 이에 의하여 본 발명의 범위가 한정되는 것은 아니다.

[113] <실시예>

[114] <제조예 1> 화학식 1-3의 화합물 합성

[115]



[116] <화합물 1의 제조>

[117] 2L 둥근 바닥 플라스크에 1-브로모-2-요오드벤젠(50g, 176.7mmol)과

페닐아세틸렌(21.7g, 212.5mmol), 트리에틸아민 800ml를 넣고 교반한다.
비스(트리페닐포스핀)팔라듐 디클로라이드(2.48g, 3.54mmol)와
요오드화제일구리(0.34g, 1.79mmol)를 넣고 60°C에서 5시간 동안 교반한다.
상온으로 냉각시키고 생성된 고체를 여과한다. 여과된 액체를 감압증류하여
농축시키고 컬럼정제하여 화합물 1(28.2g, 109.7mmol)을 수율 62.1%로 얻었다.
MS : [M+H]⁺=258

[118] <화합물 2의 제조>

[119] 1L 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 1(25g, 97.2mmol)과
4-클로로페닐보론산(16.7g, 107mmol), 탄산칼륨(53.7g, 388.8mmol),
테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(2.3g, 2mmol), 테트라하이드로퓨란 400ml,
물 200ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고
유기층을 분리한다. 감압증류하여 농축시키고 컬럼정제하여 화합물 2(19.8g,
68.7mmol)를 수율 70.7%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=289

[120] <화합물 3의 제조>

[121] 1L 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 2(15g, 51.9mmol)를 디클로로메탄
500ml에 녹이고, N-브로모수신이미드(11g, 61.8mmol)와 실리카겔 9g을 넣고
18시간 동안 교반한다. 반응 종료 후 티오황산나트륨 수용액 100ml를 넣고 20분
동안 교반한 후 유기층을 분리한다. 분리된 유기층을 염화나트륨 수용액
200ml로 씻어 준 후 무수 황산마그네슘으로 건조시킨다. 용액을 여과한 후
감압농축시키고 컬럼정제하여 화합물 3(15.2g, 41.3mmol)을 수율 79.7%로
얻었다. MS : [M+H]⁺=368

[122] <화합물 4의 제조>

[123] 오븐에서 건조된 500ml 둥근 바닥 플라스크에 질소라인을 연결시키고 상기
화합물 3(15g, 40.8mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 300ml를 넣는다.
-78°C로 냉각시킨 후 노말 부틸리튬(2.5M 헥산용액; 18ml, 45mmol)을 서서히
넣어주고 30분 동안 교반한다. 물 20ml를 넣고 30분 동안 교반하고 상온으로
승온시킨다. 유기층을 분리하여 무수 황산마그네슘으로 건조시킨 후 여과한다.
감압증류하여 농축시키고 컬럼정제하여 화합물 4(9.6g, 33.2mmol)를 수율
81.5%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=289

[124] <화합물 5의 제조>

[125] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 4(9.6g, 33.2mmol)와
비스(피나콜라토)디보론(10.1 g, 39.8mmol), 아세트산 칼륨(9.77g, 99.6mmol),
디옥산 100ml을 넣고 가열하면서 교반한다. 환류되는 상태에서
비스(디벤질리딘아세톤) 팔라듐(0.38g, 0.66mmol)과
트리사이클로헥실포스핀(0.37g, 1.33mmol)을 넣고 6시간 동안 교반한다.
상온으로 냉각시킨 후 물 50ml를 넣고 교반한다. 유기층을 분리하여 무수 황산
마그네슘으로 건조한다. 감압증류하여 농축시키고 컬럼정제하여 화합물 5(8.7g,
22.9mmol)를 수율 69.9%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=381

[126] <화합물 6의 제조>

[127] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 5(8.7g, 22.9mmol)와 1-브로모-4-클로로벤젠(4.38g, 22.9mmol), 탄산칼륨(12.7g, 91.6mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.53g, 0.46mmol), 테트라하이드로퓨란 100ml, 물 50ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 유기층을 분리한다. 감압증류하여 농축시키고 컬럼정제하여 화합물 6(5.9g, 16.2mmol)을 수율 70.6%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=365

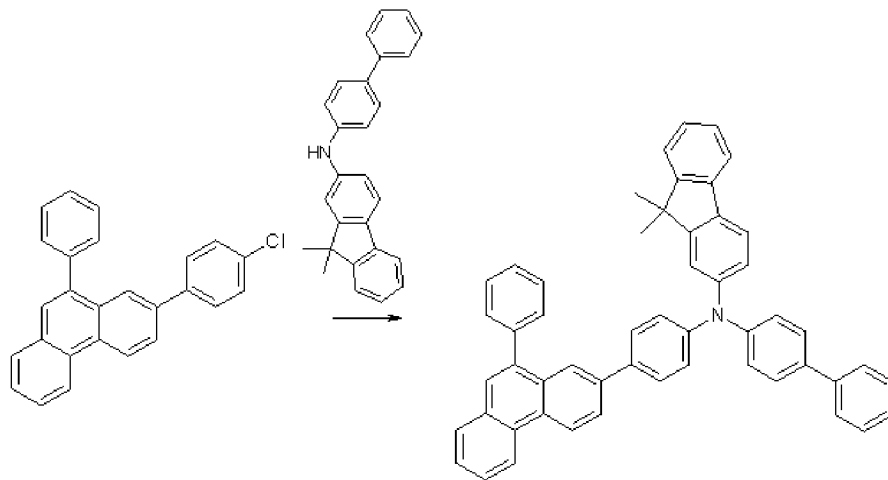
[128] <화학식 1-3의 화합물 제조>

[129] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 6(5g, 13.7mmol)과 비스(4-비페닐)아민(4.8g, 14.9mmol), 나트륨 터트-부톡사이드(1.71g, 17.8mmol), 비스(트리터트-부틸포스핀)팔라듐(0.1g, 0.2mmol), 자일렌 80ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 셀라이트 545 5g을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응액을 여과하고 감압증류하여 농축시킨다. 컬럼정제하여 화학식 1-3(5.4g, 8.3mmol)의 화합물을 수율 60.6%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=650

[130]

[131] <제조예 2> 화학식 1-4의 화합물 합성

[132]



화학식 1-4

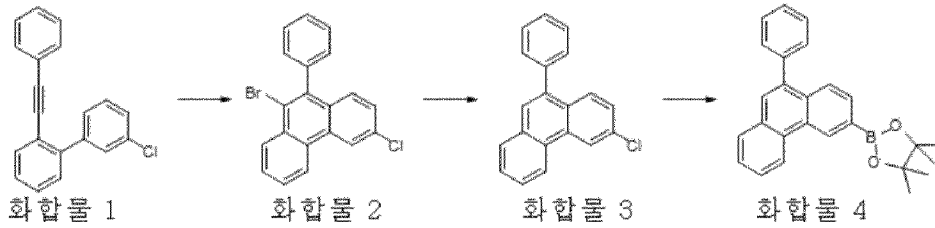
[133] <화학식 1-4의 화합물 제조>

[134] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 제조예 1의 화합물 6(8g, 21.9mmol)과 N-(4-비페닐)-(9,9-디메틸프로렌-2-일)아민(8.7g, 24.1mmol), 나트륨 터트-부톡사이드(2.74g, 28.5mmol), 비스(트리터트-부틸포스핀)팔라듐(0.22g, 0.43mmol), 자일렌 80ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 셀라이트 545 5g을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응액을 여과하고 감압증류하여 농축시킨다. 컬럼정제하여 화학식 1-4(9.8g, 14.2mmol)를 수율 64.9%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=690

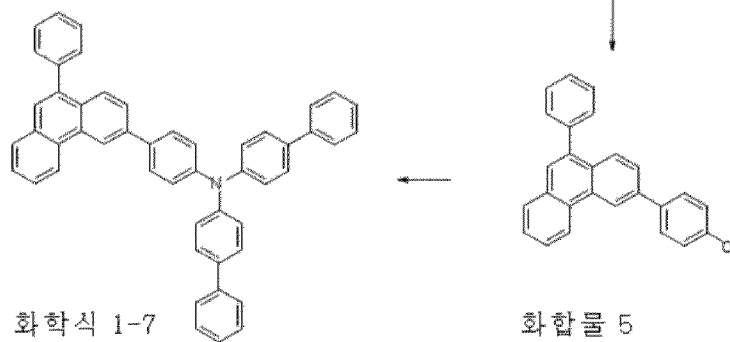
[135]

[136] <제조예 3> 화학식 1-7의 화합물 합성

[137]



[138]



[139] <화합물 1의 제조>

[140] 1L 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 1(30g, 116.7mmol)과 3-클로로페닐보론산(20g, 128mmol), 탄산칼륨(64.5g, 466.8mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(2.3g, 2mmol), 테트라하이드로퓨란 450ml, 물 250ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 유기층을 분리한다. 감압증류하여 농축시키고 컬럼정제하여 화합물 1(24.7g, 85.5mmol)을 수율 73.3%로 얻었다. MS : $[M+H]^+=289$

[141] <화합물 2의 제조>

[142] 1L 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 1(24.7g, 85.5mmol)을 디클로로메탄 600ml에 녹이고, N-브로모수신이미드(18g, 101.1mmol)와 실리카겔 11g을 넣고 21시간 동안 교반한다. 반응 종료 후 티오황산나트륨 수용액 150ml를 넣고 20분 동안 교반한 후 유기층을 분리한다. 분리된 유기층을 염화나트륨 수용액 200ml로 씻어 준 후 무수 황산마그네슘으로 건조시킨다. 용액을 여과한 후 감압농축시키고 컬럼정제하여 화합물 2(12.1g, 32.9mmol)를 수율 38.5%로 얻었다. MS : $[M+H]^+=368$

[143] <화합물 3의 제조>

[144] 오븐에서 건조된 500ml 둥근 바닥 플라스크에 질소라인을 연결시키고 상기 화합물 2(12.1g, 32.9mmol)를 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 300ml를 넣는다. -78°C로 냉각시킨 후 노말 부틸리튬(2.5M 헥산용액; 14.5ml, 36.3mmol)을 서서히 넣어주고 30분 동안 교반한다. 물 20ml를 넣고 30분 동안 교반하고 상온으로 승온시킨다. 유기층을 분리하여 무수 황산마그네슘으로 건조시킨 후 여과한다. 감압증류하여 농축시키고 컬럼정제하여 화합물 3(7.1g, 24.6mmol)을 수율 74.7%로 얻었다. MS : $[M+H]^+=289$

[145] <화합물 4의 제조>

[146] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 3(7g, 24.2mmol)과 비스(피나콜라토)디보론(7.3g, 28.7mmol), 아세트산 칼륨(7.1g, 72.3mmol), 디옥산 90ml을 넣고 가열하면서 교반한다. 환류되는 상태에서 비스(디벤질리딘아세톤)팔라듐(0.28g, 0.49mmol)과 트리사이클로헥실포스핀(0.27g, 0.97mmol)을 넣고 6시간 동안 교반한다. 상온으로 냉각시킨 후 물 50ml를 넣고 교반한다. 유기층을 분리하여 무수 황산 마그네슘으로 건조한다. 감압증류하여 농축시키고 컬럼정제하여 화합물 4(6.9g, 18.1mmol)를 수율 75%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=381

[147] <화합물 5의 제조>

[148] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 4(6.9g, 18.1mmol)와 1-브로모-4-클로로벤젠(3.47g, 18.1mmol), 탄산칼륨(10g, 72.4mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.42g, 0.36mmol), 테트라하이드로퓨란 100ml, 물 50ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 유기층을 분리한다. 감압증류하여 농축시키고 컬럼정제하여 화합물 5(4.8g, 13.2mmol)를 수율 72.7%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=365

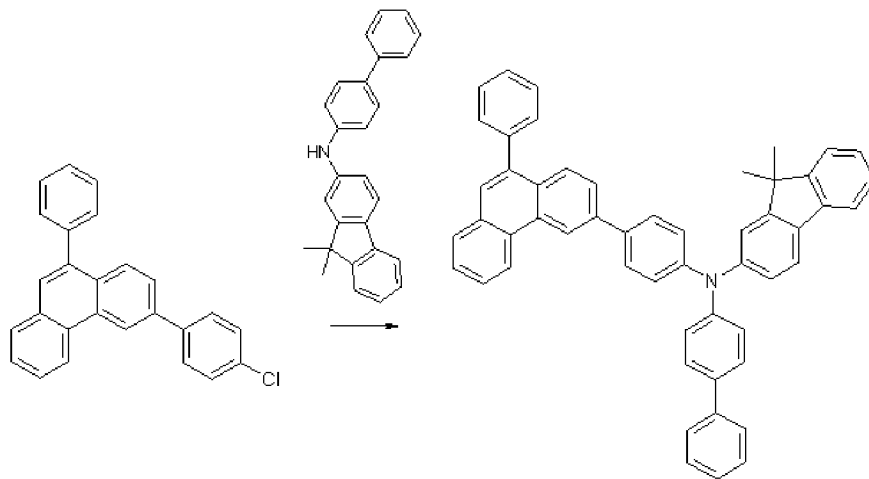
[149] <화학식 1-7의 화합물 제조>

[150] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 5(4.8g, 13.2mmol)와 비스(4-비페닐)아민(4.66g, 14.5mmol), 나트륨 터트-부톡사이드(1.65g, 17.2mmol), 비스(트리터트-부틸포스핀)팔라듐(0.13g, 0.26mmol), 자일렌 80ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 셀라이트 545 5g을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응액을 여과하고 감압증류하여 농축시킨다. 컬럼정제하여 화학식 1-7(5.6g, 8.6mmol)의 화합물을 수율 65.2%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=650

[151]

[152] <제조예 4> 화학식 1-8의 화합물 합성

[153]



화학식 1-8

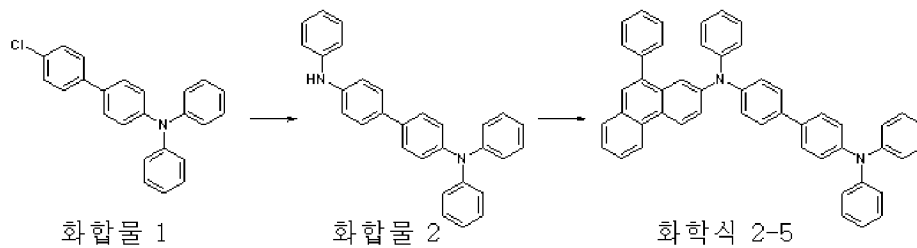
[154] <화학식 1-8의 화합물 제조>

[155] 100ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 제조예 3의 화합물 5(5g, 13.7mmol)와 N-(4-비페닐)-(9,9-디메틸프로렌-2-일)아민(5.4g, 14.9mmol), 나트륨 터트-부톡사이드(1.71g, 17.8mmol), 비스(트리터트-부틸포스핀)팔라듐(0.14g, 0.27mmol), 자일렌 60ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 셀라이트 545 5g을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응액을 여과하고 감압증류하여 농축시킨다. 컬럼정제하여 화학식 1-8(5.6g, 8.6mmol)의 화합물을 수율 62.8%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=690

[156]

[157] <제조예 5> 화학식 2-5의 화합물 합성

[158]



[159] <화합물 1의 제조>

[160] 500ml 둥근 바닥 플라스크에 4-브로모트리페닐아민(30g, 92.5mmol)과 4-클로로페닐보론산(15.8g, 101mmol), 탄산칼륨(51.1g, 370mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(2.3g, 2mmol), 테트라하이드로퓨란 200ml, 물 100ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 유기층을 분리한다. 감압증류하여 농축시키고 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화합물 1(26.7g, 75mmol)을 수율 81.1%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=356

[161] <화합물 2의 제조>

[162] 500ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 1(25g, 70.3mmol)과 아닐린(7.2g, 77.3mmol), 나트륨 터트-부톡사이드(8.78g, 91.4mmol), 비스(트리터트-부틸포스핀)팔라듐(0.72g, 1.41mmol), 자일렌 300ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 셀라이트 545 20g을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응액을 여과하고 감압증류하여 농축시킨다. 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화합물 2(21.6g, 52.3mmol)를 수율 74.5%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=413

[163] <화학식 2-5의 화합물 제조>

[164] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 2(10g, 24.2mmol)와 상기 제조예 1의 화합물 4(6.6g, 22.9mmol), 나트륨 터트-부톡사이드(2.86g, 29.8mmol), 비스(트리터트-부틸포스핀)팔라듐(0.24g, 0.47mmol), 자일렌 120ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 셀라이트 545 7g을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응액을 여과하고 감압증류하여 농축시킨다. 컬럼정제하여 화학식 2-5(9.2g, 13.8mmol)를 수율 60.3%로 얻었다. MS : [M+H]⁺

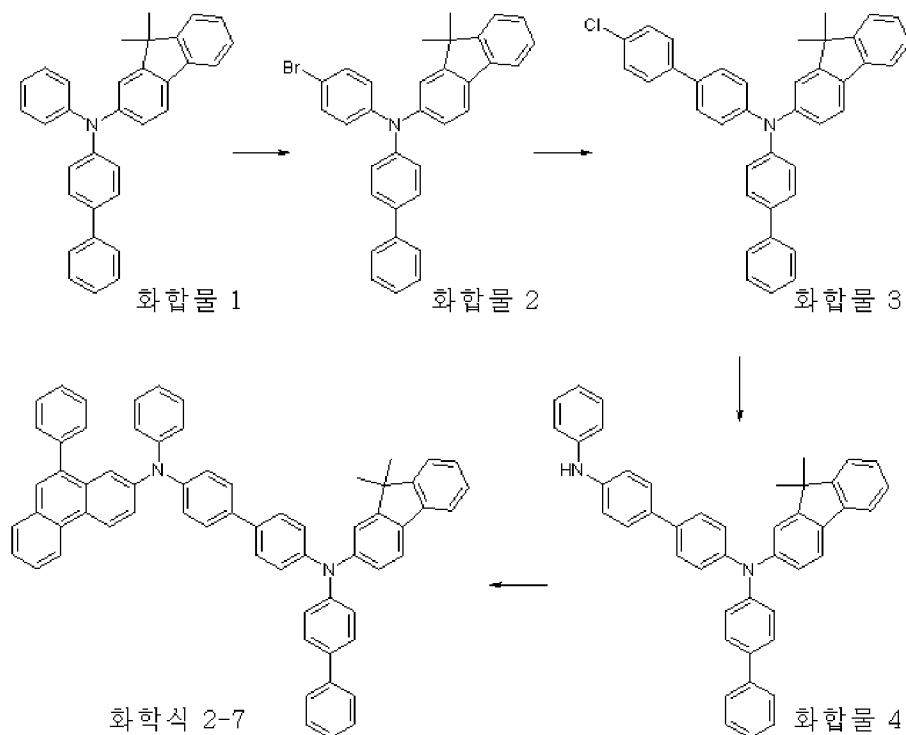
=665

[165]

[166]

<제조예 6> 화학식 2-7의 화합물 합성

[167]



[168]

<화합물 1의 제조>

[169]

1L 둥근 바닥 플라스크에 N-(4-비페닐)-(9,9-디메틸프로렌-2-일)아민(50g, 138.3mmol)과 브로모벤젠(23g, 146.5mmol), 나트륨 터트-부톡사이드(17.2g, 179mmol), 비스(트리터트-부틸포스핀)팔라듐(1.4g, 2.74mmol), 자일렌 600ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 셀라이트 545 50g을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응액을 여과하고 감압증류하여 농축시킨다. 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화합물 1(43.1g, 98.5mmol)을 수율 71.2%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=438

[170]

<화합물 2의 제조>

[171]

1L 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 1(40g, 91.4mmol)을 클로로포름 500ml에 녹이고, N-브로모수신이미드(17g, 95.5mmol)를 10분 동안 서서히 넣고 4시간 동안 교반한다. 티오황산나트륨 수용액 100ml를 넣고 20분 동안 교반한 후 유기층을 분리한다. 분리된 유기층을 염화나트륨 수용액 50ml로 씻어 준 후 무수 황산마그네슘으로 건조시킨다. 용액을 여과한 후 감압농축시키고 클로로포름과 에탄올로 재결정하여 화합물 2(35.4g, 68.5mmol)를 수율 74.9%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=517

[172]

<화합물 3의 제조>

[173]

500ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 2(30g, 58.1mmol)와 4-클로로페닐보론산(10g, 63.9mmol), 탄산칼륨(32.1g, 232.4mmol),

테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(1.4g, 1.2mmol), 테트라하이드로퓨란 300ml, 물 140ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 유기층을 분리한다. 감압증류하여 농축시키고 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화합물 3(24.7g, 45.1mmol)을 수율 77.6%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=548

[174] <화합물 4의 제조>

[175] 500ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 3(24.7g, 45.1mmol)과 아닐린(4.6g, 49.4mmol), 나트륨 터트-부톡사이드(5.6g, 5.83mmol), 비스(트리터트-부틸포스핀)팔라듐(0.46g, 0.9mmol), 자일렌 300ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 셀라이트 545 20g을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응액을 여과하고 감압증류하여 농축시킨다. 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화합물 4(21.8g, 36mmol)를 수율 79.9%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=605

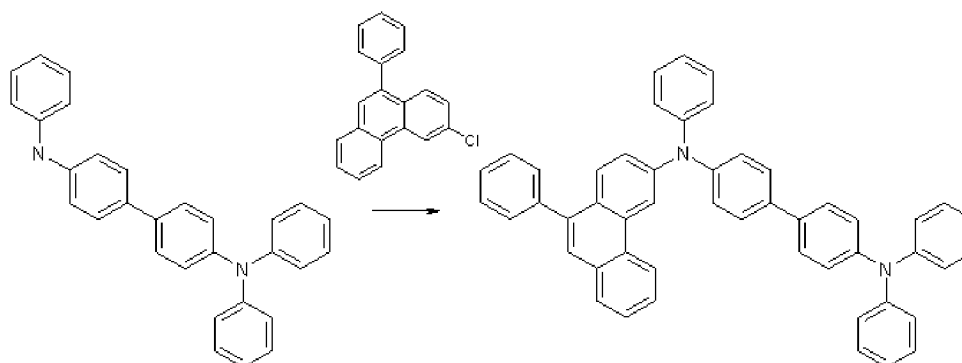
[176] <화학식 2-7의 화합물 제조>

[177] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 4(10g, 16.5mmol)와 상기 제조에 1의 화합물 4(4.8g, 16.6mmol), 나트륨 터트-부톡사이드(2.06g, 21.4mmol), 비스(트리터트-부틸포스핀)팔라듐(0.17g, 0.33mmol), 자일렌 120ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 셀라이트 545 7g을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응액을 여과하고 감압증류하여 농축시킨다. 컬럼정제하여 화학식 2-7(8.3g, 9.7mmol)을 수율 58.7%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=857

[178]

[179] <제조예 7> 화학식 2-11의 화합물 합성

[180]



화학식 2-11

[181] <화학식 2-11의 화합물 제조>

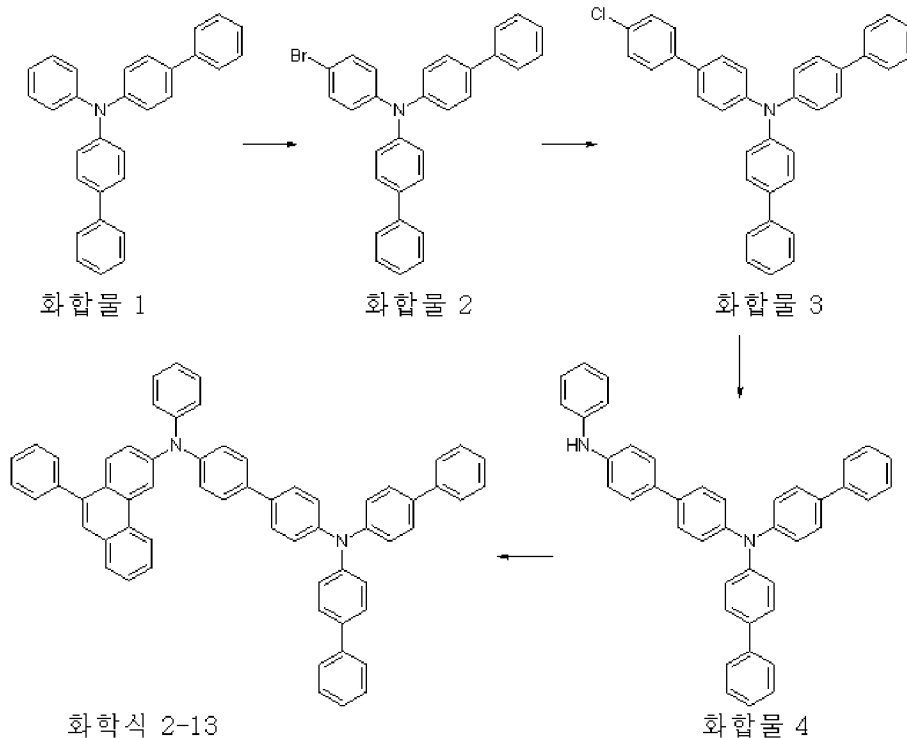
[182] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 제조예 5의 화합물 2(10g, 24.2mmol)와 상기 제조예 3의 화합물 3(6.6g, 22.9mmol), 나트륨 터트-부톡사이드(2.86g, 29.8mmol), 비스(트리터트-부틸포스핀)팔라듐(0.24g, 0.47mmol), 자일렌 120ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 셀라이트 545 7g을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응액을 여과하고 감압증류하여 농축시킨다.

컬럼정제하여 화학식 2-11(8.8g, 13.2mmol)을 수율 57.8%로 얻었다. MS : [M+H]⁺ =665

[183]

[184] <제조예 8> 화학식 2-13의 화합물 합성

[185]



[186] <화합물 1의 제조>

[187] 2L 둥근 바닥 플라스크에 아닐린(20g, 214.8mmol)과 4-브로모비페닐(110g, 471.9mmol), 나트륨 터트-부톡사이드(53g, 551.5mmol), 비스(트리터트-부틸포스핀)팔라듐(2.2g, 4.3mmol), 톨루엔 1400ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 셀라이트 545 100g을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응액을 여과하고 감압증류하여 농축시킨다. 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화합물 1(69.6g, 175.1mmol)을 수율 81.5%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=398

[188] <화합물 2의 제조>

[189] 1L 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 1(60g, 150.9mmol)을 클로로포름 800ml에 녹이고, N-브로모수신이미드(29g, 162.9mmol)를 10분 동안 서서히 넣고 4시간 동안 교반한다. 티오황산나트륨 수용액 100ml를 넣고 20분 동안 교반한 후 유기층을 분리한다. 분리된 유기층을 염화나트륨 수용액 50ml로 씻어 준 후 무수 황산마그네슘으로 건조시킨다. 용액을 여과한 후 감압농축시키고 클로로포름과 에탄올로 재결정하여 화합물 2(54.4g, 114.2mmol)를 수율 75.7%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=477

[190] <화합물 3의 제조>

[191] 1L 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 2(40g, 84mmol)와

4-클로로페닐보론산(14.4g, 92.1mmol), 탄산칼륨(46.4g, 335.8mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(2g, 1.73mmol), 테트라하이드로퓨란 400ml, 물 200ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시킨 후 생성된 고체를 여과하고 물 400ml와 에탄올 400ml로 차례로 씻어준다. 여과된 고체를 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화합물 3(27.7g, 54.5mmol)을 수율 64.9%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=508

[192] <화합물 4의 제조>

[193] 500ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 3(20g, 39.4mmol)과 아닐린(4g, 43mmol), 나트륨 터트-부톡사이드(4.9g, 51mmol), 비스(트리터트-부틸포스핀)팔라듐(0.4g, 0.78mmol), 자일렌 300ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 셀라이트 545 20g을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응액을 여과하고 감압증류하여 농축시킨다. 테트라하이드로퓨란과 에탄올로 재결정하여 화합물 4(18.6g, 32.9mmol)를 수율 83.7%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=565

[194] <화학식 2-13의 화합물 제조>

[195] 250ml 둥근 바닥 플라스크에 상기 화합물 4(10g, 17.7mmol)와 상기 제조에 3의 화합물 3(5.2g, 18mmol), 나트륨 터트-부톡사이드(2.21g, 23mmol), 비스(트리터트-부틸포스핀)팔라듐(0.18g, 0.35mmol), 자일렌 100ml를 넣고 8시간 동안 교반하면서 환류시킨다. 상온으로 냉각시키고 생성된 고체를 여과한다. 여과된 고체를 컬럼정제하여 화학식 2-13(9.2g, 11.3mmol)을 수율 63.6%로 얻었다. MS : [M+H]⁺=817

[196]

[197] <실험예 1> 유기 발광 소자의 제조

[198] ITO (indium tin oxide)가 800 Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판 (corning 7059 glass)을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이 때 세제로는 Fischer Co.의 제품을 사용하였으며 증류수로는 Millipore Co. 제품의 필터 (Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30 분간 세척한 후, 증류수로 2 회 반복하여 초음파 세척을 10 분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송시켰다. 또한 산소플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5 분간 건식 세정한 후 진공 증착기로 기판을 이송시켰다.

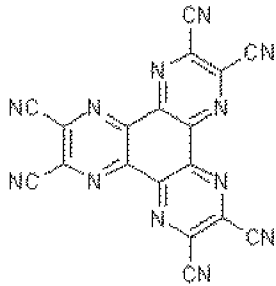
[199] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 화학식의 화합물인 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌 (hexanitride hexaazatriphenylene: 이하 HAT라 함)을 50 Å의 두께로 열 진공 증착하여 박막을 형성하였다. 이 박막에 의하여 기판과 정공주입층 사이의 계면 특성을 향상시킬 수 있다. 이어서, 상기 박막 위에 NPB를 850 Å의 두께로 증착하여 정공수송층을 형성한 후, 이 위에 화학식 1-3의 화합물을 350 Å의 두께로 증착하여 정공수송 및 전자차단층을 형성하였다. 이어서, CBP에 Ir(ppy)₃를 10 중량% 도핑하여 두께 250 Å의 발광층을

형성하였다. 그 위에 BCP를 50 Å의 두께의 정공차단층을 형성하고, 이어서 하기 화학식의 전자수송층 물질을 300 Å의 두께로 증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 위에 순차적으로 12 Å 두께의 리튬 플루오라이드 (LiF)와 2000 Å의 두께의 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

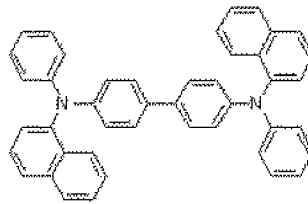
[200] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.3~0.8 Å/sec로 유지하였다. 또한, 음극의 리튬플루오라이드는 0.3 Å/sec, 알루미늄은 1.5~2.5 Å/sec의 증착 속도를 유지하였다. 증착시 진공도는 $1\sim 3 \times 10^{-7}$ 로 유지하였다.

[201]

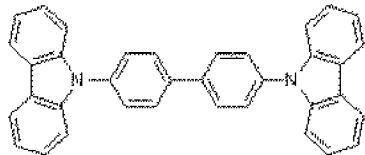
[HAT]



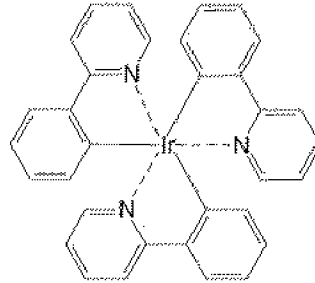
[NPB]



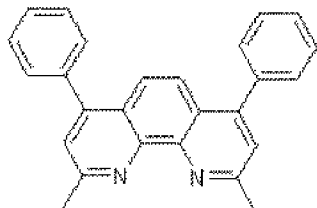
[CBP]



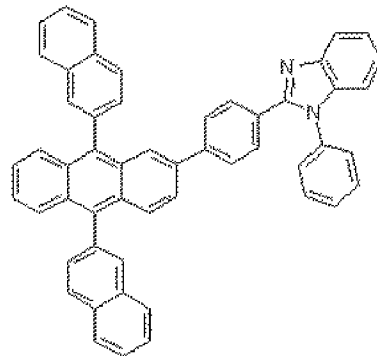
[Ir(ppy)₃]



[BCP]



[전자수송층 물질]



[202] 제조된 소자는 순방향 전류밀도 10 mA/cm²에서 5.75 V의 전계를 보였으며, 58.8 cd/A의 전류 효율을 보이는 스펙트럼이 관찰되었다. 이와 같이 소자가 상기 전류 효율을 나타내는 것은 상기 화학식 1-3의 화합물이 정공전달과 함께 전자

차단 역할을 하고 있다는 것을 나타낸다.

[203]

[204] <실험예 2> 유기 발광 소자의 제조

[205] 상기 실시예 1에서 정공수송 및 전자차단층으로 사용한 화학식 1-3의 화합물을 화학식 1-4의 화합물로 치환한 것을 제외하고는 동일한 소자를 제작하였다.

[206] 제조된 소자는 순방향 전류밀도 10 mA/cm²에서 5.51 V의 전계를 보였으며, 58.2 cd/A의 전류 효율을 보이는 스펙트럼이 관찰되었다.

[207]

[208] <실험예 3> 유기 발광 소자의 제조

[209] 상기 실시예 1에서 정공수송 및 전자차단층으로 사용한 화학식물 1-3의 화합물을 화학식 1-7의 화합물로 치환한 것을 제외하고는 동일한 소자를 제작하였다.

[210] 제조된 소자는 순방향 전류밀도 10 mA/cm²에서 5.71 V의 전계를 보였으며, 59.1 cd/A의 전류 효율을 보이는 스펙트럼이 관찰되었다.

[211]

[212] <실험예 4> 유기 발광 소자의 제조

[213] 상기 실시예 1에서 정공수송 및 전자차단층으로 사용한 화학식 1-3의 화합물을 화학식 1-8의 화합물로 치환한 것을 제외하고는 동일한 소자를 제작하였다.

[214] 제조된 소자는 순방향 전류밀도 10 mA/cm²에서 5.54 V의 전계를 보였으며, 57.9 cd/A의 전류 효율을 보이는 스펙트럼이 관찰되었다.

[215]

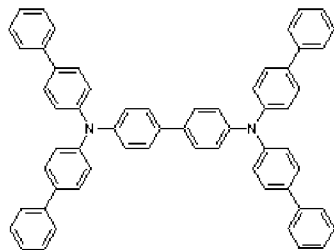
[216] <비교예> 유기 발광 소자의 제조

[217] 상기 실시예 1에서 정공수송 및 전자차단층으로 사용한 화학식 1-3의 화합물을 하기 화학식 HT1으로 치환한 것을 제외하고는 동일한 소자를 제작하였다.

[218] 제조된 소자는 순방향 전류밀도 10 mA/cm²에서 5.41 V의 전계를 보였으며, 50.8 cd/A의 전류 효율을 보이는 스펙트럼이 관찰되었다.

[219]

[HT1]



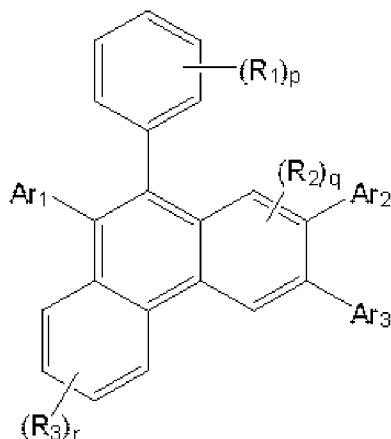
[220] 본원 발명 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하여 제작한 소자의 경우에 높은 전류 효율을 나타내는 것을 확인 할 수 있으며, 이는 소자 내에서 화학식 1의 화합물이 정공전달과 함께 전자 차단 역할을 하고 있기 때문이다.

청구범위

[청구항 1]

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Ar_1 내지 Ar_3 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알킬기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알콕시기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기, 아세틸렌기 및 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기; 및 알킬기, 알케닐기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

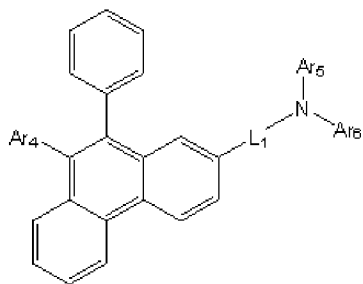
Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나는 아릴기, 헤테로고리기 또는 플루오레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기; 또는 아릴기, 헤테로고리기 또는 플루오레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 아릴기이고, 이는 추가로 아릴기, 플루오렌기 또는 아릴아민기로 치환될 수 있고,

R₁, R₂ 및 R₃는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 할로젠기; 알킬기; 알케닐기; 알콕시기; 아릴기; 헤테로고리기; 및 알킬기, 아릴기 또는 헤테로고리기로 치환 또는 비치환된 아민기로 이루어진 군에서 선택되고, p는 1 내지 5의 정수이고, q는 1 또는 2의 정수이며, r은 1 내지 4의 정수이다.

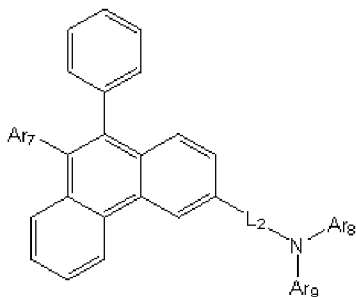
[청구항 2]

청구항 1에서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 5로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

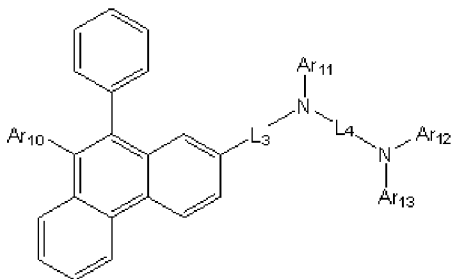
[화학식 2]



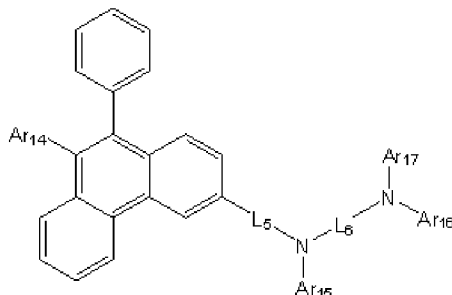
[화학식 3]



[화학식 4]



[화학식 5]



상기 화학식 2 내지 5에서,

Ar_4 , Ar_7 , Ar_{10} 및 Ar_{14} 는 각각 독립적으로 수소; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알킬기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 알콕시기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기, 아세틸렌기 및 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알킬기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기, 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기; 및 알킬기, 알케닐기, 아릴기, 아릴알킬기, 아릴알케닐기 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

Ar_5 , Ar_6 , Ar_8 , Ar_9 , Ar_{11} , Ar_{12} , Ar_{13} , Ar_{15} , Ar_{16} , 및 Ar_{17} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 헤테로고리기 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기이며, L_1 , L_2 , L_3 및 L_5 는 직접결합, 아릴렌기 또는 플루오레닐렌기이고, L_4 및 L_6 은 아릴렌기이다.

[청구항 3]

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 Ar_1 은 수소 또는 페닐기인 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 4]

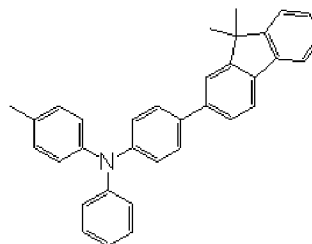
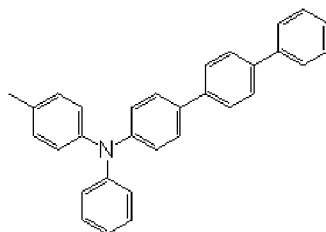
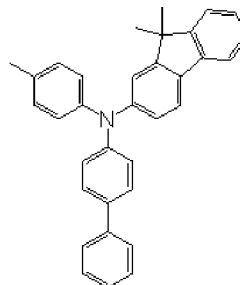
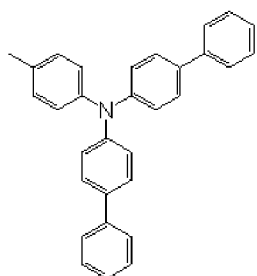
청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오펜기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기인 것을 특징으로 하는 화합물.

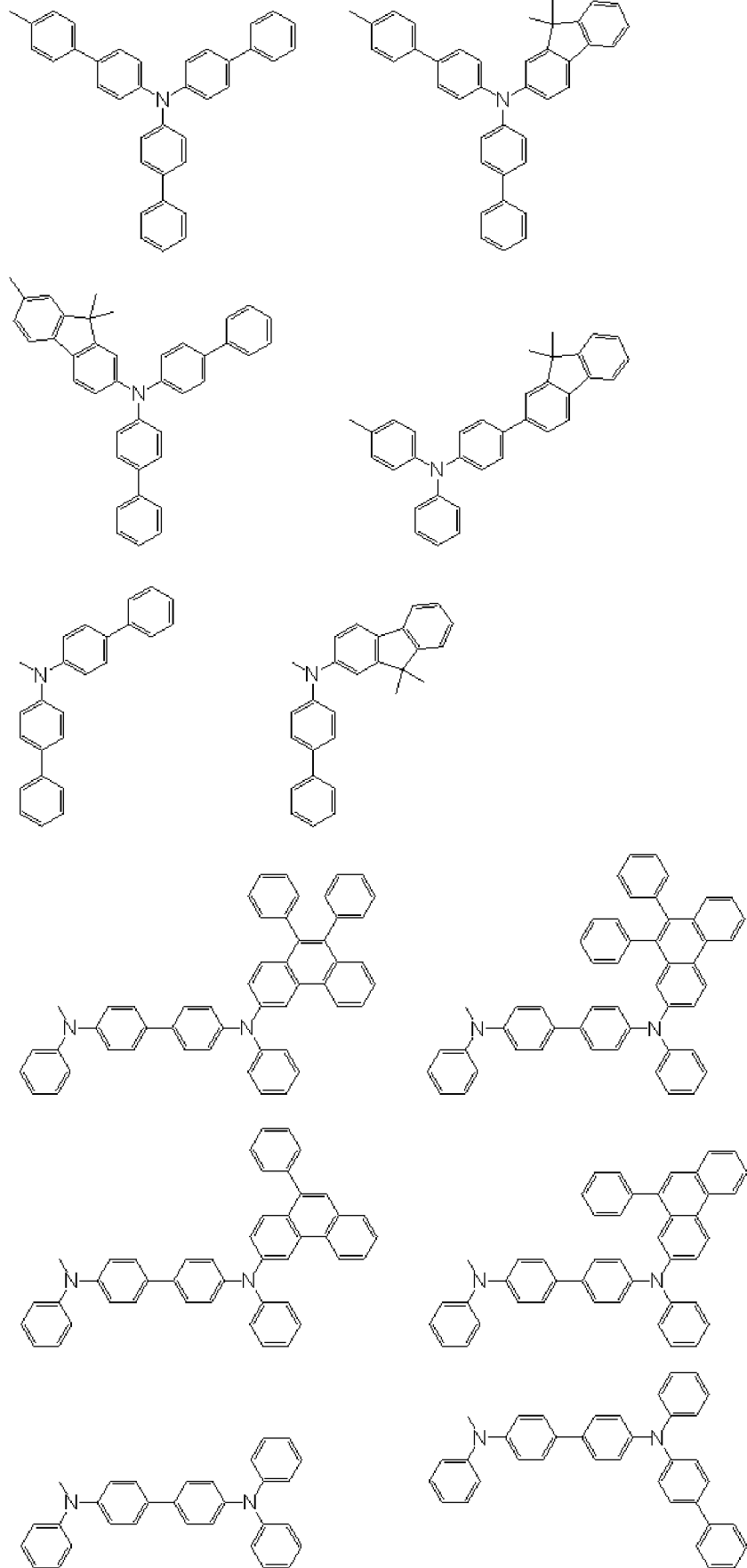
[청구항 5]

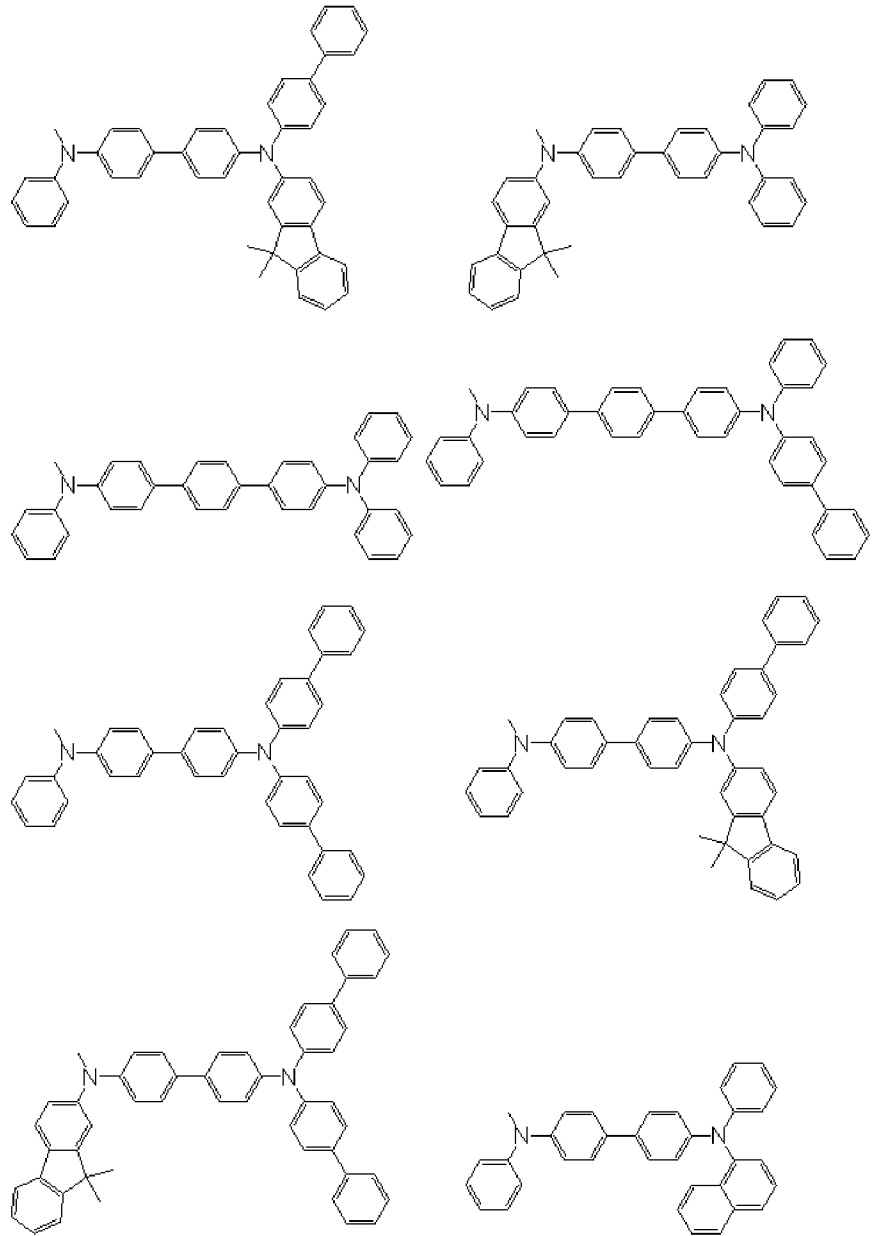
청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 페닐기; 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 바이페닐기; 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 플루오레닐기; 또는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기로 치환 또는 비치환된 아민기로 치환된 나프틸기인 것을 특징으로 하는 화합물.

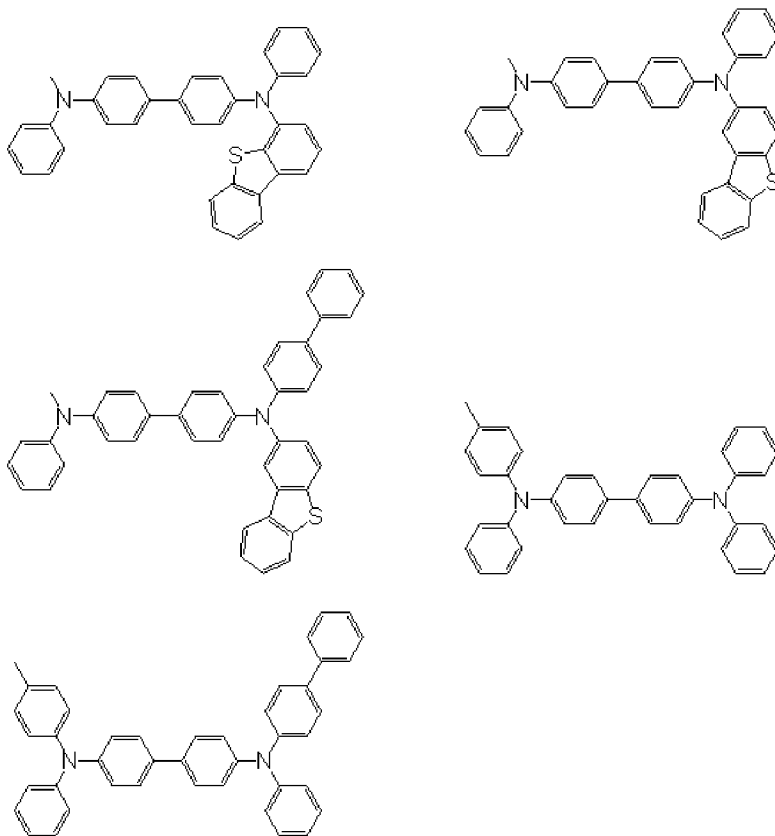
[청구항 6]

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 Ar_2 및 Ar_3 중 적어도 하나는 하기의 치환기인 것을 특징으로 하는 화합물.



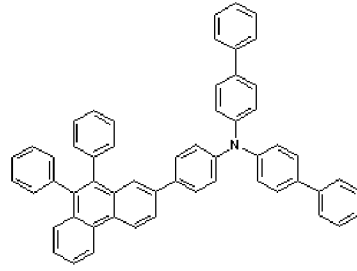




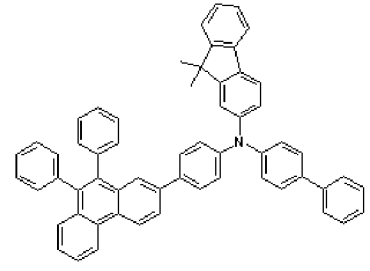


- [청구항 7] 청구항 2에 있어서, 상기 화학식 2 내지 5의 Ar_4 , Ar_7 , Ar_{10} 및 Ar_{14} 는 수소 또는 페닐기인 것을 특징으로 하는 화합물.
- [청구항 8] 청구항 2에 있어서, 상기 화학식 2 내지 5의 Ar_5 , Ar_6 , Ar_8 , Ar_9 , Ar_{11} , Ar_{12} , Ar_{13} , Ar_{15} , Ar_{16} , 및 Ar_{17} 은 각각 독립적으로 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기로 치환된 페닐기, 나프틸기, 알킬기로 치환된 플루오레닐기, 디벤조티오페닐기 또는 페난트레닐기인 것을 특징으로 하는 화합물.
- [청구항 9] 청구항 2에 있어서, 상기 화학식 2 내지 5의 L_1 , L_2 , L_3 및 L_5 는 각각 독립적으로 직접결합, 페닐렌기, 바이페닐렌기, 나프틸렌기, 플루오레닐렌기인 것을 특징으로 하는 화합물.
- [청구항 10] 청구항 2에 있어서, 상기 화학식 2 내지 5의 L_4 및 L_6 은 각각 독립적으로 바이페닐렌기 또는 터페닐렌기인 것을 특징으로 하는 화합물.
- [청구항 11] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:

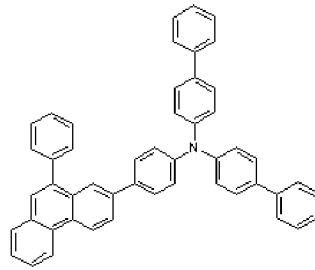
화학식 1-1



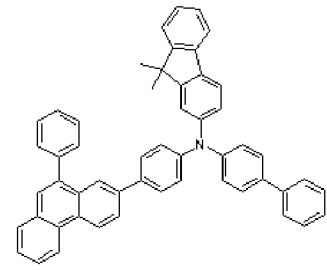
화학식 1-2



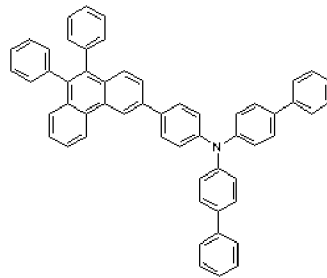
화학식 1-3



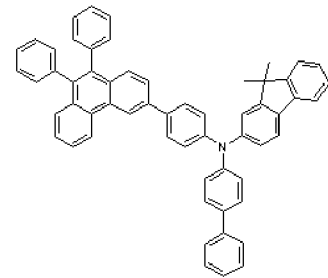
화학식 1-4



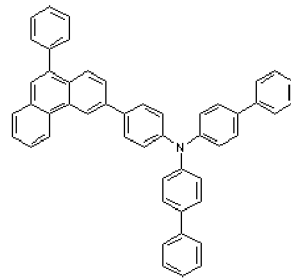
화학식 1-5



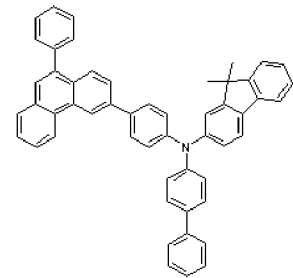
화학식 1-6



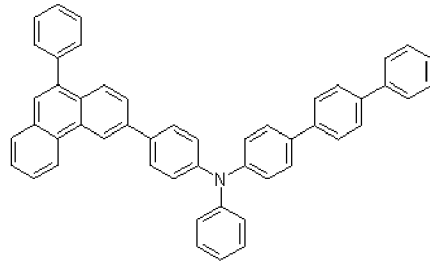
화학식 1-7



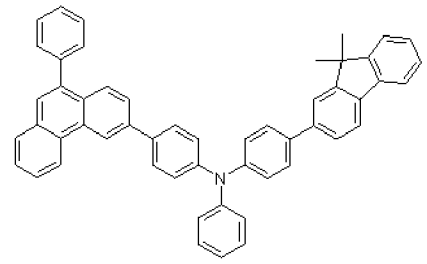
화학식 1-8



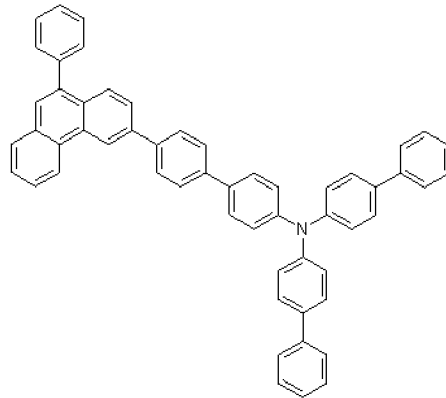
화학식 1-9



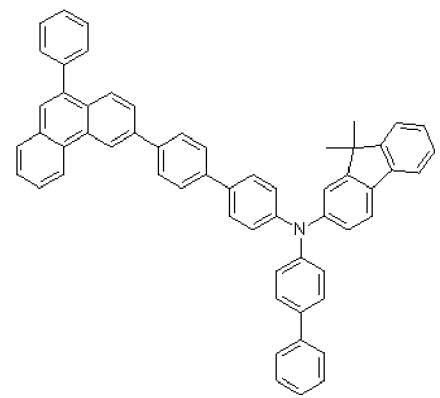
화학식 1-10



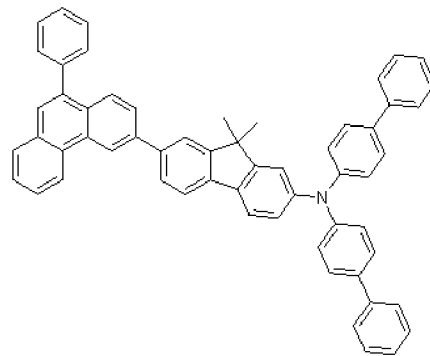
화학식 1-11



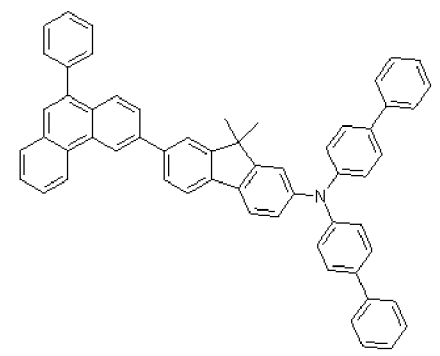
화학식 1-12



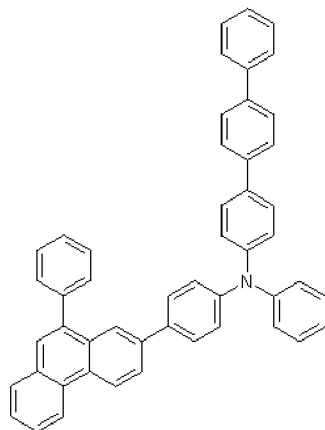
화학식 1-13



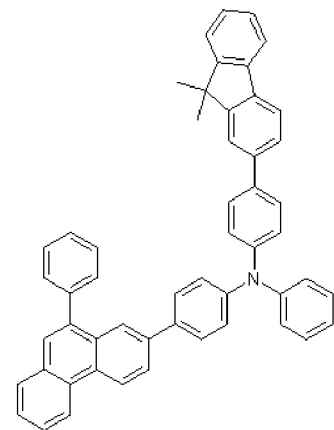
화학식 1-14



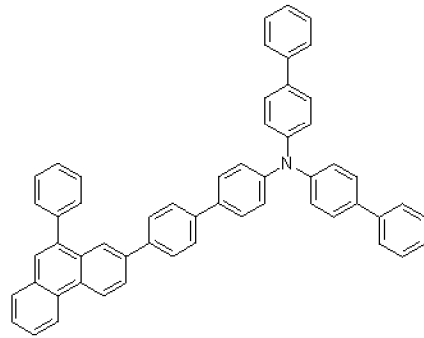
화학식 1-15



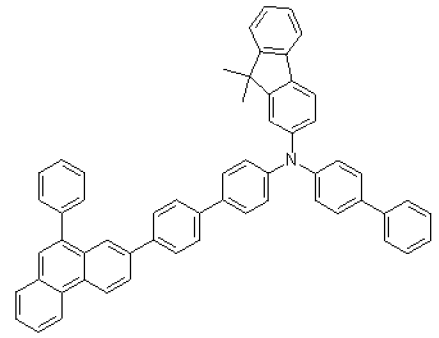
화학식 1-16



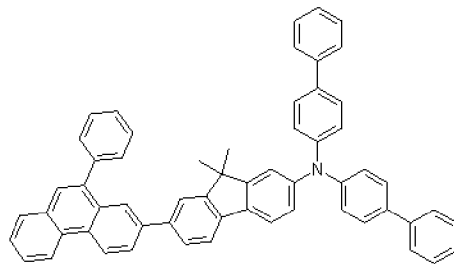
화학식 1-17



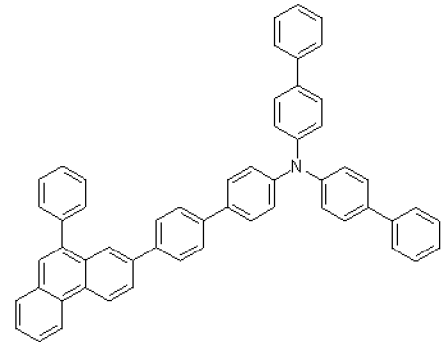
화학식 1-18



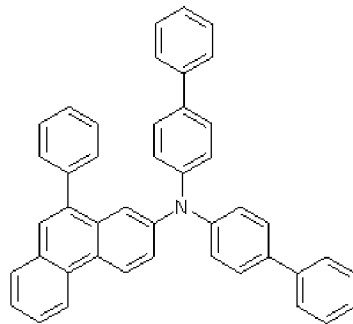
화학식 1-19



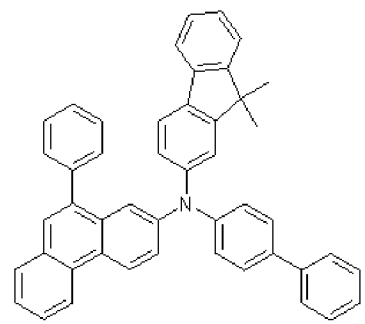
화학식 1-20



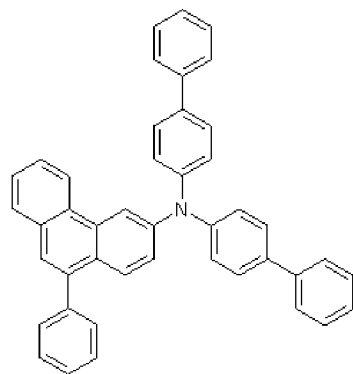
화학식 1-21



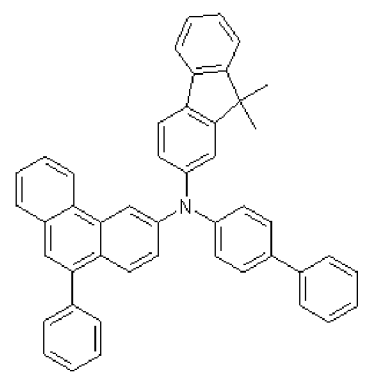
화학식 1-22



화학식 1-23



화학식 1-24

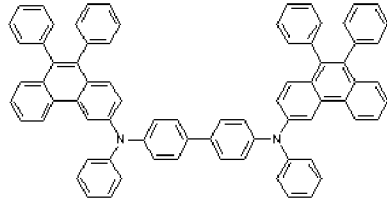


[청구항 12]

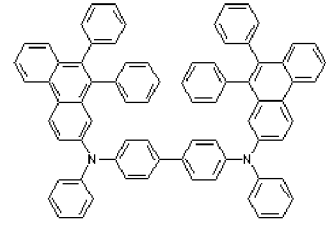
청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는

화합물:

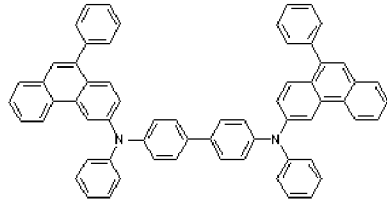
화학식 2-1



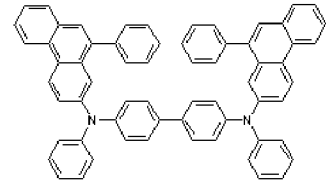
화학식 2-2



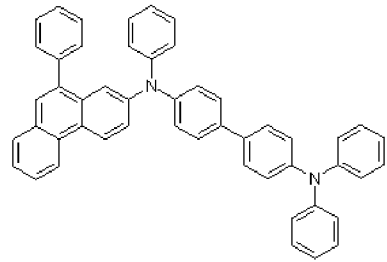
화학식 2-3



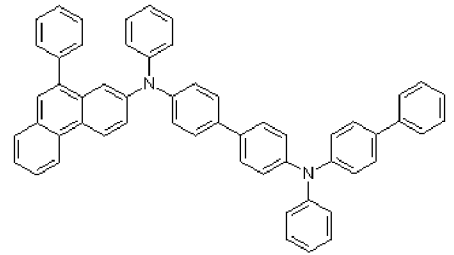
화학식 2-4



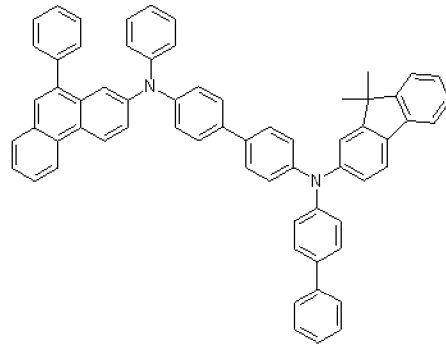
화학식 2-5



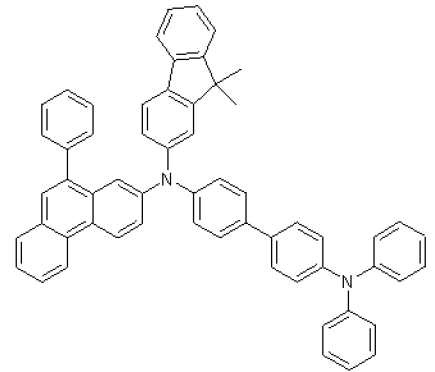
화학식 2-6



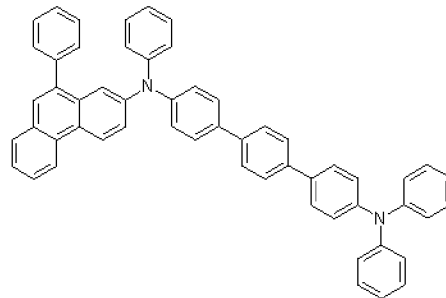
화학식 2-7



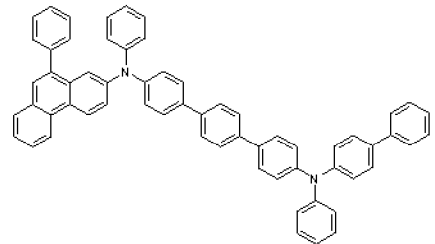
화학식 2-8



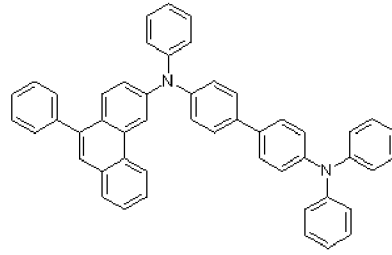
화학식 2-9



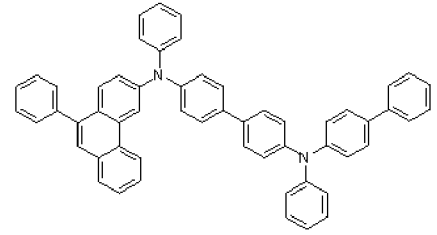
화학식 2-10



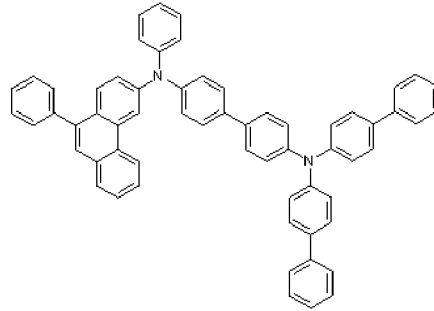
화학식 2-11



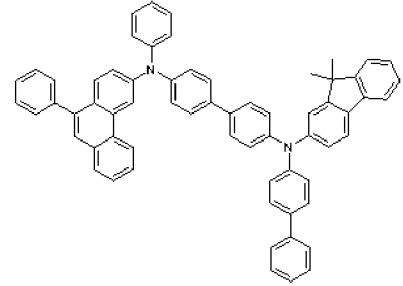
화학식 2-12



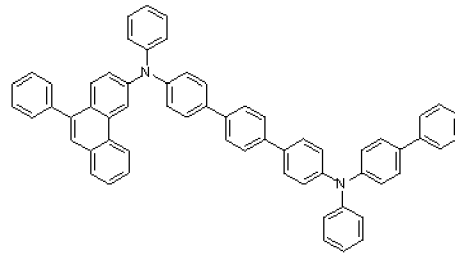
화학식 2-13



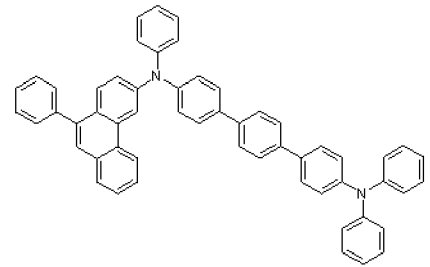
화학식 2-14



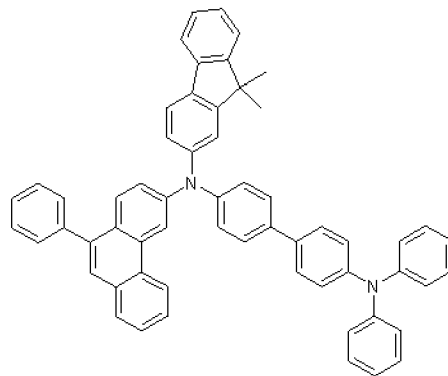
화학식 2-15



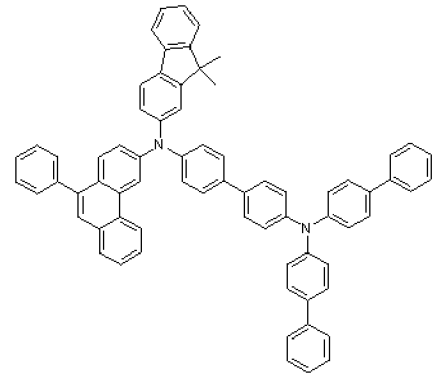
화학식 2-16



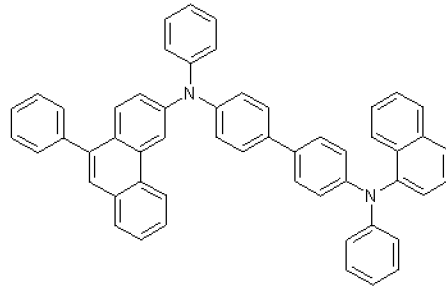
화학식 2-17



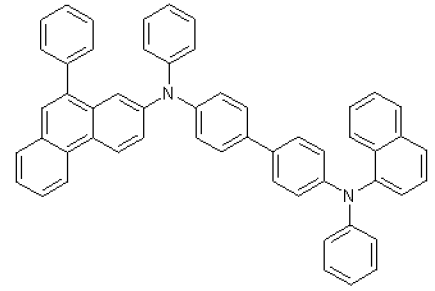
화학식 2-18



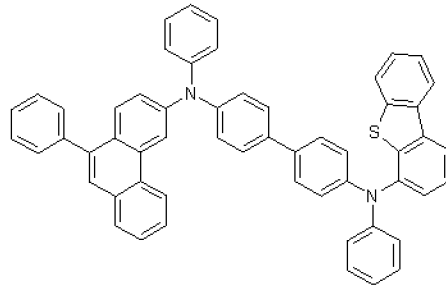
화학식 2-19



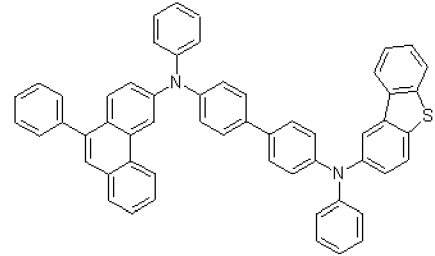
화학식 2-20



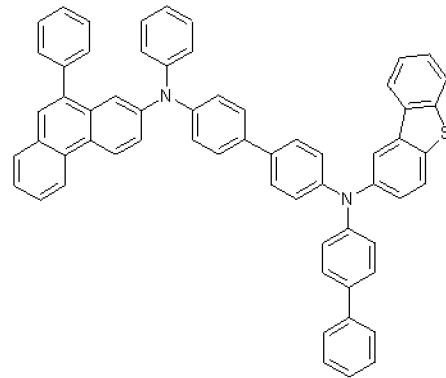
화학식 2-21



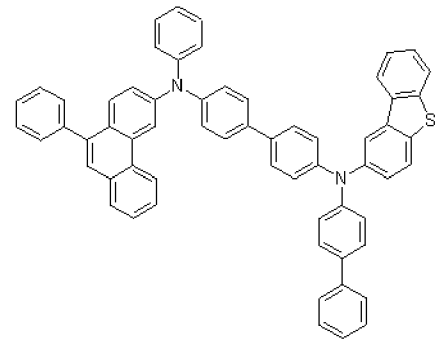
화학식 2-22



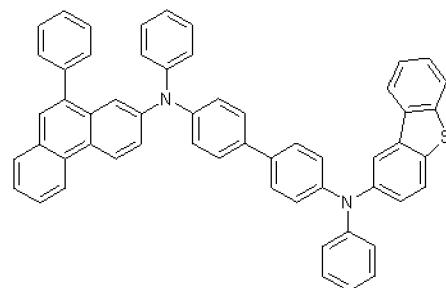
화학식 2-23



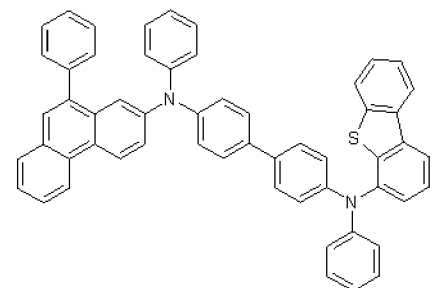
화학식 2-24



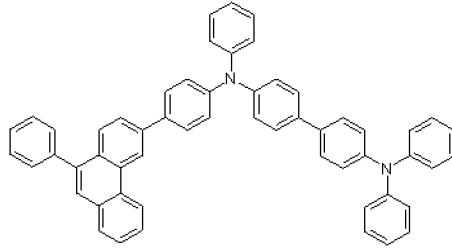
화학식 2-25



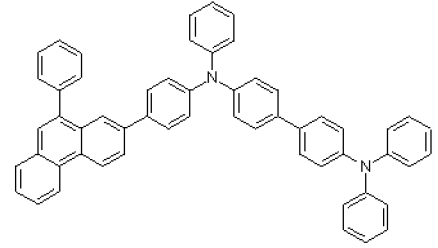
화학식 2-26



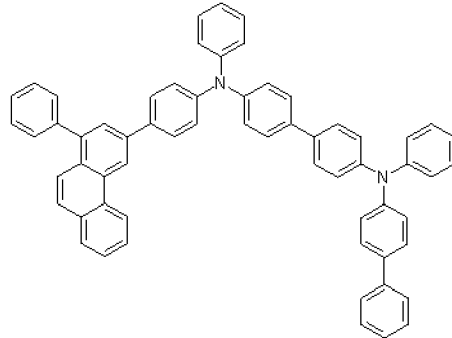
화학식 2-27



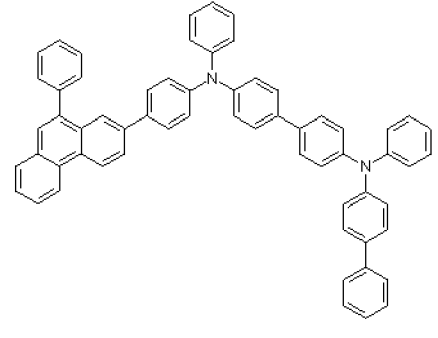
화학식 2-28



화학식 2-29



화학식 2-30



[청구항 13]

제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 청구항 1 내지 청구항 12 중 어느 한 항의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

[청구항 14]

청구항 13에 있어서, 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 정공 수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함하고, 상기 층들 중 1층 이상이 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

[청구항 15]

청구항 13에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

[청구항 16]

청구항 13에 있어서, 상기 유기물층은 정공수송층을 포함하고, 상기 정공수송층이 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

[청구항 17]

청구항 13에 있어서, 상기 유기물층은 전자 수송층, 전자 주입층, 및 전자 수송 및 전자 주입을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함하고, 상기 층들 중 1층 이상이 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

[청구항 18]

청구항 13에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

[Fig. 1]

