

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구  
국제사무국



(43) 국제공개일  
2011년 12월 1일 (01.12.2011)

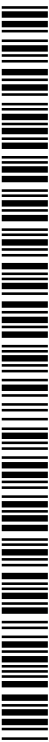
PCT

(10) 국제공개번호  
WO 2011/149240 A2

- (51) 국제특허분류: C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2011/003785
- (22) 국제출원일: 2011년 5월 24일 (24.05.2011)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보: 10-2010-0050467 2010년 5월 28일 (28.05.2010) KR
- (71) 출원인 (US 을(를) 제외한 모든 지정국에 대하여): **주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)** [KR/KR]; 서울특별시 중구 을지로 6가 18-12번지, 100-730 Seoul (KR).
- (72) 발명자; **결**
- (75) 발명자/출원인 (US 에 한하여): **이은정 (LEE, Eun Jung)** [KR/KR]; 서울시 서대문구 연희3동 337-17번지, 120-830 Seoul (KR). **홍진석 (HONG, Jin-Seok)** [KR/KR]; 경기도 수원시 장안구 연무동 61-164 302호, 440-807 Gyeonggi-do (KR). **김신한 (KIM, Shin Han)** [KR/KR]; 경기도 용인시 수지구 성북동 강남빌리지 103동 1201호, 448-982 Gyeonggi-do (KR). **김경수 (KIM, Kyoung-Soo)** [KR/KR]; 대전광역시 유성구 하기동 송림마을 305동 1905호, 305-759 Daejeon (KR).
- (74) 대리인: **조우제 (CHO, Woo Je)** 등; 서울특별시 중구 충무로 3가 60-1번지 극동빌딩 14층, 100-705 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, RO, RS, RU, 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 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, 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 2011/149240 A2

(54) Title: BIPOLAR TRIPHENYLENE-BASED COMPOUND AND AN ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT COMPRISING THE SAME

(54) 발명의 명칭 : 바이폴라 트리페닐렌계 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

(57) Abstract: The present invention relates to a bipolar triphenylene-based compound and to an organic electroluminescent element comprising the same, and more specifically the bipolar triphenylene-based compound can be used as one or other of an electron-injection layer material, electron-transport layer material, hole-injection layer material, hole-transport layer material and host material so as to improve properties such as the luminous efficiency, luminance, thermal stability, drive voltage and life of the organic electroluminescent element.

(57) 요약서: 본 발명은 바이폴라 트리페닐렌계 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 보다 구체적으로 상기 바이폴라 트리페닐렌계 화합물이 전자 주입층 재료, 전자 수송층 재료, 정공 주입층 재료, 정공 수송층 재료 및 호스트 물질 중 어느 하나로 적용됨으로써, 유기 전계 발광 소자의 발광효율, 휘도, 열적 안정성, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상될 수 있다.

## 명세서

### 발명의 명칭: 바이폴라 트리페닐렌계 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

#### 기술분야

- [1] 본 발명은 바이폴라 트리페닐렌계 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

#### 배경기술

- [2] 1950년대 Bernanose의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광(electroluminescent, EL) 소자(이하, 간단히 '유기 EL 소자'라 함)에 대한 연구는 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 EL 소자가 제시되었고, 고효율, 고수명의 유기 EL 소자를 만들기 위하여 소자 내 각각의 특징적인 유기물 층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.
- [3] 이러한 유기 EL 소자는 ITO(Indium tin oxide) 기관, 양극(anode), 선택적으로 양극으로부터 정공을 받아들이는 정공 주입층, 정공을 전달하는 정공 수송층, 정공과 전자가 재결합하여 빛을 내는 발광층, 선택적으로 전자를 전달하는 전자 수송층, 선택적으로 음극(cathode)으로부터 전자를 받아들이는 전자 주입층 및 음극(cathode)으로 이루어져 있다.
- [4] 일반적으로 유기 EL 소자는 전기 에너지를 인가하여, 양극과 음극 사이의 각 기능층을 통하여 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되고, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나는 원리로 이루어져 있다.
- [5] 유기 EL 소자에서 유기물층으로 사용되는 물질은 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.
- [6] 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 물질과 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 물질로 구분될 수 있다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 물질로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다. 그 원리는 발광층을 주로 구성하는 호스트보다 에너지 대역 간극이 작고 발광 효율이 우수한 도펀트를 발광층에 소량 혼합하면, 호스트에서 발생한 엑시톤이 도펀트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이때 호스트의 파장이 도펀트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도펀트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.
- [7] 일반적으로 인광 호스트 재료로는 CBP (4,4-dicarbazolybiphenyl) 등의 카바졸계 화합물 등이 사용되며, 인광 도펀트 재료로는 Ir, Pt 등의 중원자 (heavy atoms)가

포함된 금속 착체 화합물이 널리 사용되고 있다.

[8] 그러나, 현재 사용되는 인광 호스트 재료인 CBP의 경우 유리전이온도 ( $T_g$ )가 110 °C 정도로 낮으며, 소자 내의 결정화가 쉽게 일어나 유기 EL 소자의 수명이 150 시간 정도로 매우 짧다는 문제점이 있다.

[9] 한편, 전자 수송 물질은 전자에 대한 안정도와 전자 이동 속도가 상대적으로 우수한 유기 금속착체들이 유기 단분자 물질로서 좋은 후보들이며, 안정성이 우수하고 전자 친화도가 큰 Alq3가 가장 우수한 것으로 보고 되었으며, 현재에도 가장 기본적으로 사용되고 있다.

[10] 또한, 종래의 전자 주입 물질 및 전자 수송 물질로는 이미다졸기, 옥사졸기, 티아졸기를 가진 유기 단분자 물질들이 많이 보고되었다. 그러나 이러한 물질들이 전자 수송용 물질로 보고되기 이전에 이러한 물질들의 금속착체 화합물들이 유기 전계 발광 소자의 청색 발광층 또는 청록색 발광층에 적용된 것으로 이미 보고되었다.

[11] 전술한 유기 EL 소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 발광 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등의 소자 내 유기물층을 이루는 물질이 안정적이고 효율적으로 뒷받침되는 것이 필요하다. 그러나, 캐리어(carrier)의 수송이 어느 한 쪽으로 치우치는 문제나, 정공의 빠른 이동으로 인해 생기는 엑시톤이 불균형하게 재결합하는 문제가 있다.

[12] 이와 같이 아직까지 안정적이고 효율적인 유기 EL 소자용 유기물층 물질의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서 새로운 물질의 개발이 계속 요구되고 있다.

## 발명의 상세한 설명

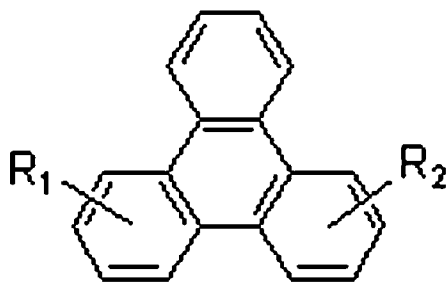
### 기술적 과제

[13] 본 발명은 전술한 문제점을 해결하고자, 구동 전압, 발광효율, 휘도, 열적 안정성 및 소자 수명 등의 제반 특성을 향상시킬 수 있는 바이폴라 트리페닐렌계 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

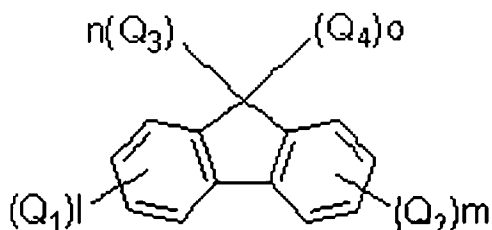
### 과제 해결 수단

[14] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물, 바람직하게는 바이폴라 트리페닐렌계 화합물을 제공한다:

[15] 화학식 1



- [16] (상기 화학식 1에서,  
 [17] 상기  $R_1$  및  $R_2$ 는 서로 다르고, 각각 독립적으로 수소, 중수소,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴알킬기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기,  $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴아미노기,  $C_5\sim C_{40}$ 의 디아릴아미노기,  $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기,  $C_5\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기, 및 하기 화학식 2로 표시되는 치환기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기로서,  
 [18] 상기  $R_1$  및  $R_2$ 는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 니트릴기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 아미노기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기 및  $C_5\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 것으로 치환되거나 또는 비치환되며,  
 [19] 이때  $R_1$  및  $R_2$  중 1개 이상은 각각 독립적으로 N, O 및 S로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 원소를 포함하는  $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기이고;  
 [20] 화학식 2



- [21] 상기 화학식 2에서,  
 [22] 상기  $l, m, n$  및  $o$ 는 각각 독립적으로 1 내지 5 범위의 정수이고,  
 [23] 복수의  $Q_1$ 은 서로 같거나 상이하고, 복수의  $Q_2$ 는 서로 같거나 상이하며, 복수의  $Q_3$ 는 서로 같거나 상이하며, 복수의  $Q_4$ 는 서로 같거나 상이하며,  
 [24] 상기  $Q_1, Q_2, Q_3$  및  $Q_4$ 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 니트릴기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 아미노기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기 및  $C_5\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나; 또는 연결기임).  
 [25] 또한, 본 발명은 (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자를 제공한다.  
 [26] 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 전자 주입층, 전자 수송층, 정공

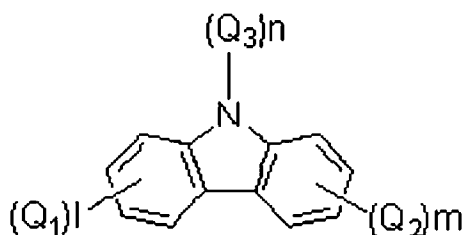
주입층, 정공 수송층 및 발광층으로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상에 사용될 수 있다.

### 발명의 효과

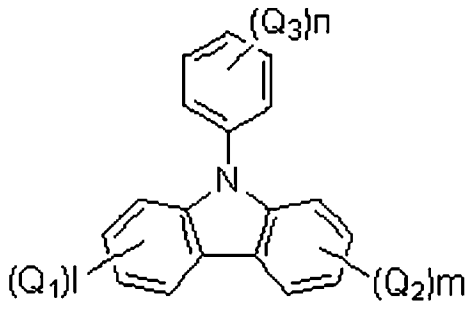
- [27] 본 발명에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 바이폴라 화합물이 유기 전계 발광 소자의 전자 수송 물질, 정공 수송 물질 및 호스트 물질로 이루어진 군에서 선택된 물질로 사용될 경우, 한 분자 내에 전자 주게기(Electron Donating Group, EDG)와 전자 흡인기(Electron Withdrawing Group, EWG)가 동시에 도입된 바이폴라 화합물이 캐리어 수송을 조절하여 charge 밸런스를 개선하고, 이로 인해 재결합 효율이 향상되기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 발광 효율, 휘도, 열적 안정성, 구동 전압, 수명 특성 등의 제반 특성이 향상될 수 있다.

### 발명의 실시를 위한 최선의 형태

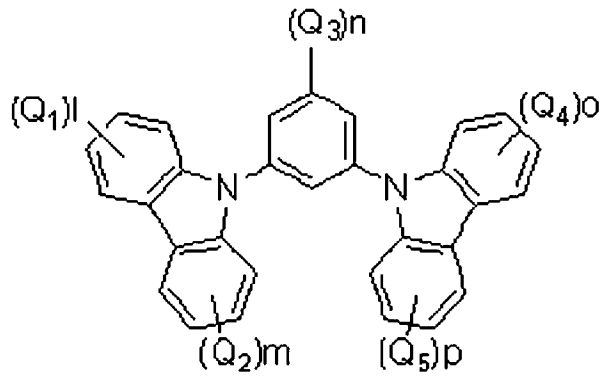
- [28] 이하, 본 발명에 대하여 상세히 설명한다.
- [29] 본 발명에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 바이폴라 트리페닐렌계 화합물로서, 트리페닐렌계 모이어티(moiety)에, 전자 주게기(EDG) 및 전자 흡인기(EWG)가 동시에 치환되되, 이때 상기 EDG 및 EWG가 각각 독립적으로 N, O 및 S로 이루어진 군에서 선택되는 1 이상의 원소를 포함하는 C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 헤테로아릴기인 것을 특징으로 한다. 이러한 바이폴라 트리페닐렌계 화합물이 유기 전계 발광 소자의 전자 수송 물질, 정공 수송 물질 및 호스트 물질 중 적어도 하나로서 이용될 경우, 상기 화합물의 일측에는 전자를 줄 수 있는 EDG가, 다른측에는 전자를 끌어 당기는 EWG가 동시에 결합되어 있기 때문에, 캐리어가 어느 한쪽으로 치우치지 않고, 또한 정공의 빠른 이동도로 인해 생기는 엑시톤 재결합의 불균형을 완화시킬 수 있어 유기 전계 발광 소자는 발광 효율, 휘도, 열적 안정성, 구동 전압, 수명 특성이 전반적으로 향상될 수 있다.
- [30] 상기 N, O 및 S로 이루어진 군에서 선택되는 1 이상의 원소를 포함하는 C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 헤테로아릴기의 예로는 하기 화학식 3으로 표시되는 치환기 내지 화학식 39로 표시되는 헤테로아릴기 등이 있는데, 이에 제한되지 않는다. 하기 화학식 3으로 표시되는 헤테로아릴기 내지 화학식 39로 표시되는 헤테로아릴기 중에서, 화학식 3으로 표시되는 헤테로아릴기 내지 화학식 17로 표시되는 헤테로아릴기는 EDG이고, 화학식 18로 표시되는 헤테로아릴기 내지 화학식 39로 표시되는 헤테로아릴기는 EWG이다:
- [31] 화학식 3



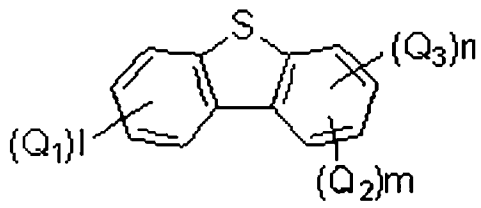
[32] 화학식 4



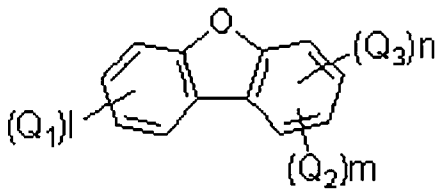
[33] 화학식 5



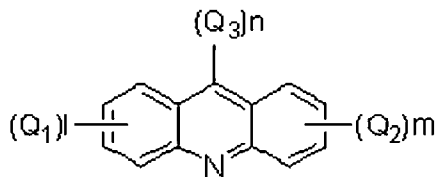
[34] 화학식 6



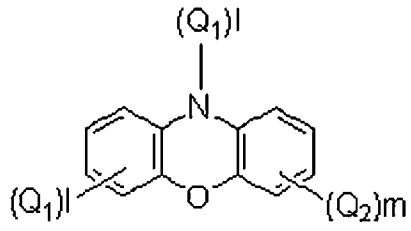
[35] 화학식 7



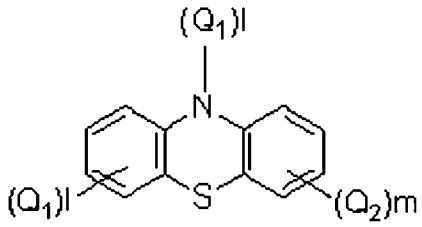
[36] 화학식 8



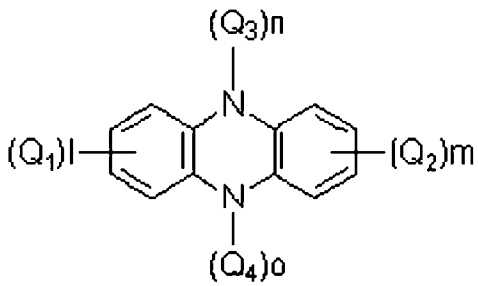
[37] 화학식 9



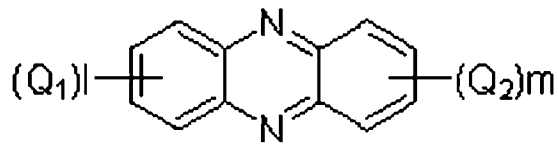
[38] 화학식 10



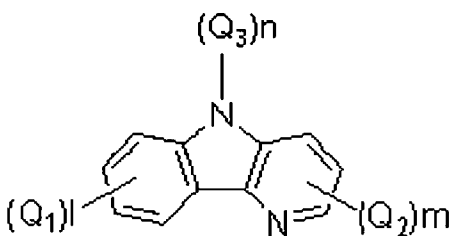
[39] 화학식 11



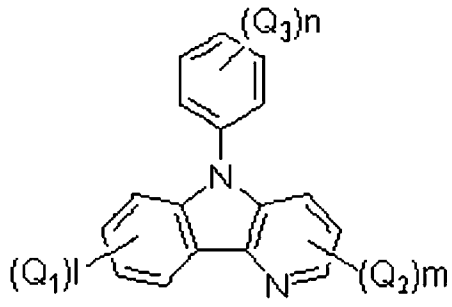
[40] 화학식 12



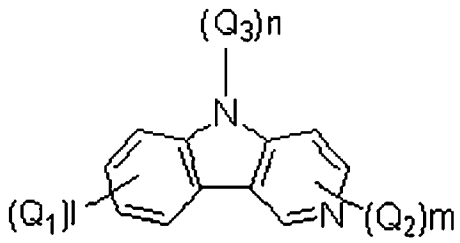
[41] 화학식 13



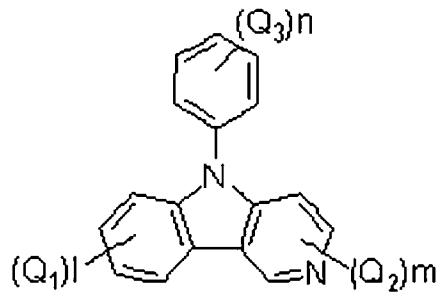
[42] 화학식 14



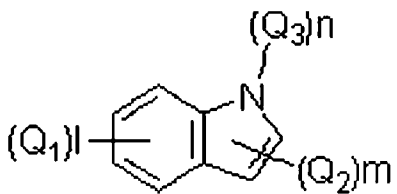
[43] 화학식 15



[44] 화학식 16



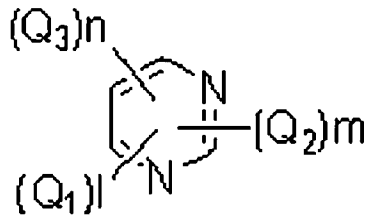
[45] 화학식 17



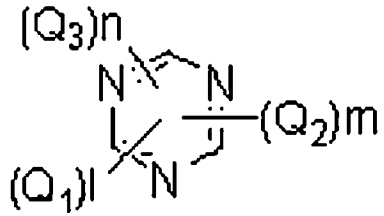
[46] 화학식 18



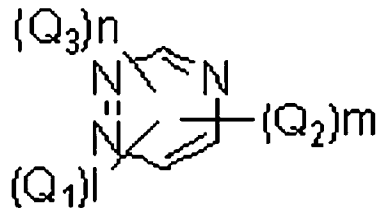
[47] 화학식 19



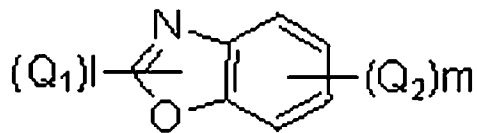
[48] 화학식 20



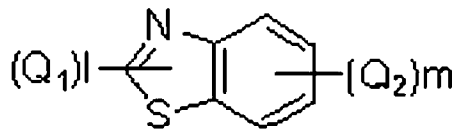
[49] 화학식 21



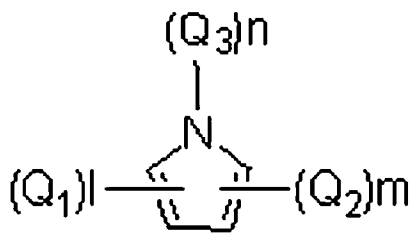
[50] 화학식 22



[51] 화학식 23



[52] 화학식 24



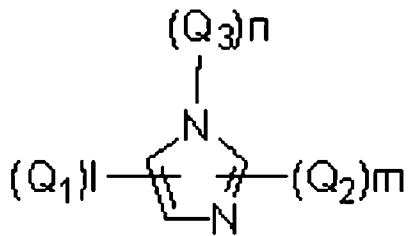
[53] 화학식 25



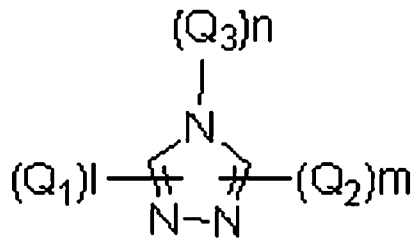
[54] 화학식 26



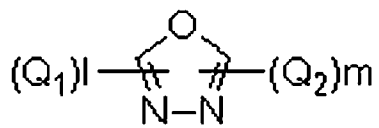
[55] 화학식 27



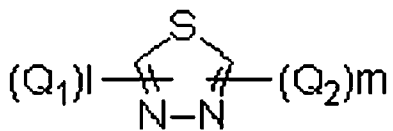
[56] 화학식 28



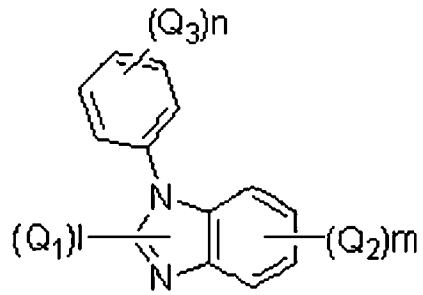
[57] 화학식 29



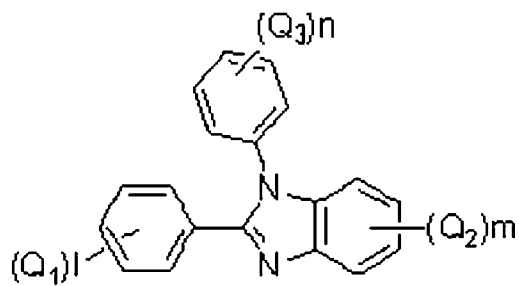
[58] 화학식 30



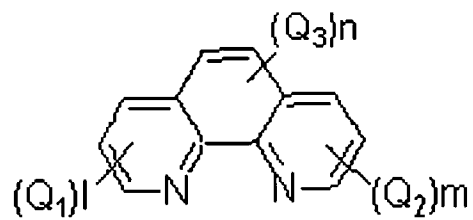
[59] 화학식 31



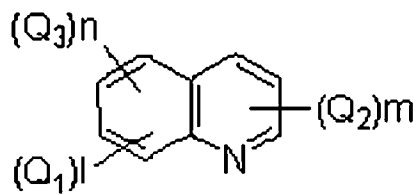
[60] 화학식 32



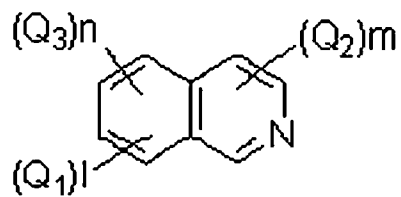
[61] 화학식 33



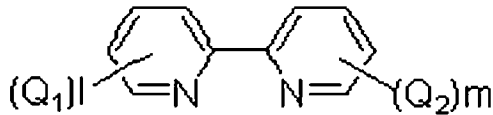
[62] 화학식 34



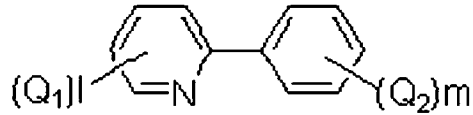
[63] 화학식 35



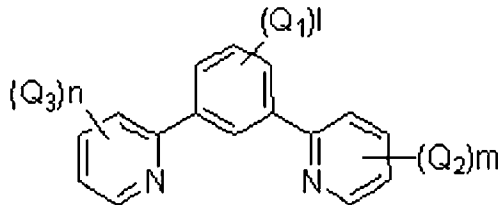
[64] 화학식 36



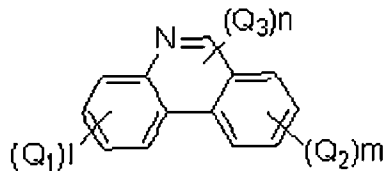
[65] 화학식 37



[66] 화학식 38



[67] 화학식 39



[68] 상기 화학식 3 내지 화학식 39에서,

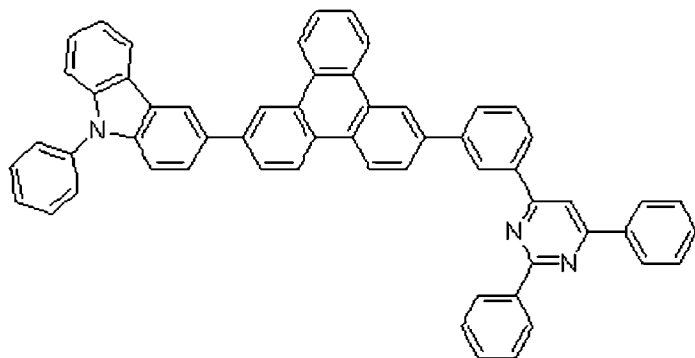
[69] 상기 l, m, n, o 및 p는 각각 독립적으로 1 내지 5 범위의 정수이고;

[70] 복수의 Q<sub>1</sub>은 서로 같거나 상이하고, 복수의 Q<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하며, 복수의 Q<sub>3</sub>는 서로 같거나 상이하며, 복수의 Q<sub>4</sub>는 서로 같거나 상이하며, 복수의 Q<sub>5</sub>는 서로 같거나 상이하며;

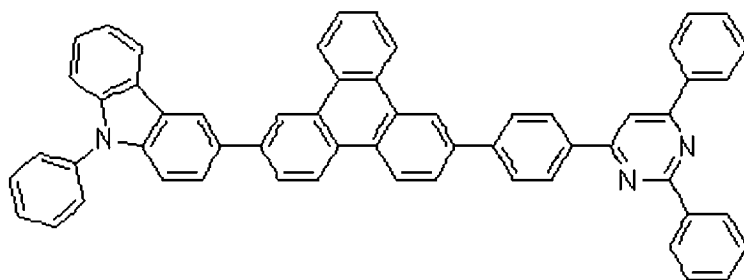
[71] 상기 Q<sub>1</sub>, Q<sub>2</sub>, Q<sub>3</sub>, Q<sub>4</sub> 및 Q<sub>5</sub>는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 니트릴기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알케닐기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알콕시기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 아미노기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 시클로알킬기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 헤테로시클로알킬기, C<sub>6</sub>~C<sub>40</sub>의 아릴기 및 C<sub>5</sub>~C<sub>40</sub>의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나; 또는 연결기이다.

[72] 하기 화학식 40으로 표시되는 화합물 내지 화학식 69로 표시되는 화합물은 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물의 대표적인 예들이나, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 예시된 것들에 한정되는 것은 아니다:

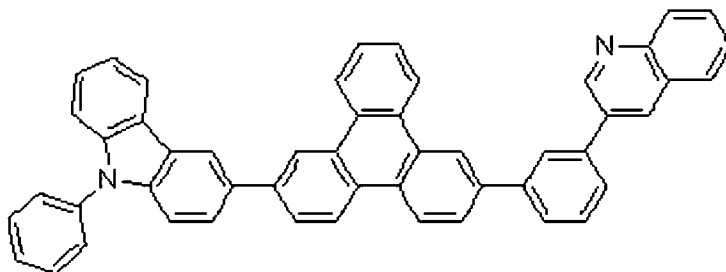
[73] 화학식 40



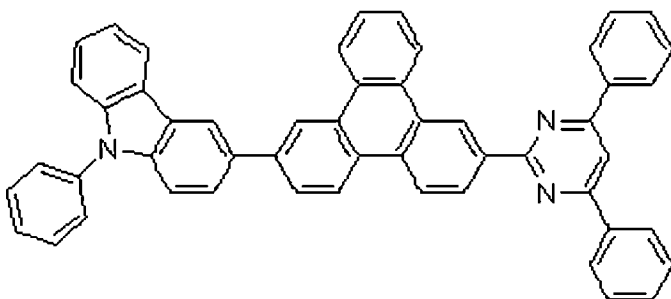
[74] 화학식 41



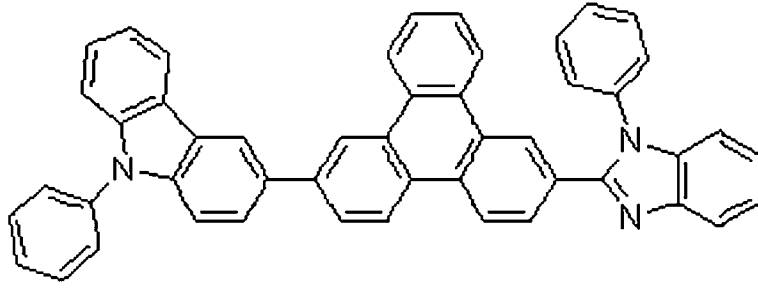
[75] 화학식 42



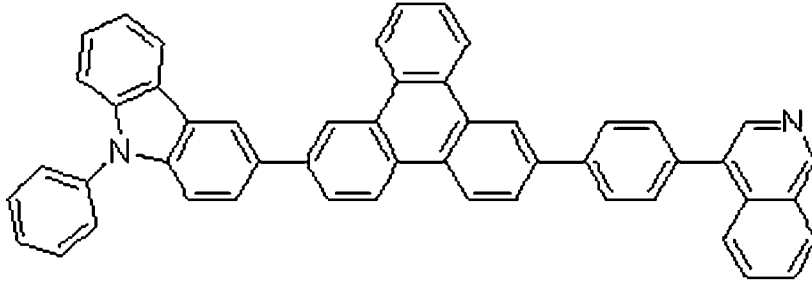
[76] 화학식 43



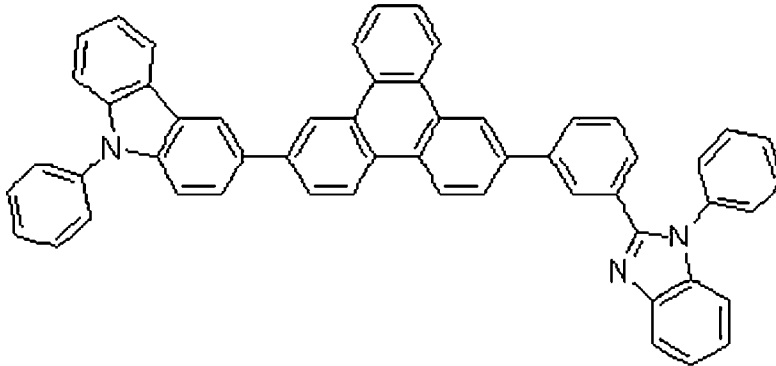
[77] 화학식 44



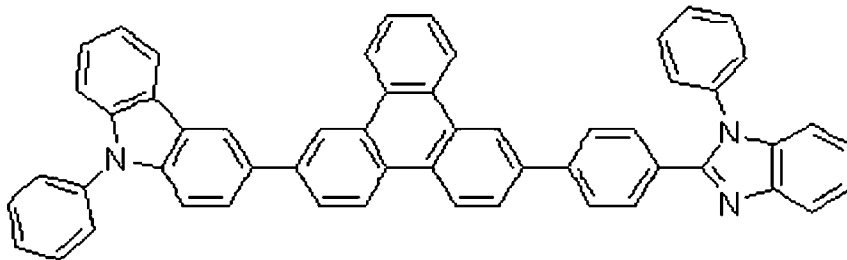
[78] 화학식 45



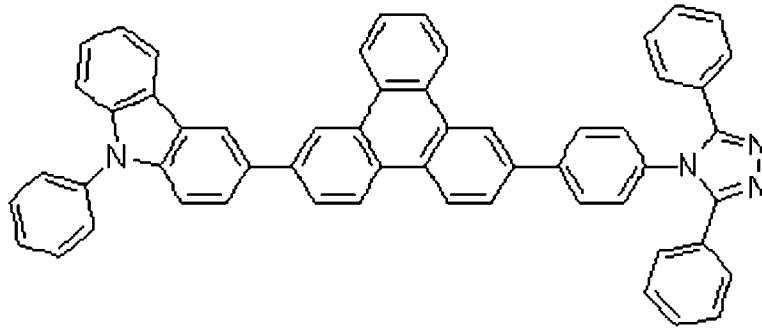
[79] 화학식 46



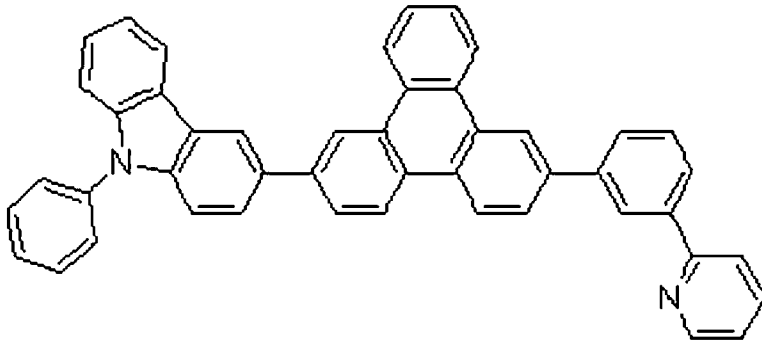
[80] 화학식 47



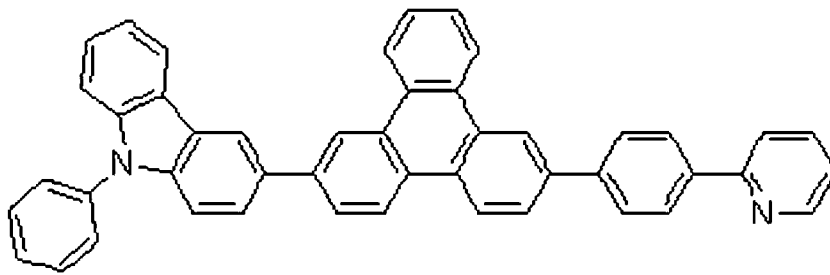
[81] 화학식 48



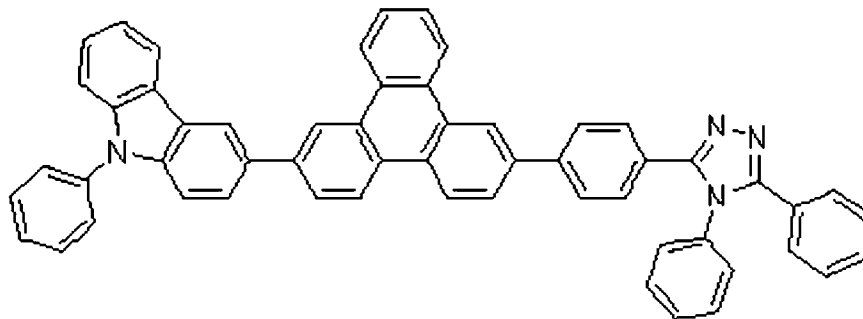
[82] 화학식 49



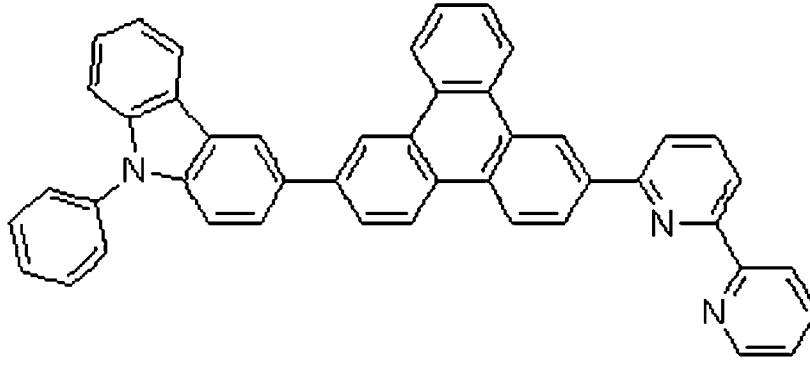
[83] 화학식 50



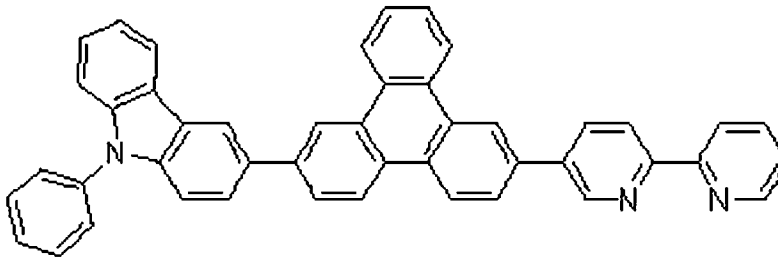
[84] 화학식 51



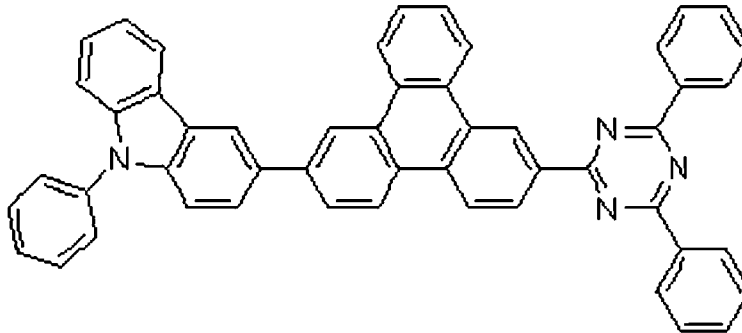
[85] 화학식 52



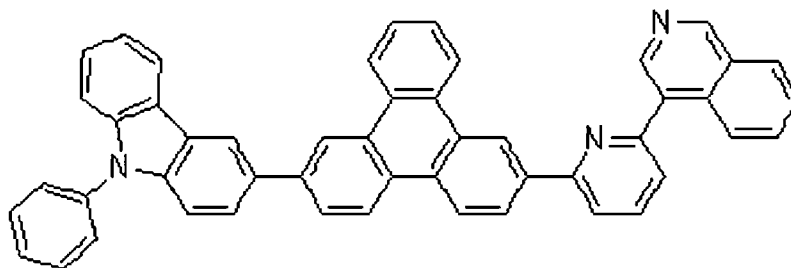
[86] 화학식 53



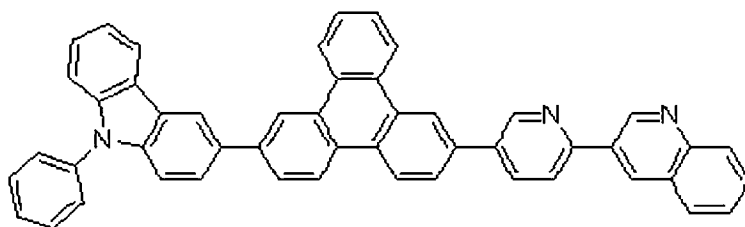
[87] 화학식 54



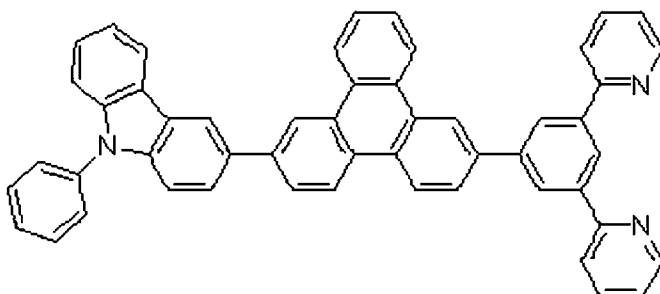
[88] 화학식 55



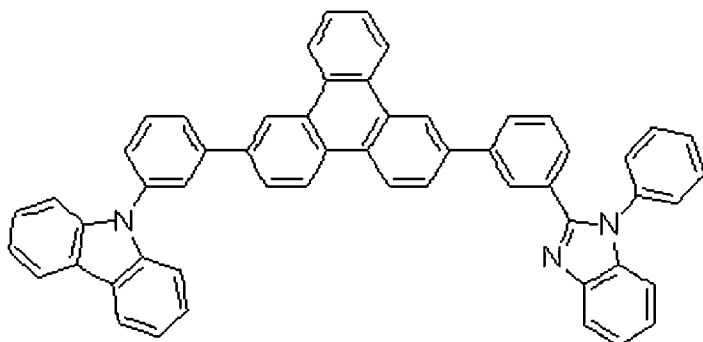
[89] 화학식 56



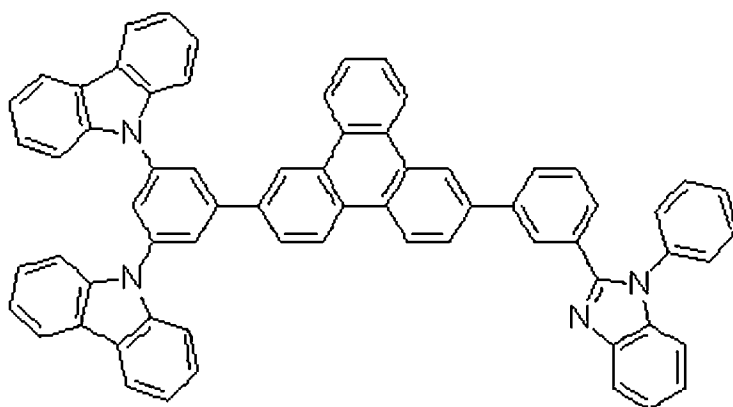
[90] 화학식 57



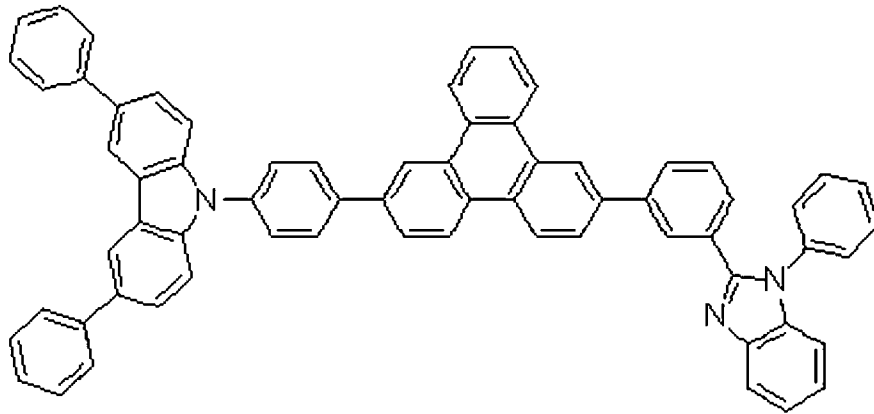
[91] 화학식 58



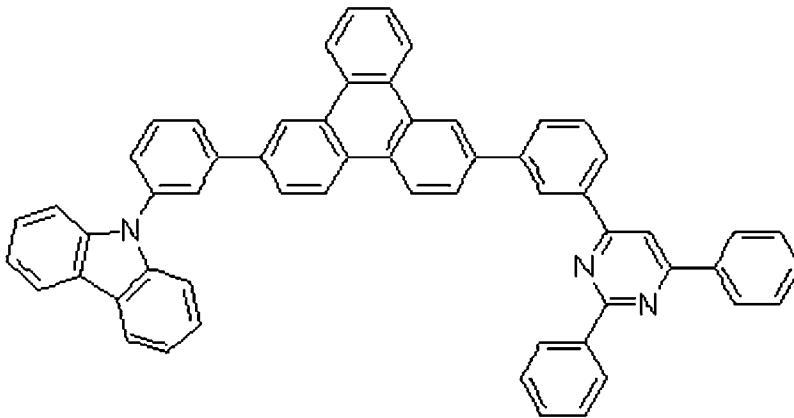
[92] 화학식 59



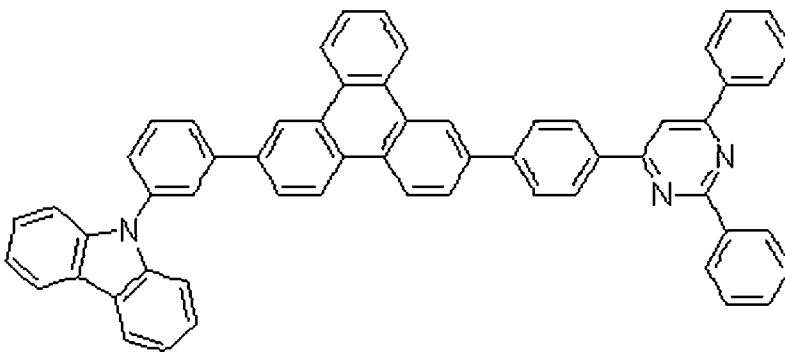
[93] 화학식 60



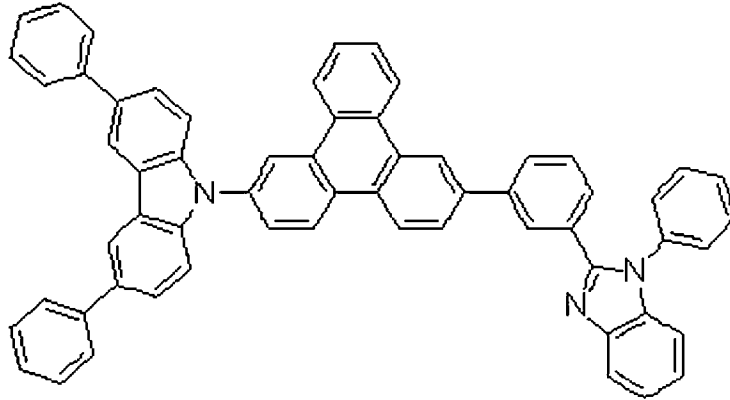
[94] 화학식 61



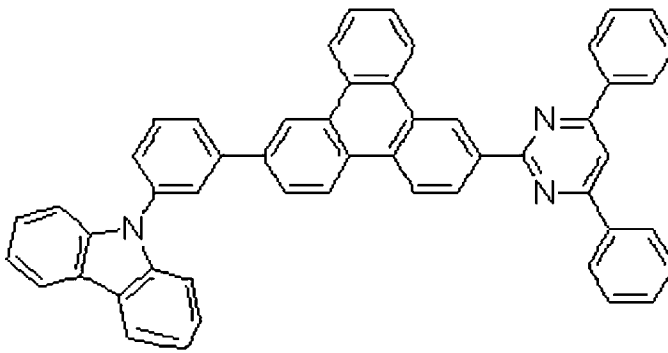
[95] 화학식 62



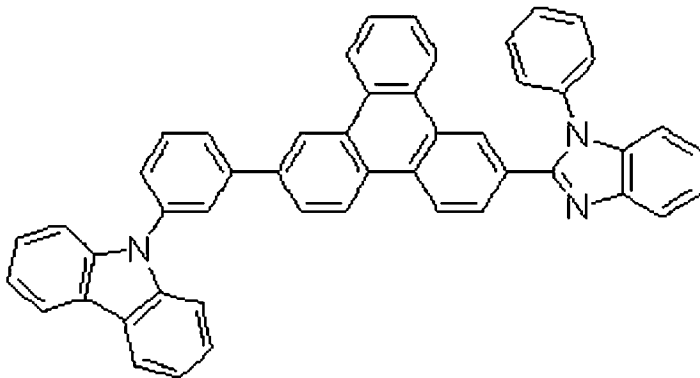
[96] 화학식 63



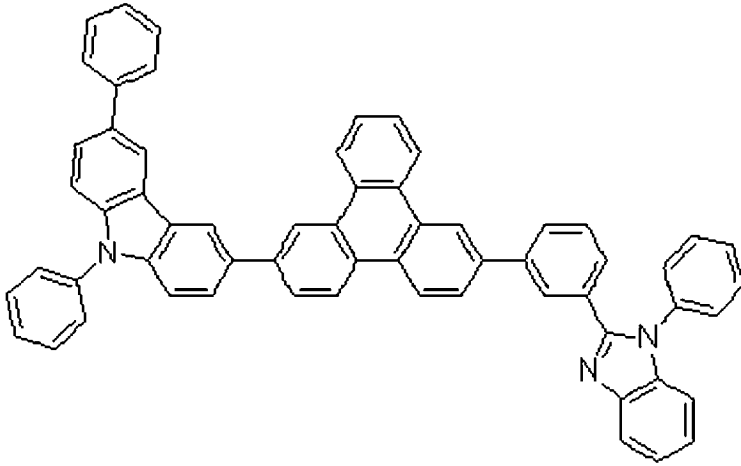
[97] 화학식 64



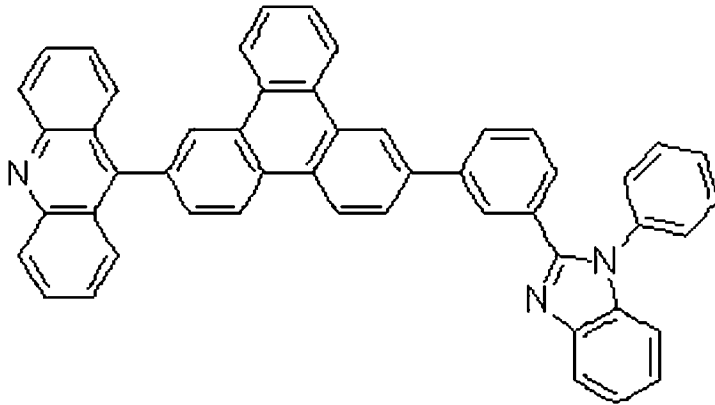
[98] 화학식 65



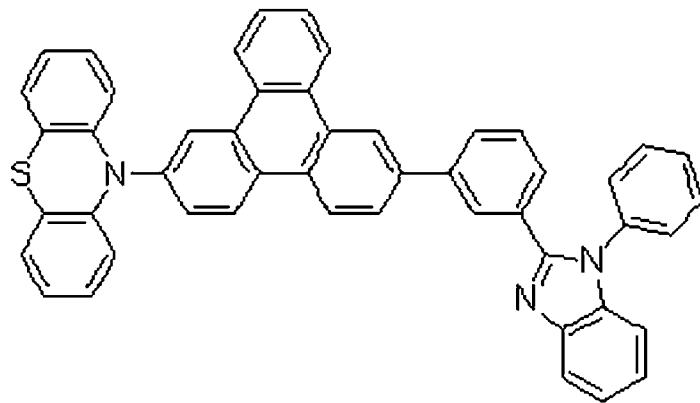
[99] 화학식 66



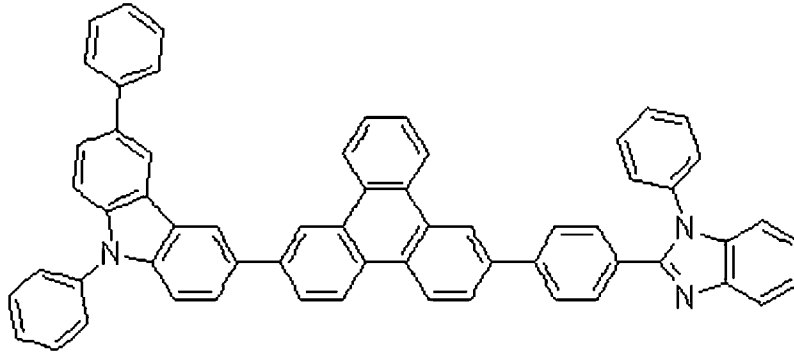
[100] 화학식 67



[101] 화학식 68



[102] 화학식 69



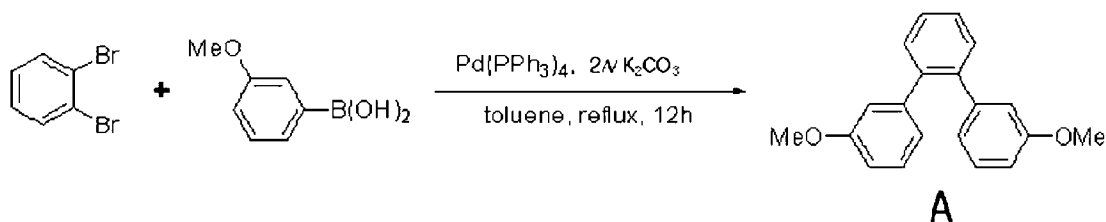
- [103] 한편, 본 발명은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [104] 구체적으로, 본 발명은 (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [105] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자에서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 주입층, 정공 수송층 및 발광층 중 어느 하나 이상일 수 있다.
- [106] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 단독 또는 복수로 포함될 수 있다.
- [107] 본 발명에서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 주입층, 정공 수송층의 재료로서 유기 전계 발광 소자에 포함될 경우, 유기 전계 발광 소자의 전자 주입/수송 능력이나 정공 주입/수송 능력이 극대화될 수 있다.
- [108] 또한, 본 발명에서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 유기 전계 발광 소자의 발광층의 재료, 구체적으로 도펀트(dopant)와 결합할 수 있는 호스트(host) 재료로 사용될 경우, 유기 전계 발광 소자의 발광효율 및 수명 특성이 향상될 수 있다.
- [109] 한편, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자에서, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층 이외의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및/또는 전자 주입층일 수 있다.
- [110] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자 구조의 비제한적인 예를 들면, 기판, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 것일 수 있으며, 이때 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층 중 어느 하나 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 또한, 상기 전자 수송층 위에는 전자 주입층이 위치할 수도 있는데, 이때 상기 전자 주입층에 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 포함될 수 있다.
- [111] 또한, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 전술한 바와 같이 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조뿐만 아니라, 전극과 유기물층

계면에 절연층 또는 접착층이 삽입될 수 있다.

- [112] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 상기 유기물층은 진공 증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이들에만 한정되지 않는다.
- [113] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 하나 이상의 유기물층 중 1층 이상을 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법을 이용하여 유기물층 및 전극을 형성함으로써 제조될 수 있다.
- [114] 예컨대, 기판으로는 실리콘 웨이퍼, 석영 또는 유리판, 금속판, 플라스틱 필름이나 시트 등이 사용될 수 있다.
- [115] 양극 물질로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO<sub>2</sub>:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 또는 카본블랙 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [116] 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [117] 이외에 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 등의 물질들은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당업계에 알려진 통상의 물질이 사용될 수 있다.

### 발명의 실시를 위한 형태

- [118] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.
- [119] <실시예 1> 화학식 40으로 표시되는 화합물의 합성
- [120] <합성예 1-1> 화합물 A의 합성
- [121] [반응식 1-1]
- [122]



- [123] 1,2-dibromobenzene 50 g 및 3-methoxyphenylboronic acid 65.1 g을 톨루엔 1.4 L에 용해시킨 후, 여기에 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0) [Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>] 4.95 g 및

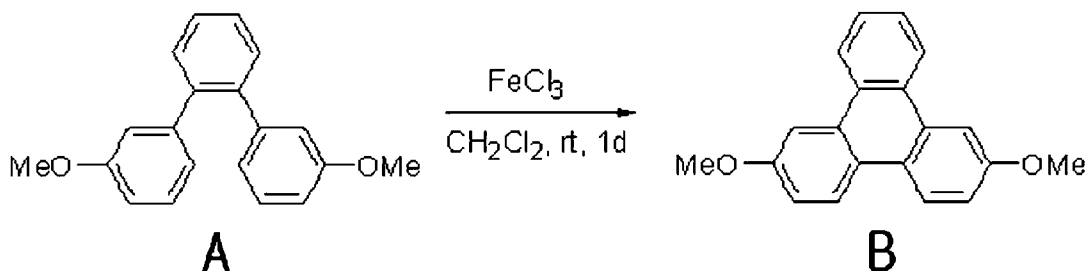
2 N의 탄산칼륨( $K_2CO_3$ ) 1.2 L를 첨가하였다. 반응물을 12 시간동안 환류 교반한 다음, 상온으로 냉각시켜 유기물 층과 물층을 분리하였다. 물층과 분리된 유기물층을 물과 포화 염화나트륨 용액으로 세척한 후 무수 황산나트륨으로 건조하여 농축한 다음, 컬럼 크로마토그래피(n-헥산 ~ n-헥산/디클로로메탄=4/1)를 통해 정제하여 흰색의 고체인 화합물 A 43.5 g (수율: 70 %)을 얻었다.

[124] Mass:  $[M+1]+ 290$

[125] <합성예 1-2> 화합물 B의 합성

[126] [반응식 1-2]

[127]



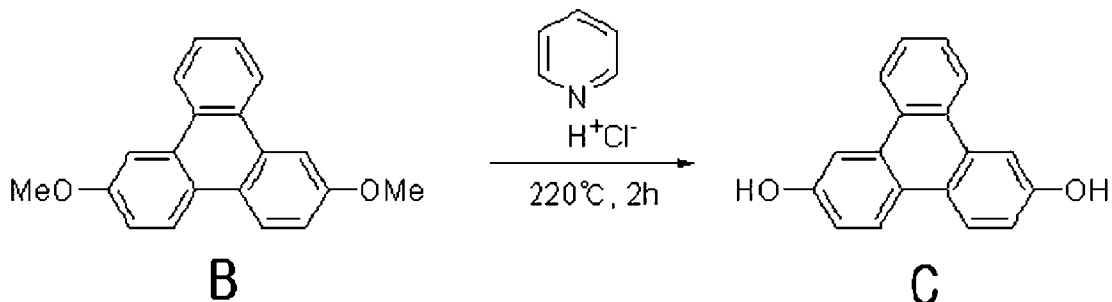
[128] 상기 합성예 1-1에서 얻은 화합물 A 40 g을 디클로로메탄( $CH_2Cl_2$ ) 1 L에 용해시킨 다음, 여기에 iron(III) chloride( $FeCl_3$ ) 44.4 g을 첨가한 후 반응물을 상온에서 12 시간 동안 교반하였다. 이후, 상기 반응물에 2 당량의 iron(III) chloride를 더 첨가한 후 1 시간 더 교반하고, 여기에 메탄올 및 물을 1 : 1의 부피 비율로 1 L 첨가하였다. 반응 종결 후, 유기물층을 분리하여 과량의 무수 황산나트륨으로 건조한 후 여과하여 여액을 농축한 다음, 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(n-헥산/디클로로메탄=2/3)를 통해 분리하여 반응 생성물 31.6 g을 얻었다. 이후, 반응 생성물 31.6 g을 아세트니트릴 600 ml로 재결정하여 얻은 노란색의 고체인 화합물 B 28 g(수율: 70 %)을 얻었다.

[129] Mass:  $[M+1]+ 288$

[130] <합성예 1-3> 화합물 C의 합성

[131] [반응식 1-3]

[132]



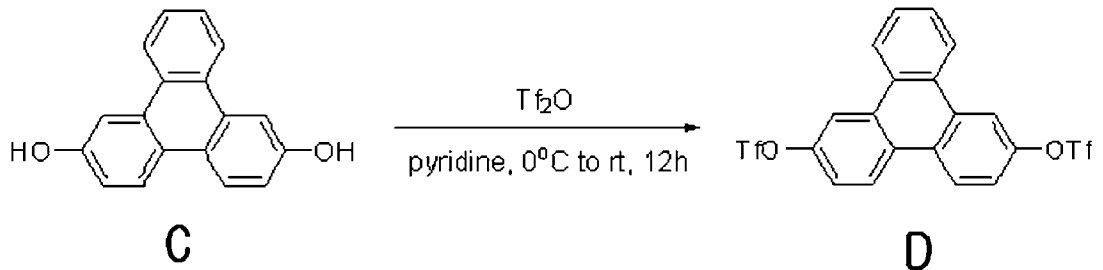
[133] 상기 합성예 1-2에서 얻은 화합물 B 25 g을 pyridine hydrochloride 100 g과 함께 플라스크에 넣은 다음, 220 °C에서 90 분간 환류 교반 하였다. 반응 종결 후, 반응 생성물을 과량의 물로 세척하여 화합물 C 20 g(수율: 88 %)을 얻었다.

[134] Mass: [M+1]+ 260

[135] <합성예 1-4> 화합물 D의 합성

[136] [반응식 1-4]

[137]



[138] 상기 합성예 1-3에서 얻은 화합물 C 20 g을 플라스크에 넣은 후, 질소분위기하에서 상기 플라스크에 pyridine 385 ml를 넣어 상기 화합물을 용해시킨 다음, 0 °C의 온도에서 교반하였다. 여기에, trifluoromethanesulfonic anhydride(triflic anhydride, Tf<sub>2</sub>O) 43.5 g을 천천히 한 방울씩 적가한 다음, 상온에서 12 시간 동안 교반 하였다. 반응 종결 후, 반응물을 감압 농축하여 얻은 고체를 플라스크에 넣고, 여기에 메탄올 500 ml를 첨가한 후 1 시간 동안 교반한 후 여과하였다. 여과로 얻은 백색의 고체인 혼합물 35 g을 헥산/디클로로메탄으로 재결정하여 백색 고체인 화합물 D 28 g(수율: 68 %)을 얻었다.

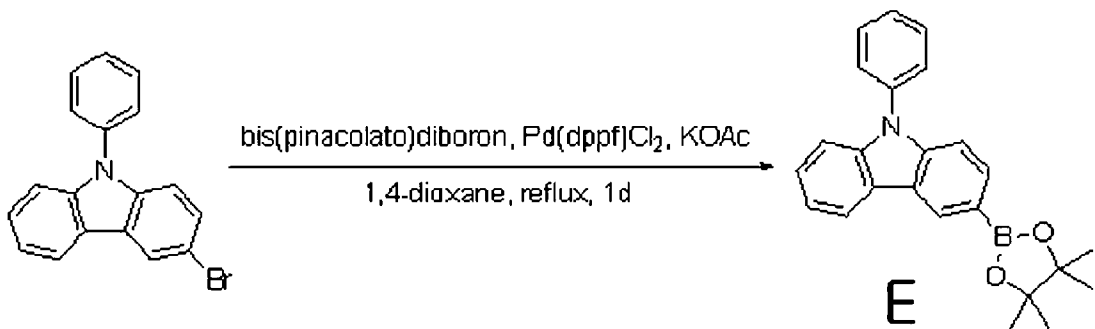
[139] <sup>1</sup>H NMR (500MHz, THF-d8) 7.74 (m, 2H), 7.79 (m, 2H), 8.78 (m, 4H), 8.93 (m, 2H)

[140] Mass: [M+1]+ 524

[141] <합성예 1-5> 화합물 E의 합성

[142] [반응식 1-5]

[143]



[144] 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole 50 g을 bis(pinacolato)diboron 47.3 g과 함께 1,4-디옥산(1,4-dioxane) 700 mL에 분산시킨 후, 여기에 [1,1'-bis(diphenylphosphino)ferrocene]dichloropalladium(II)[Pd(dppf)Cl<sub>2</sub>] 3.4 g 및 초산칼륨(KOAc) 45.7 g을 첨가한 후 환류 교반하고, 상온으로 냉각시킨 다음, 증류수 700 mL를 넣고 교반하고, 이어서 디클로로메탄 700 mL로 유기물층과 물층으로 분리하였다. 이후, 물층과 분리된 유기물층을 과량의 포화 염화나트륨 용액으로 세척한 후, 무수 황산나트륨으로 건조하여 농축한 다음, 컬럼 크로마토그래피(n-헥산 ~ n-헥산/디클로로메탄=4/1)를 통해 정제하여 흰색

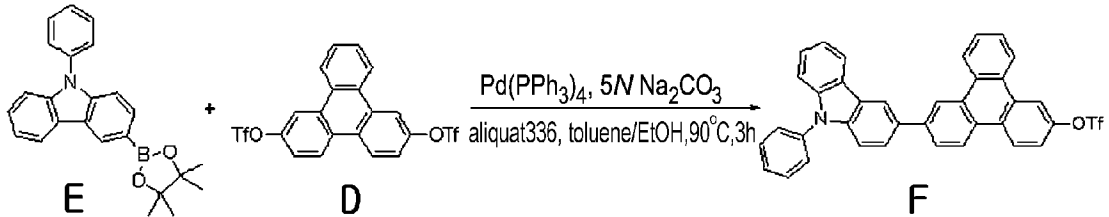
고체인 화합물 E 39 g(수율: 68 %)을 얻었다.

[145] Mass: [M+1]+ 369

[146] <합성예 1-6> 화합물 F의 합성

[147] [반응식 1-6]

[148]



[149] 상기 합성예 1-4에서 얻은 화합물 D 30 g 및 상기 합성예 1-5에서 얻은 화합물 E 14.1 g을 톨루엔 400 mL에 용해시켰다. 이 반응 용액에 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)[Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>] 2 g, 탄산나트륨 8.1 g 및 aliquat 336 2.6 mL를 첨가한 후, 3 시간 동안 90 °C의 온도에서 교반한 다음, 상온으로 냉각시켜 고체를 얻었다. 상기 고체를 여과하여 얻은 여액을 유기물층과 물층으로 분리하였다. 물층과 분리된 유기물층을 물과 포화 염화나트륨 용액으로 세척한 후, 무수 황산나트륨으로 건조하여 농축하고, 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(n-헥산 ~ n-헥산/디클로로메탄=9/1 ~ 4/1)를 통해 정제하여 흰색의 고체인 화합물 F 7.7 g(수율: 33 %)을 얻었다.

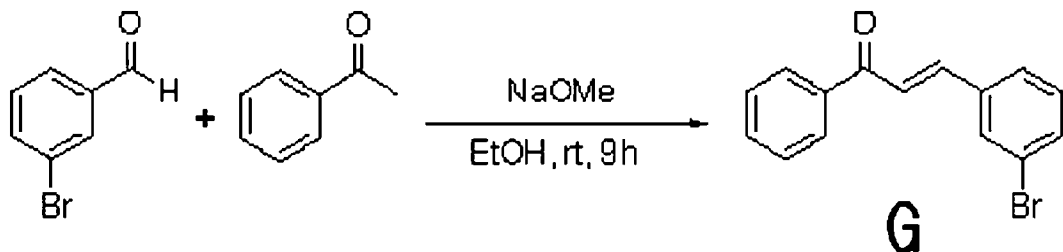
[150] <sup>1</sup>H NMR (500MHz, THF-d<sub>8</sub>) 9.15(s, 1H), 8.99 (d, 1H), 8.97 (d, 1H), 8.84 (d, 1H), 8.75 (m, 3H), 8.32 (d, 1H), 8.15 (dd, 1H), 7.97 (dd, 1H), 7.75 (m, 2H), 7.67 (m, 5H), 7.53 (m, 2H), 7.41 (m, 2H), 7.30 (m, 1H)

[151] Mass: [M+1]+ 617

[152] <합성예 1-7> 화합물 G의 합성

[153] [반응식 1-7]

[154]



[155] 3-bromobenzaldehyde 40g과 acetophenone 25.3 mL를 에탄올(EtOH) 800 ml에 용해시킨 다음, 여기에 sodium methoxide 2.5 g을 첨가하였다. 반응물을 상온에서 9 시간 동안 교반하여 얻은 고체를 여과한 후 과량의 에탄올로 세척하여 연미색의 고체인 화합물 G 57 g(수율: 70 %)을 얻었다.

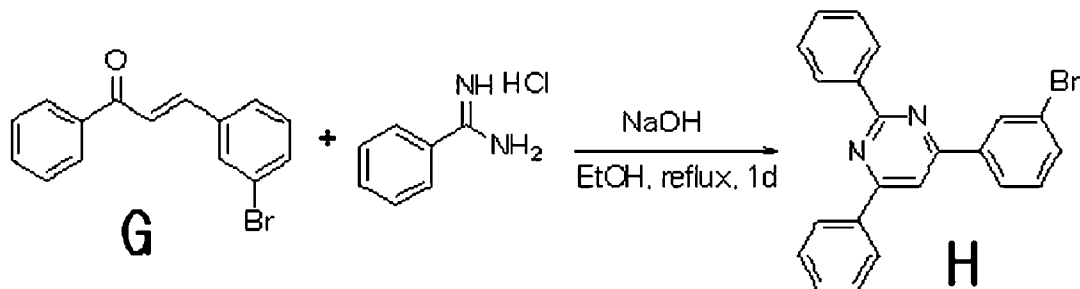
[156] <sup>1</sup>H NMR (500MHz, THF-d<sub>8</sub>) 8.11 (dd, 2H), 8.01 (t, 1H), 7.82 (d, 1H), 7.74 (s, 1H), 7.70 (d, 1H), 7.57 (m, 2H), 7.50 (t, 2H), 7.34 (t, 1H)

[157] Mass: [M+1]+ 286

[158] <합성예 1-8> 화합물 H의 합성

[159] [반응식 1-8]

[160]



[161] 상기 합성예 1-7에서 얻은 화합물 G 56 g을 benzamidine hydrochloride 30.5 g과 함께 에탄올 400 mL에 용해시킨 후, 여기에 수산화나트륨(NaOH) 15.6 g을 첨가하였다. 상기 반응물을 1 일 동안 환류 교반한 다음, 상온으로 냉각한 후 여과하고, 과량의 에탄올로 세척하여 흰색 고체인 화합물 H 46.2 g(수율: 43%)을 얻었다.

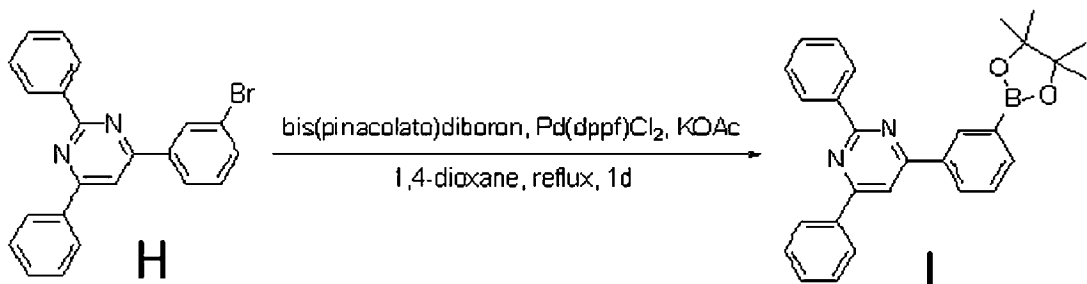
[162]  $^1\text{H NMR}$  (500MHz, THF-d8) 8.73 (dd, 2H), 8.61 (t, 1H), 8.45 (dd, 2H), 8.42 (d, 1H), 8.37 (s, 1H), 7.71 (dd, 1H), 7.57 ~ 7.48 (m, 7H)

[163] Mass:  $[\text{M}+1]^+$  387

[164] <합성예 1-9> 화합물 I의 합성

[165] [반응식 1-9]

[166]



[167] 상기 합성예 1-8에서 얻은 화합물 H 22.6 g을 bis(pinacolato)diboron 17.8 g과 함께 1,4-디옥산 300 mL에 분산시킨 후, 여기에

[1,1'-bis(diphenylphosphino)ferrocene]dichloropalladium(II)[Pd(dppf)Cl<sub>2</sub>] 1.3 g 및 초산칼륨(KOAc) 17.2 g을 첨가한 다음 환류 교반하고, 이후 상온으로 냉각한 다음, 증류수 300 mL를 넣고 교반시킨 후, 디클로로메탄 300 mL를 첨가하여 유기물층과 물층으로 분리하였다. 물층과 분리된 유기물층을 과량의 포화 염화나트륨 용액으로 세척한 다음, 무수 황산나트륨으로 건조하여 농축하고, 이후 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(n-헥산 ~ n-헥산/디클로로메탄=9/1 ~ 4/1)를 통해 정제하여 흰색의 고체인 화합물 I 19.8 g(수율: 78%)을 얻었다.

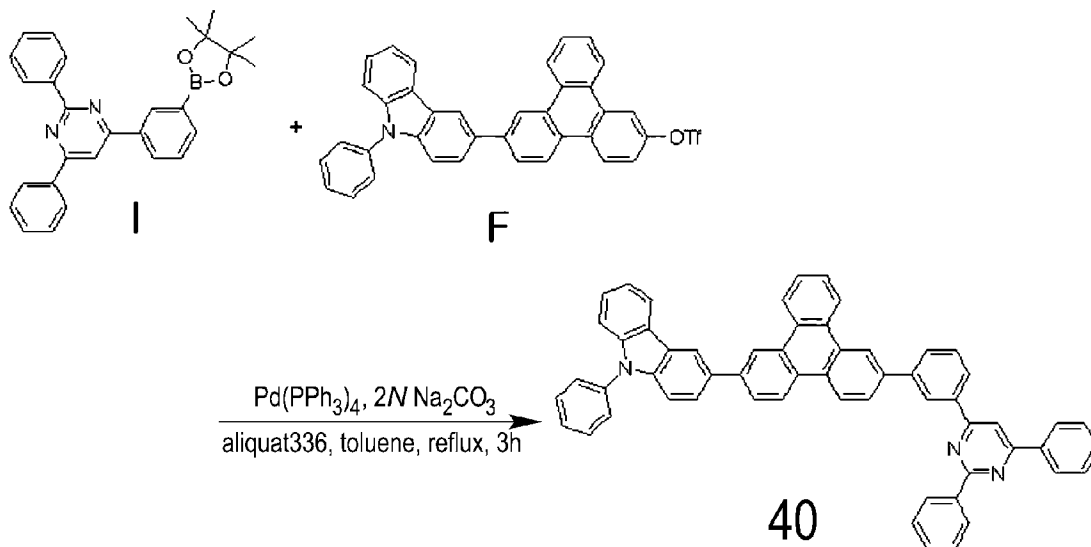
[168]  $^1\text{H NMR}$  (500MHz, THF-d8) 8.74 (dd, 2H), 8.68 (s, 1H), 8.56 (dt, 1H), 8.44 (dd, 2H), 8.32 (s, 1H), 7.94 (d, 1H), 7.58 ~ 7.49 (m, 7H), 1.38 (s, 12H)

[169] Mass: [M+1]+ 435

[170] <합성예 1-10> 화학식 40으로 표시되는 화합물의 합성

[171] [반응식 1-10]

[172]



[173] 상기 합성예 1-9에서 얻은 화합물 I 7.2 g과 상기 합성예 1-6에서 얻은 화합물 F 8.5 g을 톨루엔 130 mL에 용해시킨 후, 여기에 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)[Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>] 0.5 g, 2 N의 탄산나트륨(Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) 30 mL, 및 aliquat 336 0.6 mL를 첨가한 다음, 3 시간 동안 환류 교반하고, 이후 상온으로 냉각시켜 유기물층과 물층으로 분리하였다. 물층과 분리된 유기물층을 물과 포화 염화나트륨 용액으로 세척한 다음, 무수 황산나트륨으로 건조하여 농축하고, 이후 컬럼 크로마토그래피(n-헥산 ~ n-헥산/디클로로메탄=4/1)를 통해 정제하여 흰색의 고체인 화학식 40으로 표시되는 화합물 6.3 g(수율: 59%)을 얻었다.

[174] <sup>1</sup>H NMR (500MHz, THF-d<sub>8</sub>) 9.15 (s, 1H), 8.99 (d, 1H), 8.93 (d, 1H), 8.55 (d, 1H), 8.36 (m, 3H), 8.25 (d, 1H), 8.08 (m, 4H), 7.91 (dd, 2H), 7.85 (m, 2H), 7.69 (m, 2H), 7.56 (m, 3H), 7.50 (m, 5H), 7.45 (m, 5H), 7.30 (m, 4H), 7.16 (d, 2H)

[175] Mass: [M+1]+ 776

[176]

[177] <실시예 2> 화학식 43으로 표시되는 화합물의 합성

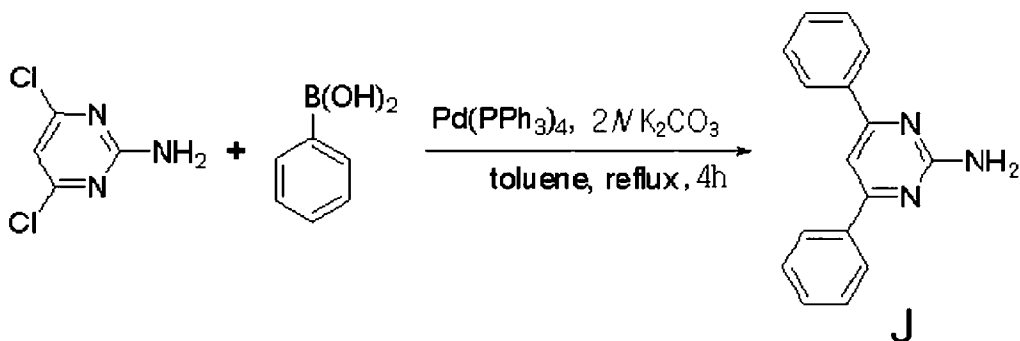
[178] <합성예 2-1> 내지 <합성예 2-6>

[179] 상기 실시예 1의 합성예 1-1 내지 합성예 1-6과 동일하게 수행하여 화합물 F 8.5 g을 얻었다.

[180] <합성예 2-7> 화합물 J의 합성

[181] [반응식 2-1]

[182]



[183] 2-amino-4,6-dichloropyrimidine 25 g 및 phenylboronic acid 46.5 g을 톨루엔 800 mL에 용해시킨 후, 여기에 tetrakis(triphenylphosphine) palladium(0)[Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>] 10.6 g 및 2 N의 탄산칼륨(K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) 300 mL를 첨가한 후 4 시간 동안 환류 교반하고, 상온으로 냉각시켜 유기물층과 물층으로 분리하였다. 물층과 분리된 유기물층을 물과 포화 염화나트륨 용액으로 세척한 후 무수 황산나트륨으로 건조하여 농축하고, 이후 컬럼 크로마토그래피(n-헥산 ~ n-헥산/디클로로메탄=9/1)를 통해 정제한 다음, n-헥산으로 추출하여 반짝이는 연미색의 고체인 화합물 J 32.4 g(수율: 86 %)을 얻었다.

[184] <sup>1</sup>H NMR (500MHz, THF-d<sub>8</sub>) 8.18 (dt, 4H), 7.60 (s, 1H), 7.44 (m, 6H), 6.09 (br s, 2H)

[185] Mass: [M+1]<sup>+</sup> 247

[186] <합성예 2-8> 화합물 K의 합성

[187] [반응식 2-2]

[188]



[189] Copper bromide(CuBr<sub>2</sub>) 29.2 g을 t-butyl nitrite[(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>CONO] 18.7 mL와 함께 아세토니트릴(MeCN) 500 mL에 분산시켰다. 분산 용액을 65 °C의 온도로 가열하여 30 분간 교반한 후, 여기에 상기 합성예 2-7에서 얻은 화합물 J 32.3 g을 첨가한 다음, 30 분 동안 교반하였다. 이후, 상기 교반 용액을 상온으로 냉각한 다음, 셀라이트로 여과하고, 이 여액을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(n-헥산/초산에틸=4/1)로 분리하여 연노란색의 고체인 화합물 K 20 g(수율: 49.2 %)을 얻었다.

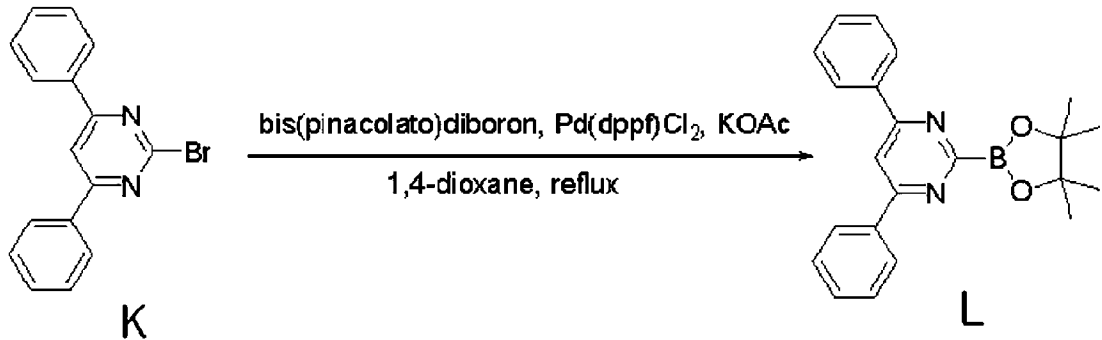
[190] <sup>1</sup>H NMR (500MHz, THF-d<sub>8</sub>) 8.60 (s, 1H), 8.15 (dt, 4H), 7.54 (m, 6H)

[191] Mass: [M]+ 311

[192] <합성예 2-9> 화합물 L의 합성

[193] [반응식 2-3]

[194]



[195] 상기 합성예 2-8에서 얻은 화합물 K 20 g을 bis(pinacolato)diboron 19.6 g과 함께 1,4-디옥산 300 mL에 분산시킨 다음, 여기에

[1,1'-bis(diphenylphosphino)ferrocene]dichloropalladium(II) [Pd(dppf)Cl<sub>2</sub>] 1.4 g 및 초산칼륨(KOAc) 18.9 g을 첨가한 후 환류 교반하였다. 이후, 상온으로 냉각한 다음, 여기에 증류수 300 mL를 넣고 교반시킨 후, 디클로로메탄 300 mL를 첨가하여 유기물층과 물층으로 분리하였다. 물층과 분리된 유기물층을 물과 포화 염화나트륨 용액으로 세척한 후, 무수 황산나트륨으로 건조하여 농축하고, 이후 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(n-헥산 ~ n-헥산/초산에틸=2/1)를 통해 정제하여 흰색의 고체인 화합물 L 14.7 g(수율: 64 %)을 얻었다.

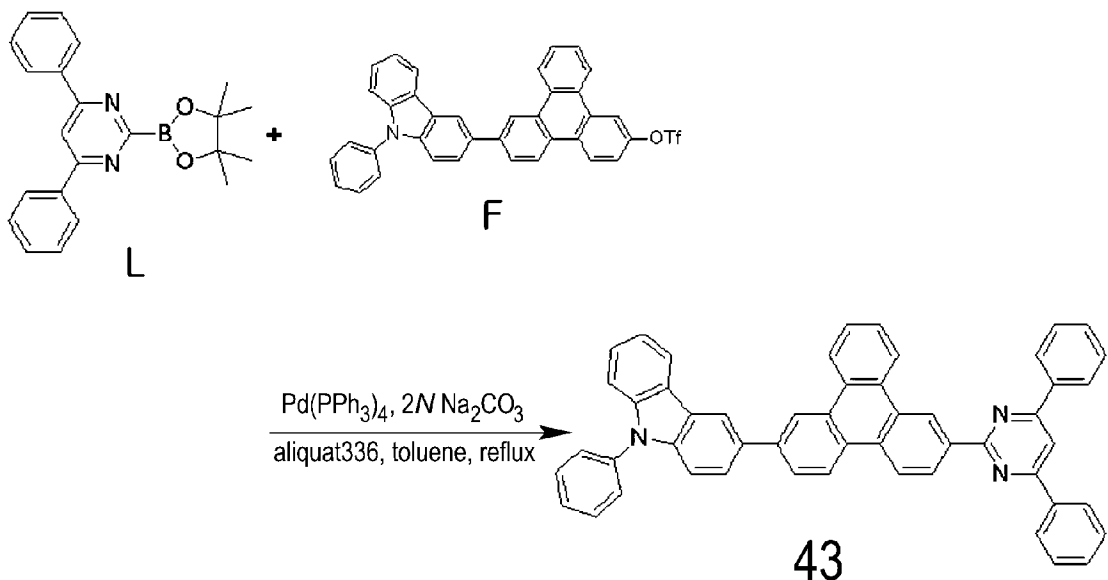
[196] <sup>1</sup>H NMR (500MHz, THF-d<sub>8</sub>) 8.78 (s, 1H), 8.17 (dt, 4H), 7.50 (m, 6H), 1.30 (s, 12H)

[197] Mass: [M+1]+ 358

[198] <합성예 2-10> 화학식 43으로 표시되는 화합물의 합성

[199] [반응식 2-4]

[200]



[201] 상기 합성예 2-9에서 얻은 화합물 L 4.9 g 및 상기 합성예 2-6에서 얻은 화합물 F

8.5 g을 톨루엔 130 mL에 용해시킨 후, 여기에 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)[Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>] 0.5 g, 2 N의 탄산나트륨 30 mL, 및 aliquat 336 0.6 mL를 넣고, 3 시간 동안 환류 교반하였다. 이후, 상온으로 냉각시켜 유기물층과 물층으로 분리하였다. 물층과 분리된 유기물층을 물과 포화 염화나트륨 용액으로 세척한 다음, 무수 황산나트륨으로 건조하여 농축하고, 이후 컬럼 크로마토그래피(n-헥산 ~ n-헥산/디클로로메탄=4/1)를 통해 정제하여 흰색의 고체인 화학식 43으로 표시되는 화합물 4.6 g(수율: 48 %)을 얻었다.

[202] <sup>1</sup>H NMR (500MHz, THF-d<sub>8</sub>) 9.25 (s, 1H), 8.99 (d, 1H), 8.93 (d, 1H), 8.34 (s, 1H), 8.23 (s, 1H), 8.19 (m, 4H), 8.04 (d, 1H), 7.88 (m, 6H), 7.77 (s, 1H), 7.55 (m, 7H), 7.48 (d, 2H), 7.40 (m, 2H), 7.3 (m, 4H), 7.08 (d, 1H)

[203] Mass: [M+1]<sup>+</sup> 699

[204]

[205] <실시예 3> 화학식 58로 표시되는 화합물의 합성

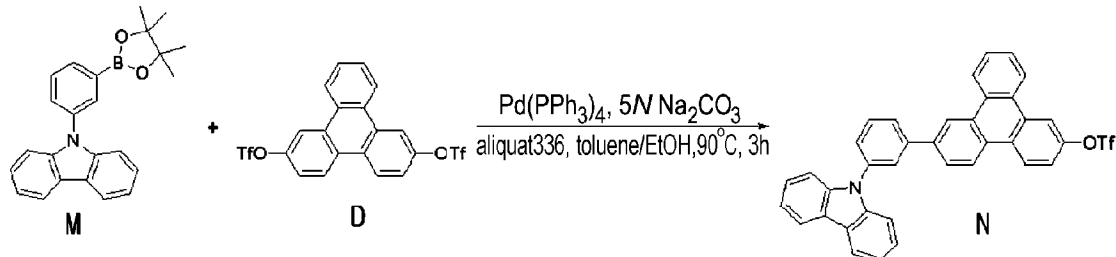
[206] <합성예 3-1> 내지 <합성예 3-4>

[207] 상기 실시예 1의 합성에 1-1 내지 합성에 1-4에서와 동일하게 수행하여 화합물 D 30 g을 얻었다.

[208] <합성예 3-5> 화합물 N의 합성

[209] [반응식 3-2]

[210]



[211] 상기 반응식 3-2의 화합물 M 14.1 g과 상기 합성예 3-4에서 얻은 화합물 D 30 g을 톨루엔 400 mL에 용해시킨 후, 여기에 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)[Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>] 2 g, 5 N의 탄산나트륨 8.1 g, 및 aliquat 336 2.6 mL를 넣고, 3 시간 동안 90 °C의 온도에서 교반하고, 이후 상온으로 냉각시켜 고체를 얻었다. 이어서, 얻은 고체를 여과하여 여액을 얻었고, 이 여액을 유기물층과 물층으로 분리하였다. 물층과 분리된 유기물층을 물과 포화 염화나트륨 용액으로 세척한 후, 무수 황산나트륨으로 건조하여 농축하고, 이후 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(n-헥산 ~ n-헥산/디클로로메탄=9/1 ~ 4/1)를 통해 정제하여 흰색의 고체인 화합물 N 9.6 g(수율: 41 %)을 얻었다.

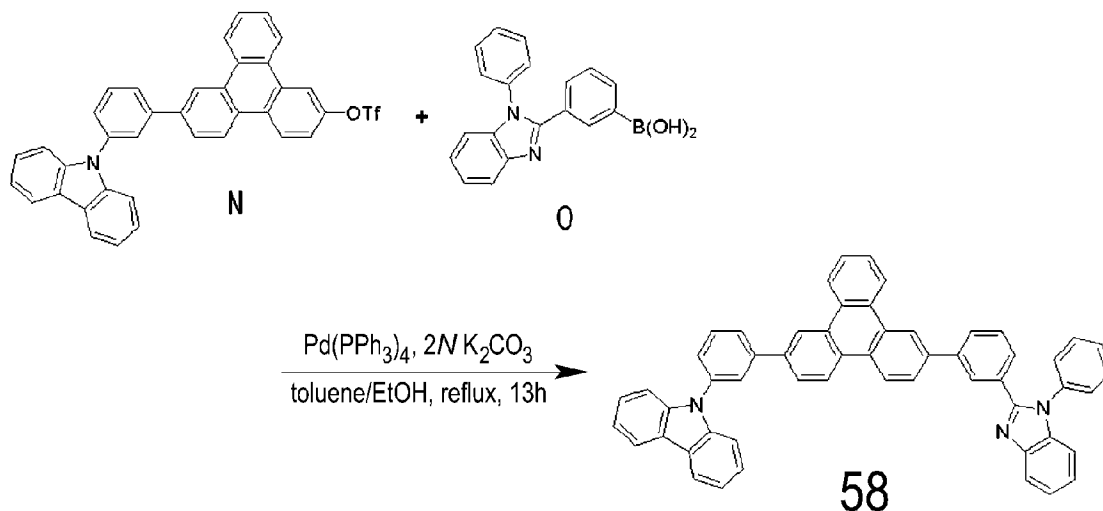
[212] <sup>1</sup>H NMR (500MHz, THF-d<sub>8</sub>) 9.12 (m, 2H), 8.99 (s, 1H), 8.55 (d, 1H), 8.34 (s, 1H), 8.19 (d, 2H), 8.10 (d, 2H), 7.82 (d, 2H), 7.77 (m, 1H), 7.5 (s, 1H), 7.40 (m, 3H), 7.18 (m, 4H), 7.12 (d, 2H)

[213] Mass: [M+1]+ 617

[214] <합성예 3-6> 화학식 58로 표시되는 화합물의 합성

[215] [반응식 3-3]

[216]



[217] 상기 합성예 3-5에서 얻은 화합물 N 5.2 g과 반응식 3-3의 화합물 O 8.5 g을 톨루엔 130 mL에 용해시킨 후, 여기에 tetrakis(triphenylphosphine) palladium(0)[Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>] 0.5 g, 2 N의 탄산칼륨 30 mL, 에탄올(EtOH) 30 mL, 및 aliquat 336 0.6 mL를 넣고, 3 시간 동안 환류 교반하고, 이후 상온으로 냉각시켜 유기층과 물층으로 분리하였다. 상기 유기물층을 물과 포화 염화나트륨 용액으로 세척한 후, 무수 황산나트륨으로 건조하여 농축하고, 이후 컬럼 크로마토그래피(n-헥산 ~ n-헥산/초산에틸=6/1)를 통해 정제하여 흰색의 고체인 화학식 58로 표시되는 화합물 6.1 g (수율: 60.1 %)을 얻었다.

[218] <sup>1</sup>H NMR (500MHz, THF-d<sub>8</sub>) 9.25 (s, 1H), 9.12 (d, 1H), 8.99 (d, 1H), 8.76 (dd, 2H), 8.46 (s, 1H), 8.23 (d, 2H), 8.19 (d, 2H), 8.10 (m, 4H), 7.90 (s, 1H), 7.65 (m, 6H), 7.49 (m, 5H), 7.38 (m, 3H), 7.25 (m, 3H), 7.18 (dd, 1H), 7.10 (d, 2H)

[219] Mass: [M+1]+ 737

[220]

[221] <실시예 4> 유기 발광 소자의 제조

[222] ITO(Indium tin oxide)가 1500 Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 사용하였다.

[223] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극(양극) 위에 제품명 DS-205 (두산社)를 800 Å의 두께로 진공 증착하여 정공 주입층을 형성한 후, 이 위에 정공 이송 물질인 NPB (N, N-di(naphthalene-1-yl)-N, N-diphenylbenzidine)를 150 Å의 두께로 증착하여 정공 수송층을 형성하였다. 이후, 상기 정공 수송층 위에, 호스트로서 ADN (9,10-di(naphthalen-2-yl)anthracene)을 사용하고, 도펀트로서 DS-405 (두산社)를 5

% 도핑하여 300 Å의 두께로 증착하여 발광층을 형성하였다. 이후, 상기 발광층 위에, 전자 이송 물질로서 실시예 1에서 합성된 화학식 40으로 표시되는 화합물을 250 Å의 두께로 증착하여 전자 수송층을 형성하였다. 이후, 상기 전자 수송층 위에 10 Å의 두께의 LiF를 증착하여 전자 주입층을 형성하였고, 상기 전자 주입층 위에 2,000 Å의 두께의 Al을 증착하여 음극을 형성하여 소자를 제조하였다.

[224]

[225] &lt;실시예 5&gt; 유기 발광 소자의 제조

[226] 상기 실시예 4에서 전자 수송층의 형성시, 전자 이송 물질로서 화학식 40으로 표시되는 화합물 대신에 실시예 2에서 합성된 화학식 43으로 표시되는 화합물을 사용하는 것을 제외하고, 실시예 4와 동일하게 수행하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[227]

[228] &lt;실시예 6&gt; 유기 발광 소자의 제조

[229] 상기 실시예 4에서 전자 수송층의 형성시, 전자 이송 물질로서 화학식 40으로 표시되는 화합물 대신에 실시예 3에서 합성된 화학식 58로 표시되는 화합물을 사용하는 것을 제외하고, 실시예 4와 동일하게 수행하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[230]

[231] &lt;비교예 1&gt; 유기 발광 소자의 제조

[232] 상기 실시예 4에서 전자 수송층의 형성시 전자 이송 물질로서 화학식 40으로 표시되는 화합물 대신에 Alq3 (aluminum tris(8-hydroxyquinoline))를 사용하는 것을 제외하고, 실시예 4와 동일하게 수행하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[233]

[234] &lt;실험예 1&gt;

[235] 실시예 4 내지 6, 및 비교예 1에서 제조된 각각의 유기 발광 소자에 대해 전류밀도 10 mA/cm<sup>2</sup>에서의 발광 효율을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[236] 표 1

구분	전자 수송 물질	구동 전압 (V)	발광 효율 (cd/A)
실시예 4	화학식 40의 화합물	4.5	7.5
실시예 5	화학식 43의 화합물	4.6	6.8
실시예 6	화학식 58의 화합물	5.1	8.2
비교예 1	Alq3	5.7	6

[237] 상기 표 1에서 알 수 있는 바와 같이, 전자 수송층을 형성하는 전자 수송 물질로서 본 발명에 따른 화합물을 사용한 유기 발광 소자(실시예 4 내지 6)는

전자 수송 물질로서 Alq3을 사용한 종래 유기 발광 소자(비교예 1)보다 구동 전압 및 발광 효율 면에서 월등히 우수하며, 특히 열 안정성이 개선된 것을 확인할 수 있었다.

[238] <실시예 7> 유기 발광 소자 제조

[239] 상기 실시예 4에서 준비된 ITO 투명 전극(양극) 위에 제품명 DS-205 (두산社)를 800 Å의 두께로 진공 증착하여 정공 주입층을 형성한 다음, 상기 정공 주입층 위에 정공 이송 물질인 NPB (*N,N*-di(naphthalene-1-yl)-*N,N*-diphenylbenzidine)를 150 Å의 두께로 증착하여 정공 수송층을 형성하였다. 상기 정공 수송층 위에 실시예 1에서 합성된 화학식 40으로 표시되는 화합물을 호스트로 사용하고 도펀트로 Ir(ppy)3를 10 % 도핑하여 300 Å의 두께로 증착하여 발광층을 형성하였다. 상기 발광층 위에 BCP (2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline)를 100 Å의 두께로 증착하여 정공 저지층을 형성한 다음, 상기 정공 저지층 위에 전자 수송 물질인 Alq3를 250 Å의 두께로 증착하여 전자 수송층을 형성하였다. 이후, 상기 전자 수송층 위에 LiF를 10 Å의 두께로 증착하여 전자 주입층을 형성한 다음, 이 위에 Al을 2,000 Å의 두께로 증착하여 음극을 형성하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[240]

[241] <실시예 8> 유기 발광 소자의 제조

[242] 상기 실시예 7에서 발광층의 형성시, 호스트 물질로서 실시예 1에서 합성된 화학식 40으로 표시되는 화합물 대신에 실시예 2에서 합성된 화학식 43으로 표시되는 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 7과 동일하게 수행하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[243]

[244] <실시예 9> 유기 발광 소자의 제조

[245] 상기 실시예 7에서 발광층의 형성시, 호스트 물질로서 실시예 1에서 합성된 화학식 40으로 표시되는 화합물 대신에 실시예 3에서 합성된 화학식 58로 표시되는 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 7과 동일하게 수행하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[246]

[247] <비교예 2> 유기 발광 소자의 제조

[248] 상기 실시예 7에서 발광층의 형성시, 호스트 물질로서 실시예 1에서 합성된 화학식 40으로 표시되는 화합물 대신에 CBP (4,4'-di(9H-carbazol-9-yl)biphenyl)를 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 7과 동일하게 수행하여 유기 발광 소자를 제조하였다.

[249]

[250] <실험예 2>

[251] 실시예 7 내지 9, 및 비교예 2에서 제조된 각각의 유기 발광 소자에 대하여 전류밀도 1 mA/cm<sup>2</sup>에서의 발광 효율을 측정하였고, 이를 하기 표 2에 나타내었다.

[252] 표 2

구분	인광 호스트	구동 전압 (V)	발광 효율 (cd/A)
실시예 7	화학식 40의 화합물	6.8	49.2
실시예 8	화학식 43의 화합물	6.5	44.7
실시예 9	화학식 58의 화합물	5.9	51.8
비교예 2	CBP	7.3	43.6

[253] 상기 표 2에서와 같이, 호스트 물질로서 본 발명에 따른 화합물을 사용한 유기 발광 소자(실시예 7 내지 9)는 호스트 물질로서 CBP를 사용한 종래 유기 발광 소자(비교예 2)보다 구동 전압 및 발광 효율 면에서 월등히 우수하다는 것을 확인할 수 있었다.

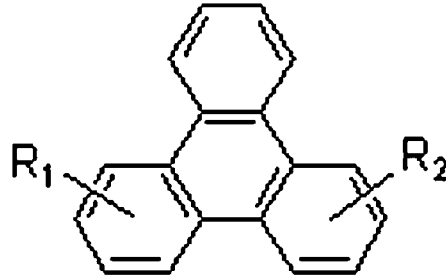
[254] 이상을 통해 본 발명의 바람직한 실시예에 대하여 설명하였지만, 본 발명은 이에 한정되는 것이 아니고 특허청구범위와 발명의 상세한 설명의 범위 안에서 여러 가지로 변형하여 실시하는 것이 가능하고 이 또한 본 발명의 범주에 속하는 것은 당연하다.

## 청구범위

[청구항 1]

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



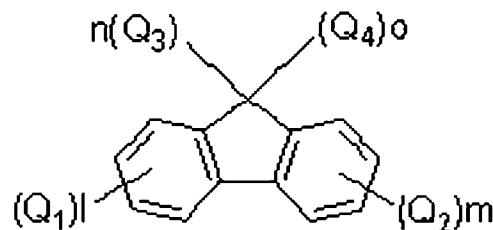
(상기 화학식 1에서,

상기  $R_1$  및  $R_2$ 는 서로 다르고, 각각 독립적으로 수소, 중수소,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴알킬기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기,  $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴아미노기,  $C_5\sim C_{40}$ 의 디아릴아미노기,  $C_5\sim C_{40}$ 의 아릴기,  $C_5\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기, 및 하기 화학식 2로 표시되는 치환기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기로서,

상기  $R_1$  및  $R_2$ 는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 니트릴기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알콕시기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 아미노기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기 및  $C_5\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 것으로 치환되거나 또는 비치환되며,

이때  $R_1$  및  $R_2$  중 1개 이상은 각각 독립적으로 N, O 및 S로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 원소를 포함하는  $C_2\sim C_{40}$ 의 헤테로아릴기이고;

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

상기 l, m, n, 및 o는 각각 독립적으로 1 내지 5 범위의 정수이고,

복수의 Q<sub>1</sub>은 서로 같거나 상이하고, 복수의 Q<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하며, 복수의 Q<sub>3</sub>는 서로 같거나 상이하며, 복수의 Q<sub>4</sub>는 서로 같거나 상이하며,

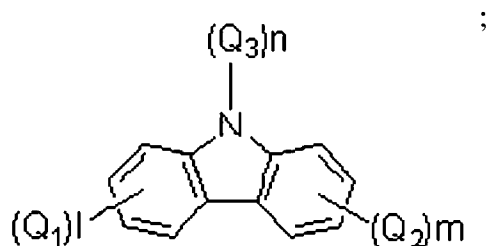
상기 Q<sub>1</sub>, Q<sub>2</sub>, Q<sub>3</sub> 및 Q<sub>4</sub>는서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 니트릴기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알케닐기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알콕시기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 아미노기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 시클로알킬기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 헤테로시클로알킬기, C<sub>6</sub>~C<sub>40</sub>의 아릴기 및 C<sub>5</sub>~C<sub>40</sub>의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나; 또는 연결기임).

[청구항 2]

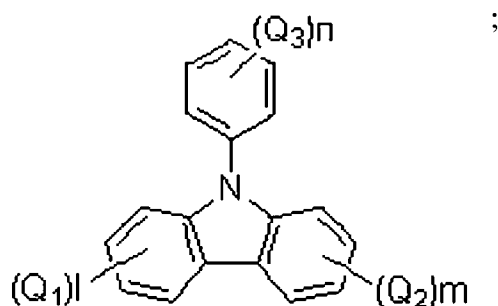
제1항에 있어서,

상기 N, O 및 S로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 원소를 포함하는 C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 헤테로아릴기는 하기 화학식 3 내지 화학식 39로 이루어진 군에서 선택된 화학식으로 표시되는 것이 특징인 화합물:

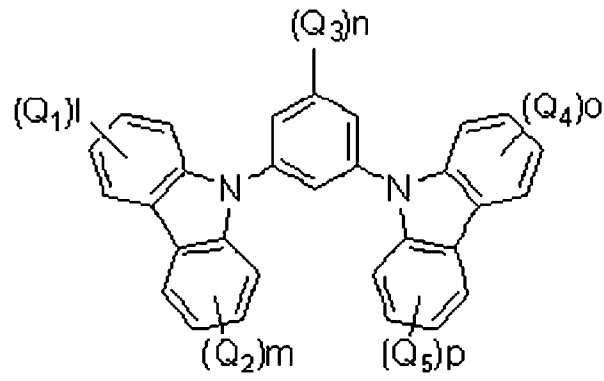
[화학식 3]



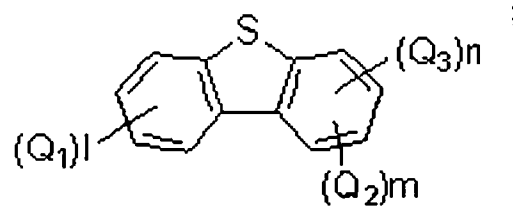
[화학식 4]



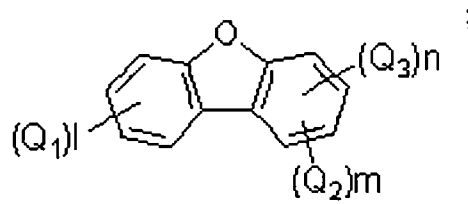
[화학식 5]



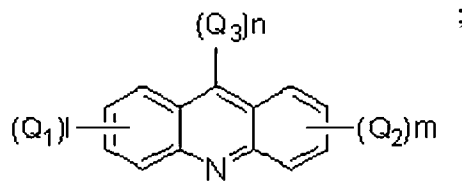
[화학식 6]



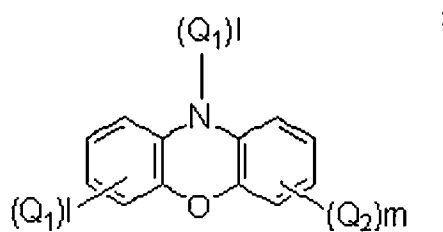
[화학식 7]



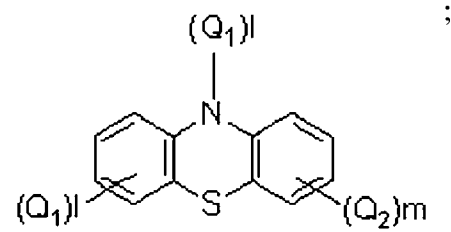
[화학식 8]



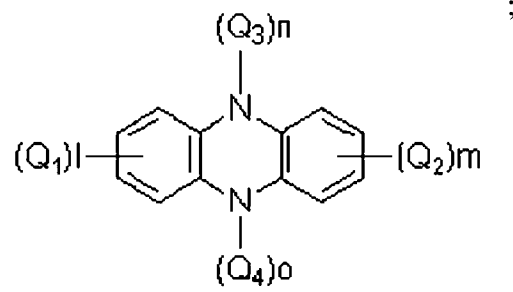
[화학식 9]



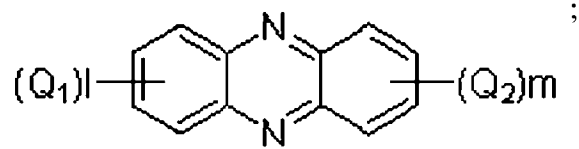
[화학식 10]



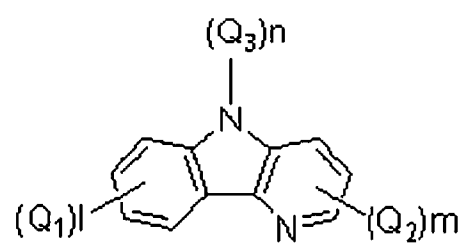
[화학식 11]



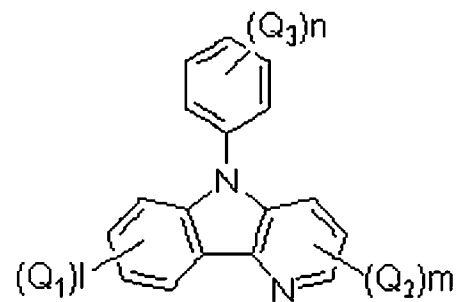
[화학식 12]



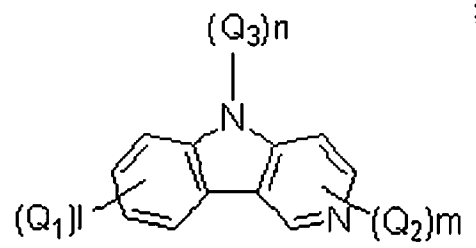
[화학식 13]



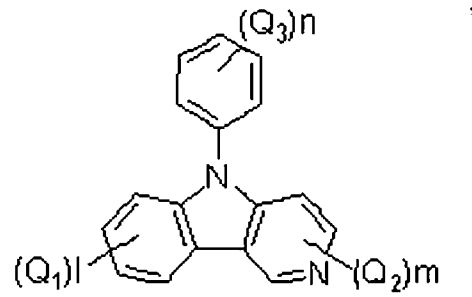
[화학식 14]



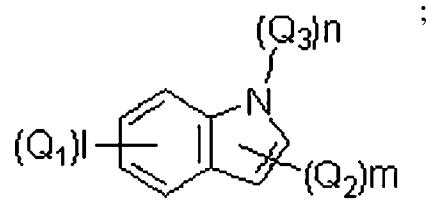
[화학식 15]



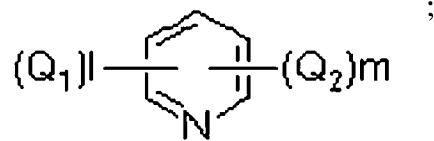
[화학식 16]



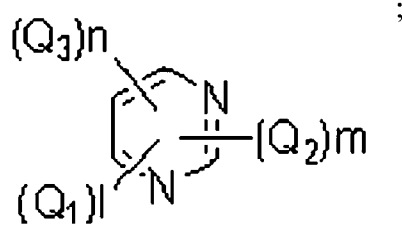
[화학식 17]



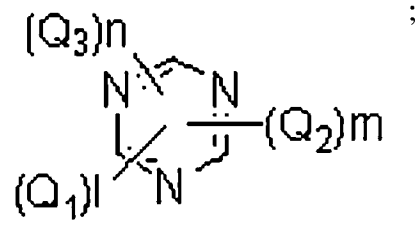
[화학식 18]



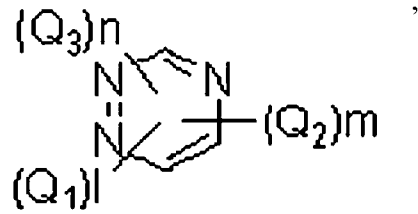
[화학식 19]



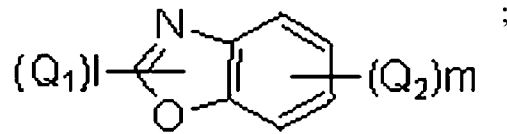
[화학식 20]



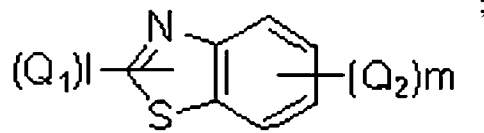
[화학식 21]



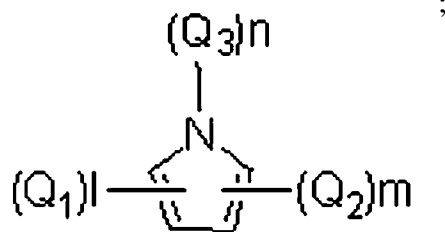
[화학식 22]



[화학식 23]



[화학식 24]



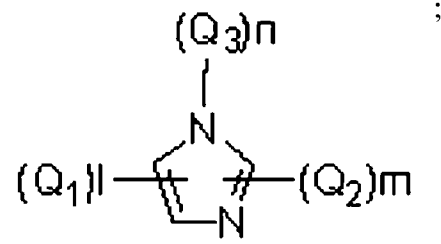
[화학식 25]



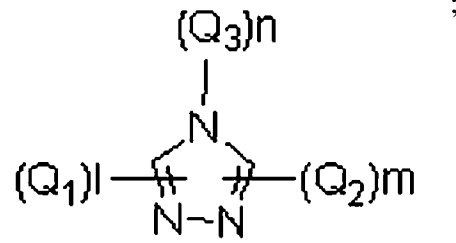
[화학식 26]



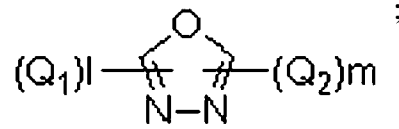
[화학식 27]



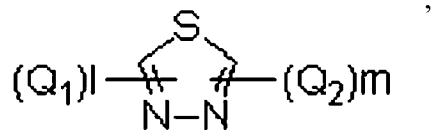
[화학식 28]



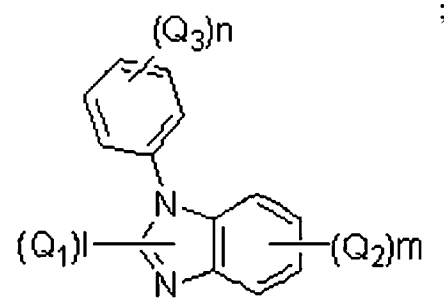
[화학식 29]



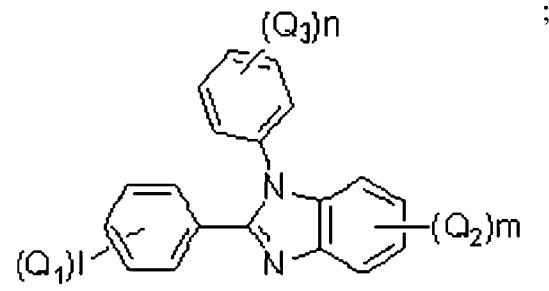
[화학식 30]



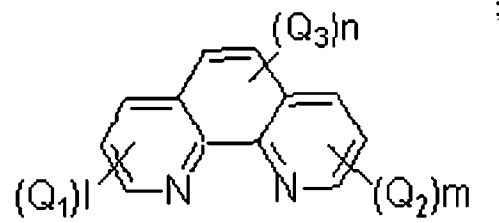
[화학식 31]



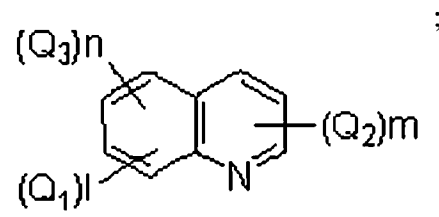
[화학식 32]



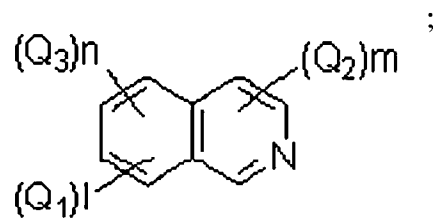
[화학식 33]



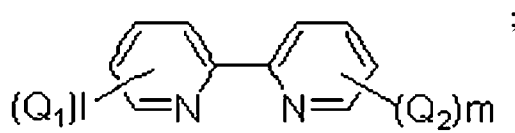
[화학식 34]



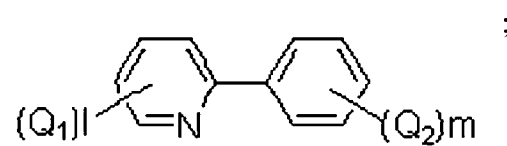
[화학식 35]



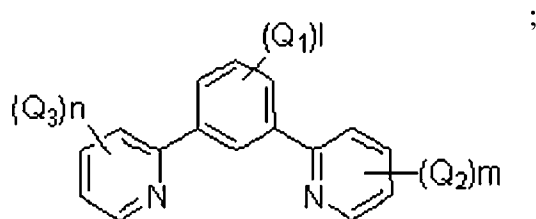
[화학식 36]



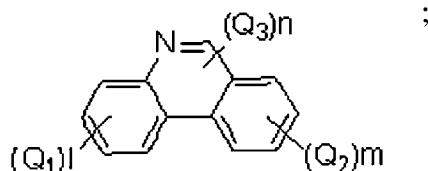
[화학식 37]



[화학식 38]



[화학식 39]



(상기 화학식 3 내지 화학식 39에서,

상기 l, m, n, o 및 p는 각각 독립적으로 1 내지 5 범위의 정수이고; 복수의 Q<sub>1</sub>은 서로 같거나 상이하고, 복수의 Q<sub>2</sub>는 서로 같거나 상이하며, 복수의 Q<sub>3</sub>는 서로 같거나 상이하며, 복수의 Q<sub>4</sub>는 서로 같거나 상이하며, 복수의 Q<sub>5</sub>는 서로 같거나 상이하며; 상기 Q<sub>1</sub>, Q<sub>2</sub>, Q<sub>3</sub>, Q<sub>4</sub> 및 Q<sub>5</sub>는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 니트릴기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알케닐기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알콕시기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 아미노기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 시클로알킬기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 헤테로시클로알킬기, C<sub>6</sub>~C<sub>40</sub>의 아릴기 및 C<sub>5</sub>~C<sub>40</sub>의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나; 또는 연결기임).

[청구항 3]

(i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 제1항 또는 제2항에 기재된 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.

[청구항 4]

제3항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 주입층, 정공 수송층 및 발광층으로 이루어진 군에서 선택된 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.