



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

(11) 공개번호 10-2020-0042428  
(43) 공개일자 2020년04월23일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C07C 211/54* (2006.01) *C07D 209/82* (2006.01)  
*C07D 307/91* (2006.01) *C07D 333/76* (2006.01)  
*C09K 11/06* (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)  
*H01L 51/50* (2006.01)
- (52) CPC특허분류  
*C07C 211/54* (2013.01)  
*C07D 209/82* (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2019-0127309
- (22) 출원일자 2019년10월14일  
 심사청구일자 2019년10월14일
- (30) 우선권주장  
 1020180122688 2018년10월15일 대한민국(KR)
- (71) 출원인  
**주식회사 엘지화학**  
 서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)
- (72) 발명자  
**이성재**  
 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
**차용범**  
 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
 (뒷면에 계속)
- (74) 대리인  
**유미특허법인**

전체 청구항 수 : 총 9 항

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

**(57) 요약**

본 발명은 신규한 화합물 및 이를 이용한 유기 발광 소자를 제공한다.

**대표도** - 도1

4
3
2
1

(52) CPC특허분류

*C07D 307/91* (2013.01)  
*C07D 333/76* (2013.01)  
*C09K 11/06* (2013.01)  
*H01L 51/0059* (2013.01)  
*H01L 51/0073* (2013.01)  
*H01L 51/50* (2013.01)  
*C09K 2211/1007* (2013.01)  
*C09K 2211/1014* (2013.01)  
*C09K 2211/1022* (2013.01)

(72) 발명자

**홍성길**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**홍완표**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

---

**문현진**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

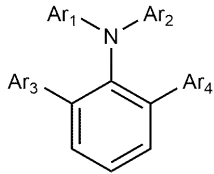
## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Ar<sub>1</sub>은 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 C<sub>6-60</sub> 아릴; 또는 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 치환 또는 비치환된 C<sub>5-60</sub> 헤테로아릴이고,

Ar<sub>3</sub> 및 Ar<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 C<sub>6-60</sub> 아릴이고, 단, Ar<sub>3</sub> 및 Ar<sub>4</sub>가 중 적어도 하나가 비페닐릴 또는 나프틸이다.

#### 청구항 2

제1항에 있어서,

Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로, C<sub>6-30</sub> 아릴; 또는 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 치환 또는 비치환된 C<sub>5-30</sub> 헤테로아릴인,

화합물.

#### 청구항 3

제1항에 있어서,

Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 쿼터페닐릴, 나프틸, 페난트레닐, 트리페닐레닐, 디메틸플루오레닐, 디페닐플루오레닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오페닐, 9-페닐-9H-카바졸릴, 나프틸로 치환된 페닐, 페난트레닐로 치환된 페닐, 또는 트리페닐레닐로 치환된 페닐인,

화합물.

#### 청구항 4

제1항에 있어서,

Ar<sub>3</sub> 및 Ar<sub>4</sub>는 각각 독립적으로, C<sub>6-30</sub> 아릴인,

화합물.

#### 청구항 5

제1항에 있어서,

Ar<sub>3</sub> 및 Ar<sub>4</sub>는 각각 독립적으로, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 또는 나프틸인,

화합물.

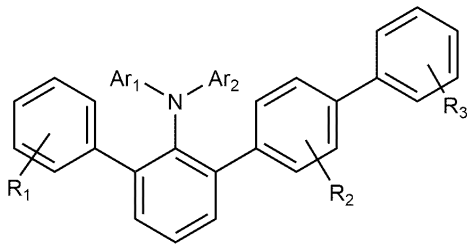
**청구항 6**

제1항에 있어서,

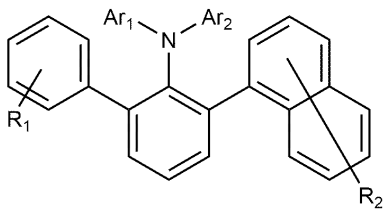
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은, 하기 화학식 1-1 내지 1-12 중 어느 하나로 표시되는 것인,

화합물:

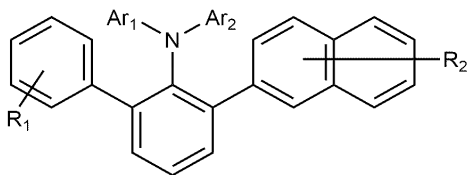
[화학식 1-1]



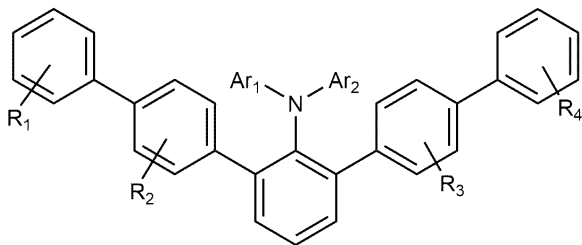
[화학식 1-2]



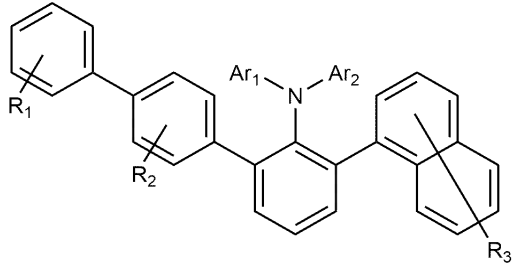
[화학식 1-3]



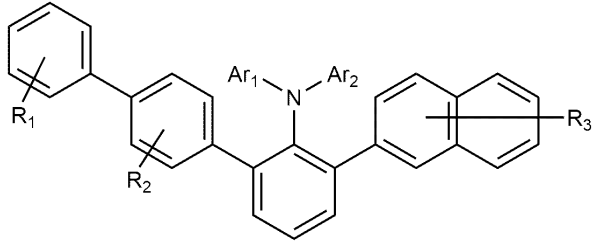
[화학식 1-4]



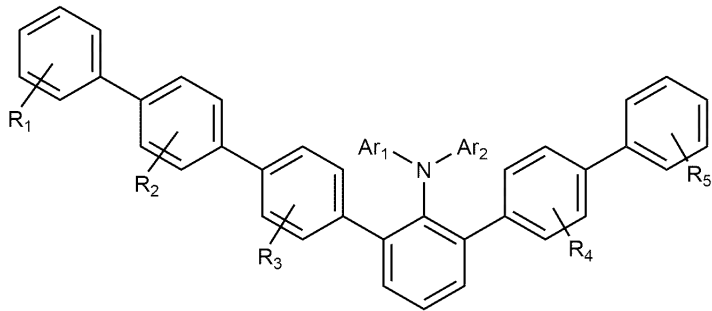
[화학식 1-5]



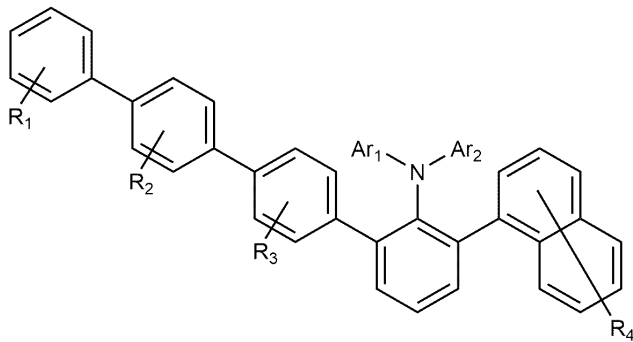
[화학식 1-6]



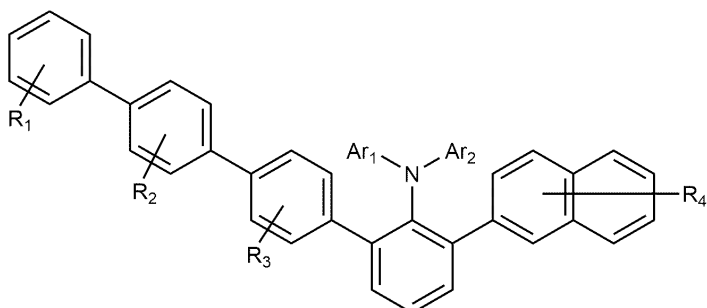
[화학식 1-7]



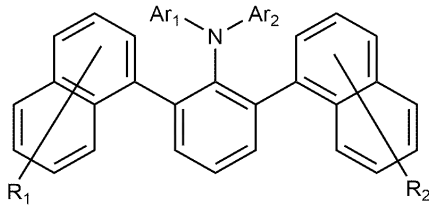
[화학식 1-8]



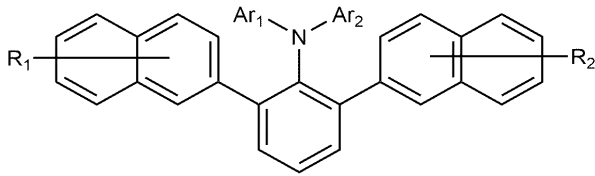
[화학식 1-9]



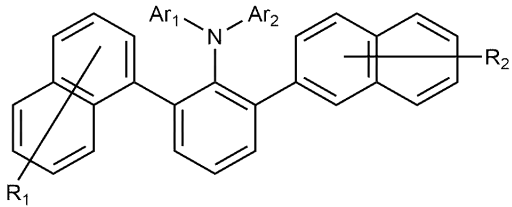
[화학식 1-10]



[화학식 1-11]



[화학식 1-12]



상기 화학식 1-1 내지 1-12에서,

Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>은 제1항에 정의한 바와 같으며,

R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, 및 R<sub>5</sub>는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 니트릴기, 실릴기, C<sub>6-60</sub> 아릴, C<sub>6-60</sub> 아르알킬, C<sub>6-60</sub> 아르알케닐; 또는 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 치환 또는 비치환된 C<sub>5-60</sub> 헤테로아릴이다.

#### 청구항 7

제4항에 있어서,

R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, 및 R<sub>5</sub>는 수소인,

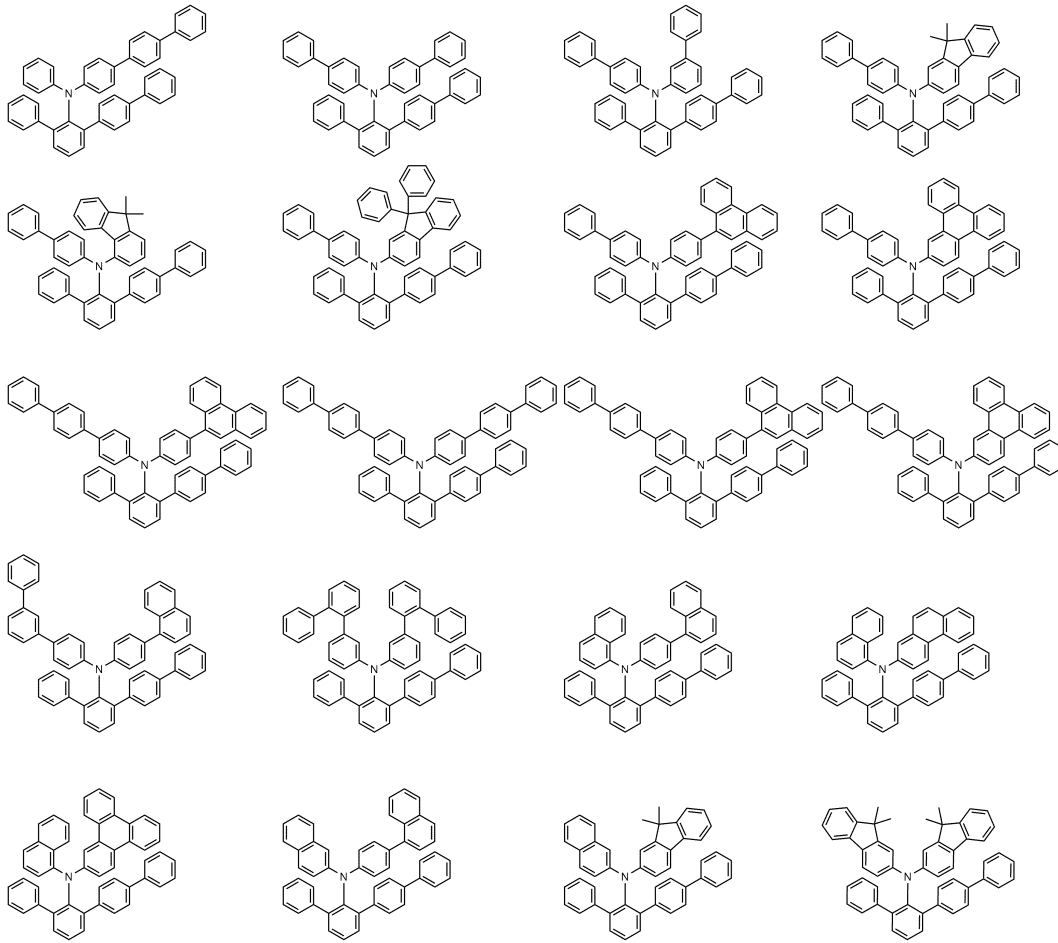
화합물.

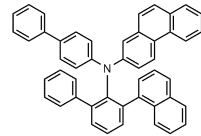
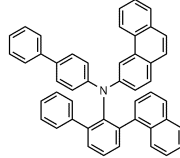
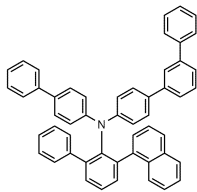
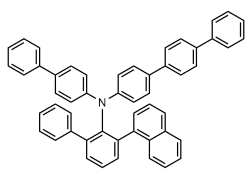
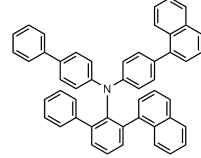
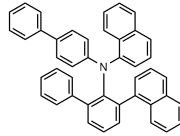
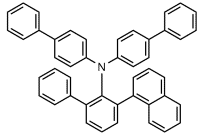
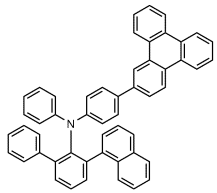
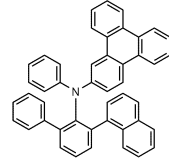
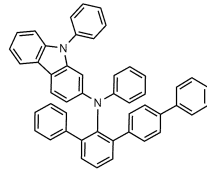
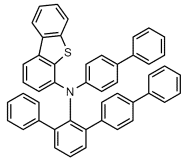
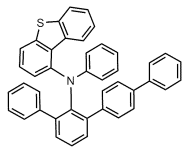
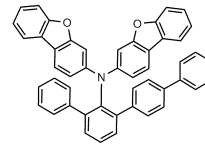
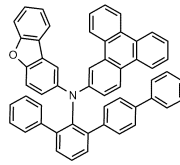
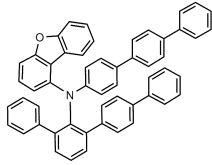
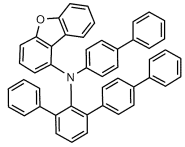
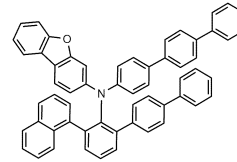
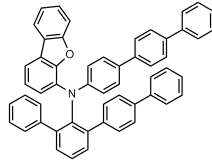
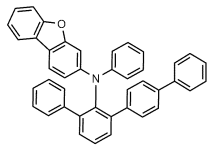
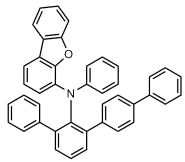
#### 청구항 8

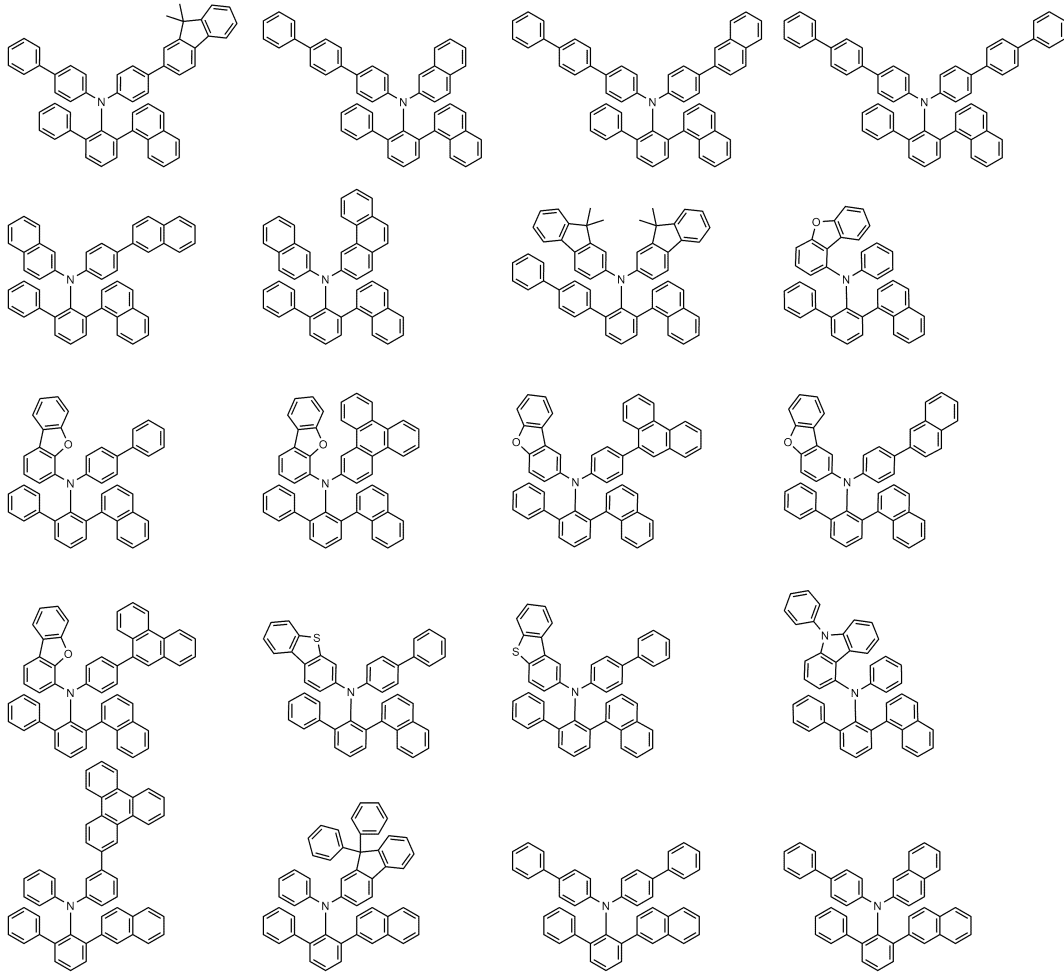
제1항에 있어서,

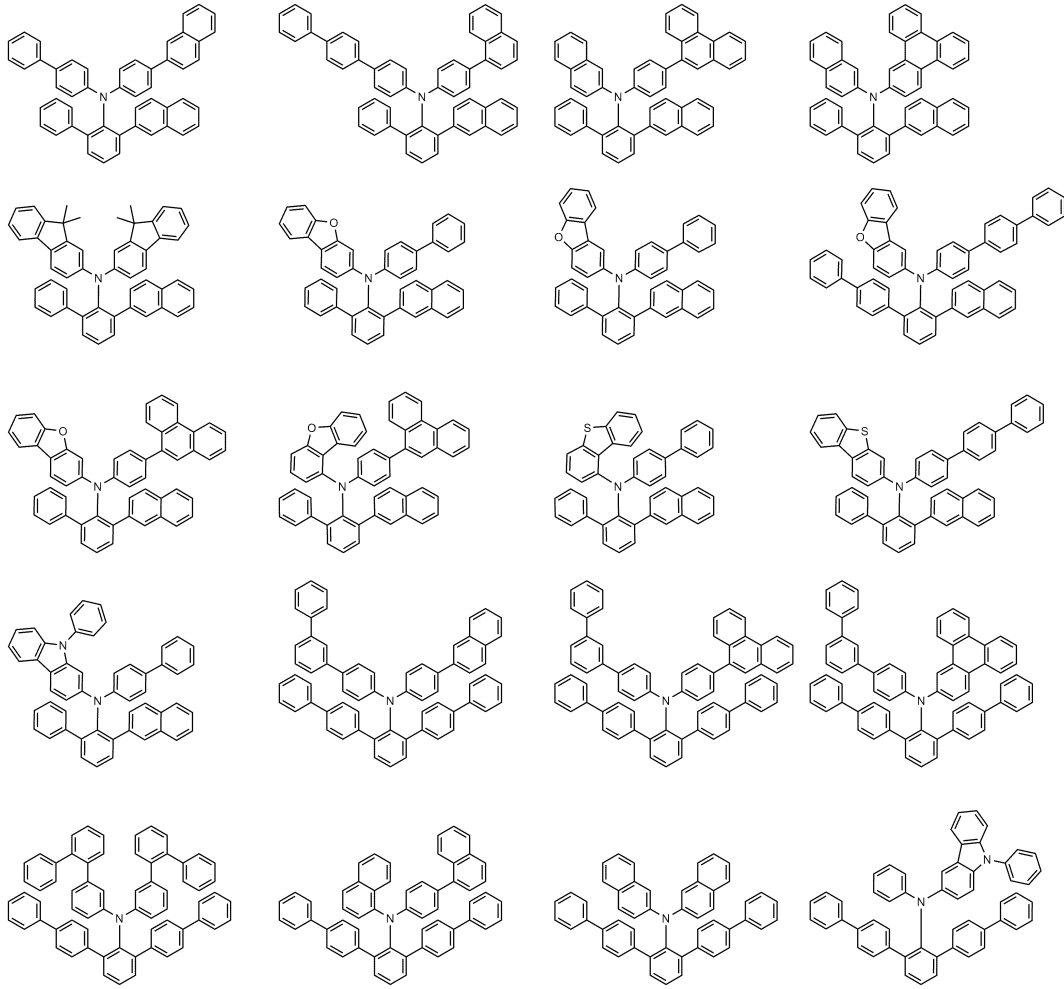
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나인,

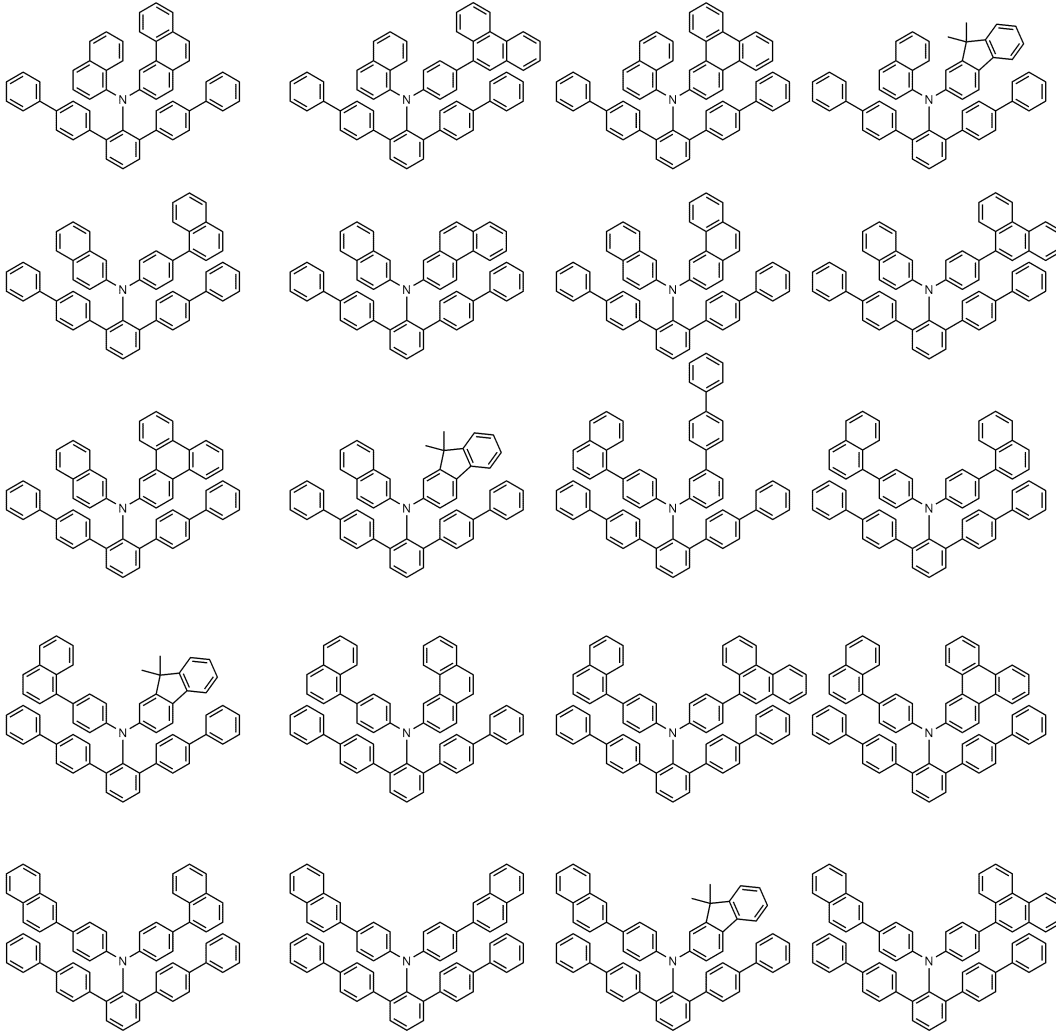
화합물:

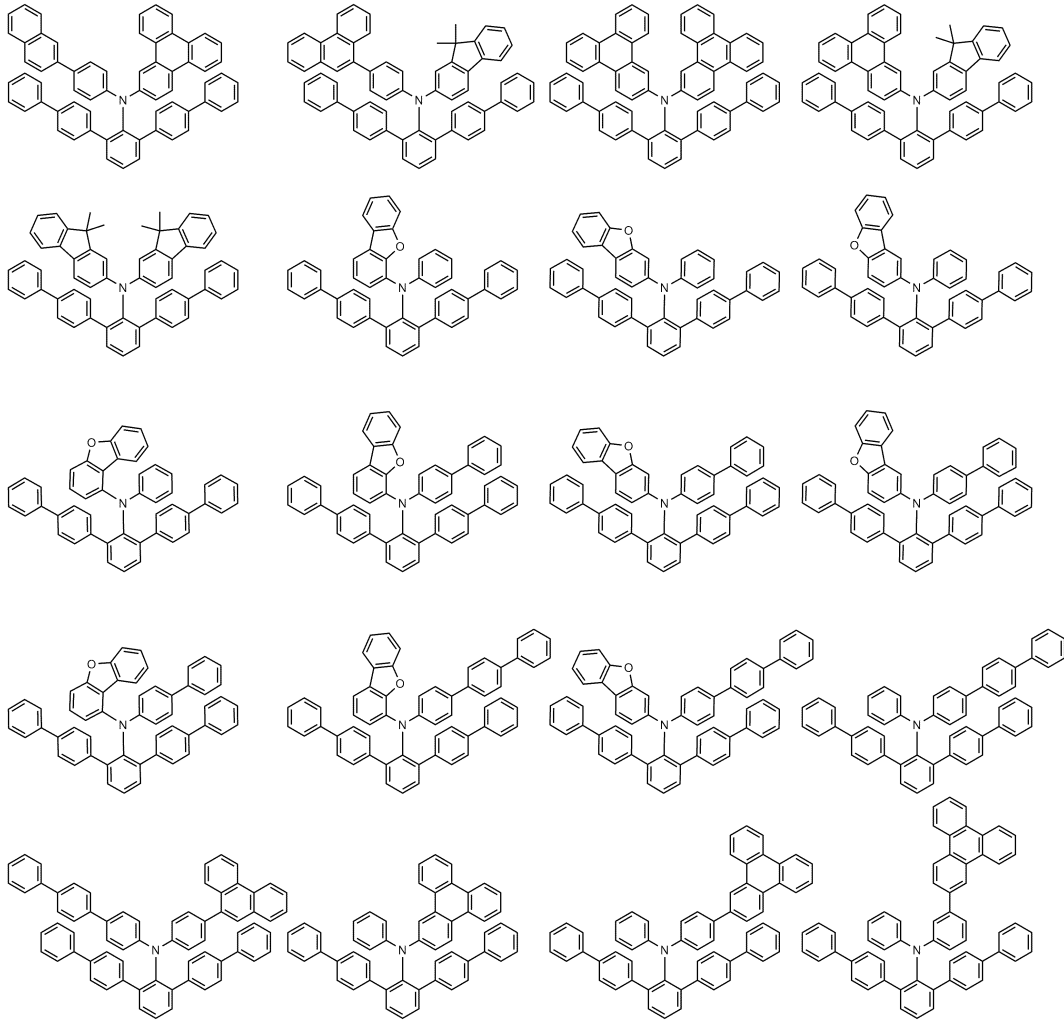


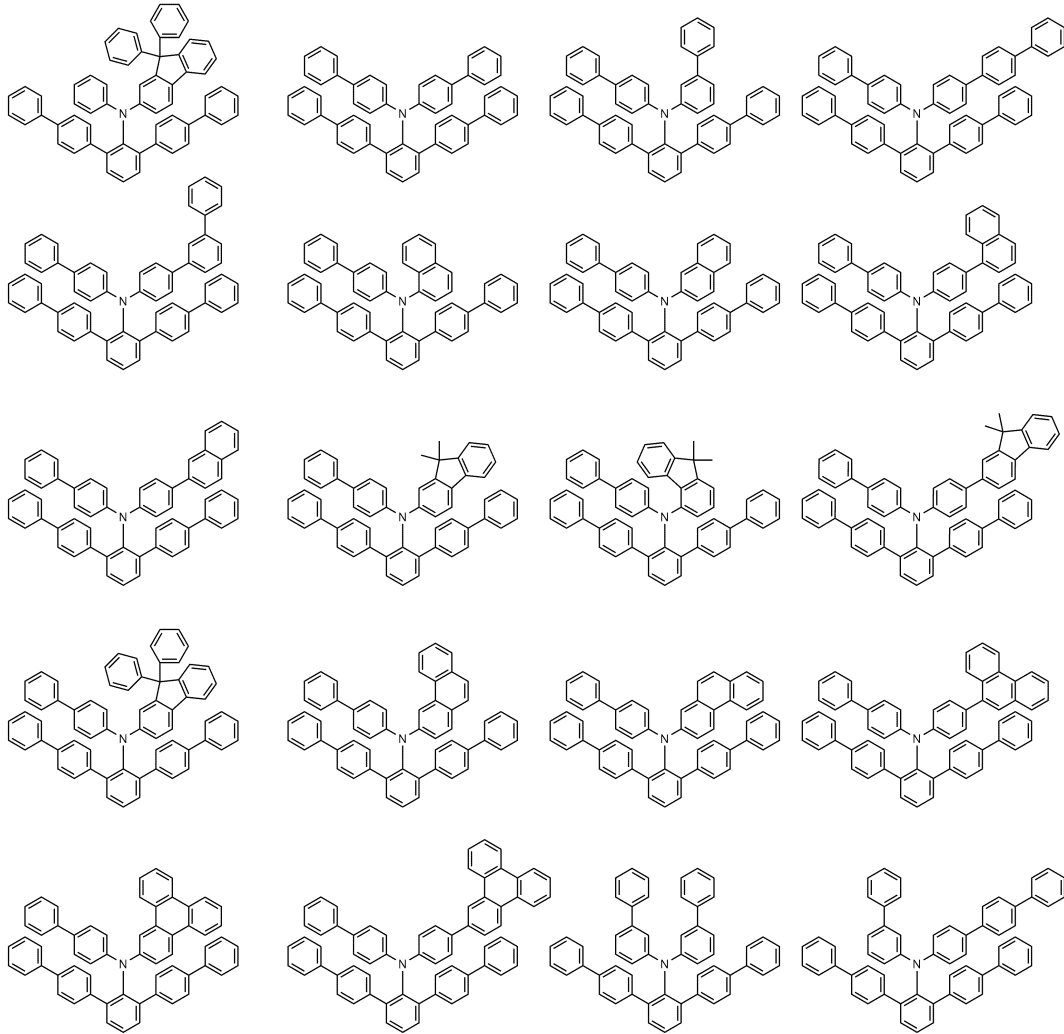


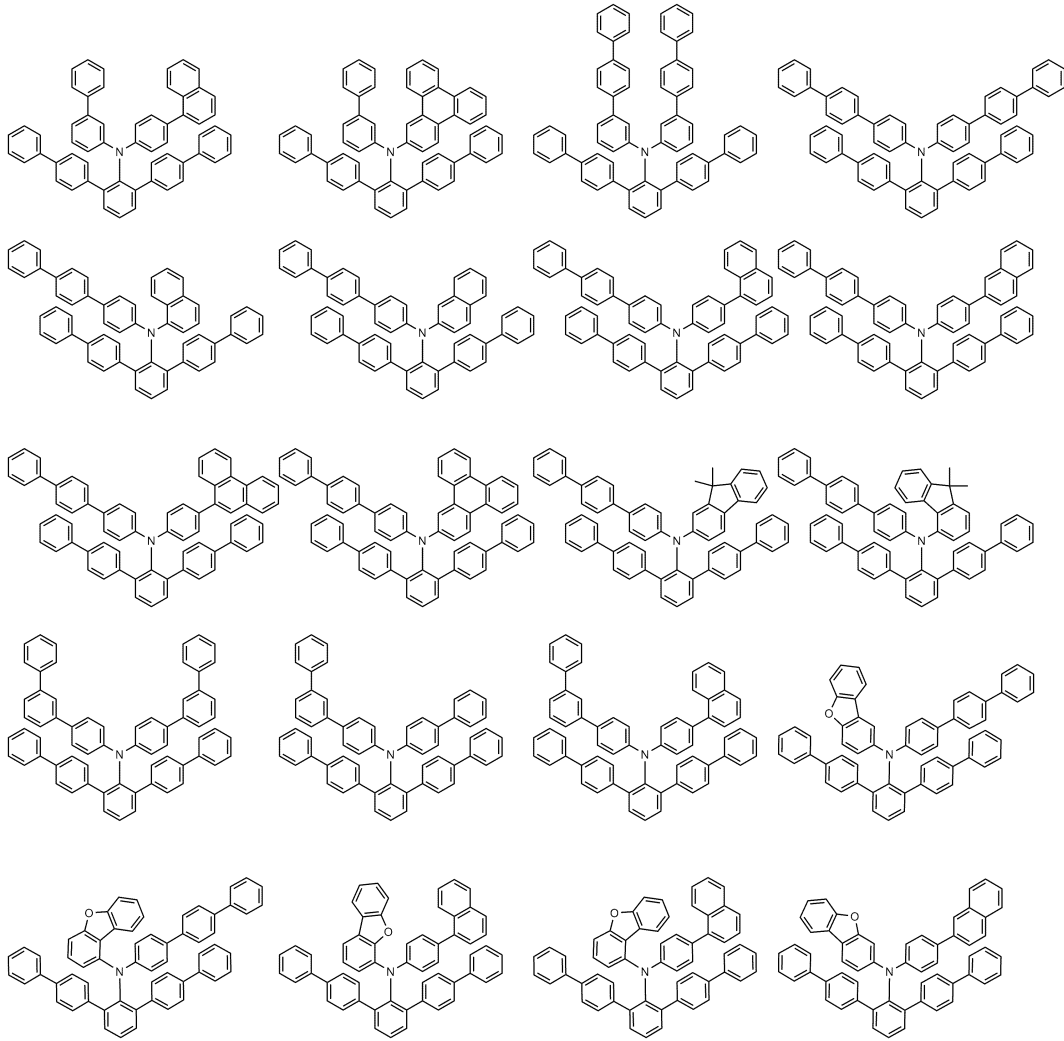


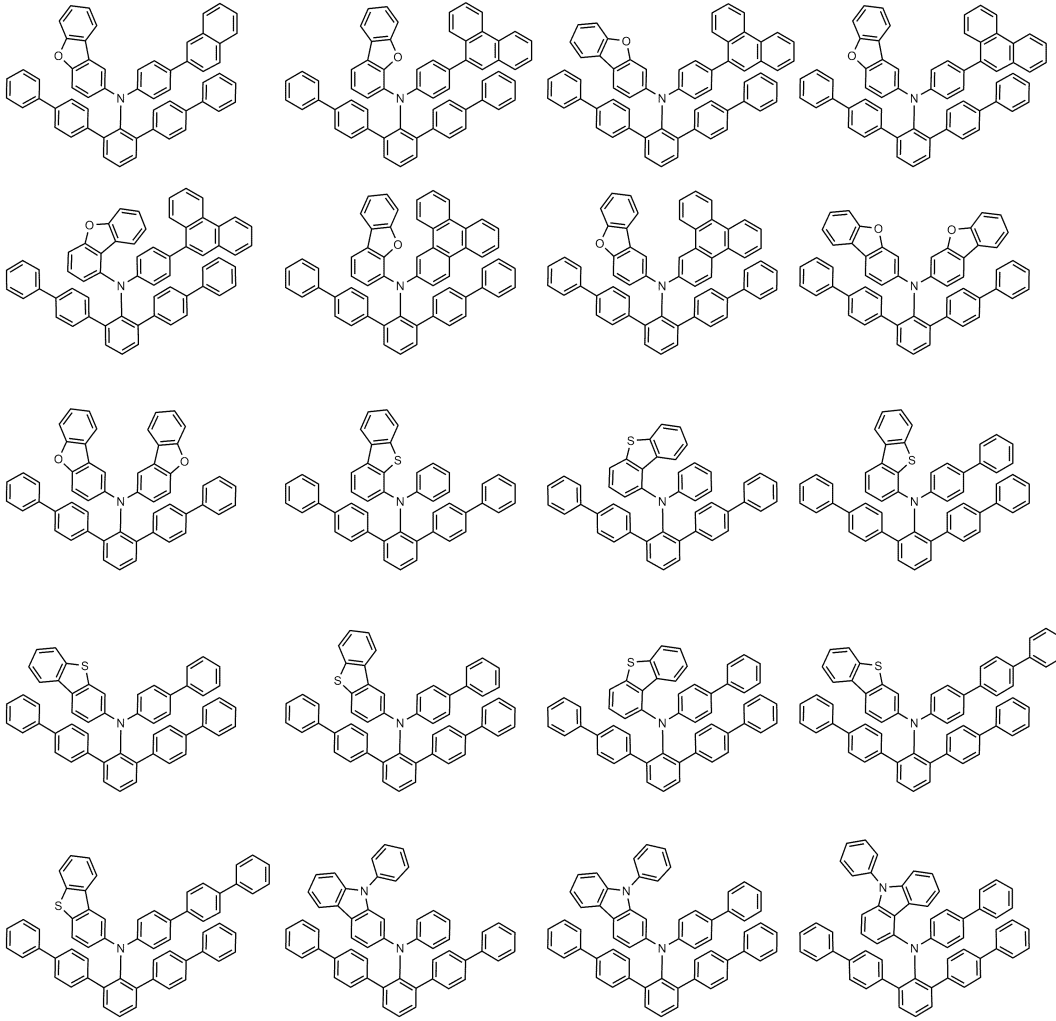


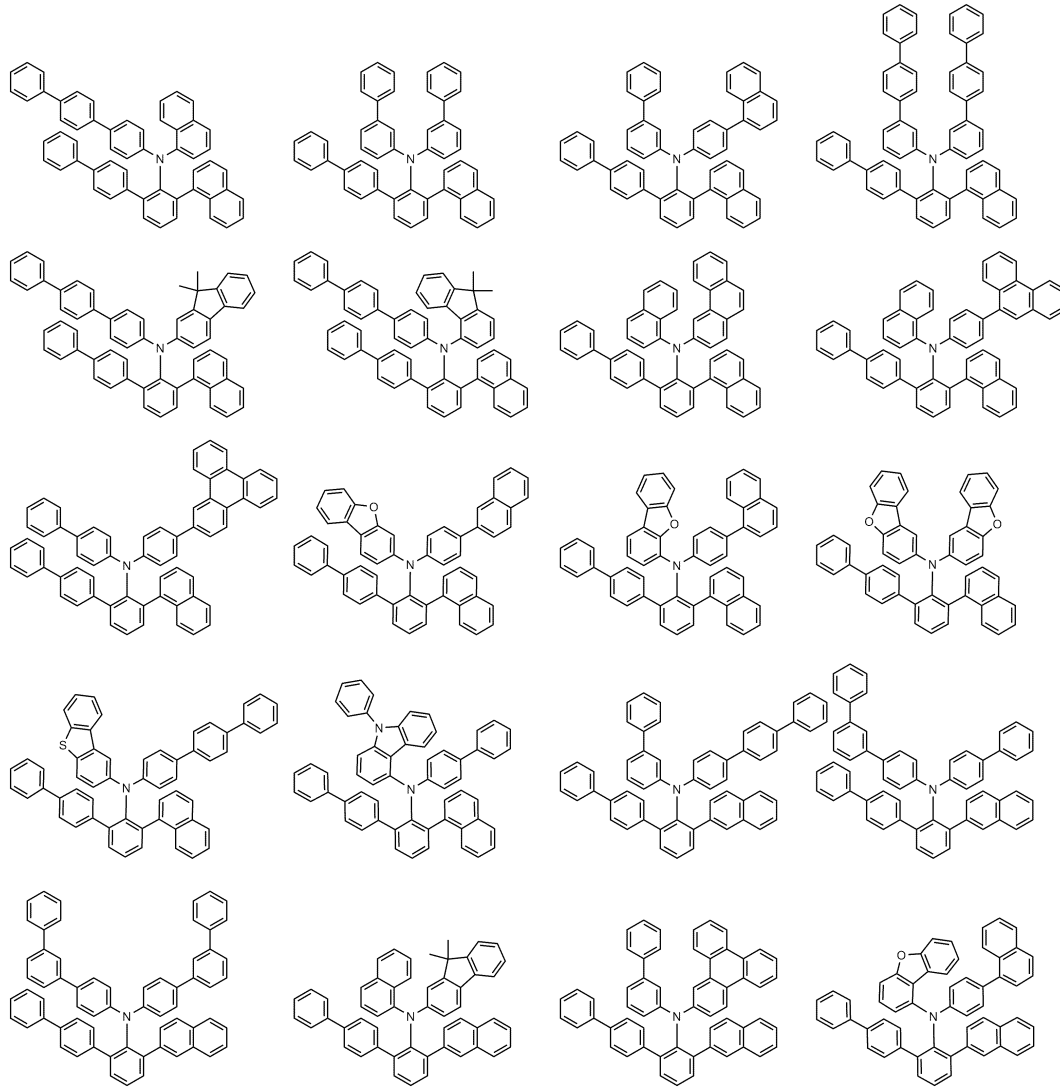


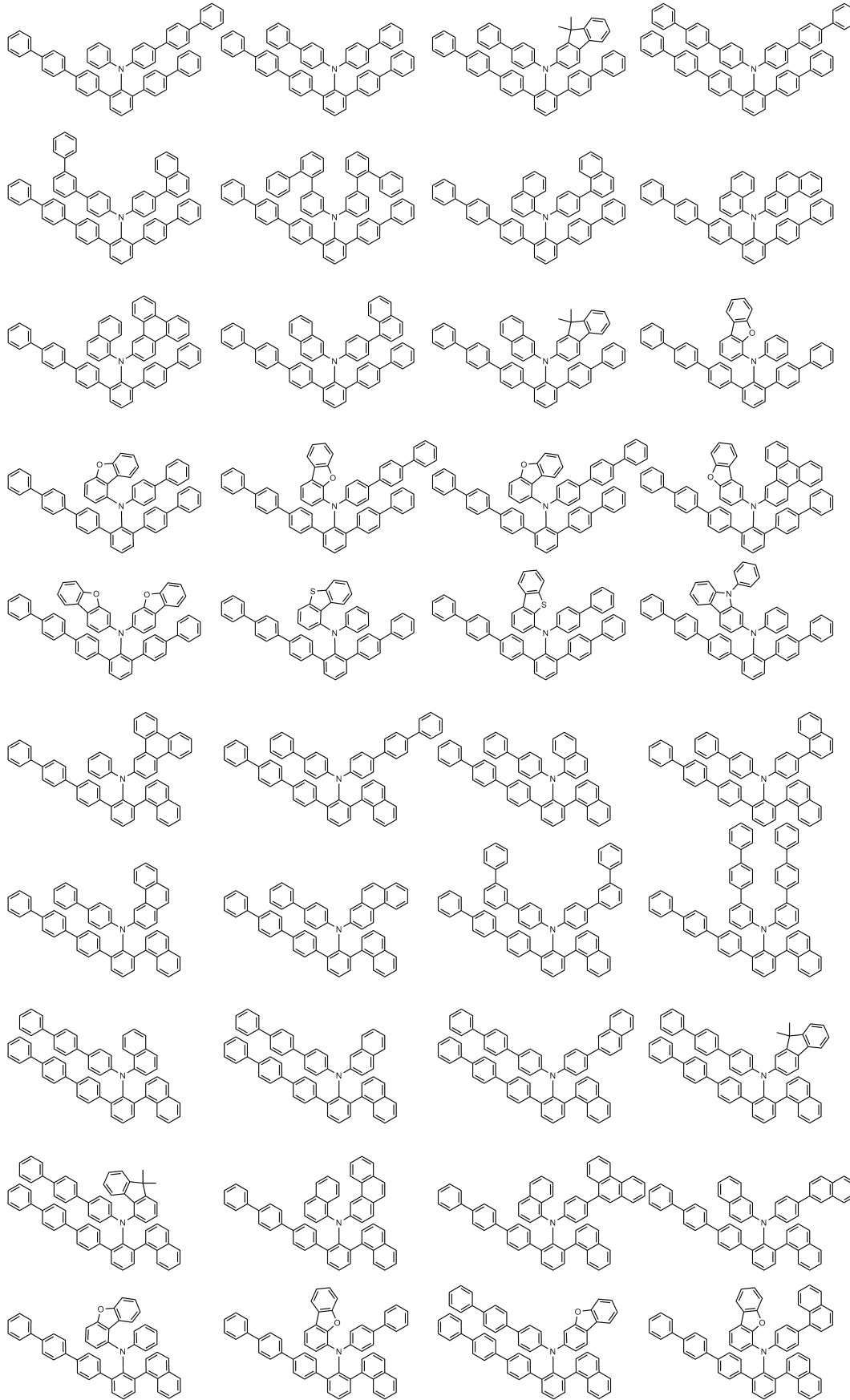


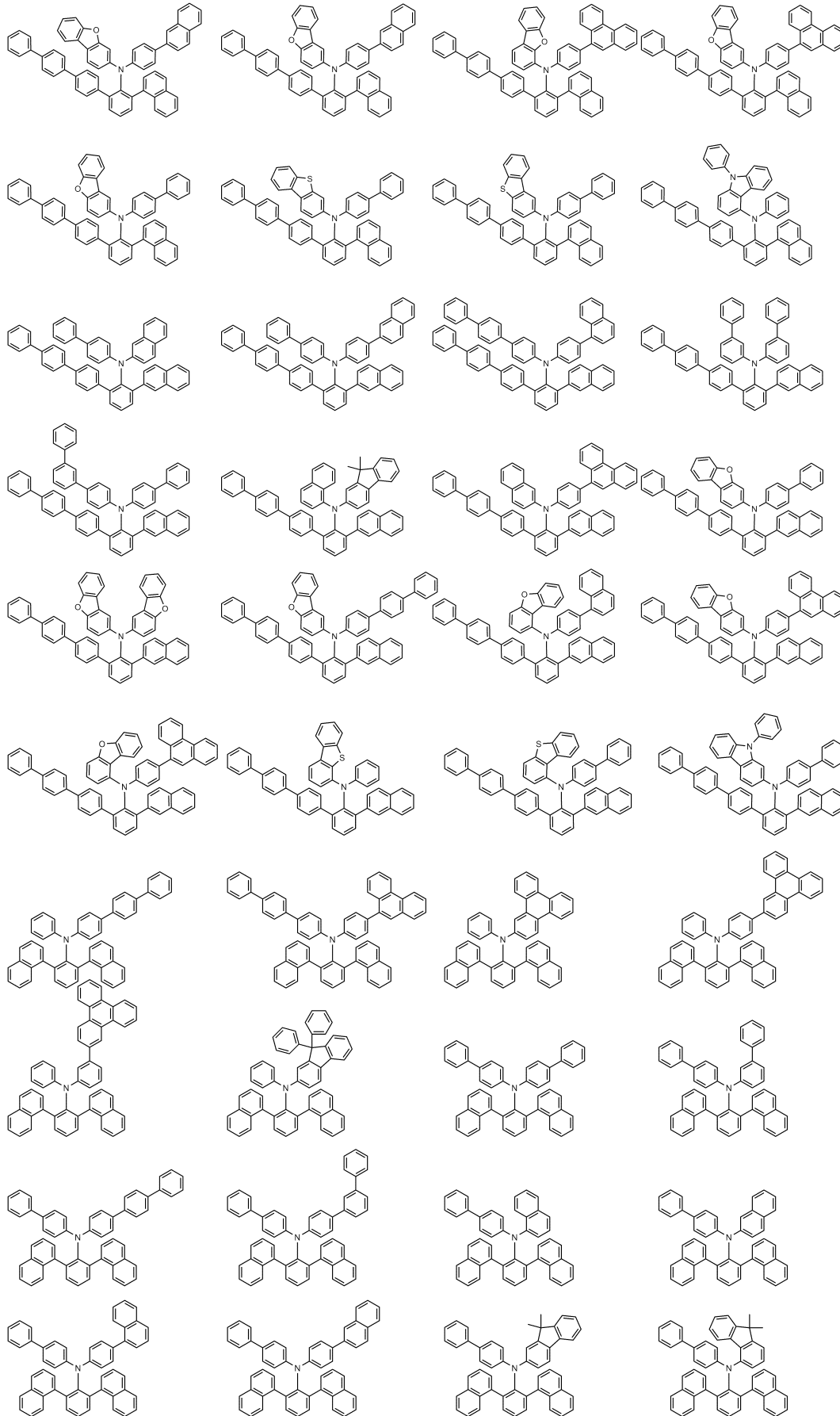


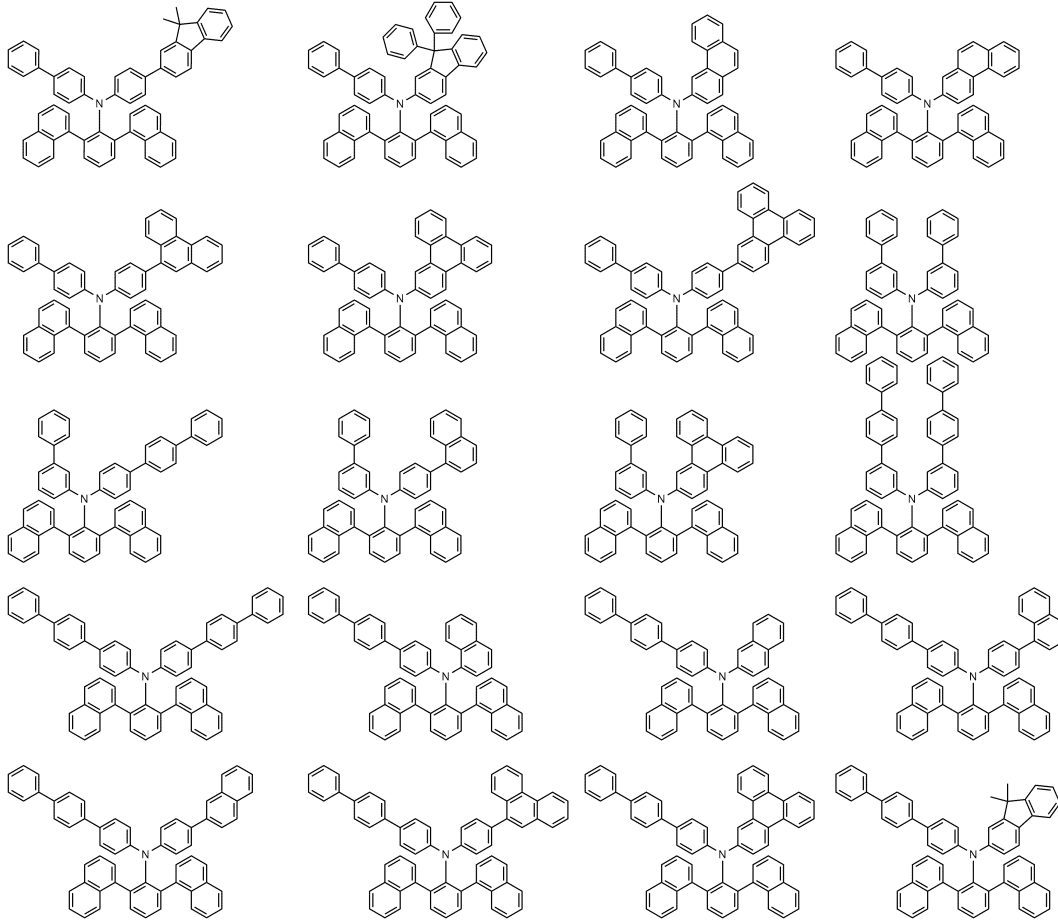


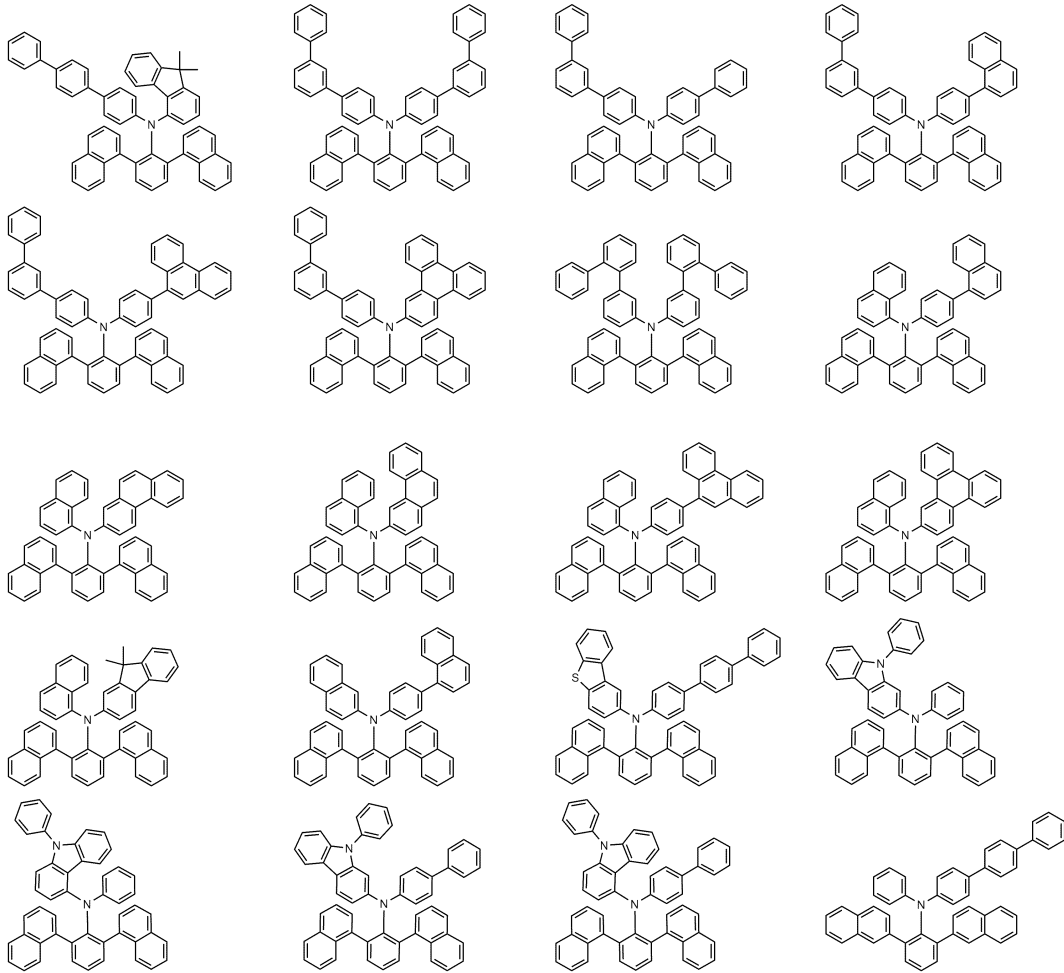


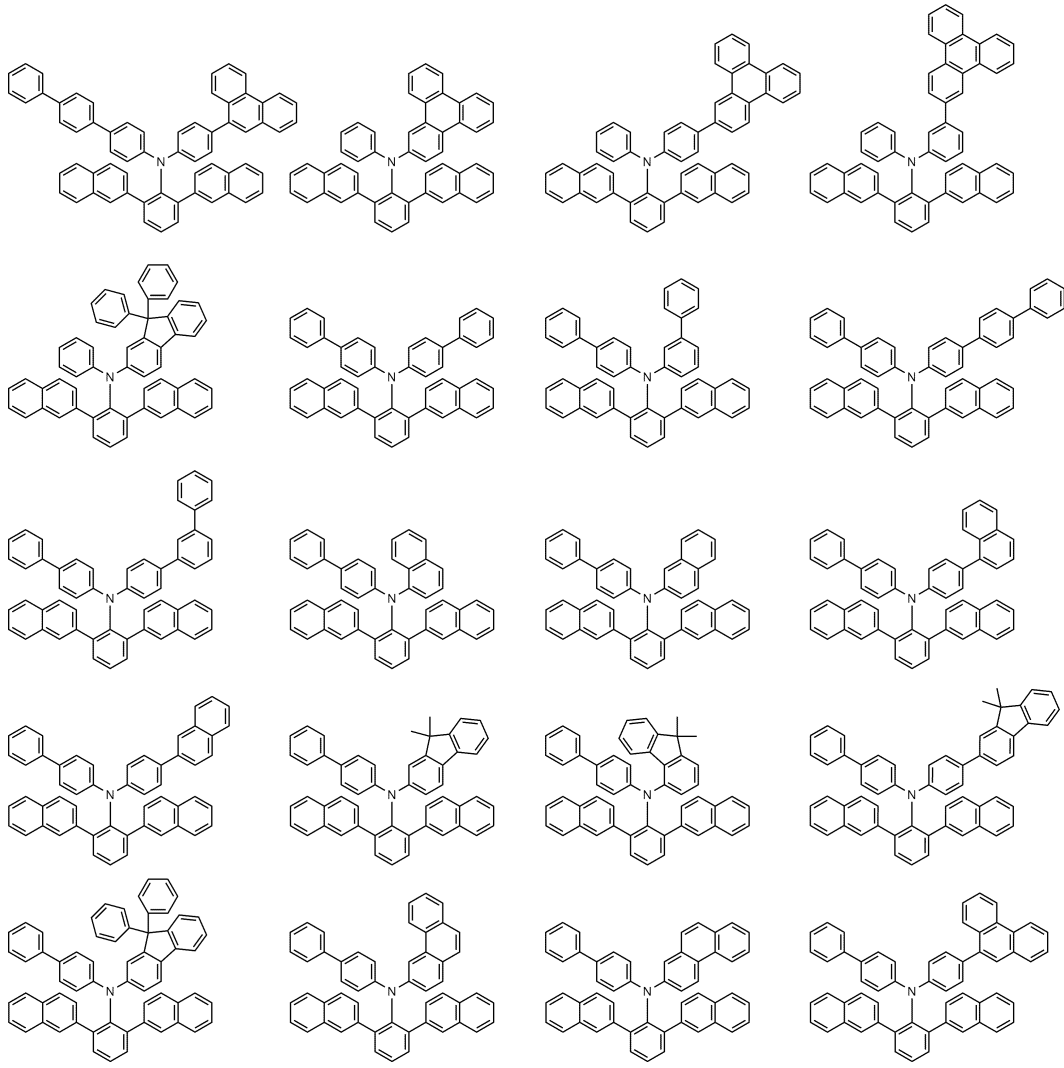


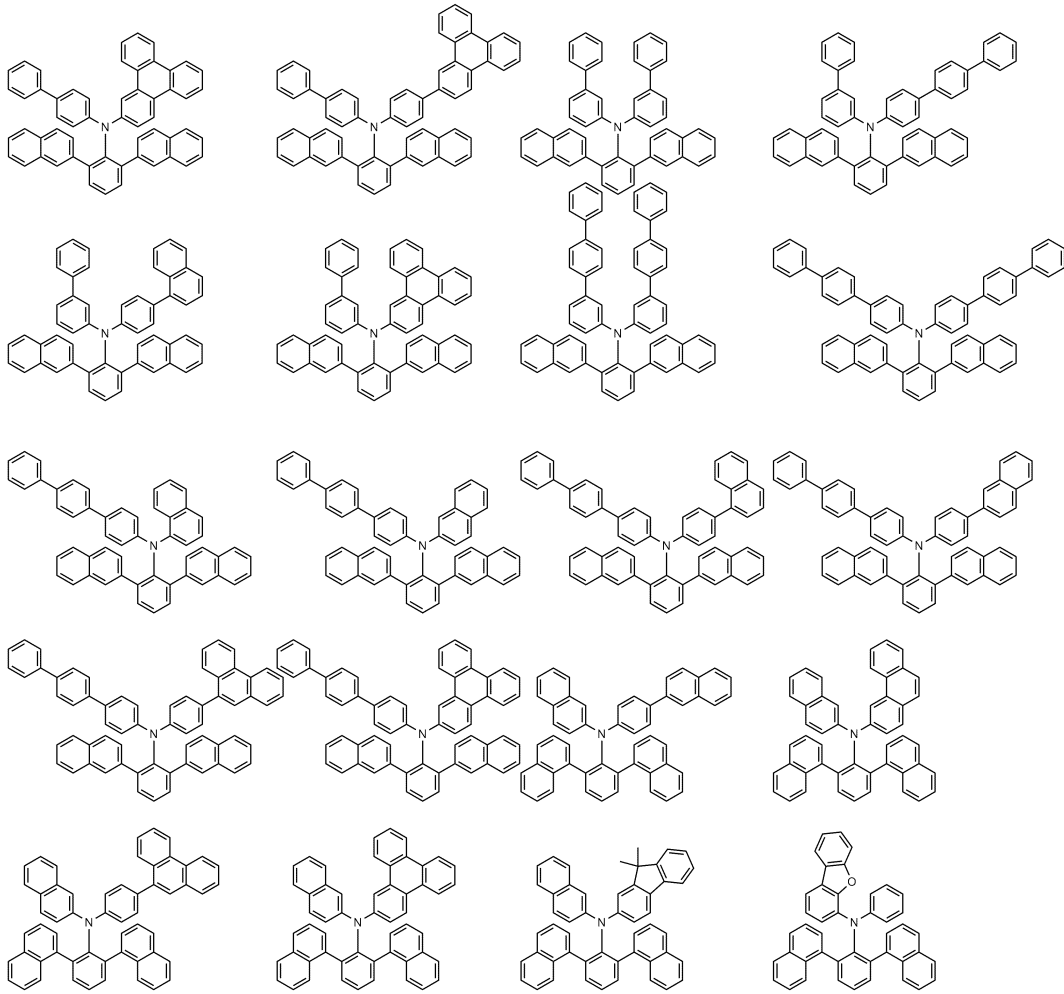


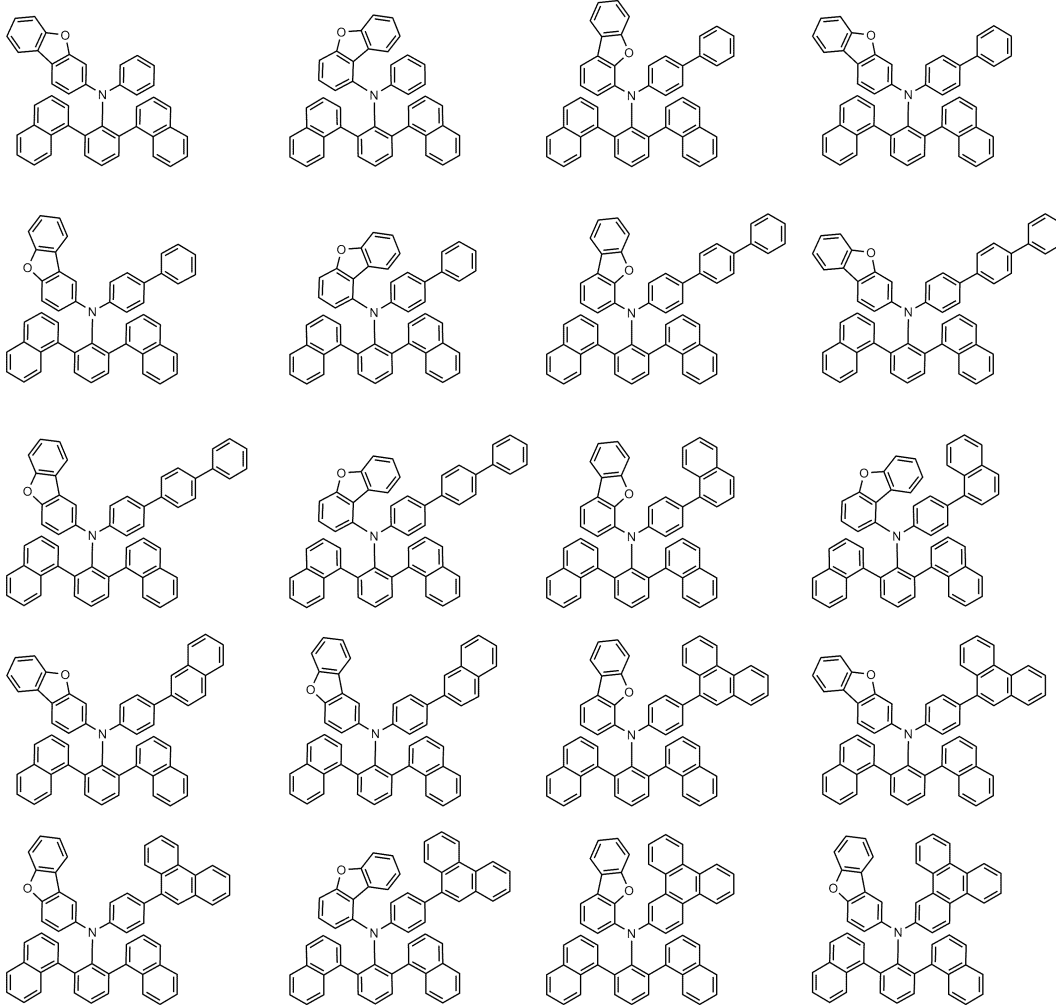


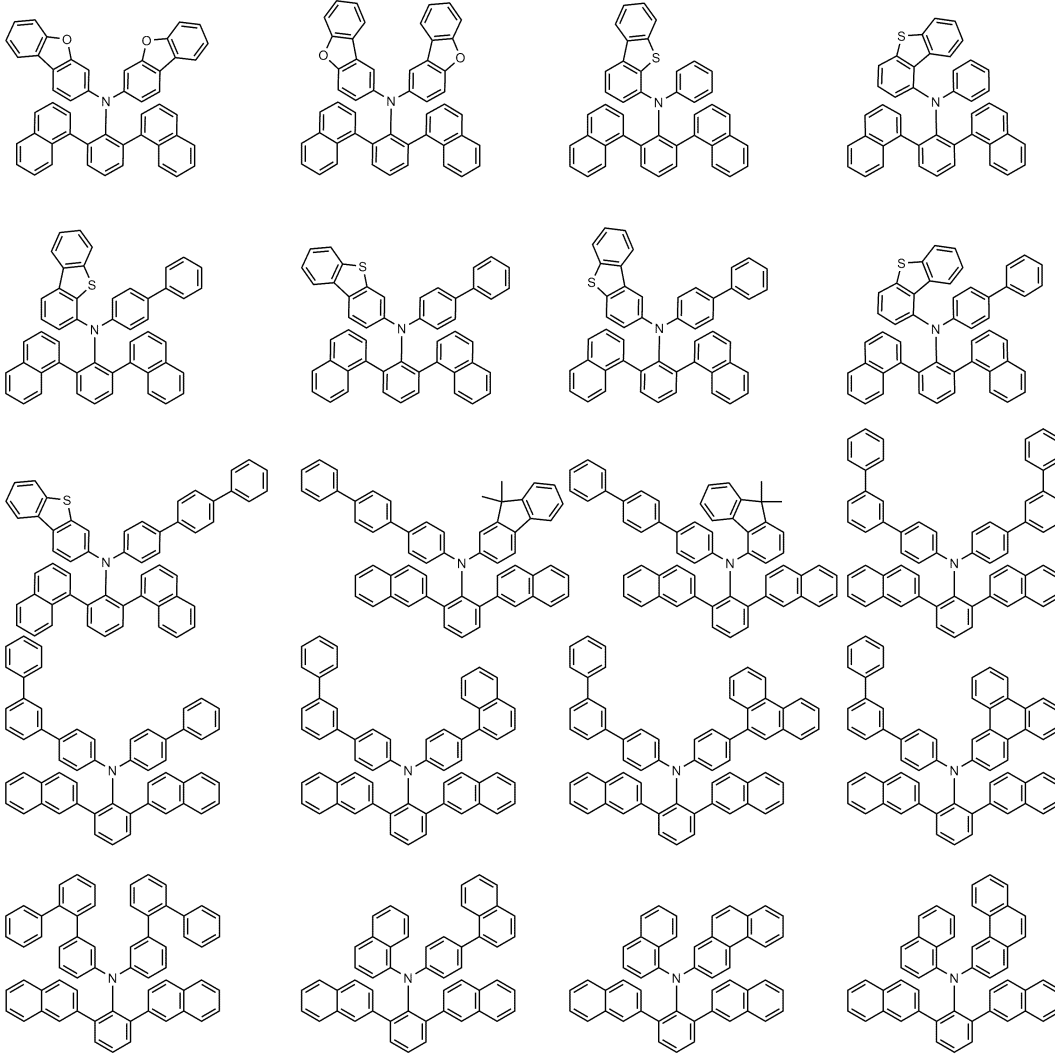


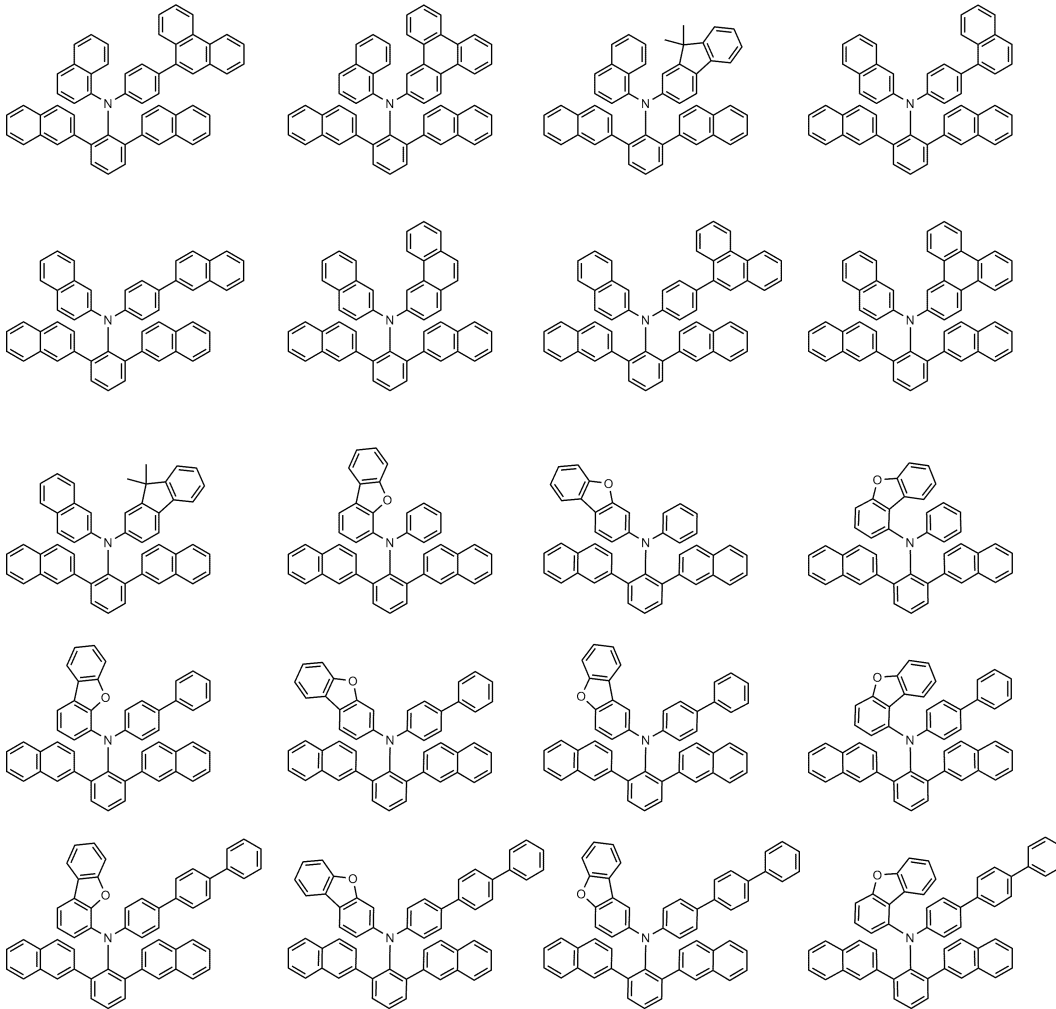


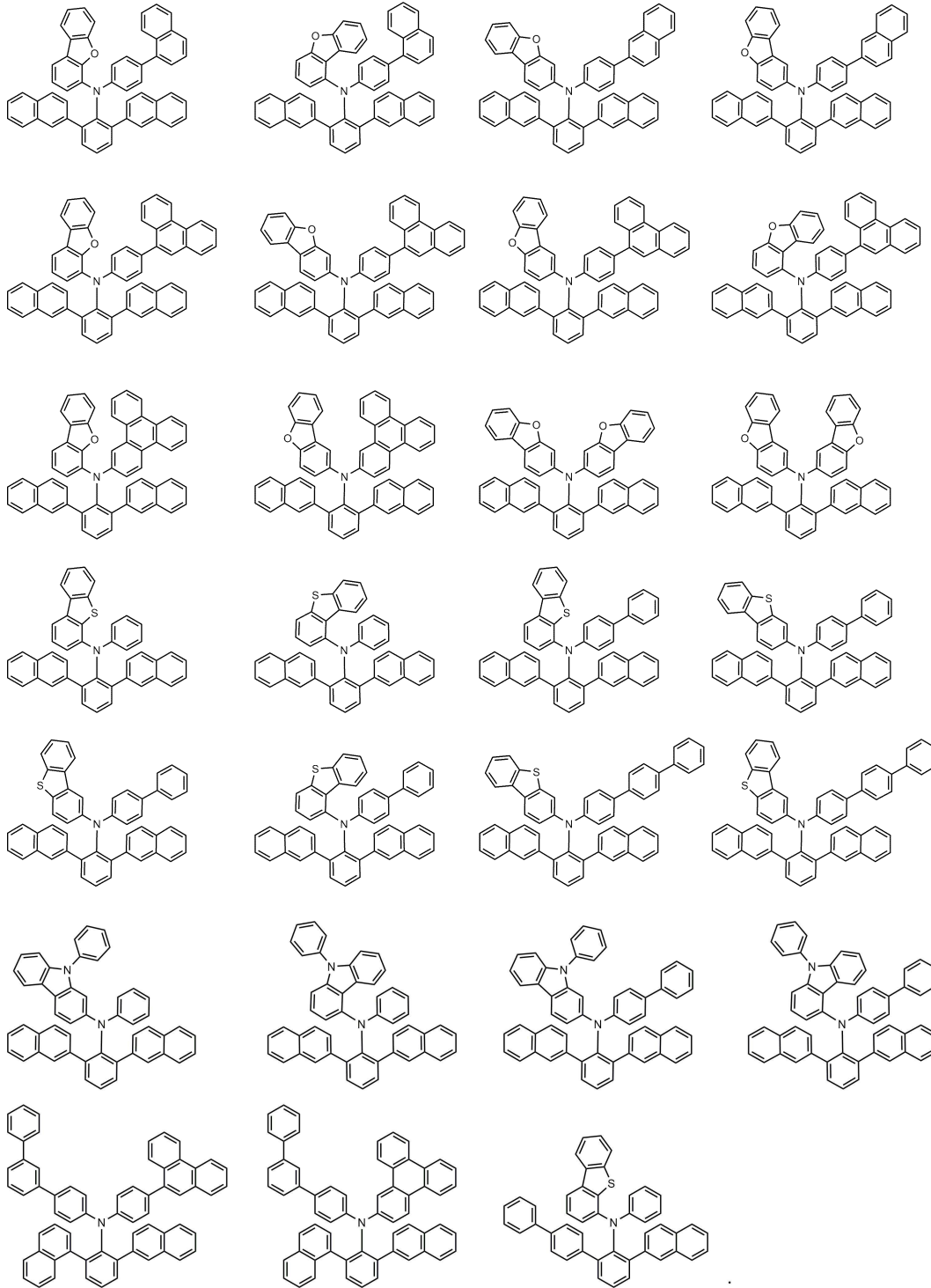












**청구항 9**

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

**발명의 설명**

**기술 분야**

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

**배경 기술**

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

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

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

**선행기술문헌**

**특허문헌**

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

**발명의 내용**

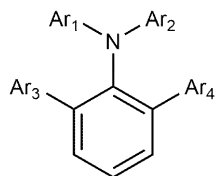
**해결하려는 과제**

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

**과제의 해결 수단**

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

[0013] [화학식 1]



[0014]

[0015] 상기 화학식 1에서,

[0016] Ar<sub>1</sub>은 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 C<sub>6-60</sub> 아릴; 또는 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 치환 또는 비치환된 C<sub>5-60</sub> 헤테로아릴이고,

[0017] Ar<sub>3</sub> 및 Ar<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 C<sub>6-60</sub> 아릴이고, 단, Ar<sub>3</sub> 및 Ar<sub>4</sub>가 중 적어도 하나가 비페닐릴 또는 나프틸이다.

[0019] 또한, 본 발명은 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물 층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자를 제공한다.

**발명의 효과**

[0021] 본 발명에 따른 화합물은 유기 발광 소자의 유기물 층의 재료로서 사용될 수 있으며, 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동전압 및/또는 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

[0023] 도 1은 기관(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.  
 도 2는 기관(1), 양극(2), 정공수송층(5), 전자억제층(6), 발광층(3), 전자수송층(7), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.  
 도 3은 기관(1), 양극(2), 정공주입층(8), 정공수송층(5), 전자억제층(6), 발광층(3), 정공억제층(9), 전자수송층(7) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

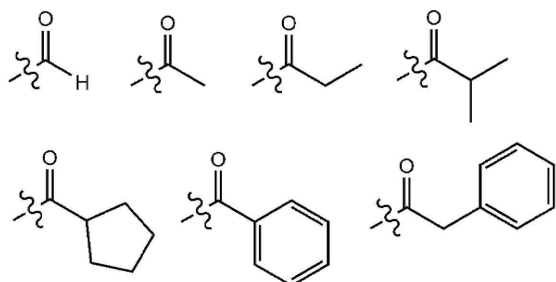
**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0024] 이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 보다 상세히 설명한다.

[0026] 본 명세서에서,  $\frac{\text{○}}{\text{○}}$  는 다른 치환기에 연결되는 결합을 의미한다.

[0028] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아미노기; 포스핀옥사이드기; 알콕시기; 아릴옥시기; 알킬티옥시기; 아릴티옥시기; 알킬술폰시기; 아릴술폰시기; 실릴기; 붕소기; 알킬기; 사이클로알킬기; 알케닐기; 아릴기; 아르알킬기; 아르알케닐기; 알킬아릴기; 알킬아민기; 아릴아민기; 아릴포스핀기; 또는 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환 또는 비치환된 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 비페닐기일 수 있다. 즉, 비페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다.

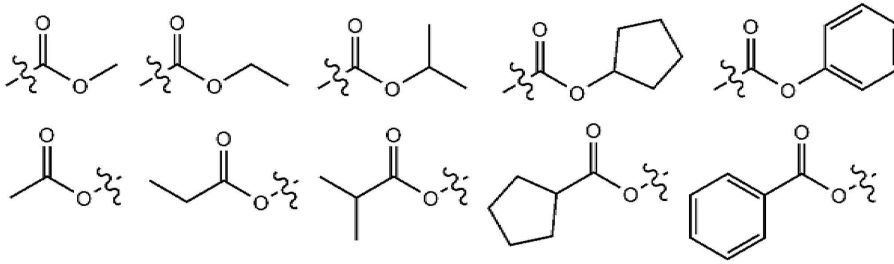
[0030] 본 명세서에서 카보닐기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0031]

[0033] 본 명세서에 있어서, 에스테르기는 에스테르기의 산소가 탄소수 1 내지 25의 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄 알킬기 또는 탄소수 6 내지 25의 아릴기로 치환될 수 있다. 구체적으로, 하기 구조식의 화합물이 될 수 있으나, 이에

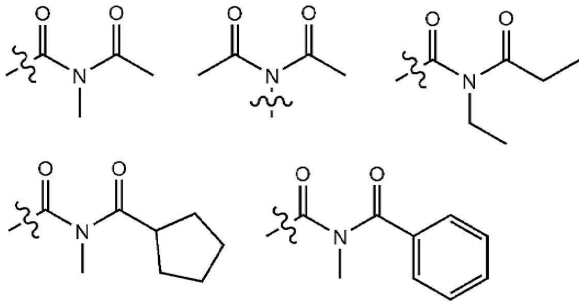
한정되는 것은 아니다.



[0034]

[0036]

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



[0037]

[0039]

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

[0041]

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

[0043]

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

[0045]

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

[0047]

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

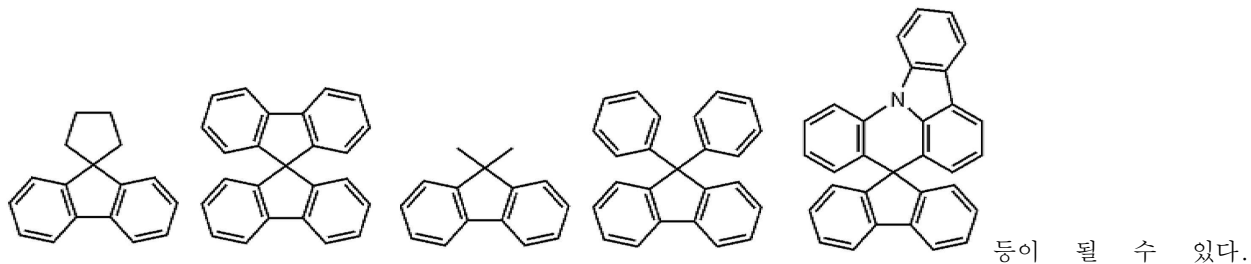
나 이들에 한정되지 않는다.

[0049] 본 명세서에 있어서, 사이클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 일 실시 상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 30이다. 또 하나의 실시 상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 또 하나의 실시 상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 6이다. 구체적으로 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 3-메틸사이클로펜틸, 2,3-디메틸사이클로펜틸, 사이클로헥실, 3-메틸사이클로헥실, 4-메틸사이클로헥실, 2,3-디메틸사이클로헥실, 3,4,5-트리메틸사이클로헥실, 4-tert-부틸사이클로헥실, 사이클로헵틸, 사이클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0051] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 60인 것이 바람직하며, 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 일 실시 상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 일 실시 상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 20이다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기로는 페닐기, 비페닐릴기, 터페닐기, 쿼터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0053] 본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있다.

상기 플루오레닐기가 치환되는 경우,



[0055] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리기는 이종 원소로 O, N, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로고리기로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 헤테로고리기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 아크리딘기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난트롤린기 (phenanthroline), 이소옥사졸릴기, 티아디아졸릴기, 페노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0057] 본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 아르알케닐기, 알킬아릴기, 아릴아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 알킬아릴기, 알킬아민기 중 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민 중 헤테로아릴은 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 아르알케닐기 중 알케닐기는 전술한 알케닐기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 아릴렌은 2가지인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴렌은 2가지인 것을 제외하고는 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 탄화수소 고리는 1가지가 아니고, 2개의 치환기가 결합하여 형성한 것을 제외하고는 전술한 아릴기 또는 사이클로알킬기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 헤테로고리는 1가지가 아니고, 2개의 치환기가 결합하여 형성한 것을 제외하고는 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0059] 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0061] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 트리아릴아민의 아민 질소 원자에 결합하는 하나의 페닐기에 있어서, 질소 원자에 대해 오르소(ortho) 위치에만 아릴기를 도입하는 것으로, 이러한 치환기 도입에 따라 화합물의 HOMO 및 LUMO 에너지 준위를 조절하여 각 유기물 층과의 에너지 배리어를 조절할 수 있는 우수한 효과를 얻을 수 있다.

[0063] 구체적으로, Ar<sub>1</sub>은 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 C<sub>6-30</sub> 아릴, 또는 C<sub>6-28</sub> 아릴, 또는 C<sub>6-25</sub> 아릴이거나, 또는 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 치환 또는 비치환된 C<sub>5-30</sub> 헤테로아릴, 또는 C<sub>8-20</sub> 헤테로아릴, 또는 C<sub>12-18</sub> 헤테로아릴일 수 있다. 바람직하게는, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 쿼터페닐릴, 나프틸, 페난트레닐, 트리페닐레닐, 디메틸플루오레닐, 디페닐플루오레닐, 디벤조퓨라닐, 디벤조티오펜, 9-페닐-9H-카바졸릴, 나프틸로 치환된 페닐, 페난트레닐로 치환된 페닐, 또는 트리페닐레닐로 치환된 페닐 중 어느 하나일 수 있다.

[0065] 구체적으로, Ar<sub>3</sub> 및 Ar<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 C<sub>6-30</sub> 아릴, 또는 C<sub>6-25</sub> 아릴, 또는 C<sub>6-18</sub> 아릴일 수 있다. 바람직하게는, Ar<sub>3</sub> 및 Ar<sub>4</sub>는 각각 독립적으로, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 또는 나프틸이다.

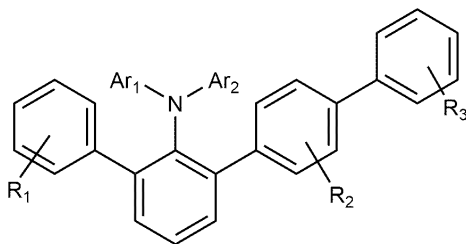
[0067] 구체적으로, Ar<sub>1</sub>와 Ar<sub>2</sub>, 및 Ar<sub>3</sub>와 Ar<sub>4</sub>는 각각 서로 동일하거나 서로 상이한 것일 수 있다.

[0069] 일 예로, Ar<sub>1</sub>와 Ar<sub>2</sub>, 및 Ar<sub>3</sub>와 Ar<sub>4</sub> 중 적어도 한 쌍 이상은 서로 동일한 것일 수 있다. 예컨대, Ar<sub>1</sub>와 Ar<sub>2</sub>가 서로 동일하고, Ar<sub>3</sub>와 Ar<sub>4</sub>는 서로 상이할 수 있다. 또는, Ar<sub>1</sub>와 Ar<sub>2</sub>는 서로 상이하며, Ar<sub>3</sub>와 Ar<sub>4</sub>가 서로 동일할 수 있다. 또는 Ar<sub>1</sub>와 Ar<sub>2</sub>가 서로 동일하고, Ar<sub>3</sub>와 Ar<sub>4</sub>도 서로 동일한 것일 수 있다.

[0071] 여기서, Ar<sub>1</sub>와 Ar<sub>2</sub>가 서로 동일한 경우, Ar<sub>2</sub>와 Ar<sub>2</sub>는 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 또는 디메틸플루오레닐일 수 있다.

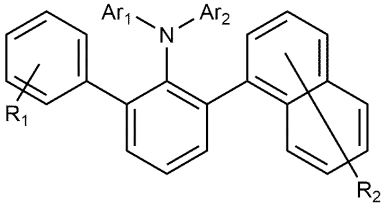
[0073] 일 예로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-12 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

[0074] [화학식 1-1]



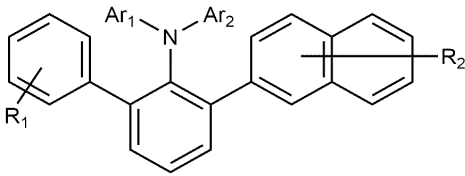
[0075]

[0076] [화학식 1-2]



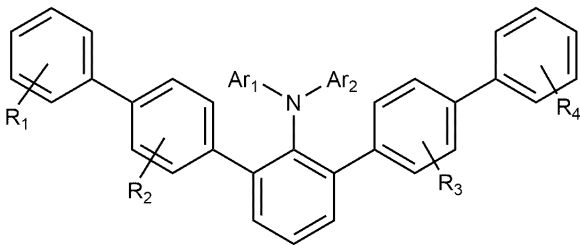
[0077]

[0078] [화학식 1-3]



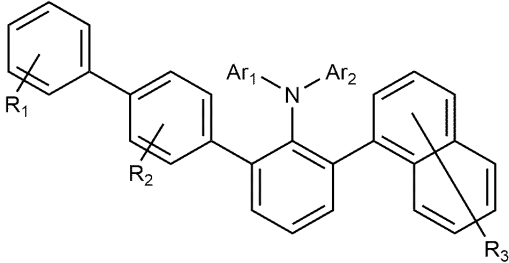
[0079]

[0080] [화학식 1-4]



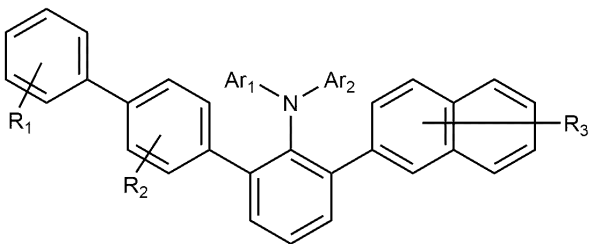
[0081]

[0082] [화학식 1-5]



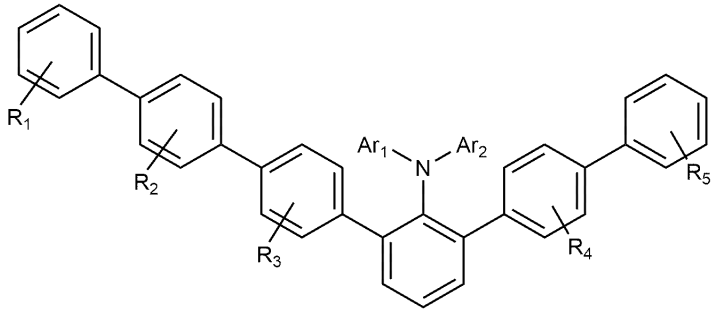
[0083]

[0084] [화학식 1-6]



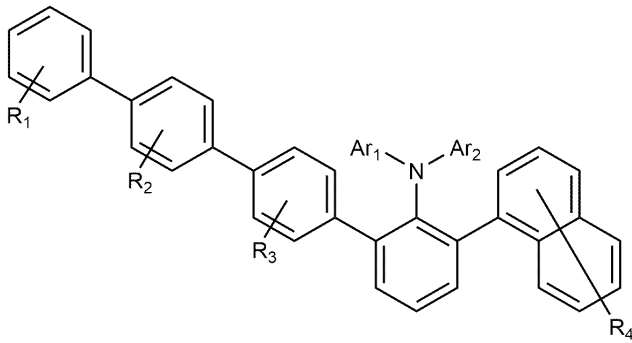
[0085]

[0086] [화학식 1-7]



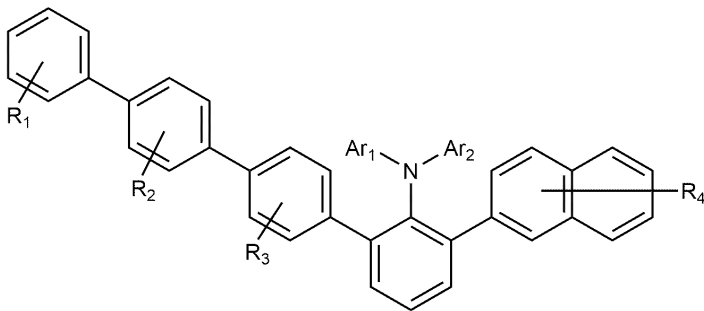
[0087]

[0088] [화학식 1-8]



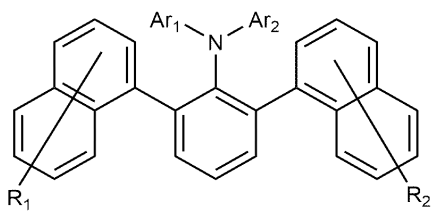
[0089]

[0090] [화학식 1-9]



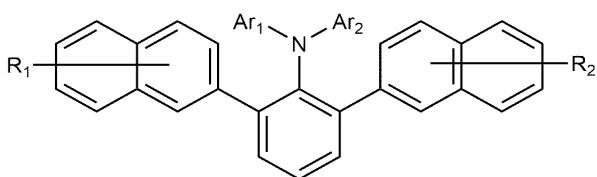
[0091]

[0092] [화학식 1-10]



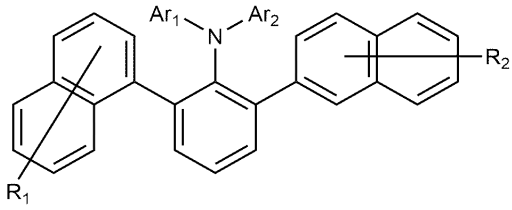
[0093]

[0094] [화학식 1-11]



[0095]

[0096] [화학식 1-12]



[0097]

[0098]

상기 화학식 1-1 내지 1-12에서,

[0099]

Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같으며,

[0100]

R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, 및 R<sub>5</sub>는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 니트릴기, 실릴기, C<sub>6-60</sub> 아릴, C<sub>6-60</sub> 아르알킬, C<sub>6-60</sub> 아르알케닐; 또는 N, O 및 S로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 치환 또는 비치환된 C<sub>5-60</sub> 헤테로아릴이다.

[0102]

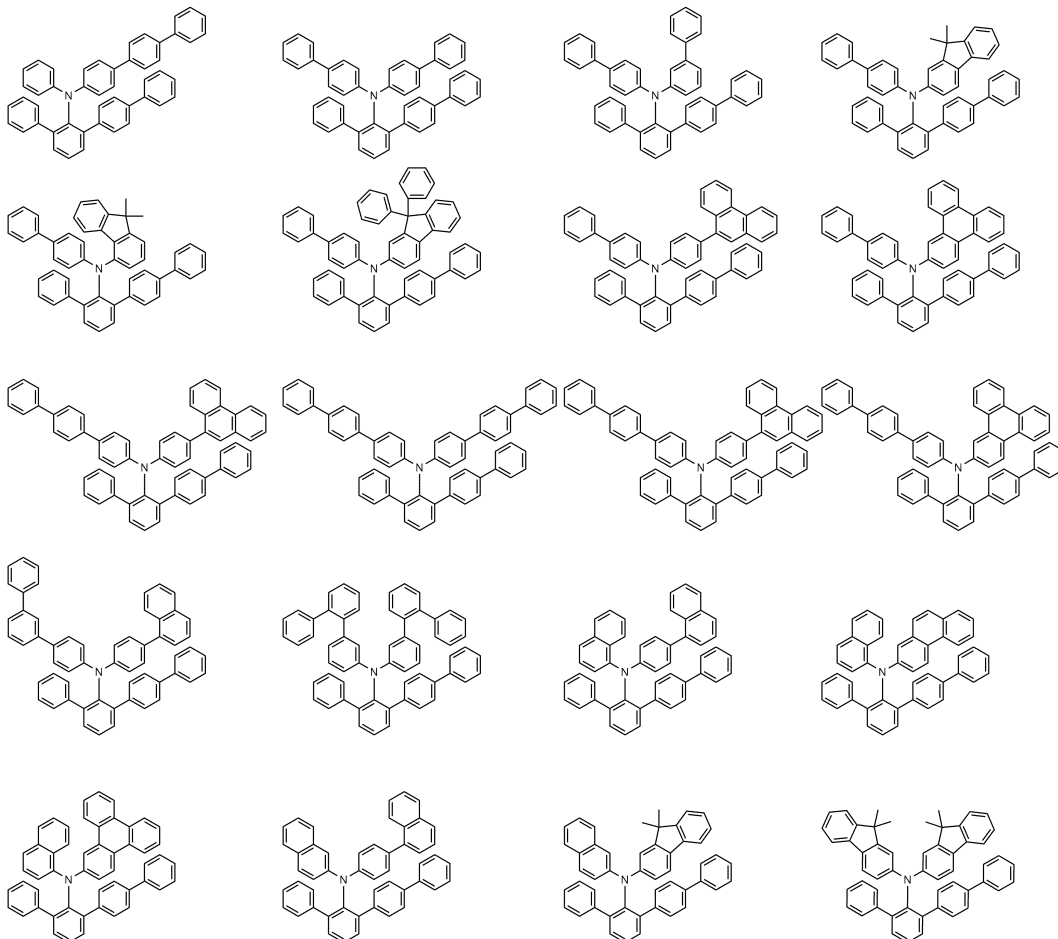
구체적으로, 상기 R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, 및 R<sub>5</sub>는 수소일 수 있다.

[0104]

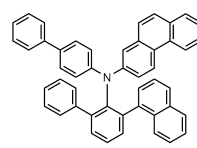
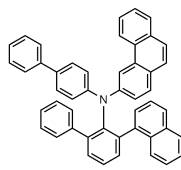
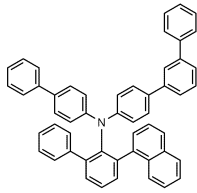
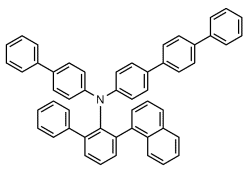
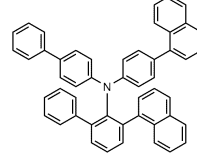
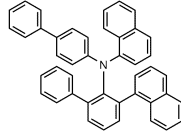
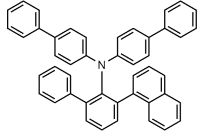
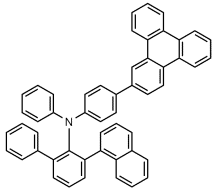
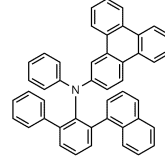
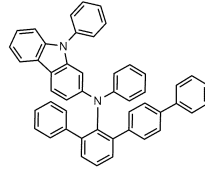
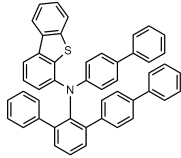
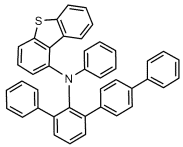
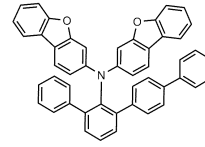
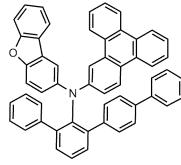
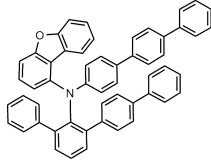
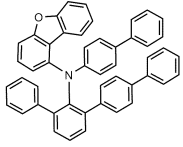
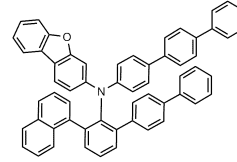
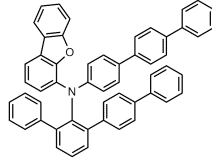
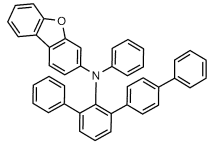
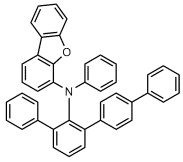
한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은, 트리아릴아민의 아민 질소 원자에 치환된 Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>가 회전을 통해 좌우 위치를 달리한 구조 이성질체(stereo-isomer)를 모두 포함하는 것이 될 수 있다.

[0106]

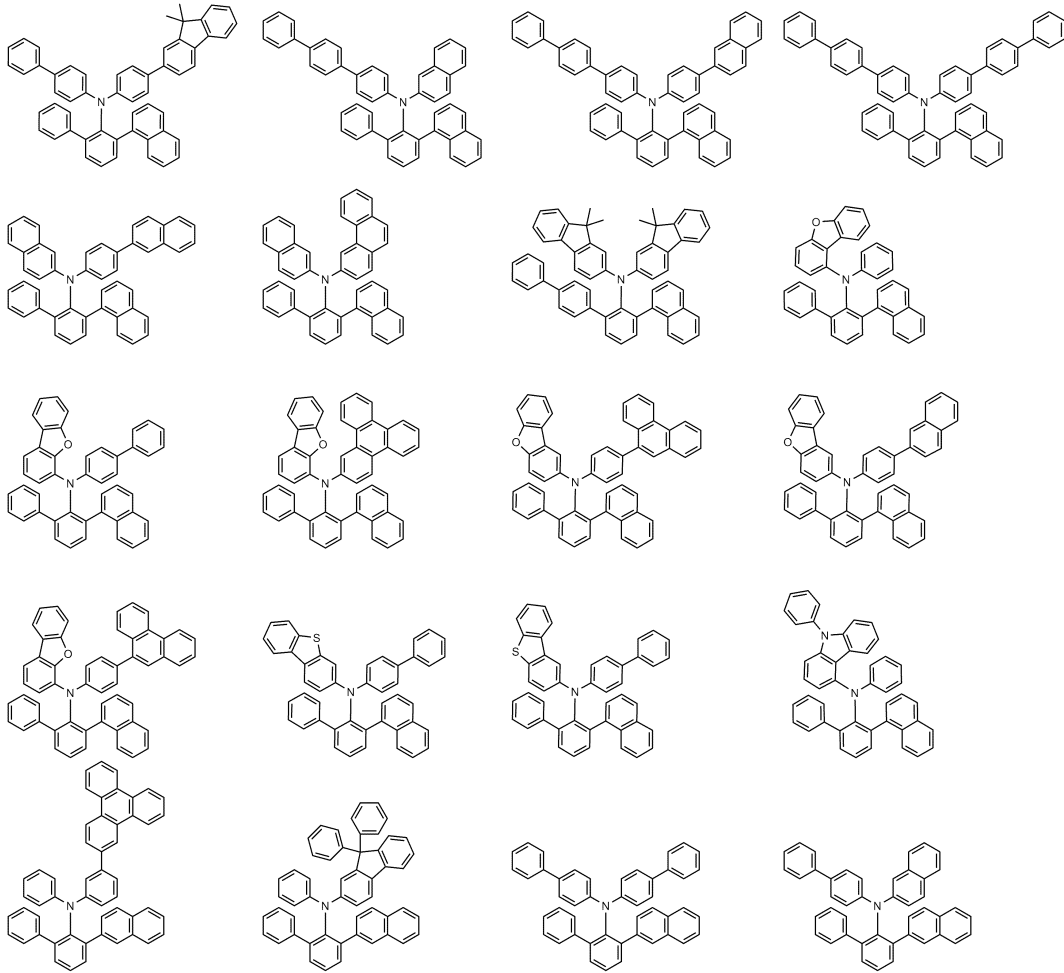
상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 대표적인 예는 하기와 같다.



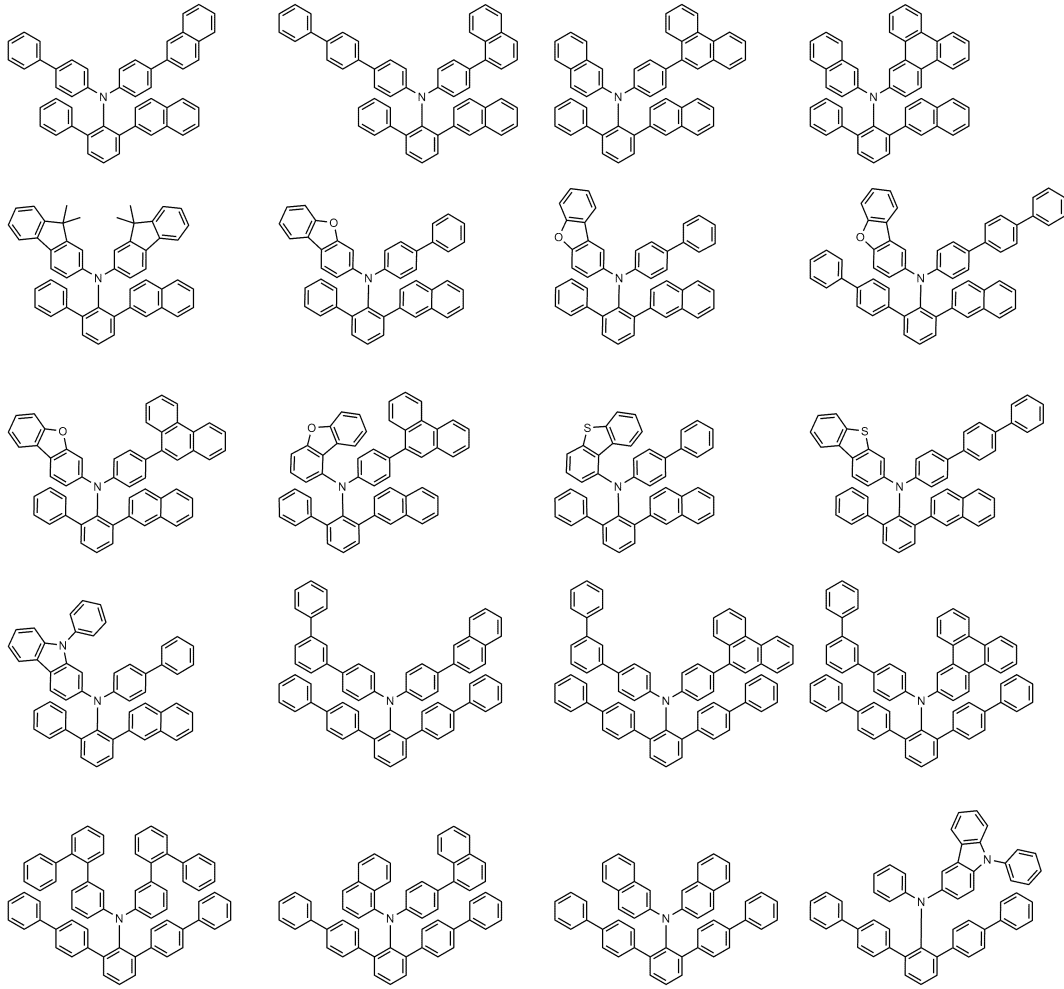
[0107]



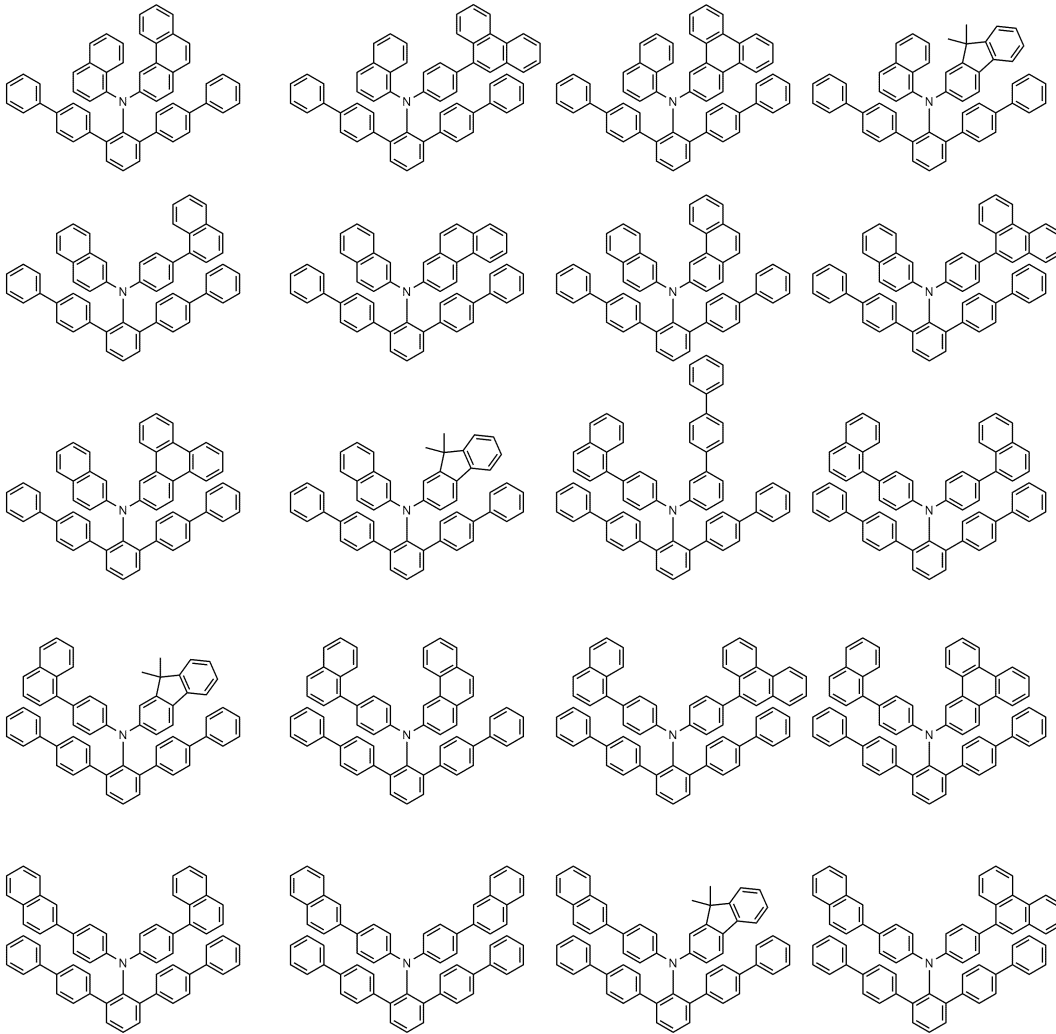
[0108]



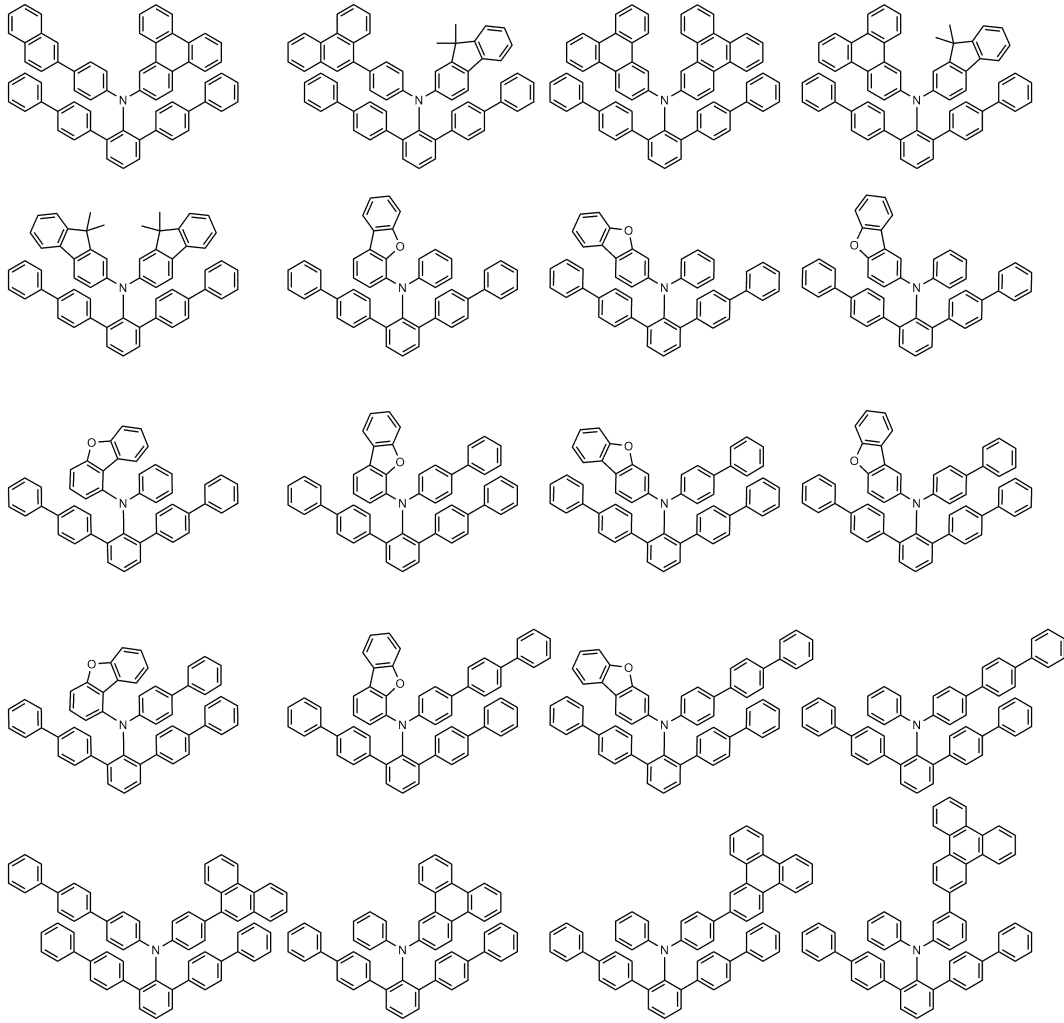
[0109]



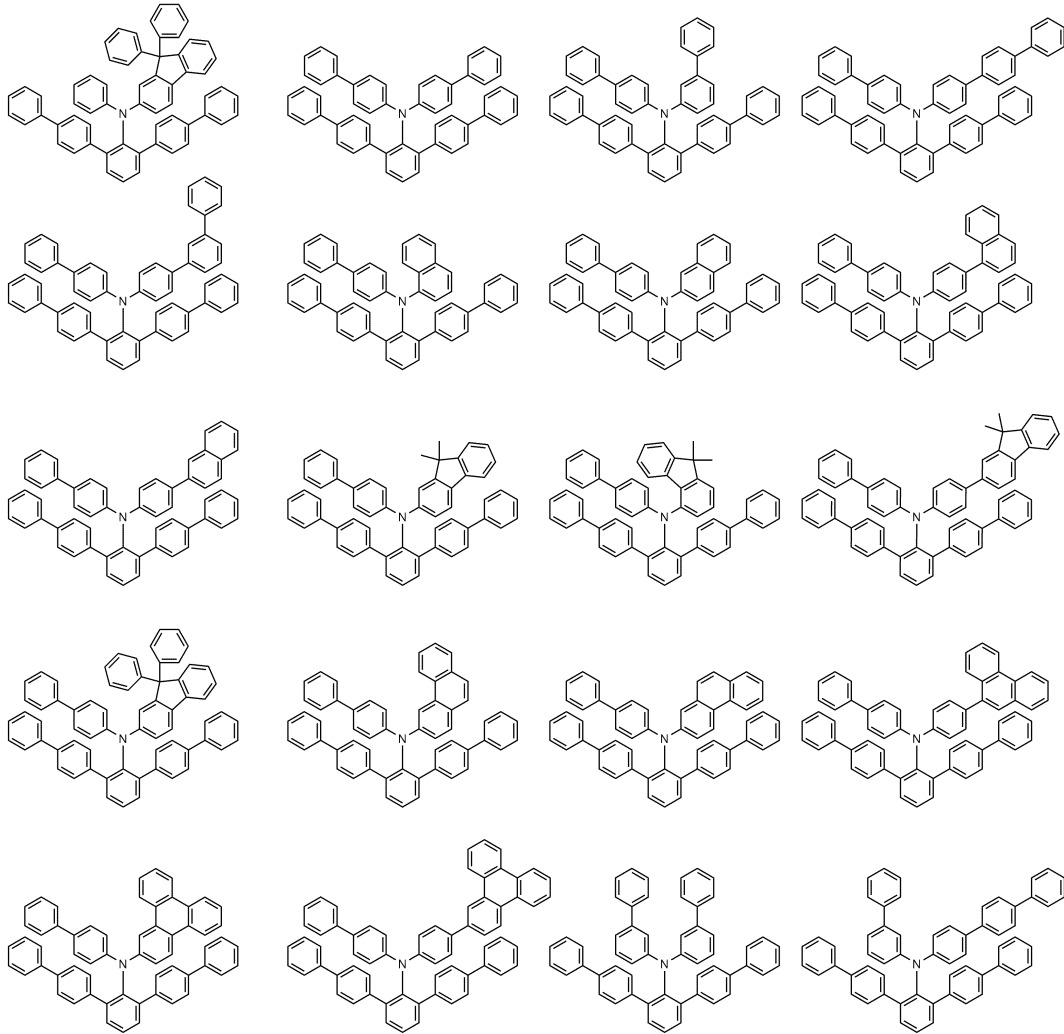
[0110]



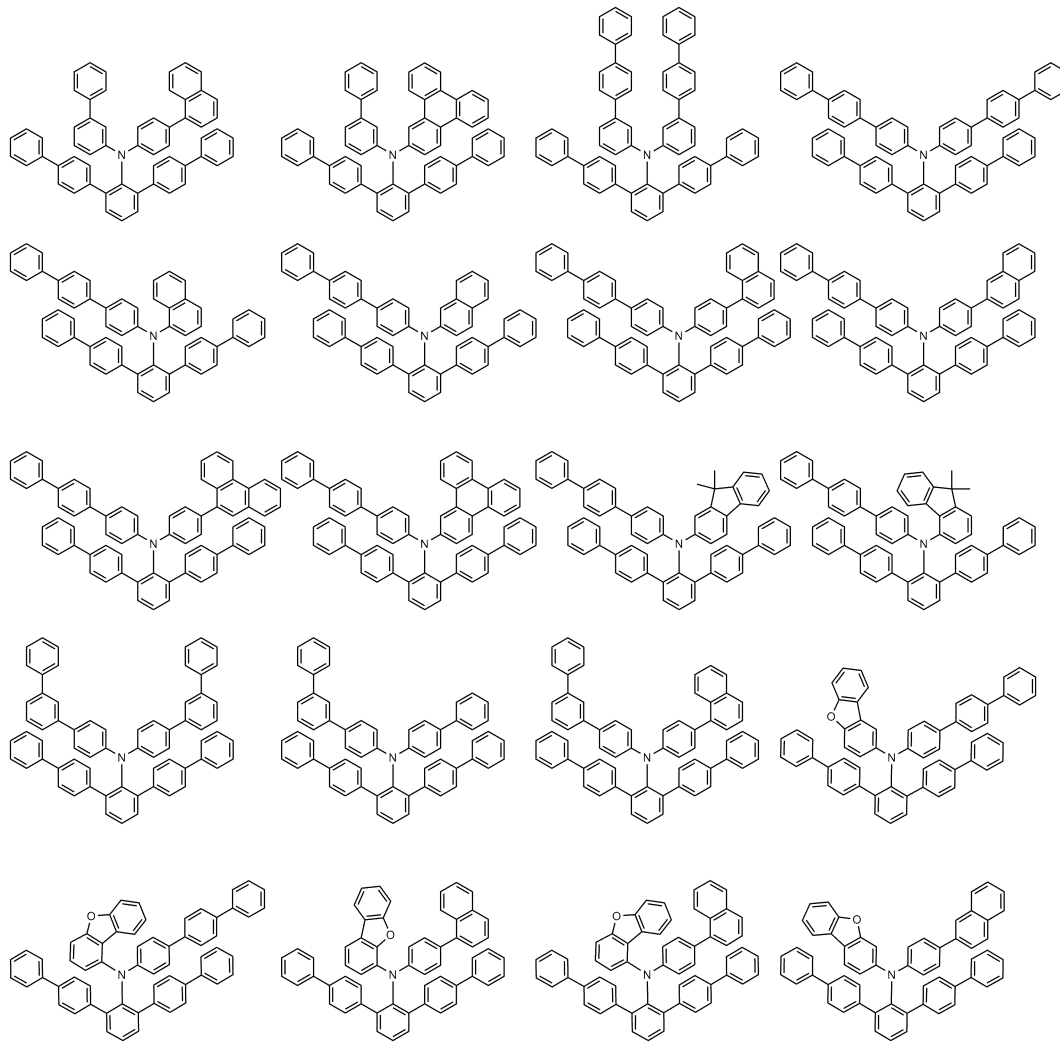
[0111]



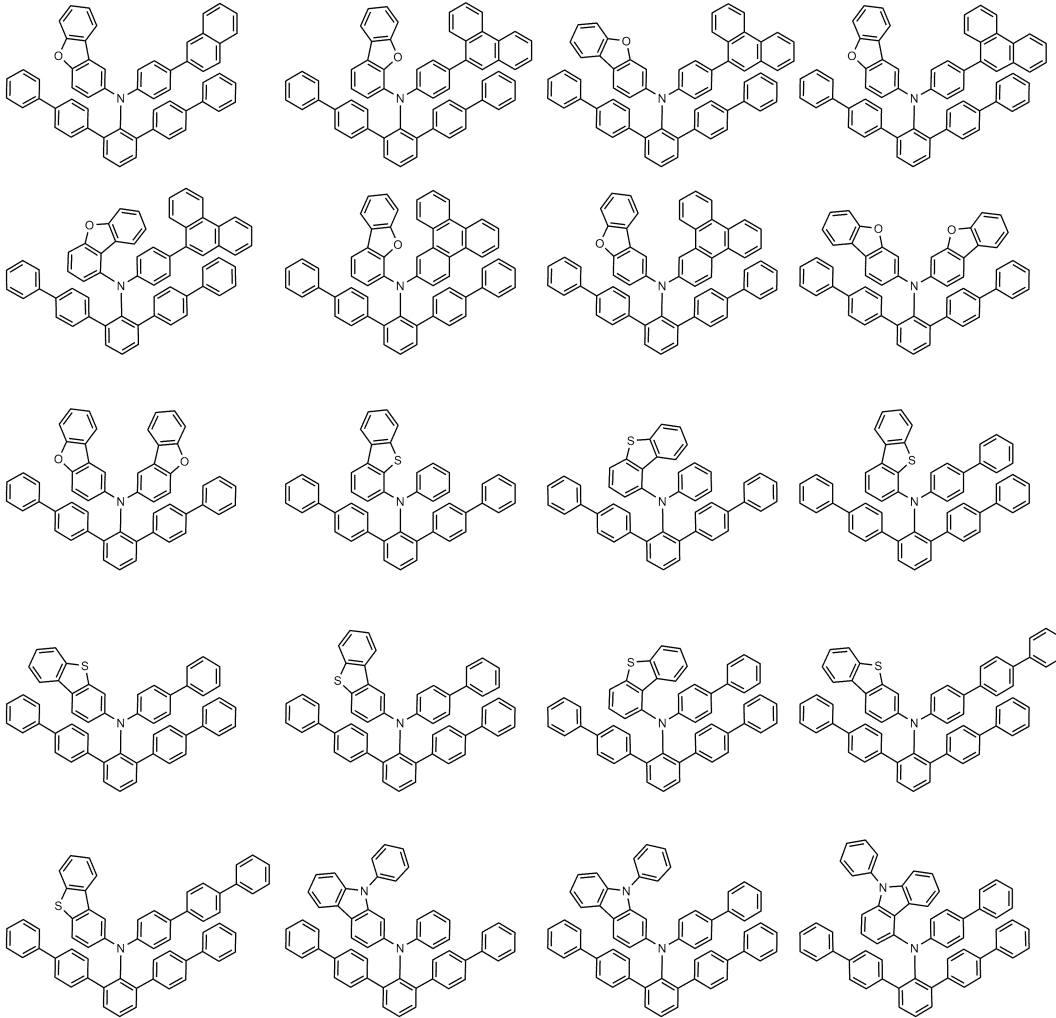
[0112]



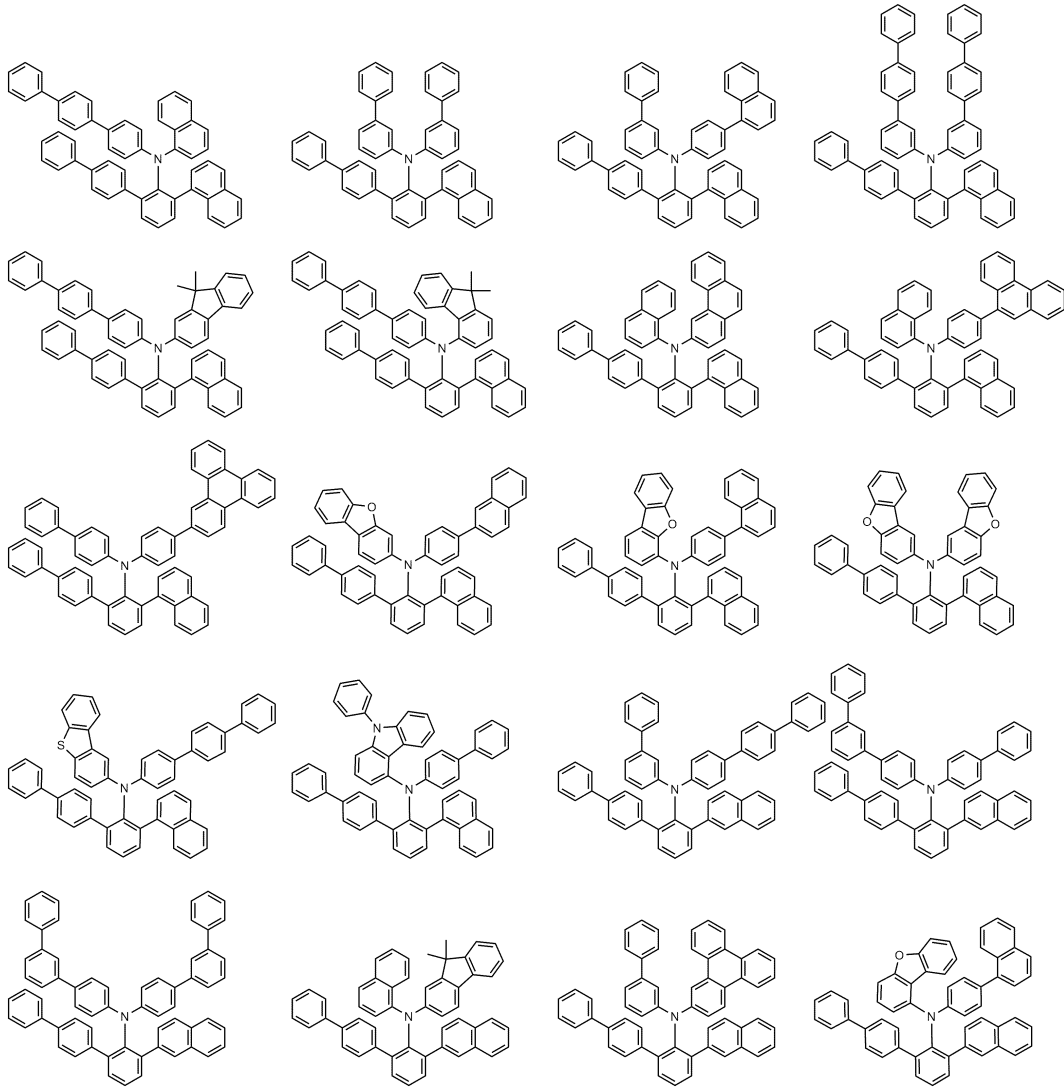
[0113]



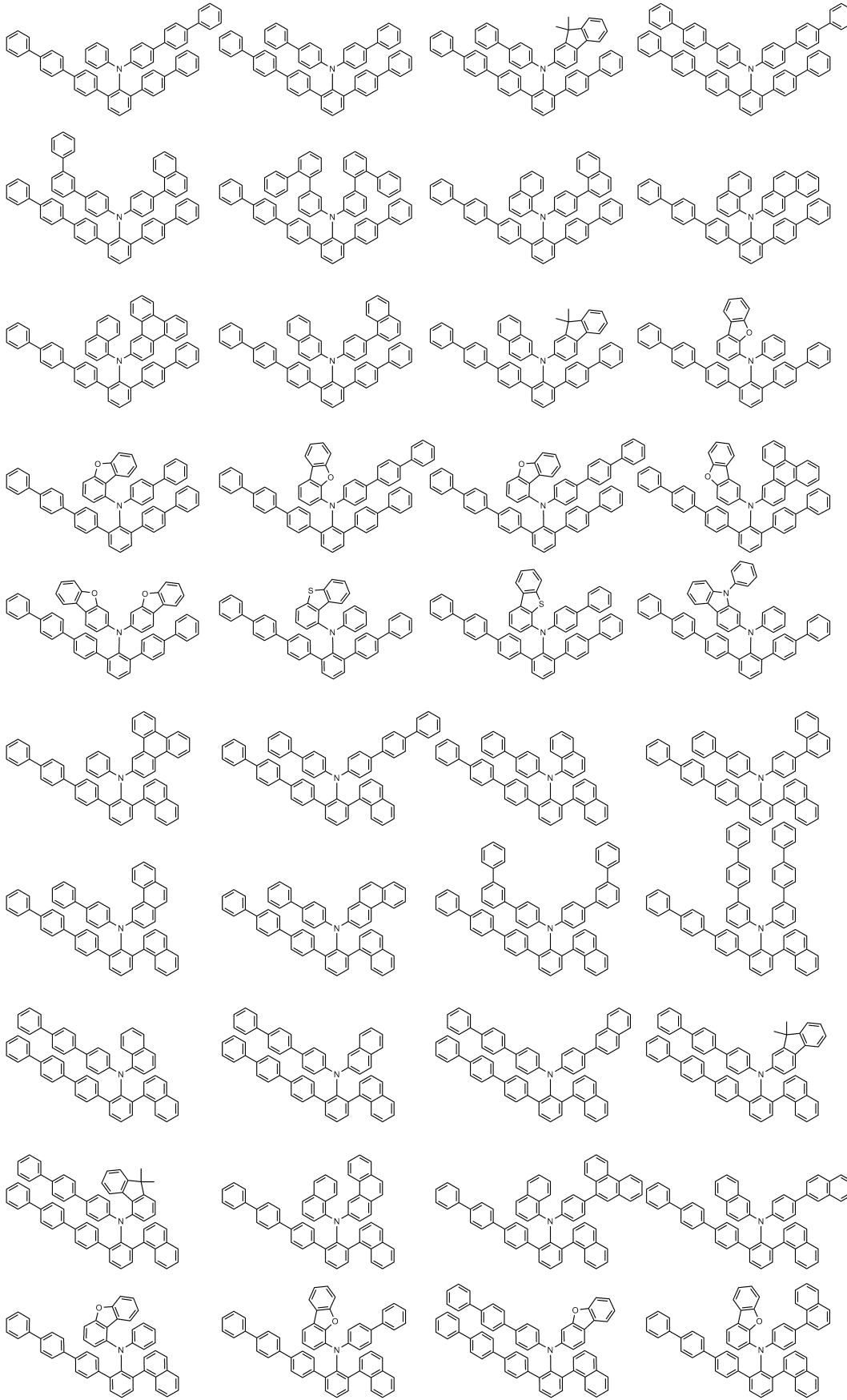
[0114]



[0115]

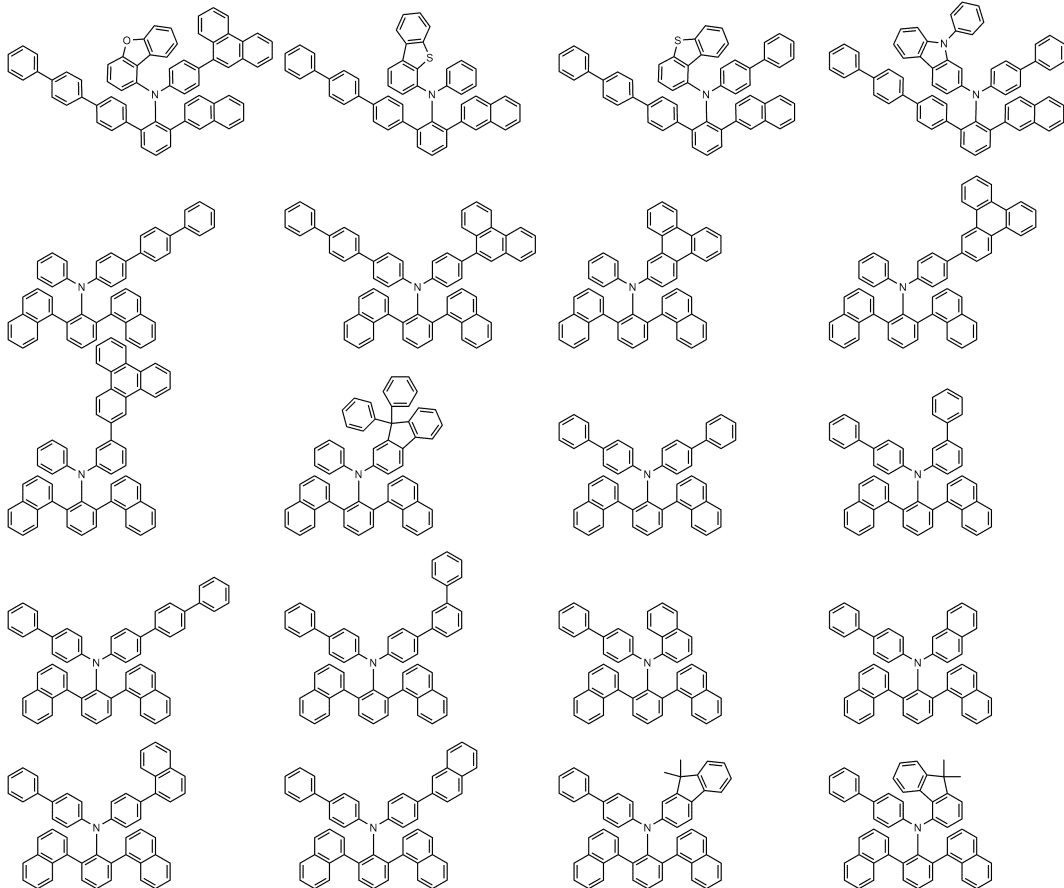
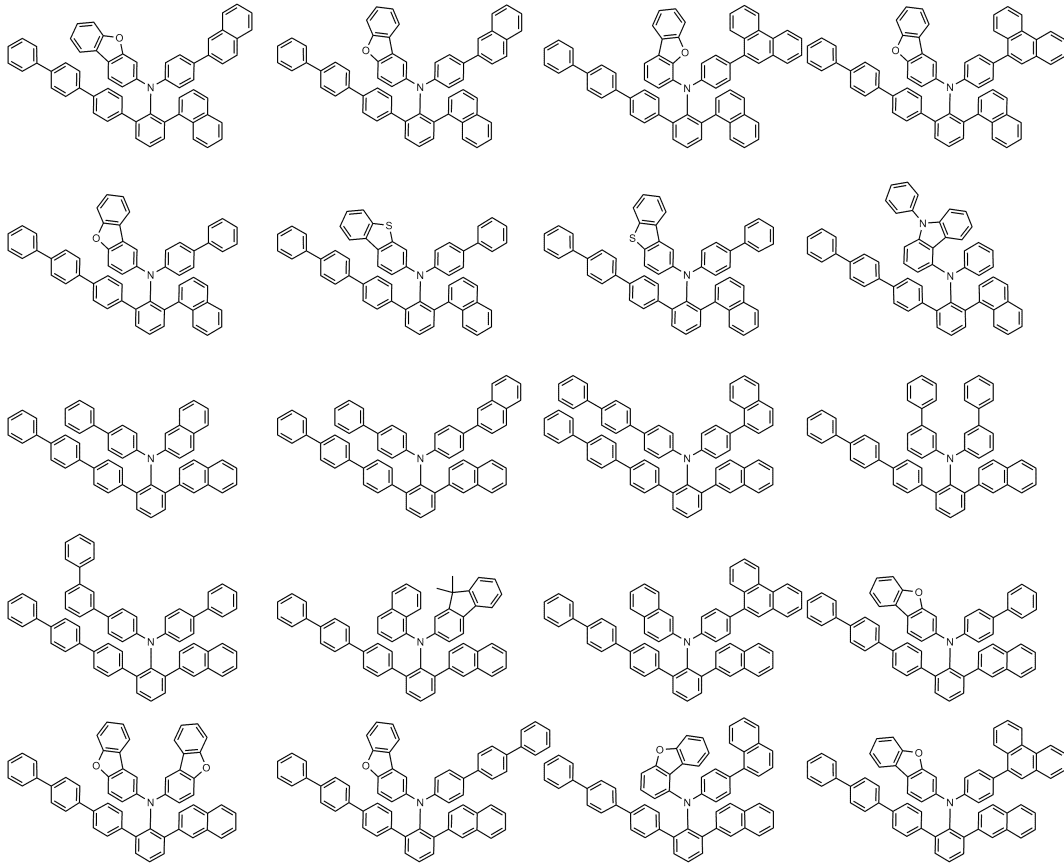


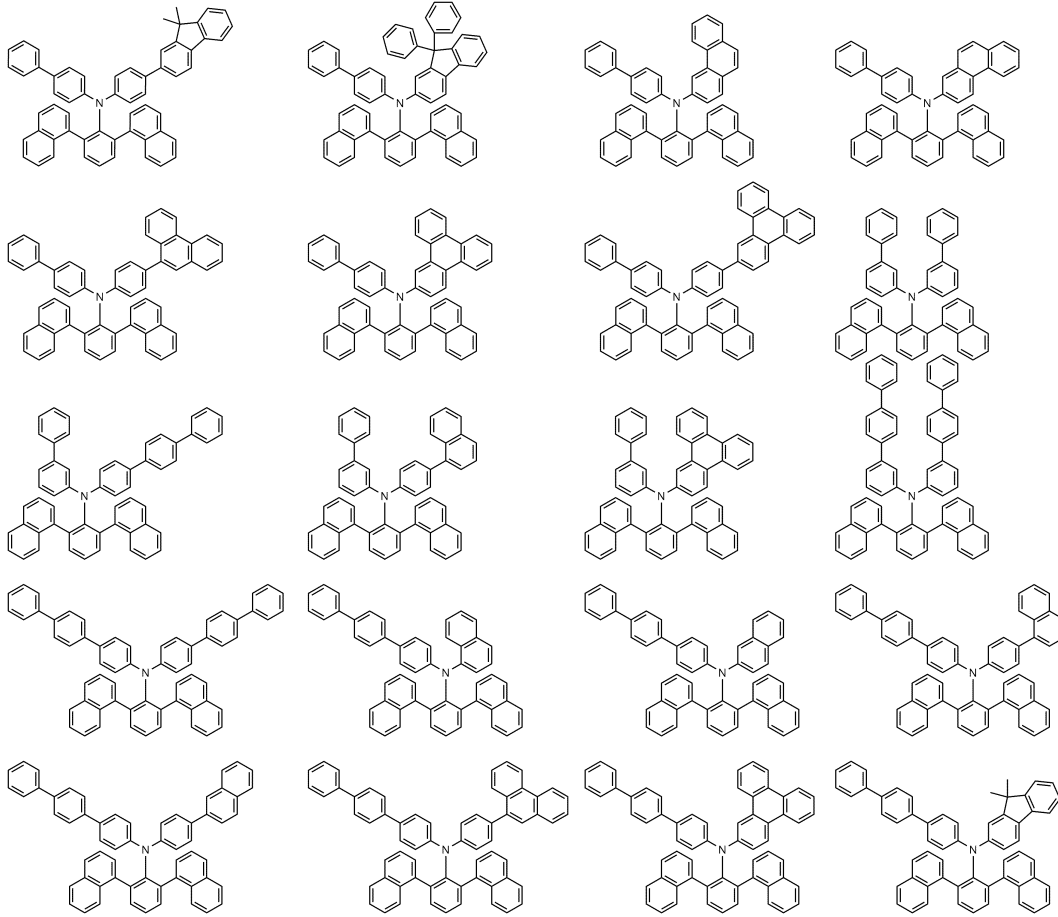
[0116]



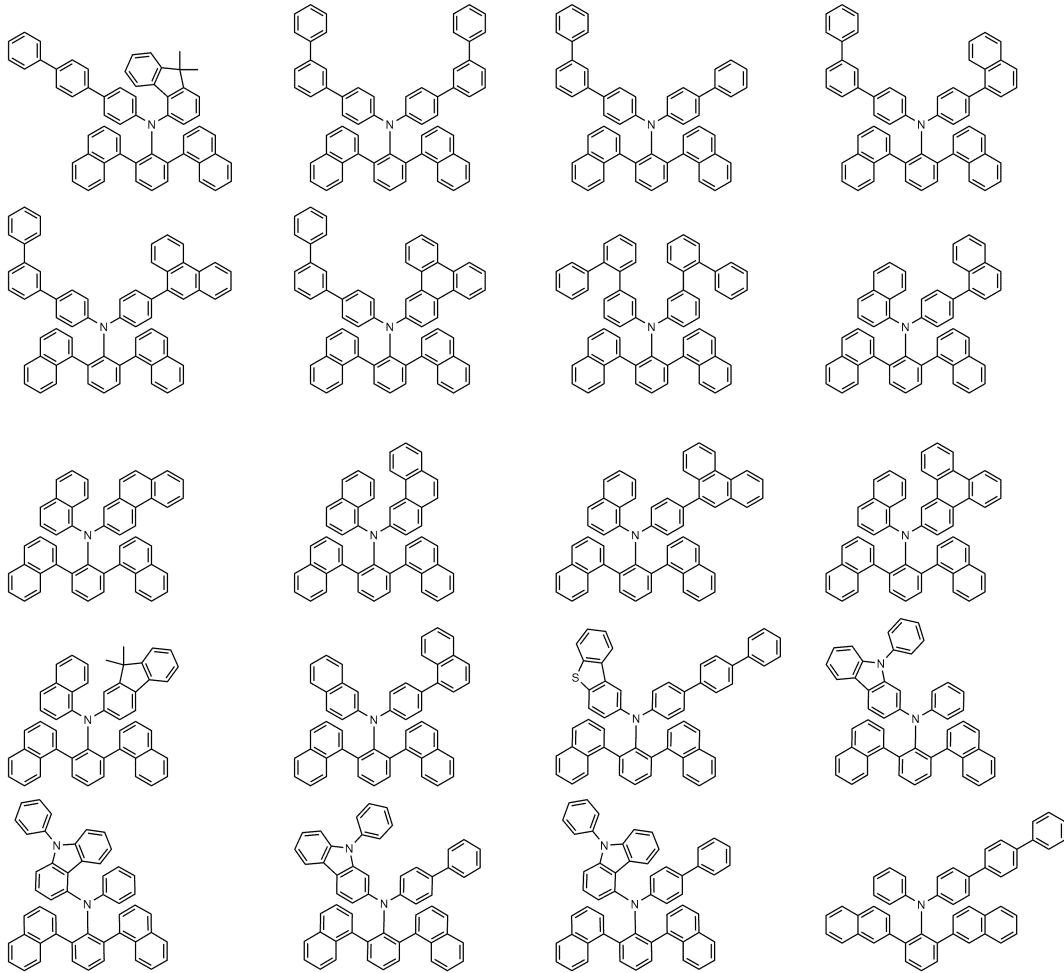
[0117]

[0118]

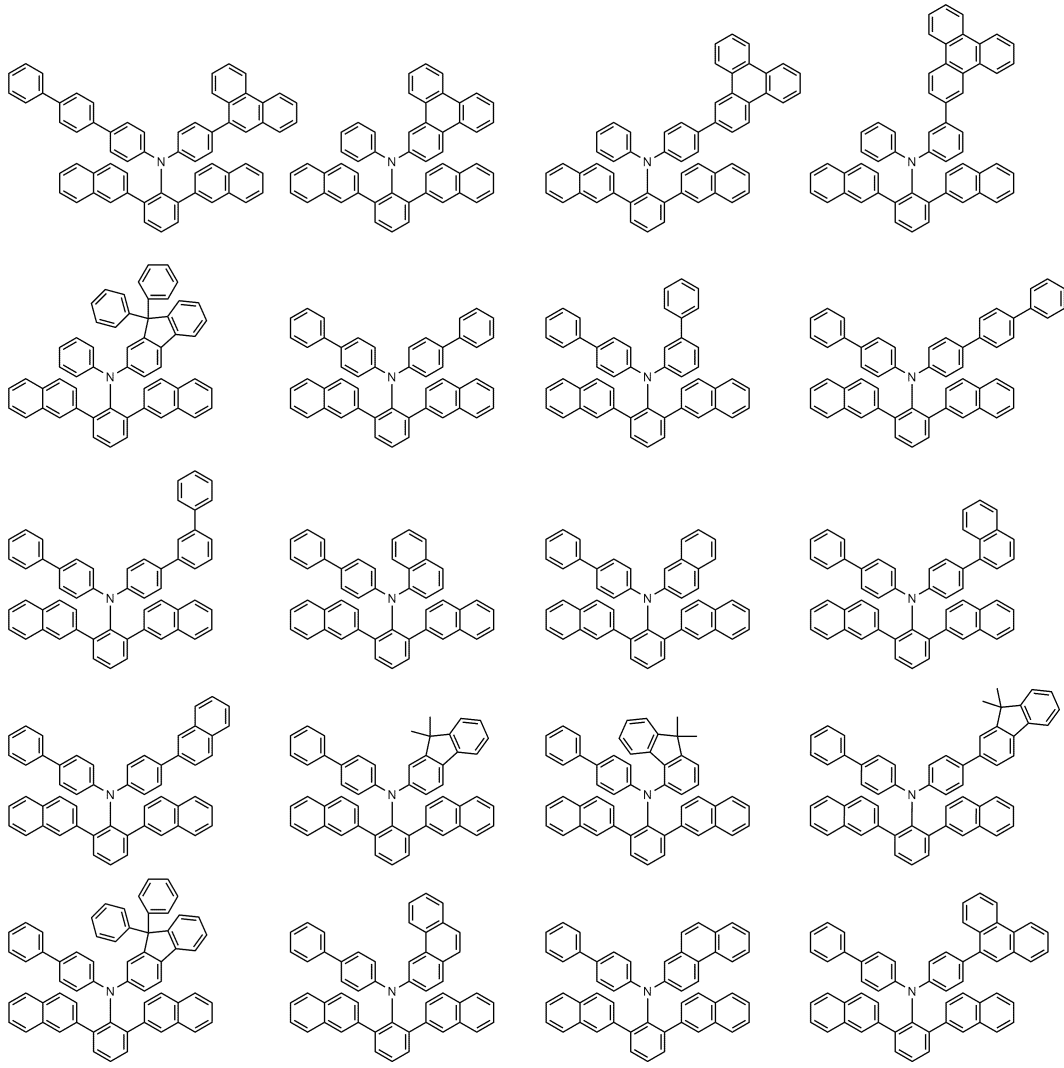




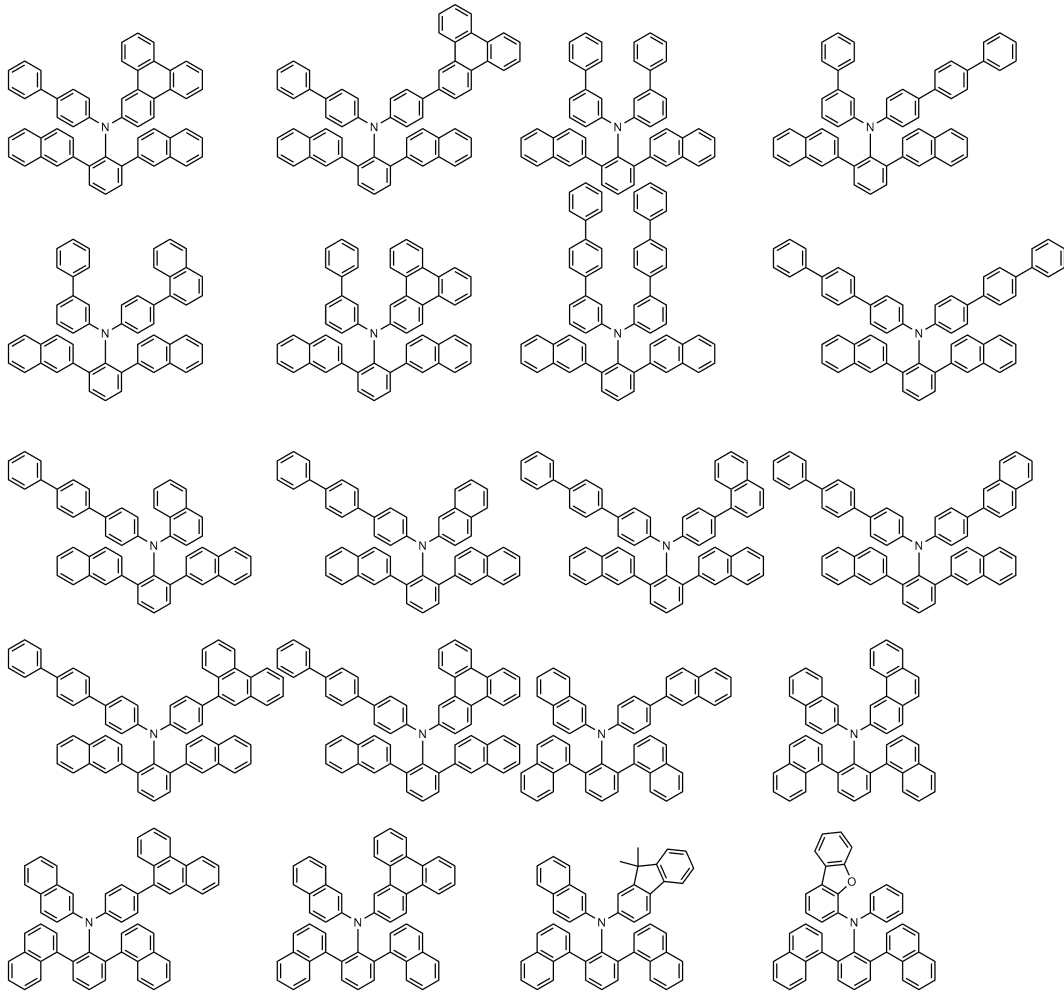
[0121]



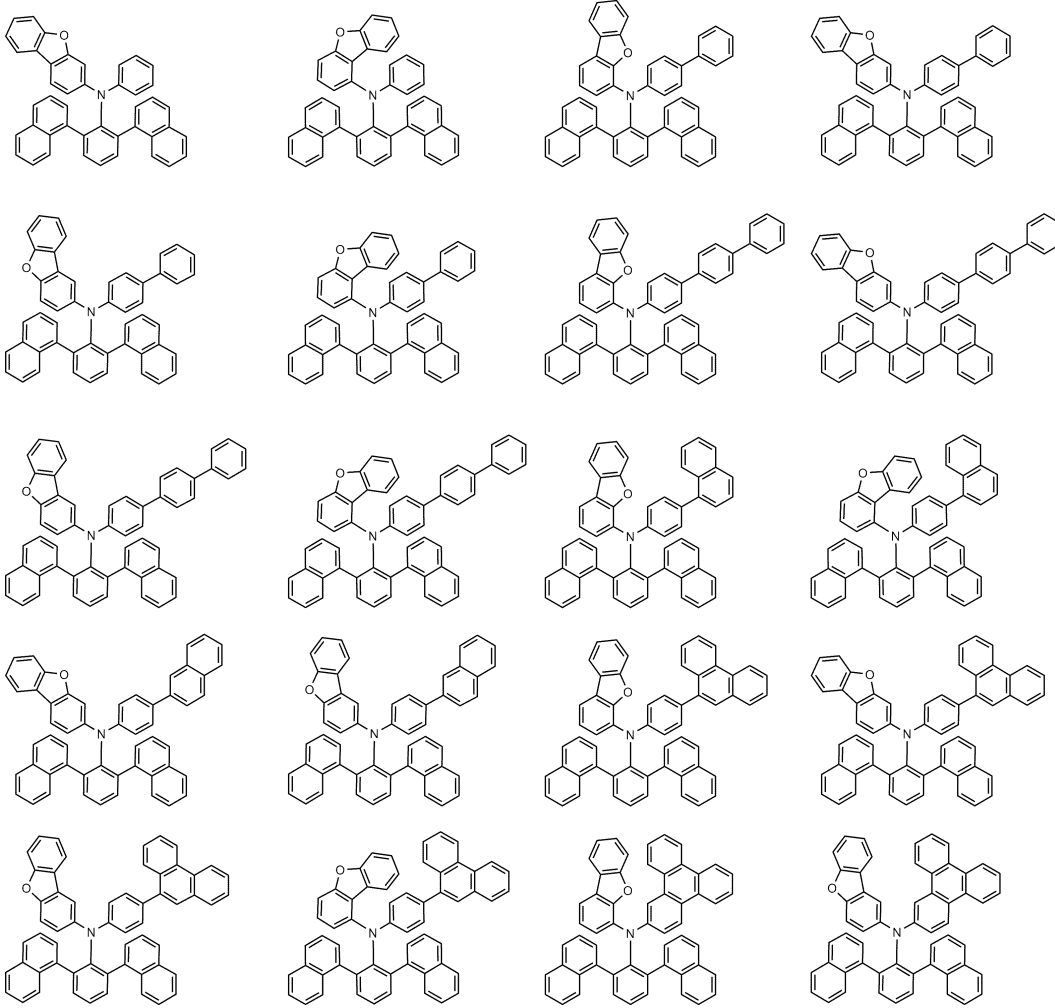
[0122]



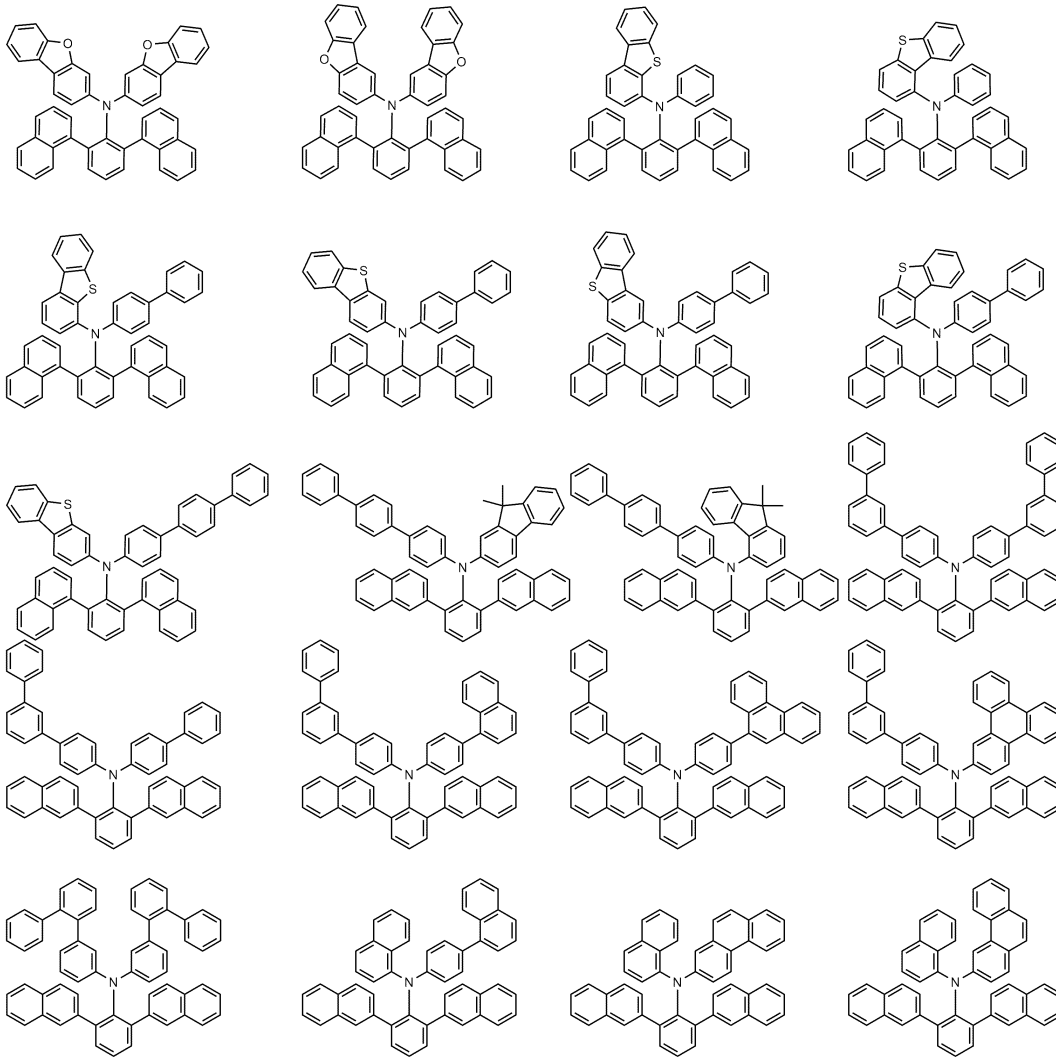
[0123]



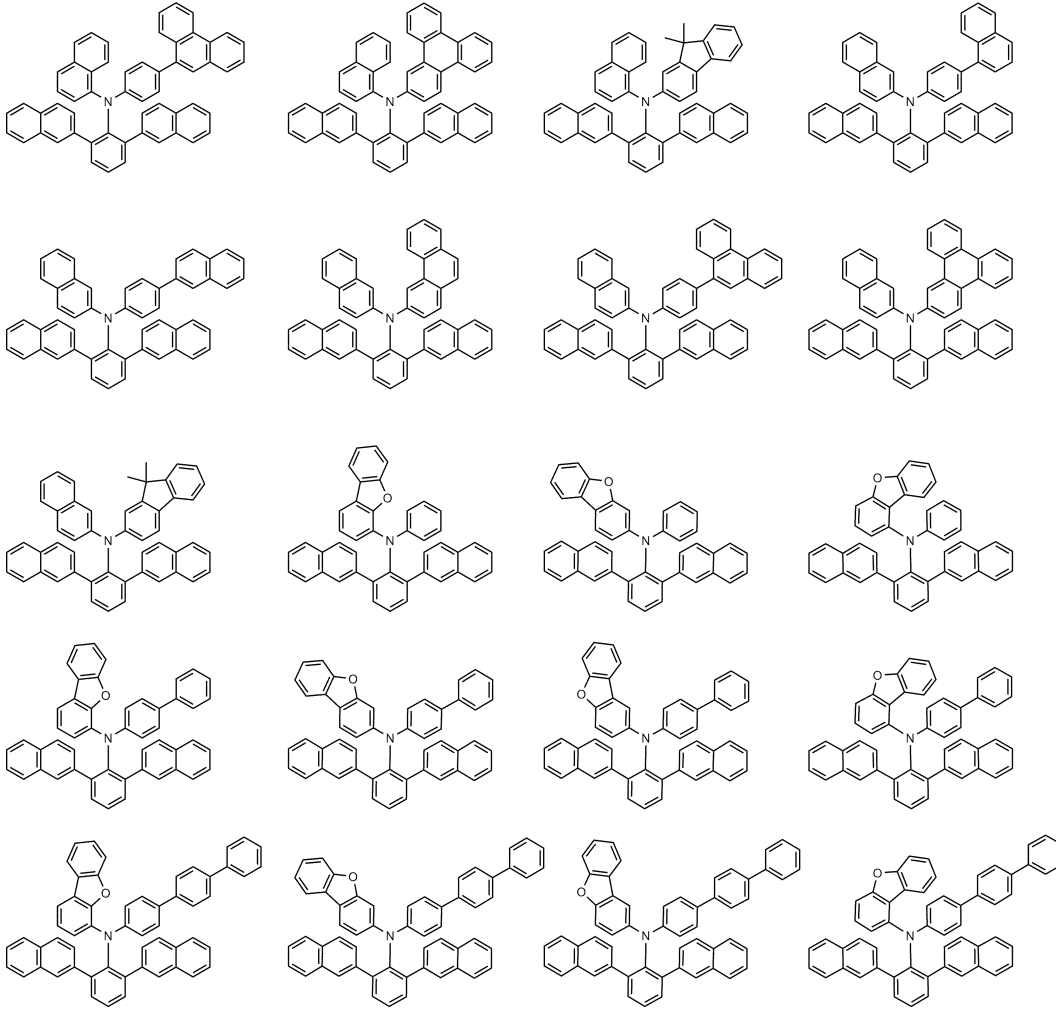
[0124]



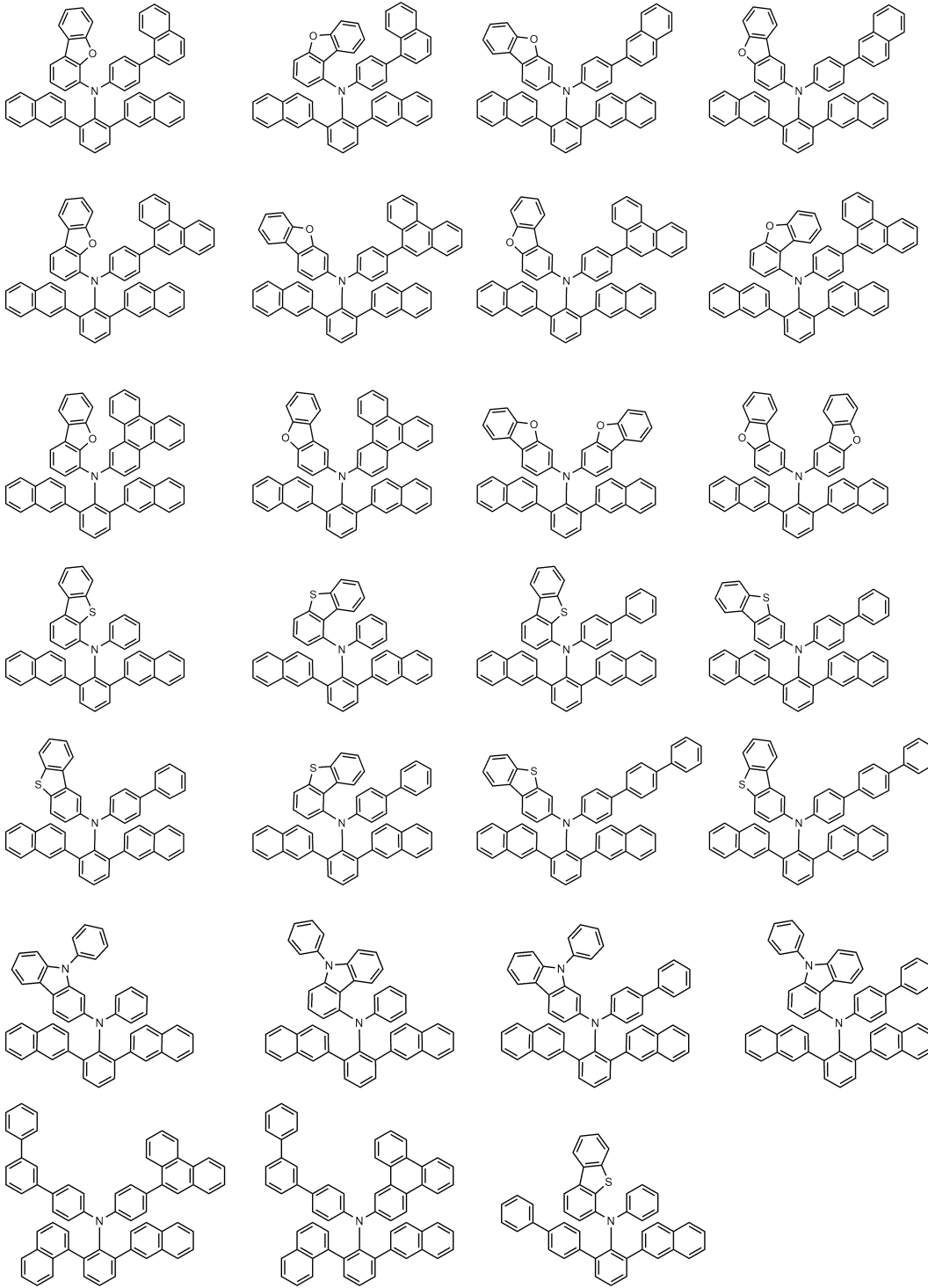
[0125]



[0126]

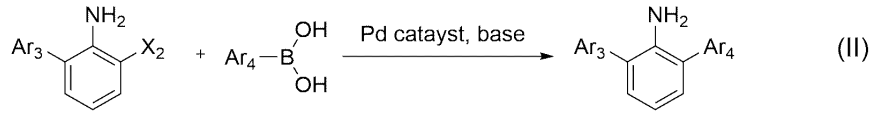
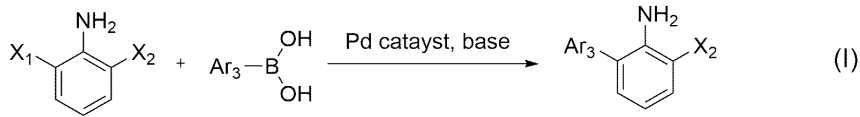


[0127]



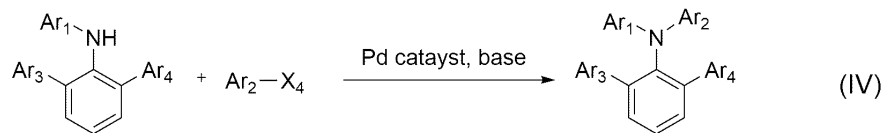
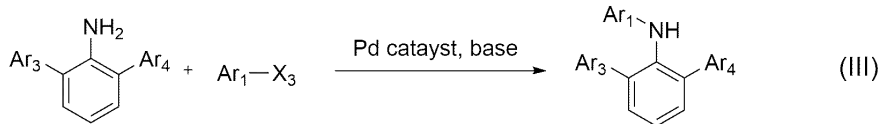
[0131] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 반응식 1 내지 2와 같은 방법으로 제조할 수 있다.

[0132] [반응식 1]



[0133]

[0134] [반응식 2]



[0135]

[0137] 상기 반응식 1 내지 2에서, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, Ar<sub>3</sub>, 및 Ar<sub>4</sub>는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같으며, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 할로젠기이다.

[0139] 구체적으로, 상기 반응식 1은, 페닐 아민의 오르소(ortho) 위치의 양쪽에 아릴기(Ar<sub>3</sub>, Ar<sub>4</sub>)을 도입하는 반응이다.

[0141] 상기 반응식 1은, 염기(base) 존재 하에서 팔라듐 촉매(Pd catalyst)를 사용하여 수행할 있다. 일례로, 상기 반응식 1에서 염기 성분으로는 포타슘 카보네이트(K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) 등을 사용할 수 있으며, 팔라듐 촉매로는 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐 (BTP, bis(tri-tert-butylphosphine)palladium) 등을 사용할 수 있다.

[0143] 상기 반응식 1 중 반응 (I)은 페닐 아민의 오르소(ortho) 위치 중 하나에 아릴기를 도입하는 반응으로, 오르소(ortho) 위치에 할로젠기가 치환된 페닐 아민을 염기(base) 존재 하에서 팔라듐 촉매(Pd catalyst)를 사용하여 아릴 보론산(Ar<sub>3</sub>-B(OH)<sub>2</sub>)과 반응시키는 것으로 이뤄진다. 이렇게 페닐 아민의 오르소(ortho) 위치 중 하나에 아릴기를 도입한 후에, 상기 반응식 1 중 반응 (II)와 같이 별도의 아릴 보론산(Ar<sub>4</sub>-B(OH)<sub>2</sub>)와 반응시켜 페닐 아민의 오르소(ortho) 위치 중 나머지 하나에도 모두 아릴기를 도입하는 것이다.

[0145] 여기서, Ar<sub>3</sub>와 Ar<sub>4</sub>가 동일한 경우에는, 상기 반응식 1 중 반응 (II)를 생략하고, 반응(I)에서 페닐 아민의 오르소(ortho) 위치 중 양쪽에 한꺼번에 아릴기를 도입하는 1단계 반응으로 수행할 수 있다.

[0147] 또한, 상기 반응식 2은, 반응식 1을 통해 생성된 오르소(ortho) 위치에 할로젠기가 치환된 페닐 아민에 아릴이나 헤테로아릴 그룹(Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>)을 추가로 도입하는 반응이다.

- [0149] 또한, 상기 반응식 2는, 염기(base) 존재 하에서 팔라듐 촉매(Pd catalyst)를 사용하여 수행할 있다. 상기 반응식 2에서 염기 성분으로는 소듐 터트-부톡사이드 (NaOtBu) 등을 사용할 수 있으며, Pd 촉매로는 비스(트리-터트-부틸포스핀)팔라듐 (BTP) 또는 1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센디클로로 팔라듐 (II) (Pd(dppf)Cl<sub>2</sub>) 등을 사용할 수 있다.
- [0151] 상기 반응식 2 중 반응 (III)은, 상기 반응식 1을 통해 생성된 오르소(ortho) 위치에 할로겐기가 치환된 페닐 아민, 즉, 디아릴 페닐 아민을 염기(base) 존재 하에서 팔라듐 촉매(Pd catalyst)를 사용하여 치환하고자 하는 아릴 또는 헤테로아릴을 포함하는 할로겐화물 (Ar<sub>1</sub>-X<sub>3</sub>)과 반응시키는 것으로 이뤄진다. 이렇게 반응 (III)을 통해 디아릴 페닐 아민 중 수소 대신에 아릴이나 헤테로아릴을 도입한 후에, 상기 반응식 1 중 반응 (IV)와 같이 별도의 아릴 또는 헤테로아릴을 포함하는 할로겐화물 (Ar<sub>2</sub>-X<sub>4</sub>)과 반응시켜 페닐 아민의 나머지 수소 대신에 모두 아릴 또는 헤테로아릴을 도입하는 것이다. 바람직하게는, X<sub>3</sub> 및 X<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 브로모 또는 클로로이다.
- [0153] 여기서, Ar<sub>1</sub>과 Ar<sub>2</sub>가 동일한 경우에는, 상기 반응식 2 중 반응 (IV)를 생략하고, 반응(III)에서 디아릴 페닐 아민의 수소 2개 대신에 아릴 또는 헤테로아릴을 양쪽에 한꺼번에 도입하는 1 단계 반응으로 수행할 수 있다.
- [0155] 상기 반응식 1 내지 2에 따른 제조 방법에서, 아민 치환 반응을 위한 반응기는 당업계에서 알려진 바에 따라 변경이 가능하다. 상기 제조 방법은 후술할 제조예에서 보다 구체화될 수 있다.
- [0157] 또한, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다. 일례로, 본 발명은 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물 층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자를 제공한다.
- [0159] 본 발명의 유기 발광 소자의 유기물 층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물 층으로서 정공주입층, 정공수송층, 전자억제층, 발광층, 정공억제층, 전자수송층, 전자주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기층을 포함할 수 있다.
- [0161] 또한, 상기 유기물 층은 정공주입층, 정공수송층, 또는 정공 주입과 수송을 동시에 하는 층을 포함할 수 있고, 상기 정공주입층, 정공수송층, 또는 정공 주입과 수송을 동시에 하는 층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.
- [0163] 또한, 상기 유기물 층은 전자억제층을 포함할 수 있고, 이때, 상기 전자억제층은 상기 발광층에 인접하여 위치하고, 상기 전자억제층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.
- [0165] 또한, 상기 유기물 층은 발광층을 포함할 수 있고, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 특히, 본 발명에 따른 화합물은 발광층의 도펀트로 사용할 수 있다.
- [0167] 또한, 상기 유기물 층은 정공억제층을 포함할 수 있고, 이때, 상기 정공억제층은 상기 발광층에 인접하여 위치하고, 상기 정공억제층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

- [0169] 또한, 상기 유기물 층은 전자수송층, 전자주입층, 또는 전자 주입과 수송을 동시에 하는 층을 포함할 수 있고, 상기 전자수송층, 전자주입층, 또는 전자 주입과 수송을 동시에 하는 층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.
- [0171] 또한, 상기 유기물 층은 정공수송층 및 발광층을 포함하고, 상기 정공수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0173] 또한, 상기 유기물 층은 전자억제층 및 발광층을 포함하고, 상기 전자억제층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0175] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 기판 상에 양극, 1층 이상의 유기물 층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조(normal type)의 유기 발광 소자일 수 있다. 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 기판 상에 음극, 1층 이상의 유기물 층 및 양극이 순차적으로 적층된 역방향 구조(inverted type)의 유기 발광 소자일 수 있다. 예컨대, 본 발명의 일실시예에 따른 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 2에 예시되어 있다.
- [0177] 도 1은 기판(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다.
- [0179] 도 2는 기판(1), 양극(2), 정공수송층(5), 전자억제층(6), 발광층(3), 전자수송층(7), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 정공수송층, 전자억제층, 발광층, 및 전자수송층 중 1층 이상에 포함될 수 있다.
- [0181] 도 3는 기판(1), 양극(2), 정공주입층(8), 정공수송층(5), 전자억제층(6), 발광층(3), 정공억제층(9), 전자수송층(7) 및 음극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 정공주입층, 정공수송층, 전자억제층, 발광층, 정공억제층, 및 전자수송층 중 1층 이상에 포함될 수 있다.
- [0183] 본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 상기 유기물 층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다. 또한, 상기 유기 발광 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.
- [0185] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 기판 상에 제1 전극, 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층시켜 제조할 수 있다. 이때, 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical Vapor Deposition)방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 전자억제층, 발광층, 정공억제층, 전자 수송층 등을 포함하는 유기물 층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시켜 제조할 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수 있다.
- [0187] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물 층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.

- [0189] 이와 같은 방법 외에도, 기관 상에 음극 물질로부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 제조할 수 있다(WO 2003/012890). 다만, 제조 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0191] 일례로, 상기 제1 전극은 양극이고, 상기 제2 전극은 음극이거나, 또는 상기 제1 전극은 음극이고, 상기 제2 전극은 양극이다.
- [0193] 상기 양극 물질로는 통상 유기물 층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 상기 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO<sub>2</sub>:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0195] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 상기 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0197] 상기 정공주입층은 전극으로부터 정공을 주입하는 층으로, 정공 주입 물질로는 정공을 수송하는 능력을 가져 양극에서의 정공 주입효과, 발광층 또는 발광재료에 대하여 우수한 정공 주입 효과를 갖고, 발광층에서 생성된 여기자의 전자주입층 또는 전자주입재료에의 이동을 방지하며, 또한, 박막 형성 능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물 층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrin), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone)계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정 되는 것은 아니다.
- [0199] 상기 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층으로, 정공 수송 물질로 양극이나 정공주입층으로부터 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.
- [0201] 상기 전자억제층은 정공수송층 상에 형성되어, 구체적으로 상기 전자억제층은 발광층에 접하여 구비되어, 전자의 과도한 이동을 방지하여 정공-전자간 결합 확률을 높여줌으로써 유기 발광 소자의 효율을 개선하는 역할을 하는 층을 의미한다. 상기 전자억제층은 전자가 발광층에서 이동하지 않도록 전자에 대한 이동성이 작은 물질이 적합하다.
- [0203] 상기 발광 물질로는 정공수송층과 전자수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송 받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq<sub>3</sub>); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAq; 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.

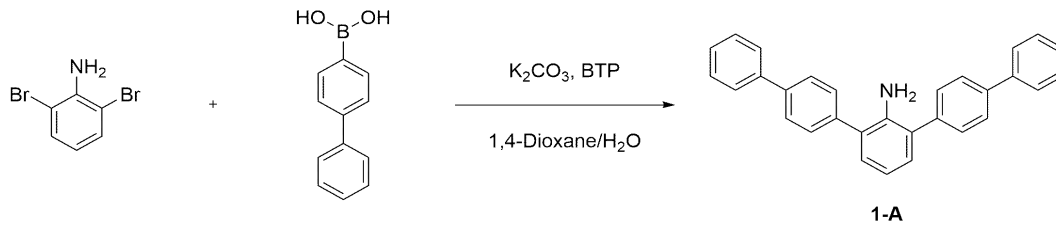
- [0205] 상기 발광층은 호스트 재료 및 도펀트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0207] 도펀트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스티릴아민 화합물, 붕소 착체, 플루오란텐 화합물, 금속 착체 등이 있다. 구체적으로 방향족 아민 유도체로는 치환 또는 비치환된 아릴아미노기를 갖는 축합 방향족환 유도체로서, 아릴아미노기를 갖는 피렌, 안트라센, 크리센, 페리플란텐 등이 있으며, 스티릴아민 화합물로는 치환 또는 비치환된 아릴아민에 적어도 1개의 아릴비닐기가 치환되어 있는 화합물로, 아릴기, 실릴기, 알킬기, 사이클로알킬기 및 아릴아미노기로 이루어진 군에서 1 또는 2 이상 선택되는 치환기가 치환 또는 비치환된다. 구체적으로 스티릴아민, 스티릴디아민, 스티릴트리아민, 스티릴테트라아민 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 또한, 금속 착체로는 이리듐 착체, 백금 착체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0209] 상기 정공억제층은 발광층 상에 형성되어, 구체적으로 상기 정공억제층은 발광층에 접하여 구비되어, 정공의 과도한 이동을 방지하여 정공-전자간 결합 확률을 높여줌으로써 유기 발광 소자의 효율을 개선하는 역할을 하는 층을 의미한다. 상기 전자억제층은 정공이 발광층에서 다시 이동하지 않도록 정공에 대한 이동성이 작은 물질이 적합하다.
- [0211] 상기 전자수송층은 전자주입층으로부터 전자를 수취하여 발광층까지 전자를 수송하는 층으로, 구체적으로, 상기 전자수송층은 상기 정공억제층에 접하여 구비된다. 특히 상기 전자수송층에서 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<sub>3</sub>를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 전자 수송층은 종래기술에 따라 사용된 바와 같이 임의의 원하는 캐소드 물질과 함께 사용할 수 있다. 특히, 적절한 캐소드 물질의 예는 낮은 일함수를 가지고 알루미늄층 또는 실버층이 뒤따르는 통상적인 물질이다. 구체적으로 세슘, 바륨, 칼슘, 이테르븀 및 사마륨이고, 각 경우 알루미늄 층 또는 실버층이 뒤따른다.
- [0213] 상기 전자주입층은 전극으로부터 전자를 주입하는 층으로, 전자를 수송하는 능력을 갖고, 음극으로부터의 전자 주입 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 전자주입 효과를 가지며, 발광층에서 생성된 여기자의 정공 주입층에의 이동을 방지하고, 또한, 박막형성능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 구체적으로는 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀸논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다이하이드록시, 트리아졸, 이미다졸, 페틸렌 테트라카복실산, 프레오넬리텐 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 질소 함유 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0215] 상기 금속 착체 화합물로서는 8-하이드록시퀴놀리나토 리튬, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)아연, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)구리, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)망간, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(2-메틸-8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)갈륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)아연, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)클로로갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(o-크레졸라토)갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(1-나프톨라토)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(2-나프톨라토)갈륨 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0217] 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0219] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자 외에도 유기 태양 전지 또는 유기 트랜지스터에 포함될 수 있다.

[0221] 본 발명에 따른 신규 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자의 제조는 이하 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나 하기 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0223] **합성예 1. 화합물 1의 합성**

[0224] **단계 1) 화합물 1-A의 합성**

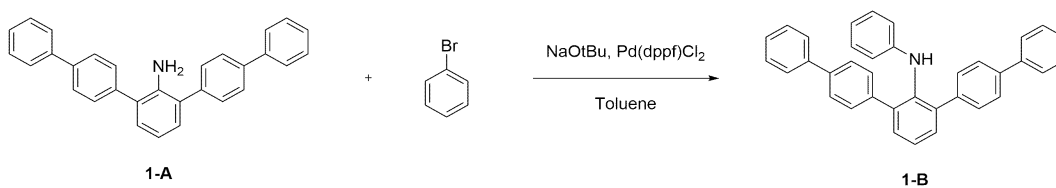


[0225]

[0226] 2,6-디브로모아닐린 (50.0 g, 199.27 mmol)과 [1,1'-바이페닐]-4-일보론 산 (82.87 g, 418.46 mmol)을 이용하여 상기 합성예 1의 단계 1과 동일한 방법으로 상기 화합물 7-A (68.0 g, 85.84% 수율)를 수득하였다.

[0228] 2,6-디브로모아닐린 (50.0 g, 199.27 mmol)과 [1,1'-바이페닐]-4-일보론 산 (82.87 g, 418.46 mmol)을 1,4-다이옥산(700 mL)에 용해 후, 포타슘 카보네이트 (130.71 g, 996.35 mmol, 물 350 mL) 용액을 가한 후, 10 분 동안 가열 교반하였다. 상기 용액에 1,4-다이옥산(10 mL)에 용해시킨 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐 (BTP, 0.20 g, 0.40 mmol)을 가한 후 1 시간 동안 가열 교반하였다. 반응 종결 및 여과 후, 클로로포름과 물로 층분리하였다. 용매 제거 후 에틸아세테이트로 재결정하여 상기 화합물 1-A (68.0 g, 85.84% 수율)를 수득하였다.

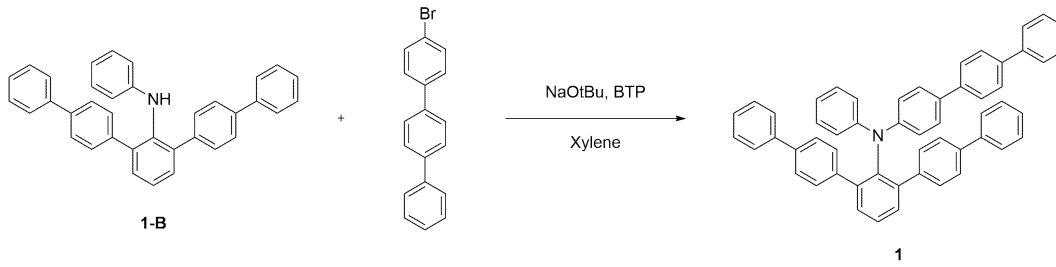
[0230] **단계 2) 화합물 1-B의 합성**



[0231]

[0232] 상기 합성예 1의 단계 1에서 수득한 화합물 1-A (40.0 g, 100.63 mmol)와 브로모벤젠 (15.80 g, 100.63 mmol), 그리고 소듐 tert-부톡사이드 (21.94 g, 228.27 mmol)에 톨루엔(250 mL)을 가한 후, 10 분 동안 가열 교반하였다. 상기 혼합물에 톨루엔(30 mL)에 용해시킨 1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센디클로로팔라듐(II) (Pd(dppf)Cl<sub>2</sub>, 0.60 g, 0.82 mmol)을 가한 후 1 시간 동안 가열 교반하였다. 반응 종결 및 여과 후, 톨루엔과 물로 층분리하였다. 용매 제거 후 에틸아세테이트로 재결정하여 상기 화합물 1-B (37.0 g, 77.63% 수율)를 수득하였다.

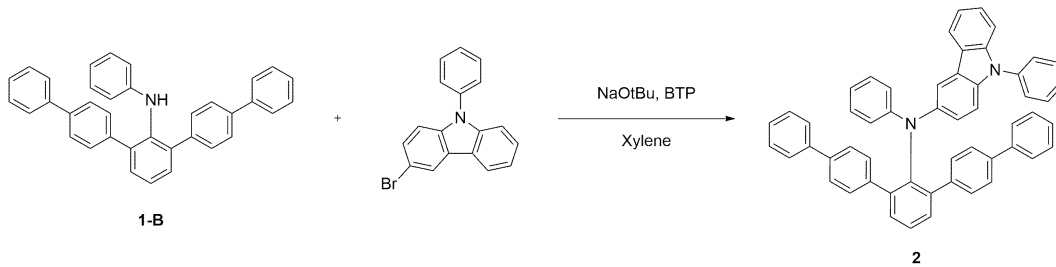
[0234] 단계 3) 화합물 1의 합성



[0235]

[0236] 상기 합성에 1의 단계 2에서 수득한 화합물 1-B (20.0 g, 42.23 mmol)와 4-브로모-1,1':4',1''-터페닐 (13.32 g, 43.07 mmol) 그리고 소듐 터트-부톡사이드 (NaOtBu, 8.37 g, 87.11 mmol)에 자일렌(200 mL)을 가한 후, 10 분 동안 가열 교반하였다. 상기 혼합물에 자일렌(10 mL)에 용해시킨 비스(트리-터트-부틸포스핀)팔라듐 (BTP, 0.16 g, 0.31 mmol)을 가한 후 1 시간 동안 가열 교반하였다. 반응 종결 및 여과 후, 톨루엔과 물로 층분리하였다. 용매 제거 후 에틸아세테이트로 재결정하여 상기 화합물 1 (21.0 g, 79.46% 수율)을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 626)

[0238] 합성예 2. 화합물 2의 합성

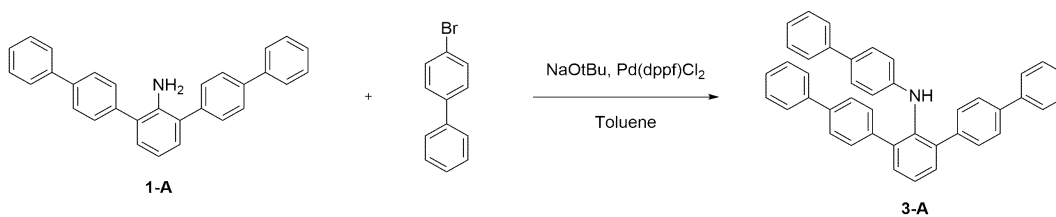


[0239]

[0240] 상기 합성에 1의 단계 2에서 수득한 화합물 1-B (20.0 g, 42.23 mmol)와 3-브로모-9-페닐-9H-카바졸 (13.88 g, 43.07 mmol)을 이용하여 상기 합성에 1의 단계 3과 동일한 방법으로 상기 화합물 2 (21.5 g, 79.70% 수율)를 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 639)

[0242] 합성예 3. 화합물 3의 합성

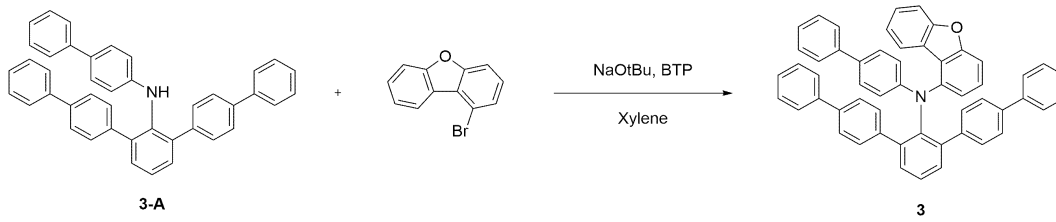
[0243] 단계 1) 화합물 3-A의 합성



[0244]

[0245] 상기 합성에 1의 단계 1에서 수득한 화합물 1-A (40.0 g, 100.63 mmol)와 4-브로모-1,1'-바이페닐 (23.46 g, 100.63 mmol)을 이용하여 상기 합성에 1의 단계 2와 동일한 방법으로 상기 화합물 3-A (47.7 g, 86.23% 수율)를 수득하였다.

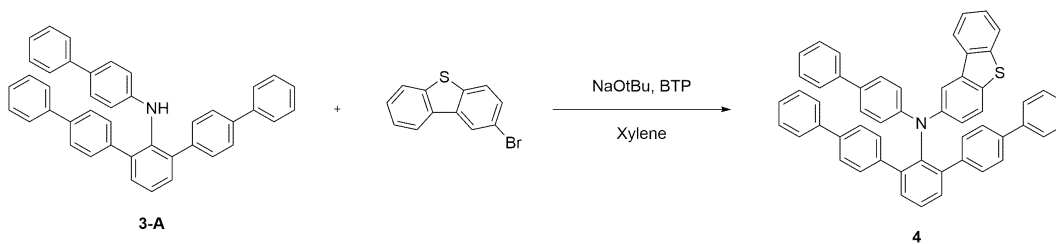
[0247] 단계 2) 화합물 3의 합성



[0248]

[0249] 상기 합성예 3의 단계 1에서 수득한 화합물 3-A (20.0 g, 36.38 mmol)와 1-브로모디벤조[*b,d*]퓨란 (9.17 g, 37.11 mmol)을 이용하여 상기 합성예 1의 단계 3과 동일한 방법으로 상기 화합물 3 (19.5 g, 74.87% 수율)을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 716)

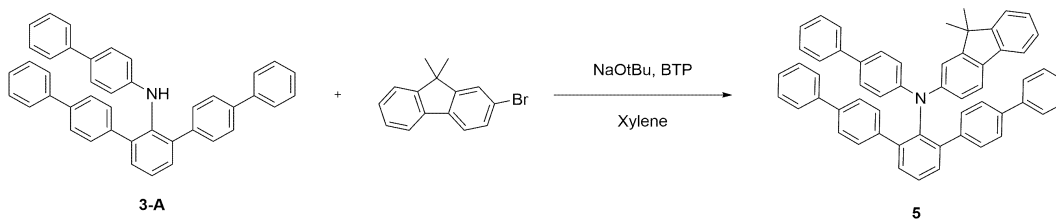
[0251] 합성예 4. 화합물 4의 합성



[0252]

[0253] 상기 합성예 3의 단계 1에서 수득한 화합물 3-A (20.0 g, 36.38 mmol)와 2-브로모디벤조[*b,d*]사이오렌 (9.77 g, 37.11 mmol)을 이용하여 상기 합성예 1의 단계 3과 동일한 방법으로 상기 화합물 4 (20.4 g, 76.61% 수율)를 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 732)

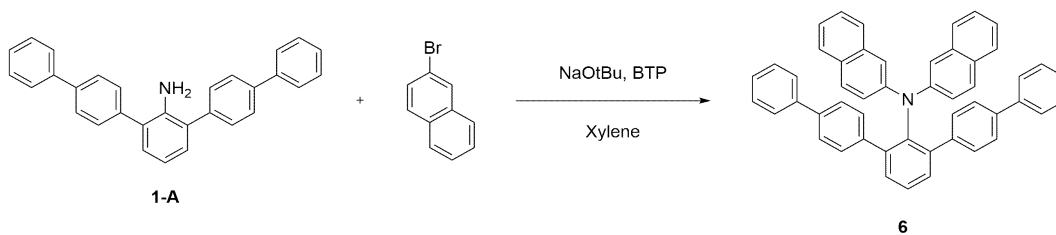
[0255] 합성예 5. 화합물 5의 합성



[0256]

[0257] 상기 합성예 3의 단계 1에서 수득한 화합물 3-A (20.0 g, 36.38 mmol)와 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 (10.14 g, 37.11 mmol)을 이용하여 상기 합성예 1의 단계 3과 동일한 방법으로 상기 화합물 5 (21.7 g, 80.40% 수율)를 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 742)

[0259] 합성예 6. 화합물 6의 합성

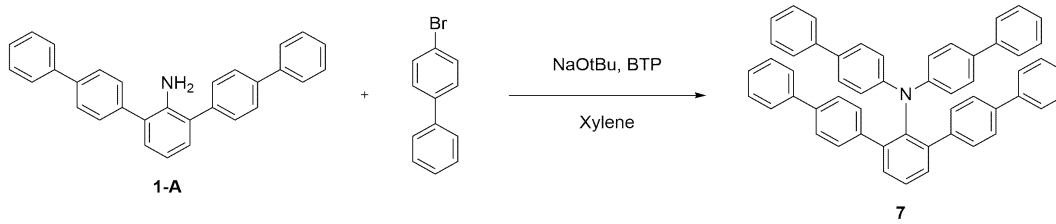


[0260]

[0261] 상기 합성예 1의 단계 1에서 수득한 화합물 1-A (15.0 g, 37.73 mmol)와 2-브로모나프탈렌 (16.02 g, 77.35 mmol) 그리고 소듐 터트-부톡사이드 (16.45 g, 171.19 mmol)에 자일렌(200 mL)을 가한 후, 10분 동안 가열 교반하였다. 상기 혼합물에 자일렌(15 mL)에 용해시킨 비스(트리-터트-부틸포스핀)팔라듐 (0.25 g, 0.49 mmol)을

가한 후 1 시간 동안 가열 교반하였다. 반응 종결 및 여과 후, 톨루엔과 물로 층분리하였다. 용매 제거 후 에틸 아세테이트로 재결정하여 상기 화합물 6 (20.5 g, 83.61% 수율)을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 650)

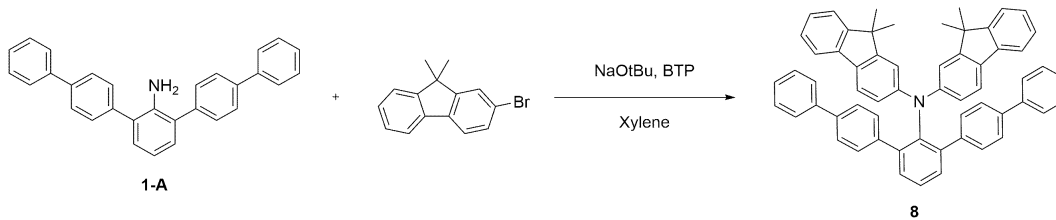
[0263] **합성예 7. 화합물 7의 합성**



[0264]

[0265] 상기 합성예 1의 단계 1에서 수득한 화합물 1-A (15.0 g, 37.73 mmol)와 4-브로모-1,1'-바이페닐 (18.03 g, 77.35 mmol)을 이용하여 상기 합성예 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 7 (22.5 g, 84.96% 수율)을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 702)

[0267] **합성예 8. 화합물 8의 합성**

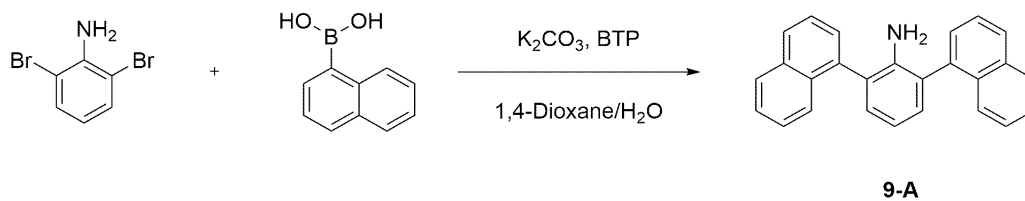


[0268]

[0269] 상기 합성예 1의 단계 1에서 수득한 화합물 1-A (15.0 g, 37.73 mmol)와 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 (21.13 g, 77.35 mmol)을 이용하여 상기 합성예 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 8 (23.4 g, 79.30% 수율)을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 782)

[0271] **합성예 9. 화합물 9의 합성**

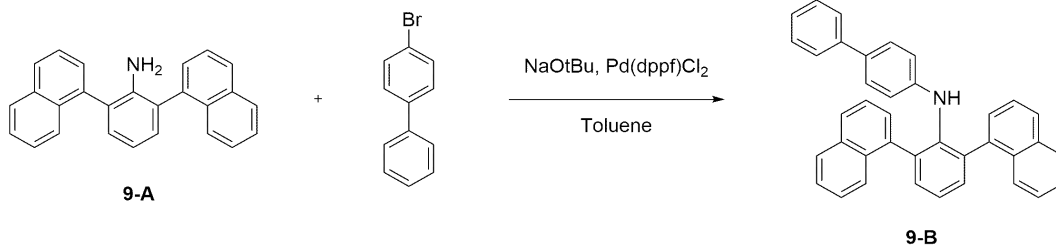
[0272] **단계 1) 화합물 9-A의 합성**



[0273]

[0274] 2,6-디브로모아닐린 (50.0 g, 199.27 mmol)과 나프탈렌-1-일보론 산 (71.97 g, 418.46 mmol)을 이용하여 상기 합성예 1의 단계 1과 동일한 방법으로 상기 화합물 9-A (52.0 g, 75.54% 수율)를 수득하였다.

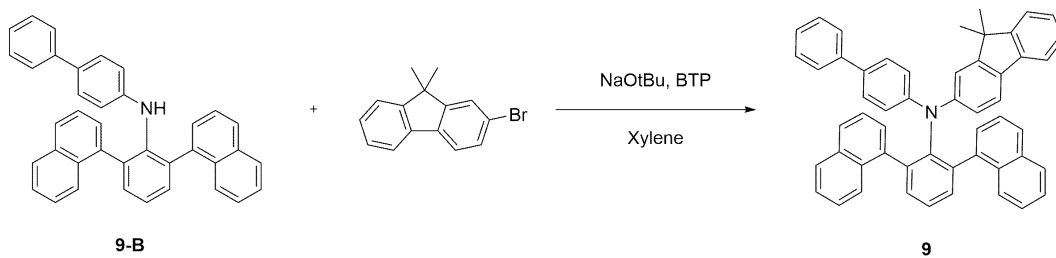
[0276] 단계 2) 화합물 9-B의 합성



[0277]

[0278] 상기 합성에 9의 단계 1에서 수득한 화합물 9-A (40.0 g, 115.79 mmol)와 4-브로모-1,1'-바이페닐 (26.99 g, 115.79 mmol)을 이용하여 상기 합성에 1의 단계 2와 동일한 방법으로 상기 화합물 9-B (46.1 g, 80.00% 수율)를 수득하였다.

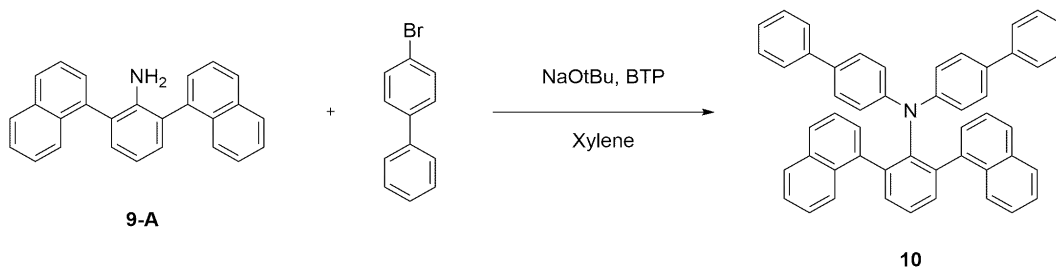
[0280] 단계 3) 화합물 9의 합성



[0281]

[0282] 상기 합성에 9의 단계 2에서 수득한 화합물 9-B (20.0 g, 40.19 mmol)와 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 (11.20 g, 40.99 mmol)을 이용하여 상기 합성에 1의 단계 3과 동일한 방법으로 상기 화합물 9 (21.8 g, 78.62% 수율)를 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 690)

[0284] 합성에 10. 화합물 10의 합성

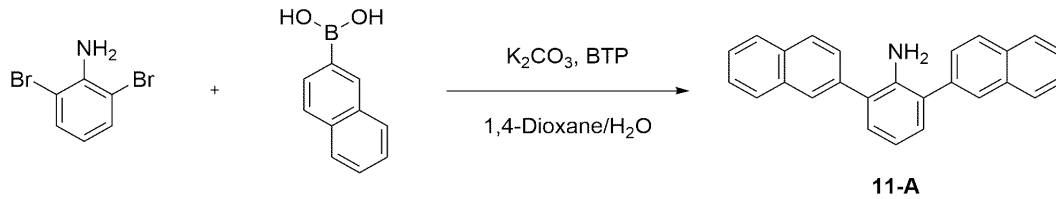


[0285]

[0286] 상기 합성에 9의 단계 1에서 수득한 화합물 9-A (15.0 g, 43.42 mmol)와 4-브로모-1,1'-바이페닐 (20.75 g, 89.01 mmol)을 이용하여 상기 합성에 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 10 (22.7 g, 80.45% 수율)을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 650)

[0288] 합성에 11. 화합물 11의 합성

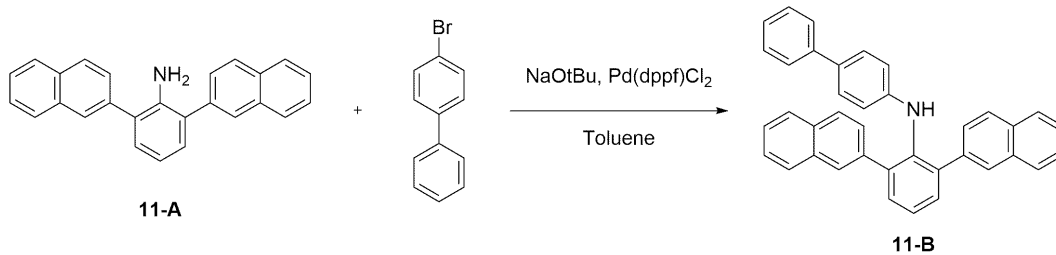
[0289] 단계 1) 화합물 11-A의 합성



[0290]

[0291] 2,6-디브로모아닐린 (50.0 g, 199.27 mmol)과 나프탈렌-2-일보론 산 (71.97 g, 418.46 mmol)을 이용하여 상기 합성에 1의 단계 1과 동일한 방법으로 상기 화합물 11-A (56.0 g, 81.35% 수율)를 수득하였다.

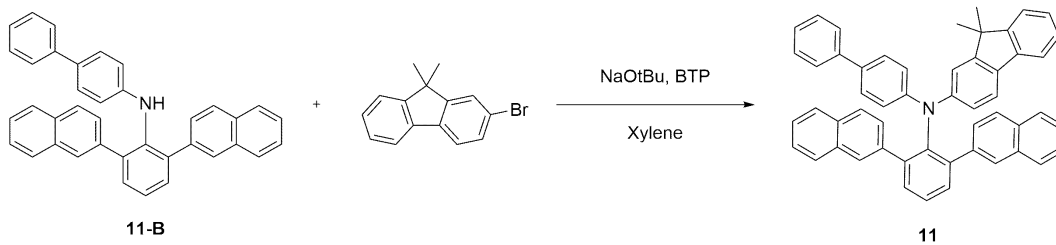
[0293] 단계 2) 화합물 11-B의 합성



[0294]

[0295] 상기 합성에 11의 단계 1에서 수득한 화합물 11-A (40.0 g, 115.79 mmol)와 4-브로모-1,1'-바이페닐 (26.99 g, 115.79 mmol)을 이용하여 상기 합성에 1의 단계 2와 동일한 방법으로 상기 화합물 11-B (48.3 g, 83.82% 수율)를 수득하였다.

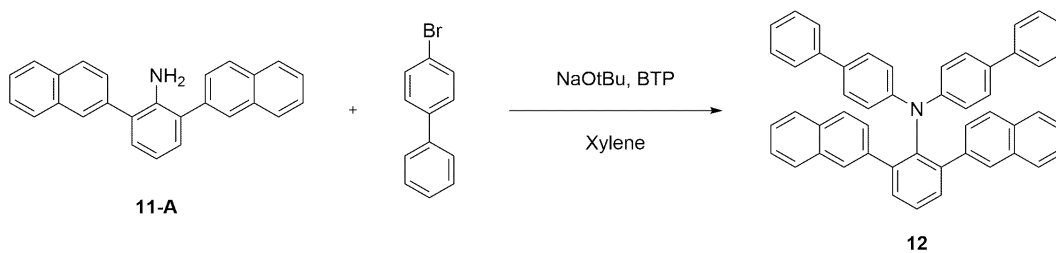
[0297] 단계 3) 화합물 11의 합성



[0298]

[0299] 상기 합성에 11의 단계 2에서 수득한 화합물 11-B (20.0 g, 40.19 mmol)와 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 (11.20 g, 40.99 mmol)을 이용하여 상기 합성에 1의 단계 3과 동일한 방법으로 상기 화합물 11 (22.8 g, 82.23% 수율)을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 690)

[0301] 합성에 12. 화합물 12의 합성



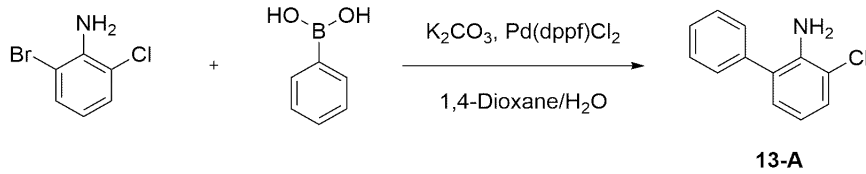
[0302]

[0303] 상기 합성에 11의 단계 1에서 수득한 화합물 11-A (15.0 g, 43.42 mmol)와 4-브로모-1,1'-바이페닐 (20.75 g, 89.01 mmol)을 이용하여 상기 합성에 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 12 (23.8 g, 84.35% 수율)를

수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 650)

[0305] 합성예 13. 화합물 13의 합성

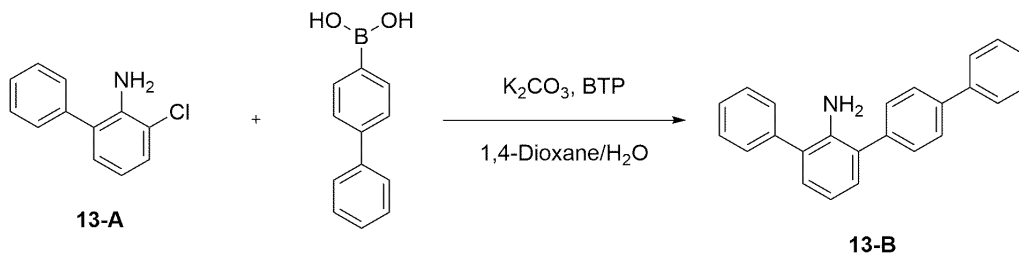
[0306] 단계 1) 화합물 13-A의 합성



[0307]

[0308] 2-브로모-6-클로로아닐린 (50.0 g, 242.17 mmol)과 페닐보론 산 (31.00 g, 254.27 mmol)을 1,4-다이옥산(600 mL)에 용해 후, 포타슘 카보네이트 (100.41 g, 726.51 mmol : 물 300 mL) 용액을 가한 후, 10분 동안 가열 교반하였다. 상기 용액에 1,4-다이옥산(50 mL)에 용해시킨 1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센디클로로팔라듐(II) (0.89 g, 1.21 mmol)을 가한 후 1 시간 동안 가열 교반하였다. 반응 종결 및 여과 후, 클로로포름과 물로 층분리하였다. 용매 제거 후 에틸아세테이트로 재결정하여 상기 화합물 13-A (40.0 g, 81.10% 수율)를 수득하였다.

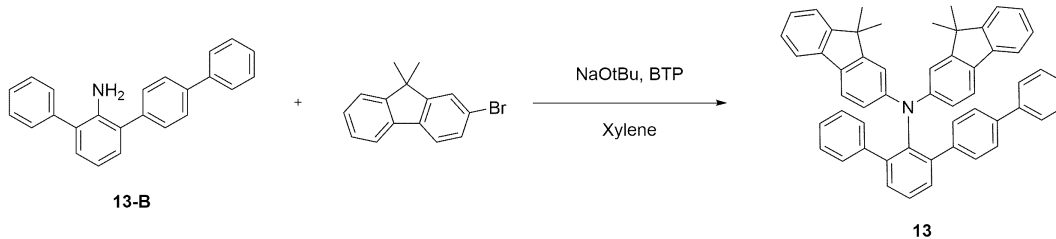
[0310] 단계 2) 화합물 13-B의 합성



[0311]

[0312] 상기 합성예 13의 단계 1에서 수득한 화합물 13-A (40.0 g, 196.40 mmol)와 [1.1'-바이페닐]-4-일보론 산 (40.84 g, 206.22 mmol)을 1,4-다이옥산(500 mL)에 용해 후, 포타슘 카보네이트 (81.43 g, 589.20 mmol : 물 250 mL) 용액을 가한 후, 10 분 동안 가열 교반하였다. 상기 용액에 1,4-다이옥산(25 mL)에 용해시킨 비스(트리-tert-부틸포스핀)팔라듐 (0.50 g, 0.98 mmol)을 가한 후 1 시간 동안 가열 교반하였다. 반응 종결 및 여과 후, 클로로포름과 물로 층분리하였다. 용매 제거 후 에틸아세테이트로 재결정하여 상기 화합물 13-B (48.0 g, 76.04% 수율)를 수득하였다.

[0314] 단계 3) 화합물 13의 합성

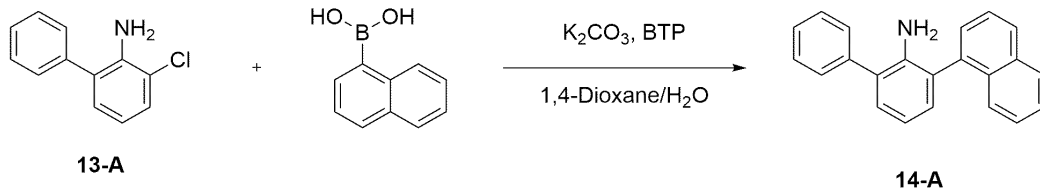


[0315]

[0316] 상기 합성예 13의 단계 2에서 수득한 화합물 13-B (15.0 g, 46.67 mmol)와 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 (26.13 g, 95.67 mmol)을 이용하여 상기 합성예 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 13 (26.4 g, 78.92% 수율)을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 706)

[0318] 합성예 14. 화합물 14의 합성

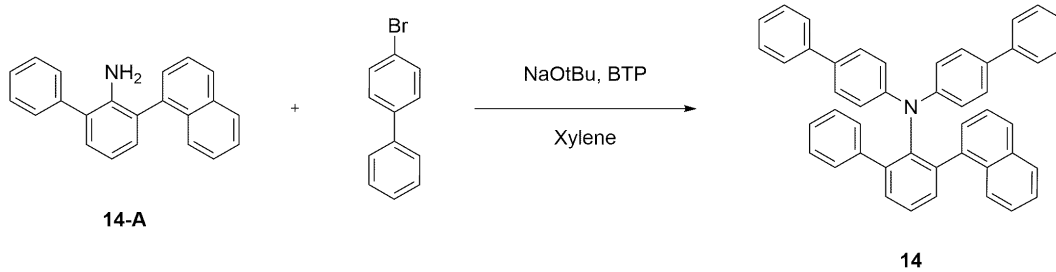
[0319] 단계 1) 화합물 14-A의 합성



[0321]

[0323] 상기 합성에 13의 단계 1에서 수득한 화합물 13-A (40.0 g, 196.40 mmol)와 나프탈렌-1-일보론 산 (35.47 g, 206.22 mmol)을 이용하여 상기 합성에 13의 단계 2와 동일한 방법으로 상기 화합물 14-A (45.0 g, 77.57% 수율)를 수득하였다.

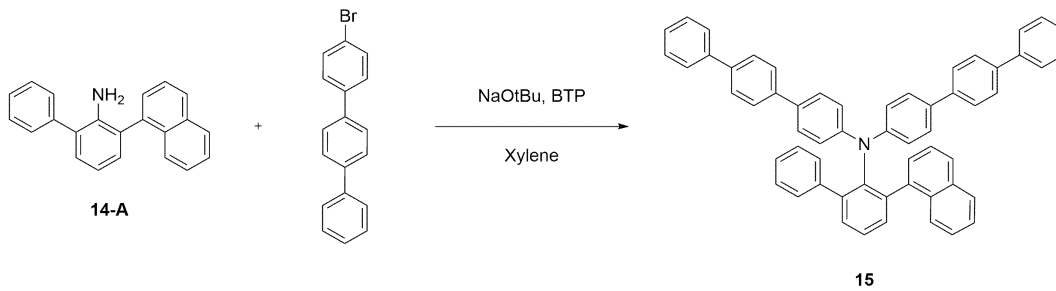
[0325] 단계 2) 화합물 14의 합성



[0326]

[0327] 상기 합성에 14의 단계 1에서 수득한 화합물 14-A (15.0 g, 50.78 mmol)와 4-브로모-1,1'-바이페닐 (24.27 g, 104.10 mmol)을 이용하여 상기 합성에 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 14 (25.2 g, 82.74% 수율)를 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 600)

[0329] 합성에 15. 화합물 15의 합성

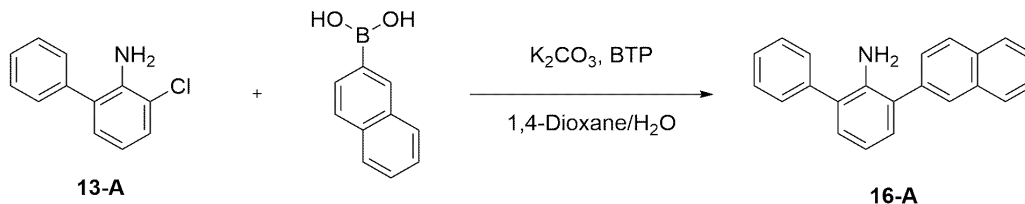


[0330]

[0331] 상기 합성에 14의 단계 1에서 수득한 화합물 14-A (15.0 g, 50.78 mmol)와 4-브로모-1,1':4',1''-터페닐 (32.19 g, 104.10 mmol)을 이용하여 상기 합성에 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 15 (30.5 g, 79.87% 수율)를 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 752)

[0333] 합성에 16. 화합물 16의 합성

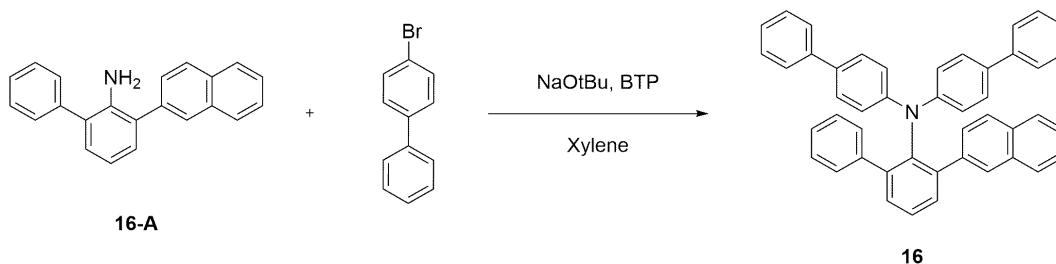
[0334] 단계 1) 화합물 16-A의 합성



[0335]

[0336] 상기 합성에 13의 단계 1에서 수득한 화합물 13-A (40.0 g, 196.40 mmol)와 나프탈렌-2-일보론 산 (35.47 g, 206.22 mmol)을 이용하여 상기 합성에 13의 단계 2와 동일한 방법으로 상기 화합물 16-A (46.0 g, 79.29% 수율)를 수득하였다.

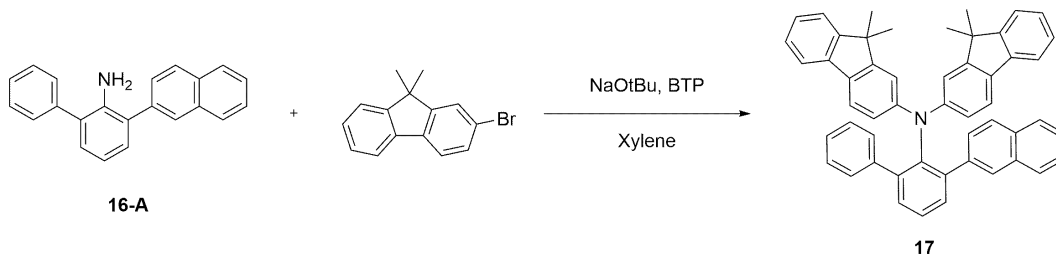
[0338] 단계 2) 화합물 16의 합성



[0339]

[0340] 상기 합성에 16의 단계 1에서 수득한 화합물 16-A (15.0 g, 50.78 mmol)와 4-브로모-N-1,1'-바이페닐 (24.27 g, 104.10 mmol)을 이용하여 상기 합성에 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 16 (26.0 g, 85.37% 수율)을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 600)

[0342] 합성에 17. 화합물 17의 합성

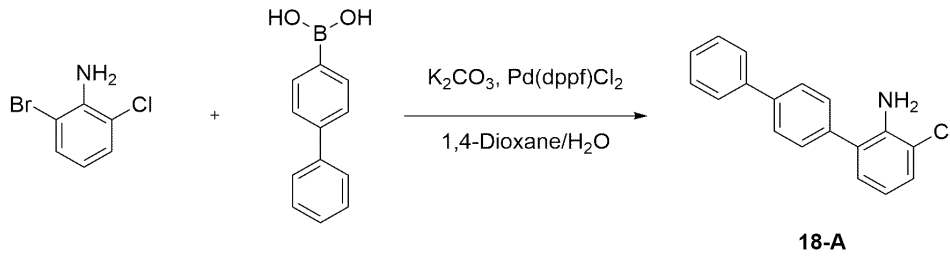


[0343]

[0344] 상기 합성에 16의 단계 1에서 수득한 화합물 16-A (15.0 g, 50.78 mmol)와 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 (28.44 g, 104.10 mmol)을 이용하여 상기 합성에 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 17 (26.2 g, 75.89% 수율)를 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 680)

[0346] 합성에 18. 화합물 18의 합성

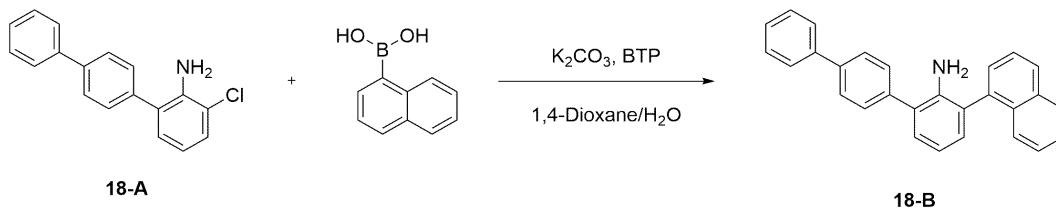
[0347] 단계 1) 화합물 18-A의 합성



[0348]

[0349] 2-브로모-6-클로로아닐린 (50.0 g, 242.17 mmol)과 [1.1'-바이페닐]-4-일보론 산 (50.35 g, 254.27 mmol)을 이용하여 상기 합성에 13의 단계 1과 동일한 방법으로 상기 화합물 18-A (52.0 g, 76.75% 수율)를 수득하였다.

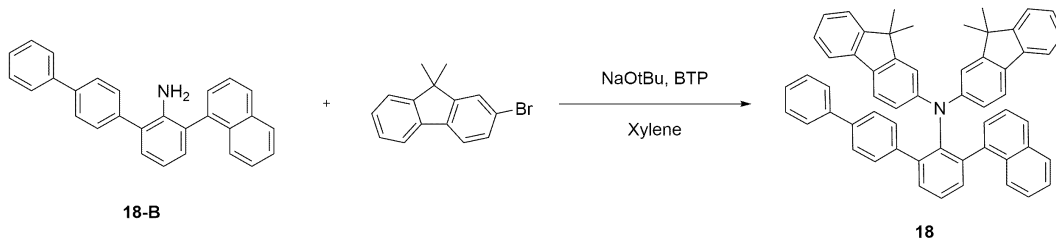
[0351] 단계 2) 화합물 18-B의 합성



[0352]

[0353] 상기 합성에 18의 단계 1에서 수득한 화합물 18-A (40.0 g, 142.97 mmol)와 나프탈렌-1-일보론 산 (25.82 g, 150.12 mmol)을 이용하여 상기 합성에 13의 단계 2와 동일한 방법으로 상기 화합물 18-B (40.0 g, 75.31% 수율)를 수득하였다.

[0355] 단계 3) 화합물 18의 합성

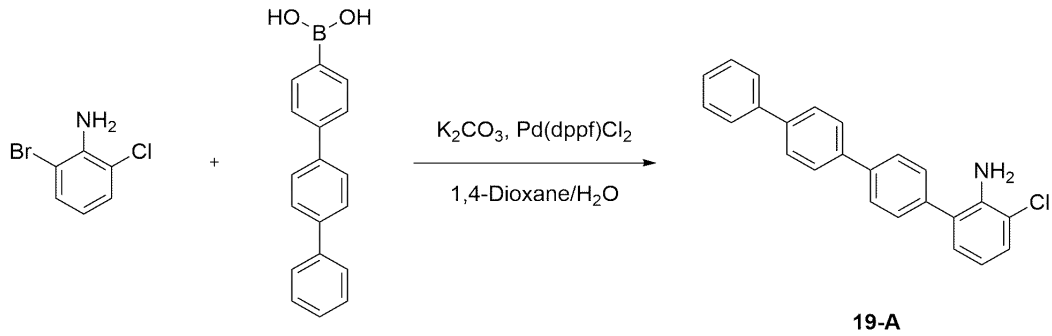


[0356]

[0357] 상기 합성에 18의 단계 2에서 수득한 화합물 18-B (15.0 g, 40.38 mmol)와 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 (22.61 g, 82.78 mmol)을 이용하여 상기 합성에 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 18 (24.8 g, 81.24% 수율)을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 756)

[0359] 합성에 19. 화합물 19의 합성

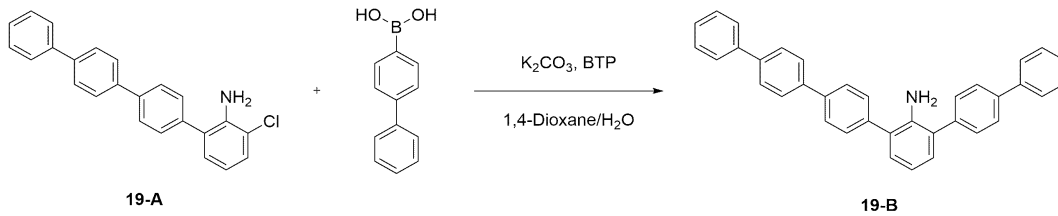
[0360] 단계 1) 화합물 19-A의 합성



[0361]

[0362] 2-브로모-6-클로로아닐린 (50.0 g, 242.17 mmol)과 [1,1':4',1''-터페닐]-4-일보론산 (69.70 g, 254.27 mmol)을 이용하여 상기 합성에 13의 단계 1과 동일한 방법으로 상기 화합물 19-A (68.0 g, 78.90% 수율)를 수득하였다.

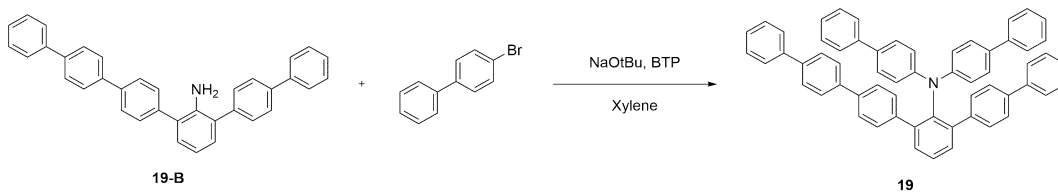
[0364] 단계 2) 화합물 19-B의 합성



[0365]

[0366] 상기 합성에 19의 단계 1에서 수득한 화합물 19-A (40.0 g, 112.40 mmol)와 [1,1'-바이페닐]-4-일보론 산 (23.37 g, 118.02 mmol)을 이용하여 상기 합성에 13의 단계 2와 동일한 방법으로 상기 화합물 19-B (40.0 g, 75.13% 수율)를 수득하였다.

[0368] 단계 3) 화합물 19의 합성

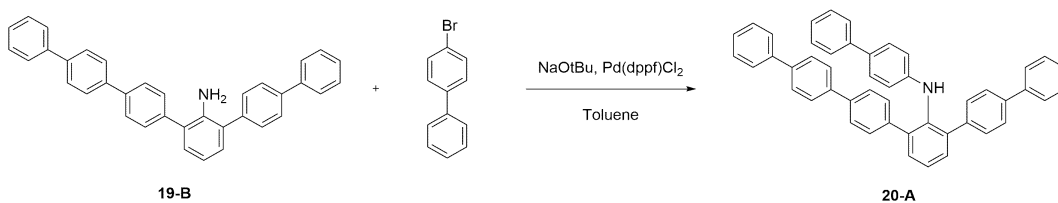


[0369]

[0370] 상기 합성에 19의 단계 2에서 수득한 화합물 19-B (15.0 g, 31.67 mmol)와 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 (15.13 g, 64.93 mmol)을 이용하여 상기 합성에 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 19 (20.1 g, 81.58% 수율)를 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 778)

[0372] 합성에 20. 화합물 20의 합성

[0373] 단계 1) 화합물 20-A의 합성

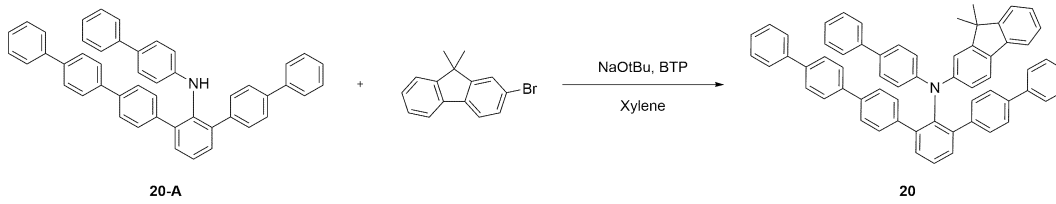


[0374]

[0375] 상기 합성에 19의 단계 2에서 수득한 화합물 19-B (40.0 g, 84.46 mmol)와 4-브로모-1,1'-바이페닐 (19.69 g,

84.46 mmol)을 이용하여 상기 합성에 1의 단계 2와 동일한 방법으로 상기 화합물 20-A (42.0 g, 79.46% 수율)를 수득하였다.

[0377] 단계 2) 화합물 20의 합성

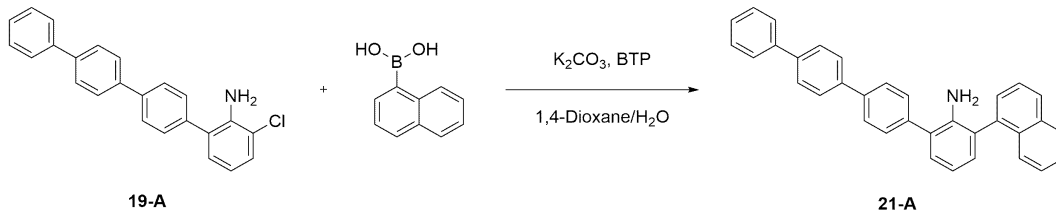


[0378]

[0379] 상기 합성에 20의 단계 1에서 수득한 화합물 20-A (20.0 g, 31.96 mmol)와 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 (8.90 g, 32.60 mmol)을 이용하여 상기 합성에 1의 단계 3과 동일한 방법으로 상기 화합물 20 (19.5 g, 74.58% 수율)을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 818)

[0381] 합성에 21. 화합물 21의 합성

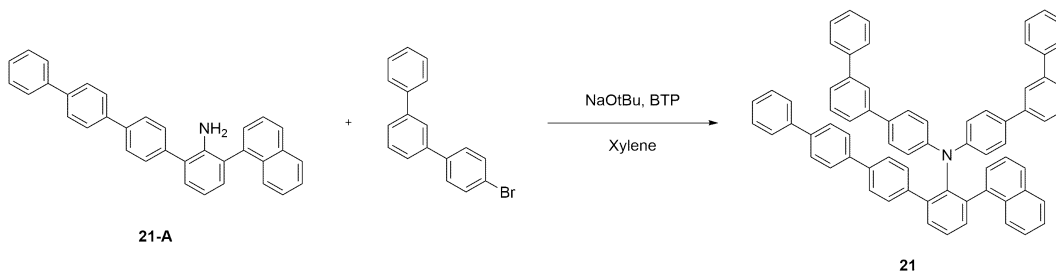
[0382] 단계 1) 화합물 21-A의 합성



[0383]

[0384] 상기 합성에 19의 단계 1에서 수득한 화합물 19-A (40.0 g, 112.40 mmol)와 나프탈렌-1-일보론 산 (20.30 g, 118.02 mmol)을 이용하여 상기 합성에 13의 단계 2와 동일한 방법으로 상기 화합물 21-A (40.0 g, 79.51% 수율)를 수득하였다.

[0386] 단계 2) 화합물 21의 합성

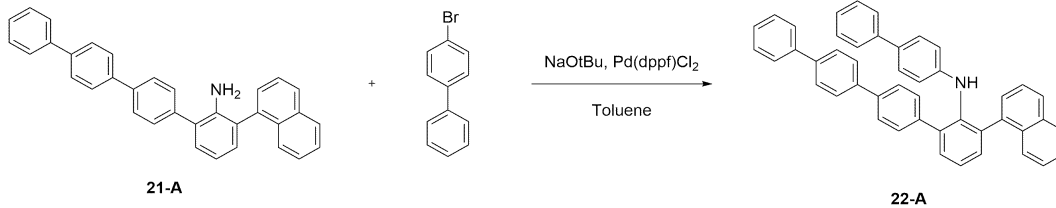


[0387]

[0388] 상기 합성에 21의 단계 1에서 수득한 화합물 21-A (15.0 g, 33.51 mmol)와 4-브로모-1,1':3',1''-터페닐 (21.24 g, 68.70 mmol)을 이용하여 상기 합성에 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 21 (24.0 g, 79.21% 수율)을 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 904)

[0390] 합성에 22. 화합물 22의 합성

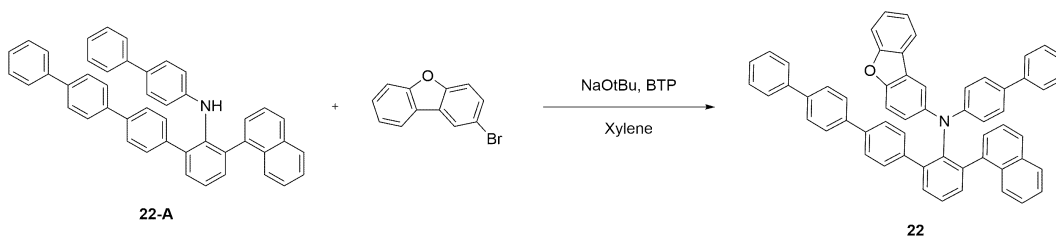
[0391] 단계 1) 화합물 22-A의 합성



[0392]

[0393] 상기 합성에 21의 단계 1에서 수득한 화합물 21-A (40.0 g, 89.37 mmol)와 4-브로모-1,1'-바이페닐 (20.83 g, 89.37 mmol)을 이용하여 상기 합성에 1의 단계 2와 동일한 방법으로 상기 화합물 22-A (43.0 g, 80.22% 수율)를 수득하였다.

[0395] 단계 2) 화합물 22의 합성

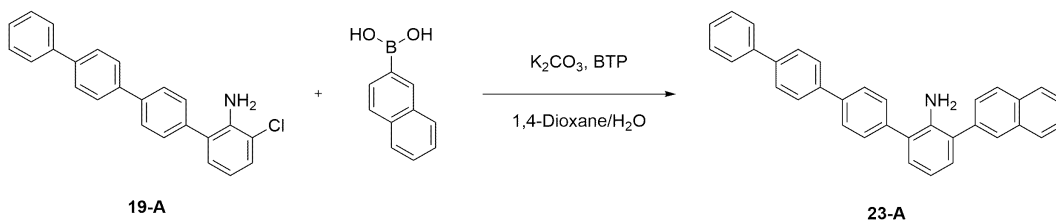


[0396]

[0397] 상기 합성에 22의 단계 1에서 수득한 화합물 22-A (20.0 g, 33.35 mmol)와 2-브로모디벤조[b,d]퓨란 (8.40 g, 34.01 mmol)을 이용하여 상기 합성에 1의 단계 3과 동일한 방법으로 상기 화합물 22 (20.0 g, 75.72% 수율)를 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 792)

[0399] 합성예 23. 화합물 23의 합성

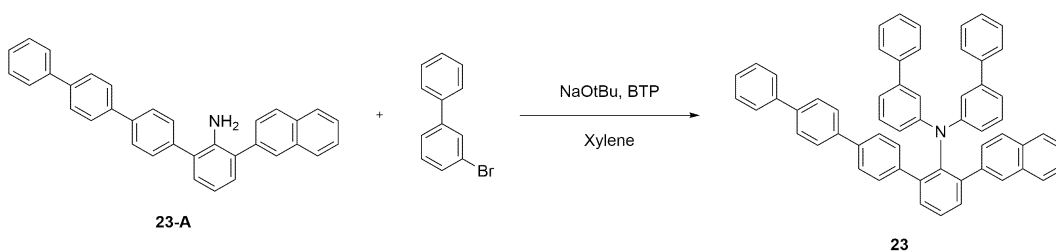
[0400] 단계 1) 화합물 23-A의 합성



[0401]

[0402] 상기 합성에 19의 단계 1에서 수득한 화합물 19-A (40.0 g, 112.40 mmol)와 나프탈렌-2-일보론 산 (20.30 g, 118.02 mmol)을 이용하여 상기 합성에 13의 단계 2와 동일한 방법으로 상기 화합물 23-A (42.0 g, 83.49% 수율)를 수득하였다.

[0404] 단계 2) 화합물 23의 합성

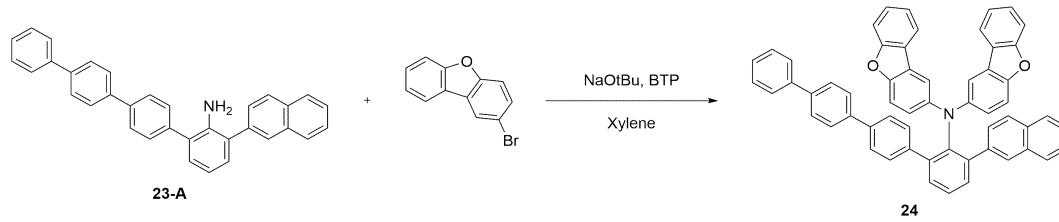


[0405]

[0406] 상기 합성에 23의 단계 1에서 수득한 화합물 23-A (15.0 g, 33.51 mmol)와 3-브로모-1,1'-바이페닐 (16.02 g,

68.70 mmol)을 이용하여 상기 합성에 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 23 (21.0 g, 83.34% 수율)을  
수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 752)

[0408] 합성에 24. 화합물 24의 합성



[0409]

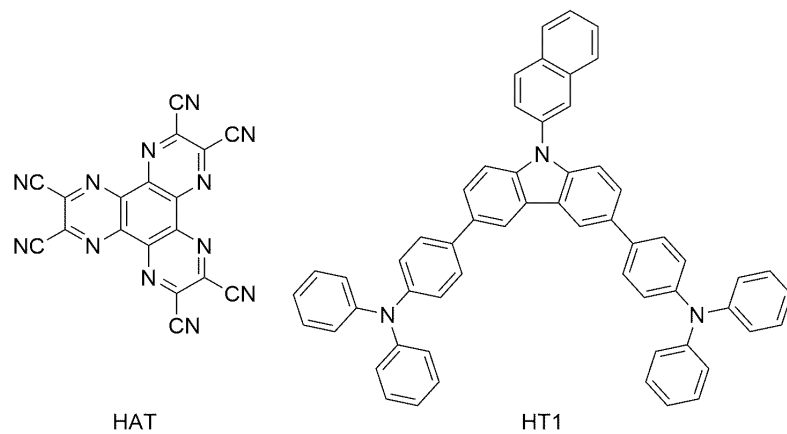
[0410] 상기 합성에 23의 단계 1에서 수득한 화합물 23-A (15.0 g, 33.51 mmol)와 2-브로모디벤조[b,d]퓨란 (16.98 g, 68.70 mmol)을 이용하여 상기 합성에 6과 동일한 방법으로 상기 화합물 24 (21.0 g, 80.35% 수율)를 수득하였다. (MS[M+H]<sup>+</sup> = 780)

[0412] <실험예 및 비교실험예>

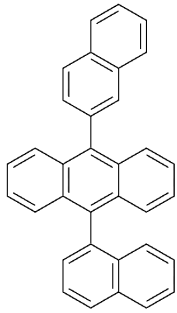
[0413] 실험예 1-1

[0414] ITO(Indium Tin Oxide)가 1400 옹스트롬(Å, angstrom)의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀러포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10 분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5 분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

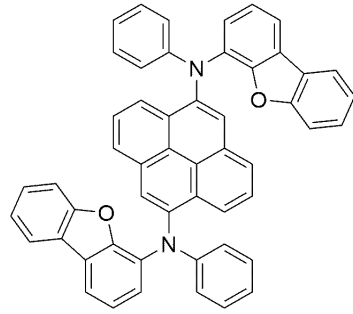
[0416] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 화학식 HAT로 표시되는 화합물을 100 Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다. 그 위에 정공수송층으로 하기 화학식 HT1로 표시되는 화합물을 1150 Å 두께로 진공 증착한 후, 전자억제층으로 상기 합성에 1에서 제조된 화합물 1을 150 Å의 두께로 열 진공 증착하였다. 이어서, 발광층으로 하기 화학식 BH로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 BD로 표시되는 화합물을 25:1의 중량비로 200 Å의 두께로 진공 증착하였다. 이어서, 정공억제층으로 하기 화학식 HB1으로 표시되는 화합물을 50 Å의 두께로 진공 증착하였다. 이어서, 전자수송 및 전자주입을 동시에 하는 층으로 하기 화학식 ET1로 표시되는 화합물과 하기 LiQ로 표시되는 화합물을 1:1의 중량비로 310 Å의 두께로 열 진공 증착하였다. 상기 전자 수송 및 전자 주입층 위에 순차적으로 12 Å의 두께로 리튬플로라이드(LiF)와 1000 Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하여, 유기 발광 소자를 제조하였다.



[0417]

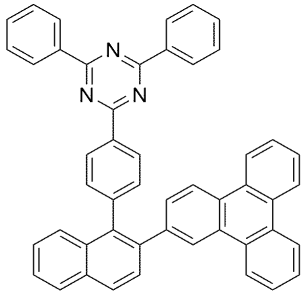


BH

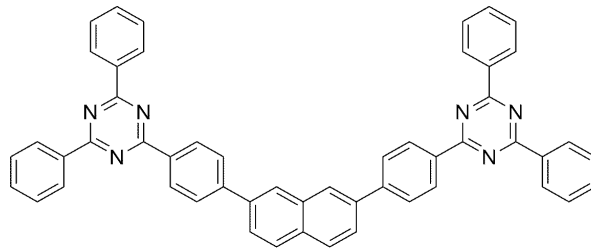


BD

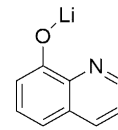
[0418]



HB1



ET1



LiQ

[0419]

[0421]

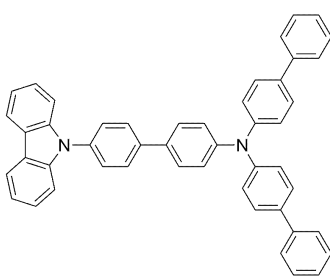
실험예 1-2 내지 1-15 및 비교실험예 1-1 내지 1-8

[0422]

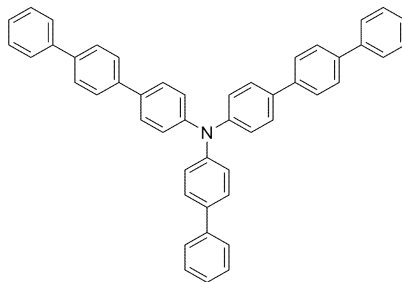
상기 실험예 1-1에서 화합물 1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실험예 1-1과 동일한 방법으로 실험예 1-2 내지 1-15 및 비교실험예 1-1 내지 1-8의 유기 발광 소자를 제작하였다. 실험예 및 비교실험예에서 제조한 유기 발광 소자에 10 mA/cm<sup>2</sup>의 전류를 인가하였을 때, 전압, 효율, 색좌표 및 수명을 측정하고 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 한편, T95는 휘도가 초기 휘도(6000 nit)에서 95%로 감소되는데 소요되는 시간을 의미한다.

[0424]

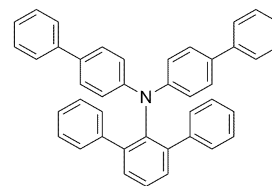
하기 표 1에서 전자억제층에 사용된 화합물 EB1 내지 EB8은, 각각 하기 화학식 EB1 내지 EB8로 표시되는 것이다.



EB1

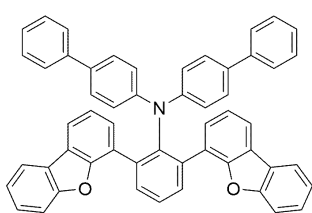


EB2

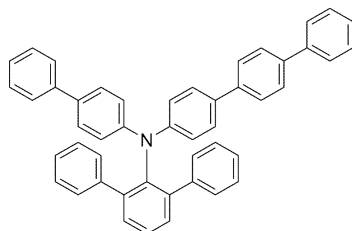


EB3

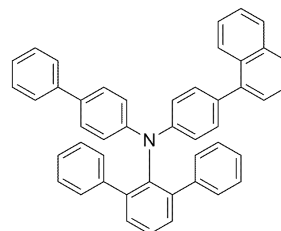
[0425]



EB4

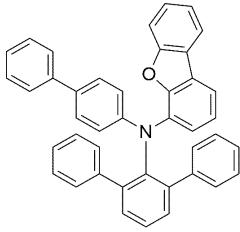


EB5

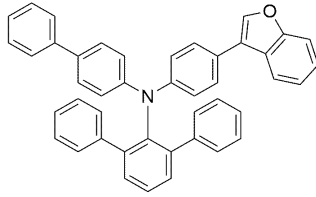


EB6

[0426]



EB7



EB8

[0427]

표 1

[0429]

	전자억제층	전압 (V, @ 10mA/cm <sup>2</sup> )	효율(cd/A, @ 10mA/cm <sup>2</sup> )	색좌표 (x, y)	수명 (T95, hr)
실험예 1-1	화합물 1	3.54	6.15	0.141, 0.043	285
실험예 1-2	화합물 3	3.52	6.10	0.143, 0.044	275
실험예 1-3	화합물 5	3.51	6.15	0.141, 0.043	280
실험예 1-4	화합물 6	3.50	6.21	0.139, 0.045	290
실험예 1-5	화합물 7	3.48	6.24	0.139, 0.043	290
실험예 1-6	화합물 10	3.48	6.26	0.141, 0.043	295
실험예 1-7	화합물 12	3.47	6.27	0.141, 0.043	285
실험예 1-8	화합물 14	3.59	6.18	0.142, 0.044	280
실험예 1-9	화합물 15	3.54	6.17	0.141, 0.045	270
실험예 1-10	화합물 16	3.53	6.14	0.142, 0.043	280
실험예 1-11	화합물 19	3.52	6.22	0.141, 0.043	285
실험예 1-12	화합물 21	3.54	6.24	0.142, 0.043	275
실험예 1-13	화합물 22	3.50	6.20	0.142, 0.044	280
실험예 1-14	화합물 23	3.54	6.26	0.141, 0.043	275
실험예 1-15	화합물 24	3.53	6.21	0.142, 0.044	280
비교실험예 1-1	EB1	3.86	5.73	0.143, 0.046	235
비교실험예 1-2	EB2	4.18	5.25	0.144, 0.048	180
비교실험예 1-3	EB3	4.00	5.55	0.143, 0.047	220
비교실험예 1-4	EB4	4.05	5.48	0.143, 0.048	210
비교실험예 1-5	EB5	4.01	5.40	0.144, 0.046	215
비교실험예 1-6	EB6	4.11	5.28	0.144, 0.047	190
비교실험예 1-7	EB7	4.20	5.40	0.144, 0.047	180
비교실험예 1-8	EB8	4.30	5.10	0.143, 0.048	160

[0430]

상기 표 1에 나타난 바와 같이, 본 발명의 화합물은 전자 억제 능력이 우수하여 이를 전자억제층으로 사용한 유기 발광 소자는 구동 전압, 효율, 수명 면에서 현저한 효과를 나타내는 것으로 확인되었다.

[0432]

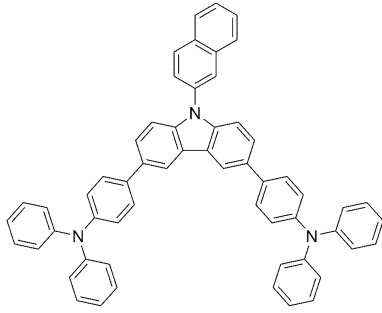
실험예 2-1 내지 2-15 및 비교실험예 1-1, 2-1 내지 2-7

[0433]

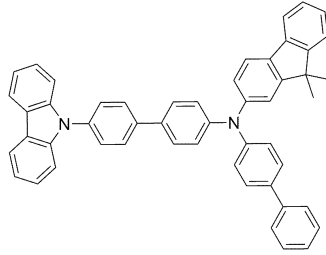
상기 실험예 1-1에서 전자억제층으로 화합물 1 대신 상기 화학식 EB1으로 표시되는 화합물을 사용하고, 정공수송층으로 하기 화학식 HT1으로 표시되는 화합물 대신 하기 표 2에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실험예 1-1과 동일한 방법으로 실험예 2-1 내지 2-15 및 비교실험예 2-1 내지 2-7의 유기 발광 소자를 제작하였다. 실험예 및 비교실험예에서 제조한 유기 발광 소자에 10 mA/cm<sup>2</sup>의 전류를 인가하였을 때, 전압, 효율, 색좌표 및 수명을 측정하고 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 한편, T95는 휘도가 초기 휘도(6000 nit)에서 95%로 감소되는 데 소요되는 시간을 의미한다.

[0435]

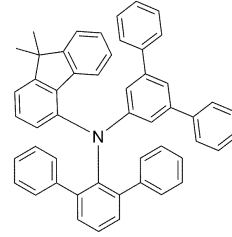
하기 표 2에서 정공수송층에 사용된 화합물 HT1 내지 HT8은, 각각 하기 화학식 HT1 내지 HT8로 표시되는 것이다.



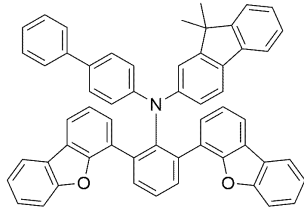
HT1



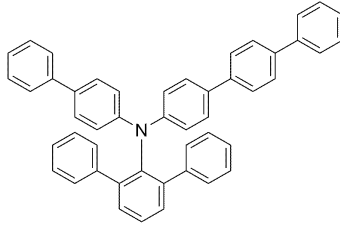
HT2



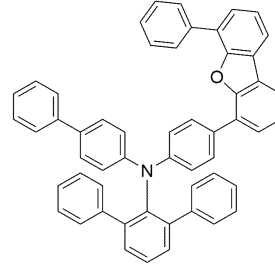
HT3



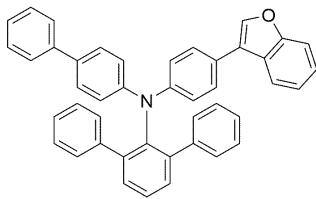
HT4



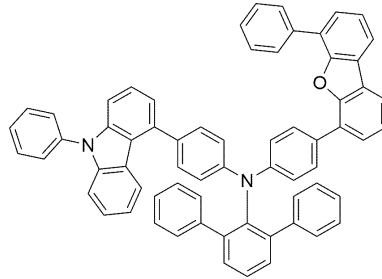
HT5



HT6



HT7



HT8

표 2

	정공수송층	전압 (V, @ 10mA/cm <sup>2</sup> )	효율(cd/A, @ 10mA/cm <sup>2</sup> )	색좌표 (x, y)	수명 (T95, hr)
실험예 2-1	화합물 2	3.53	6.24	0.142, 0.044	275
실험예 2-2	화합물 4	3.54	6.23	0.142, 0.045	285
실험예 2-3	화합물 5	3.50	6.20	0.142, 0.044	270
실험예 2-4	화합물 8	3.46	6.18	0.141, 0.043	290
실험예 2-5	화합물 9	3.50	6.19	0.141, 0.044	285
실험예 2-6	화합물 11	3.51	6.18	0.142, 0.044	285
실험예 2-7	화합물 13	3.44	6.10	0.140, 0.043	270
실험예 2-8	화합물 15	3.54	6.24	0.142, 0.045	290
실험예 2-9	화합물 17	3.42	6.15	0.139, 0.044	280
실험예 2-10	화합물 18	3.43	6.15	0.140, 0.043	275
실험예 2-11	화합물 19	3.51	6.19	0.142, 0.043	285
실험예 2-12	화합물 20	3.46	6.14	0.142, 0.044	280
실험예 2-13	화합물 21	3.47	6.18	0.140, 0.043	275
실험예 2-14	화합물 22	3.52	6.19	0.142, 0.044	280
실험예 2-15	화합물 24	3.48	6.20	0.140, 0.044	275
비교실험예 1-1	HT1	3.86	5.73	0.143, 0.046	235
비교실험예 2-1	HT2	3.95	5.62	0.144, 0.047	220
비교실험예 2-2	HT3	4.06	5.45	0.144, 0.047	215

비교실험예 2-3	HT4	4.14	5.34	0.144, 0.048	200
비교실험예 2-4	HT5	4.18	5.48	0.144, 0.048	200
비교실험예 2-5	HT6	4.15	5.45	0.143, 0.048	205
비교실험예 2-6	HT7	4.20	5.15	0.144, 0.048	180
비교실험예 2-7	HT8	4.18	5.10	0.144, 0.048	170

[0441] 상기 표 2에 나타난 바와 같이, 본 발명의 화합물은 정공 수송 능력이 우수하여 이를 정공수송층으로 사용한 유기 발광 소자는 구동 전압, 효율, 수명 면에서 현저한 효과를 나타내는 것으로 확인되었다.

**부호의 설명**

- [0443] 1: 기관 2: 양극  
 3: 발광층 4: 음극  
 5: 정공수송층 6: 전자억제층  
 7: 전자수송층 8: 정공주입층  
 9: 정공억제층

**도면**

**도면1**

4
3
2
1

**도면2**

4
7
3
6
5
2
1

도면3

4
7
9
3
6
5
8
2
1