(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2020년06월16일
(11) 등록번호 10-2123713
(24) 등록일자 2020년06월10일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 498/04 (2006.01) *C07D 498/06* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07D 498/04 (2013.01)
C07D 498/06 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2016-0071794
(22) 출원일자 2016년06월09일
심사청구일자 2018년04월20일
(65) 공개번호 10-2017-0139350
(43) 공개일자 2017년12월19일
(56) 선행기술조사문헌
KR1020130052566 A*
(뒷면에 계속)
전체 청구항 수 : 총 8 항

(73) 특허권자
주식회사 엘지화학
서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)
(72) 발명자
이정하
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원
박태윤
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원
(74) 대리인
정순성

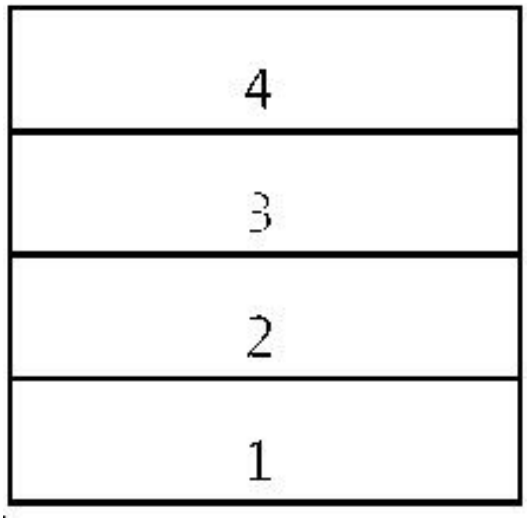
심사관 : 지무근

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

(57) 요 약

본 명세서는 화학식 1의 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/0071 (2013.01)
H01L 51/5056 (2013.01)
H01L 51/5096 (2013.01)
C09K 2211/1011 (2013.01)
C09K 2211/1033 (2013.01)

(56) 선행기술조사문헌
KR101490069 B1
JP2014503661 A
JP2012121867 A
CN105348300 A
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

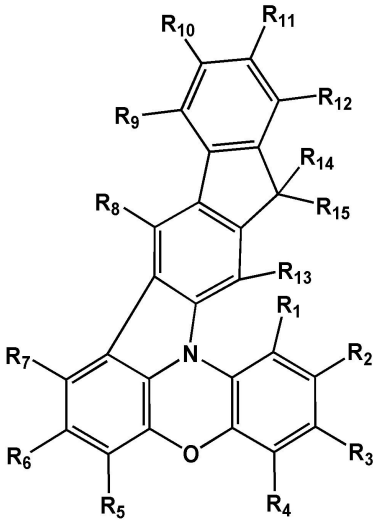
명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1의 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

R_{11}은 -(L)n-A이고,

R_1 내지 R_{10}, R_{12} 및 R_{13}은 수소이며,

R_{14} 및 R_{15}는 알킬기이고,

L은 직접결합; 또는 아릴렌기이며,

A는 아릴아민기; 아릴기 및 헤테로고리기 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 아릴기 및 헤테로고리기 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 아민기; 또는 아릴기 및 헤테로고리기 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,

n은 0 내지 2의 정수이다.

청구항 2

삭제

청구항 3

삭제

청구항 4

삭제

청구항 5

삭제

청구항 6

삭제

청구항 7

삭제

청구항 8

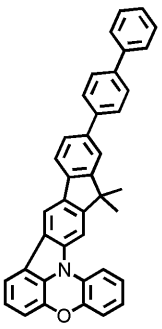
삭제

청구항 9

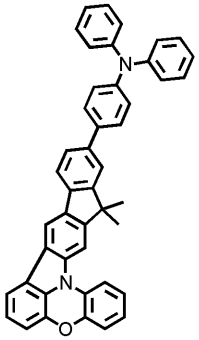
삭제

청구항 10

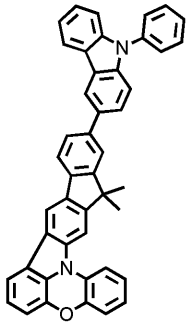
청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화합물 중에서 선택된 어느 하나인 것인 화합물:



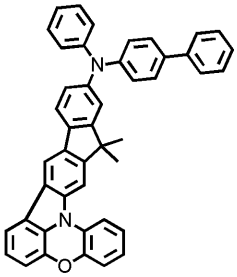
[화합물 1-1]



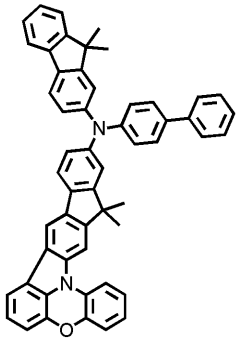
[화합물 1-2]



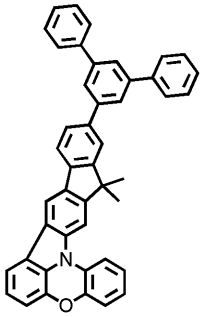
[화합물 1-3]



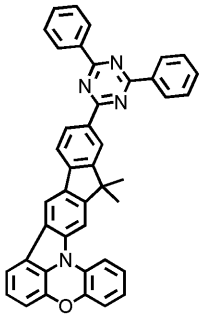
[화합물 1-4]



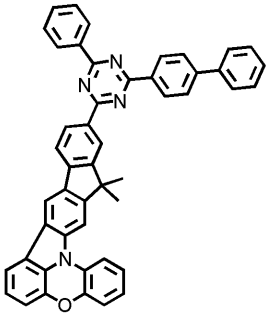
[화합물 1-5]



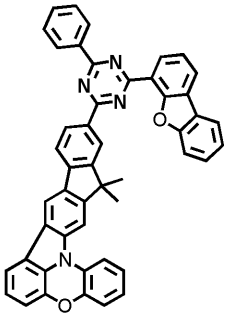
[화합물 1-6]



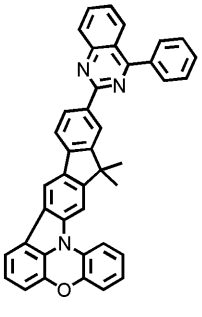
[화합물 1-7]



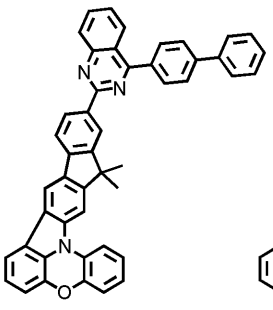
[화합물 1-8]



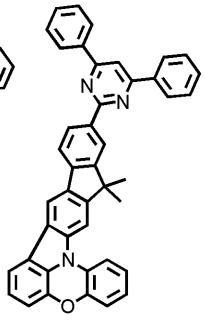
[화합물 1-9]



[화합물 1-10]



[화합물 1-11]



[화합물 1-12]

청구항 11

제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 청구항 1 또는 10에 따른 화합

물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

청구항 12

청구항 11에 있어서, 상기 유기물층은 정공 수송층을 포함하고, 상기 정공 수송층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

청구항 13

청구항 11에 있어서, 상기 유기물층은 정공 주입층을 포함하고, 상기 정공 주입층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

청구항 14

청구항 11에 있어서, 상기 유기물층은 전자 억제층을 포함하고, 상기 전자 억제층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

청구항 15

청구항 11에 있어서, 상기 유기물층은 정공 주입과 정공 수송을 동시에 하는 층을 포함하고, 상기 정공 주입과 정공 수송을 동시에 하는 층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

청구항 16

청구항 11에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 명세서는 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.

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

선행기술문헌

특허문헌

[0004] (특허문헌 0001) 한국 특허공개공보 2000-0051826

발명의 내용

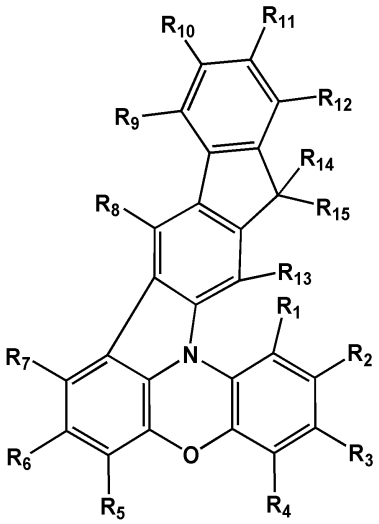
해결하려는 과제

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

과제의 해결 수단

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

[0007] [화학식 1]

[0008] 

[0009] 상기 화학식 1에 있어서,

[0010] R_1 내지 R_{13} 중 적어도 하나는 -(L)n-A이고,

[0011] L은 직접결합이거나, 치환 또는 비치환된 알킬렌기; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 2가 헤테로고리기이며, n은 0 내지 4의 정수이고,

[0012] A는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 알킬아릴기; 치환 또는 비치환된 아릴포스핀기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

[0013] R_1 내지 R_{13} 중 -(L)n-A 로 표시되지 않는 나머지 기, R_{14} 및 R_{15}는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로겐기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폭시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폭시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 아르알킬기; 치환 또는 비치환된 아르알케닐기; 치환 또는 비치환된 알킬아릴기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴포스핀기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

[0014] 또한, 본 명세서의 일 실시상태는 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

[0015] 본 명세서에 기재된 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있다. 적어도 하나의 실시상태에 따른 화합물은 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동전압 및/또는 수명 특성을 향상시킬 수 있다. 특히, 본 명세서에 기재된 화합물은 정공주입, 정공수송, 정공주입과 정공수송, 발광, 전자수송, 또는 전자주입 재료로 사용될 수 있다. 또한, 본 명세서에 기재된 화합물은 바람직하게는 발광층, 전자수송 또는 전자주입 재료로 사용될 수 있다. 또한, 보다 바람직하게는 본 명세서에 기재된 화합물은 발광층의 호스트 재료, 예컨대 녹색 호스트 또는 적색 호스트로 사용될 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0016] 도 1은 기판(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

도 2는 기판 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자수송층(8) 및 음극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0017] 이하 본 명세서에 대하여 더욱 상세히 설명한다.

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

[0019] 상기 화합물의 경우 HOMO 에너지 준위가 높은 특징이 있다.

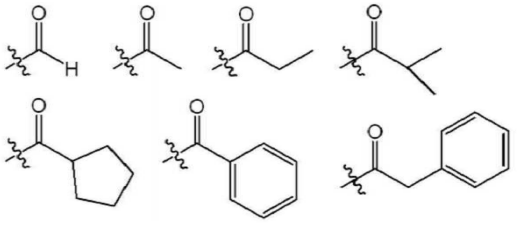
[0020] 본 명세서에 있어서, 에너지 준위는 에너지 크기를 의미하는 것이다. 따라서, 진공준위로부터 마이너스(-) 방향으로 에너지 준위가 표시되는 경우에도, 에너지 준위는 해당 에너지 값의 절대값을 의미하는 것으로 해석된다. 예컨대, HOMO 에너지 준위란 진공준위로부터 최고 점유 분자 오비탈(highest occupied molecular orbital)까지의 거리를 의미한다.

[0021] 상기 치환기들의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

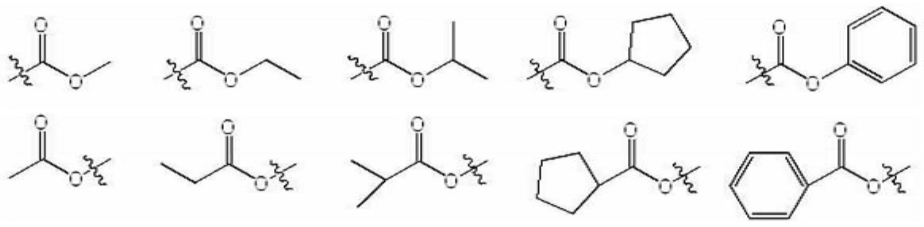
[0022] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된" 이라는 용어는 중수소; 할로겐기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 카보닐기; 에스테르기; 이미드기; 아민기; 포스핀옥사이드기; 알콕시기; 아릴옥시기; 알킬티옥시기; 아릴티옥시기; 알킬술폭시기; 아릴술폭시기; 알킬기로 치환 또는 비치환된 실릴기; 붕소기; 알킬기; 시클로알킬기; 알케닐기; 아릴기; 아르알킬기; 아르알케닐기; 알킬아릴기; 알킬아민기; 아랄킬아민기; 헤테로아릴아민기; 아릴아민기; 아릴포스핀기; 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환 또는 비치환된 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 바이페닐기일 수 있다. 즉, 바이페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다.

[0023] 본 명세서에 있어서,  는 다른 치환기 또는 결합부에 결합되는 부위를 의미한다.

[0024] 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.

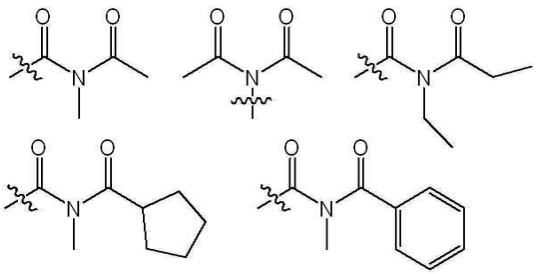
[0025] 

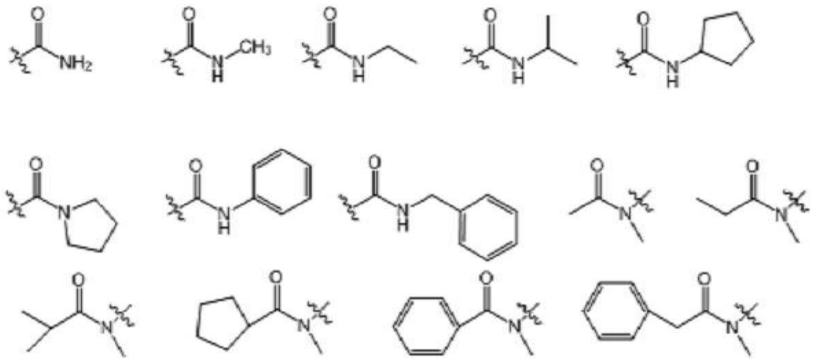
[0026] 본 명세서에 있어서, 에스테르기는 에스테르기의 산소가 탄소수 1 내지 25의 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄 알킬기 또는 탄소수 6 내지 25의 아릴기로 치환될 수 있다. 구체적으로, 하기 구조식의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0027] 

[0028] 본 명세서에 있어서, 이미드기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 25인 것이 바람직하다. 구체

적으로 하기와 같은 구조의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0029] 

[0030] 

[0031] 본 명세서에 있어서, 실릴기는 -SiRR'R''의 화학식으로 표시될 수 있고, 상기 R, R' 및 R''는 각각 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다. 상기 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

[0032] 본 명세서에 있어서, 붕소기는 -BRR'의 화학식으로 표시될 수 있고, 상기 R 및 R'은 각각 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다. 상기 붕소기는 구체적으로 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

[0033] 본 명세서에 있어서, 할로겐기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.

[0034] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 6이다. 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, n-프로필, 이소프로필, 부틸, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, sec-부틸, 1-메틸-부틸, 1-에틸-부틸, 펜틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, 헥실, n-헥실, 1-메틸펜틸, 2-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 1-메틸헥실, 시클로펜틸메틸, 시클로헥틸메틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸-프로필, 1,1-디메틸-프로필, 이소헥실, 4-메틸헥실, 5-메틸헥실 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0035] 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 있으나 이들에 한정되지 않는다.

[0036] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 일 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 6이다. 구체적으로 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 3-메틸시클로펜틸, 2,3-디메틸시클로펜틸, 시클로헥실, 3-메틸시클로헥실, 4-메틸시클로헥실, 2,3-디메틸시클로헥실, 3,4,5-트리메틸시클로헥실, 4-tert-부틸시클로헥실, 시

클로헵틸, 시클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0037] 본 명세서에 있어서, 알콕시기는 특별히 한정되지는 않으나, 탄소수 1 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알콕시기의 탄소수는 1 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알콕시기의 탄소수는 1 내지 6이다. 상기 알콕시기의 구체적인 예로는 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 이소부틸옥시기, sec-부틸옥시기, 펜틸옥시기, iso-아밀옥시기, 헥실옥시기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0038] 본 명세서에 있어서, 아민기는 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 내지 30인 것이 바람직하다. 아민기의 구체적인 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 에틸아민기, 디에틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 비페닐아민기, 안트라세닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐아민기, 페닐나프틸아민기, 디톨릴아민기, 페닐톨릴아민기, 트리페닐아민기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0039] 본 명세서에 있어서, 아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노아릴아민기, 치환 또는 비치환된 디아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리아릴아민기가 있다. 상기 아릴아민기 중의 아릴기는 단환식 아릴기일 수 있고, 다환식 아릴기일 수 있다. 상기 2 이상의 아릴기를 포함하는 아릴아민기는 단환식 아릴기, 다환식 아릴기, 또는 단환식아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다.

[0040] 아릴아민기의 구체적인 예로는 페닐아민, 나프틸아민, 비페닐아민, 안트라세닐아민, 3-메틸-페닐아민, 4-메틸-나프틸아민, 2-메틸-비페닐아민, 9-메틸-안트라세닐아민, 디페닐 아민기, 페닐 나프틸 아민기, 디톨릴 아민기, 페닐 톨릴 아민기, 카바졸 및 트리페닐 아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

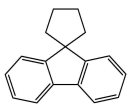
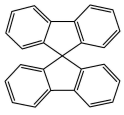
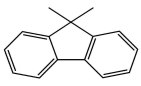
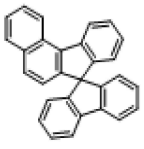
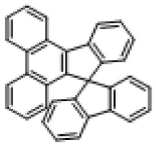
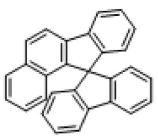
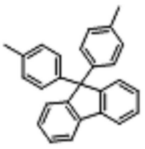
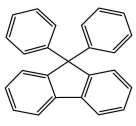
[0041] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 디헤테로아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리헤테로아릴아민기가 있다. 상기 헤테로아릴아민기 중의 헤테로아릴기는 단환식 헤테로고리기일 수 있고, 다환식 헤테로고리기일 수 있다. 상기 2 이상의 헤테로고리기를 포함하는 헤테로아릴아민기는 단환식 헤테로고리기, 다환식 헤테로고리기, 또는 단환식 헤테로고리기와 다환식 헤테로고리기를 동시에 포함할 수 있다.

[0042] 본 명세서에 있어서, 아릴헤테로아릴아민기는 아릴기 및 헤테로고리기로 치환된 아민기를 의미한다.

[0043] 본 명세서에 있어서, 아릴포스핀기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 디아릴포스핀기, 또는 치환 또는 비치환된 트리아릴포스핀기가 있다. 상기 아릴포스핀기 중의 아릴기는 단환식 아릴기일 수 있고, 다환식 아릴기일 수 있다. 상기 아릴기가 2 이상을 포함하는 아릴포스핀기는 단환식 아릴기, 다환식 아릴기, 또는 단환식 아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다.

[0044] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 60인 것이 바람직하며, 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 20이다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기, 트리페닐렌기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0045] 본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있다.

[0046] 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우, , , , , , ,  및  등이 될 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0047] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리기는 이종원자로 N, O, S, Si 및 Se 중 1개 이상을 포함하는 헤테로고리기로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 헤테로고리기의 예로는 티오펜기, 퓨란

기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딜기, 비피리딜기, 피리미딜기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딜기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난쓰롤린기(phenanthroline), 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페녹사지닐기, 페노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 상기 헤테로고리기는 지방족 헤테로고리기와 방향족 헤테로고리기를 포함한다.

[0048] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴기는 방향족인 것을 제외하고는 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0049] 본 명세서에 있어서, 아릴옥시기, 아릴티옥시기, 아릴술폭시기, 아릴포스핀기, 아르알킬기, 아랄킬아민기, 아르알케닐기, 알킬아릴기, 아릴아민기, 아릴헤테로아릴아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0050] 본 명세서에 있어서, 알킬티옥시기, 알킬술폭시기, 아르알킬기, 아랄킬아민기, 알킬아릴기, 알킬아민기 중 알킬기는 전술한 알킬기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0051] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴기, 헤테로아릴아민기, 아릴헤테로아릴아민기 중 헤테로아릴기는 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0052] 본 명세서에 있어서, 아르알케닐기 중 알케닐기는 전술한 알케닐기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0053] 본 명세서에 있어서, 알킬렌은 2가기인 것을 제외하고는 전술한 알킬기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0054] 본 명세서에 있어서, 아릴렌은 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0055] 본 명세서에 있어서, 2가 헤테로고리기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0056] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, L은 직접결합이거나, 치환 또는 비치환된 알킬렌기; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 2가 헤테로고리기이다.

[0057] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, L은 직접결합; 알킬렌기; 아릴렌기; 또는 2가 헤테로고리기이다.

[0058] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, L은 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 2가 헤테로고리기이다.

[0059] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 아릴렌기이다.

[0060] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 페닐렌기이다.

[0061] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, L은 직접결합; 또는 페닐렌기이다.

[0062] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, n은 0 내지 2의 정수이다.

[0063] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, n은 0 또는 1이다.

[0064] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, A는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 알킬아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

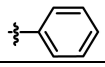
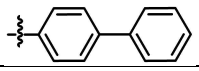
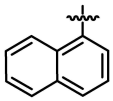
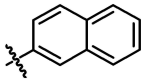
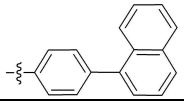
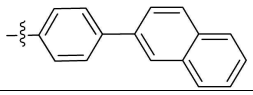
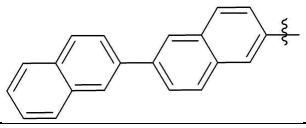
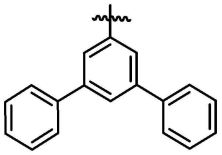
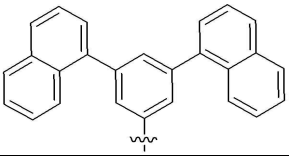
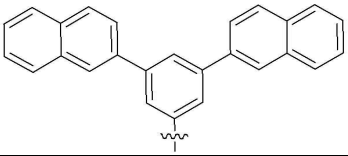
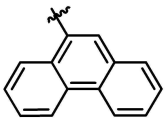
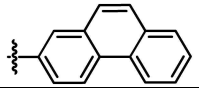
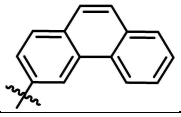
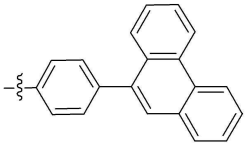
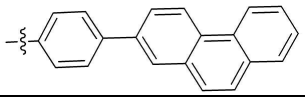
[0065] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, A는 헤테로아릴아민기; 아릴아민기; 아릴헤테로아릴아민기; 알킬기, 아릴기 및 헤테로고리기 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 알킬기, 아릴기 및 헤테로고리기 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 아민기; 알킬기, 아릴기 및 헤테로고리기 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 알킬아릴기; 또는 알킬기, 아릴기 및 헤테로고리기 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

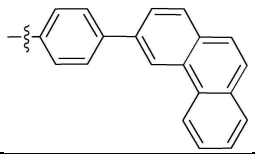
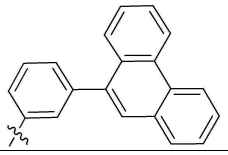
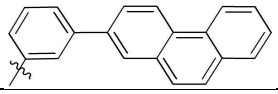
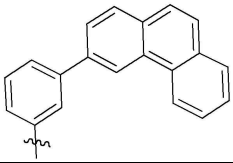
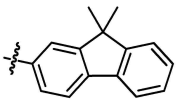
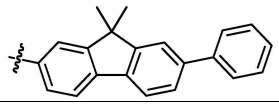
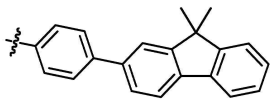
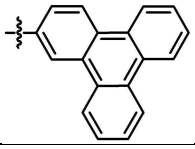
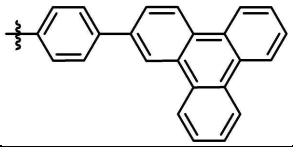
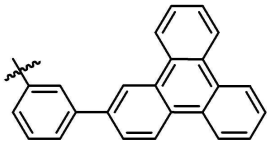
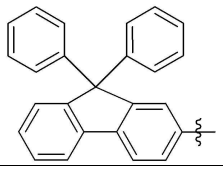
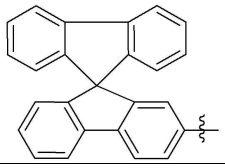
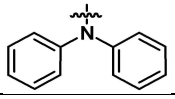
[0066] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, A는 아릴아민기; 아릴기 및 헤테로고리기 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 아릴기 및 헤테로고리기 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 아민기; 알킬아릴기; 또는 아릴기 및 헤테로고리기 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

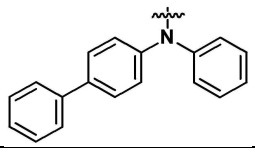
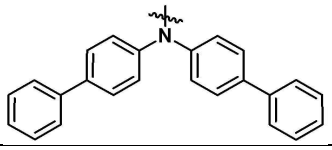
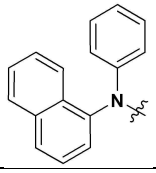
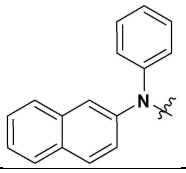
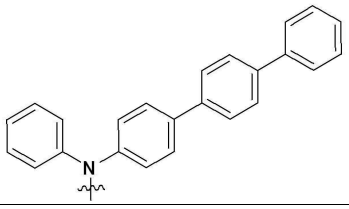
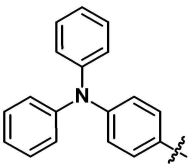
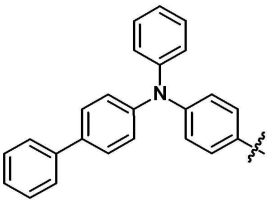
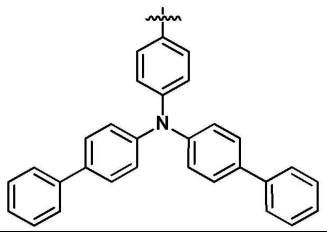
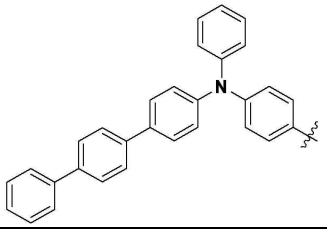
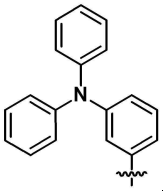
[0067] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, A는 하기 [표 1]에서 선택될 수 있다.

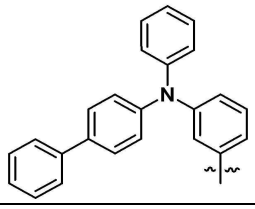
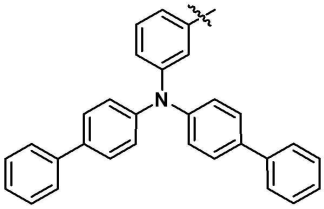
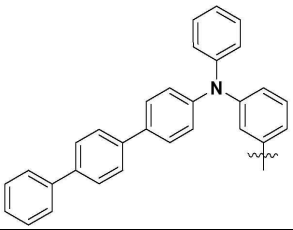
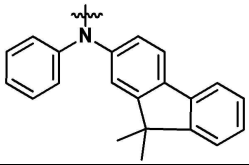
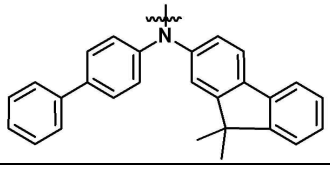
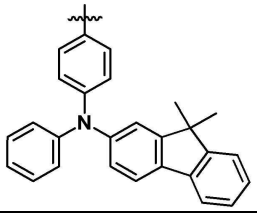
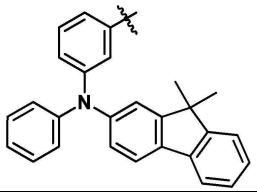
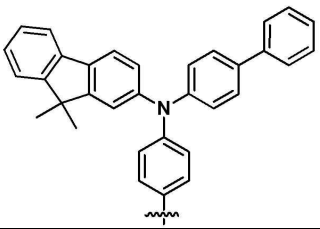
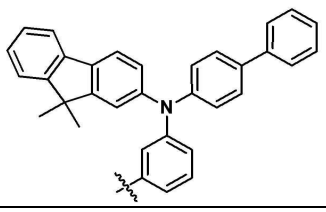
표 1

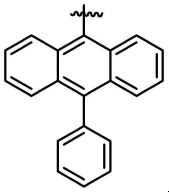
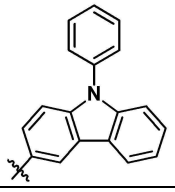
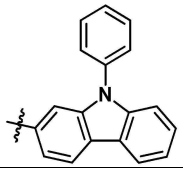
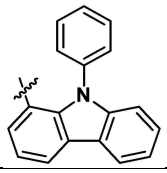
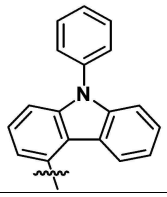
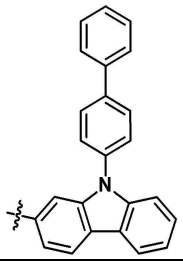
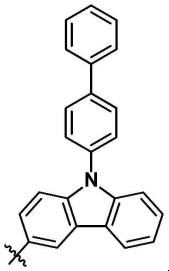
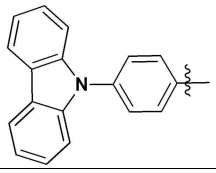
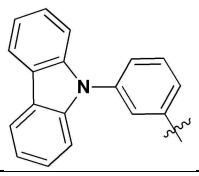
[0068]

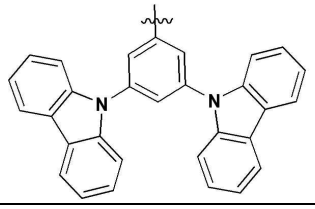
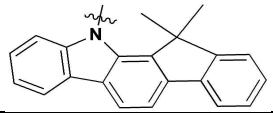
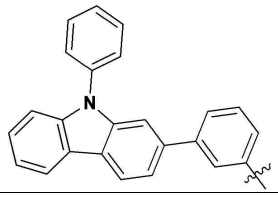
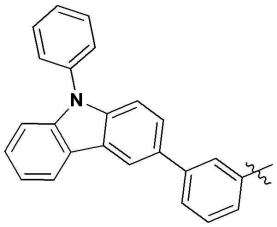
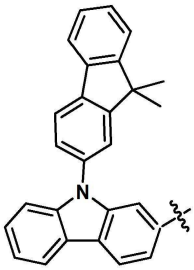
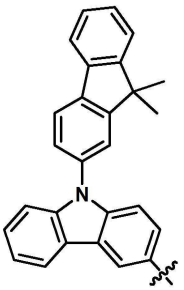
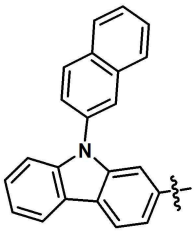
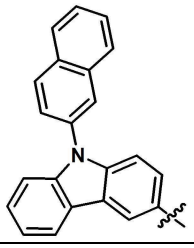
#X	- R
1X	
2X	
3X	
4X	
5X	
6X	
7X	
8X	
9X	
10X	
11X	
12X	
13X	
14X	
15X	

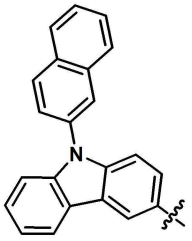
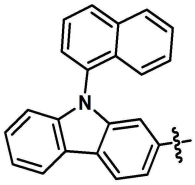
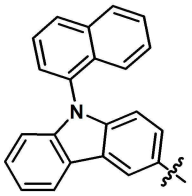
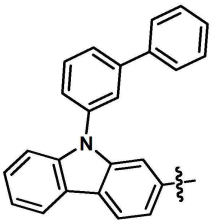
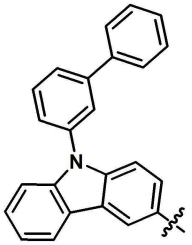
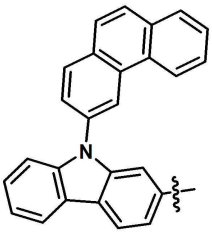
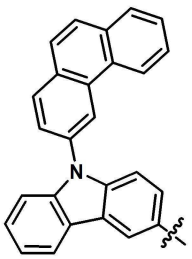
16X	
17X	
18X	
19X	
20X	
21X	
22X	
23X	
24X	
25X	
26X	
27X	
28X	

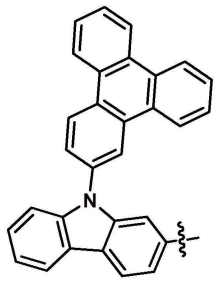
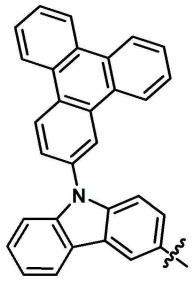
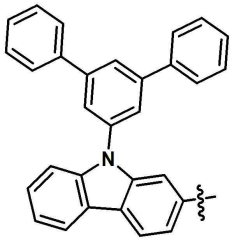
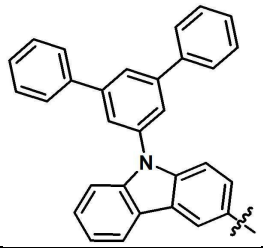
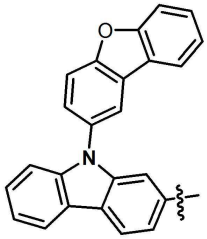
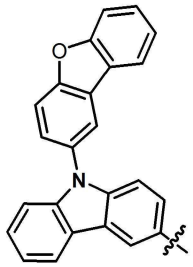
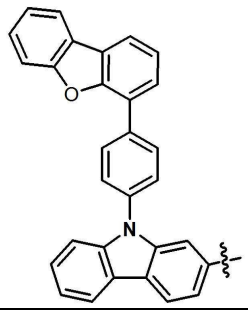
29X	
30X	
31X	
32X	
33X	
34X	
35X	
36X	
37X	
38X	

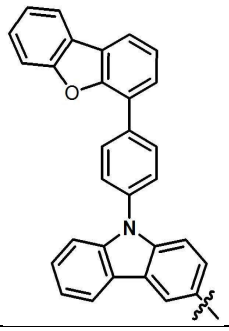
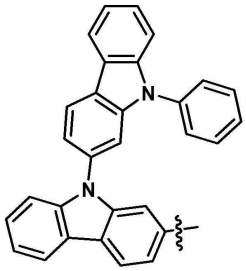
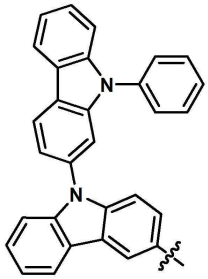
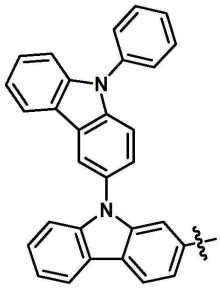
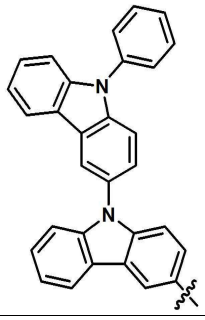
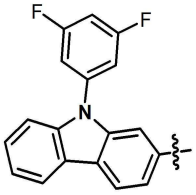
39X	
40X	
41X	
42X	
43X	
44X	
45X	
46X	
47X	

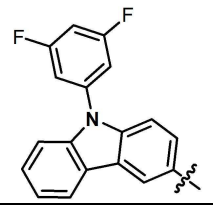
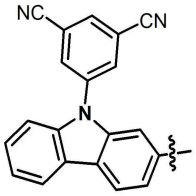
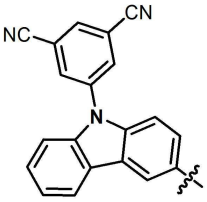
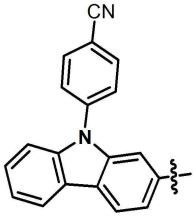
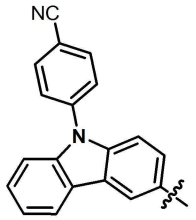
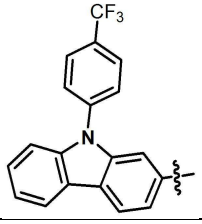
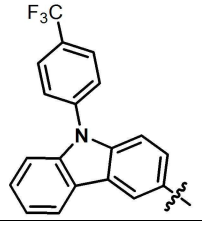
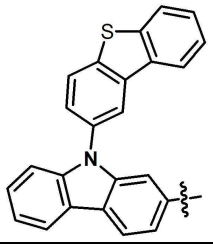
48X	
49X	
50X	
51X	
52X	
53X	
54X	
55X	
56X	

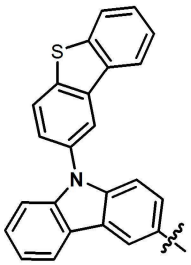
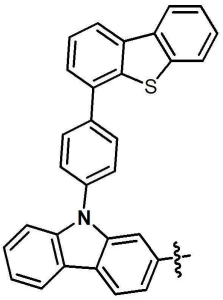
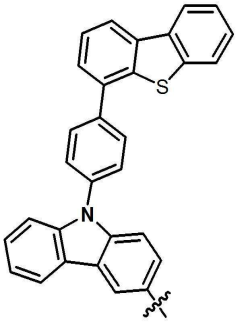
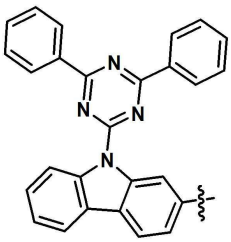
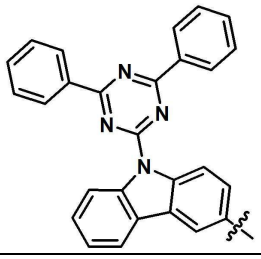
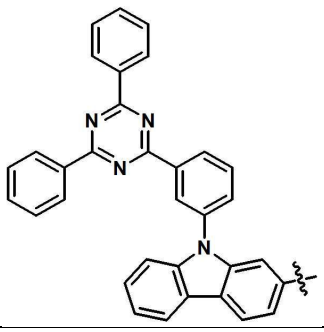
57X	
58X	
59X	
60X	
61X	
62X	
63X	
64X	

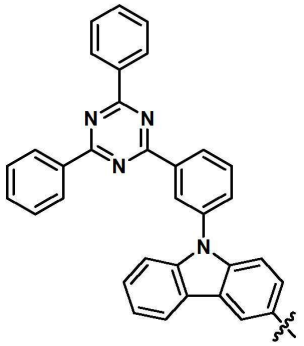
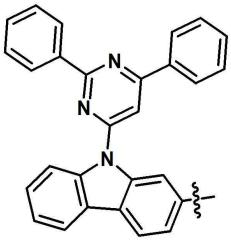
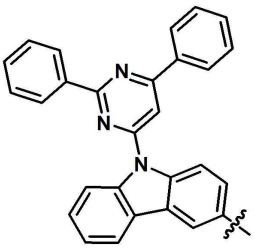
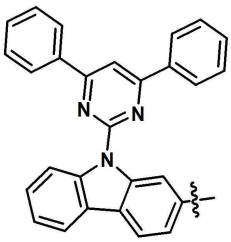
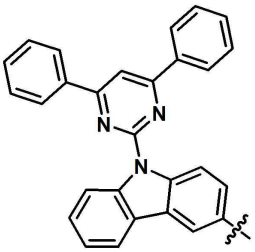
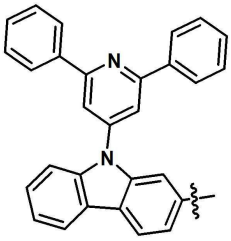
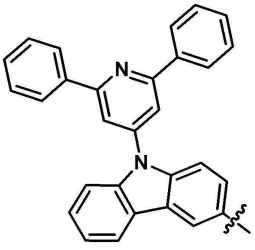
65X	
66X	
67X	
68X	
69X	
70X	
71X	

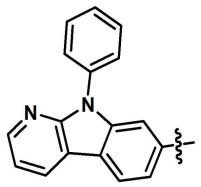
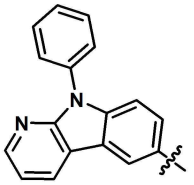
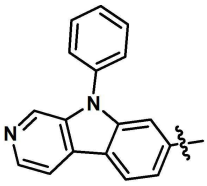
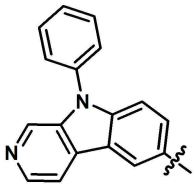
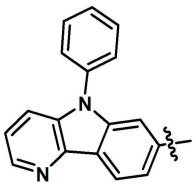
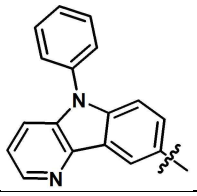
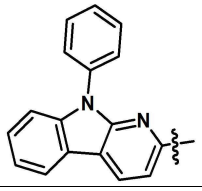
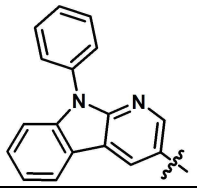
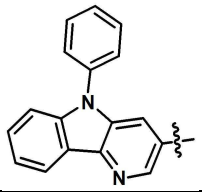
72X	
73X	
74X	
75X	
76X	
77X	
78X	

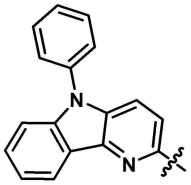
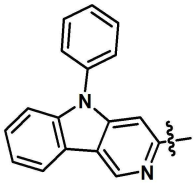
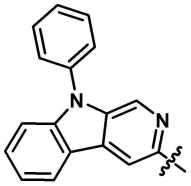
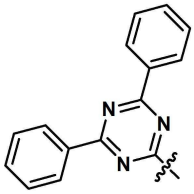
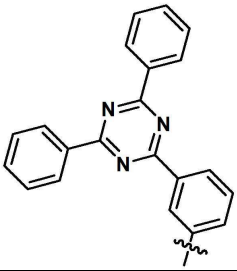
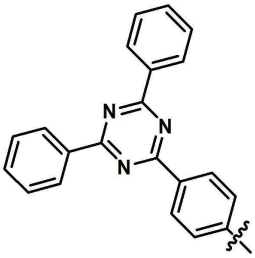
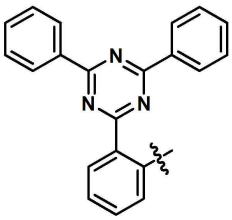
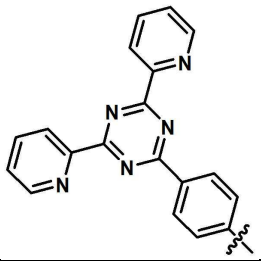
79X	
80X	
81X	
82X	
83X	
84X	

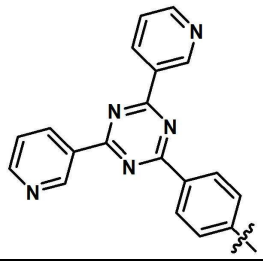
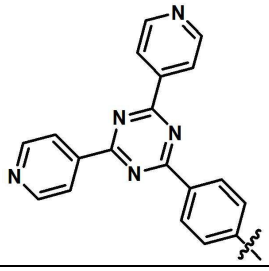
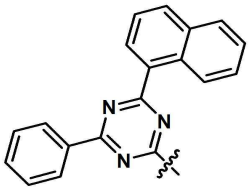
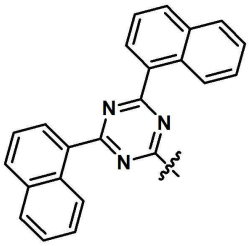
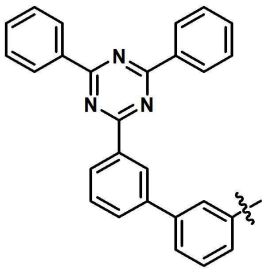
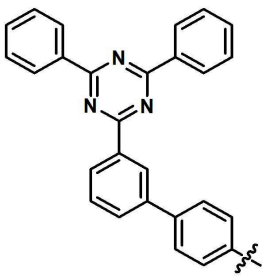
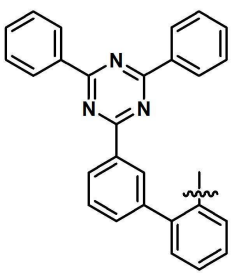
85X	
86X	
87X	
88X	
89X	
90X	
91X	
92X	

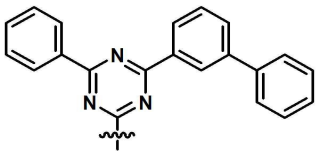
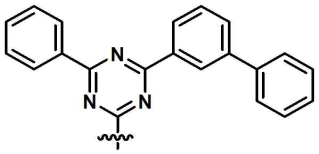
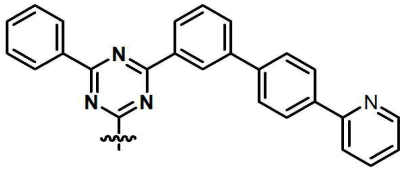
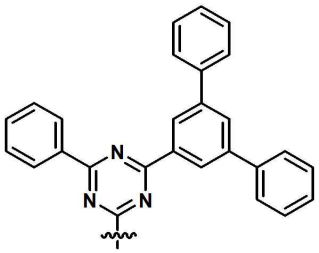
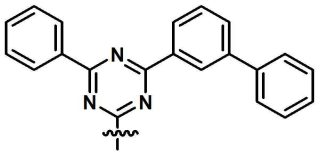
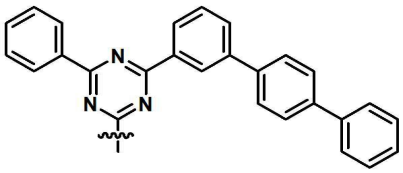
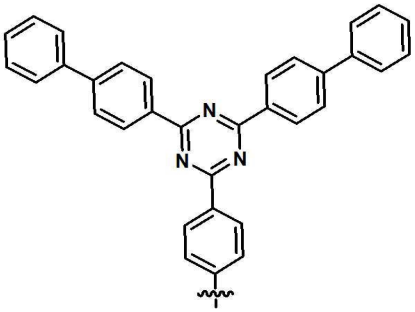
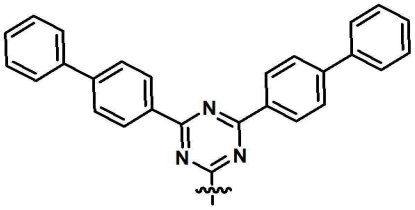
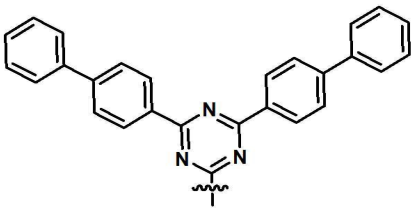
93X	
94X	
95X	
96X	
97X	
98X	

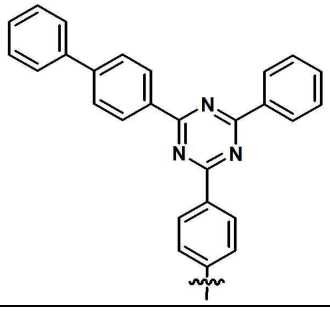
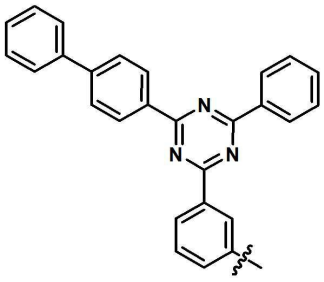
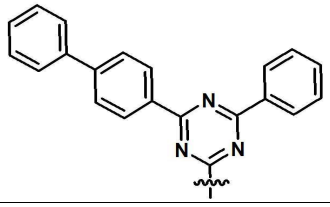
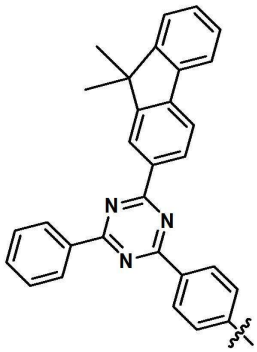
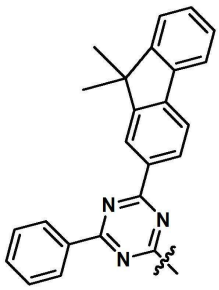
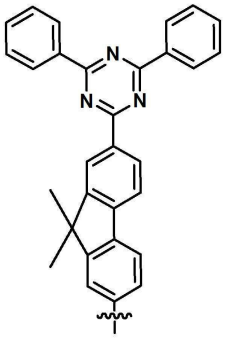
99X	
100X	
101X	
102X	
103X	
104X	
105X	

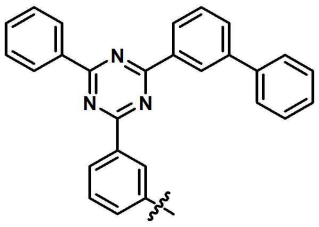
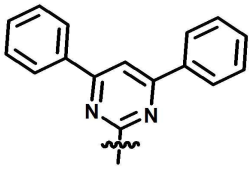
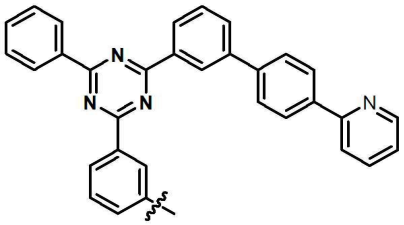
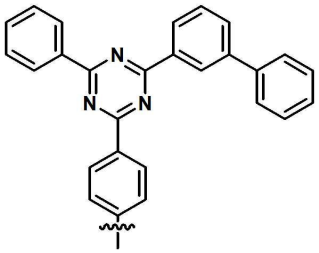
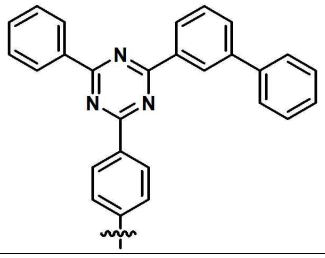
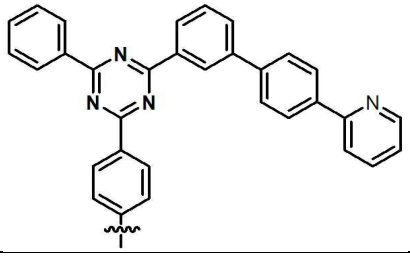
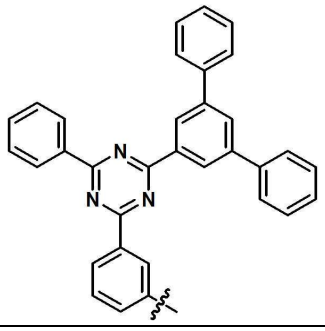
106X	
107X	
108X	
109X	
110X	
111X	
112X	
113X	
114X	

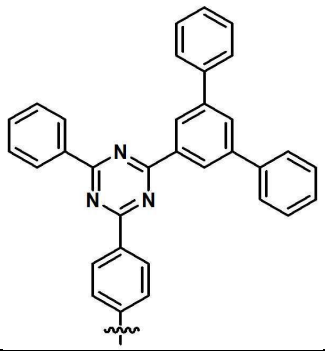
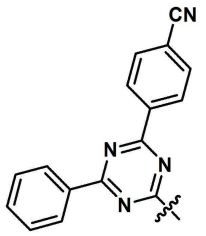
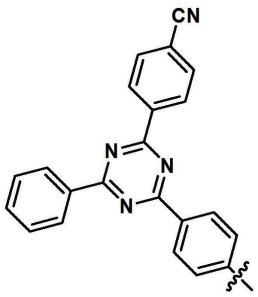
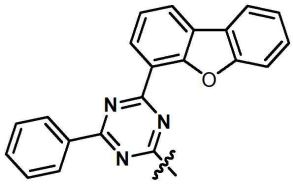
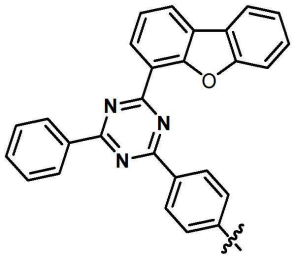
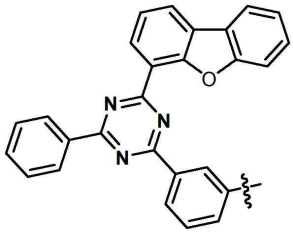
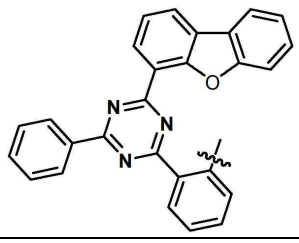
115X	
116X	
117X	
118X	
119X	
120X	
121X	
122X	

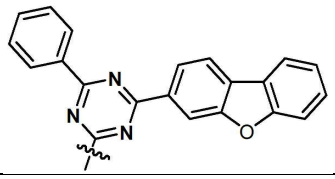
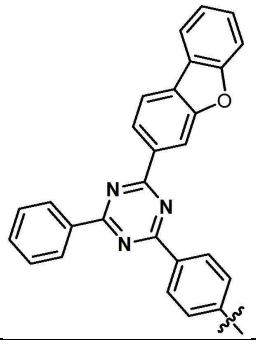
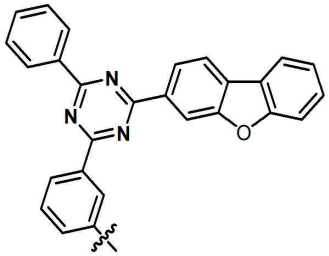
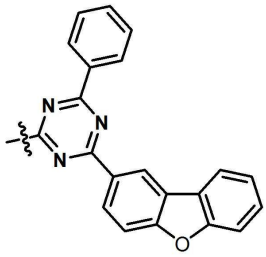
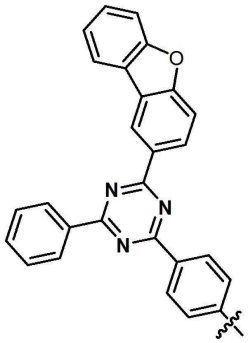
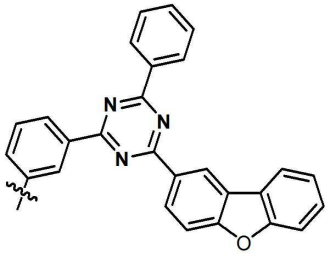
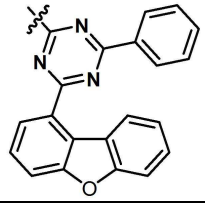
123X	
124X	
125X	
126X	
127X	
128X	
129X	

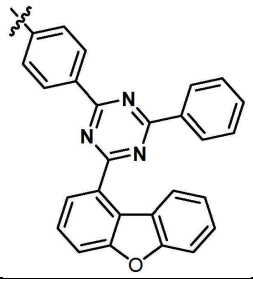
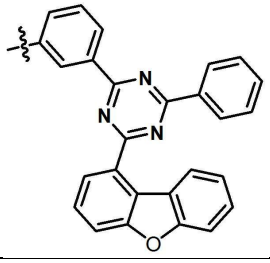
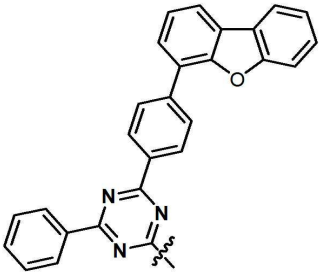
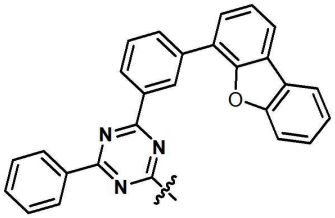
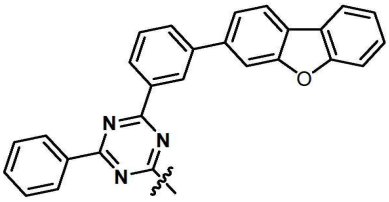
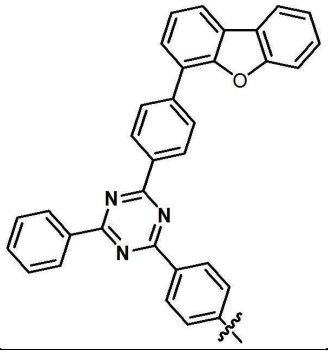
130X	
131X	
132X	 ?
133X	
134X	
135X	
136X	
137X	
138X	

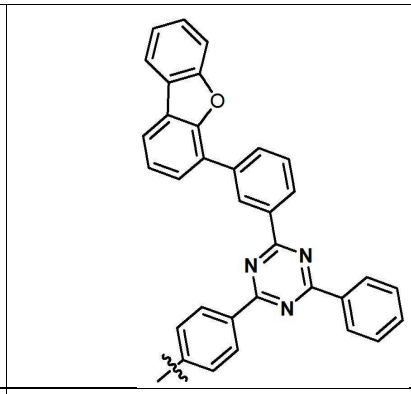
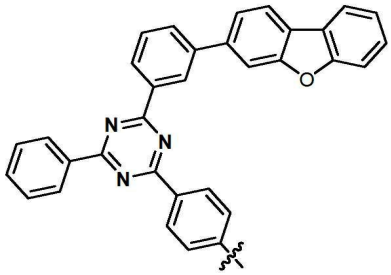
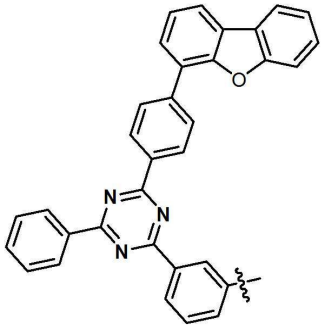
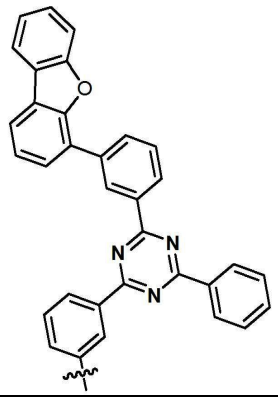
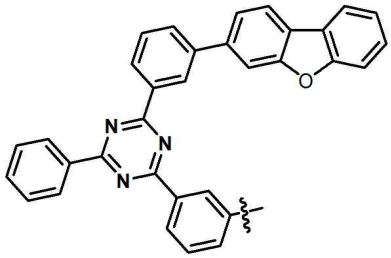
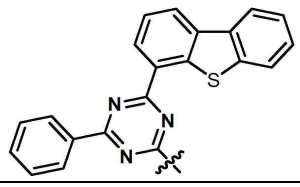
139X	
140X	
141X	
142X	
143X	
144X	

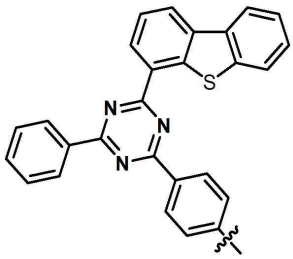
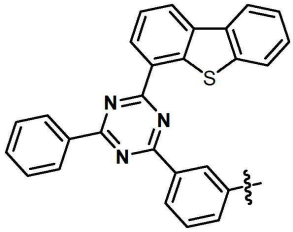
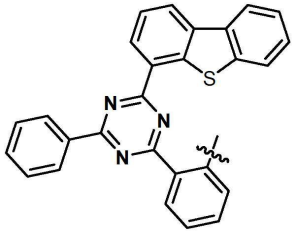
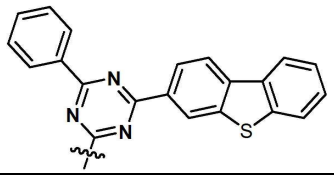
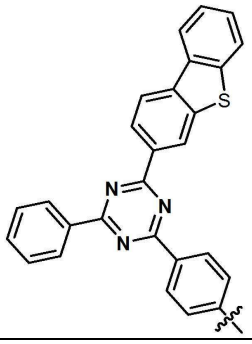
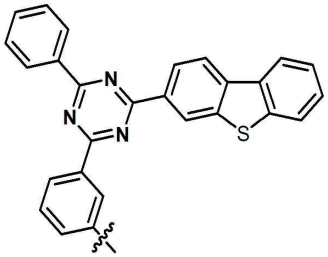
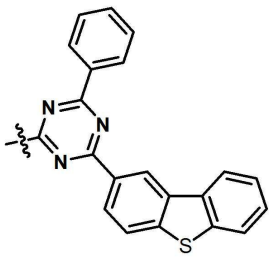
145X	
146X	
147X	
148X	
149X	
150X	
151X	

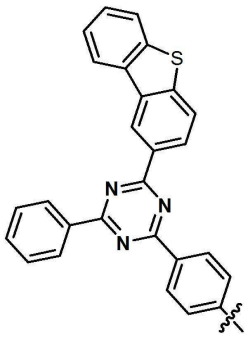
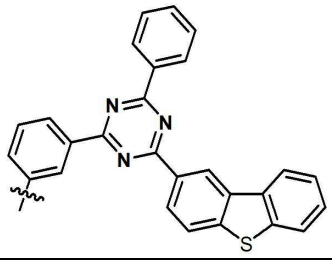
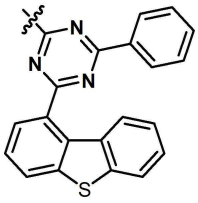
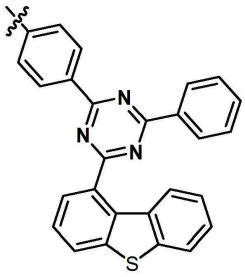
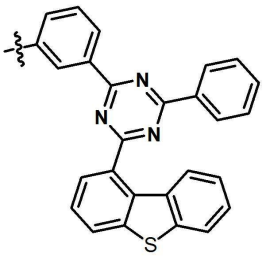
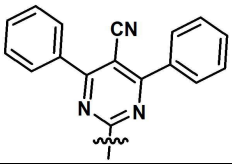
152X	
153X	
154X	
155X	
156X	
157X	
158X	

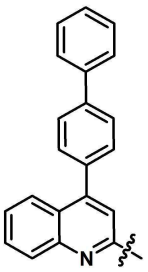
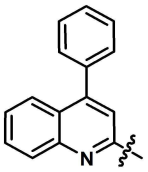
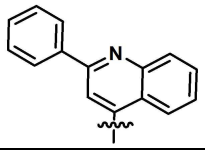
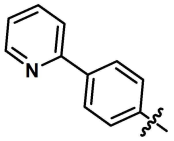
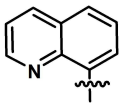
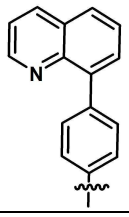
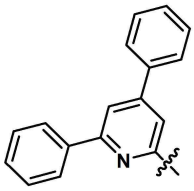
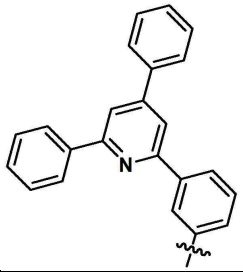
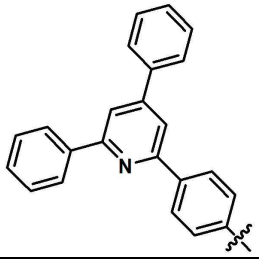
159X	
160X	
161X	
162X	
163X	
164X	
165X	

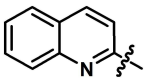
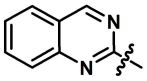
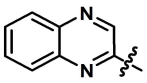
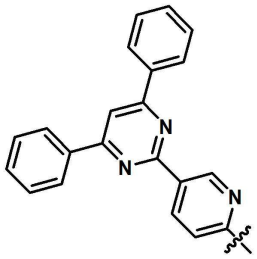
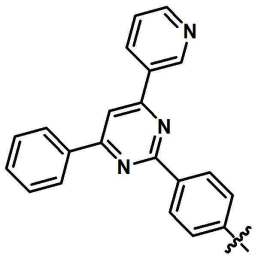
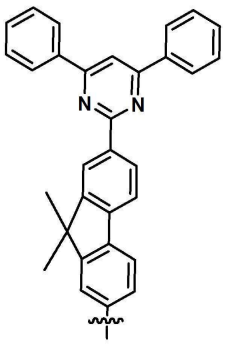
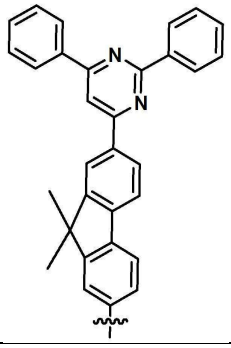
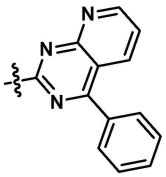
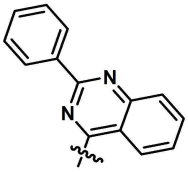
166X	
167X	
168X	
169X	
170X	
171X	

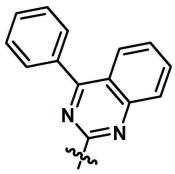
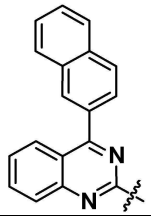
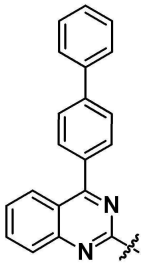
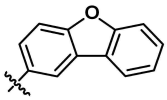
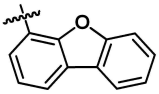
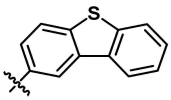
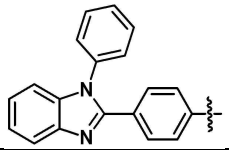
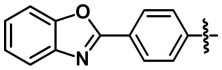
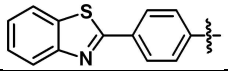
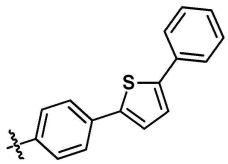
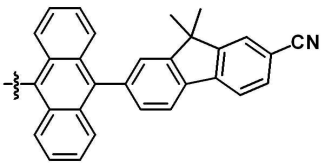
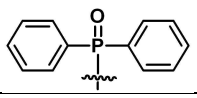
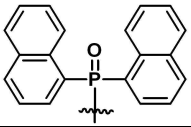
172X	
173X	
172X	
173X	
174X	
175X	

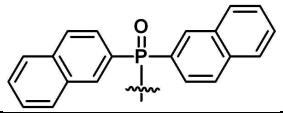
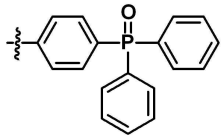
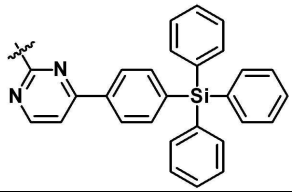
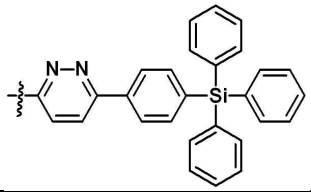
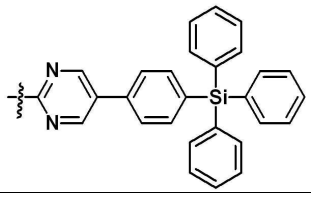
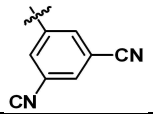
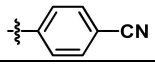
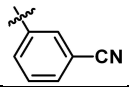
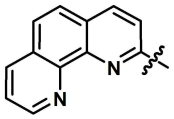
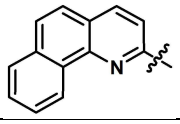
176X	
177X	
178X	
179X	
180X	
181X	
182X	

183X	
184X	
185X	
186X	
187X	
188X	
189X	
190X	
191X	

192X	
193X	
194X	
195X	
196X	
197X	
198X	
199X	
200X	

201X	
202X	
203X	
204X	
205X	
206X	
207X	
208X	
209X	

210X	
211X	
212X	
213X	
214X	
215X	
216X	
217X	
218X	
219X	
220X	
221X	
222X	

223X	
224X	
225X	
226X	
227X	
228X	
229X	
230X	
231X	
232X	

[0069] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R13은 -(L)n-A이고, A는 상기 [표 1]에서 선택될 수 있다. 이때 [표 1]에서 X는 B이고, 구체예는 1B 내지 232B이다.

[0070] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R12는 -(L)n-A이고, A는 상기 [표 1]에서 선택될 수 있다. 이때 [표 1]에서 X는 C이고, 구체예는 1C 내지 232C이다.

[0071] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R11은 -(L)n-A이고, A는 상기 [표 1]에서 선택될 수 있다. 이때 [표 1]에서 X는 D이고, 구체예는 1D 내지 232D이다.

[0072] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R10은 -(L)n-A이고, A는 상기 [표 1]에서 선택될 수 있다. 이때 [표 1]에서 X는 E이고, 구체예는 1E 내지 232E이다.

[0073] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R9는 -(L)n-A이고, A는 상기 [표 1]에서 선택될 수 있다. 이때 [표 1]에서 X는 F이고, 구체예는 1F 내지 232F이다.

[0074] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R8는 -(L)n-A이고, A는 상기 [표 1]에서 선택될 수 있다. 이때 [표 1]에서 X는 G이고, 구체예는 1G 내지 232G이다.

[0075] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R7은 -(L)n-A이고, A는 상기 [표 1]에서 선택될 수 있다. 이때 [표 1]에서 X는 H이고, 구체예는 1H 내지 232H이다.

[0076] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R6은 -(L)n-A이고, A는 상기 [표 1]에서 선택될 수 있다. 이때 [표 1]에서 X는 I이고, 구체예는 1I 내지 232I이다.

[0077] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R5는 -(L)n-A이고, A는 상기 [표 1]에서 선택될 수 있다. 이때 [표 1]에서 X는 J이고, 구체예는 1J 내지 232J이다.

[0078] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R4는 -(L)n-A이고, A는 상기 [표 1]에서 선택될 수 있다. 이때 [표 1]에서 X는 K이고, 구체예는 1K 내지 232K이다.

[0079] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R3는 -(L)n-A이고, A는 상기 [표 1]에서 선택될 수 있다. 이때 [표 1]에서 X는 M이고, 구체예는 1M 내지 232M이다.

[0080] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R2는 -(L)n-A이고, A는 상기 [표 1]에서 선택될 수 있다. 이때 [표 1]에서 X는 N이고, 구체예는 1N 내지 232N이다.

[0081] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R1는 -(L)n-A이고, A는 상기 [표 1]에서 선택될 수 있다. 이때 [표 1]에서 X는 O이고, 구체예는 1O 내지 232O이다.

[0082] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, A는 아릴아민기; 아릴기 및 헤테로고리기 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 아릴기 및 헤테로고리기 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 아민기; 알킬아릴기; 또는 아릴기 및 헤테로고리기 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고, 여기서 아릴기는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기 또는 스피로비플루오레닐기이고, 헤테로고리기는 트리아진기, 피리미딘기, 피리딘기, 퀴나졸린기, 퀴녹살린기, 디벤조퓨란기, 카바졸기 또는 벤조카바졸기이다.

[0083] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, A는 아릴기 또는 아민기로 치환 또는 비치환된 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 아릴기로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 알킬기 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 아릴기로 또는 헤테로고리기로 치환 또는 비치환된 트리아진기, 아릴기로 치환 또는 비치환된 퀴나졸린기, 아릴기로 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기, 아릴기로 치환 또는 비치환된 아민기, 또는 아릴아민기이다.

[0084] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R_{14} 및 R_{15}는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이다.

[0085] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R_{14} 및 R_{15}는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기; 또는 아릴기이다.

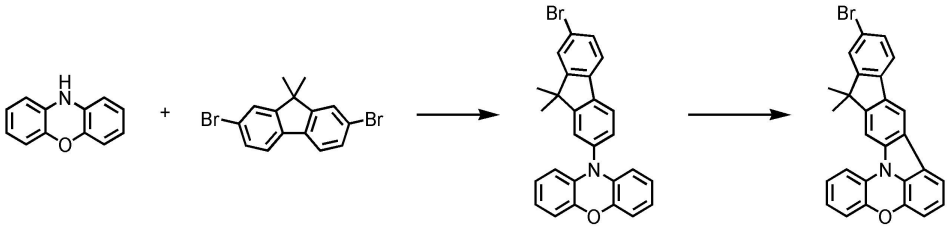
[0086] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R_{14} 및 R_{15}는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 6의 알킬기; 또는 탄소수 6 내지 20의 아릴기이다.

[0087] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R_{14} 및 R_{15}는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 메틸기; 또는 페닐기이다.

[0088] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, R_{14} 및 R_{15}는 메틸기이다.

[0089] 일 실시상태에 따르면, 전술한 화학식 1의 화합물은 하기 반응식에 따라 제조될 수 있다.

[0090] [반응식]



[0091] [SM1] [IM-1] [IM-2]

[0092] 또한, 본 명세서는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

[0093] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1 층 이상은 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

[0094] 본 명세서의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기층을 포함할 수 있다.

[0095] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층 또는 정공 주입과 수송을 동시에 하는 층을 포함하고, 상기 정공주입층, 정공수송층, 또는 정공 주입과 수송을 동시에 하는 층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다.

[0096] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다.

[0097] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 전자수송층 또는 전자주입층을 포함하고, 상기 전자수송층 또는 전자주입층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다.

[0098] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 전자 억제층을 포함하고, 상기 전자 억제층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다.

[0099] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 전자수송층, 전자주입층 또는 전자수송 및 전자주입을 동시에 하는 층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다.

[0100] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층 및 전자수송층을 포함하고, 상기 전자수송층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다.

[0101] 본 명세서의 하나의 실시상태에 있어서, 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 발광층; 상기 발광층과 상기 제1 전극 사이, 또는 상기 발광층과 상기 제2 전극 사이에 구비된 2층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 2층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다. 하나의 실시상태에 있어서, 상기 2층 이상의 유기물층은 전자수송층, 전자주입층, 전자 수송과 전자주입을 동시에 하는 층 및 정공저지층으로 이루어진 군에서 2 이상이 선택될 수 있다.

[0102] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 2층 이상의 전자수송층을 포함하고, 상기 2층 이상의 전자수송층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다. 구체적으로 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 2층 이상의 전자수송층 중 1층에 포함될 수도 있으며, 각각의 2층 이상의 전자수송층에 포함될 수 있다.

[0103] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물이 상기 각각의 2층 이상의 전자수송층에 포함되는 경우, 상기 화학식 1의 화합물을 제외한 다른 재료들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0104] 또 하나의 실시상태에 있어서, 유기 발광 소자는 기판 상에 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조(normal type)의 유기 발광 소자일 수 있다.

[0105] 또 하나의 실시상태에 있어서, 유기 발광 소자는 기판 상에 음극, 1층 이상의 유기물층 및 양극이 순차적으로

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

[0106] 예컨대, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 2에 예시되어 있다.

[0107] 도 1은 기판(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다.

[0108] 도 2는 기판 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자수송층(8) 및 음극(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화합물은 상기 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층 중 1층 이상에 포함될 수 있다.

[0109] 본 명세서의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 본 명세서의 화합물, 즉 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.

[0110] 상기 유기 발광 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.

[0111] 본 명세서의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1의 화합물, 즉 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.

[0112] 예컨대, 본 명세서의 유기 발광 소자는 기판 상에 제1 전극, 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층시킴으로써 제조할 수 있다. 이 때 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical Vapor Deposition)방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수 있다.

[0113] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.

[0114] 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질로부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수도 있다 (국제 특허 출원 공개 제 2003/012890호). 다만, 제조 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.

[0115] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 양극이고, 상기 제2 전극은 음극이다.

[0116] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 음극이고, 상기 제2 전극은 양극이다.

[0117] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SNO_2 : 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.

[0118] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO_2/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0119] 상기 정공 주입 물질로는 전극으로부터 정공을 주입하는 층으로, 정공 주입 물질로는 정공을 수송하는 능력을 가져 양극에서의 정공 주입효과, 발광층 또는 발광재료에 대하여 우수한 정공 주입 효과를 갖고, 발광층에서 생성된 여기자의 전자주입층 또는 전자주입재료에의 이동을 방지하며, 또한, 박막 형성 능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrin), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone)계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정 되는 것은 아니다.

[0120] 상기 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층으로, 정공 수송 물질로

는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0121] 상기 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq_3); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAlq; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0122] 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.

[0123] 도펀트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스트릴아민 화합물, 붕소 착체, 플루오란텐 화합물, 금속 착체 등이 있다. 구체적으로 방향족 아민 유도체로는 치환 또는 비치환된 아릴아민기를 갖는 축합 방향족환 유도체로서, 아릴아민기를 갖는 피렌, 안트라센, 크리센, 페리플란텐 등이 있으며, 스티릴아민 화합물로는 치환 또는 비치환된 아릴아민에 적어도 1개의 아릴비닐기가 치환되어 있는 화합물로, 아릴기, 실릴기, 알킬기, 시클로알킬기 및 아릴아민기로 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.

[0124] 상기 전자 수송 물질로는 전자주입층으로부터 전자를 수취하여 발광층까지 전자를 수송하는 층으로 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al착물; Alq_3를 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.

[0125] 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, 다이페노퀴논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다이아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 함질소 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

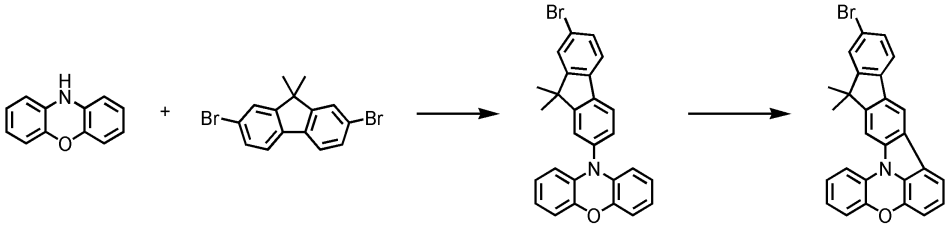
[0126] 상기 금속 착체 화합물로서는 8-하이드록시퀴놀리나토 리튬, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)아연, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)구리, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)망간, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(2-메틸-8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)갈륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)아연, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)클로로갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(o-크레졸라토)갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(1-나프톨라토)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(2-나프톨라토)갈륨 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0127] 본 명세서에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0128] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자 외에도 유기 태양 전지 또는 유기 트랜지스터에 포함될 수 있다.

[0129] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자의 제조는 이하 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나 하기 실시예는 본 명세서를 예시하기 위한 것이며, 본 명세서의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0130] **제조예 1. 화합물 IM-2의 제조**

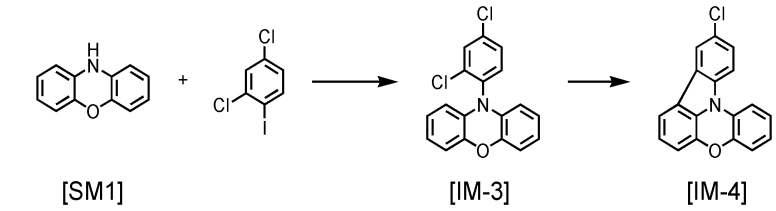


[0131] [SM1] [IM-1] [IM-2]

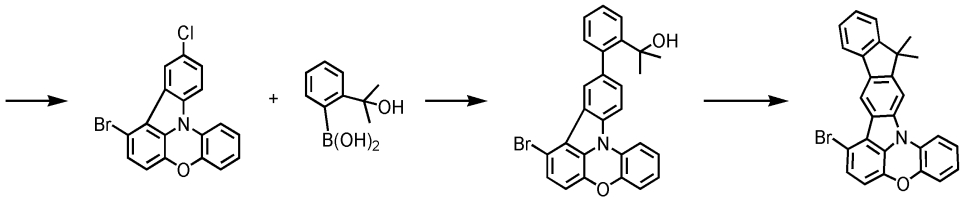
[0132] (1) SM1(50g, 0.27mol)과 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)(105.7g, 0.3mol)을 테트라하이드로퓨란(Tetrahydrofuran, THF)에 녹인 후, 탄산칼슘 수용액을 첨가하고, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(0.32g, 0.0003mol)을 넣어 끓이면서, 교반하였다. 1시간 교반하고 상온으로 식혀서 유기층을 분리한 후 클로로포름과 에탄올로 재결정하여 화합물 IM-1 고체 (98g, 수율 79%)를 얻었다. MS: $[M+H]^+$ = 454

[0133] (2) IM-1(98g, 0.22mol)과 탄산칼륨(K_2CO_3)(29.8g, 1eq), 피발산(pivalic aicd)를 넣어주고 산소 조건하에서 아세트산팔라듐(Palladium(II) acetate, $Pd(OAc)_2$)(5mol%)을 넣어 가열하였다. 18시간 교반하고 상온으로 식혀 필터하며 에탄올(ethanol, EtOH)로 씻었다. 석출된 고체를 테트라하이드로퓨란(Tetrahydrofuran, THF)으로 녹여 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압농축 시키고 에틸아세테이트 900ml 재결정하여 상기 화합물 IM-2(71g, 수율: 73%)를 제조하였다. MS: $[M+H]^+$ = 452

[0134] **제조예 2. 화합물 IM-7의 제조**



[SM1] [IM-3] [IM-4]



[0135] [IM-5] [IM-6] [IM-7]

[0136] (1) SM1(50g, 0.27mol)과 2,4-디클로로-1-요오드벤젠(2,4-dichloro-1-iodobenzene)(82g, 0.3mol)을 테트라하이드로퓨란(Tetrahydrofuran, THF)에 녹인 후, 탄산칼슘 수용액을 첨가하고, 테트라키스-(트리페닐포스핀)팔라듐(0.95g, 0.0008mol)을 넣어 끓이면서, 1.5시간 교반하였다. 그 후 상온으로 식혀서 유기층을 분리한 후 클로로포름과 에탄올로 재결정하여 화합물 IM-3 고체(62g, 수율 69%)를 얻었다. MS: $[M+H]^+$ = 327

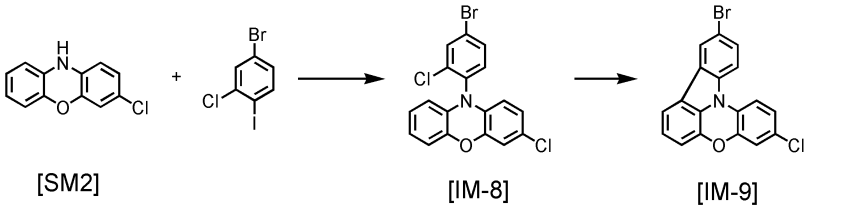
[0137] (2) 화합물 IM-3 62g(0.19mol, 1.0eq)에 아세트산팔라듐(Palladium(II) acetate, $Pd(OAc)_2$) 4.24g(18.89mmol, 015eq) 트리페닐포스핀(triphenylphosphine, PPh_3) 4.96g(18.89mmol, 0.1eq), 탄산칼륨(K_2CO_3) 52.22g(0.38mmol, 2.0eq), 테트라-n-부틸암모니움 브로마이드(Tetra-n-butylammonium bromide) 30.45g(0.09mmol, 0.5eq)을 다이메틸아세트아마이드(Dimethylacetamide) 620 mL에 넣고 반응을 진행했다. 반응액을 150 에서 19시간 동안 교반 시킨 후 용매를 감압 농축하였다. 이 농축액을 클로로포름(chloroform, $CHCl_3$)에 완전히 녹인 후 물로 씻어주고 생성물이 녹아있는 용액을 감압 농축하고 컬럼크로마토그래피를 이용하여 정제하였다. 화합물 IM-4 44g (수율 80 %)을 얻었다. MS: $[M+H]^+$ = 292

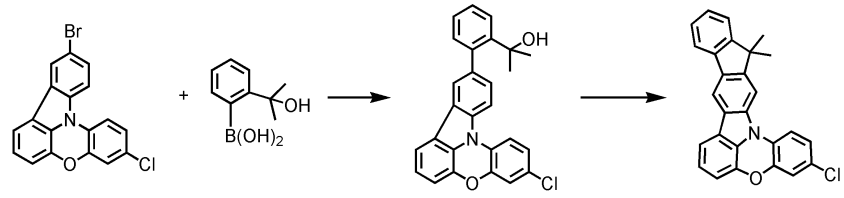
[0138] (3) 화합물 IM-4 44g(0.15mol, 1eq)을 다이메틸폼아마이드(dimethylformamide, DMF) 400ml에 녹인 후, 0에서 N-브로모숙신이미드(N-bromosuccinimide, NBS) 29.53g(0.16mol, 1.1eq)을 5회 나누어 첨가해준 뒤, 실온에서 5시간 교반하였다. 이 후, 용액을 감압한 뒤, 에틸아세테이트에 녹여 물로 물로 씻어준 뒤, 유기층을 분리해 내고 감압하여 용매를 모두 제거하였다. 이를 컬럼크로마토그래피를 이용하여 화합물 IM-5 53g (수율 95 %)를 얻었다.

[0139] (4) 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 IM-5 53g(0.14mol, 1eq), 2-(2-히드록시프로판-2-일)페닐)붕소산 (2-(2-hydroxypropan-2-yl)phenyl)boronic acid) 28.3g (0.16mol, 1.1eq)을 테트라하이드로퓨란 300ml에 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(100ml)을 첨가하고, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 3.30g(2.86mmol, 0.02eq)을 넣은 후 8 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물 층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압농축 시키고 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:10으로 컬럼하여 상기 화합물 IM-6 (59g, 수율: 88%)를 제조하였다. MS: $[M+H]^+$=470

[0140] (5) 화합물 IM-6 59g (0.13mol, 1eq)을 아세트산(acetic acid) 200ml에 녹인 후 황산 2-3 방울을 첨가하여 끓여주었다. 상온으로 냉각시킨 후 물을 첨가하여 1시간가량 교반시킨 후 여과하여 화합물 IM-7 (49g, 수율: 86 %)를 얻었다. MS: $[M+H]^+$=452

[0141] **제조예 3. 화합물 IM-11의 제조**





[0142]

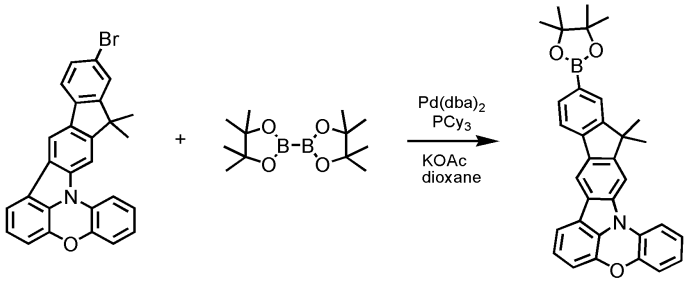
[0143] (1) 화합물 IM-3 합성방법에서 SM1 대신 SM2를, 2,4-디클로로-1-요오드벤젠(2,4-dichloro-1-iodobenzene) 대신 4-브로모-1-클로로-1-요오드벤젠(4-bromo-2-chloro-1-iodobenzene)을 사용한 것을 제외하고 화합물 IM-3을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 IM-8를 제조하였다.

[0144] (2) 화합물 IM-3 대신 화합물 IM-8를 사용한 것을 제외하고 화합물 IM-4을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 IM-9를 제조하였다.

[0145] (3) 화합물 IM-5 대신 화합물 IM-9를 사용한 것을 제외하고 화합물 IM-6을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 IM-10를 제조하였다.

[0146] (4) 화합물 IM-6 대신 화합물 IM-10를 사용한 것을 제외하고 화합물 IM-7을 제조하는 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 IM-11(43g, 수율: 83%)를 제조하였다.

[0147] **제조예 4. 화합물 IM-12의 제조**

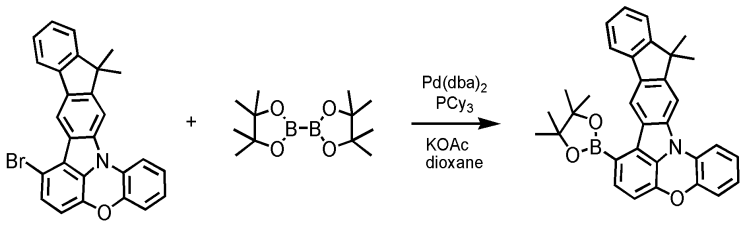


[IM-2] [IM-12]

[0148]

[0149] 질소 분위기에서 500ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 IM-2 35g(77.3mmol, 1eq), 비스(피나콜라토)디보론(bis(pinacolate)diboron) 20.6g(81.2mmol, 1.05eq), 아세트산칼륨(Potassium acetate, KOAc) 22.8g(0.23ol, 3eq)을 디옥산(dioxane) 300ml에 녹인 후 비스(디벤질리덴아세톤)팔라듐(0)(bis(dibenzylideneacetone)palladium(0), $Pd(dba)_2$) 1.33g(2.32mmol, 0.03eq), 트리싸이클로헥실포스핀(tricyclohexylphosphine, PCy_3) 1.3g(4.64mmol, 0.06eq) 넣은 후 4시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 용매 제거 후 클로로포름으로 녹여 물로 씻어준 뒤 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압농축 시키고 재결정을 통해 상기 화합물 IM-12 (33g, 수율: 83%)를 제조하였다. MS: $[M+H]^+$=500

[0150] **제조예 5. 화합물 IM-13의 제조**

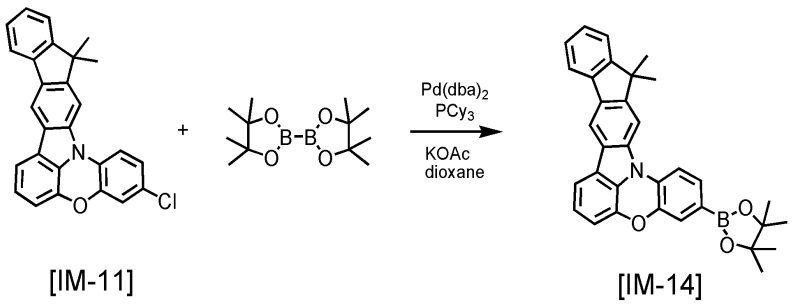


[IM-7] [IM-13]

[0151]

[0152] 제조예 4에서 출발물질을 화합물 IM-2 대신 IM-7을 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 4의 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 IM-13을 제조하였다.

[0153] **제조예 6. 화합물 IM-14의 제조**

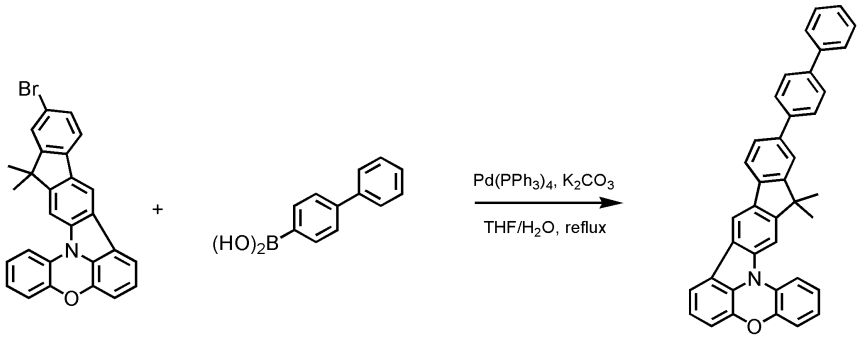


[IM-11] [IM-14]

[0154]

[0155] 제조예 4에서 출발물질을 화합물 IM-2 대신 IM-11을 사용한 것을 제외하고 상기 제조예 4의 방법과 동일한 방법으로 상기 화합물 IM-14을 제조하였다.

[0156] **제조예 7. 화합물 1-1의 제조**

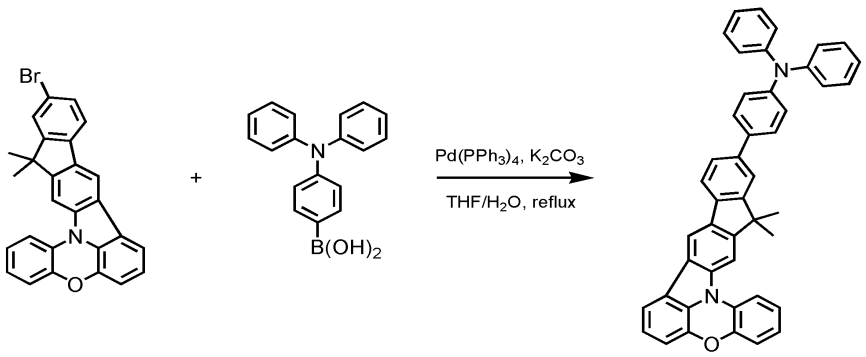


[IM-2] [화합물 1-1]

[0157]

[0158] 질소 분위기에서 250ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 IM-2(6g, 13.3mmol), (1,1'-바이페닐)-4-일붕소산((1,1'-biphenyl)-4-ylboronic acid) (2.89g, 14.6mmol)을 테트라하이드로퓨란 100ml에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(50ml)을 첨가하고, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.31g, 0.27mmol)을 넣은 후 5시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물 층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압농축 시키고 에틸아세테이트 250ml로 재결정하여 상기 화합물 1-1(5.5g, 수율: 86%)를 제조하였다. MS: [M+H] +=526

[0159] **제조예 8. 화합물 1-2의 제조**

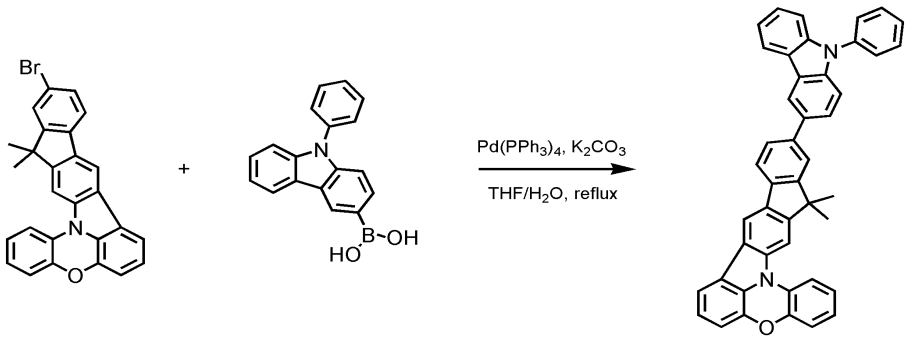


[IM-2] [화합물 1-2]

[0160]

[0161] 질소 분위기에서 250ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 IM-2(6g, 13.3mmol), (4-(디페닐아미노)페닐)붕소산((4-(diphenylamino)phenyl)boronic acid)(4.22g, 13.8mmol)을 테트라하이드로퓨란 80ml에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(50ml)을 첨가하고, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐을 넣은 후 3시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압농축 시키고 에틸아세테이트 100ml로 재결정하여 상기 화합물 1-2(5g, 수율: 61%)를 제조하였다.

[0162] **제조예 9. 화합물 1-3의 제조**



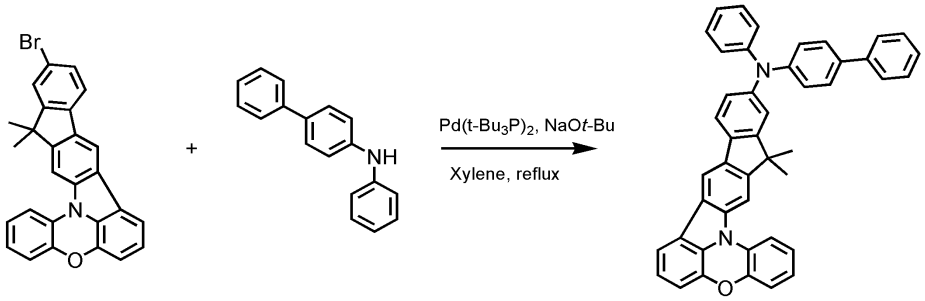
[IM-2] [화합물 1-3]

[0163]

[0164] 질소 분위기에서 250ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 IM-2(6g, 13.3mmol), (9-페닐-9H-카바졸-3-일)브롬산((9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)boronic acid)(4.19g, 14.6mmol)을 테트라하이드로퓨란 100 ml에 완전히 녹인 후 2M

탄산칼륨수용액(50ml)을 첨가하고, 테트라키스-(트리페닐포스핀)팔라듐(0.3g, 0.27mmol)을 넣은 후 6시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물 층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압농축 시키고 에틸아세테이트 170ml로 재결정하여 상기 화합물 1-3(7.5g, 수율: 92%)를 제조하였다. MS[M+H]$^+$= 615

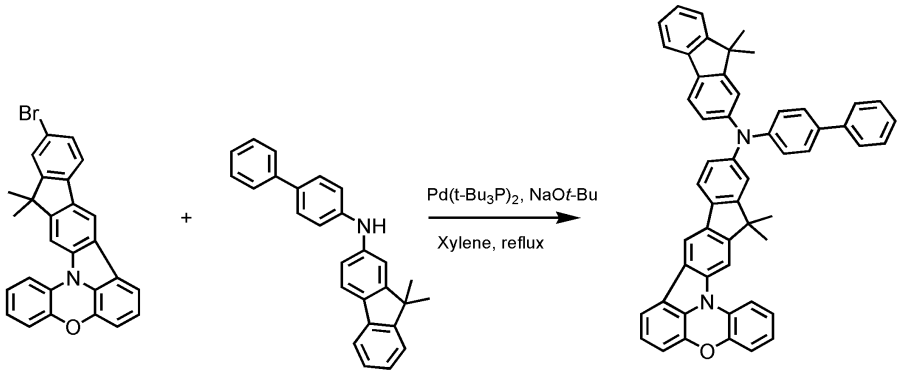
[0165] **제조예 10. 화합물 1-4의 제조**



[0166] [IM-2] [화합물 1-4]

[0167] 질소 분위기에서 250ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 IM-2(6g, 13.3 mmol), N-페닐-(1,1'-바이페닐)-4-아민(N-phenyl-(1,1'-biphenyl)-4-amine)(3.90g, 15.92mmol)을 자일렌(Xylene) 80ml에 녹인 후 나트륨 터트-부톡사이드(sodium tert-butoxide)(3.82g, 39.79mmol)을 첨가하고, 비스(트리-터트-부틸포스핀 팔라듐(0)(Bis(tri-tert-butylphosphine) palladium(0))(0.13g, 0.27mmol)을 넣은 후 3시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 필터하여 베이스(base)를 제거한 후에 자일렌(Xylene)을 감압농축 시키고 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:9으로 컬럼하여 상기 화합물 1-4 (6.5g, 수율: 53%)를 제조하였다. MS[M+H]$^+$= 617

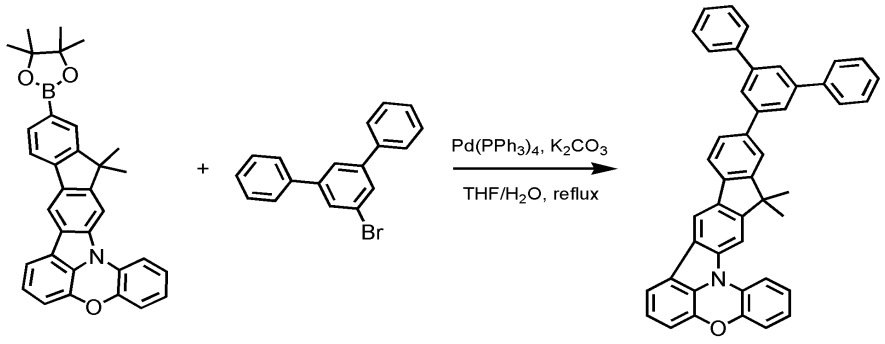
[0168] **제조예 11. 화합물 1-5의 제조**



[0169] [IM-2] [화합물 1-5]

[0170] 질소 분위기에서 250ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 IM-2(5g, 11.05mmol), N-((1,1'-바이페닐)-4-일)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민(N-((1,1'-biphenyl)-4-yl)-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine)(4.79g, 13.26mmol)을 자일렌(Xylene) 100ml에 완전히 녹인 후 나트륨 터트-부톡사이드(sodium tert-butoxide)(3.19g, 0.03mol)을 첨가하고, 비스(트리-터트-부틸포스핀)팔라듐(0)(bis(tri-tert-butylphosphine) palladium(0))(0.09g, 0.19mmol)을 넣은 후 7시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 필터하여 베이스(base)를 제거한 후에 자일렌(Xylene)을 감압농축 시키고 에탄올과 에틸아세테이트 200ml로 재결정하여 상기 화합물 1-5(7.0g, 수율: 86%)를 제조하였다. MS[M+H]$^+$= 733

[0171] **제조예 12. 화합물 1-6의 제조**

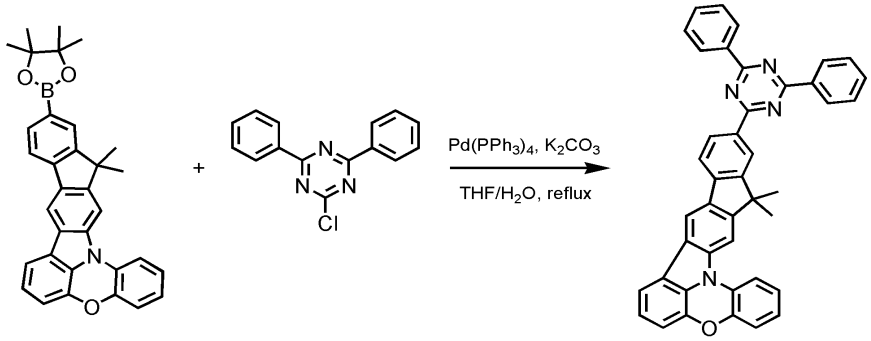


[IM-12] [화합물 1-6]

[0172]

[0173] 질소 분위기에서 250ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 IM-12(6g, 12.01mmol), 3,5-디페닐-1-브로모벤젠(3,5-diphenyl-1-bromobenzene)(3.90g, 12.62mmol)을 테트라하이드로퓨란 50 ml에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(35 ml)을 첨가하고, 테트라키스-(트리페닐포스핀)팔라듐(0.28 g, 0.24 mmol)을 넣은 후 6 시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물 층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압농축 시키고 에틸아세테이트 200ml로 재결정하여 상기 화합물 1-6(6.3 g, 수율: 87%)을 제조하였다. MS[M+H]$^+$= 602

[0174] **제조예 13. 화합물 1-7의 제조**

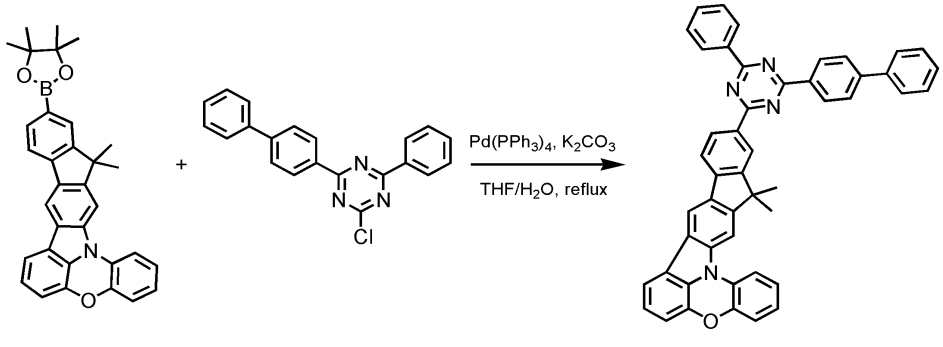


[IM-12] [화합물 1-7]

[0175]

[0176] 질소 분위기에서 250ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 IM-12(6g, 12.01mmol), 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진(2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine)(3.53g, 13.22mmol)을 테트라하이드로퓨란 75 ml에 완전히 녹인 후 2M 탄산칼륨수용액(30 ml)을 첨가하고, 테트라키스-(트리페닐포스핀)팔라듐(0.28 g, 0.24 mmol)을 넣은 후 4.5시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압농축 시키고 테트라하이드로퓨란과 에틸아세테이트 200ml로 재결정하여 상기 화합물 1-7(6.8g, 수율: 94%)를 제조하였다. MS[M+H]$^+$= 605

[0177] **제조예 14. 화합물 1-8의 제조**

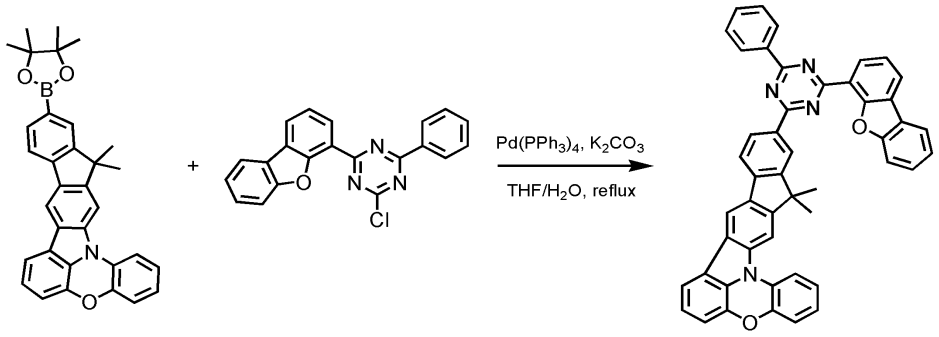


[IM-12] [화합물 1-8]

[0178]

[0179] 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진(2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) 대신 화합물 2-((1,1'-바이페닐-4-일)-4-클로로-6-페닐-1,3,5-트리아진(2-((1,1'-biphenyl)-4-yl)-4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine)을 사용한 것을 제외하고 제조예 13과 동일한 방법으로 상기 화합물 1-8(6.9 g, 수율 94 %)을 제조하였다. MS[M+H]$^+$= 681

[0180] **제조예 15. 화합물 1-9의 제조**

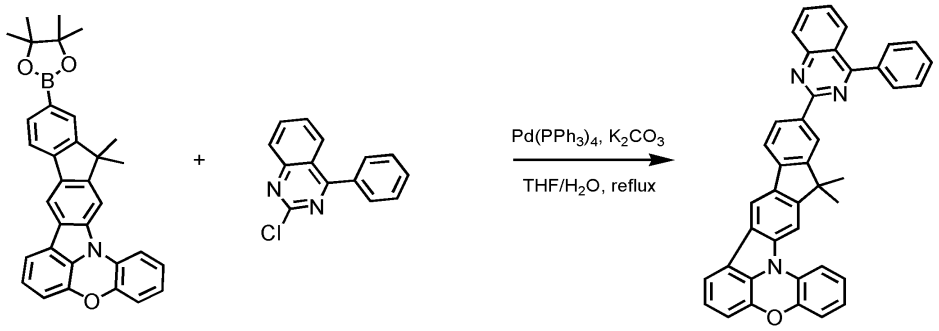


[IM-12] [화합물 1-9]

[0181]

[0182] 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진(2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) 대신 화합물 2-클로로-4-(디벤조(b,d)퓨란-4-일)-6-페닐-1,3,5-트리아진(2-chloro-4-(dibenzo(b,d)furan-4-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine)을 사용한 것을 제외하고 제조예 13과 동일한 방법으로 상기 화합물 1-9 (6.9g, 수율 94 %)를 제조하였다. MS[M+H]$^+$= 681

[0183] **제조예 16. 화합물 1-10의 제조**

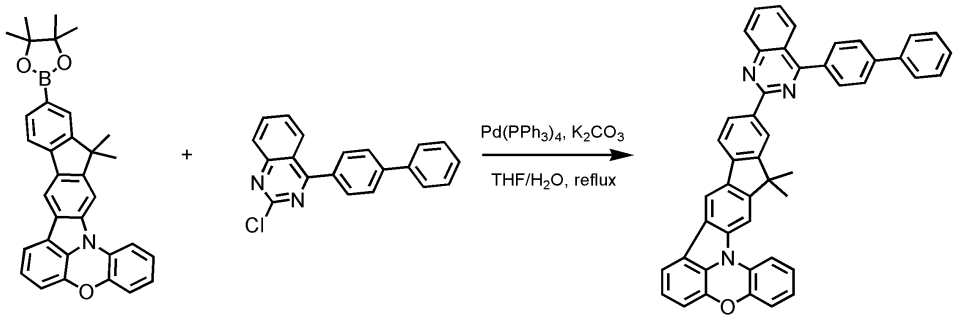


[IM-12] [화합물 1-10]

[0184]

[0185] 질소 분위기에서 250ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 IM-12(6g, 12.01mmol), 2-클로로-4-페닐퀴나졸린(2-chloro-4-phenylquinazoline)(3.18g, 13.22mmol) 테트라하이드로퓨란 60 ml에 완전히 녹인 후 탄산칼륨수용액(4.98g, 30mL)을 첨가하고, 테트라키스-(트리페닐포스핀)팔라듐(0.28g, 0.24mmol)을 넣은 후 10시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압농축 시키고 에틸아세테이트 150ml로 재결정하여 상기 화합물 1-10(5.80g, 수율: 84%)를 제조하였다. MS[M+H]$^+$= 578

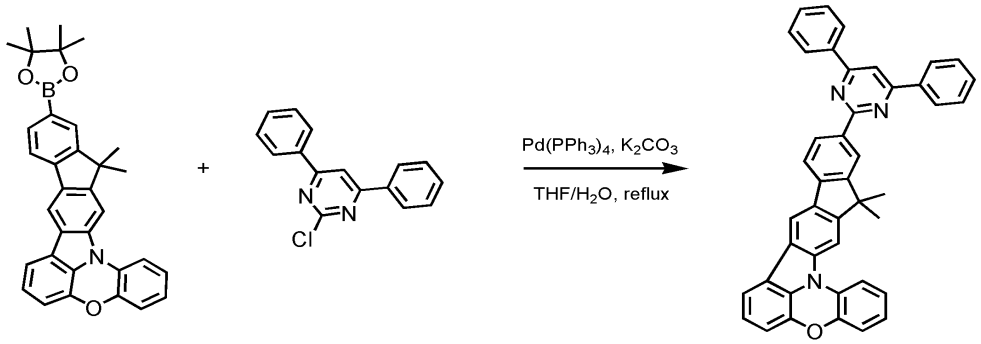
[0186] **제조예 17. 화합물 1-11의 제조**



[0187] [IM-12] [화합물 1-11]

[0188] 2-클로로-4-페닐퀴나졸린(2-chloro-4-phenylquinazoline) 대신 화합물 4-((1,1'-바이페닐)-4-일-2-클로로퀴나졸린(4-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-2-chloroquinazoline)을 사용한 것을 제외하고 제조예 16과 동일한 방법으로 상기 화합물 1-11(6.8g, 수율 87 %)을 제조하였다. MS[M+H]$^+$= 654

[0189] **제조예 18. 화합물 1-12의 제조**



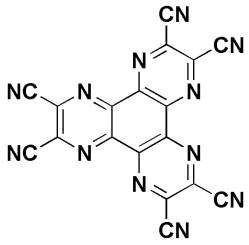
[0190] [IM-12] [화합물 1-12]

[0191] 2-클로로-4-페닐퀴나졸린(2-chloro-4-phenylquinazoline) 대신 화합물 2-클로로-4,6-디페닐피리미딘(2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine)을 사용한 것을 제외하고 제조예 16과 동일한 방법으로 상기 화합물 1-12(5.5g, 수율: 75%)를 제조하였다. MS[M+H]$^+$= 604

[0192] **실험예 1.**

[0193] 산화주석인듐(indium tin oxide, ITO)가 1,500Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이 때, 세제는 피셔(Fischer Co.)사의 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀러포어(Millipore Co.) 사 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. 산화주석인듐(ITO)이 박막 코팅된 유리기판을 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 순서대로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5 분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

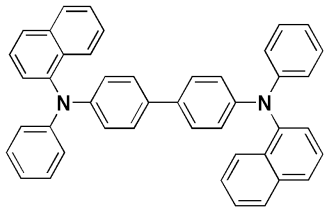
[0194] 이렇게 준비된 산화주석인듐(ITO) 투명 전극 위에 하기 화학식의 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(hexaazatriphenylene, HAT)을 500Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공 주입층을 형성하였다.



[HAT]

[0195]

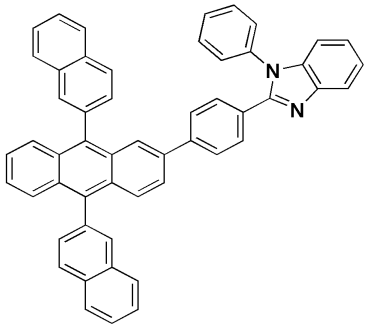
[0196] 그 위에 정공을 수송하는 물질인 4-4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB)(400Å)을 열 진공 증착하여 정공 수송층을 형성하였다.



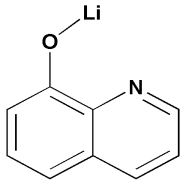
[NPB]

[0197]

[0198] 이어서, 상기 정공 수송층 위에 막 두께 300Å으로 상기 제조예에서 합성한 화합물 1-1을 트리스(2-페닐피리딘)이리듐(III)(tris(2-phenylpyridine)iridium(III), $Ir(ppy)_3$) 도판트와 10% 농도로 진공 증착하여 발광층을 형성하였다



[ET1]



[LiQ]

[0199]

[0200] 상기 발광층 위에 상기 화합물 ET1과 상기 화합물 리튬퀴놀레이트(ㅣlithium quinolate, LiQ)를 1:1의 중량비로 진공증착하여 300Å의 두께로 전자 주입 및 수송층을 형성하였다. 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 12Å두께로 리튬플로라이드(LiF)와 2,000Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

[0201] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4 내지 0.7Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플로라이드는 0.3Å/sec, 알루미늄은 2Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 2×10^{-7} 내지 5×10^{-6} torr를 유지하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0202] **실험예 2.**

[0203] 상기 실험예 1에서 화합물 1-1 대신 상기 화합물 1-2를 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0204] **실험예 3.**

[0205] 상기 실험예 1에서 화합물 1-1 대신 상기 화합물 1-3을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0206] **실험예 4.**

[0207] 상기 실험예 1에서 화합물 1-1 대신 상기 화합물 1-4를 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유

기 발광 소자를 제작하였다.

[0208] **실험예 5.**

[0209] 상기 실험예 1에서 화합물 1-1 대신 상기 화합물 1-5를 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0210] **실험예 6.**

[0211] 상기 실험예 1에서 화합물 1-1 대신 상기 화합물 1-6을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0212] **실험예 7.**

[0213] 상기 실험예 1에서 화합물 1-1 대신 상기 화합물 1-7을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0214] **실험예 8.**

[0215] 상기 실험예 1에서 화합물 1-1 대신 상기 화합물 1-8을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0216] **실험예 9.**

[0217] 상기 실험예 1에서 화합물 1-1 대신 상기 화합물 1-9를 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0218] **실험예 10.**

[0219] 상기 실험예 1에서 화합물 1-1 대신 상기 화합물 1-10을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0220] **실험예 11.**

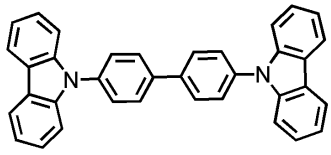
[0221] 상기 실험예 1에서 화합물 1-1 대신 상기 화합물 1-11을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0222] **실험예 12.**

[0223] 상기 실험예 1에서 화합물 1-1 대신 상기 화합물 1-12를 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0224] **비교예 1**

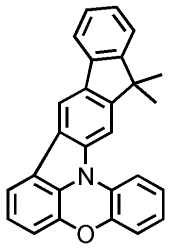
[0225] 상기 실험예 1에서 화합물 1-1 대신 화합물 H1를 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.



[0226] [H1]

[0227] **비교예 2**

[0228] 상기 실험예 1에서 화합물 1-1 대신 화합물 H2를 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.



[H2]

[0229]

[0230] 상기 실험예 1 내지 12 및 비교예 1과 비교예 2에서 각각의 화합물을 발광층으로 사용하여 제작한 소자결과를 표 2에 나타내었다.

표 2

[0231]

No.	HOST	도펀트	도핑농도(%)	구동전압(V)	발광효율(cd/A)
실험예1	화학식 1-1	$Ir(ppy)_3$	10	4.8	49.0
실험예2	화학식 1-2	$Ir(ppy)_3$	10	4.6	45.1
실험예3	화학식 1-3	$Ir(ppy)_3$	10	4.6	45.7
실험예4	화학식 1-4	$Ir(ppy)_3$	10	4.7	46.0
실험예5	화학식 1-5	$Ir(ppy)_3$	10	4.6	46.1
실험예6	화학식 1-6	$Ir(ppy)_3$	10	4.8	45.8
실험예7	화학식 1-7	$Ir(ppy)_3$	10	4.5	48.0
실험예8	화학식 1-8	$Ir(ppy)_3$	10	4.4	48.1
실험예9	화학식 1-9	$Ir(ppy)_3$	10	4.7	48.8
실험예10	화학식 1-10	$Ir(ppy)_3$	10	5.0	45.2
실험예11	화학식 1-11	$Ir(ppy)_3$	10	5.1	44.3
실험예12	화학식 1-12	$Ir(ppy)_3$	10	5.0	42.3
비교예1	H1	$Ir(ppy)_3$	10	5.3	37.0
비교예2	H2	$Ir(ppy)_3$	10	4.9	44.2

[0232] 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 발명의 범주에 속한다.

부호의 설명

[0233] 1: 기판

2: 양극

3: 발광층

4: 음극

5: 정공주입층

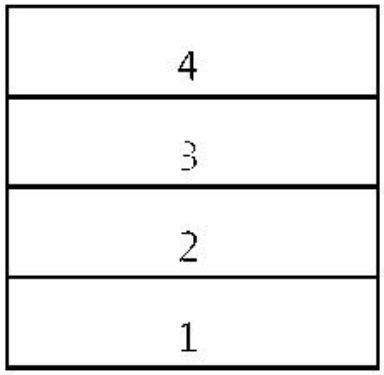
6: 정공수송층

7: 발광층

8: 전자수송층

도면

도면1



도면2

