



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2022년06월10일  
(11) 등록번호 10-2408435  
(24) 등록일자 2022년06월08일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07D 403/10 (2006.01) C07D 405/14 (2006.01)  
C07D 409/14 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)  
H01L 51/50 (2006.01)  
(52) CPC특허분류  
C07D 403/10 (2013.01)  
C07D 405/14 (2013.01)  
(21) 출원번호 10-2019-0002373  
(22) 출원일자 2019년01월08일  
심사청구일자 2020년02월27일  
(65) 공개번호 10-2020-0086131  
(43) 공개일자 2020년07월16일  
(56) 선행기술조사문헌  
KR1020150132872 A\*  
(뒷면에 계속)

(73) 특허권자  
삼성에스디아이 주식회사  
경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20 (공세동)  
(72) 발명자  
김창우  
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)  
김형선  
경기도 의왕시 고산로 56(고천동)  
(74) 대리인  
팬코리아특허법인

전체 청구항 수 : 총 15 항

심사관 : 서진화

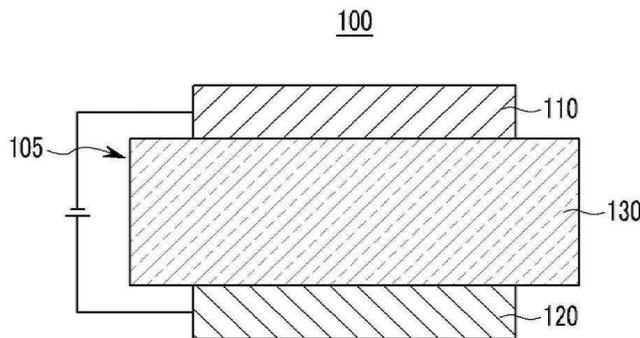
(54) 발명의 명칭 유기 광전자 소자용 화합물, 유기 광전자 소자용 조성물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치

(57) 요약

화학식 1로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물, 이를 포함하는 유기 광전자 소자용 조성물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치에 관한 것이다.

화학식 1에 대한 상세 내용은 명세서에 기재한 바와 같다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

*C07D 409/14* (2013.01)  
*H01L 51/0071* (2013.01)  
*H01L 51/0072* (2013.01)  
*H01L 51/50* (2013.01)  
*H01L 51/5012* (2013.01)

(72) 발명자

**류동완**

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

**신창주**

경기도 의왕시 고산로 56(고천동)

**이승재**

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

**이미진**

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

**이현규**

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

**정성현**

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

**정호국**

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

(56) 선행기술조사문헌

KR1020170037276 A\*

C. Li et al.. A simple and broadly applicable synthesis --(중략)-- thermally-activated delayed fluorescence. J. Mater. Chem. C. 2018, Vol. 6, pp. 6949-6957\*

KR1020180010808 A

US20190229270 A1

\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

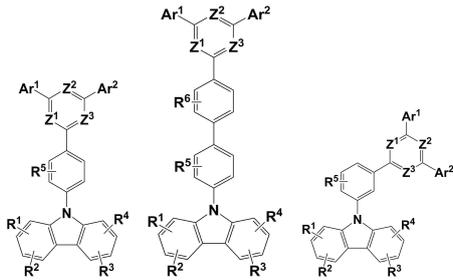
명세서

청구범위

청구항 1

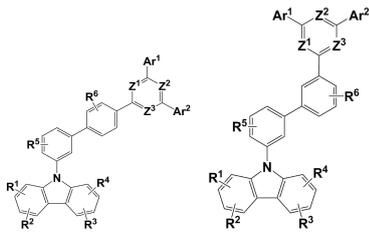
하기 화학식 1A-1, 화학식 1A-2 및 화학식 1B-1 내지 화학식 1B-3 중 하나로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 1A-1] [화학식 1A-2] [화학식 1B-1]



[화학식 1B-2]

[화학식 1B-3]



상기 화학식 1A-1, 화학식 1A-2 및 화학식 1B-1 내지 화학식 1B-3에서,

$Z^1$  내지  $Z^3$ 은 각각 독립적으로 N 또는 C-F이고,

$Z^1$  내지  $Z^3$  중 적어도 하나는 C-F이고,

$Z^1$  내지  $Z^3$  중 적어도 하나는 N이고,

$Ar^1$  및  $Ar^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기 또는 이들의 조합이고,

$R^1$  내지  $R^6$ 은 각각 독립적으로 수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이다.

청구항 2

삭제

청구항 3

삭제

청구항 4

삭제

청구항 5

제1항에서,

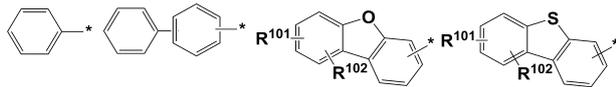
상기 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기인 유기 광전자 소자용 화합물.

**청구항 6**

제5항에서,

상기 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 하기 그룹 I 에 나열된 치환기 중 하나인 유기 광전자 소자용 화합물:

[그룹 I]



상기 그룹 I 에서,

R<sup>101</sup> 및 R<sup>102</sup>는 각각 독립적으로 수소 또는 C6 내지 C12 아릴기이고,

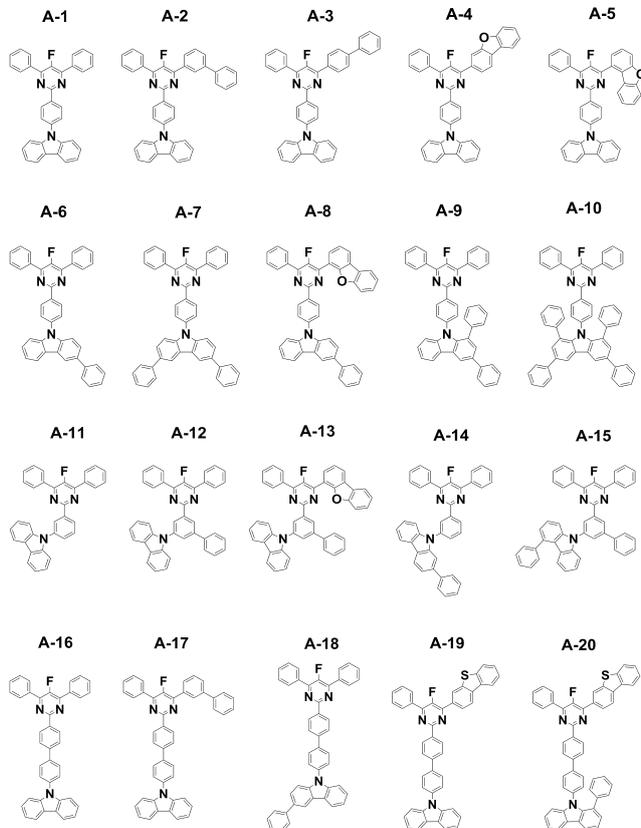
\*은 연결 지점이다.

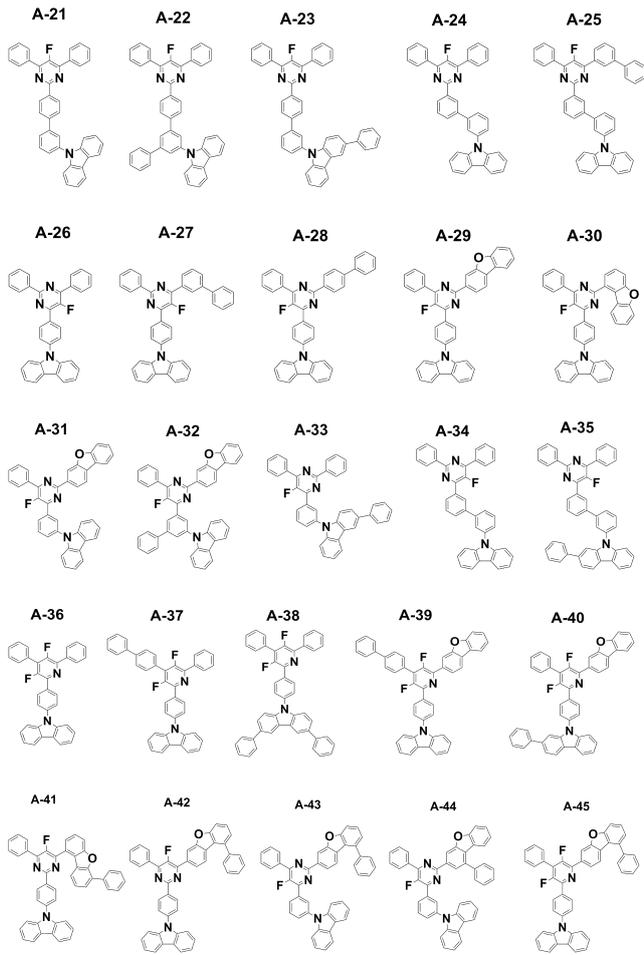
**청구항 7**

제1항에서,

하기 그룹 1에 나열된 화합물 중 하나인 유기 광전자 소자용 화합물:

[그룹 1]





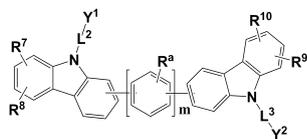
청구항 8

제1 유기 광전자 소자용 화합물, 및 제2 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하고,

상기 제1 유기 광전자 소자용 화합물은 상기 제1항에 따른 유기 광전자 소자용 화합물이며,

상기 제2 유기 광전자 소자용 화합물은 하기 화학식 2; 또는 하기 화학식 3 및 화학식 4의 조합으로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

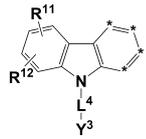
$Y^1$  및  $Y^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

$L^2$  및  $L^3$ 은 각각 독립적으로 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이고,

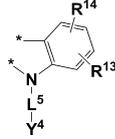
$R^a$  및  $R^7$  내지  $R^{10}$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

$m$ 은 0 내지 2의 정수이고;

[화학식 3]



[화학식 4]



상기 화학식 3 및 4에서,

$Y^3$  및  $Y^4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

화학식 3의 인접한 2개의 \*은 화학식 4와 연결되고,

화학식 4와 연결되지 않은 화학식 3의 \*은 각각 독립적으로  $C-L^a-R^b$ 이고,

$L^a$ ,  $L^4$  및  $L^5$ 는 각각 독립적으로 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이고,

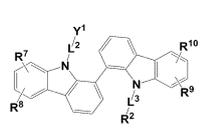
$R^b$  및  $R^{11}$  내지  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이다.

**청구항 9**

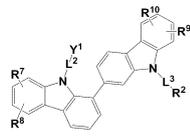
제8항에 있어서,

상기 화학식 2는 하기 화학식 2-1 내지 화학식 2-15 중 하나로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

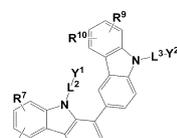
[화학식 2-1]



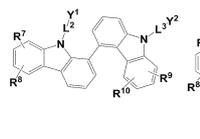
[화학식 2-2]



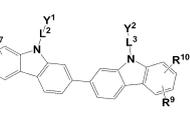
[화학식 2-3]



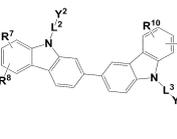
[화학식 2-4]



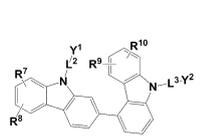
[화학식 2-5]



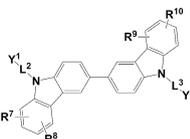
[화학식 2-6]



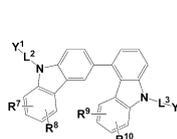
[화학식 2-7]



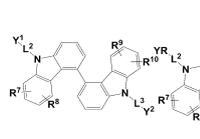
[화학식 2-8]



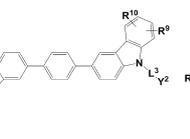
[화학식 2-9]



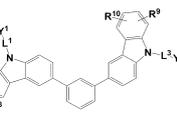
[화학식 2-10]



[화학식 2-11]



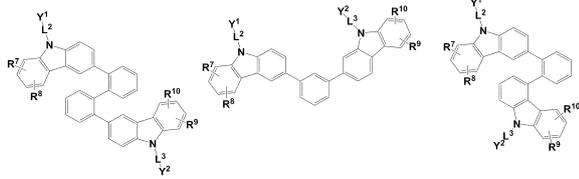
[화학식 2-12]



[화학식 2-13]

[화학식 2-14]

[화학식 2-15]

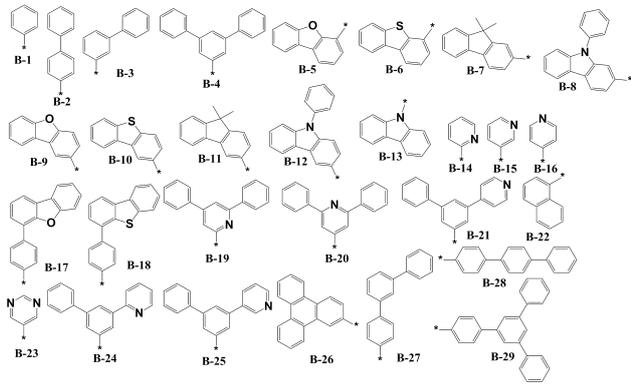


상기 화학식 2-1 내지 화학식 2-15에서,

$R^7$  내지  $R^{10}$ 은 각각 독립적으로 수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기이고,

$*-L^2-Y^1$  및  $*-L^3-Y^2$ 는 각각 독립적으로 하기 그룹 II에 나열된 치환기 중 하나이며,

[그룹 II]



상기 \*은 연결 지점이다.

**청구항 10**

제9항에 있어서,

상기 화학식 2는 상기 화학식 2-8로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물.

**청구항 11**

제10항에 있어서,

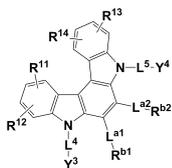
상기 화학식 2-8의  $*-L^2-Y^1$  및  $*-L^3-Y^2$ 는 각각 독립적으로 상기 그룹 II의 B-1, B-2 및 B-3에서 선택되는 하나인 유기 광전자 소자용 조성물.

**청구항 12**

제8항에 있어서,

상기 화학식 3 및 화학식 4의 조합은 하기 화학식 3C로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

[화학식 3C]



상기 화학식 3C에서,

$Y^3$  및  $Y^4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기

테로고리기이고,

$L^{a1}$ ,  $L^{a2}$ ,  $L^4$  및  $L^5$ 는 각각 독립적으로 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이고,

$R^{b1}$ ,  $R^{b2}$  및  $R^{11}$  내지  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 할로겐기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이다.

**청구항 13**

제12항에 있어서,

상기  $Y^3$  및  $Y^4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기이고,

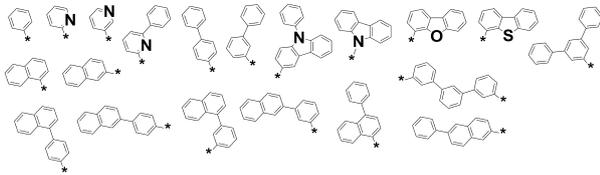
$R^{b1}$ ,  $R^{b2}$  및  $R^{11}$  내지  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기인 유기 광전자 소자용 조성물.

**청구항 14**

제12항에 있어서,

상기  $Y^3$  및  $Y^4$ 는 각각 독립적으로 하기 그룹 III에 나열된 치환기에서 선택되는 하나인 유기 광전자 소자용 조성물:

[그룹 III]



상기 그룹 III에서,

\*은 각각  $L^4$  및  $L^5$ 와의 연결 지점이다.

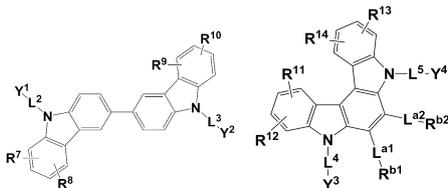
**청구항 15**

제8항에 있어서,

상기 제2 유기 광전자 소자용 화합물은 하기 화학식 2-8 또는 화학식 3C로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

[화학식 2-8]

[화학식 3C]



상기 화학식 2-8 및 화학식 3C에서,

$Y^1$  내지  $Y^4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디

벤조티오펜일기이고,

$L^2$  내지  $L^5$ ,  $L^{a1}$  및  $L^{a2}$ 는 각각 독립적으로 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이고,

$R^{b1}$ ,  $R^{b2}$  및  $R^7$  내지  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기이다.

**청구항 16**

서로 마주하는 양극과 음극,

상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층을 포함하고,

상기 유기층은 제1항, 및 제5항 내지 제7항 중 어느 한 항에 따른 유기 광전자 소자용 화합물; 또는

제8항 내지 제15항 중 어느 한 항에 따른 유기 광전자 소자용 조성물

을 포함하는 유기 광전자 소자.

**청구항 17**

제16항에 있어서,

상기 유기층은 발광층을 포함하고,

상기 발광층은 상기 유기 광전자 소자용 화합물 또는 상기 유기 광전자 소자용 조성물을 포함하는 유기 광전자 소자.

**청구항 18**

제16항에 따른 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 유기 광전자 소자용 화합물, 유기 광전자 소자용 조성물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 유기 광전자 소자(organic optoelectronic diode)는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이다.

[0003] 유기 광전자 소자는 동작 원리에 따라 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 하나는 광 에너지에 의해 형성된 엑시톤(exciton)이 전자와 정공으로 분리되고 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되면서 전기 에너지를 발생하는 광전 소자이고, 다른 하나는 전극에 전압 또는 전류를 공급하여 전기 에너지로부터 광 에너지를 발생하는 발광 소자이다.

[0004] 유기 광전자 소자의 예로는 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 및 유기 감광체 드럼(organic photo conductor drum) 등을 들 수 있다.

[0005] 이 중, 유기 발광 소자(organic light emitting diode, OLED)는 근래 평판 표시 장치(flat panel display device)의 수요 증가에 따라 크게 주목 받고 있다. 유기 발광 소자는 전기 에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서, 유기 발광 소자의 성능은 전극 사이에 위치하는 유기 재료에 의해 많은 영향을 받는다.

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

[0006] 일 구현예는 고효율 및 장수명 유기 광전자 소자를 구현할 수 있는 유기 광전자 소자용 화합물을 제공한다.

[0007] 다른 구현예는 상기 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자용 조성물을 제공한다.

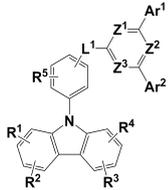
[0008] 또 다른 구현예는 상기 유기 광전자 소자용 화합물 또는 유기 광전자 소자용 조성물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

[0009] 또 다른 구현예는 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를 제공한다.

**과제의 해결 수단**

[0010] 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물을 제공한다.

[0011] [화학식 1]



[0012]

[0013] 상기 화학식 1에서,

[0014]  $Z^1$  내지  $Z^3$ 은 각각 독립적으로 N 또는 C-F이고,

[0015]  $Z^1$  내지  $Z^3$  중 적어도 하나는 C-F이고,

[0016]  $Z^1$  내지  $Z^3$  중 적어도 하나는 N이고,

[0017]  $L^1$ 은 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아틸렌기이고,

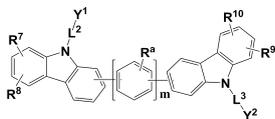
[0018]  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기 또는 이들의 조합이고,

[0019]  $R^1$  내지  $R^5$ 는 각각 독립적으로 수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸기이다.

[0020] 다른 구현예에 따르면, 제1 유기 광전자 소자용 화합물, 및 제2 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자용 조성물을 제공한다.

[0021] 상기 제1 유기 광전자 소자용 화합물은 전술한 화학식 1로 표현되며, 상기 제2 유기 광전자 소자용 화합물은 하기 화학식 2; 또는 하기 화학식 3 및 화학식 4의 조합으로 표현될 수 있다.

[0022] [화학식 2]



[0023]

[0024] 상기 화학식 2에서,

[0025]  $Y^1$  및  $Y^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아틸기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

[0026]  $L^2$  및  $L^3$ 은 각각 독립적으로 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아틸렌기이고,

[0027]  $R^a$  및  $R^7$  내지  $R^{10}$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

[0028] m은 0 내지 2의 정수이고;

[0029] [화학식 3]

[화학식 4]



[0030]

[0031]

[0032]

[0033]

[0034]

[0035]

[0036]

[0037]

[0038]

[0039]

[0040]

[0041]

[0042]

[0043]

[0044]

[0045]

상기 화학식 3 및 4에서,

$Y^3$  및  $Y^4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

화학식 3의 인접한 2개의 \*은 화학식 4와 연결되고,

화학식 4와 연결되지 않은 화학식 3의 \*은 각각 독립적으로  $C-L^a-R^b$ 이고,

$L^a$ ,  $L^4$  및  $L^5$ 는 각각 독립적으로 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아틸렌기이고,

$R^b$  및  $R^{11}$  내지  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이다.

또 다른 구현예에 따르면, 서로 마주하는 양극과 음극, 상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층을 포함하고, 상기 유기층은 상기 유기 광전자 소자용 화합물 또는 유기 광전자 소자용 조성물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를 제공한다.

**발명의 효과**

고효율 장수명 유기 광전자 소자를 구현할 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

도 1 및 도 2는 각각 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 도시한 단면도이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C6 내지 C30 아릴실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C3 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 이들의 조합으로 치환된 것을 의미한다.

본 발명의 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C6 내지 C30 아릴실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C3 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C20 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C5 알킬기 또는 C6 내지 C18 아릴기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 또는 나프틸기로 치환된 것을 의미한다.

본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

본 명세서에서 "아릴(aryl)기"는 탄화수소 방향족 모이어티를 하나 이상 갖는 그룹을 총괄하는 개념으로서, 탄

화수소 방향족 모이어티의 모든 원소가 p-오비탈을 가지면서, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 형태, 예컨대 페닐기, 나프틸기 등을 포함하고, 2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 시그마 결합을 통하여 연결된 형태, 예컨대 바이페닐기, 터페닐기, 퀴터페닐기 등을 포함하며, 2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 직접 또는 간접적으로 융합된 비방향족 융합 고리, 예컨대 플루오레닐기 등을 포함할 수 있다.

[0046] 아릴기는 모노시클릭, 폴리시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

[0047] 본 명세서에서 "헤테로고리기(heterocyclic group)"는 헤테로아릴기를 포함하는 상위 개념으로서, 아릴기, 시클로알킬기, 이들의 융합고리 또는 이들의 조합과 같은 고리 화합물 내에 탄소 (C) 대신 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개를 함유하는 것을 의미한다. 상기 헤테로고리가 융합고리인 경우, 상기 헤테로고리 전체 또는 각각의 고리마다 헤테로 원자를 한 개 이상 포함할 수 있다.

[0048] 일 예로 "헤테로아릴(heteroaryl)"은 아릴기 내에 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개를 함유하는 것을 의미한다. 2 이상의 헤테로아릴기는 시그마 결합을 통하여 직접 연결되거나, 상기 헤테로아릴기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.

[0049] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기는, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 o-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

[0050] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기는, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 피롤리딘기, 치환 또는 비치환된 피라졸리딘기, 치환 또는 비치환된 이미다졸리딘기, 치환 또는 비치환된 트리아졸리딘기, 치환 또는 비치환된 옥사졸리딘기, 치환 또는 비치환된 티아졸리딘기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸리딘기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸리딘기, 치환 또는 비치환된 피리딘기, 치환 또는 비치환된 피리미딘기, 치환 또는 비치환된 피라지딘기, 치환 또는 비치환된 트리아지딘기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸리딘기, 치환 또는 비치환된 인돌리딘기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리딘기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리딘기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리딘기, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리딘기, 치환 또는 비치환된 나프티리딘기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기, 치환 또는 비치환된 페녹사진일기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

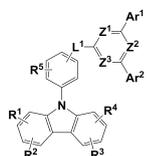
[0051] 본 명세서에서, 정공 특성이란, 전기장(electric field)을 가했을 때 전자를 공여하여 정공을 형성할 수 있는 특성을 말하는 것으로, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입, 발광층에서 형성된 정공의 양극으로의 이동 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

[0052] 또한 전자 특성이란, 전기장을 가했을 때 전자를 받을 수 있는 특성을 말하는 것으로, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입, 발광층에서 형성된 전자의 음극으로의 이동 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

[0054] 이하 일 구현예에 따른 화합물을 설명한다.

[0055] 일 구현예에 따른 화합물은 하기 화학식 1로 표현된다.

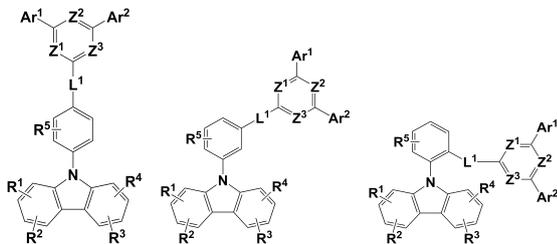
[0056] [화학식 1]



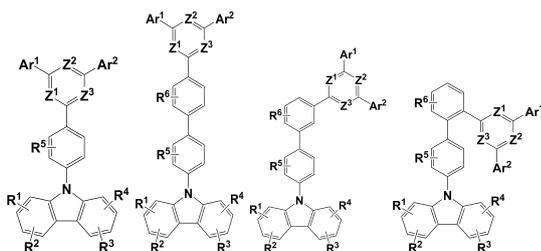
[0057]

- [0058] 상기 화학식 1에서,
- [0059]  $Z^1$  내지  $Z^3$ 은 각각 독립적으로 N 또는 C-F이고,
- [0060]  $Z^1$  내지  $Z^3$  중 적어도 하나는 C-F이고,
- [0061]  $Z^1$  내지  $Z^3$  중 적어도 하나는 N이고,
- [0062]  $L^1$ 은 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아틸렌기이고,
- [0063]  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기 또는 이들의 조합이고,
- [0064]  $R^1$  내지  $R^5$ 는 각각 독립적으로 수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸기이다.
- [0065] 화학식 1로 표현되는 화합물은 F가 도입된 피리딘 또는 F가 도입된 피리미딘이 연결기를 통해서 N-카바졸에 연결되는 구조를 포함한다.
- [0066] F 도입 구조는 F가 도입되지 않은 구조 대비 HOMO 에너지 준위 및 LUMO 에너지 준위가 낮아지므로 전자의 주입 및 이동에 유리하게 되어 이를 적용한 소자는 구동 전압 및 효율이 개선될 수 있다.
- [0067] 또한, 증착 온도를 낮추어 소자의 제작 측면에서도 유리하다.
- [0068] 한편, CN 도입 구조 대비 F 도입 구조는 전자 흡인 능력이 뛰어나서 전자 친화도 및 열적 안정성이 우수하다.
- [0069] 뿐만 아니라, N-방향으로 연결되는 카바졸기를 도입함으로써 C-N 결합을 통한  $\pi$ -결합이 끊어지게 되어 HOMO-LUMO 간 전자 구름이 정공 수송 부분과 전자 수송 부분으로 명확하게 지역화될 수 있고, 이러한 지역화는 전자 및 정공에 대한 안정성을 향상시키게 되므로, 수명 및 효율 개선 효과가 극대화될 수 있다.
- [0070] 일 예로, 상기 화학식 1은  $L^1$ 의 구체적인 연결 지점에 따라 하기 화학식 1A 내지 화학식 1C 중 하나로 표현될 수 있다.

[0071] [화학식 1A]                      [화학식 1B]                      [화학식 1C]



- [0072] 상기 화학식 1A 및 화학식 1B에서,  $Z^1$  내지  $Z^3$ ,  $L^1$ ,  $Ar^1$  및  $Ar^2$ , 그리고  $R^1$  내지  $R^5$ 는 전술한 바와 같다.
- [0073] 구체적인 일 예로 상기 화학식 1A는 하기 화학식 1A 내지 화학식 1A-4 중 하나로 표현될 수 있다.
- [0074] [화학식 1A-1][화학식 1A-2][화학식 1A-3][화학식 1A-4]

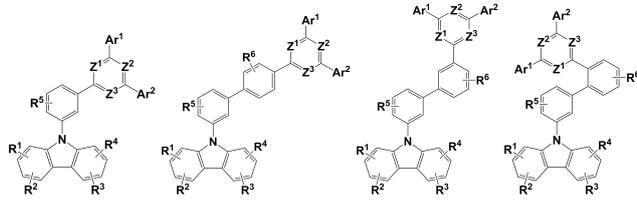


- [0075] 상기 화학식 1A-1 내지 화학식 1A-4에서,  $Z^1$  내지  $Z^3$ ,  $Ar^1$  및  $Ar^2$ , 그리고  $R^1$  내지  $R^5$ 는 전술한 바와 같고,  $R^6$ 은

R<sup>1</sup> 내지 R<sup>5</sup>의 정의와 같다.

[0078] 구체적일 일 예로 상기 화학식 1B는 하기 화학식 1B-1 내지 화학식 1B-4 중 하나로 표현될 수 있다.

[0079] [화학식 1B-1] [화학식 1B-2][화학식 1B-3] [화학식 1B-4]

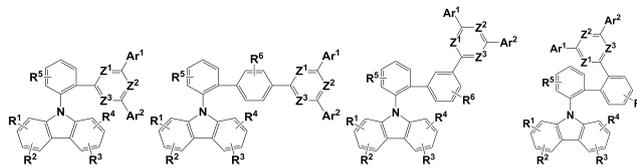


[0080]

[0081] 상기 화학식 1B-1 내지 화학식 1B-4에서, Z<sup>1</sup> 내지 Z<sup>3</sup>, Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>, 그리고 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>5</sup>는 전술한 바와 같고, R<sup>6</sup>은 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>5</sup>의 정의와 같다.

[0082] 구체적일 일 예로 상기 화학식 1C는 하기 화학식 1C-1 내지 화학식 1C-4 중 하나로 표현될 수 있다.

[0083] [화학식 1C-1][화학식 1C-2] [화학식 1C-3][화학식 1C-4]



[0084]

[0085] 상기 화학식 1C-1 내지 화학식 1C-4에서, Z<sup>1</sup> 내지 Z<sup>3</sup>, Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>, 그리고 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>5</sup>는 전술한 바와 같고, R<sup>6</sup>은 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>5</sup>의 정의와 같다.

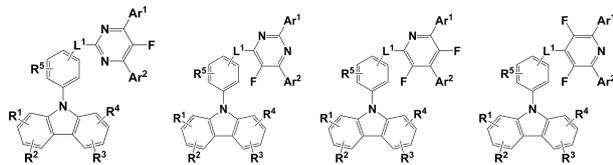
[0086] 예컨대 상기 화학식 1은 상기 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표현될 수 있다.

[0087] 예컨대 상기 화학식 1A는 상기 화학식 1A-1 또는 화학식 1A-2로 표현될 수 있다.

[0088] 예컨대 상기 화학식 1B는 상기 화학식 1B-1 내지 화학식 1B-3 중 하나로 표현될 수 있다.

[0089] 일 예로 상기 화학식 1은 F의 구체적인 도입 위치에 따라 하기 화학식 1D 내지 화학식 1G 중 하나로 표현될 수 있다.

[0090] [화학식 1D] [화학식 1E] [화학식 1F] [화학식 1G]



[0091]

[0092] 상기 화학식 1D 내지 화학식 1G에서, L<sup>1</sup>, Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>, 그리고 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>5</sup>는 전술한 바와 같다.

[0093] 예컨대 상기 화학식 1은 상기 화학식 1D, 화학식 1E 및 화학식 1F 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

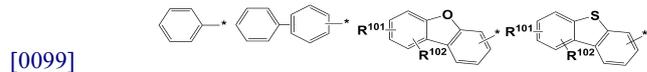
[0094] 본 발명의 가장 구체적일 일 실시예에서 상기 화학식 1은 상기 화학식 1A-1, 화학식 1D 및 화학식 1E 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

[0095] 일 예로 상기 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기일 수 있다.

[0096] 이 때 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 C6 내지 C12 아릴기로 치환된 것을 의미할 수 있다.

[0097] 구체적일 일 예로 상기 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 하기 그룹 I에 나열된 치환기 중에서 선택될 수 있다.

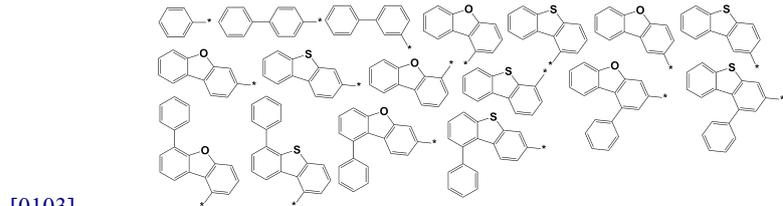
[0098] [그룹 I]



[0100] 상기 그룹 I에서, R<sup>101</sup> 및 R<sup>102</sup>는 각각 독립적으로 수소 또는 C6 내지 C12 아릴기이고, \*은 연결 지점이다.

[0101] 예컨대 상기 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 하기 그룹 I-1에 나열된 치환기 중에서 선택될 수 있다.

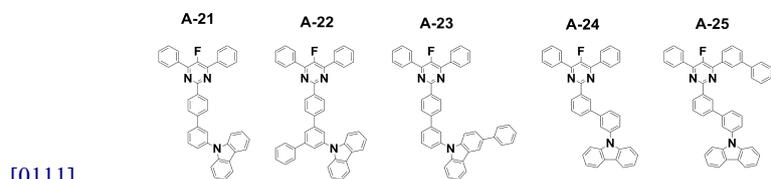
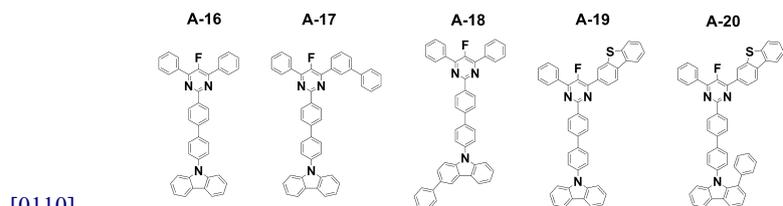
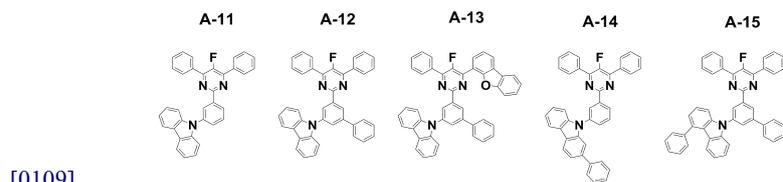
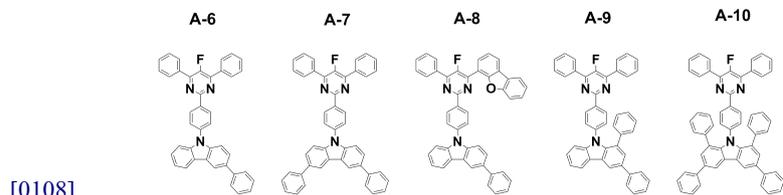
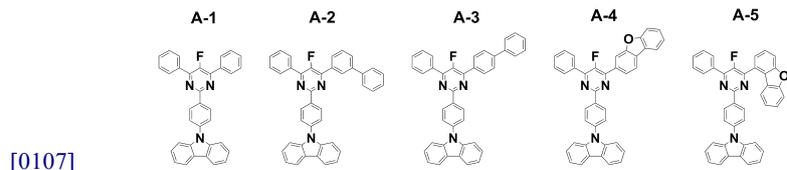
[0102] [그룹 I-1]

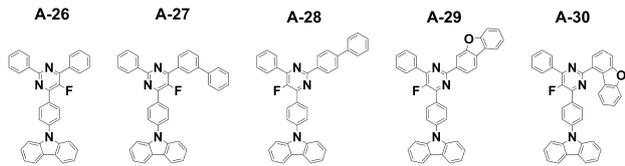


[0104] 상기 그룹 I-1에서, \*은 연결 지점이다.

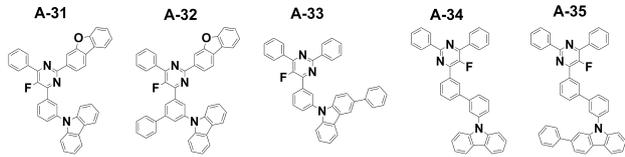
[0105] 예컨대 상기 화학식 1로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물은 하기 그룹 1에 나열된 화합물에서 선택된 하나 일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0106] [그룹 1]

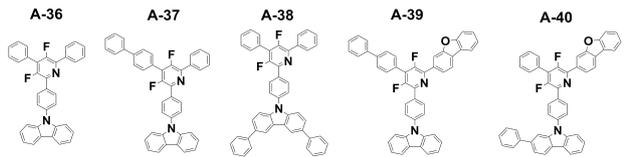




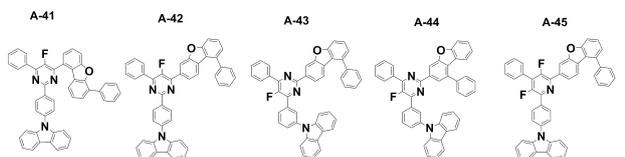
[0112]



[0113]



[0114]



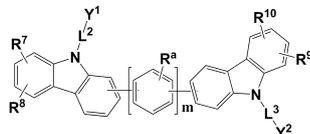
[0115]

[0116]

다른 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자용 조성물은 제1 유기 광전자 소자용 화합물, 및 제2 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하되, 상기 제1 유기 광전자 소자용 화합물은 전술한 화학식 1로 표현되고, 상기 제2 유기 광전자 소자용 화합물은 하기 화학식 2; 또는 화학식 3 및 화학식 4의 조합으로 표현될 수 있다.

[0117]

[화학식 2]



[0118]

[0119]

상기 화학식 2에서,

[0120]

$Y^1$  및  $Y^2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

[0121]

$L^2$  및  $L^3$ 은 각각 독립적으로 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이고,

[0122]

$R^a$  및  $R^7$  내지  $R^{10}$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

[0123]

$m$ 은 0 내지 2의 정수이고;

[0124]

[화학식 3]

[화학식 4]



[0125]

[0126]

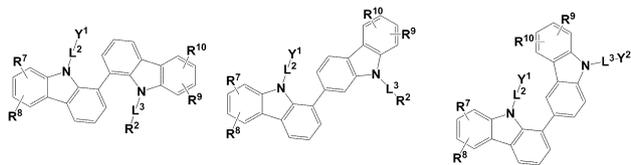
상기 화학식 3 및 4에서,

[0127]

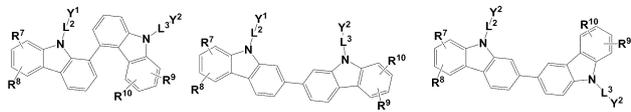
$Y^3$  및  $Y^4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

- [0128] 화학식 3의 인접한 2개의 \*은 화학식 4와 연결되고,
- [0129] 화학식 4와 연결되지 않은 화학식 3의 \*은 각각 독립적으로 C-L<sup>a</sup>-R<sup>b</sup>이고,
- [0130] L<sup>a</sup>, L<sup>4</sup> 및 L<sup>5</sup>는 각각 독립적으로 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이고,
- [0131] R<sup>b</sup> 및 R<sup>11</sup> 내지 R<sup>14</sup>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이다.
- [0132] 상기 제2 유기 광전자 소자용 화합물은 상기 제1 유기 광전자 소자용 화합물과 함께 발광층에 사용되어 전하의 이동성을 높이고 안정성을 높임으로써 발광 효율 및 수명 특성을 개선시킬 수 있다.
- [0133] 일 예로, 상기 화학식 2의 Y<sup>1</sup> 및 Y<sup>2</sup>는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조디오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 또는 치환 또는 비치환된 피리디닐기이고,
- [0134] 상기 화학식 2의 L<sup>2</sup> 및 L<sup>3</sup>는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기이며,
- [0135] 상기 화학식 2의 R<sup>7</sup> 내지 R<sup>10</sup>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기이며,
- [0136] m은 0 또는 1일 수 있다.
- [0137] 일 예로, 상기 화학식 2의 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C4 알킬기, C6 내지 C18 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다.
- [0138] 본 발명의 구체적인 일 실시예에서, 상기 화학식 2는 하기 화학식 2-1 내지 화학식 2-15 중 하나로 표현될 수 있다.

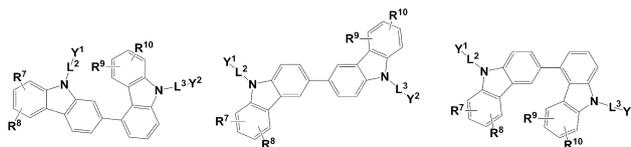
[0139] [화학식 2-1]                      [화학식 2-2]                      [화학식 2-3]



[0140] [화학식 2-4]                      [화학식 2-5]                      [화학식 2-6]

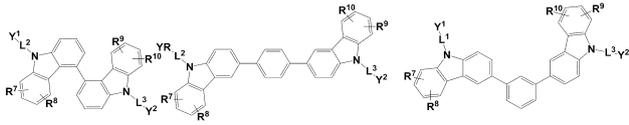


[0141] [화학식 2-7]                      [화학식 2-8]                      [화학식 2-9]



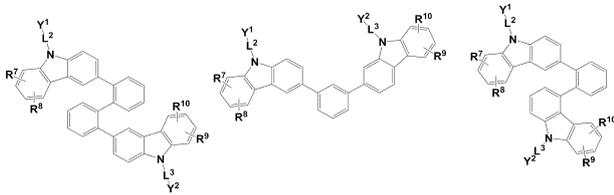
[0144] [화학식 2-10]                      [화학식 2-11]                      [화학식 2-12]

[0145] [화학식 2-10] [화학식 2-11] [화학식 2-12]



[0146]

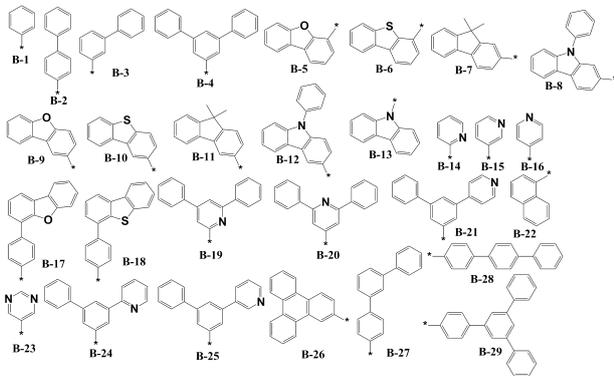
[0147] [화학식 2-13] [화학식 2-14] [화학식 2-15]



[0148]

[0149] 상기 화학식 2-1 내지 화학식 2-15에서, R<sup>7</sup> 내지 R<sup>10</sup>은 각각 독립적으로 수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기이고, \*L<sup>2</sup>-Y<sup>1</sup> 및 \*L<sup>3</sup>-Y<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 하기 그룹 II에 나열된 치환기 중 하나일 수 있다.

[0150] [그룹 II]



[0151]

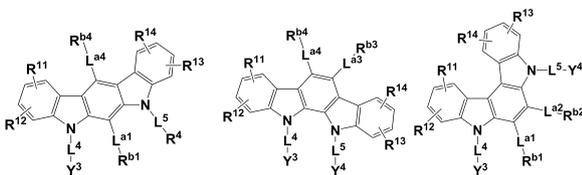
[0152] 상기 \*은 연결 지점이다.

[0153] 일 실시예에서, 상기 화학식 2는 상기 화학식 2-8로 표현될 수 있다.

[0154] 또한, 상기 화학식 2-8의 \*L<sup>2</sup>-Y<sup>1</sup> 및 \*L<sup>3</sup>-Y<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 상기 그룹 II에서 선택될 수 있으며, 예컨대 B-1, B-2 및 B-3 중 어느 하나일 수 있다.

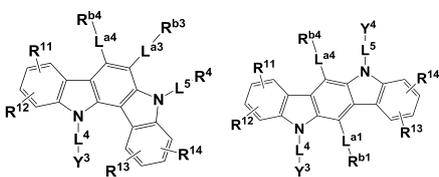
[0155] 일 예로, 상기 화학식 3 및 화학식 4의 조합으로 표현되는 제2 유기 광전자 소자용 화합물은 하기 화학식 화학식 3A, 화학식 3B, 화학식 3C, 화학식 3D 및 화학식 3E 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

[0156] [화학식 3A] [화학식 3B] [화학식 3C]



[0157]

[0158] [화학식 3D] [화학식 3E]



[0159]

[0160] 상기 화학식 3A 내지 화학식 3E에서,  $Y^3$  및  $Y^4$ ,  $L^4$  및  $L^5$ , 및  $R^{11}$  내지  $R^{14}$ 는 전술한 바와 같고,

[0161]  $L^{a1}$  내지  $L^{a4}$ 은 전술한  $L^4$  및  $L^5$ 의 정의와 같으며,

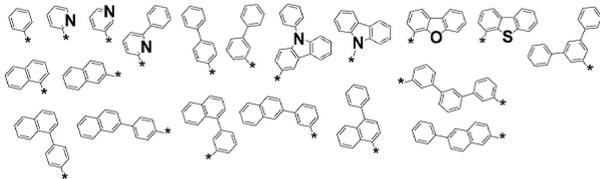
[0162]  $R^{b1}$  내지  $R^{b4}$ 은 전술한  $R^{11}$  내지  $R^{14}$ 의 정의와 같다.

[0163] 예컨대, 상기 화학식 3 및 4의  $Y^3$  및  $Y^4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기이고,

[0164]  $R^{b1}$  내지  $R^{b4}$  및  $R^{11}$  내지  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기일 수 있다.

[0165] 본 발명의 구체적인 일 실시예에서, 상기 화학식 3 및 4의  $Y^3$  및  $Y^4$ 는 각각 독립적으로 하기 그룹 III에 나열된 치환기에서 선택될 수 있다.

[0166] [그룹 III]



[0167] 상기 그룹 III에서, \*은 각각  $L^4$  및  $L^5$ 와의 연결 지점이다.

[0169] 일 실시예에서, 상기  $R^{b1}$  내지  $R^{b4}$  및  $R^{11}$  내지  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기일 수 있다.

[0170] 예컨대 상기  $R^{b1}$  내지  $R^{b4}$  및  $R^{11}$  내지  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있으며,

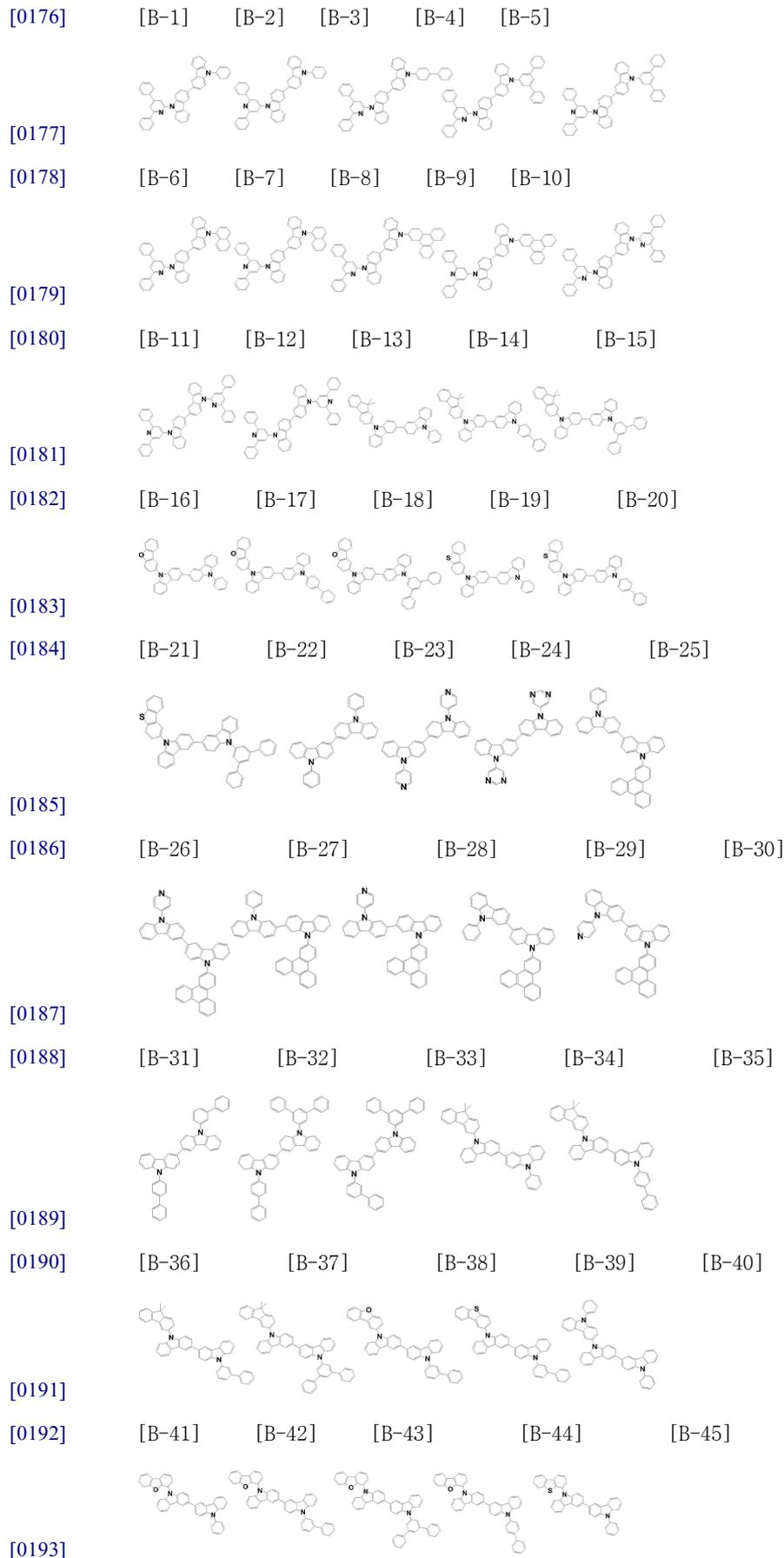
[0171] 구체적인 일 실시예에서, 상기  $R^{b1}$  내지  $R^{b4}$ 은 각각 수소이고,  $R^{11}$  내지  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소, 또는 페닐기일 수 있다.

[0172] 본 발명의 구체적인 일 실시예에서, 상기 제2 유기 광전자 소자용 화합물은 상기 화학식 2-8 또는 화학식 3C로 표현될 수 있다.

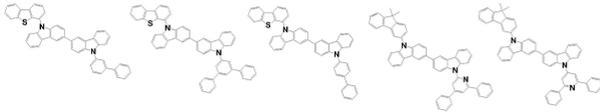
[0173] 여기서, 상기 화학식 2-8 및 화학식 3C의  $Y^1$  내지  $Y^4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기이고,  $L^2$  내지  $L^5$ ,  $L^{a1}$  및  $L^{a2}$ 는 각각 독립적으로 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이고,  $R^{b1}$ ,  $R^{b2}$  및  $R^7$  내지  $R^{14}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기일 수 있다.

[0174] 예컨대 제2 유기 광전자 소자용 화합물은 하기 그룹 2에 나열된 화합물에서 선택된 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0175] [그룹 2]

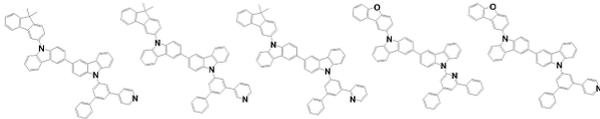


[0194] [B-46] [B-47] [B-48] [B-49] [B-50]



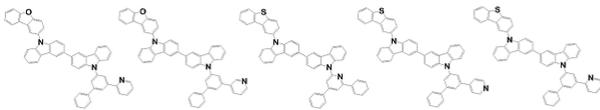
[0195]

[0196] [B-51] [B-52] [B-53] [B-54] [B-55]



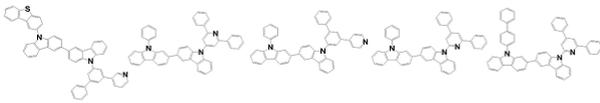
[0197]

[0198] [B-56] [B-57] [B-58] [B-59] [B-60]



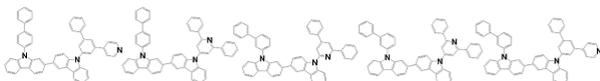
[0199]

[0200] [B-61] [B-62] [B-63] [B-64] [B-65]



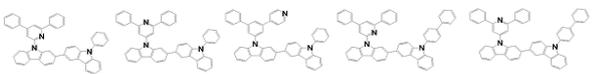
[0201]

[0202] [B-66] [B-67] [B-68] [B-69] [B-70]



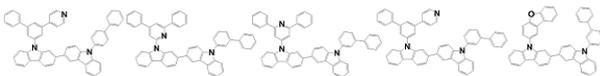
[0203]

[0204] [B-71] [B-72] [B-73] [B-74] [B-75]



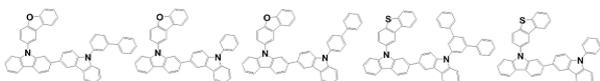
[0205]

[0206] [B-76] [B-77] [B-78] [B-79] [B-80]



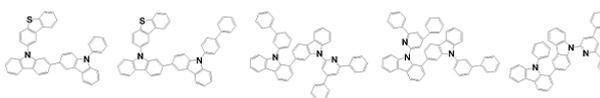
[0207]

[0208] [B-81] [B-82] [B-83] [B-84] [B-85]



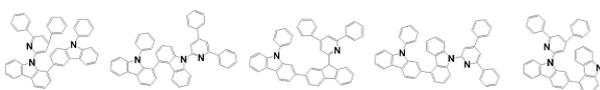
[0209]

[0210] [B-86] [B-87] [B-88] [B-89] [B-90]



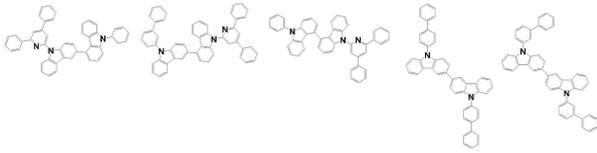
[0211]

[0212] [B-91] [B-92] [B-93] [B-94] [B-95]



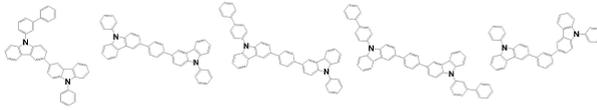
[0213]

[0214] [B-96] [B-97] [B-98] [B-99] [B-100]



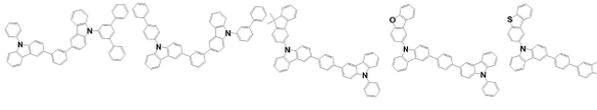
[0215]

[0216] [B-101] [B-102] [B-103] [B-104] [B-105]



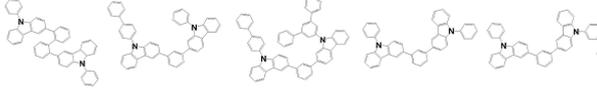
[0217]

[0218] [B-106] [B-107] [B-108] [B-109] [B-110]



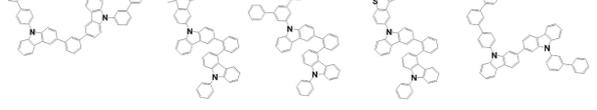
[0219]

[0220] [B-111] [B-112] [B-113] [B-114] [B-115]



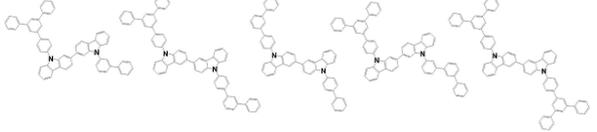
[0221]

[0222] [B-116] [B-117] [B-118] [B-119] [B-120]



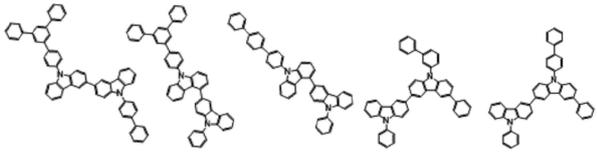
[0223]

[0224] [B-121] [B-122] [B-123] [B-124] [B-125]



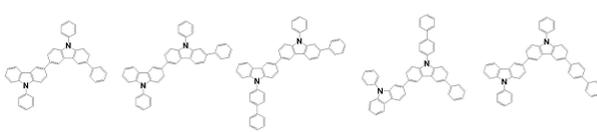
[0225]

[0226] [B-126] [B-127] [B-128] [B-129] [B-130]



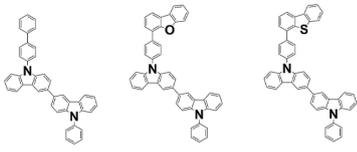
[0227]

[0228] [B-131] [B-132] [B-133] [B-134] [B-135]

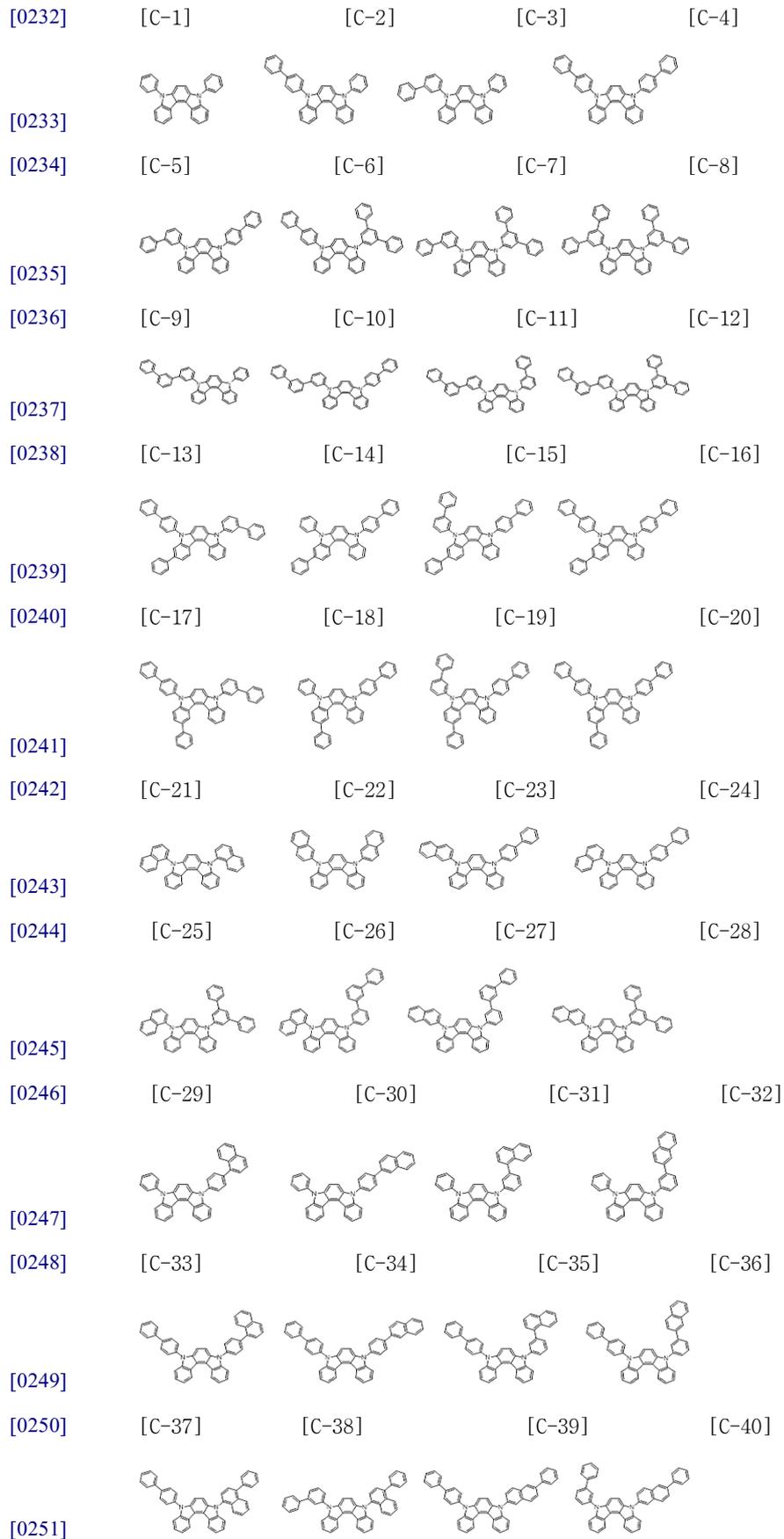


[0229]

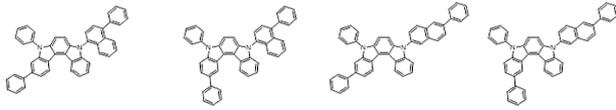
[0230] [B-136] [B-137] [B-138]



[0231]

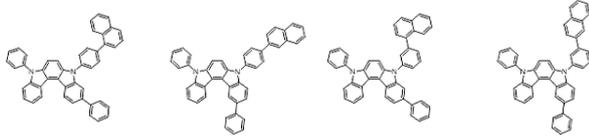


[0252] [C-41] [C-42] [C-43] [C-44]



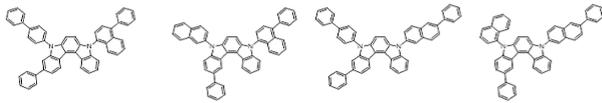
[0253]

[0254] [C-45] [C-46] [C-47] [C-48]



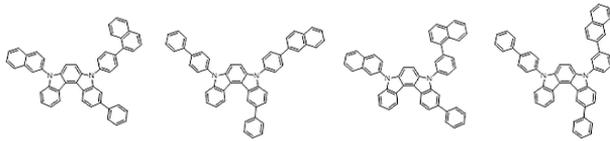
[0255]

[0256] [C-49] [C-50] [C-51] [C-52]



[0257]

[0258] [C-53] [C-54] [C-55] [C-56]



[0259]

[0260] 제1 유기 광전자 소자용 화합물과 제2 유기 광전자 소자용 화합물은 예컨대 1:99 내지 99:1의 중량비로 포함될 수 있다. 상기 범위로 포함됨으로써 제1 유기 광전자 소자용 화합물의 전자 수송 능력과 제2 유기 광전자 소자용 화합물의 정공 수송 능력을 이용해 적절한 중량비를 맞추어 바이폴라 특성을 구현하여 효율과 수명을 개선할 수 있다. 상기 범위 내에서 예컨대 약 10:90 내지 90:10, 약 20:80 내지 80:20의 중량비로 포함될 수 있고, 예컨대 약 20:80 내지 약 70:30, 약 20:80 내지 약 60:40, 그리고 약 20:80 내지 약 50:50의 중량비로 포함될 수 있다. 일 예로, 20:80 내지 40:60의 중량비로 포함될 수 있고, 구체적인 일 예로, 30:70, 40:60 또는 50:50의 중량비로 포함될 수 있으며, 예컨대 30:70의 중량비로 포함될 수 있다.

[0261] 전술한 제1 유기 광전자 소자용 화합물 및 제2 유기 광전자 소자용 화합물 외에 1종 이상의 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0262] 전술한 유기 광전자 소자용 화합물 또는 유기 광전자 소자용 조성물은 도펀트를 더 포함하는 조성물일 수 있다.

[0263] 도펀트는 예컨대 인광 도펀트일 수 있고, 예컨대 적색, 녹색 또는 청색의 인광 도펀트일 수 있고, 예컨대 적색 또는 녹색 인광 도펀트일 수 있다.

[0264] 도펀트는 유기 광전자 소자용 화합물 또는 조성물에 미량 혼합되어 발광을 일으키는 물질로, 일반적으로 삼중항 상태 이상으로 여기시키는 다중항 여기(multiple excitation)에 의해 발광하는 금속 착체(metal complex)와 같은 물질이 사용될 수 있다. 도펀트는 예컨대 무기, 유기, 유무기 화합물일 수 있으며, 1종 또는 2종 이상 포함될 수 있다.

[0265] 도펀트의 일 예로 인광 도펀트를 들 수 있으며, 인광 도펀트의 예로는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합을 포함하는 유기 금속화합물을 들 수 있다. 인광 도펀트는 예컨대 하기 화학식 Z로 표현되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

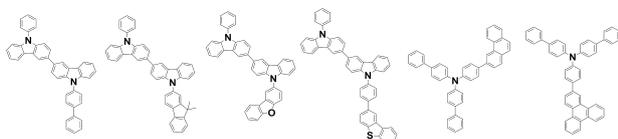
[0266] [화학식 Z]



[0268] 상기 화학식 Z에서, M은 금속이고,  $L^6$  및  $X^a$ 는 서로 같거나 다르며 M과 착화합물을 형성하는 리간드이다.

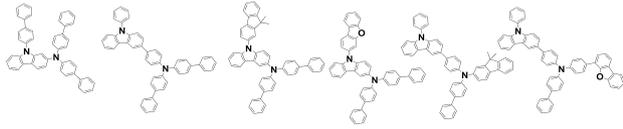
[0269] 상기 M은 예컨대 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합일 수 있고, 상기 L 및 X는 예컨대 바이덴테이트 리간드일 수 있다.

- [0270] 전술한 유기 광전자 소자용 화합물 또는 유기 광전자 소자용 조성물은 화학기상증착과 같은 건식 성막법에 의해 형성될 수 있다.
- [0271] 이하 상술한 유기 광전자 소자용 화합물 또는 유기 광전자 소자용 조성물을 적용한 유기 광전자 소자를 설명한다.
- [0272] 유기 광전자 소자는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이면 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 및 유기 감광체 드럼 등을 들 수 있다.
- [0273] 여기서는 유기 광전자 소자의 일 예인 유기 발광 소자를 도면을 참고하여 설명한다.
- [0274] 도 1 및 도 2는 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.
- [0275] 도 1을 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자 (100)는 서로 마주하는 양극(120)과 음극(110), 그리고 양극(120)과 음극(110) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.
- [0276] 양극(120)은 예컨대 정공 주입이 원활하도록 일 함수가 높은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 양극(120)은 예컨대 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO와 Al 또는 SnO<sub>2</sub>와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리(3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜)(polyethylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 도전성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0277] 음극(110)은 예컨대 전자 주입이 원활하도록 일 함수가 낮은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 음극(110)은 예컨대 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al, LiO<sub>2</sub>/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF<sub>2</sub>/Ca과 같은 다층 구조 물질을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0278] 유기층(105)은 전술한 유기 광전자 소자용 화합물 또는 유기 광전자 소자용 조성물을 포함할 수 있다.
- [0279] 상기 유기층(105)은 발광층(130)을 포함하고, 발광층(130)은 전술한 유기 광전자 소자용 화합물 또는 유기 광전자 소자용 조성물을 포함할 수 있다.
- [0280] 도펀트를 더욱 포함하는 상기 유기 광전자 소자용 조성물은 예컨대 녹색 발광 조성물일 수 있다.
- [0281] 발광층(130)은 예컨대 전술한 제1 유기 광전자 소자용 화합물과 제2 유기 광전자 소자용 화합물을 각각 인광 호스트로서 포함할 수 있다.
- [0282] 유기층은 발광층 외에 보조층을 더 포함할 수 있다.
- [0283] 상기 보조층은 예컨대 정공 보조층(140)일 수 있다.
- [0284] 도 2를 참고하면, 유기 발광 소자(200)는 발광층(130) 외에 정공 보조층(140)을 더 포함한다. 정공 보조층(140)은 양극(120)과 발광층(130) 사이의 정공 주입 및/또는 정공 이동성을 더욱 높이고 전자를 차단할 수 있다.
- [0285] 상기 정공 보조층(140)은 예컨대 하기 그룹 A에 나열된 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0286] 구체적으로 상기 정공 보조층(140)은 양극(120)과 발광층(130) 사이의 정공 수송층, 및 상기 발광층(130)과 상기 정공 수송층 사이의 정공 수송 보조층을 포함할 수 있고, 하기 그룹 D에 나열된 화합물 중 적어도 하나는 상기 정공 수송 보조층에 포함될 수 있다.
- [0287] [그룹 D]

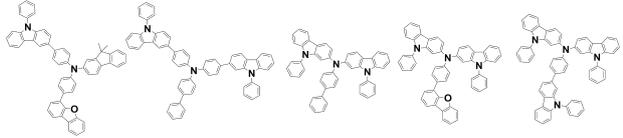


[0288]

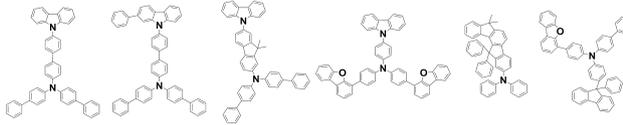
[0289]



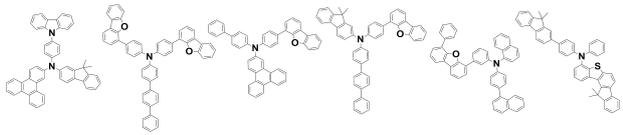
[0290]



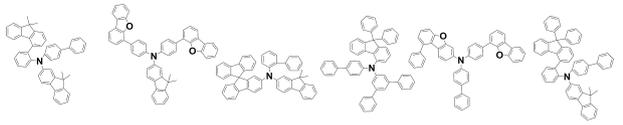
[0291]



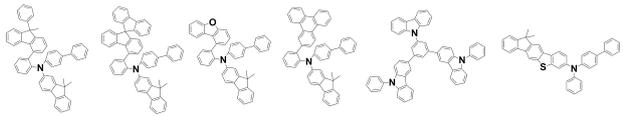
[0292]



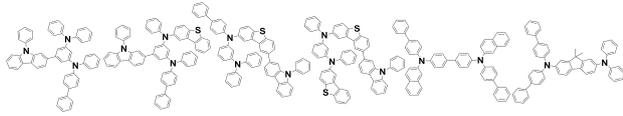
[0293]



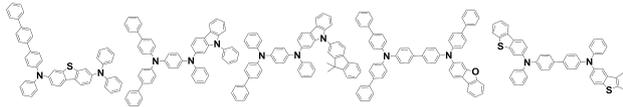
[0294]



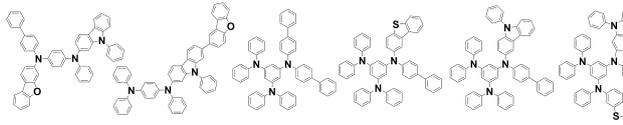
[0295]



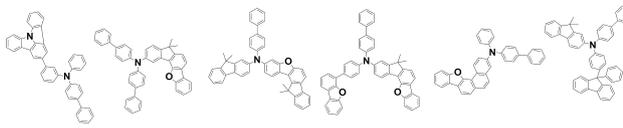
[0296]



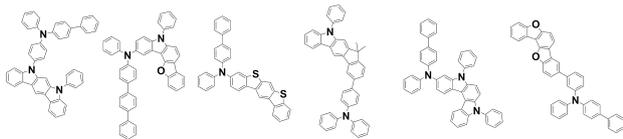
[0297]



[0298]



[0299]



[0300]

상기 정공 수송 보조층에는 전술한 화합물 외에도 US5061569A, JP1993-009471A, W01995-009147A1, JP1995-126615A, JP1998-095973A 등에 기재된 공지의 화합물 및 이와 유사한 구조의 화합물도 사용될 수 있다.

[0301]

또한, 본 발명의 일 구현예에서는 도 1 또는 도 2에서 유기층(105)으로서 추가로 전자 수송층, 전자주입층, 전공주입층 등을 더 포함한 유기 발광 소자일 수도 있다.

[0302]

유기 발광 소자(100, 200)는 기판 위에 양극 또는 음극을 형성한 후, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링

(sputtering), 플라즈마 도금 및 이온도금과 같은 건식성막법 등으로 유기층을 형성한 후, 그 위에 음극 또는 양극을 형성하여 제조할 수 있다.

[0303] 상술한 유기 발광 소자는 유기 발광 표시 장치에 적용될 수 있다.

[0305] 이하 실시예를 통하여 상술한 구현예를 보다 상세하게 설명한다. 다만 하기의 실시예는 단지 설명의 목적을 위한 것이며 권리범위를 제한하는 것은 아니다.

[0306] 이하, 실시예 및 합성예에서 사용된 출발물질 및 반응물질은 특별한 언급이 없는 한, Sigma-Aldrich 社, TCI 社, tokyo chemical industry 또는 P&H tech에서 구입하였거나, 공지된 방법을 통해 합성하였다.

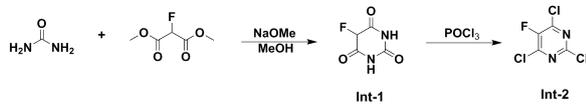
[0308] **(유기 광전자 소자용 화합물의 제조)**

[0309] 본 발명의 화합물의 보다 구체적인 예로서 제시된 화합물을 하기 단계를 통해 합성하였다.

[0310] **(제1 유기 광전자 소자용 화합물의 제조)**

[0311] **합성예 1: 중간체 Int-2의 합성**

[0312] [반응식 1]



[0313]

[0314] **1단계: 중간체 Int-1의 합성**

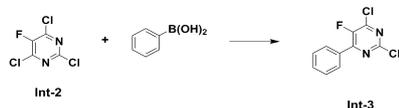
[0315] 질소 조건 하에서 환저플라스크에 Urea (65g, 1082mmol), dimethyl fluoromalonate (178.7g, 1190mmol) 와 메탄올 1100ml을 넣고 교반하다가 25wt% NaOMe in methanol (467ml, 2165mmol) 을 천천히 적가한다. 혼합물을 6시간 동안 환류 교반 후 상온으로 식히고 생성된 고형물을 필터한다. 1.5L 의 물에 고형물을 녹인 후 aq. HCl 용액을 넣어 pH 2~3 정도로 조절한다. 2시간 동안 교반 후 생성된 고형물을 필터하고 증류수를 이용하여 씻어준 후 진공 건조하여 중간체 Int-1을 95g(60%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 147.01

[0316] **2단계: 중간체 Int-2의 합성**

[0317] 질소 조건 하에서 환저플라스크에 중간체 Int-1 (95g, 650mmol), POCl<sub>3</sub> (425ml, 6552mmol) 및 N,N-dimethylaniline 83ml 을 천천히 적가한 후 110 °C 에서 8시간 동안 환류 교반한다. 반응이 끝나면 상온으로 식힌 후 과량의 ice water 에 반응물을 천천히 붓는다 (심한 발열반응 주의). Ethyl acetate 로 추출 후 MgSO<sub>4</sub>를 이용하여 건조한 뒤 필터한다. 여액을 감압하에 증류하여 중간체 Int-2를 72g(55%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 200.8

[0319] **합성예 2: 중간체 Int-4의 합성**

[0320] [반응식 2]



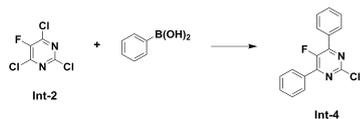
[0321]

[0322] **1단계: 중간체 Int-3의 합성**

[0323] 질소 조건 하에서 환저플라스크에 중간체 Int-2 (20g, 99.3mmol), Phenylboronic acid (12.1g, 99.3mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (20.6g, 149mmol) 그리고 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (3.4g, 2.98mmol) 을 THF(400ml) 와 증류수(100ml)에 녹인 후 60 °C 에서 8시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 종료되면 물층을 제거한 후 컬럼크로마토그래피(Hexane:DCM(25%))로 정제하여 중간체 Int-3을 19g(79%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 242.87

[0324] **합성예 3: 중간체 Int-4의 합성**

[0325] [반응식 3]

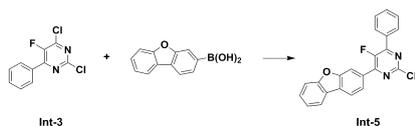


[0326]

[0327] 상기 합성에 2의 1단계의 반응 조건 중 Phenylboronic acid (24g, 197.6mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (30.2g, 218mmol)를 사용한 것을 제외하고 동일한 조건으로 합성 및 정제하여 중간체 Int-4를 24g(85%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 285.04

[0329] **합성예 4: 중간체 Int-5의 합성**

[0330] [반응식 4]

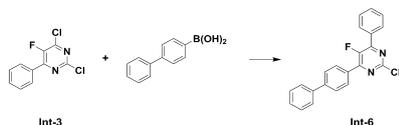


[0331]

[0332] 질소 조건 하에서 환저플라스크에 중간체 Int-3 (10g, 41.1mmol), 3-Dibenzofuranboronic acid (8.72g, 41.1mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (8.5g, 61.7mmol) 그리고 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (1.4g, 1.23mmol) 을 THF(150ml) 와 증류수(40ml)에 녹인 후 60 °C에서 8시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 종료되면 물층을 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:DCM(40%))로 정제하여 중간체 Int-5를 11.7g(76%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 375.08

[0334] **합성예 5: 중간체 Int-6의 합성**

[0335] [반응식 5]

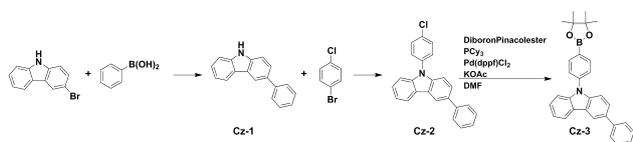


[0336]

[0337] 상기 합성예 4 에서 3-Dibenzofuranboronic acid 대신 4-biphenylboronic acid 를 사용한 것 외에는 동일한 방법으로 합성 및 정제하여 중간체 Int-6을 15.4g(68%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 361.2

[0339] **합성예 6: 중간체 Cz-3의 합성**

[0340] [반응식 6]



[0341]

[0342] **1단계: 중간체 Cz-1의 합성**

[0343] 질소 조건 하에서 환저플라스크에 3-Bromocarbazole (40g, 162.5mmol), Phenylboronic acid (23.8g, 195.1mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (33.7g, 243.8mmol) 그리고 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (5.6g, 4.88mmol) 을 THF(550ml) 와 증류수(170ml)에 녹인 후 60 °C에서 8시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 종료되면 물층을 제거한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:DCM(30%))로 정제하여 중간체 Cz-1 을 31.6g(80%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 244.1

[0344] **2단계: 중간체 Cz-2의 합성**

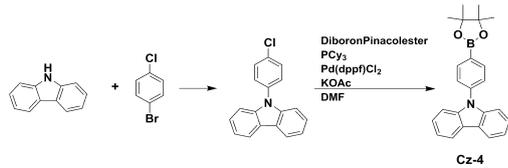
[0345] 질소 조건 하에서 환저플라스크에 중간체 Cz-1 (31.6g, 129.9mmol), 1-Bromo-4-chlorobenzene (27.4g, 142.9mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (4.76g, 5.2mmol), Sodium tert-butoxide (18.7g, 194.8mmol) 그리고 tri-tert butylphosphine 50% in toluene (6.3ml, 13mmol) 을 Xylene(550ml) 에 녹인 후 130 °C에서 8시간 동안 환류 교 반시킨다. 반응이 종료되면 감압하에 용매를 제거하고 컬럼크로마토그래피(Hexane:DCM(15%))로 정제하여 중간체 Cz-2를 29.9g(65%) 수득하였다. LCMS : (M+H): 354.23

[0346] 3단계: 중간체 Cz-3 의 합성

[0347] 질소 조건 하에서 환저플라스크에 중간체 Cz-2 (29.9g, 84.5mmol), Bis(pinacolato)diboron (25.8g, 101.4mmol), Pd(dppf)Cl<sub>2</sub> (3.45g, 4.23mmol), Tricyclohexylphosphine (4.1g, 16.9mmol) 그리고 Potassium acetate (16.6g, 169mmol) 을 DMF(350ml) 에 녹인 후 130 °C에서 10시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 종료되면 과량의 증류수에 혼합물을 붓고 1시간 동안 교반한다. 고형물을 필터한 후 DCM에 녹인다. MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후 실리카겔 패드를 이용하여 유기용매를 필터한 후 감압하에 제거한다. 컬럼크로마토그래피 (Hexane:DCM(25%))로 정제하여 중간체 Cz-3를 25.2g(67%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 446.31

[0349] **합성예 7: 중간체 Cz-4 의 합성**

[0350] [반응식 7]

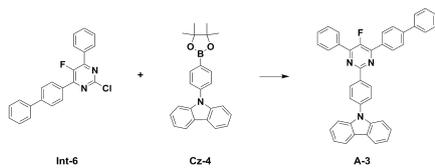


[0351]

[0352] 상기 합성예 6의 2단계에서 출발물질인 중간체 Cz-1 대신 Carbazole 을 사용한 것을 제외하고 동일한 방법으로 합성 및 정제하여 중간체 Cz-4 를 21g(전체 수율 35%) 합성하였다. LCMS: (M+H): 370.1

[0354] **합성예 8: 화합물 A-3의 합성**

[0355] [반응식 8]

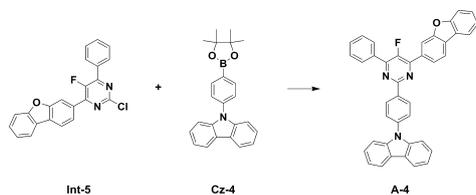


[0356]

[0357] 질소 조건 하에서 환저플라스크에 중간체 Int-6 (15.4g, 42.7mmol), 중간체 Cz-4 (17.3g, 46.9mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (8.9g, 64mmol) 그리고 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (1.5g, 1.3mmol) 을 THF(170ml) 와 증류수(50ml)에 녹인 후 60 °C에서 8시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 혼합물을 필터한 후 고형물을 과량의 메탄올로 씻어준다. Monochlorobenzene 단독으로 재결정하여 화합물 A-3을 13.3g(55%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 568.3

[0359] **합성예 9: 화합물 A-4의 합성**

[0360] [반응식 9]

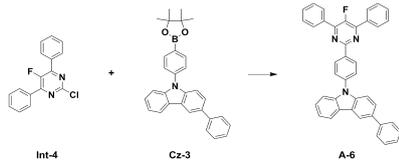


[0361]

[0362] 질소 조건 하에서 환저플라스크에 중간체 Int-5 (11.7g, 31.2mmol), 중간체 Cz-4 (12.7g, 34.3mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (6.5g, 47mmol) 그리고 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (1.1g, 0.95mmol) 을 THF(130ml) 와 증류수(30ml)에 녹인 후 60 °C에서 8시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 혼합물을 필터한 후 고형물을 과량의 메탄올로 씻어준다. Monochlorobenzene 단독으로 재결정하여 화합물 A-4를 11.1g(61%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 582.3

[0364] **합성예 10: 화합물 A-6의 합성**

[0365] [반응식 10]

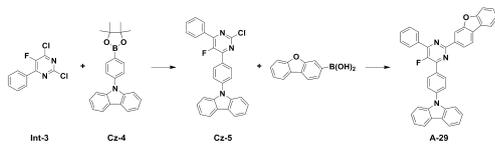


[0366]

[0367] 질소 조건 하에서 환저플라스크에 중간체 Int-4 (12.1g, 42.5mmol), 중간체 Cz-3 (20.8g, 46.7mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (8.8g, 64mmol) 그리고 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (1.5g, 1.3mmol) 을 THF(170ml) 와 증류수(45ml)에 녹인 후 60 °C 에서 8시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 혼합물을 필터한 후 고형물을 과량의 메탄올로 씻어준다. Monochlorobenzene 단독으로 재결정하여 화합물 A-6를 12.5g(52%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 568.21

[0369] **합성예 11: 화합물 A-29의 합성**

[0370] [반응식 11]



[0371]

[0372] 1단계: 중간체 Cz-5의 합성

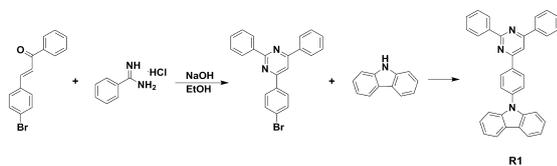
[0373] 질소 조건 하에서 환저플라스크에 중간체 Int-3 (19g, 78.2mmol), 중간체 Cz-4 (27.4g, 74.3mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (16.2g, 117mmol) 그리고 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (2.7g, 2.3mmol) 을 THF(300ml) 와 증류수(80ml)에 녹인 후 60°C에서 8시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 물층을 제거한 후 킬럼크로마토그래피(Hexane:DCM(30%))로 정제하여 중간체 Cz-5를 16.9g(48%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 450.1

[0374] 2단계: 화합물 A-29의 합성

[0375] 질소 조건 하에서 환저플라스크에 중간체 Cz-5 (16.9g, 37.6mmol), 3-Dibenzofuranboronic acid (8.76g, 41.3mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (7.8g, 56mmol) 그리고 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (1.3g, 1.13mmol) 을 THF(150ml) 와 증류수(40ml)에 녹인 후 60 °C 에서 8시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 혼합물을 필터한 후 고형물을 과량의 메탄올로 씻어 준다. Monochlorobenzene 단독으로 재결정하여 화합물 A-29 를 11.2g(51%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 582.29

[0377] **비교합성예 1: 비교화합물 R1의 합성**

[0378] [반응식 12]

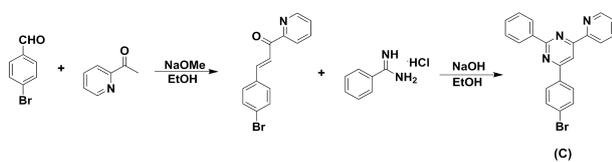


[0379]

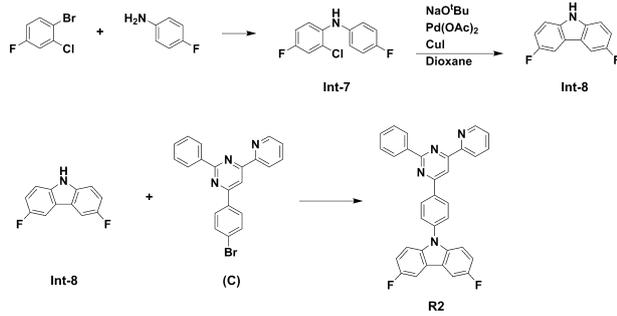
[0380] 상기 반응식 12가 수록된 선행문헌 W02003-080760의 화합물 A73 과 동일한 방법으로 합성하여 비교화합물 R1을 합성하였다.

[0382] **비교합성예 2: 비교화합물 R2 의 합성**

[0383] [반응식 13]



[0384]



[0385]

[0386] 1단계: 중간체 (C)의 합성

[0387] 상기 반응식 13이 수록된 선행문헌 W02003-080760의 중간체 (C)와 동일한 방법으로 합성하여 비교화합물 중간체 (C)를 합성하였다.

[0388] 2단계: 중간체 Int-7의 합성

[0389] 질소 조건 하에서 환저플라스크에 1-Bromo-2-chloro-4-fluorobenzene (40g, 191mmol), 4-Fluoroaniline (20.1ml, 210.1mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (39.6g, 286.5mmol), CuI (7.3g, 38.2mmol) 그리고 1,10-Phenanthroline (3.5g, 19.1mmol)을 DMF(550ml)에 녹인 후 150 °C에서 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 혼합물을 메탄올에 붓고 1시간 동안 교반한다. 고형물을 필터한 후 고형물을 과량의 메탄올로 씻어준다. 컬럼크로마토그래피 (Hexane:DCM(25%))로 정제하여 중간체 Int-7를 28.8g(63%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 240.1

[0390] 3단계: 중간체 Int-8의 합성

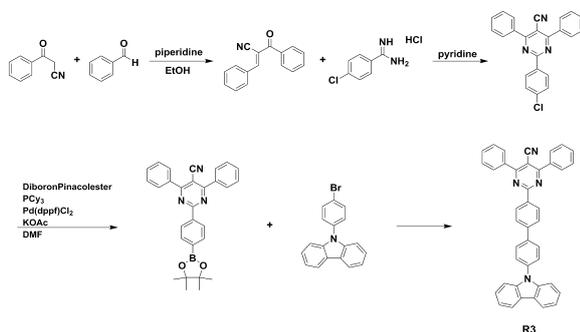
[0391] 중간체 Int-7 (28.8g, 120.2mmol), Sodium tert-butoxide (22.5g, 360.5mmol), Palladium(II) acetate (1.35g, 6.01mmol) 그리고 CuI (4.6g, 24.1mmol)을 1,4-dioxane(240ml)에 넣어 녹인 후 130 °C에서 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 상온으로 식힌 후 NaCl 수용액에 반응물을 붓고 교반후에 DCM을 이용하여 추출한다. 유기용액을 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>를 이용하여 건조한 후 컬럼크로마토그래피 (Hexane:DCM(30%))로 정제하여 중간체 Int-8를 20g(82%) 수득하였다. LCMS: (M+H): 204.3

[0392] 4단계: 비교화합물 R2의 합성

[0393] 환저플라스크에 중간체 Int-8 및 중간체 (C)를 넣고 상기 중간체 Int-7의 합성과 동일한 방법으로 합성 및 정제하여 비교화합물 R2를 합성하였다.

[0395] 비교합성예 3: 비교화합물 R3의 합성

[0396] [반응식 14]



[0397]

[0398] 상기 반응식 14가 수록된 선행문헌 W02016-195406의 화합물 5와 동일한 방법으로 합성하여 비교화합물 R3를 합성하였다.

[0400] (제2 유기 광전자 소자용 화합물의 제조)

[0401] 합성예 12: 화합물 B-99의 합성

[0402] US2017-0317293A1에 공지된 방법과 동일하게 화합물 B-99를 합성하였다.

[0403] **합성예 13: 화합물 C-4의 합성**

[0404] [반응식 15]



[0405]

[0406] 둥근바닥 플라스크에 중간체 I-1 (8g, 31.2mmol), 4-Iodobiphenyl (20.5g, 73.32mmol), CuI (1.19g, 6.24mmol), 1,10-phenanthroline (1.12g, 6.24mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (12.9g, 93.6mmol)을 넣고 DMF 50ml을 가하여 질소 분위기 하에서 24시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 증류수로 가하여 결정을 석출시키고, 여과하였다. 고체를 xylene 250ml에 녹여 실리카 겔로 여과한 후, 백색 고체로 석출시켜 화합물 C-4 16.2g(수율 93%)을 합성하였다.

[0407] LC/MS calculated for: C<sub>42</sub>H<sub>28</sub>N<sub>2</sub> Exact Mass: 560.2252 found for: 561.23

[0409] **(유기 발광 소자의 제작)**

[0410] **실시예 1**

[0411] ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송 시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 10분간 세정 한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상부에 화합물 A를 진공 증착하여 700Å 두께의 정공 주입층을 형성하고 상기 주입층 상부에 화합물 B를 50Å의 두께로 증착한 후, 화합물 C를 1020Å의 두께로 증착하여 정공수송층을 형성하였다. 정공수송층 상부에 합성예 8의 화합물 A-3 를 호스트로 사용하고 도판트로 PhGD 를 7wt%로 도핑하여 진공 증착으로 400Å 두께의 발광층을 형성하였다. 이어서 상기 발광층 상부에 화합물 D와 Liq를 동시에 1:1 비율로 진공 증착하여 300Å 두께의 전자수송층을 형성하고 상기 전자수송층 상부에 Liq 15Å 과 Al 1200Å을 순차적으로 진공 증착 하여 음극을 형성함으로써 유기발광소자를 제작하였다.

[0412] 상기 유기발광소자는 다층의 유기 박막층을 가지는 구조로 되어 있으며, 구체적으로 다음과 같다.

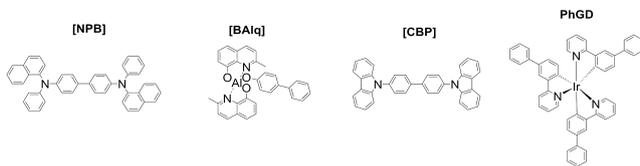
[0413] ITO/화합물A(700Å)/화합물B(50Å)/화합물C(1020Å)/EML[화합물 A-3:PhGD(7wt%)](400Å)/화합물D:Liq(300Å)/Liq(15Å\*)/Al(1200Å)의 구조로 제작하였다.

[0414] 화합물 A: N<sub>4</sub>,N<sub>4</sub>'-diphenyl-N<sub>4</sub>,N<sub>4</sub>'-bis(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)biphenyl-4,4'-diamine

[0415] 화합물 B: 1,4,5,8,9,11-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile (HAT-CN),

[0416] 화합물 C: N-(biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-N-(4-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)phenyl)-9H-fluoren-2-amine

[0417] 화합물 D: 8-(4-(4,6-di(naphthalen-2-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)quinoline



[0418]

[0420] **실시예 2 내지 실시예 12, 및 비교예 1 내지 비교예 9**

[0421] 하기 표 1에 기재한 바와 같이 호스트와 그 비율을 변경한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 실시예 2 내지 실시예 12, 및 비교예 1 내지 비교예 9 의 소자를 제작하였다.

[0423] **평가 1: 발광 효율 및 수명 상승 효과 확인**

[0424] 상기 실시예 1 내지 실시예 12, 및 비교예 1 내지 비교예 9 에 따른 유기 발광 소자의 구동전압 및 수명 특성을 평가하였다. 구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 표 1과 같다.

[0425] 구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 표 1과 같다.

- [0426] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정
- [0427] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.
- [0428] (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정
- [0429] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.
- [0430] (3) 발광효율 측정
- [0431] 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도( $10 \text{ mA/cm}^2$ )의 전류 효율 (cd/A) 을 계산하였다.
- [0432] (4) 구동전압 측정
- [0433] 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여  $15 \text{ mA/cm}^2$ 에서 각 소자의 구동전압을 측정하여 결과를 얻었다.

**표 1**

[0434]

No.	단독 호스트	구동 전압 (V)	효율 (cd/A)
실시예 1	A-3	4.5	51
실시예 4	A-4	4.7	50
실시예 7	A-6	4.4	52
실시예 10	A-29	4.7	48
비교예 1	R1	5.5	48
비교예 4	R2	5.6	28
비교예 7	R3	4.9	40

**표 2**

[0435]

No.	호스트			구동 전압 (V)	효율 (cd/A)
	제1호스트	제2호스트	혼합비		
실시예 2	A-3	B-99	3:7	4.1	67
실시예 3	A-3	C-4	3:7	4.1	65
실시예 5	A-4	B-99	3:7	4.2	66
실시예 6	A-4	C-4	3:7	4.1	67
실시예 8	A-6	B-99	3:7	4.0	67
실시예 9	A-6	C-4	3:7	3.9	69
실시예 11	A-29	B-99	3:7	4.3	62
실시예 12	A-29	C-4	3:7	4.2	65
비교예 2	R1	B-99	3:7	4.9	59
비교예 3	R1	C-4	3:7	4.8	58
비교예 5	R2	B-99	3:7	5.3	35
비교예 6	R2	C-4	3:7	5.4	32
비교예 8	R3	B-99	3:7	4.6	49
비교예 9	R3	C-4	3:7	4.7	50

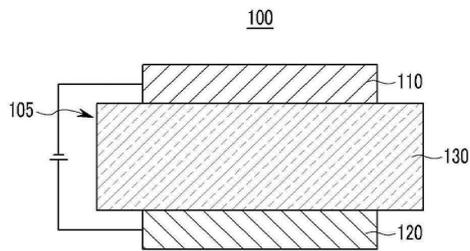
- [0437] 표 1 및 표 2를 참고하면, 본 발명에 따른 화합물은 선행 문헌에 기재된 종전의 화합물 대비 효율 및 구동이 크게 개선된 것을 확인할 수 있다.
- [0439] 이상에서 본 발명의 바람직한 실시예들에 대하여 상세하게 설명하였지만 본 발명의 권리범위는 이에 한정되는 것은 아니고 다음의 청구 범위에서 정의하고 있는 본 발명의 기본 개념을 이용한 당업자의 여러 변형 및 개량 형태 또한 본 발명의 권리범위에 속하는 것이다.

**부호의 설명**

- [0440] 100, 200: 유기 발광 소자
- 105: 유기층
- 110: 음극
- 120: 양극
- 130: 발광층
- 140: 정공 보조층

**도면**

**도면1**



**도면2**

