



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 등록특허공보(B1)**

(45) 공고일자 2018년11월27일  
 (11) 등록번호 10-1922649  
 (24) 등록일자 2018년11월21일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C07D 311/80* (2006.01) *C07D 405/10* (2006.01)  
*C07D 405/14* (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)  
*H01L 51/50* (2006.01)  
 (52) CPC특허분류  
*C07D 311/80* (2013.01)  
*C07D 405/10* (2013.01)  
 (21) 출원번호 10-2017-0101073  
 (22) 출원일자 2017년08월09일  
 심사청구일자 2017년08월09일  
 (65) 공개번호 10-2018-0018400  
 (43) 공개일자 2018년02월21일  
 (30) 우선권주장  
 1020160101362 2016년08월09일 대한민국(KR)  
 (56) 선행기술조사문헌  
 KR1020150083917 A\*  
 \*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자  
**주식회사 엘지화학**  
 서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)  
 (72) 발명자  
**허동욱**  
 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
**이동훈**  
 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
 (뒷면에 계속)  
 (74) 대리인  
**정순성**

전체 청구항 수 : 총 7 항

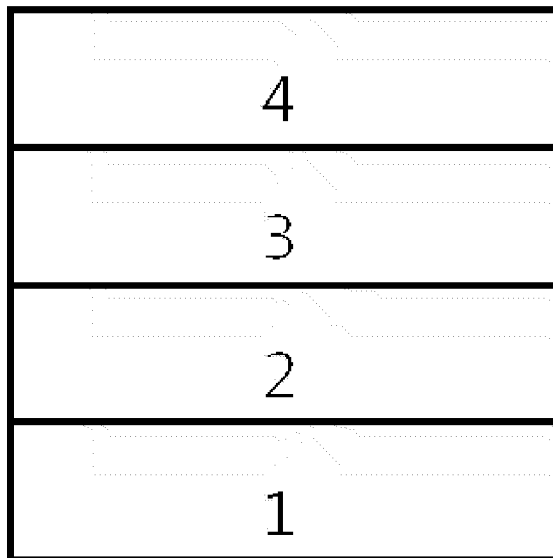
심사관 : 금보라

(54) 발명의 명칭 **화합물 및 이를 포함하는 유기발광소자**

**(57) 요약**

본 명세서에는 화학식 1의 화합물 및 이를 포함한 유기발광소자를 제공한다.

**대표도** - 도1



(52) CPC특허분류

*C07D 405/14* (2013.01)

*H01L 51/0073* (2013.01)

*H01L 51/5072* (2013.01)

*H01L 51/5092* (2013.01)

(72) 발명자

**허정오**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**장분재**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**강민영**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**한미연**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**정민우**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

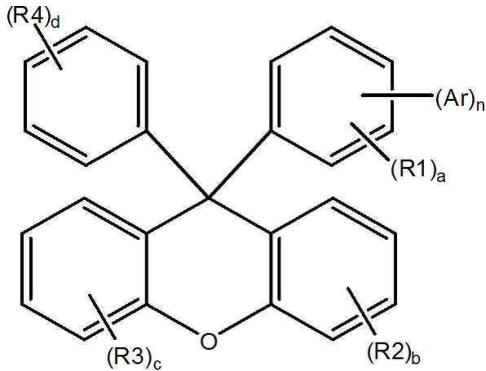
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

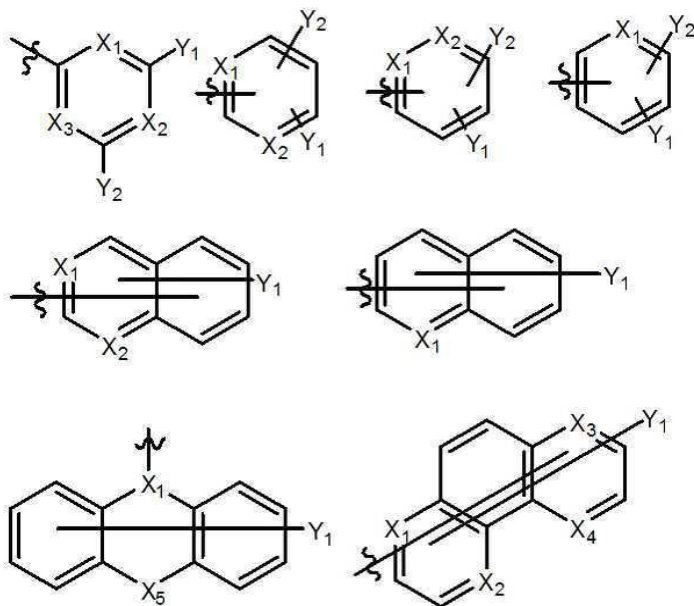
Ar은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 -L-Ar1이며,

R1 내지 R4는 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이며,

a, b 및 c 는 각각 0 내지 4의 정수이고, n는 1 내지 4의 정수이며, d는 0 내지 5의 정수이고, n+a는 5이하이고, n 및 a 내지 d가 2 이상인 경우, 괄호안의 치환기는 서로 동일하거나 상이하며,

상기 L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 아틸렌기이고,

상기 Ar1은 하기 구조식들 중에서 선택되며,



상기 구조식에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로, N 또는 CH이고, X<sub>5</sub>는 S 또는 O이며,

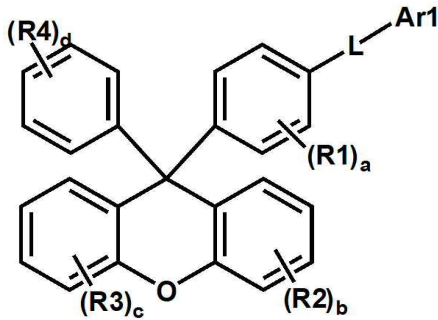
Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기;

치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 축합다환기이고, 상기 Ar1의 X1 내지 X4 중 적어도 하나는 N이거나, X1 내지 X4가 모두 CH인 경우는 Y1 또는 Y2는 니트릴기이다.

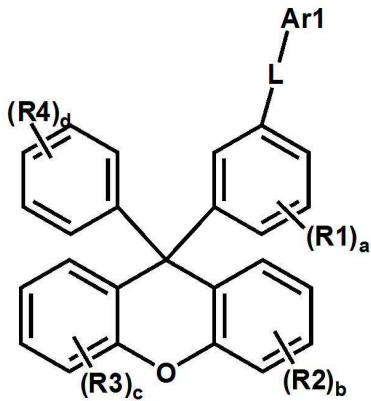
**청구항 2**

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 4 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:

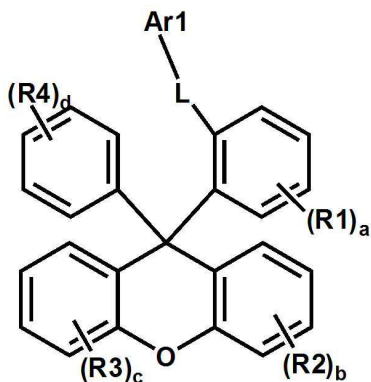
[화학식 2]



[화학식 3]



[화학식 4]



상기 화학식 2 내지 4에 있어서, R1 내지 R4, a 내지 d, L 및 Ar1은 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하다.

**청구항 3**

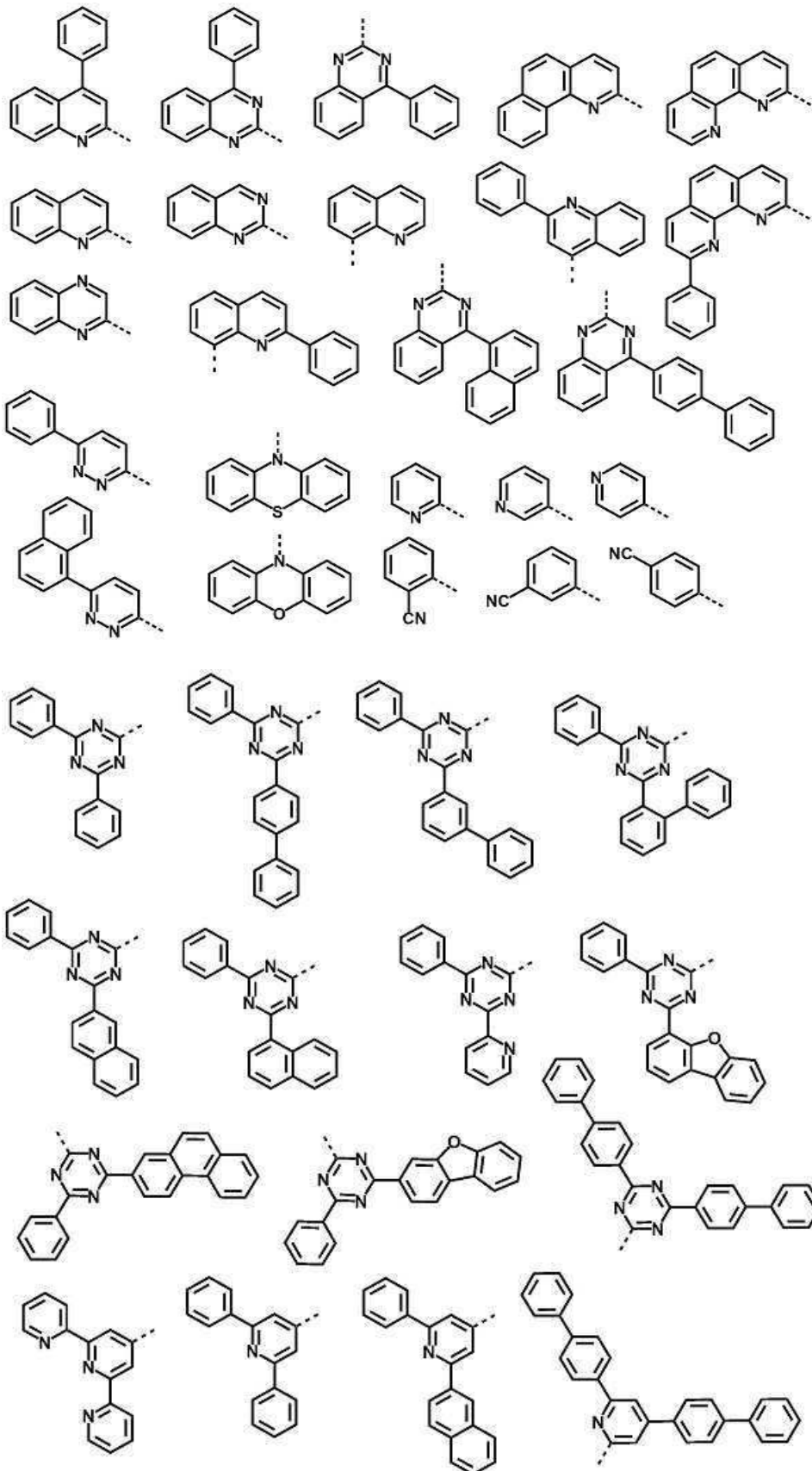
청구항 1에 있어서, 상기 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 페난트릴기; 치환 또는 비치환된 피리딘기; 또는 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기인 것인 화합물.

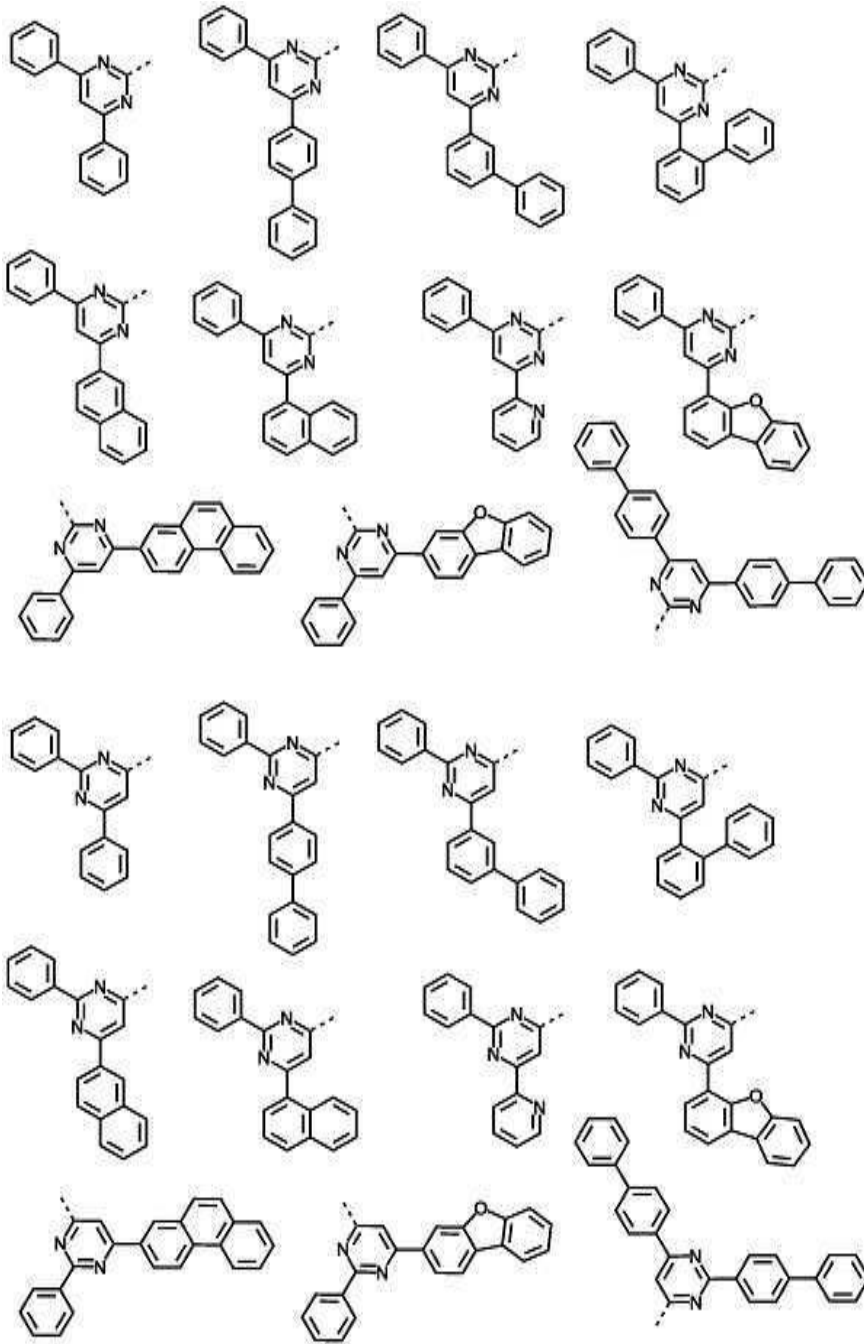
**청구항 4**

삭제

청구항 5

청구항 1에 있어서, 상기 Ar1은 하기 구조식들 중에서 선택되는 것인 화합물:

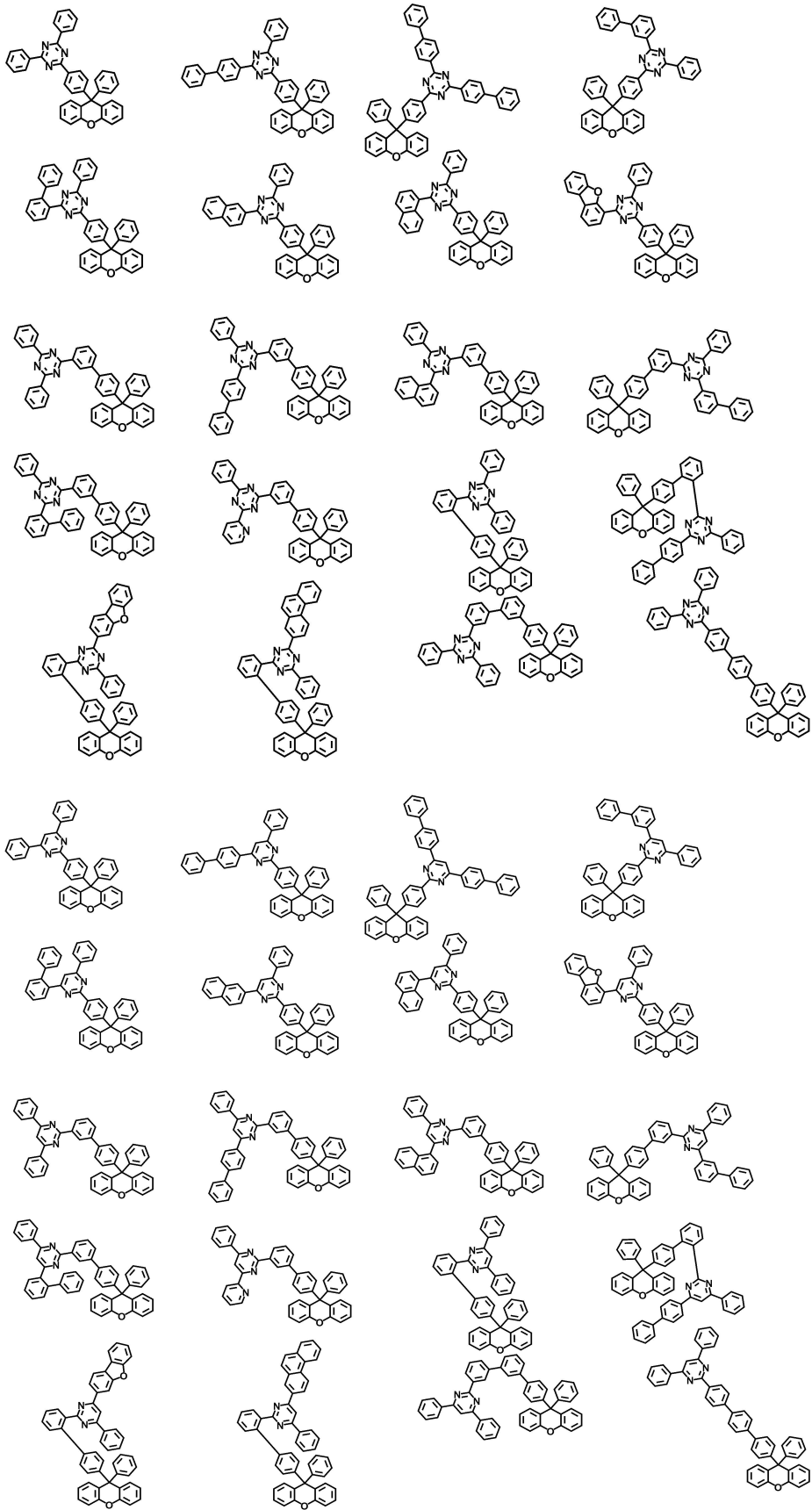


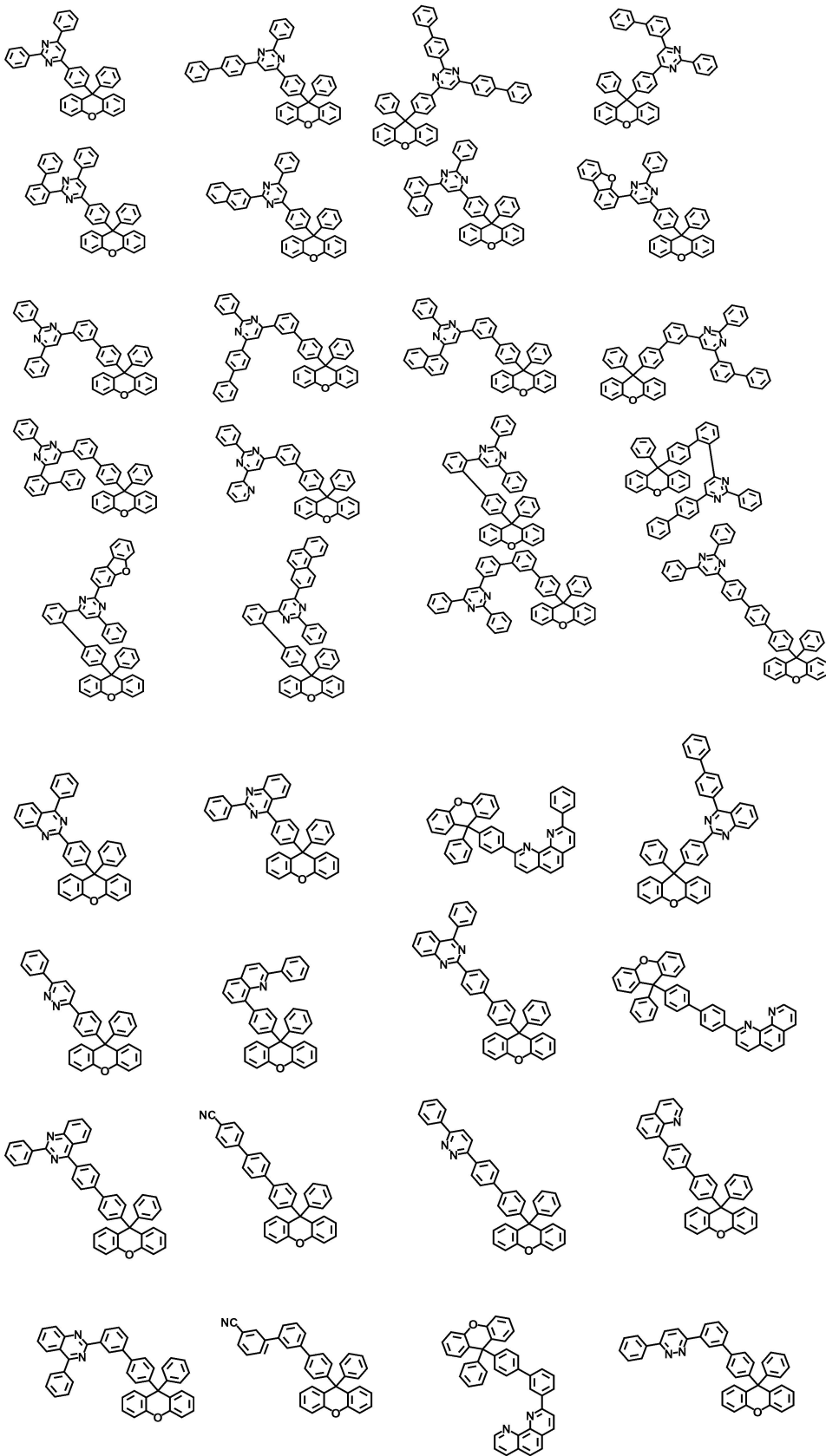


상기 구조식에 있어서, 점선은 상기L과 결합하는 위치를 의미한다.

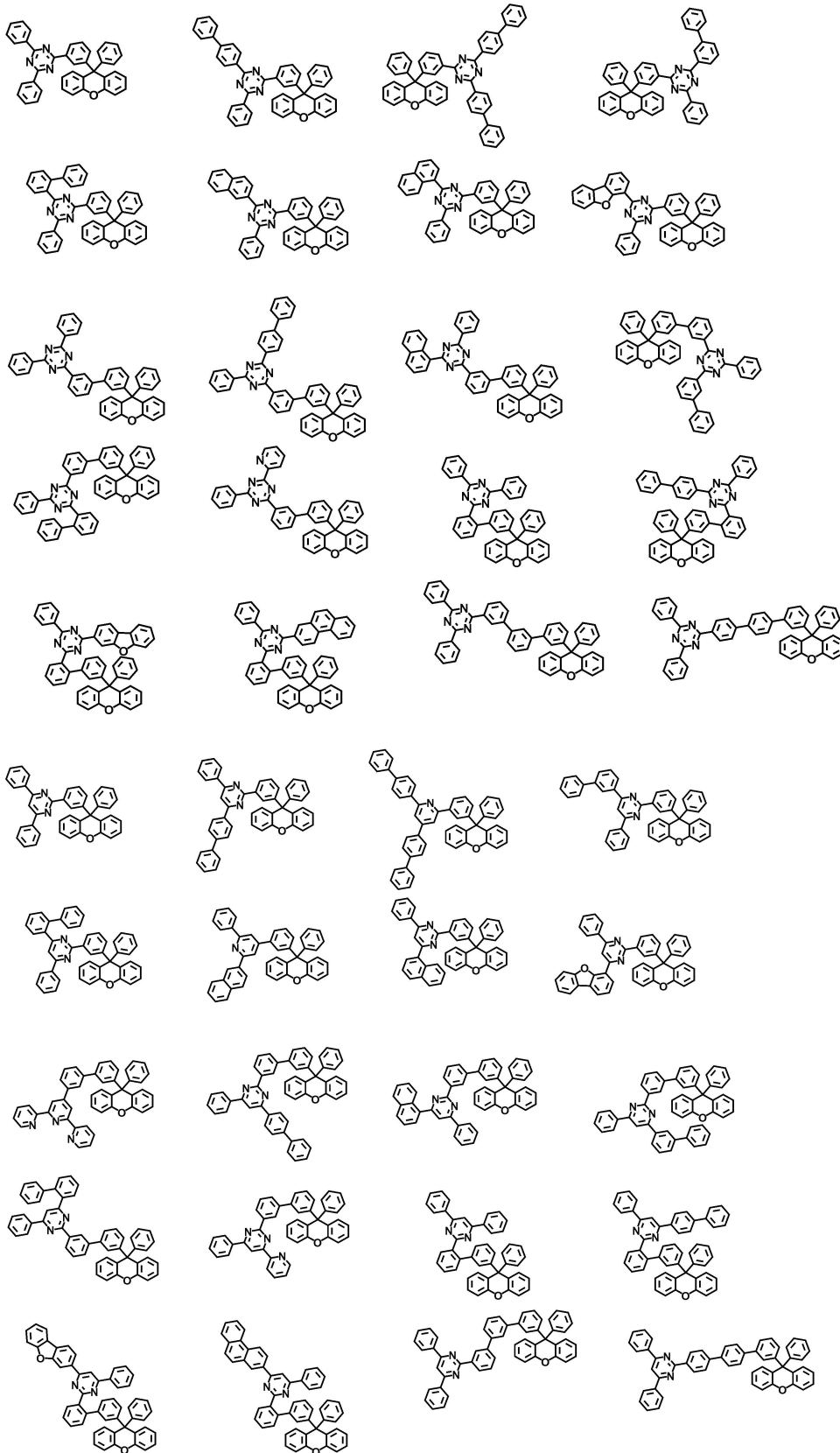
청구항 6

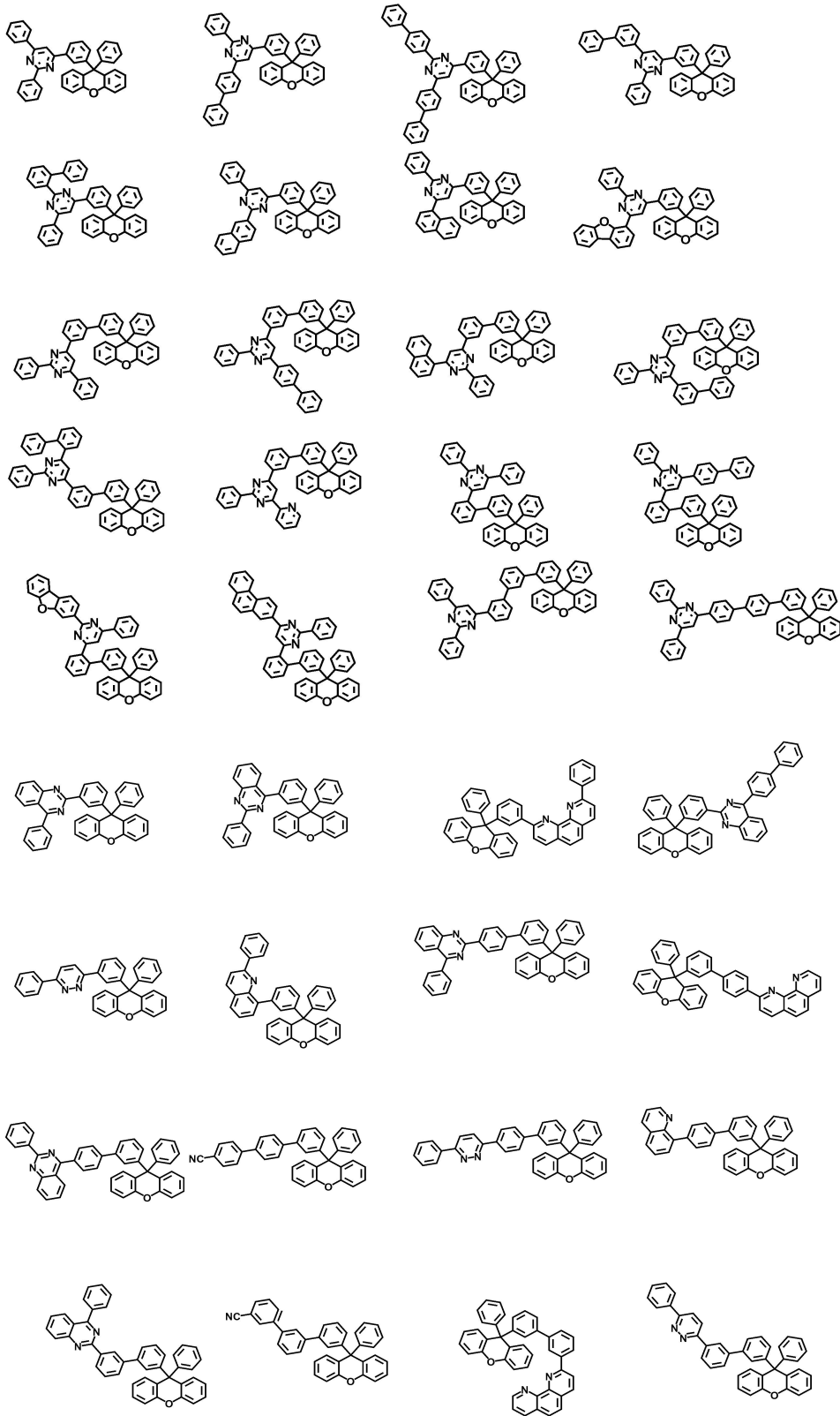
청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 구조식들 중에서 선택되는 것인 화합물:

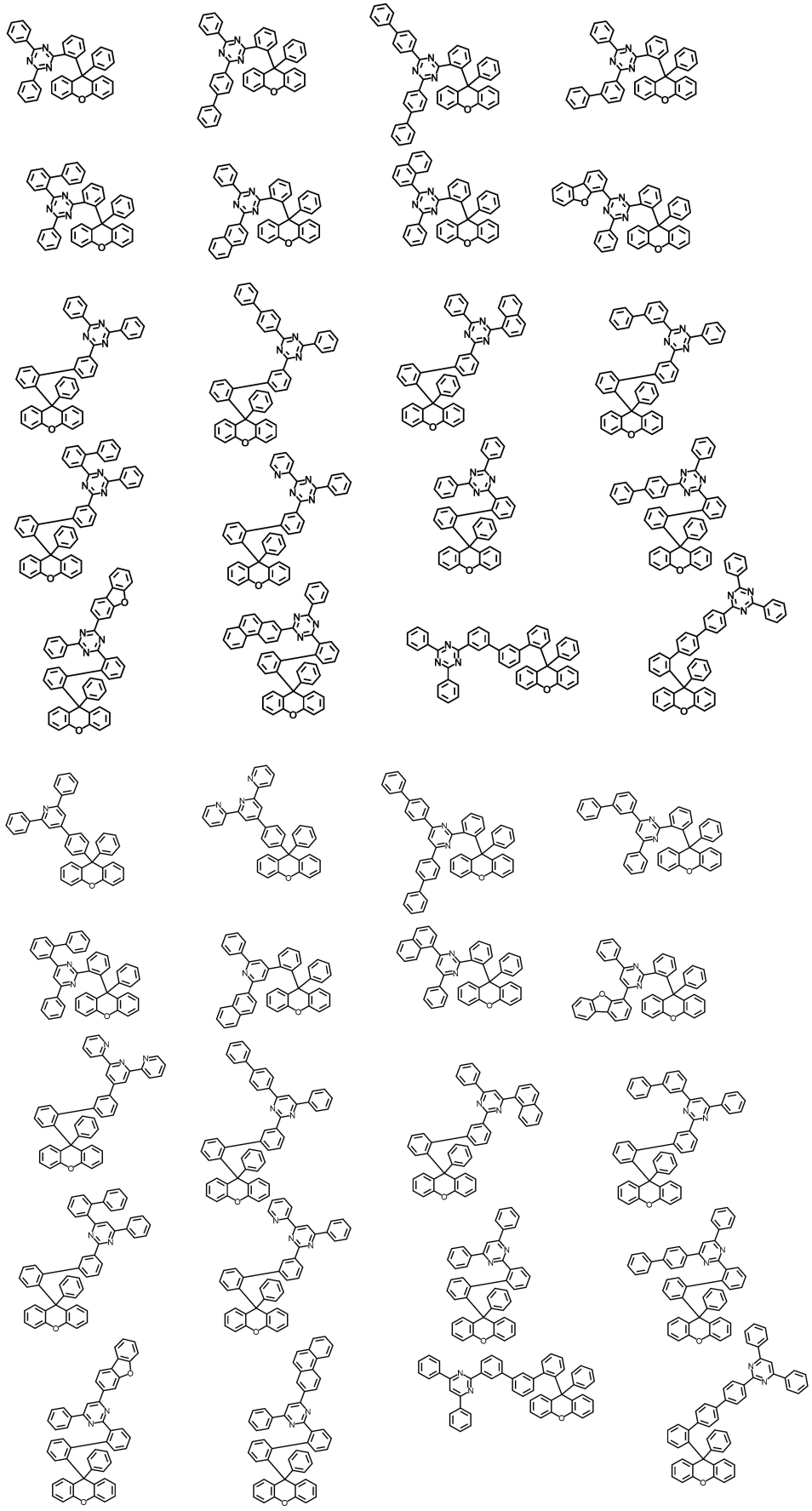


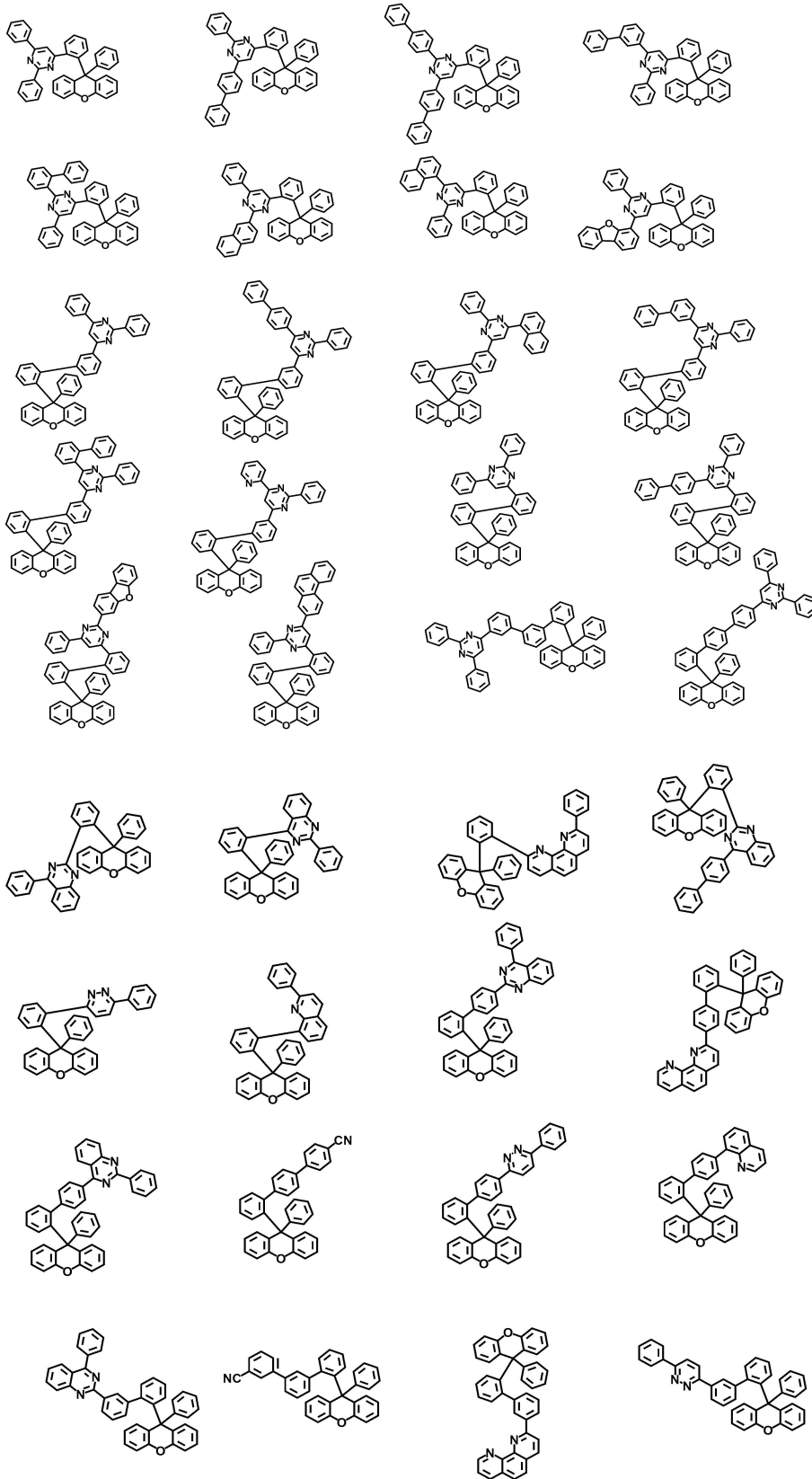












청구항 7

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 적어도 1층 이상은 청구항 1 내지 3, 5 및 6 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

청구항 8

청구항 7에 있어서, 상기 유기물층은 전자수송층, 전자주입층, 또는 전자주입 및 수송층을 포함하고, 상기 전자수송층, 전자주입층, 또는 전자 주입 및 수송층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 명세서는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다. 본 명세서는 2016년 8월 9일에 한국특허청에 제출된 제10-2016-0101362호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용은 전부 본 명세서에 포함된다.

**배경 기술**

[0002] 유기발광소자는 2개의 전극 사이에 유기박막을 배치시킨 구조를 가지고 있다. 이와 같은 구조의 유기발광소자에 전압이 인가되면, 2개의 전극으로부터 주입된 전자와 정공이 유기박막에서 결합하여 쌍을 이룬 후 소멸하면서 빛을 발하게 된다. 상기 유기박막은 필요에 따라 단층 또는 다층으로 구성될 수 있다.

[0003] 유기박막의 재료는 필요에 따라 발광 기능을 가질 수 있다. 예컨대, 유기박막 재료로는 그 자체가 단독으로 발광층을 구성할 수 있는 화합물이 사용될 수도 있고, 또는 호스트-도펀트계 발광층의 호스트 또는 도펀트 역할을 할 수 있는 화합물이 사용될 수도 있다. 그 외에도, 유기박막의 재료로서, 정공주입, 정공수송, 전자블록킹, 정공블록킹, 전자수송 또는 전자주입 등의 역할을 수행할 수 있는 화합물이 사용될 수도 있다.

[0004] 유기발광소자의 성능, 수명 또는 효율을 향상시키기 위하여, 유기박막의 재료의 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0005] (특허문헌 0001) 국제 특허 출원 공개 제2003-012890호

**발명의 내용**

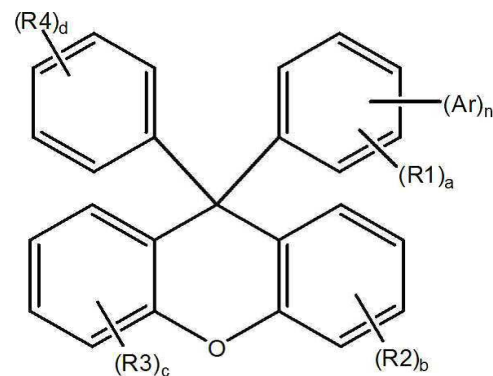
**해결하려는 과제**

[0006] 본 명세서는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

**과제의 해결 수단**

[0007] 본 명세서의 일 실시상태는 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0008] [화학식 1]



[0009] 상기 화학식 1에 있어서,  
[0010] Ar은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 -L-Ar1이며,

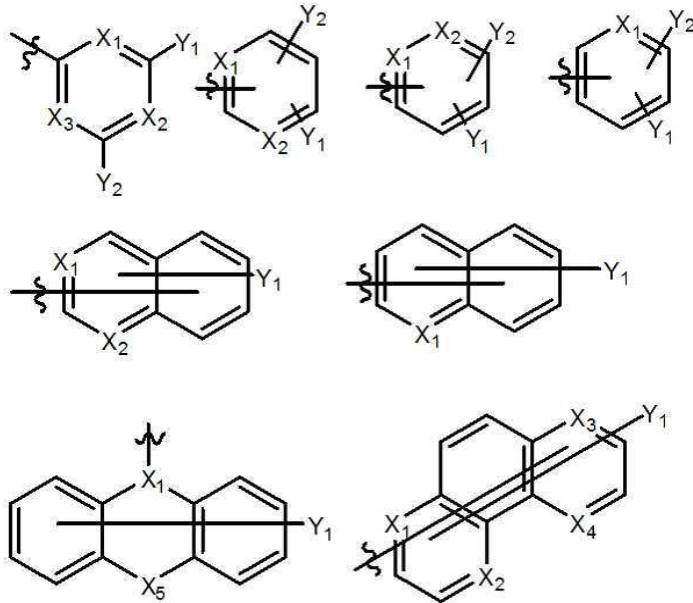
[0011]

[0012] R1 내지 R4는 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이며,

[0013] a, b 및 c 는 0 내지 4의 정수이고, n는 1 내지 4의 정수이며, d는 0 내지 5의 정수이고, n+a는 5이하이고, n 및 a 내지 d가 2 이상인 경우 괄호안의 치환기는 서로 동일하거나 상이하며,

[0014] 상기 L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 아틸렌기이고,

[0015] 상기 Ar1은 하기 구조식들 중에서 선택되며,



[0016]

[0017] 상기 구조식에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로, N 또는 CH이고, X<sub>5</sub>는 S 또는 O이며,

[0018] Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아틸렌기; 치환 또는 비치환된 헤테로아틸렌기; 또는 치환 또는 비치환된 축합다환기이다.

[0019] 또한, 본 출원은 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 전술한 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

**발명의 효과**

[0020] 본 출원의 일 실시상태에 따른 화합물은 유기 발광 소자에 사용되어, 유기 발광 소자의 구동전압을 낮추고, 광 효율을 향상시키며, 화합물의 열적 안정성에 의하여 소자의 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

[0021] 도 1은 기관(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

도 2는 기관 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(3), 전자수송층(7) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

도 3는 본 명세서의 일 실시상태에 따르는 화합물 E1에 대하여, 광전자 분광장치를 이용하여 측정된 HOMO 에너지 준위를 도시한 것이다.

도 4는 본 명세서의 일 실시상태에 따르는 화합물 E3에 대하여, 광전자 분광장치를 이용하여 측정된 HOMO 에너지 준위를 도시한 것이다.

도 5는 화합물 [ET-1-J]에 대하여, 광전자 분광장치를 이용하여 측정된 HOMO 에너지 준위를 도시한 것이다.

도 6은 본 명세서의 일 실시상태에 따르는 화합물 E1에 대하여, 포토루미네선스(photoluminescence; PL)를 통하여 측정된 흡수, 발광 스펙트럼이다.

도 7은 본 명세서의 일 실시상태에 따르는 화합물 E3에 대하여, 포토루미네센스(photoluminescence; PL)를 통하여 측정된 흡수, 발광 스펙트럼이다.

도 8은 화합물 [ET-1-J]에 대하여, 포토루미네센스(photoluminescence; PL)를 통하여 측정된 흡수, 발광 스펙트럼이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0022]

이하, 본 명세서에 대하여 더욱 상세하게 설명한다.

[0023]


본 명세서는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0024]

본 명세서에서 치환기의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0025]

본 명세서에 있어서,  및 점선은 다른 치환기 또는 결합부에 결합되는 부위를 의미한다.

[0026]

상기 "치환"이라는 용어는 화합물의 탄소 원자에 결합된 수소 원자가 다른 치환기로 바뀌는 것을 의미하며, 치환되는 위치는 수소 원자가 치환되는 위치 즉, 치환기가 치환 가능한 위치라면 한정하지 않으며, 2 이상 치환되는 경우, 2 이상의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0027]

본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 시아노기; 니트로기; 히드록시기; 알킬기; 시클로알킬기; 알케닐기; 알콕시기; 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기; 아릴기; 및 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된 1 또는 2 이상의 치환기로 치환되었거나 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환되거나, 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 바이페닐기일 수 있다. 즉, 바이페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다.

[0028]

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

[0029]

본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 50인 것이 바람직하다. 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, 시클로헥실메틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸프로필, 1,1-디메틸프로필, 이소헥실, 2-메틸펜틸, 4-메틸헥실, 5-메틸헥실 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0030]

본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 구체적으로 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 3-메틸시클로펜틸, 2,3-디메틸시클로펜틸, 시클로헥실, 3-메틸시클로헥실, 4-메틸시클로헥실, 2,3-디메틸시클로헥실, 3,4,5-트리메틸시클로헥실, 4-tert-부틸시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0031]

본 명세서에 있어서, 상기 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 20인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, i-프로필옥시, n-부톡시, 이소부톡시, tert-부톡시, sec-부톡시, n-펜틸옥시, 네오펜틸옥시, 이소펜틸옥시, n-헥실옥시, 3,3-디메틸부틸옥시, 2-에틸부틸옥시, n-옥틸옥시, n-노닐옥시, n-데실옥시, 벤질옥시, p-메틸벤질옥시 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0032]

본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 40인 것이 바람직하다. 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, 스티베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.

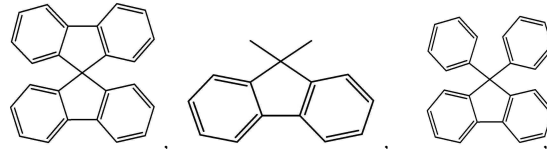
[0033]

본 명세서에 있어서, 포스핀옥사이드기는 구체적으로 디페닐포스핀옥사이드기, 디나프틸포스핀옥사이드 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0034] 본 명세서에서 상기 아릴기가 단환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 6 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

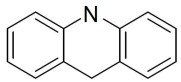
[0035] 상기 아릴기가 다환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 10 내지 24인 것이 바람직하다. 구체적으로 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0036] 본 명세서에 있어서, 상기 플루오레닐기는 치환될 수 있으며, 인접한 치환기들이 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

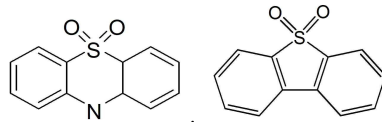


[0037] 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우, , , , 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0038] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴기는 탄소가 아닌 원자, 이종원자를 1 이상 포함하는 것으로서, 구체적으로 상기 이종 원자는 O, N, Se 및 S 등으로 이루어진 군에서 선택되는 원자를 1 이상 포함할 수 있다. 헤테로아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨라닐기, 피롤기, 이미다졸릴기, 티아졸릴기, 옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 트리아졸릴기, 피리딜기, 비피리딜기, 피리미딜기, 트리아지닐기, 아크리딜기, 하이드로아크리딜기(예컨대,



) , 피리다지닐기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴놀살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도피리미디닐기, 피리도피라지닐기, 피라지노피라지닐기, 이소퀴놀리닐기, 인돌기, 카바졸릴기, 벤즈옥사졸릴기, 벤즈이미다졸릴기, 벤조티아졸릴기, 벤조카바졸릴기, 디벤조카바졸릴기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 디벤조퓨라닐기; 벤조실릴기, 디벤조실릴기, 페난트릴리닐기(phenanthrolynyl group), 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페노티아지닐기, 페노옥사지닐기, 및 이들의 축합구조 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 이외에도 헤테로고리기의 예로서, 술폰닐기를 포함



하는 헤테로고리 구조, 예컨대, , 등이 있다.

[0039] 본 명세서에 있어서, 축합다환기는 방향족과 지방족의 축합고리일 수 있으며, 상기 헤테로아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.

[0040] 본 명세서에 있어서, 아릴렌은 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

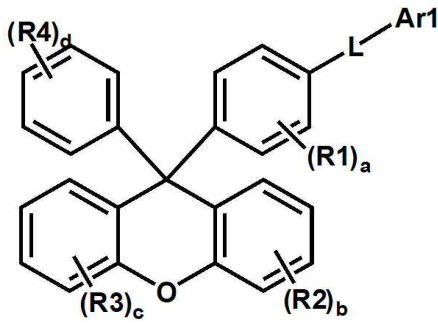
[0041] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴렌은 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0042] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 n은 1이다.

[0043] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 4 중 어느하나로 표시된다.

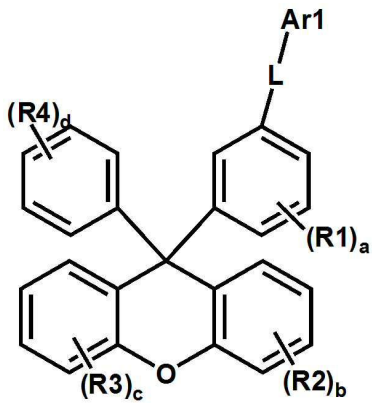


[0044] [화학식 2]



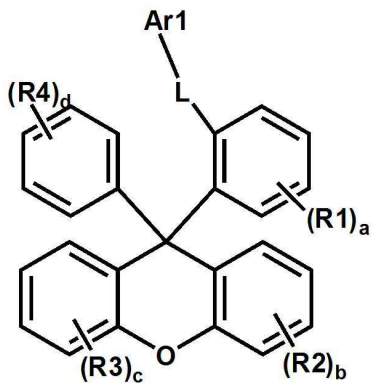
[0045]

[0046] [화학식 3]



[0047]

[0048] [화학식 4]



[0049]

[0050] 상기 화학식 2 내지 4에 있어서, R1 내지 R4, a 내지 d, L 및 Ar1은 화학식 1에서의 정의와 동일하다.

[0051] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 직접결합이다.

[0052] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 아릴렌기이다.

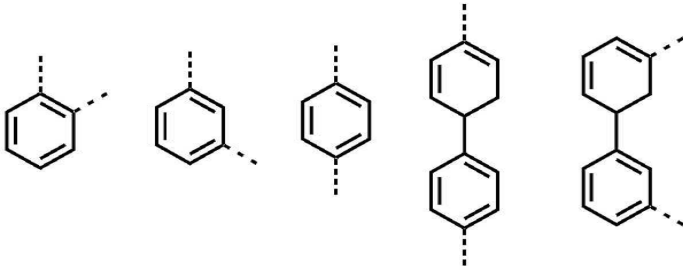
[0053] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이다.

[0054] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 단환의 아릴렌기이다.

[0055] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 직접결합; 페닐렌기; 바이페닐렌기; 또는 터페닐렌기이다.

[0056] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 직접결합; 페닐렌기; 또는 바이페닐렌기이다.

[0057] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 직접결합 또는 하기 구조식들 중에서 선택된다.

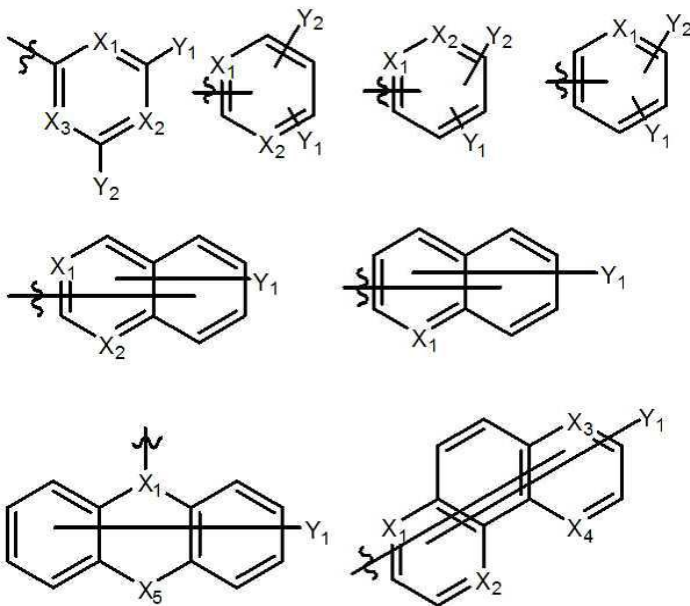


[0058]

[0059] 상기 구조식에 있어서, 점선은 화학식 1과 Ar1과 결합하는 결합위치를 의미한다.

[0060] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1 내지 R4는 수소이다.

[0061] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1은 하기 구조식들 중에서 선택된다.



[0062]

[0063] 상기 구조식에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로, N 또는 CH이고, X<sub>5</sub>는 S 또는 O이며,

[0064] Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 축합다환기이다.

[0065] 상기 구조식에 있어서, 물결은 L과 결합하는 위치를 의미한다.

[0066] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1은 적어도 하나의 N을 포함하거나, 치환기로 니트릴기를 갖는다.

[0067] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1의 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub> 중 적어도 하나는 N이고, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>가 모두 CH인 경우는 Y<sub>1</sub> 또는 Y<sub>2</sub>는 니트릴기이다. Ar1이 상기 치환기인 경우, HOMO, LUMO 준위를 낮게 형성하여 전자수송 및 정공차단을 원활히하여 우수한 효과가 있다.

[0068] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이다.

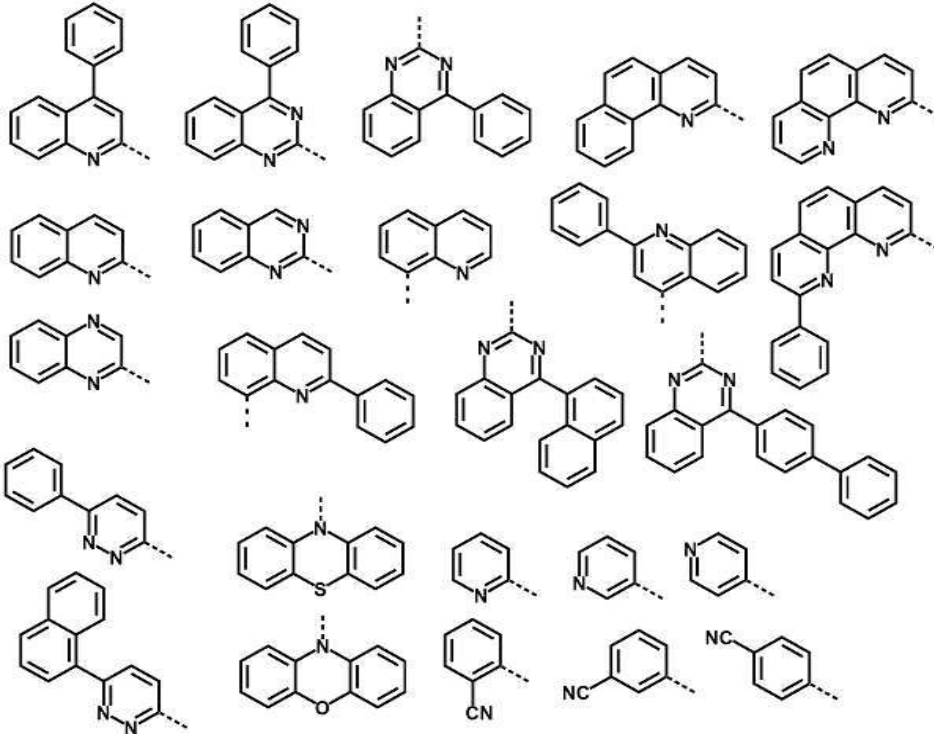
[0069] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이다.

[0070] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또

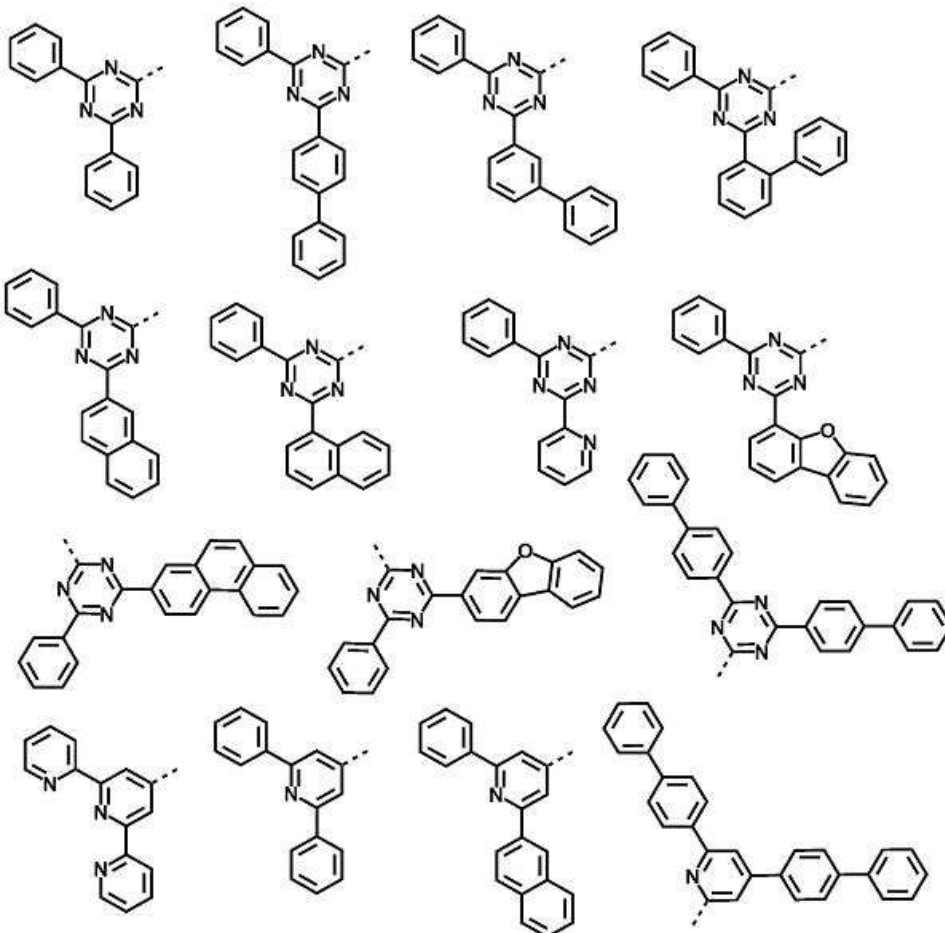
는 비치환된 페난트릴기; 치환 또는 비치환된 피리딘기; 또는 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐기이다.

[0071] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로, 수소; 중수소; 니트릴기; 페닐기; 바이페닐기; 나프틸기; 페난트릴기; 피리딘기; 또는 디벤조퓨라닐기이다.

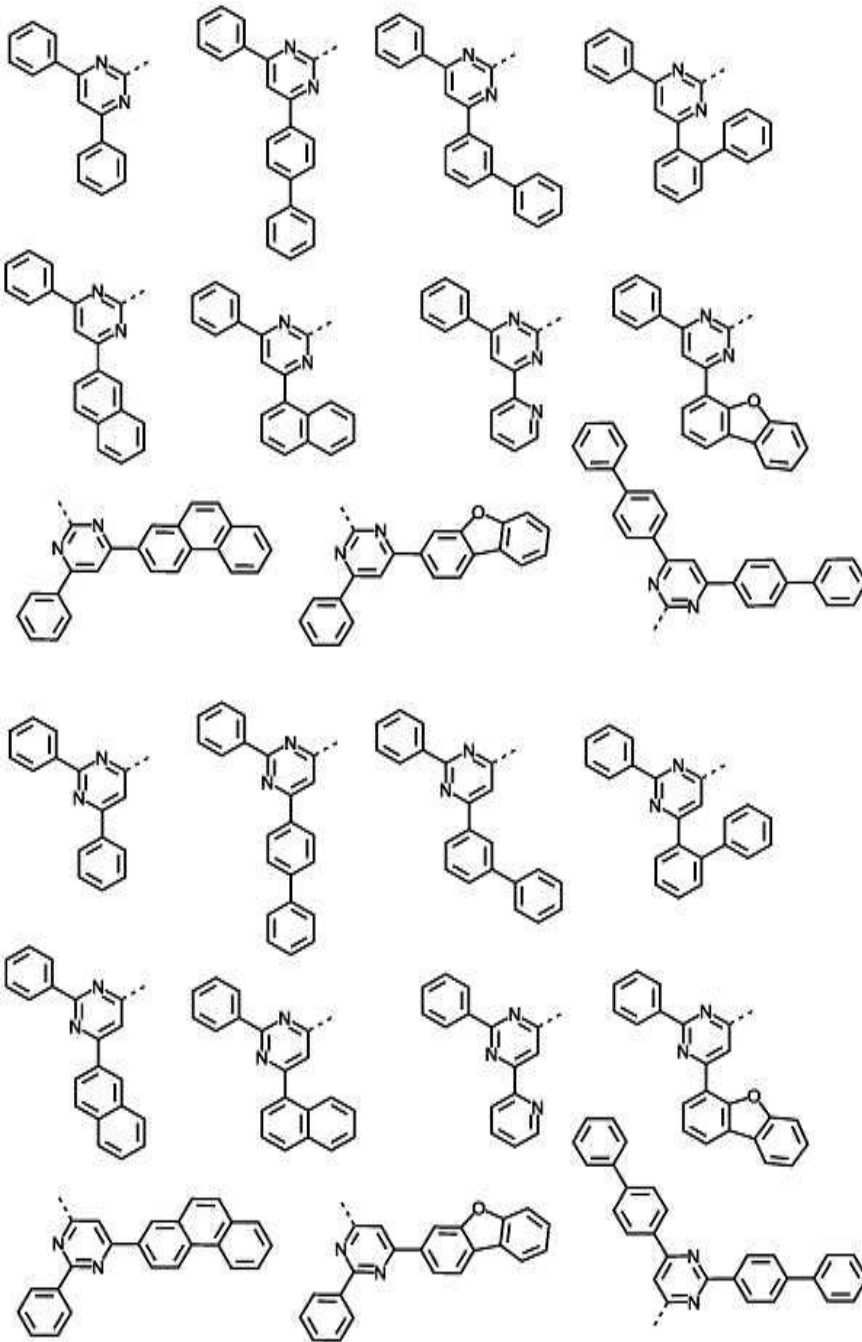
[0072] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1은 하기 구조식들 중에서 선택된다.



[0073]



[0074]



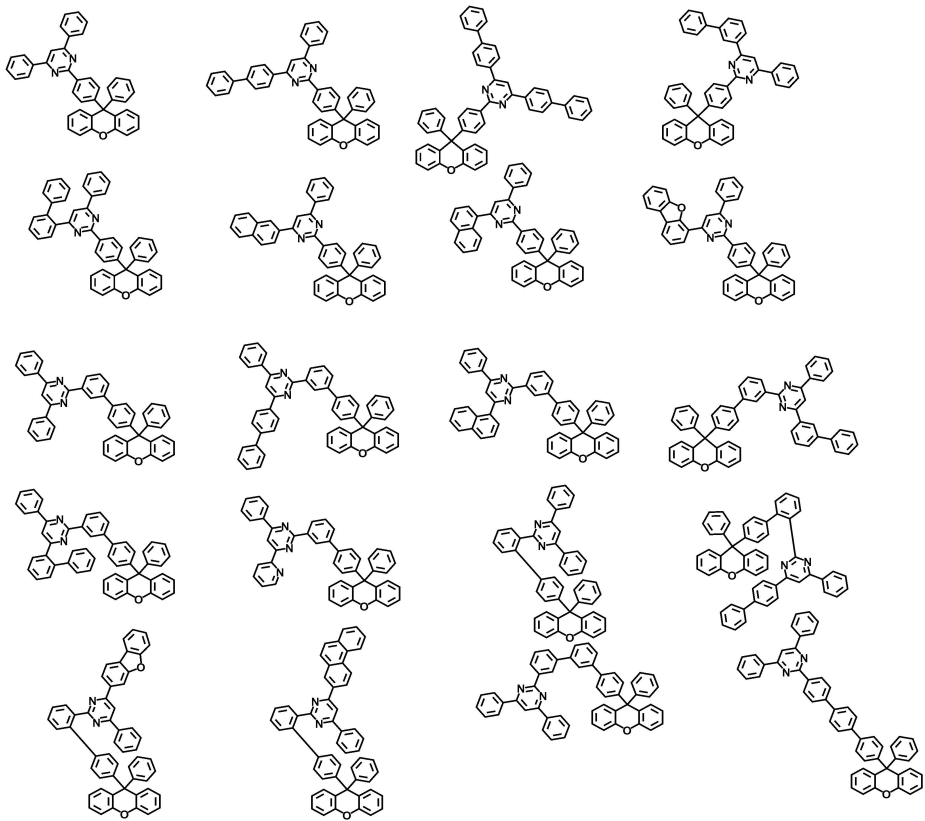
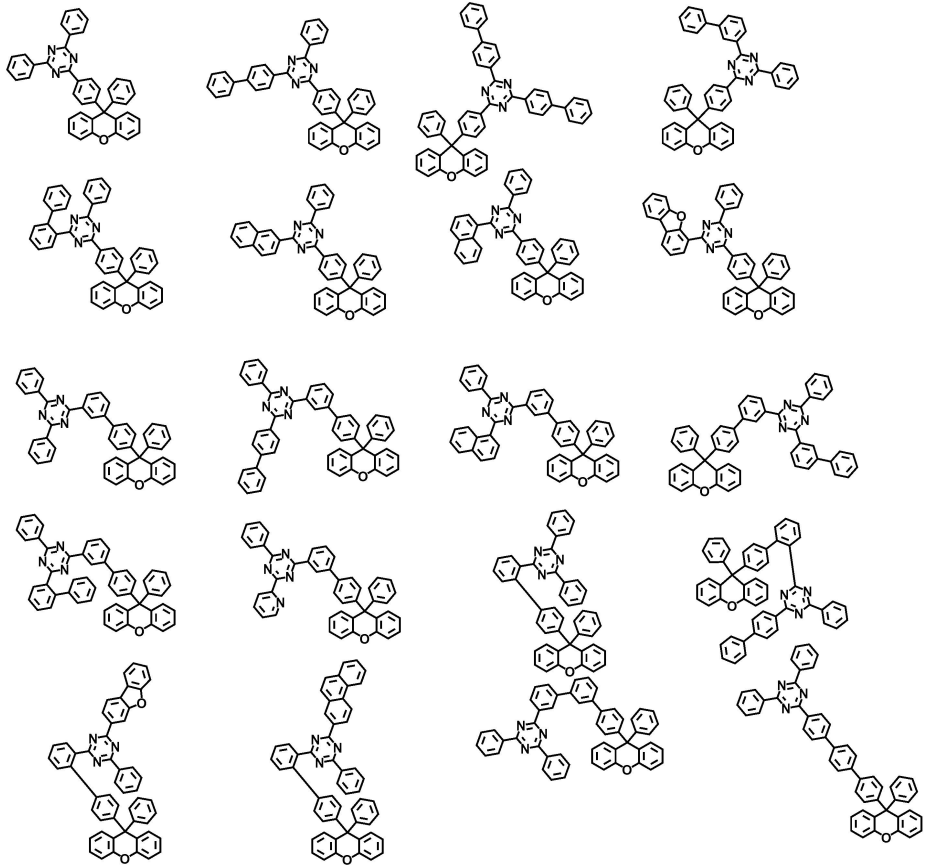
[0075]

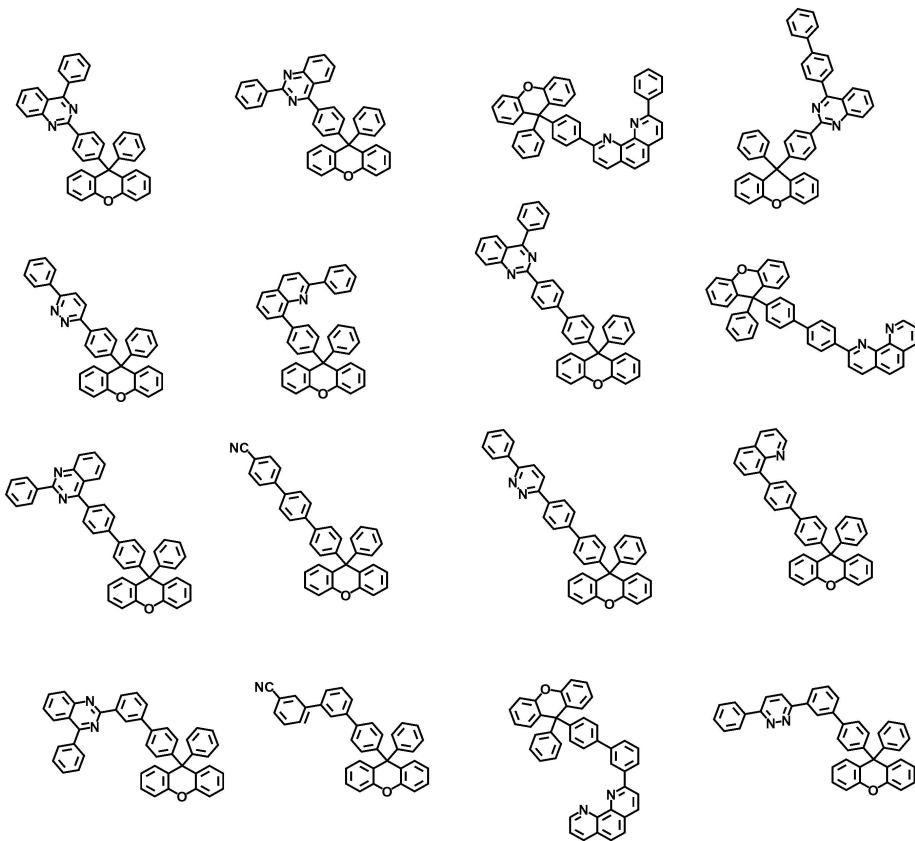
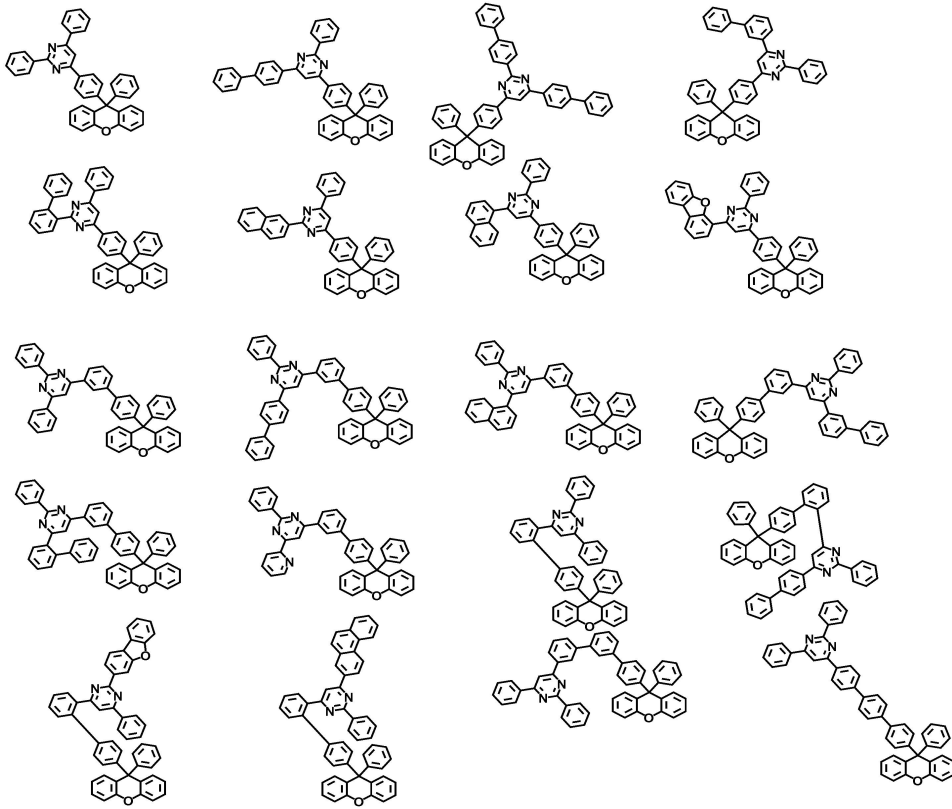
[0076]

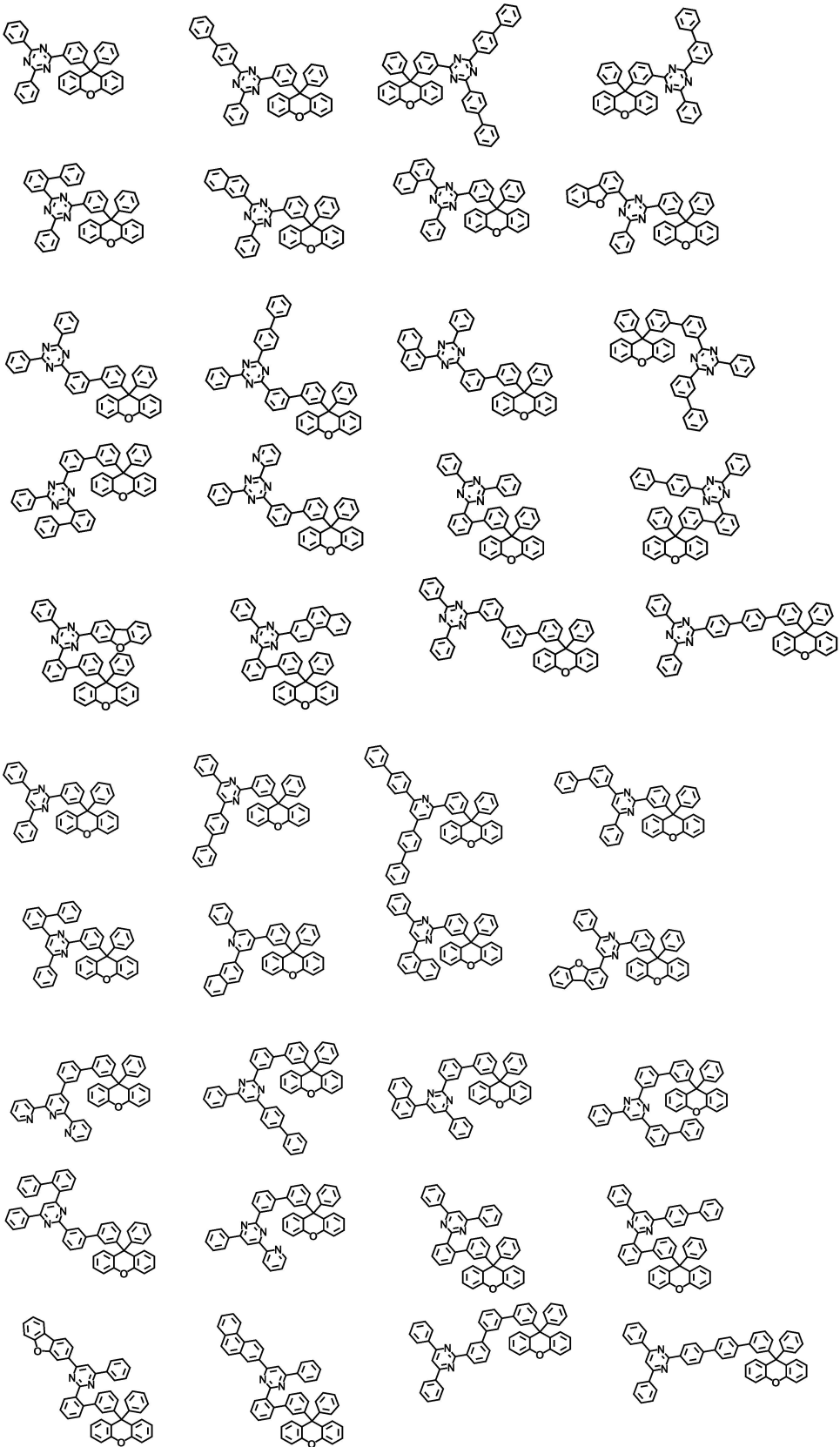
상기 구조식에 있어서, 점선은 L과 결합하는 위치를 의미한다.

[0077]

본 명세서의 일 실시 상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식들 중에서 선택되는 어느 하나이다.

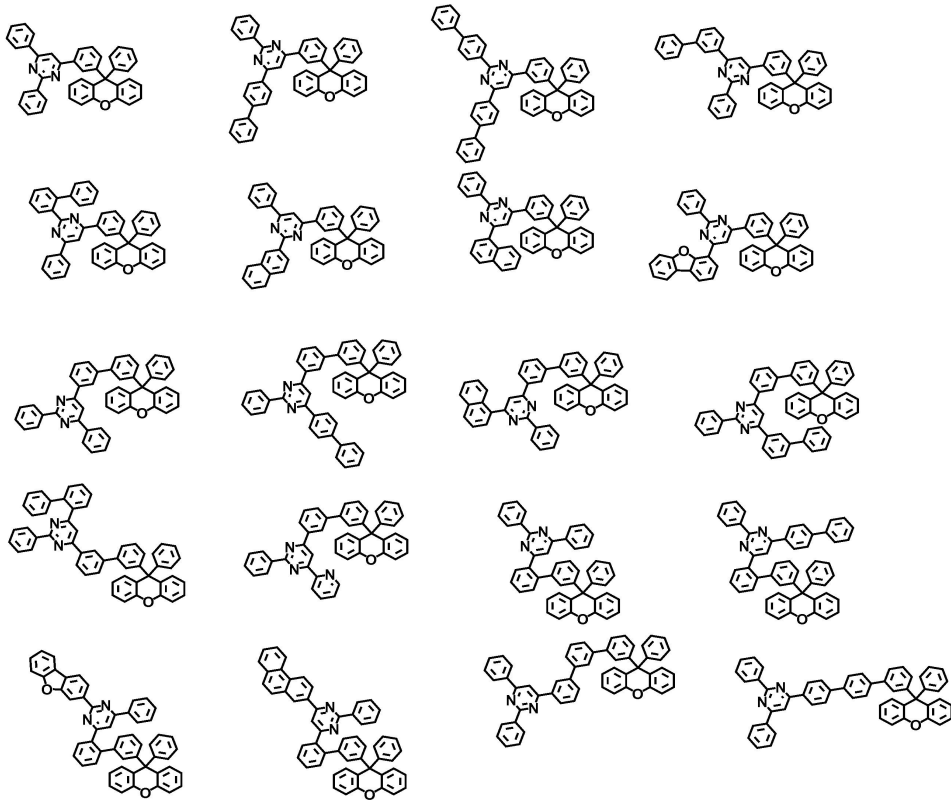




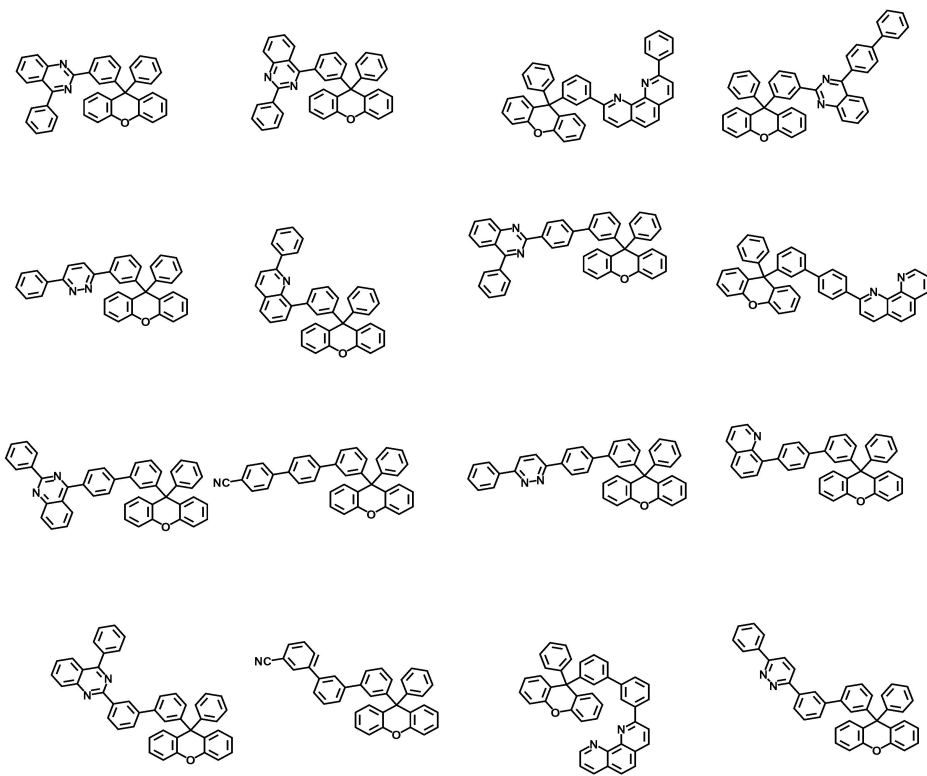


[0082]

[0083]

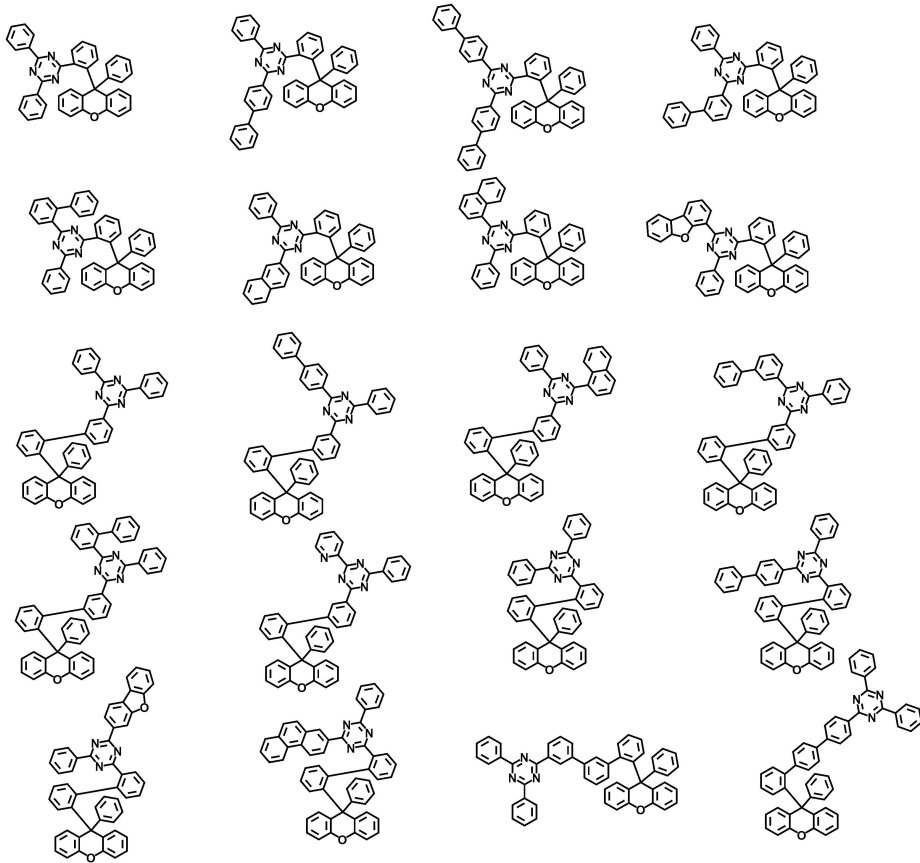


[0084]

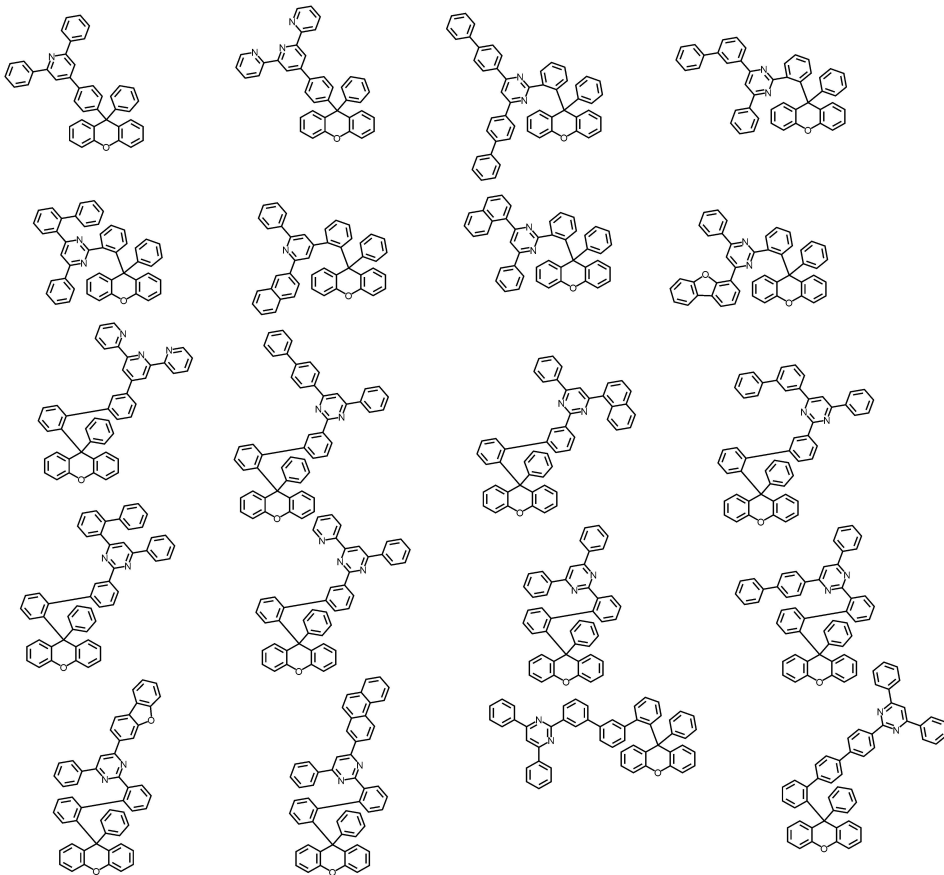


[0085]

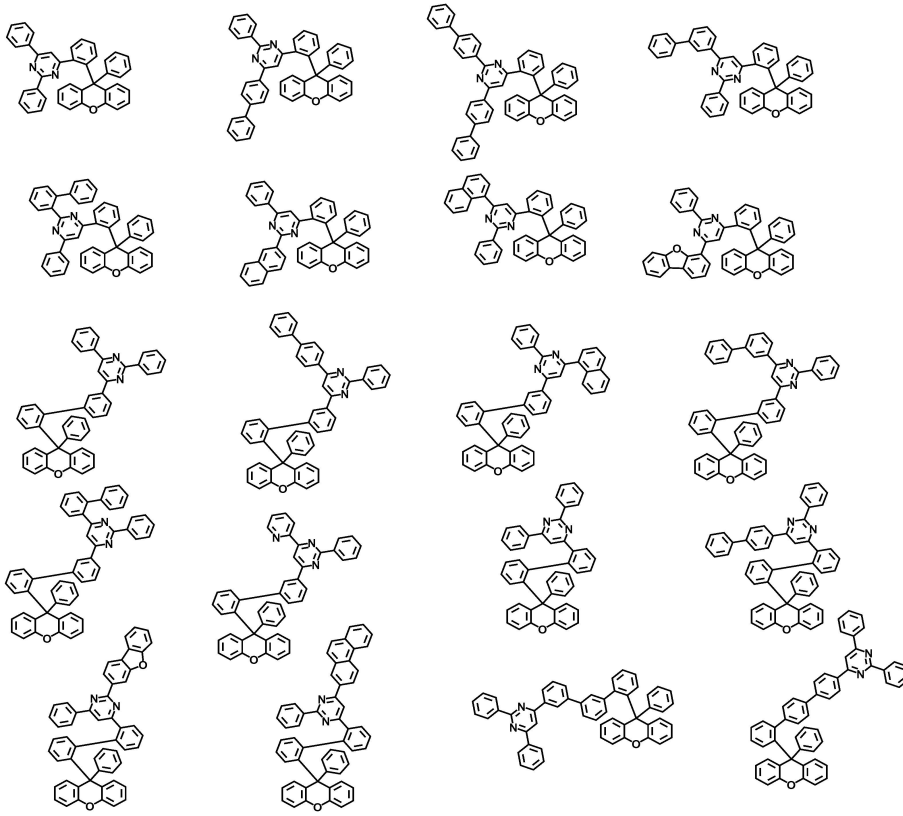




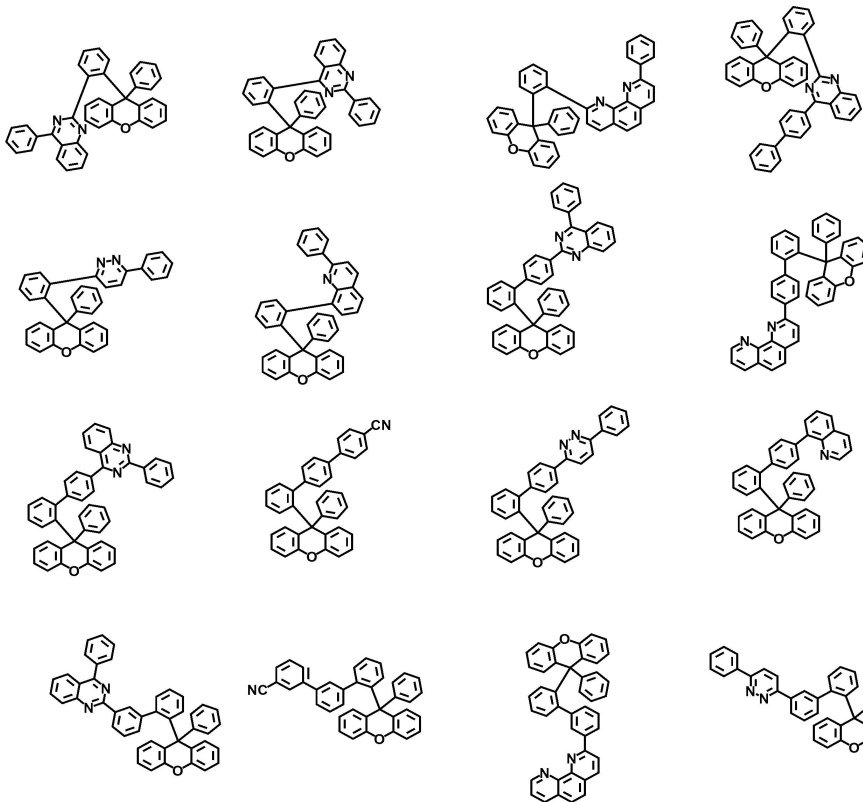
[0086]



[0087]



[0088]

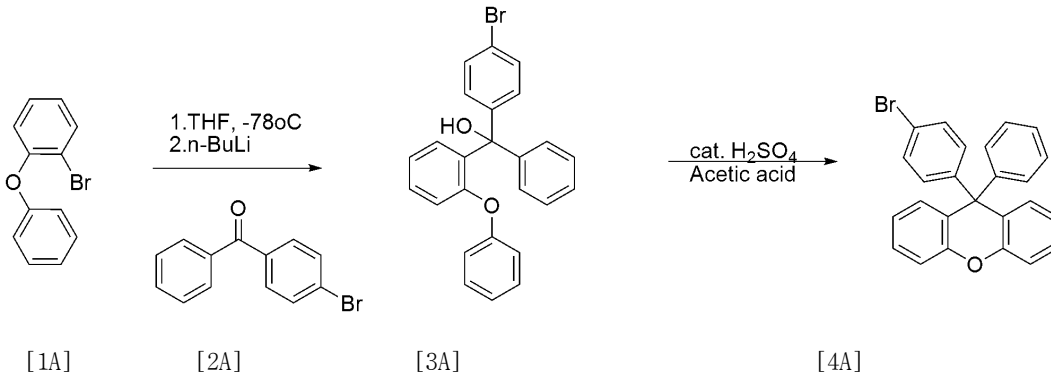


[0089]

[0090] 본 출원의 일 실시 상태에 따른 화합물은 후술하는 제조방법으로 제조될 수 있다.

[0091] 예컨대 상기 화학식 1의 화합물은 하기 반응식 1과 같이 코어구조가 제조될수 있다. 치환기는 당기술분야에 알려져 있는 방법에 의하여 결합될 수 있으며, 치환기의 종류, 위치 또는 개수는 당기술분야에 알려져 있는 기술에 따라 변경될 수 있다.

[0092] [반응식 1]



[0093]

[0094]

[0095] 상기 반응식 1에서 2A 대신에 (3-브로모페닐)(페닐)메탄온 ((3-bromophenyl)(phenyl)methanone)이나, (2-브로모)(페닐)메탄온 ((2-bromophenyl)(phenyl)methanone)을 사용하여 Br의 결합위치를 조정할 수 있으며, Br에 화학식 1의 Ar의 정의에 해당하는 치환기로 치환하여 화학식 1의 화합물을 제조할 수 있다.

[0096] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 HOMO 에너지 준위는 6.0 eV 이상이다.

[0097] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 LUMO 에너지 준위는 2.9 eV 이상이다.

[0098] 또한, 본 명세서는 상기 전술한 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

[0099] 본 출원의 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 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

[0100] 본 명세서에서 어떤 부재가 다른 부재 "상에" 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부재가 다른 부재에 접해 있는 경우뿐 아니라 두 부재 사이에 또 다른 부재가 존재하는 경우도 포함한다.

[0101] 본 명세서에서 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함" 한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성 요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.

[0102] 본 출원의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자의 대표적인 예로서, 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 유기물층을 포함할 수 있다.

[0103] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 포함한다.

[0104] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 정공주입층 또는 정공수송층을 포함하고, 상기 정공주입층 또는 정공수송층은 상기 화합물을 포함한다.

[0105] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 전자수송층 또는 전자주입층을 포함하고, 상기 전자수송층 또는 전자주입층은 상기 화합물을 포함한다.

[0106] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 전자수송층, 전자주입층, 또는 전자주입 및 수송층을 포함하고, 상기 전자수송층, 전자주입층, 또는 전자주입 및 수송층은 상기 화합물을 포함한다.

[0107] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화합물은 상기 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층은 추가의 화합물을 포함할 수 있다.

[0108] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화합물은 상기 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층은 N형 도펀트를 추가로 포함할 수 있다.

[0109] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화합물은 상기 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층은 금속착체를 추가로 포함할 수 있다.

[0110] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화합물은 상기 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층은 알칼리 금속착체를 추가로 포함할 수 있다.

- [0111] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화합물은 상기 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층은 리튬퀴놀레이트를 추가로 포함할 수 있다.
- [0112] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화합물은 상기 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층은 본원 화합물과 리튬퀴놀레이트를 1: 9 내지 9:1의 중량비로 포함할 수 있다.
- [0113] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화합물은 상기 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층은 본원 화합물과 리튬퀴놀레이트를 4: 6 내지 6:4의 중량비로 포함할 수 있다.
- [0114] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화합물은 상기 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층은 본원 화합물과 리튬퀴놀레이트를 1: 1의 중량비로 포함할 수 있다.
- [0115] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 전자저지층 또는 정공저지층을 포함하고, 상기 전자저지층 또는 정공저지층은 상기 화합물을 포함한다.
- [0116] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층의 두께는 1Å 내지 1000Å이고, 보다 바람직하게는 1Å 내지 500Å이다.
- [0117] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 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 포함하고, 상기 2층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화합물을 포함한다.
- [0118] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 2층 이상의 유기물층은 전자수송층, 전자주입층, 전자 수송과 전자주입을 동시에 하는 층 및 정공저지층으로 이루어진 군에서 2 이상이 선택될 수 있다.
- [0119] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 2층 이상의 전자수송층을 포함하고, 상기 2층 이상의 전자수송층 중 적어도 하나는 상기 화합물을 포함한다. 구체적으로 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화합물은 상기 2층 이상의 전자수송층 중 1층에 포함될 수도 있으며, 각각의 2층 이상의 전자수송층에 포함될 수 있다.
- [0120] 또한, 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 화합물이 상기 각각의 2층 이상의 전자수송층에 포함되는 경우, 상기 화합물을 제외한 다른 재료들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0121] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 상기 화합물을 포함하는 유기물층 이외에 아릴아미노기, 카바졸릴기 또는 벤조카바졸릴기를 포함하는 화합물을 포함하는 정공주입층 또는 정공수송층을 더 포함한다.
- [0122] 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.
- [0123] 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.
- [0124] 예컨대, 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 2에 예시되어 있다.
- [0125] 도 1은 기판(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화합물은 상기 발광층(3)에 포함될 수 있다.
- [0126] 도 2는 기판 (1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(3), 전자수송층(7) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서 상기 화합물은 상기 정공주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(3) 및 전자 수송층(7) 중 1층 이상에 포함될 수 있다.
- [0127] 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화합물은 상기 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층 중 1층 이상에 포함될 수 있다.
- [0128] 본 출원의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 본 출원의 화합물, 즉 상기 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.
- [0129] 상기 유기 발광 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.
- [0130] 본 출원의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 상기 화합물, 즉 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포

합하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.

- [0131] 예컨대, 본 출원의 유기 발광 소자는 기관 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, 기관 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, 기관 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수 있다.
- [0132] 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.
- [0133] 이와 같은 방법 외에도, 기관 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.
- [0134] 본 출원의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 양극이고, 상기 제2 전극은 음극이다.
- [0135] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 음극이고, 상기 제2 전극은 양극이다.
- [0136] 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<sub>2</sub> : Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0137] 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<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0138] 상기 정공 주입 층은 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.
- [0139] 상기 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층으로, 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0140] 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<sub>3</sub>); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BA1q; 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.
- [0141] 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 화합물, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0142] 상기 전자 수송층은 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; Al<sub>3</sub>를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라톤-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.

[0143] 상기 전자주입층은 전극으로부터 전자를 주입하는 층으로, 전자를 수송하는 능력을 갖고, 음극으로부터의 전자 주입 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 전자주입 효과를 가지며, 발광층에서 생성된 여기자의 정공 주입층에의 이동을 방지하고, 또한, 박막형성능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 구체적으로는 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀸논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사디아아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페틸렌 테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 함질소 5원환 유도체가 있으나, 이에 한정되지 않는다.

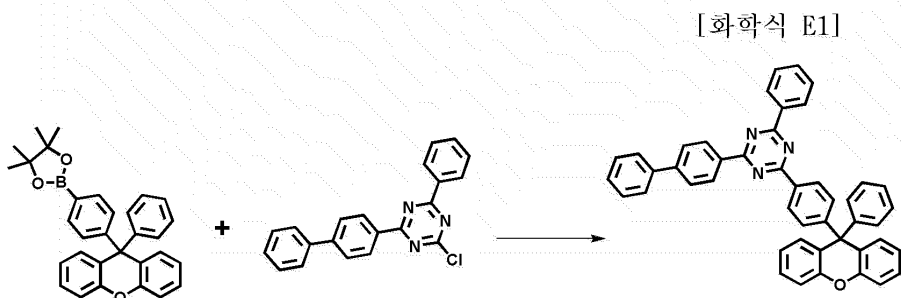
[0144] 상기 금속 착체 화합물로서는 8-하이드록시퀴놀리나토 리튬, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)아연, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)구리, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)망간, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(2-메틸-8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)갈륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)아연, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)클로로갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(o-크레졸라토)갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(1-나프톨라토)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(2-나프톨라토)갈륨 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0145] 상기 정공저지층은 정공의 음극 도달을 저지하는 층으로, 일반적으로 정공주입층과 동일한 조건으로 형성될 수 있다. 구체적으로 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, BCP, 알루미늄 착물 (aluminum complex) 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0146] 본 명세서에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0147] 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.

[0148] **제조예 1. 화학식 E1의 합성**



[0149]

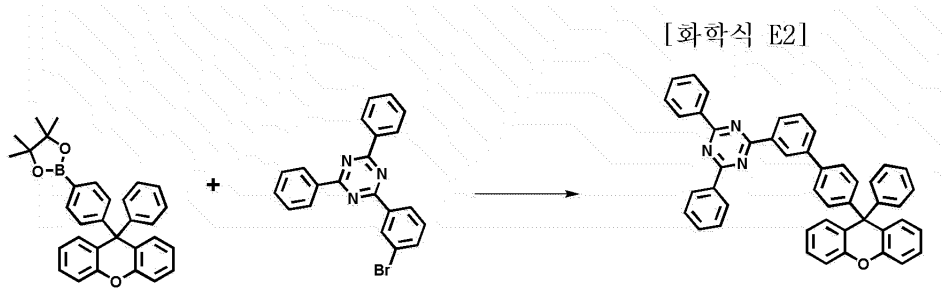
[0150] 상기 화합물 4,4,5,5-테트라메틸-2-(4-(9-페닐-9H-잔텐-9-일)페닐)-1,3,2-디옥사보로란 (10.0g, 21.7mmol)과 2-([1,1'-비페닐]-4-일)-4-클로로-6-페닐-1,3,4-트리아진 (7.5g, 21.7mmol)을 테트라하이드로퓨란(100ml)에 완전히 녹인 후 탄산칼륨(9.0g, 65.4mmol)을 물 50ml에 용해시켜 첨가하고, 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐 (753mg, 0.65mmol)을 넣은 후, 8시간동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 반응을 종결한 후, 탄산칼륨 용액을 제거하여 상기의 흰색 고체를 걸렀다. 걸러진 흰색의 고체를 테트라하이드로퓨란과 에틸아세테이트로 각각 2번씩 세척하여 상기 화학식 E1의 화합물 (12.5g, 수율 90%)을 제조하였다.

[0151] MS[M+H]<sup>+</sup> = 642

[0152] 상기 화학식 E1의 화합물을 광전자 분광장치를 이용하여 측정된 HOMO 에너지 준위를 도 3에 나타내었다.

[0153] 상기 화학식 E1의 화합물을 포토루미네센스를 이용하여 측정된 흡수, 발광 스펙트럼을 도 6에 나타내었다.

[0154] 제조예 2. 화학식 E2의 합성

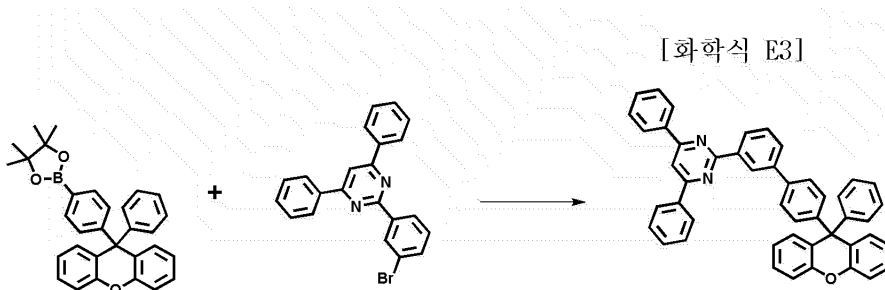


[0155]

[0156] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E2로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0157]  $MS[M+H]^+ = 642$

[0158] 제조예 3. 화학식 E3의 합성



[0159]

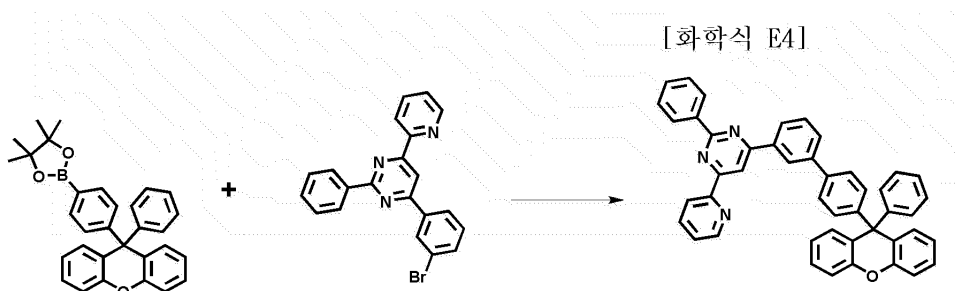
[0160] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E3로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0161]  $MS[M+H]^+ = 641$

[0162] 상기 화학식 E3의 화합물을 광전자 분광창치를 이용하여 측정된 HOMO 에너지 준위를 도 4에 나타내었다.

[0163] 상기 화학식 E3의 화합물을 포토루미네센스를 이용하여 측정된 흡수, 발광 스펙트럼을 도 7에 나타내었다.

[0164] 제조예 4. 화학식 E4의 합성

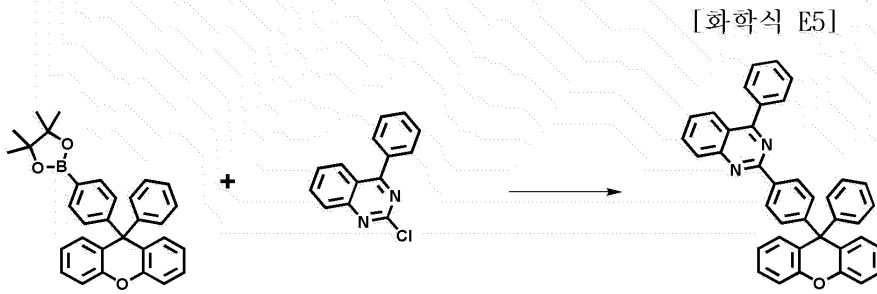


[0165]

[0166] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E4로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0167]  $MS[M+H]^+ = 642$

[0168] 제조예 5. 화학식 E5의 합성

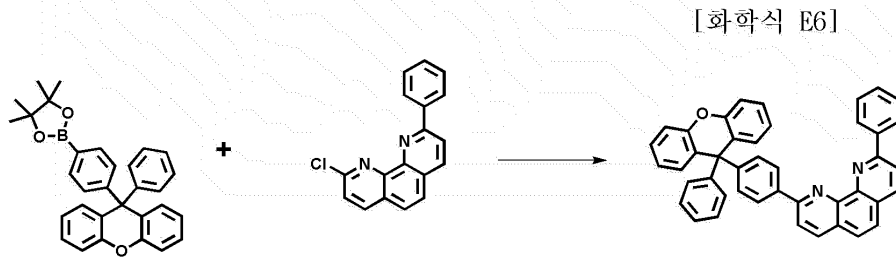


[0169]

[0170] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E5로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0171] MS[M+H]<sup>+</sup> = 539

[0172] 제조예 6. 화학식 E6의 합성

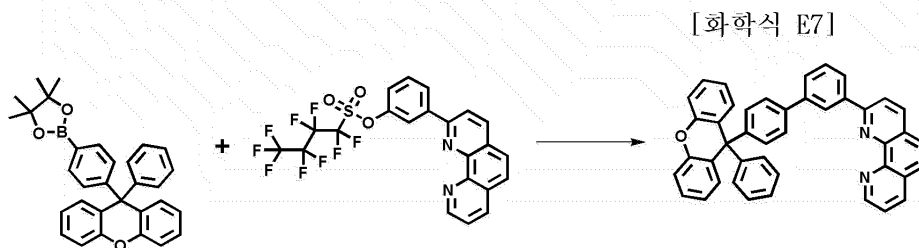


[0173]

[0174] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E6로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0175] MS[M+H]<sup>+</sup> = 589

[0176] 제조예 7. 화학식 E7의 합성



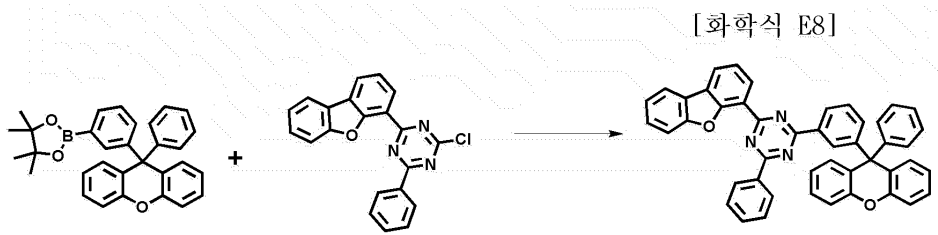
[0177]

[0178] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E7로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0179] MS[M+H]<sup>+</sup> = 589



[0180] 제조예 8. 화학식 E8의 합성

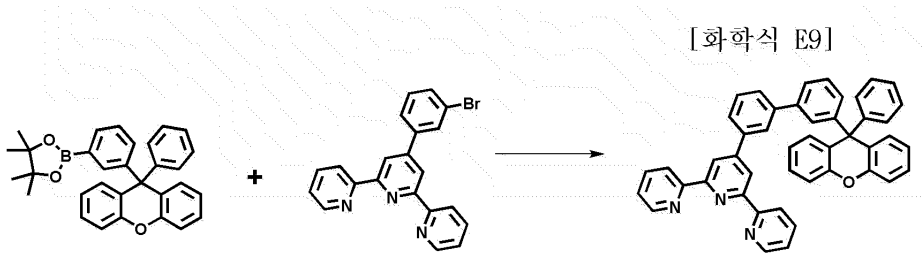


[0181]

[0182] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E8로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0183] MS[M+H]<sup>+</sup> = 656

[0184] 제조예 9. 화학식 E9의 합성

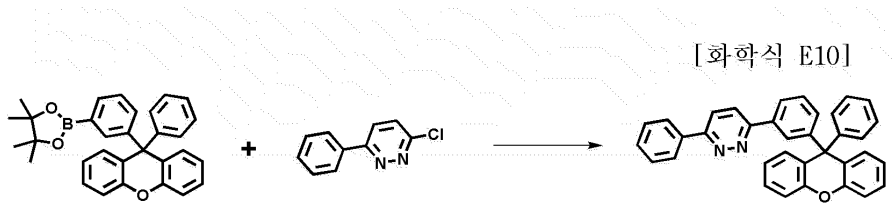


[0185]

[0186] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E9로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0187] MS[M+H]<sup>+</sup> = 642

[0188] 제조예 10. 화학식 E10의 합성

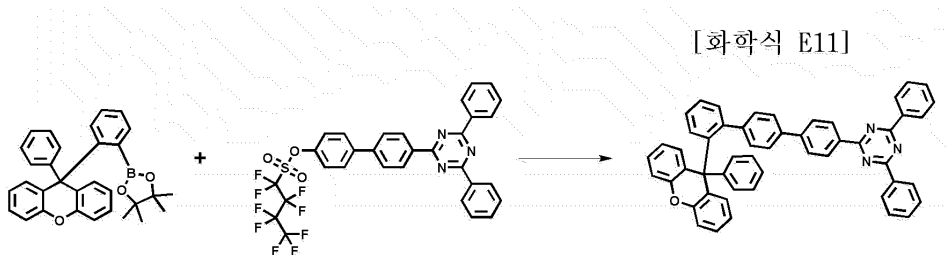


[0189]

[0190] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E10로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0191] MS[M+H]<sup>+</sup> = 489

[0192] 제조예 11. 화학식 E11의 합성

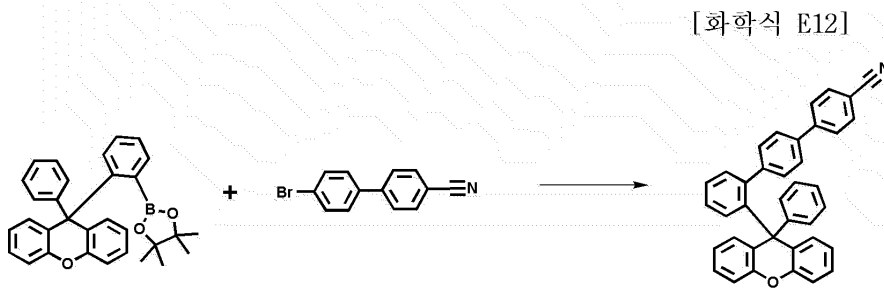


[0193]

[0194] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E11로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0195] MS[M+H]<sup>+</sup> = 718

[0196] 제조예 12. 화학식 E12의 합성

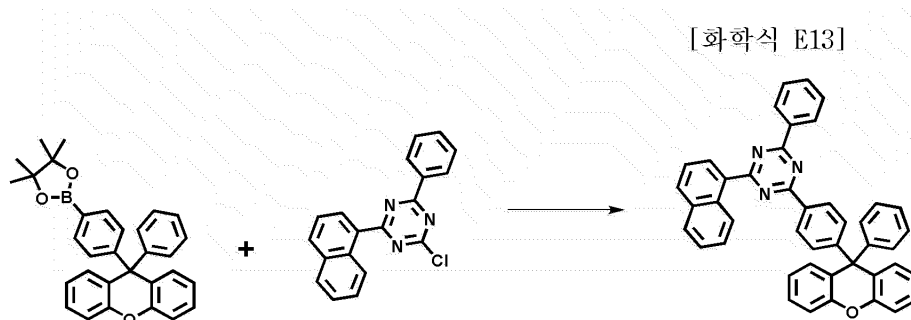


[0197]

[0198] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E12로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0199] MS[M+H]<sup>+</sup> = 512

[0200] 제조예 13. 화학식 E13의 합성

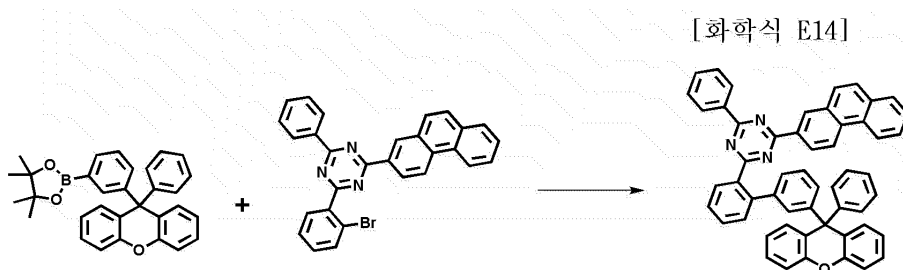


[0201]

[0202] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E13로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0203] MS[M+H]<sup>+</sup> = 616

[0204] 제조예 14. 화학식 E14의 합성

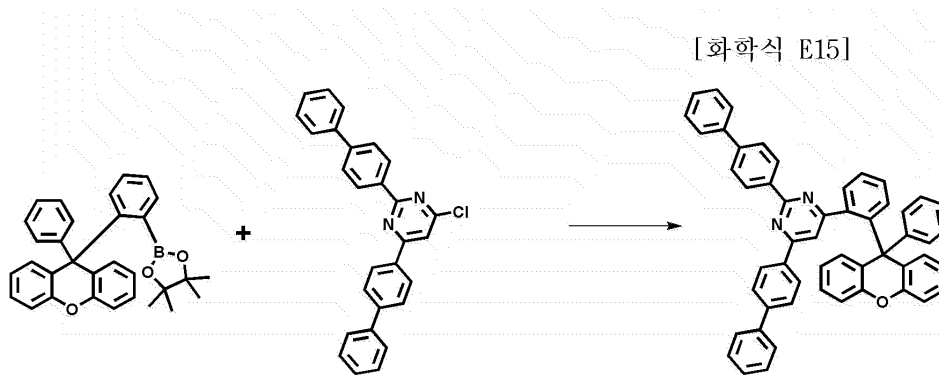


[0205]

[0206] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E14로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0207] MS[M+H]<sup>+</sup> = 742

[0208] 제조예 15. 화학식 E15의 합성



[0209]

[0210] 각 출발물질을 상기 반응식과 같이 하는 것을 제외하고는, 제조예 1과 동일한 방법으로 상기 화학식 E15로 표시되는 화합물을 제조하였다.

[0211] MS[M+H]<sup>+</sup> = 717

[0212] <실험예 1-1>

[0213] ITO(indium tin oxide)가 1,000Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이 때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀러포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

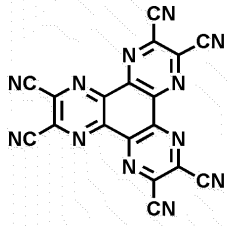
[0214] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 화합물 [HI-A]를 600Å의 두께로 열 진공증착하여 정공 주입층을 형성하였다. 상기 정공 주입층 위에 하기 화학식의 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(hexanitriple hexaazatriphenylene; HAT)를 50Å 및 하기 화합물 [HT-A] (600Å)를 순차적으로 진공증착하여 정공 수송층을 형성하였다.

[0215] 이어서, 상기 정공 수송층 위에 막 두께 200Å으로 하기 화합물 [BH]와 [BD]를 25:1의 중량비로 진공증착하여 발광층을 형성하였다.

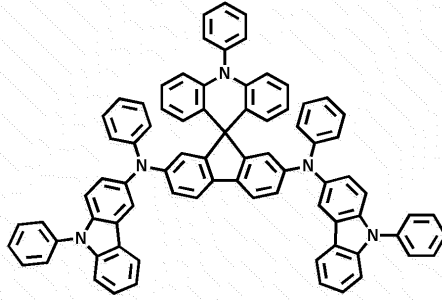
[0216] 상기 발광층 위에 상기 [화학식 E1]의 화합물과 상기 화합물 [LiQ](Lithiumquinolate)를 1:1 중량비로 진공증착하여 350Å의 두께로 전자 주입 및 수송층을 형성하였다. 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 10Å 두께로 리튬 플루라이드(LiF)와 1,000Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

[0217] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4 내지 0.9 Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플루오라이드는 0.3 Å/sec, 알루미늄은 2 Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 1 × 10<sup>-7</sup> 내지 5 × 10<sup>-8</sup> torr를 유지하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.

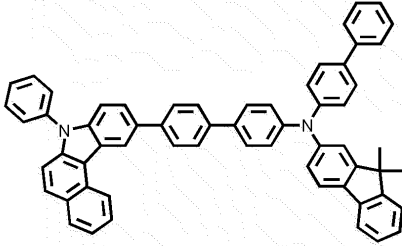
[HAT]



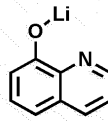
[HI-A]



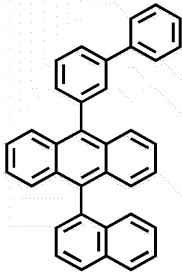
[HT-A]



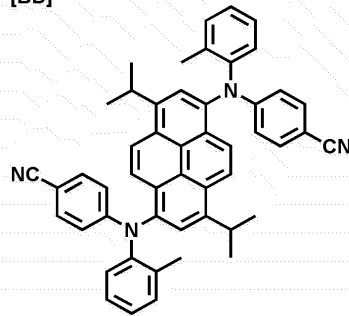
[LiQ]



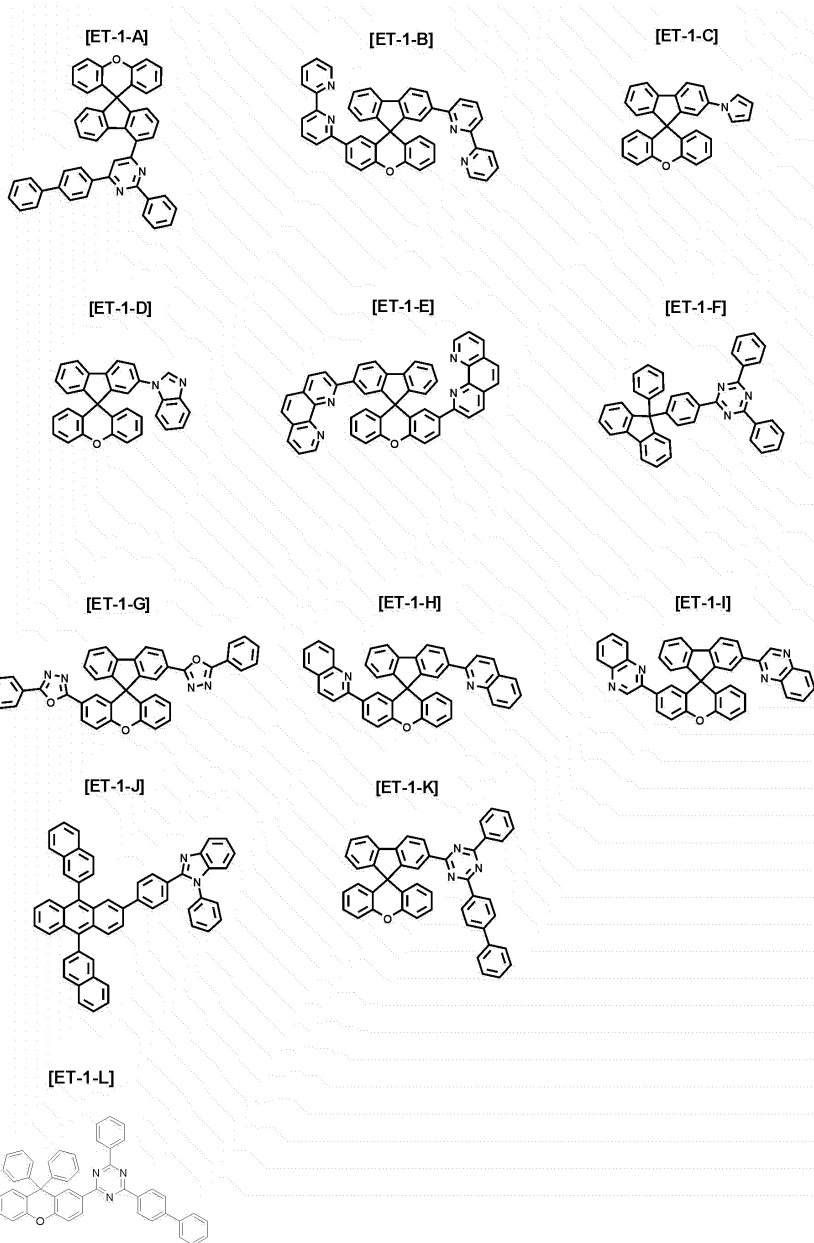
[BH]



[BD]



[0218]



[0219]

[0220] <실험예 1-2>

[0221] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E2의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0222] <실험예 1-3>

[0223] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E3의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0224] <실험예 1-4>

[0225] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E4의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0226] <실험예 1-5>

[0227] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E5의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0228] <실험예 1-6>

- [0229] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E6의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0230] <실험예 1-7>
- [0231] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E7의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0232] <실험예 1-8>
- [0233] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E8의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0234] <실험예 1-9>
- [0235] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E9의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0236] <실험예 1-10>
- [0237] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E10의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0238] <실험예 1-11>
- [0239] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E11의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0240] <실험예 1-12>
- [0241] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E12의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0242] <실험예 1-13>
- [0243] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E13의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0244] <실험예 1-14>
- [0245] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E14의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0246] <실험예 1-15>
- [0247] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 E15의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0248] <비교예 1-1>
- [0249] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 ET-1-A의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0250] <비교예 1-2>
- [0251] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 ET-1-B의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0252] <비교예 1-3>
- [0253] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 ET-1-C의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0254] <비교예 1-4>
- [0255] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 ET-1-D의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예

1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0256] <비교예 1-5>

[0257] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 ET-1-E의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0258] <비교예 1-6>

[0259] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 ET-1-F의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0260] <비교예 1-7>

[0261] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 ET-1-G의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0262] <비교예 1-8>

[0263] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 ET-1-H의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0264] <비교예 1-9>

[0265] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 ET-1-I의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0266] <비교예 1-10>

[0267] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 ET-1-J의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0268] 또한, 상기 화합물 [ET-1-J]의 광전자 분광창치를 이용하여 측정된 HOMO 에너지 준위를 도 5에 나타내었고, 상기 화합물 [ET-1-J]의 포토루미네선스를 이용하여 측정된 흡수, 발광 스펙트럼을 도 8에 나타내었다.

[0269] <비교예 1-11>

[0270] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 ET-1-K의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0271] <비교예 1-12>

[0272] 상기 실험예 1-1에서 화학식 E1의 화합물 대신 상기 화학식 ET-1-L의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1-1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0273] 진술한 실험예 1-1 내지 1-15 및 비교예 1-1 내지 1-12의 방법으로 제조한 유기 발광 소자를 10 mA/Cm<sup>2</sup>의 전류 밀도에서 구동전압과 발광 효율을 측정하였고, 20 mA/Cm<sup>2</sup>의 전류밀도에서 초기 휘도 대비 90%가 되는 시간(T<sub>90</sub>)을 측정하였다. 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

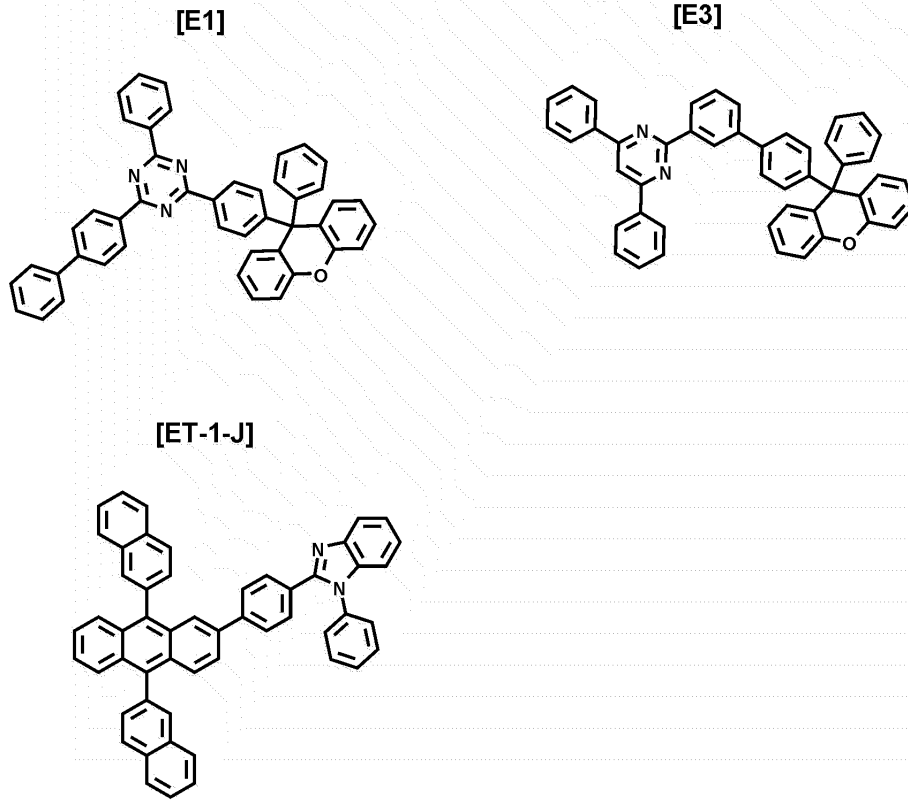
[0274]

|         | 화학식 | 전압<br>(V@10mA/cm <sup>2</sup> ) | 효율<br>(cd/A@10mA/cm <sup>2</sup> ) | 색좌표<br>(x, y)  | 수명(h)<br>T <sub>90</sub> at<br>20mA/Cm <sup>2</sup> |
|---------|-----|---------------------------------|------------------------------------|----------------|---|
| 실험예 1-1 | E1  | 4.37                            | 5.77                               | (0.142, 0.097) | 110   |
| 실험예 1-2 | E2  | 4.25                            | 5.80                               | (0.142, 0.096) | 100   |
| 실험예 1-3 | E3  | 4.44                            | 5.82                               | (0.142, 0.096) | 98  |
| 실험예 1-4 | E4  | 4.30                            | 5.75                               | (0.142, 0.096) | 106   |
| 실험예 1-5 | E5  | 4.50                            | 5.34                               | (0.142, 0.096) | 97  |
| 실험예 1-6 | E6  | 4.41                            | 5.40                               | (0.142, 0.097) | 115   |
| 실험예 1-7 | E7  | 4.47                            | 5.39                               | (0.142, 0.096) | 112   |
| 실험예 1-8 | E8  | 4.39                            | 5.71                               | (0.142, 0.099) | 129   |

|          |        |      |      |                |     |
|----------|--------|------|------|----------------|-----|
| 실험예 1-9  | E9     | 4.48 | 5.30 | (0.142, 0.096) | 96  |
| 실험예 1-10 | E10    | 4.39 | 5.68 | (0.142, 0.098) | 133 |
| 실험예 1-11 | E11    | 4.31 | 5.70 | (0.142, 0.096) | 136 |
| 실험예 1-12 | E12    | 4.47 | 5.48 | (0.142, 0.097) | 160 |
| 실험예 1-13 | E13    | 4.21 | 5.75 | (0.142, 0.096) | 120 |
| 실험예 1-14 | E14    | 4.33 | 5.80 | (0.142, 0.097) | 100 |
| 실험예 1-15 | E15    | 4.30 | 5.84 | (0.142, 0.097) | 101 |
| 비교예 1-1  | ET-1-A | 4.50 | 4.70 | (0.142, 0.098) | 90  |
| 비교예 1-2  | ET-1-B | 4.84 | 4.01 | (0.142, 0.102) | 77  |
| 비교예 1-3  | ET-1-C | 4.99 | 2.99 | (0.142, 0.096) | 81  |
| 비교예 1-4  | ET-1-D | 4.70 | 4.00 | (0.142, 0.096) | 57  |
| 비교예 1-5  | ET-1-E | 5.11 | 3.50 | (0.142, 0.096) | 65  |
| 비교예 1-6  | ET-1-F | 4.33 | 5.00 | (0.142, 0.096) | 30  |
| 비교예 1-7  | ET-1-G | 5.33 | 3.21 | (0.142, 0.096) | 40  |
| 비교예 1-8  | ET-1-H | 5.45 | 3.18 | (0.142, 0.096) | 45  |
| 비교예 1-9  | ET-1-I | 5.59 | 3.07 | (0.142, 0.096) | 52  |
| 비교예 1-10 | ET-1-J | 5.00 | 3.77 | (0.142, 0.096) | 80  |
| 비교예 1-11 | ET-1-K | 4.55 | 4.51 | (0.142, 0.097) | 88  |
| 비교예 1-12 | ET-1-L | 4.40 | 5.05 | (0.142, 0.097) | 27  |

- [0275] 상기 표 1의 결과로부터, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 유기 발광 소자의 전자주입 및 전자수송을 동시에 할 수 있는 유기물층에 사용될 수 있음을 확인할 수 있다.
- [0276] 구체적으로 실험예 1-1 내지 1-15과 비교예 1-1, 1-11를 비교하면, 상기 화학식 1과 같이 디페닐 잔텐 골격의 화합물은 스피로 플루오렌 잔텐 골격의 화합물에 비하여 유기 발광 소자에서 구동전압, 효율 면에서 우수한 특성을 나타내는 것을 확인할 수 있다.
- [0277] 구체적으로 실험예 1-1 내지 1-15과 비교예 1-2, 1-5, 1-7, 1-8, 1-9를 비교하면, 상기 화학식 1과 같이 디페닐 잔텐 골격에 치환기가 하나만 치환된 화합물은 스피로 플루오렌 잔텐 골격에 두 개 이상의 치환기를 가지는 화합물에 비하여 유기 발광 소자에서 구동전압, 효율 및 수명면에서 우수한 특성을 나타내는 것을 확인할 수 있다.
- [0278] 구체적으로 실험예 1-1 내지 1-15과 비교예 1-3, 1-4, 1-7, 1-10를 비교하면, 상기 화학식 1과 같이 디페닐 잔텐 골격에 6원고리의 Ar1이 치환된 화합물은 질소를 함유한 5원 헤테로고리 치환기를 가지는 화합물에 비하여 유기 발광 소자에서 구동전압, 효율 및 수명면에서 우수한 특성을 나타내는 것을 확인할 수 있다.
- [0279] 구체적으로 실험예 1-1 내지 1-15과 비교예 1-6를 비교하면, 상기 화학식 1과 같이 디페닐 잔텐 골격의 화합물은 디페닐 플루오렌 골격의 화합물에 비하여 유기 발광 소자에서 구동전압, 수명 면에서 우수한 특성을 나타내는 것을 확인할 수 있다.
- [0280] 구체적으로 실험예 1-1 내지 1-15과 비교예 1-12를 비교하면, 상기 화학식 1과 같이 디페닐 잔텐 골격의 화합물은 디페닐 잔텐 골격의 화합물에 잔텐고리 벤젠에 치환된 헤테로 아릴 화합물 비하여 유기 발광 소자에서 효율, 수명 면에서 우수한 특성을 나타내는 것을 확인할 수 있다.
- [0281] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성이 우수하고, 6.0 eV 이상의 깊은 HOMO 준위, 높은 삼중항 에너지(ET), 및 정공 안정성을 가져 우수한 특성을 나타낼 수 있다.
- [0282] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 전자 주입 및 전자수송을 동시에 할 수 있는 유기물층에 사용할 경우, 당업계에서 사용되는 n-형 도펀트를 혼합하여 사용 가능하다.
- [0283] 이에 따라, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 낮은 구동전압 및 높은 효율을 가지며, 화합물의 정공 안정성에 의하여 소자의 안정성을 향상시킬 수 있다.
- [0284] <실험예 2>
- [0285] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물에 해당하는 하기 화학식 E1, E3 및 ET-1-J로 표시되는 화합물의 HOMO 에너지 및 LUMO 에너지 값을 하기 표 2에 나타내었다.





[0286]

[0287] 본 명세서의 실시예에서 상기 HOMO 준위는 대기하 광전자 분광장치(RIKEN KEIKI Co., Ltd. 제조: AC3)를 이용하여 측정하였다.

[0288] 본 명세서의 실시예에 상기 LUMO 준위는 photoluminescence(PL)을 통하여 측정된 파장값으로 계산하였다.

**표 2**

[0289]

| 화학식    | HOMO (eV) | LUMO (eV) |
|--------|-----------|-----------|
| E1     | 6.22      | 2.96      |
| E3     | 6.18      | 2.93      |
| ET-1-J | 5.70      | 2.87      |

**부호의 설명**

[0290]

- 1: 기관
- 2: 양극
- 3: 발광층
- 4: 음극
- 5: 정공주입층
- 6: 정공수송층
- 7: 전자수송층

도면

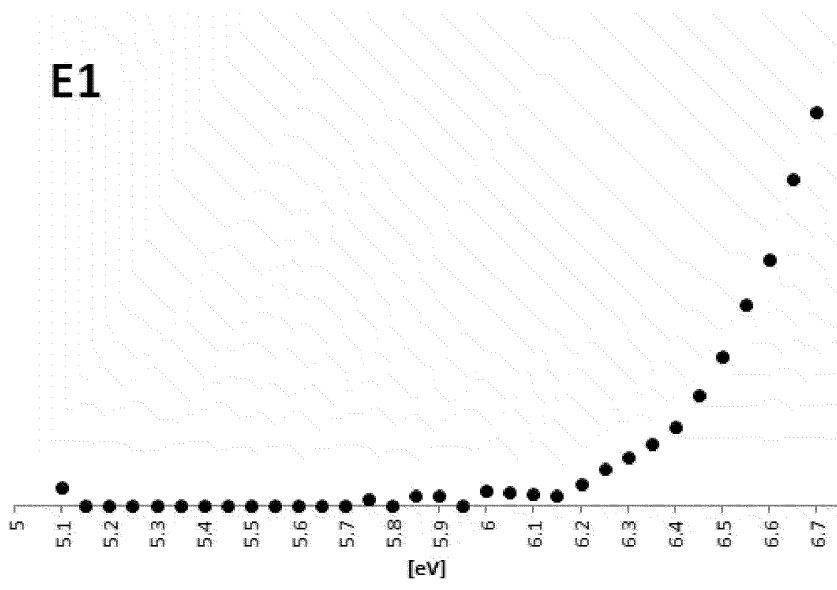
도면1

|   |
|---|
| 4 |
| 3 |
| 2 |
| 1 |

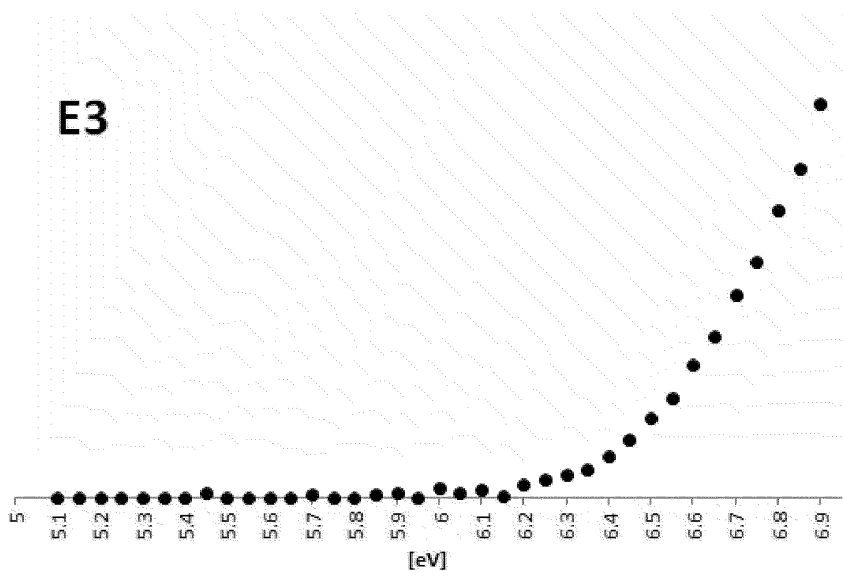
도면2

|   |
|---|
| 4 |
| 7 |
| 3 |
| 6 |
| 5 |
| 2 |
| 1 |

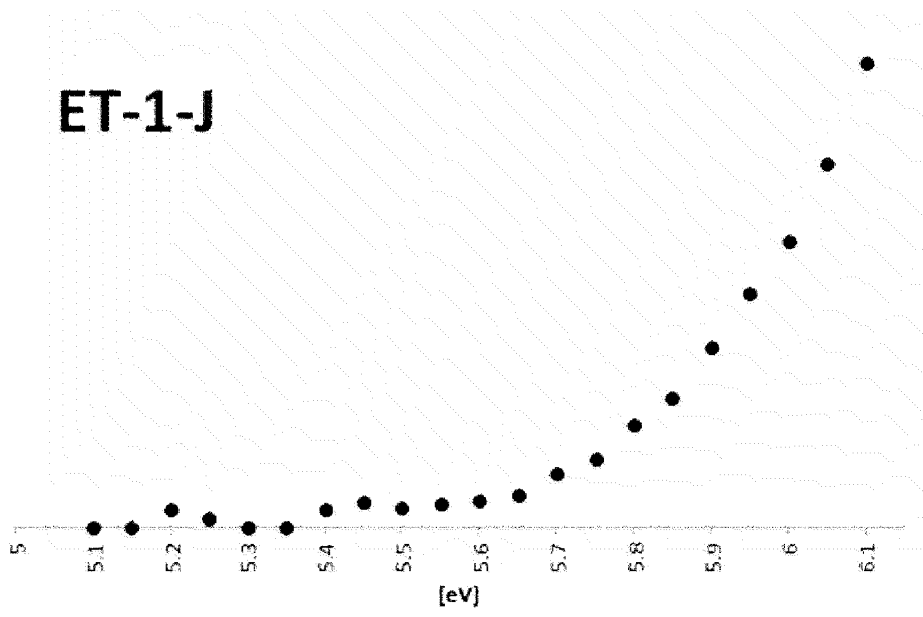
도면3



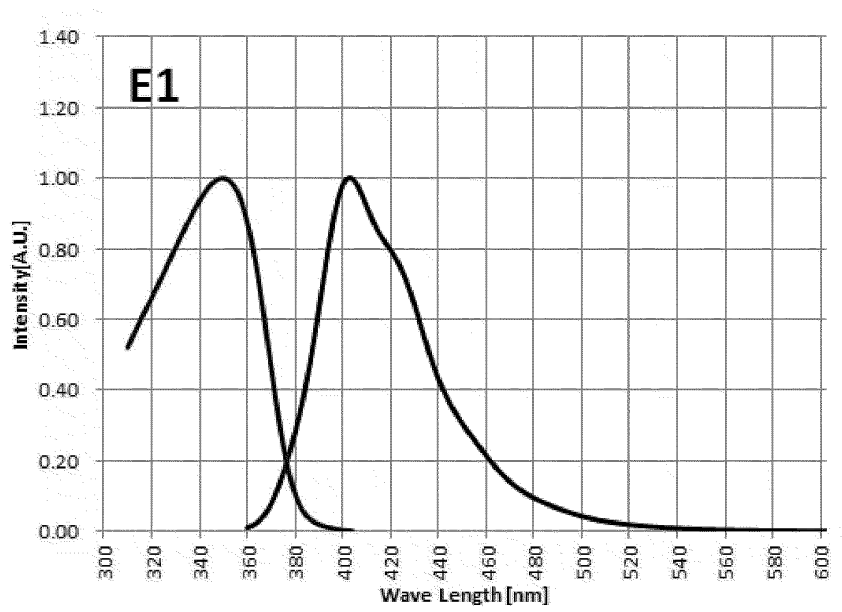
도면4



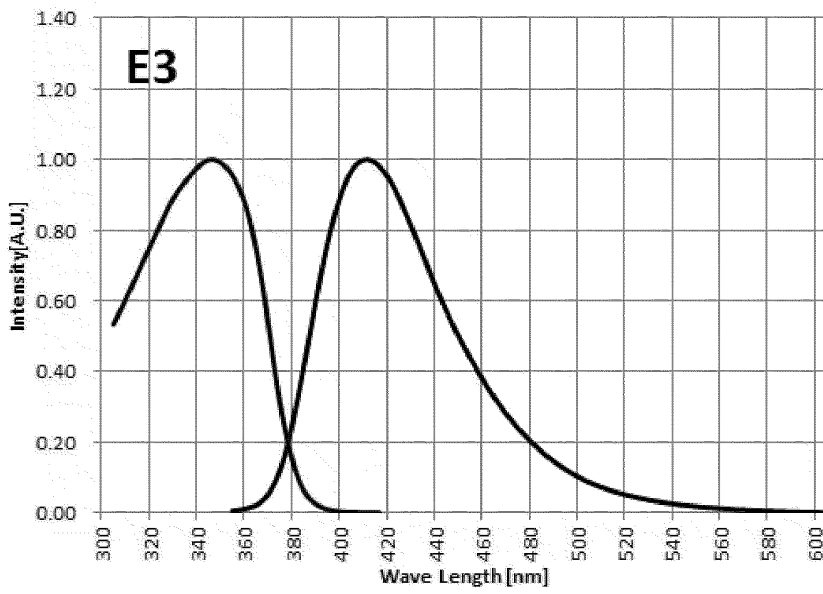
도면5



도면6



도면7



도면8

