



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2012년11월16일  
(11) 등록번호 10-1202347  
(24) 등록일자 2012년11월12일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/54 (2006.01)  
(21) 출원번호 10-2009-0096393  
(22) 출원일자 2009년10월09일  
심사청구일자 2009년10월09일  
(65) 공개번호 10-2011-0039108  
(43) 공개일자 2011년04월15일  
(56) 선행기술조사문헌  
KR1020080047209 A\*  
\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자  
삼성디스플레이 주식회사  
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)  
(72) 발명자  
김희연  
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)  
양승각  
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)  
이관희  
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)  
(74) 대리인  
리엔목특허법인

전체 청구항 수 : 총 21 항

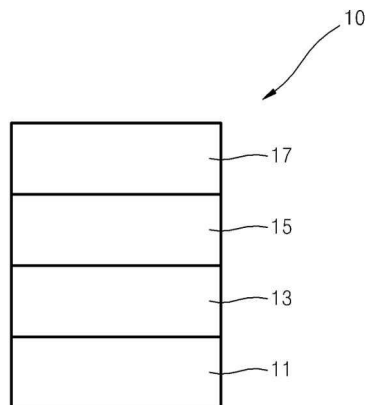
심사관 : 오세주

(54) 발명의 명칭 축합한 화합물 및 이를 포함한 유기층을 구비한 유기 발광 소자

(57) 요약

축합한 화합물 및 이를 구비한 유기 발광 소자가 제시된다:

대표도 - 도1

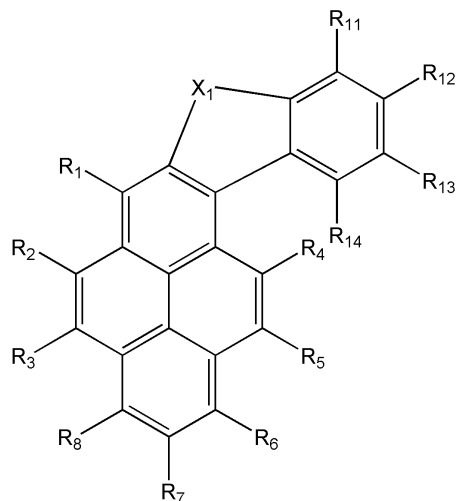


## 특허청구의 범위

### 청구항 1

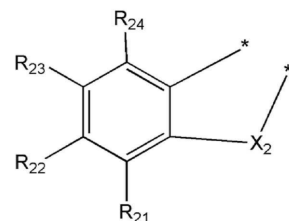
하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

$R_7$ 은 수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알콕시기,  $-(Ar_1)_a-Ar_{11}$ 로 표시되는 그룹, 및  $-N[-(Ar_2)_b-Ar_{12}][-(Ar_3)_c-Ar_{13}]$ 로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되고,  $R_8$ 은 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알콕시기,  $-(Ar_1)_a-Ar_{11}$ 로 표시되는 그룹, 및  $-N[-(Ar_2)_b-Ar_{12}][-(Ar_3)_c-$



$Ar_{13}]$ 로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되거나; 또는  $R_8$ 은 화학식 2의 \*와 연결되고,  $R_7$ 은 상기 화학식 2의 \*'와 연결되고;

상기  $R_1$  내지  $R_6$ ,  $R_{11}$  내지  $R_{14}$ , 및  $R_{21}$  내지  $R_{24}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알콕시기,  $-(Ar_4)_d-Ar_{14}$ 로 표시되는 그룹, 및  $-N[-(Ar_5)_e-Ar_{15}][-(Ar_6)_f-Ar_{16}]$ 로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되고;

상기  $Ar_1$  내지  $Ar_6$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬렌기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된  $C_5$ - $C_{30}$ 아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된  $C_4$ - $C_{30}$ 헤테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되고;

상기  $Ar_{11}$  내지  $Ar_{16}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_5$ - $C_{30}$ 아릴기, 및 치환 또는 비치환된  $C_4$ - $C_{30}$ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고;

a 내지 f는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수이고;

$-(Ar_1)_a-Ar_{11}$ 로 표시되는 그룹 중 a개의  $Ar_1$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $-(Ar_2)_b-Ar_{12}$ 로 표시되는 그룹 중 b개의  $Ar_2$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $-(Ar_3)_c-Ar_{13}$ 로 표시되는 그룹 중 c개의  $Ar_3$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $-(Ar_4)_d-Ar_{14}$ 로 표시되는 그룹 중 d개의  $Ar_4$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $-(Ar_5)_e-Ar_{15}$ 로 표시되는 그룹 중 e개의  $Ar_5$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $-(Ar_6)_f-Ar_{16}$ 로 표시되는 그룹 중 f개의  $Ar_6$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

상기  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 독립적으로,  $-C(Q_1)(Q_2)-$  및  $-N(Q_3)-$ 로 이루어진 군으로부터 선택된 2가 연결기이고;

상기  $Q_1$  내지  $Q_3$ 는 서로 독립적으로, 수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{30}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{30}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{30}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{30}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{30}$ 아릴기, 및 치환 또는 비치환된  $C_4-C_{30}$ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고;

상기 치환된  $C_1-C_{30}$ 알킬기, 치환된  $C_1-C_{30}$ 알킬렌기, 치환된  $C_1-C_{30}$ 알콕시기, 치환된  $C_2-C_{30}$ 알케닐기, 치환된  $C_2-C_{30}$ 알케닐렌기, 치환된  $C_2-C_{30}$ 알키닐기, 치환된  $C_5-C_{30}$ 아릴기, 치환된  $C_5-C_{30}$ 아릴렌기, 치환된  $C_4-C_{30}$ 헤테로아릴기, 및 치환된  $C_4-C_{30}$ 헤테로아릴렌기의 치환기는 할로겐 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염,  $C_1-C_{30}$ 알킬기,  $C_1-C_{30}$ 알케닐기,  $C_1-C_{30}$ 알키닐기,  $C_6-C_{30}$ 아릴기 및  $C_2-C_{20}$ 헤테로아릴기 중 하나 이상이다.

## 청구항 2

제1항에 있어서,

상기  $R_1$  내지  $R_7$ 이 수소이고;

$R_8$ 은 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{10}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{10}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 알콕시기,  $-(Ar_1)_a-Ar_{11}$ 로 표시되는 그룹, 및  $-N[-(Ar_2)_b-Ar_{12}][-(Ar_3)_c-Ar_{13}]$ 로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되고;

$R_{11}$  내지  $R_{14}$ 가 서로 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{10}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{10}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 알콕시기,  $-(Ar_4)_d-Ar_{14}$ 로 표시되는 그룹, 및  $-N[-(Ar_5)_e-Ar_{15}][-(Ar_6)_f-Ar_{16}]$ 로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되고;

상기  $Ar_1$  내지  $Ar_6$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{30}$ 알킬렌기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{30}$ 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{30}$ 아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된  $C_4-C_{30}$ 헤테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되고;

상기  $Ar_{11}$  및  $Ar_{16}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{30}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{30}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{30}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{30}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{30}$ 아릴기, 및 치환 또는 비치환된  $C_4-C_{30}$ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

## 청구항 3

제2항에 있어서,

상기 a 내지 f는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

## 청구항 4

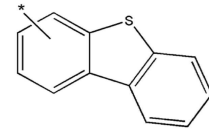
제2항에 있어서,

상기  $R_8$ 은  $-(Ar_1)_a-Ar_{11}$ 로 표시되는 그룹 또는  $-N[-(Ar_2)_b-Ar_{12}][-(Ar_3)_c-Ar_{13}]$ 로 표시되는 그룹이고,  $R_{12}$ 는 수소,  $-(Ar_4)_d-Ar_{14}$ 로 표시되는 그룹 또는  $-N[-(Ar_5)_e-Ar_{15}][-(Ar_6)_f-Ar_{16}]$ 로 표시되는 그룹이고,  $R_{11}$ ,  $R_{13}$  및  $R_{14}$ 는 수소일 경우, 상기  $Ar_1$  내지  $Ar_6$ 는 서로 독립적으로, 피리디닐렌기(pyridinylene), 퀴놀리닐렌기(quinolinylene), 벤조이미다졸일렌기(benzoimidazolylene), 이미다조 피리디닐렌기(imidazopyridinylene), 이미다조피리미디닐렌기(imidazopyrimidinylene), 페닐렌기,  $C_1-C_{10}$ 알킬 페닐렌기, 카바졸일렌기(carbazolylene), 카바졸일렌기, 페닐 카바졸일렌기, 플루오레닐렌기(fluorenylene),  $C_1-C_{10}$ 알킬플루오레닐렌기, 디( $C_1-C_{10}$ 알킬)플루오레닐렌기, 에틸렌기, 및 나프틸렌기(naphthylene)로 이루어진 군으로부터 선택된 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

## 청구항 5

제2항에 있어서,

상기  $R_8$ 은  $-(Ar_1)_a-Ar_{11}$ 로 표시되는 그룹 또는  $-N[-(Ar_2)_b-Ar_{12}][-(Ar_3)_c-Ar_{13}]$ 로 표시되는 그룹이고,  $R_{12}$ 는 수소,  $-(Ar_4)_d-Ar_{14}$ 로 표시되는 그룹 또는  $-N[-(Ar_5)_e-Ar_{15}][-(Ar_6)_f-Ar_{16}]$ 로 표시되는 그룹이고,  $R_{11}$ ,  $R_{13}$  및  $R_{14}$ 는 수소일 경우, 상기  $Ar_{11}$  내지  $Ar_{16}$ 는 서로 독립적으로, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 피리디닐기, 퀴놀리닐기, 벤조이미다졸일기, 이미다조 피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 페

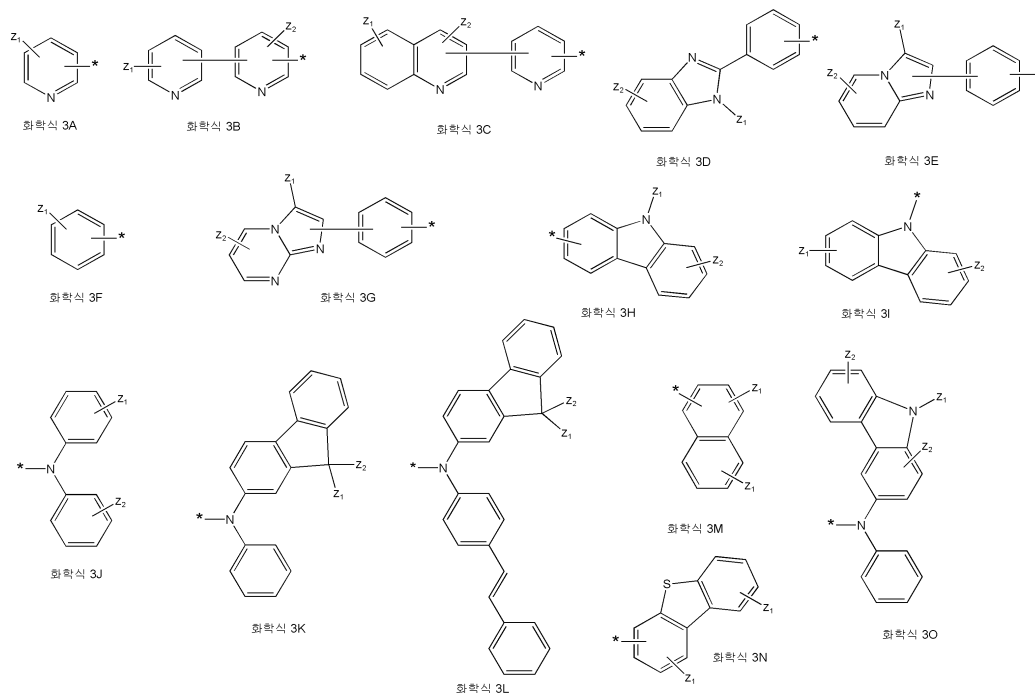


닐기, 카바졸일기, 플루오레닐기, 디( $C_1-C_{10}$ 알킬)플루오레닐기, 나프틸기, 및 화학식 로 이루어진 군으로부터 선택된 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

## 청구항 6

제2항에 있어서,

상기  $R_8$ 은 하기 화학식 3A 내지 3O로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기  $R_{11}$  내지  $R_{14}$ 은 서로 독립적으로 수소 및 하기 화학식 3A 내지 3O로 이루어진 군으로부터 선택된 것을 특징으로 하는 축합환 화합물:



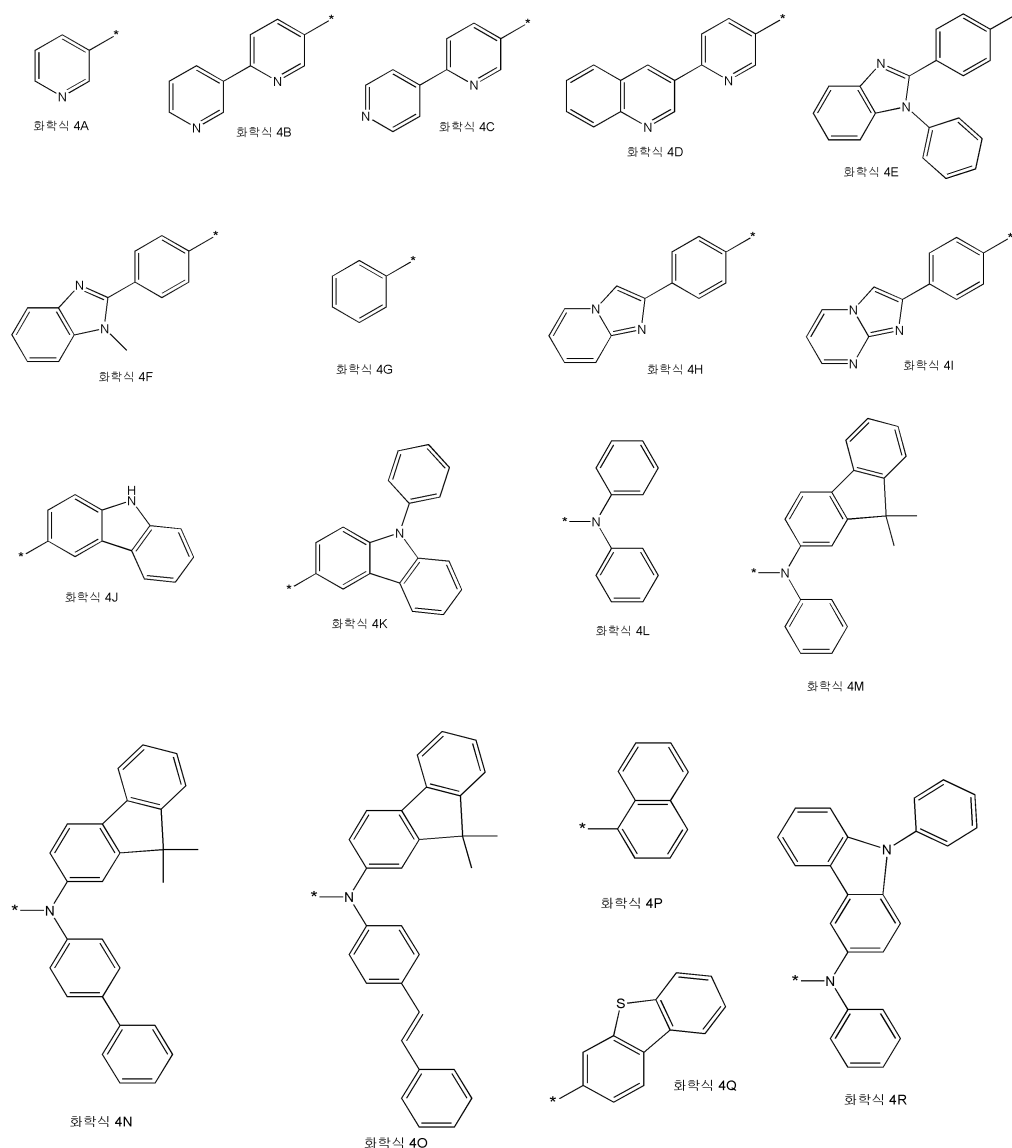
상기 화학식들 중,  $Z_1$  및  $Z_2$ 는 서로 독립적으로, 수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 메톡시기, 에톡시기,

프로폭시기, 부톡시기, 페닐기, 및 나프틸기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

## 청구항 7

제2항에 있어서,

상기 R<sub>8</sub>은 하기 화학식 4A 내지 4R로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub>은 서로 독립적으로 수소 및 하기 화학식 4A 내지 4R로 이루어진 군으로부터 선택된 것을 특징으로 하는 축합환 화합물:



## 청구항 8

제2항에 있어서,

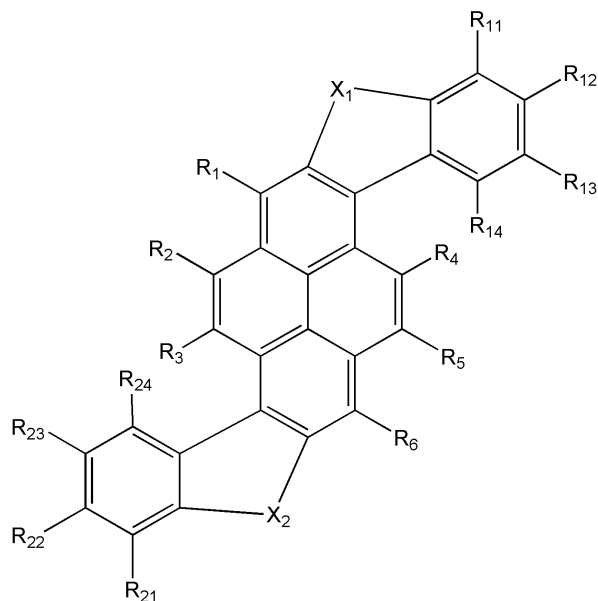
상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>3</sub>가 서로 독립적으로, 수소, C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알콕시기, C<sub>5</sub>-C<sub>14</sub>아릴기, 및 C<sub>4</sub>-C<sub>14</sub>헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

## 청구항 9

제1항에 있어서,

상기 R<sub>8</sub>은 상기 화학식 2의 \*와 연결되고, R<sub>7</sub>은 상기 화학식 2의 \*'와 연결되어, 하기 화학식 1a로 표시되는 것을 특징으로 하는 축합환 화합물:

<화학식 1a>



### 청구항 10

제9항에 있어서,

상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>6</sub>이 수소이고;

R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub> 및 R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>가 서로 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, -(Ar<sub>4</sub>)<sub>d</sub>-Ar<sub>14</sub>로 표시되는 그룹, 및 -N[-(Ar<sub>5</sub>)<sub>e</sub>-Ar<sub>15</sub>][- (Ar<sub>6</sub>)<sub>f</sub>-Ar<sub>16</sub>]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되고;

상기 Ar<sub>4</sub> 내지 Ar<sub>6</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub>헤테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되고;

상기 Ar<sub>14</sub> 및 Ar<sub>16</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub>헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

### 청구항 11

제9항에 있어서,

상기 d 내지 f는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

### 청구항 12

제9항에 있어서,

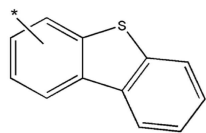
상기 R<sub>12</sub> 및 R<sub>22</sub>는 수소, -(Ar<sub>4</sub>)<sub>d</sub>-Ar<sub>14</sub>로 표시되는 그룹 또는 -N[-(Ar<sub>5</sub>)<sub>e</sub>-Ar<sub>15</sub>][- (Ar<sub>6</sub>)<sub>f</sub>-Ar<sub>16</sub>]로 표시되는 그룹이고, R<sub>11</sub>, R<sub>13</sub>, R<sub>14</sub>, R<sub>21</sub>, R<sub>23</sub> 및 R<sub>24</sub>는 수소일 경우, 상기 Ar<sub>4</sub> 내지 Ar<sub>6</sub>는 서로 독립적으로, 피리디닐렌기(pyridinylene), 퀴놀리닐렌기(quinolinylene), 벤조이미다졸일렌기(benzimidazolylene), 이미다조 피리디닐렌기(imidazopyridinylene), 이미다조피리미디닐렌기(imidazopyrimidinylene), 페닐렌기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬 페닐렌기, 카바졸일렌기(carbazolylene), 카바졸일렌기, 페닐카바졸일렌기, 플루오레닐렌기(fluorenylene), C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬플루

오레닐렌기, 디(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬)플루오레닐렌기, 에틸렌기, 및 나프틸렌기(naphthylene)로 이루어진 군으로부터 선택된 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

### 청구항 13

제9항에 있어서,

상기 R<sub>12</sub> 및 R<sub>22</sub>는 수소, -(Ar<sub>4</sub>)<sub>d</sub>-Ar<sub>14</sub>로 표시되는 그룹 또는 -N[-(Ar<sub>5</sub>)<sub>e</sub>-Ar<sub>15</sub>][- (Ar<sub>6</sub>)<sub>f</sub>-Ar<sub>16</sub>]로 표시되는 그룹이고, R<sub>11</sub>, R<sub>13</sub>, R<sub>14</sub>, R<sub>21</sub>, R<sub>23</sub> 및 R<sub>24</sub>는 수소일 경우, 상기 Ar<sub>14</sub> 내지 Ar<sub>16</sub>는 서로 독립적으로, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 피리디닐기, 퀴놀리닐기, 벤조이미다졸일기, 이미다조 피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 페닐기, 카바졸일기, 플루오레닐기, 디(C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬)플루오레닐기, 나

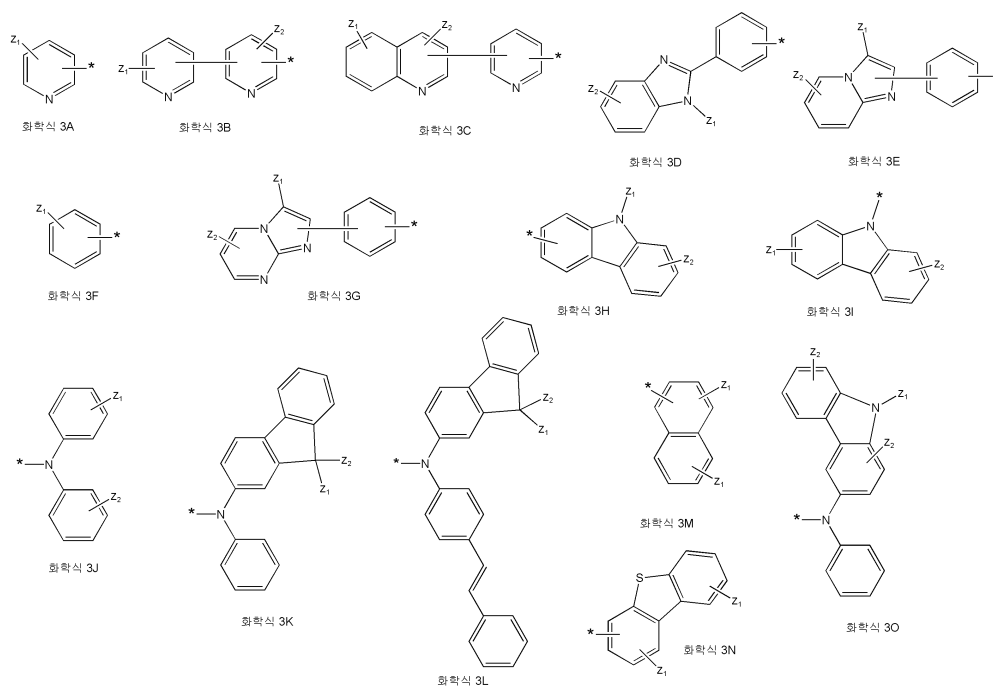


프틸기, 및 화학식 로 이루어진 군으로부터 선택된 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

### 청구항 14

제9항에 있어서,

상기 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub> 및 R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>가 서로 독립적으로 수소 및 하기 화학식 3A 내지 3O로 이루어진 군으로부터 선택된 것을 특징으로 하는 축합환 화합물:

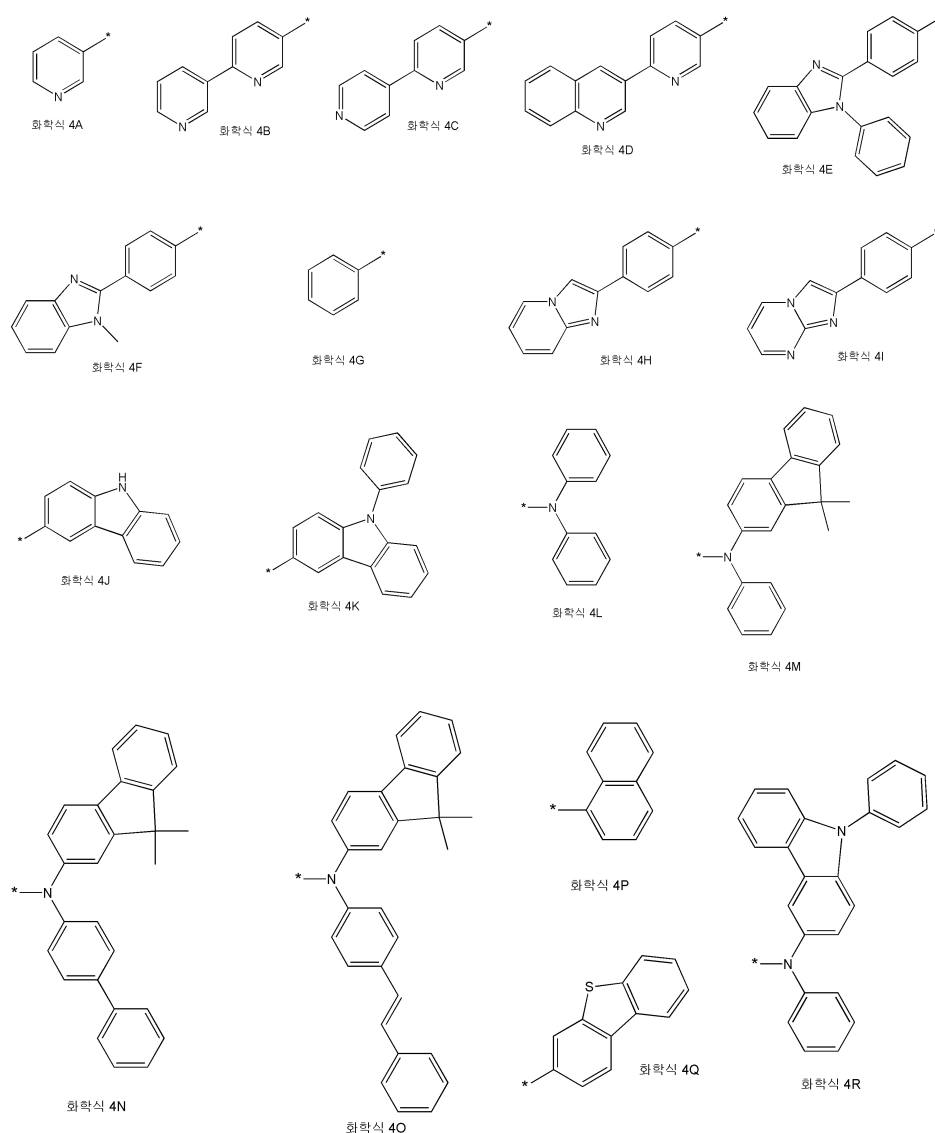


상기 화학식들 중, Z<sub>1</sub> 및 Z<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 페닐기, 및 나프틸기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

### 청구항 15

제9항에 있어서,

상기 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub> 및 R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>가 서로 독립적으로 수소 및 하기 화학식 4A 내지 4R로 이루어진 군으로부터 선택된 것을 특징으로 하는 축합환 화합물:



## 청구항 16

제9항에 있어서,

상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>3</sub>가 서로 독립적으로, 수소, C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알콕시기, C<sub>5</sub>-C<sub>14</sub>아릴기, 및 C<sub>4</sub>-C<sub>14</sub>헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

## 청구항 17

제1항에 있어서,

상기 X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, -CH<sub>2</sub>-, -CH(CH<sub>3</sub>)-, -C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-, -CH(Ph)-, -NH-, 및 -N(Ph)-로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 Ph는 페닐기를 나타내는 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

## 청구항 18

제1항에 있어서,

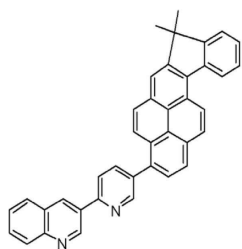
하기 화합물 3, 19, 34, 35, 40 또는 43인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물:

<화합물 3>

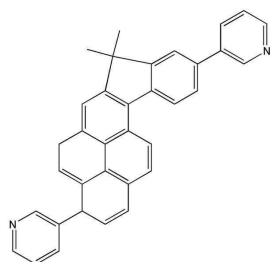
<화합물 19>

<화합물 34>

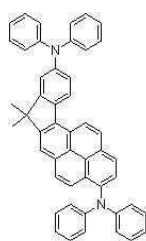




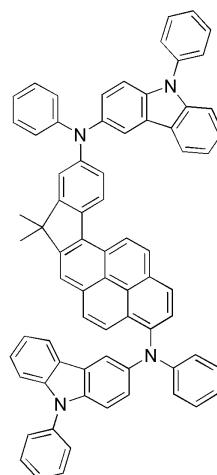
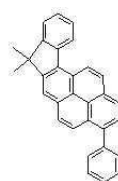
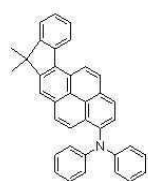
<화합물 35>



<화합물 40>



<화합물 43>



#### 청구항 19

제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층을 포함하고, 상기 유기층이 제1항 내지 제18항 중 어느 한 항의 축합환 화합물을 포함한 유기 발광 소자.

#### 청구항 20

제19항에 있어서,

상기 유기층이 정공 수송층, 발광층 또는 전자 수송층인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

#### 청구항 21

제19항에 있어서,

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 정공 지지층, 전자 수송층 및 전자 주입층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 층이 더 포함된 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

### 명세서

#### 발명의 상세한 설명

#### 기술 분야

[0001] 축합환 화합물 및 이를 포함한 유기층을 구비한 유기 발광 소자가 제공된다.

#### 배경 기술

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting diode)는 자발광형 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라, 응답시간이 빠르며, 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.

[0003] 일반적인 유기 발광 소자는 기판 상부에 애노드가 형성되어 있고, 이 애노드 상부에 정공수송층, 발광층, 전자

수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 여기에서 정공수송층, 발광층 및 전자수송층은 유기화합물로 이루어진 유기 박막들이다.

[0004] 상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기 발광 소자의 구동 원리는 다음과 같다.

[0005] 상기 애노드 및 캐소드간에 전압을 인가하면, 애노드로부터 주입된 정공은 정공수송층을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자수송층을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exiton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

## 발명의 내용

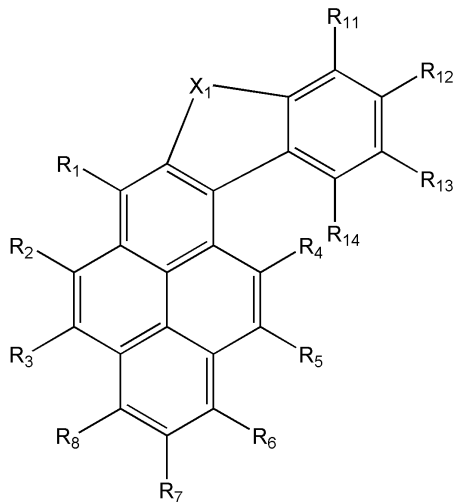
### 해결 하고자하는 과제

[0006] 고효율 및 장수명 등을 갖는 유기 발광 소자를 제공할 수 있는 화합물을 제시하고자 한다.

### 과제 해결수단

[0007] 하기 화학식 1을 갖는 축합환 화합물이 제공된다:

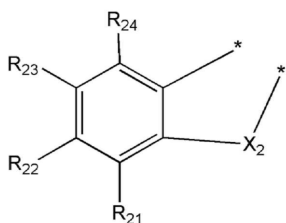
[0008] <화학식 1>



[0009]

[0010] 상기 화학식 1 중,

[0011] R<sub>8</sub> 및 R<sub>7</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알콕시기, -(Ar<sub>1</sub>)<sub>a</sub>-Ar<sub>11</sub>로 표시되는 그룹, 및 -N[-(Ar<sub>2</sub>)<sub>b</sub>-Ar<sub>12</sub>][- (Ar<sub>3</sub>)<sub>c</sub>-Ar<sub>13</sub>]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되거나;



또는 R<sub>8</sub>은 로 표시되는 화학식 2의 \*와 연결되고, R<sub>7</sub>은 상기 화학식 2의 '\*'와 연결되고;

[0012] 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>6</sub>, R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub> 및 R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알콕시기, -(Ar<sub>4</sub>)<sub>d</sub>-Ar<sub>14</sub>로 표시되는 그룹, 및 -N[-(Ar<sub>5</sub>)<sub>e</sub>-Ar<sub>15</sub>][- (Ar<sub>6</sub>)<sub>f</sub>-Ar<sub>16</sub>]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되고;

- [0013] 상기  $Ar_1$  내지  $Ar_6$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{30}$ 알킬렌기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{30}$ 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{30}$ 아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된  $C_4-C_{30}$ 헤테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택되고;
- [0014] 상기  $Ar_{11}$  및  $Ar_{16}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{30}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{30}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{30}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{30}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{30}$ 아릴기, 및 치환 또는 비치환된  $C_4-C_{30}$ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고;
- [0015] a 내지 f는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수이고;
- [0016]  $-(Ar_1)_a-Ar_{11}$ 로 표시되는 그룹 중 a개의  $Ar_1$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $-(Ar_2)_b-Ar_{12}$ 로 표시되는 그룹 중 b개의  $Ar_2$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $-(Ar_3)_c-Ar_{13}$ 로 표시되는 그룹 중 c개의  $Ar_3$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $-(Ar_4)_d-Ar_{14}$ 로 표시되는 그룹 중 d개의  $Ar_4$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $-(Ar_5)_e-Ar_{15}$ 로 표시되는 그룹 중 e개의  $Ar_5$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $[-(Ar_6)_f-Ar_{16}]$ 로 표시되는 그룹 중 f개의  $Ar_6$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고;
- [0017] 상기  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 독립적으로,  $-C(Q_1)(Q_2)-$  및  $-N(Q_3)-$ 로 이루어진 군으로부터 선택된 2가 연결기이고;
- [0018] 상기  $Q_1$  내지  $Q_3$ 는 서로 독립적으로, 수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{30}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{30}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2-C_{30}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{30}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{30}$ 아릴기, 및 치환 또는 비치환된  $C_4-C_{30}$ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0019] 또한, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층을 포함하고, 상기 유기층이 상기 화학식 1을 갖는 축합환 화합물을 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.

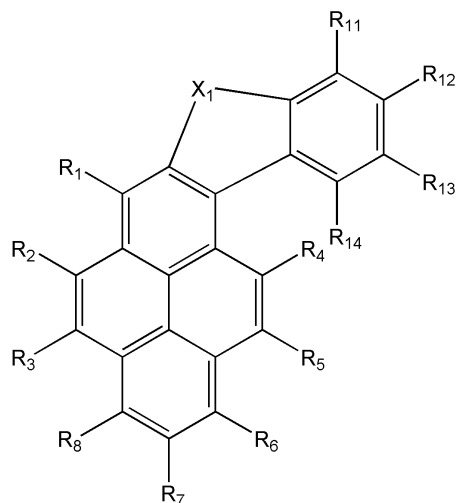
## 효 과

- [0020] 상기 화학식 1을 갖는 축합환 화합물을 포함한 유기층을 구비한 유기 발광 소자는 고효율 및 장수명 등을 가질 수 있다.

## 발명의 실시를 위한 구체적인 내용

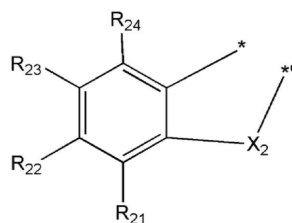
- [0021] 하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 제공된다:

- [0022] <화학식 1>



- [0023]
- [0024] 상기 화학식 1 중,  $R_8$  및  $R_7$ 는 서로 독립적으로, 수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된

C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알콕시기, -(Ar<sub>1</sub>)<sub>a</sub>-Ar<sub>11</sub>로 표시되는 그룹, 및 -N[-(Ar<sub>2</sub>)<sub>b</sub>-Ar<sub>12</sub>][- (Ar<sub>3</sub>)<sub>c</sub>-Ar<sub>13</sub>]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군



으로부터 선택되거나; 또는 R<sub>8</sub>은 로 표시되는 화학식 2의 \*와 연결되고, R<sub>7</sub>은 상기 화학식 2의 \*'와 연결되고; 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>6</sub>, R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub> 및 R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알콕시기, -(Ar<sub>4</sub>)<sub>d</sub>-Ar<sub>14</sub>로 표시되는 그룹, 및 -N[-(Ar<sub>5</sub>)<sub>e</sub>-Ar<sub>15</sub>][- (Ar<sub>6</sub>)<sub>f</sub>-Ar<sub>16</sub>]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0025]

예를 들어, 상기 화학식 1 중, R<sub>8</sub> 및 R<sub>7</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알콕시기, -(Ar<sub>1</sub>)<sub>a</sub>-Ar<sub>11</sub>로 표시되는 그룹, 및 -N[-(Ar<sub>2</sub>)<sub>b</sub>-Ar<sub>12</sub>][- (Ar<sub>3</sub>)<sub>c</sub>-Ar<sub>13</sub>]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있고, 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>6</sub> 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알콕시기, -(Ar<sub>4</sub>)<sub>d</sub>-Ar<sub>14</sub>로 표시되는 그룹, 및 -N[-(Ar<sub>5</sub>)<sub>e</sub>-Ar<sub>15</sub>][- (Ar<sub>6</sub>)<sub>f</sub>-Ar<sub>16</sub>]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0026]

예를 들어, 상기 화학식 1 중, 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 및 R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>이 수소이고; R<sub>8</sub>은 수소, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, -(Ar<sub>1</sub>)<sub>a</sub>-Ar<sub>11</sub>로 표시되는 그룹, 및 -N[-(Ar<sub>2</sub>)<sub>b</sub>-Ar<sub>12</sub>][- (Ar<sub>3</sub>)<sub>c</sub>-Ar<sub>13</sub>]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택되고; R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub>가 서로 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, -(Ar<sub>4</sub>)<sub>d</sub>-Ar<sub>14</sub>로 표시되는 그룹, 및 -N[-(Ar<sub>5</sub>)<sub>e</sub>-Ar<sub>15</sub>][- (Ar<sub>6</sub>)<sub>f</sub>-Ar<sub>16</sub>]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0027]

상기 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>6</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알케닐렌기, 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub>헤테로아릴렌기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0028]

예를 들어, 상기 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>6</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub>헤테로아릴렌기로 이루어진 군 으로부터 선택될 수 있다.

[0029]

구체적으로, 상기 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>6</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 에틸렌기, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기(pentalenylene), 치환 또는 비치환된 인데닐렌기(indenylene), 치환 또는 비치환된 나프틸렌기(naphthylene), 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌(azulenylene), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐렌(heptalenylene), 치환 또는 비치환된 인다세닐렌(indacenylene), 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기(acenaphthylene), 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기(fluorenylene), 치환 또는 비치환된 페나레닐렌기(phenalenylene), 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기(phenanthrenylene), 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기(anthracenylene), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기(fluoranthenylene), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기(triphenylenylene), 치환 또는 비치환된 파이레닐렌기(pyrenylenylene), 치환 또는 비치환된 크라이세닐레닐렌기(chrysenylene), 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기(naphthacenylene), 치환 또는 비치환된 피세닐렌기(picenylene), 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기(perylenylene), 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기

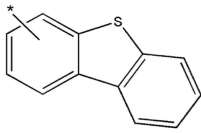
(pentaphenylene), 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기(hexacenylene), 치환 또는 비치환된 피롤일렌기(pyrrolylene), 치환 또는 비치환된 피라졸일렌기(pyrazolylene), 치환 또는 비치환된 이미다졸일렌기(imidazolylene), 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐렌기(imidazolinylene), 치환 또는 비치환된 이미다조 피리디닐렌기(imidazopyridinylene), 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐렌기(imidazopyrimidinylene), 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기(pyridinylene), 치환 또는 비치환된 피라지닐렌기(pyrazinylene), 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기(pyrimidinylene), 치환 또는 비치환된 인돌일렌기(indolylene), 치환 또는 비치환된 푸리닐렌기(purinylene), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐렌기(quinolinylene), 치환 또는 비치환된 프탈라지닐렌기(phthalazinylene), 치환 또는 비치환된 인돌리지닐렌기(indolizinylene), 치환 또는 비치환된 나프티리디닐렌기(naphthyridinylene), 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐렌기(quinazolinylene), 치환 또는 비치환된 시놀리닐렌기(cinnolinylene), 치환 또는 비치환된 인다졸일렌기(indazolylene), 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기(carbazolylene), 치환 또는 비치환된 페나지닐렌기(phenazinylene), 치환 또는 비치환된 페난트리디닐렌기(phenanthridinylene), 치환 또는 비치환된 파이랄닐렌기(pyranylene), 치환 또는 비치환된 크로메닐렌기(chromenylene), 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐렌기(benzofuranylene), 치환 또는 비치환된 티오펜일렌기(thiophenylene), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일렌기(benzothiophenylene), 치환 또는 비치환된 이소티아졸일렌기(isothiazolylene), 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일렌기(benzoimidazolylene), 및 치환 또는 비치환된 이소사졸일렌기(isoxazolylene)로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0030] 상기  $Ar_{11}$  내지  $Ar_{16}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알키닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_5$ - $C_{30}$ 아릴기, 및 치환 또는 비치환된  $C_4$ - $C_{30}$ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0031] 구체적으로, 상기  $Ar_{11}$  내지  $Ar_{16}$ 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{10}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인테닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵탈레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페나레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 파이레닐기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐레닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페틸레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타세닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 인돌리지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 파이랄닐렌기(pyranylene), 치환 또는 비치환된 크로메닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기, 및 치환 또는 비치환된 이소사졸일기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0032] 예를 들어, 상기  $Ar_1$  내지  $Ar_6$ 는 서로 독립적으로, 피리디닐렌기(pyridinylene), 퀴놀리닐렌기(quinolinylene), 벤조이미다졸일렌기(benzoimidazolylene), 이미다조 피리디닐렌기(imidazopyridinylene), 이미다조피리미디닐렌기(imidazopyrimidinylene), 페닐렌기,  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬 페닐렌기, 카바졸일렌기(carbazolylene), 카바졸일렌기, 페닐카바졸일렌기, 플루오레닐렌기(fluorenylene),  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬플루오레닐렌기, 디( $C_1$ - $C_{10}$ 알킬)플루오레닐렌기, 에틸렌기, 및 나프틸렌기(naphthylene)로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

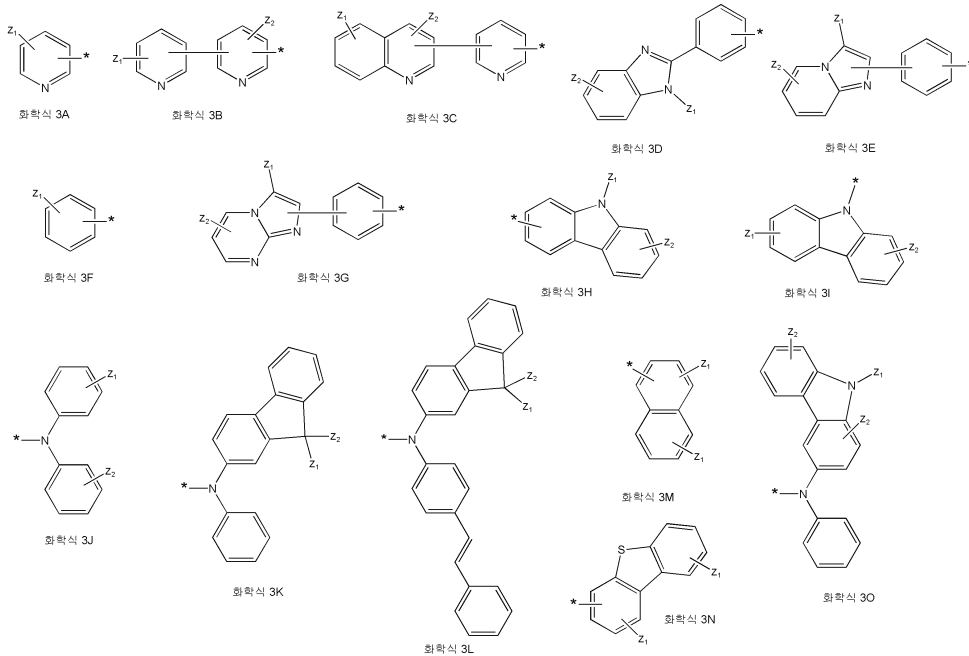
[0033] 또한, 예를 들어, 상기  $Ar_{11}$  내지  $Ar_{16}$ 는 서로 독립적으로, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로톡시기, 부톡시기, 피리디닐기, 퀴놀리닐기, 벤조이미다졸일기, 이미다조 피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 페닐기, 카바졸일기, 플루오레닐기, 디( $C_1$ - $C_{10}$ 알킬)플루오레닐기, 나프틸기, 화학식



로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0034]

상기 R<sub>8</sub> 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 서로 독립적으로 하기 화학식 3A 내지 3O로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



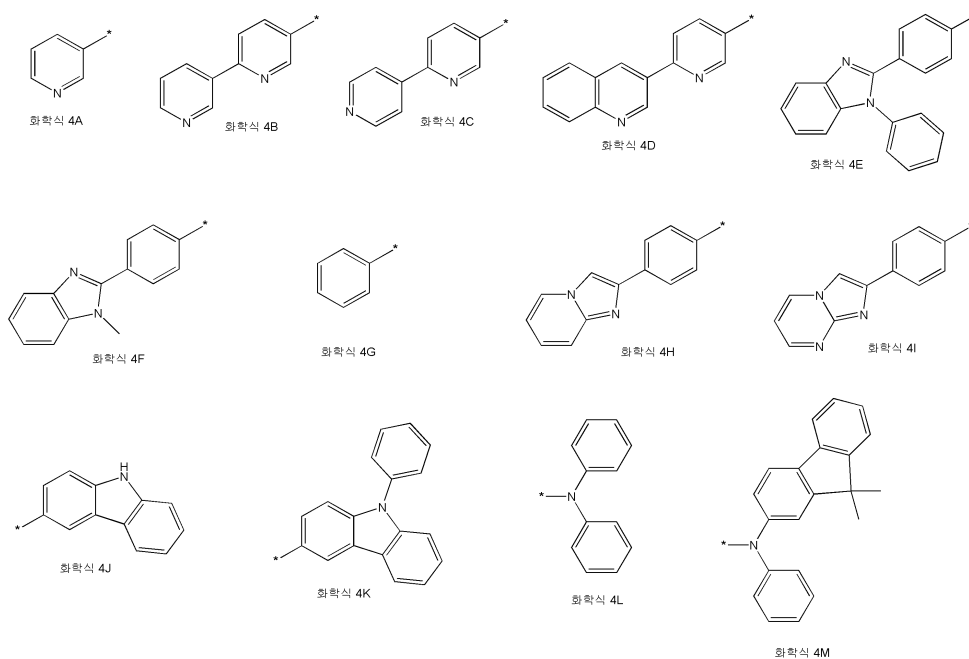
[0035]

[0036]

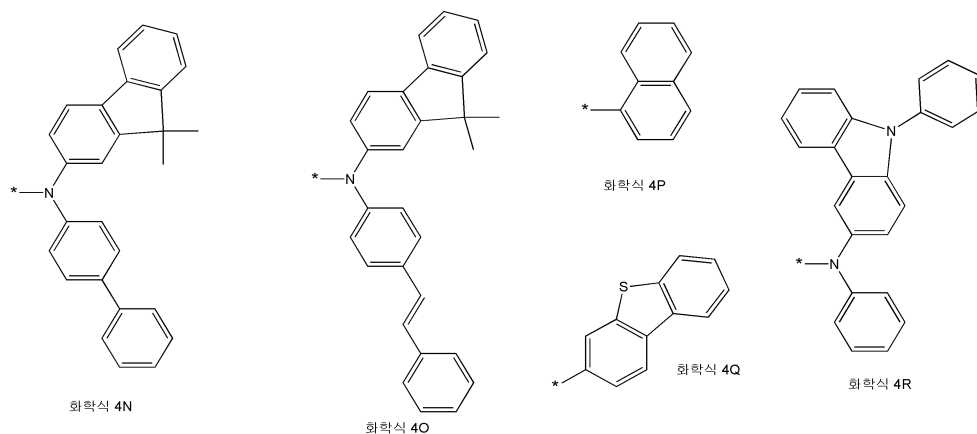
상기 화학식들 중, Z<sub>1</sub> 및 Z<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 히드록실기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 페닐기, 및 나프틸기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0037]

구체적으로, 상기 R<sub>8</sub> 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 서로 독립적으로 하기 화학식 4A 내지 4R로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0038]



[0039]

[0040]

상기 화학식 1 중, a 내지 f는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수일 수 있다. 예를 들어, 상기 a 내지 f는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0041]

상기 화학식 1 중, 상기  $-(Ar_1)_a-Ar_{11}$ 로 표시되는 그룹 중 a개의  $Ar_1$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $-(Ar_2)_b-Ar_{12}$ 로 표시되는 그룹 중 b개의  $Ar_2$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $-(Ar_3)_c-Ar_{13}$ 로 표시되는 그룹 중 c개의  $Ar_3$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $-(Ar_4)_d-Ar_{14}$ 로 표시되는 그룹 중 d개의  $Ar_4$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $-(Ar_5)_e-Ar_{15}$ 로 표시되는 그룹 중 e개의  $Ar_5$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고,  $[-(Ar_6)_f-Ar_{16}]$ 로 표시되는 그룹 중 f개의  $Ar_6$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0042]

예를 들어,  $-(Ar_1)_a-Ar_{11}$ 로 표시되는 그룹에 있어서, a가 2인 경우, 2개의  $Ar_1$ 들 모두가 페닐렌기일 수 있거나, 2개의  $Ar_1$ 들 중 하나는 페닐렌기일 수 있고, 나머지 하나는 벤조이미다졸일렌기일 수 있는 등 다양한 변형예가 가능하다.

[0043]

상기 화학식 1 중,  $Q_1$  내지  $Q_3$ 는 서로 독립적으로, 수소,  $C_1-C_{30}$ 알킬기,  $C_1-C_{30}$ 알콕시기,  $C_5-C_{14}$ 아릴기, 및  $C_4-C_{14}$ 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다. 예를 들어, 상기  $Q_1$  내지  $Q_3$ 는 서로 독립적으로, 수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 페닐기, 및 나프틸기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것이다. 예를 들어, 상기  $Q_1$  내지  $Q_3$ 는 서로 독립적으로, 수소, 메틸기 또는 페닐기일 수 있다.

[0044]

상기 화학식 1 중  $X_1$ 은  $-CH_2-$ ,  $-CH(CH_3)-$ ,  $-C(CH_3)_2-$ ,  $-CH(Ph)-$ ,  $-NH-$ , 및  $-N(Ph)-$ (여기서, Ph는 페닐기를 나타냄)로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0045]

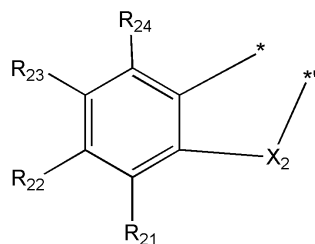
상기 화학식 1은 상술한 바와 같은 구조를 가짐으로서 열안정성이 우수하다. 또한, 넓은 밴드갭을 가지므로, 치환기(예를 들면,  $R_8$  및  $R_{11} \sim R_{14}$ )에 따라 유기 발광 소자의 다양한 층(예를 들면 정공 수송층, 발광층 및/또는 전자 수송층)에 사용될 수 있다.

[0046]

한편, 상기 화학식 1 중,  $R_8$ 은 하기 화학식 2의 \*와 연결되고,  $R_7$ 은 상기 화학식 2의 \*'와 연결될 수 있다.

[0047]

<화학식 2>



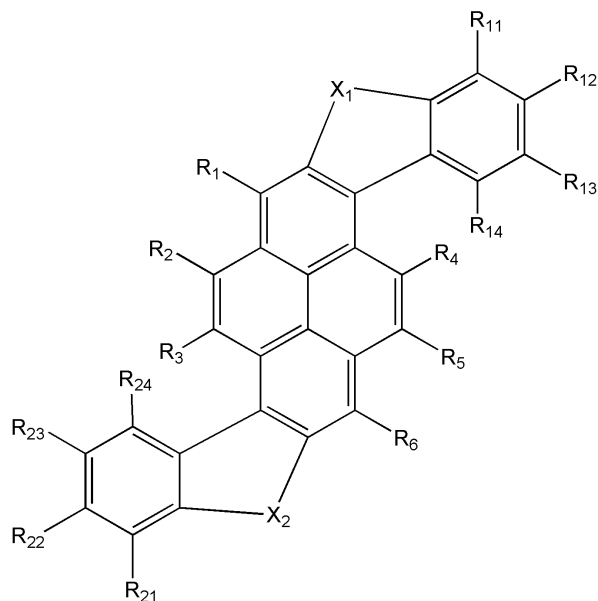
[0048]

[0049]

이로써, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1A로 표시될 수 있다:



[0050] <화학식 1A>



[0051]

[0052] 상기 화학식 1A 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>6</sub> 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub>에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조하고; R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>에 대한 상세한 설명은 상기 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub>에 대한 설명과 동일하므로 이를 참조하기로 한다.

[0053]

예를 들어, 상기 화학식 1A 중, 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>6</sub>이 수소이고; R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub> 및 R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>가 서로 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기, -(Ar<sub>4</sub>)<sub>d</sub>-Ar<sub>14</sub>로 표시되는 그룹, 및 -N[-(Ar<sub>5</sub>)<sub>e</sub>-Ar<sub>15</sub>][- (Ar<sub>6</sub>)<sub>f</sub>-Ar<sub>16</sub>]로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0054]

여기서, 상기 Ar<sub>4</sub> 내지 Ar<sub>6</sub>, Ar<sub>14</sub> 내지 Ar<sub>16</sub> 및 d 내지 f에 대한 상세한 설명은 상술한 바와 동일하므로 이를 참조한다.

[0055]

상기 화학식 1A 중 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub> 및 R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>는 서로 독립적으로 상기 화학식 3A 내지 30로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0056]

보다 구체적으로, 상기 화학식 1A 중 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub> 및 R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>는 서로 독립적으로 상기 화학식 4A 내지 4R로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0057]

상기 화학식 1A 중 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>3</sub> 및 X<sub>1</sub>에 대한 설명은 상술한 바를 참조하고, X<sub>2</sub>에 대한 설명은 X<sub>1</sub>에 대한 설명과 동일하므로, 이를 참조한다.

[0058]

상기 화학식 1은 상술한 바와 같은 화학식 1A를 가짐으로서 열안정성이 우수하다. 또한, 넓은 밴드갭을 가지므로, 치환기(예를 들면, R<sub>8</sub> 및 R<sub>11</sub>~R<sub>14</sub>)에 따라 유기 발광 소자의 다양한 층(예를 들면 정공 수송층, 발광층 및/또는 전자 수송층)에 사용될 수 있다.

[0059]

본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 및 R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 수소이고; R<sub>8</sub> 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 서로 독립적으로 수소 또는 상기 화학식 3A 내지 30로 이루어진 군으로부터 선택된 하나이고; X<sub>1</sub>은 서로 독립적으로, -C(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)- 및 -N(Q<sub>3</sub>)-로 이루어진 군으로부터 선택된 2가 연결기이되, 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 페닐기, 및 나프틸기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0060]

본 발명의 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>, R<sub>11</sub>, R<sub>13</sub> 및 R<sub>14</sub>는 수소이고; R<sub>8</sub> 및 R<sub>12</sub>는 서로 독립적으로 수소 또는 상기 화학식 3A 내지 30로 이루어진 군으로부터 선택된 하나이고; X<sub>1</sub>은 서로 독립적으로, -C(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)- 및 -N(Q<sub>3</sub>)-로 이루어진 군으로부터 선택된 2가 연결기이되, 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>3</sub>는 서로



독립적으로, 수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 페닐기, 및 나프틸기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0061] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>, R<sub>11</sub>, R<sub>13</sub> 및 R<sub>14</sub>는 수소이고; R<sub>8</sub> 및 R<sub>12</sub>는 서로 독립적으로 수소 또는 상기 화학식 4A 내지 4R로 이루어진 군으로부터 선택된 하나이고; X<sub>1</sub>은 서로 독립적으로, -CH<sub>2</sub>-, -CH(CH<sub>3</sub>)-, -C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-, -CH(Ph)-, -NH-, 및 -N(Ph)-(여기서, Ph는 페닐기를 나타냄)로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0062] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub> 내지 R<sub>7</sub>, R<sub>11</sub>, R<sub>13</sub> 및 R<sub>14</sub>는 수소이고; R<sub>8</sub> 및 R<sub>12</sub>는 서로 독립적으로 수소 또는 상기 화학식 4A 내지 4R로 이루어진 군으로부터 선택된 하나이고; X<sub>1</sub>은 서로 독립적으로, -CH<sub>2</sub>-, -CH(CH<sub>3</sub>)-, -C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>- 및 -CH(Ph)- (여기서, Ph는 페닐기를 나타냄)로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0063] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R<sub>6</sub>은 상기 화학식 2의 \*와 연결되고, R<sub>7</sub>은 상기 화학식 2의 \*'와 연결되고(즉, 화학식 1은 화학식 1A로 표시됨), R<sub>1</sub> 내지 R<sub>6</sub>은 수소이고; R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub> 및 R<sub>21</sub> 내지 R<sub>24</sub>는 서로 독립적으로 수소 또는 상기 화학식 3A 내지 30로 이루어진 군으로부터 선택된 하나이고; X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, -C(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)- 및 -N(Q<sub>3</sub>)-로 이루어진 군으로부터 선택된 2가 연결기이되, 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 페닐기, 및 나프틸기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

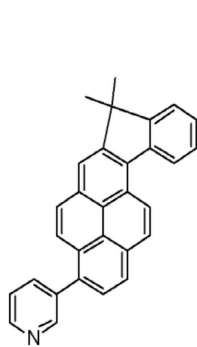
[0064] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중  $R_8$ 은 상기 화학식 2의 \*와 연결되고,  $R_7$ 은 상기 화학식 2의 \*'와 연결되고(즉, 화학식 1은 화학식 1A로 표시됨),  $R_1$  내지  $R_6$ ,  $R_{11}$ ,  $R_{13}$ ,  $R_{14}$ ,  $R_{21}$ ,  $R_{23}$ , 및  $R_{24}$ 는 수소이고;  $R_{12}$  및  $R_{22}$ 는 서로 독립적으로 수소 또는 상기 화학식 3A 내지 3O로 이루어진 군으로부터 선택된 하나이고;  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 독립적으로,  $-C(Q_1)(Q_2)-$  및  $-N(Q_3)-$ 로 이루어진 군으로부터 선택된 2가 연결기이되, 상기  $Q_1$  내지  $Q_3$ 는 서로 독립적으로, 수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 페닐기, 및 나프틸기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0065] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R<sub>8</sub>은 상기 화학식 2의 \*와 연결되고, R<sub>7</sub>은 상기 화학식 2의 \*'와 연결되고(즉, 화학식 1은 화학식 1A로 표시됨), R<sub>1</sub> 내지 R<sub>6</sub>, R<sub>11</sub>, R<sub>13</sub>, R<sub>14</sub>, R<sub>21</sub>, R<sub>23</sub>, 및 R<sub>24</sub>는 수소이고, R<sub>12</sub> 및 R<sub>22</sub>는 서로 독립적으로 수소 또는 상기 화학식 4A 내지 4R로 이루어진 군으로부터 선택된 하나이고; X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, -CH<sub>2</sub>-, -CH(CH<sub>3</sub>)-, -C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-, -CH(Ph)-, -NH-, 및 -N(Ph)-(여기서, Ph는 페닐기를 나타냄)로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0066] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중  $R_8$ 은 상기 화학식 2의 \*와 연결되고,  $R_7$ 은 상기 화학식 2의 \*'와 연결되고(즉, 화학식 1은 화학식 1A로 표시됨),  $R_1$  내지  $R_6$ ,  $R_{11}$ ,  $R_{13}$ ,  $R_{14}$ ,  $R_{21}$ ,  $R_{23}$ , 및  $R_{24}$ 는 수소이고,  $R_{12}$  및  $R_{22}$ 는 서로 독립적으로 수소 또는 상기 화학식 4A 내지 4R로 이루어진 군으로부터 선택된 하나이고;  $X_1$  및  $X_2$ 는 서로 독립적으로,  $-CH_2-$ ,  $-CH(CH_3)-$ ,  $-C(CH_3)_2-$  및  $-CH(Ph)-$ 로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0067] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 하기 화합물 1 내지 42일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

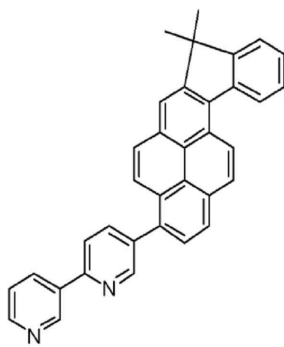
[0068] <화합물 1> <화합물 2> <화합물 3>



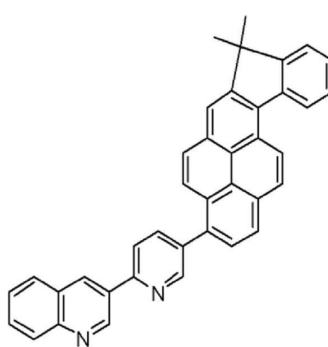
[0069]

[0070]

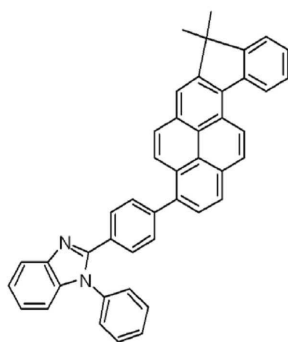
<화합물 4>



<화합물 5>



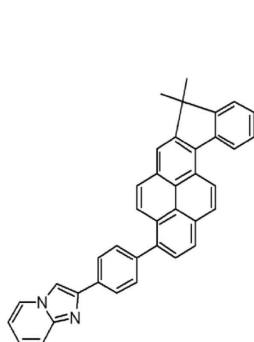
<화합물 6>



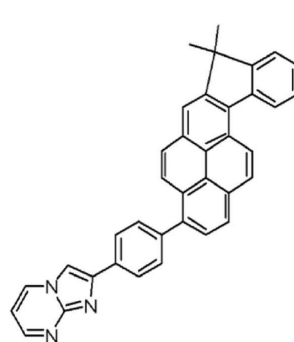
[0071]

[0072]

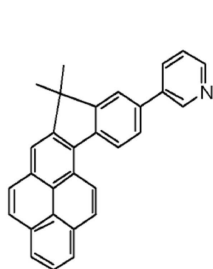
<화합물 7>



<화합물 8>



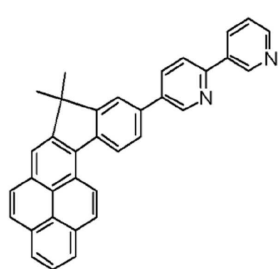
<화합물 9>



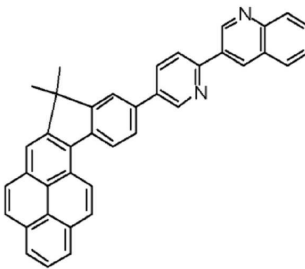
[0073]

[0074]

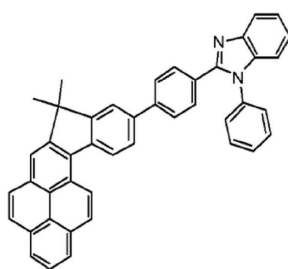
<화합물 10>



<화합물 11>



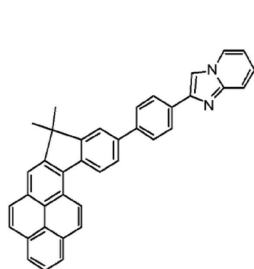
<화합물 12>



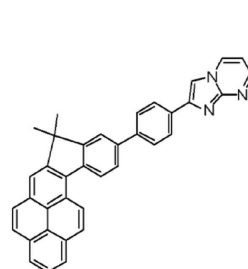
[0075]

[0076]

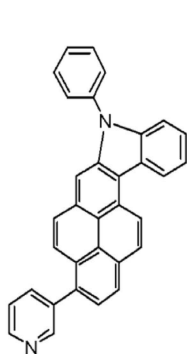
<화합물 13>



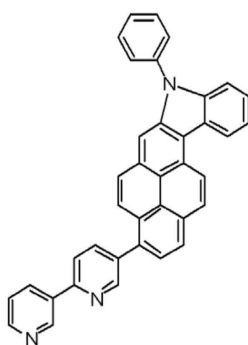
<화합물 14>



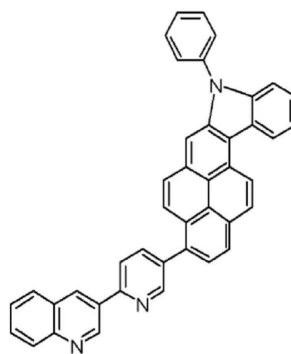
<화합물 15>



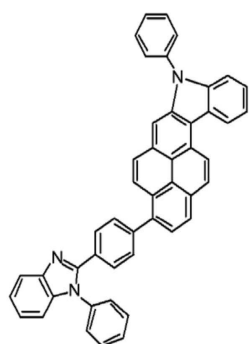
<화합물 16>



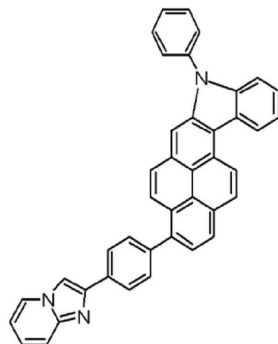
<화합물 17>



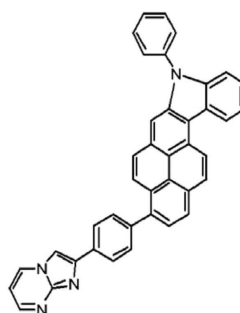
<화합물 18>



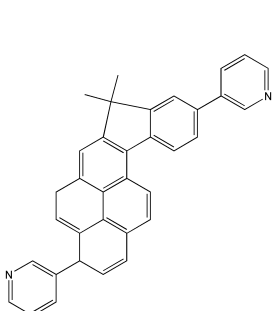
<화합물 19>



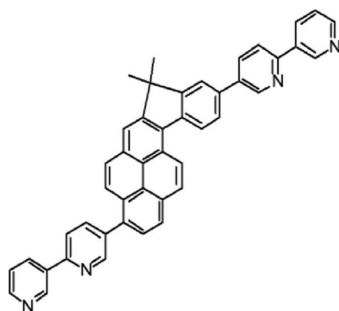
<화합물 20>



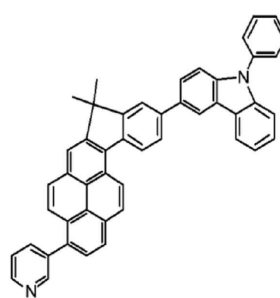
<화합물 21>



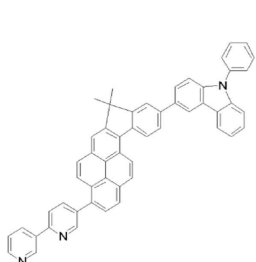
<화합물 22>



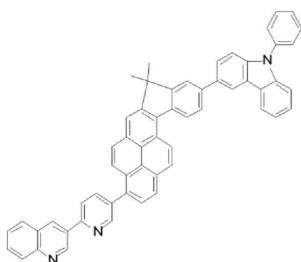
<화합물 23>



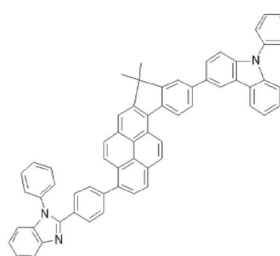
<화합물 24>



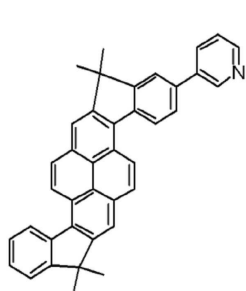
<화합물 25>



<화합물 26>

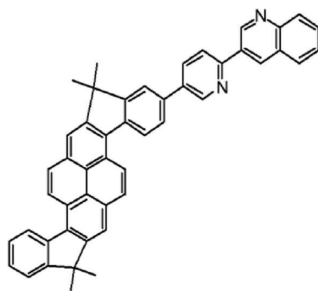


<화합물 27>



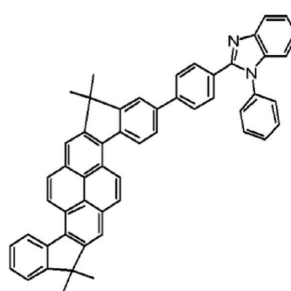
[0085]

<화합물 28>

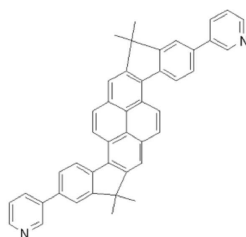


[0086]

<화합물 29>

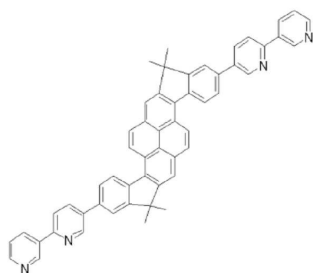


<화합물 30>



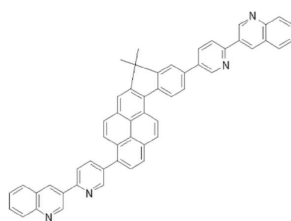
[0087]

<화합물 31>

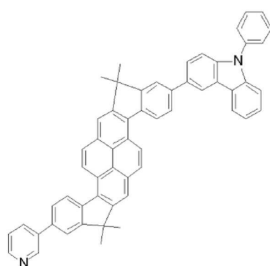


[0088]

<화합물 32>

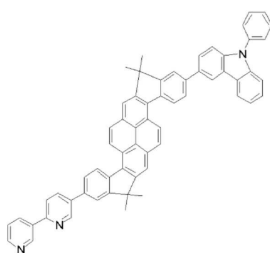


<화합물 33>



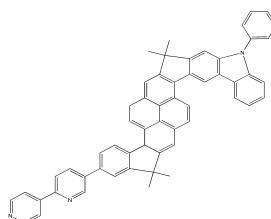
[0089]

<화합물 34>

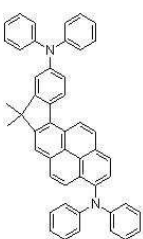


[0090]

<화합물 35>

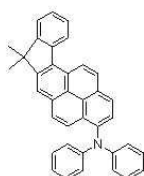


<화합물 36>



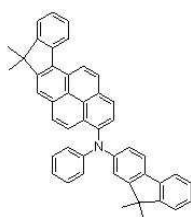
[0091]

<화합물 37>

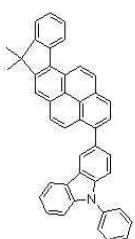


[0092]

<화합물 38>

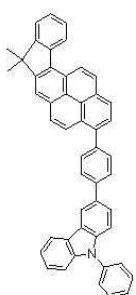


<화합물 39>



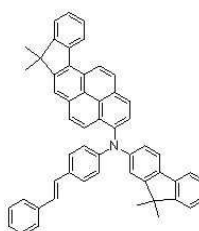
[0093]

<화합물 40>

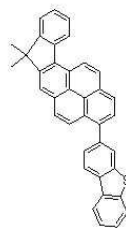
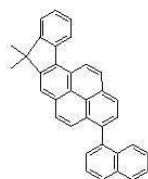
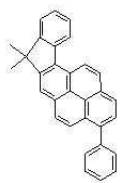


[0094]

<화합물 41>



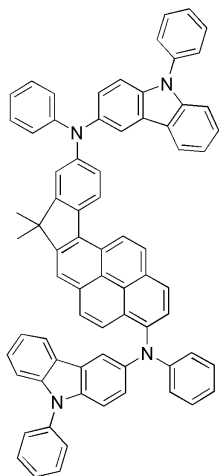
<화합물 42>



[0095]

[0096]

<화합물 43>



[0097]

[0098]

본 명세서 중, 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기(또는  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기)의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있고, 치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기는 상기 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자가 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염, 또는  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{30}$ 알케닐기,  $C_1$ - $C_{30}$ 알키닐기,  $C_6$ - $C_{30}$ 아릴기 또는  $C_2$ - $C_{20}$ 헤테로아릴기로 치환된 것이다. 한편, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬렌기는 상술한 바와 같은 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기와 동일한 구조를 가지나 2가 연결기라는 점만이 상이한 그룹이다.

[0099]

본 명세서 중 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알콕시기(또는  $C_1$ - $C_{30}$ 알콕시기)는 -OA(단, A는 상술한 바와 같은 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기임)의 화학식을 가지며, 이의 구체적인 예로서, 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시, 등이 있고, 이들 알콕시기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0100]

본 명세서 중 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알케닐기(또는  $C_2$ - $C_{30}$ 알케닐기)는 상기 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 에테닐, 프로페닐, 부테닐 등이 있다. 이들 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알케닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다. 한편, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알케닐렌기는 상술한 바와 같은 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알케닐렌기와 동일한 구조를 가지나 2가 연결기라는 점만이 상이한 그룹이다.

[0101]

본 명세서 중 비치환된  $C_2$ - $C_{30}$ 알키닐기(또는  $C_2$ - $C_{30}$ 알키닐기)는 상기 정의된 바와 같은  $C_2$ - $C_{30}$ 알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 아세틸렌, 프로필렌, 페닐아세틸렌, 나프틸아세틸렌, 이소프로필아세틸렌, t-부틸아세틸렌, 디페닐아세틸렌 등이 있다. 이들 알키닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0102]

본 명세서 중 비치환된  $C_5$ - $C_{30}$ 아릴기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 5 내지 30개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 비치환된  $C_5$ - $C_{30}$ 아릴렌기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 5 내지 30개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.

다. 상기 아릴기 및 아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 상기 아릴기 및 아릴렌기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.

[0103] 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>아릴기의 예로는 페닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬페닐기(예를 들면, 에틸페닐기), C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬비페닐기(예를 들면, 에틸비페닐기), 할로페닐기(예를 들면, o-, m- 및 p-플루오로페닐기, 디클로로페닐기), 디시아노페닐기, 트리플루오로메톡시페닐기, o-, m-, 및 p-토릴기, o-, m- 및 p-쿠메닐기, 메시틸기, 페녹시페닐기, (α, α-디메틸벤젠)페닐기, (N,N'-디메틸)아미노페닐기, (N,N'-디페닐)아미노페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 할로나프틸기(예를 들면, 플루오로나프틸기), C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬나프틸기(예를 들면, 메틸나프틸기), C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시나프틸기(예를 들면, 메톡시나프틸기), 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 안트라퀴놀일기, 메틸안트릴기, 페난트릴기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 크리세닐기, 에틸-크리세닐기, 피세닐기, 페틸레닐기, 클로로페틸레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네틸기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기 등을 들 수 있다. 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>아릴기의 예를 참조하여 용이하게 인식될 수 있다.

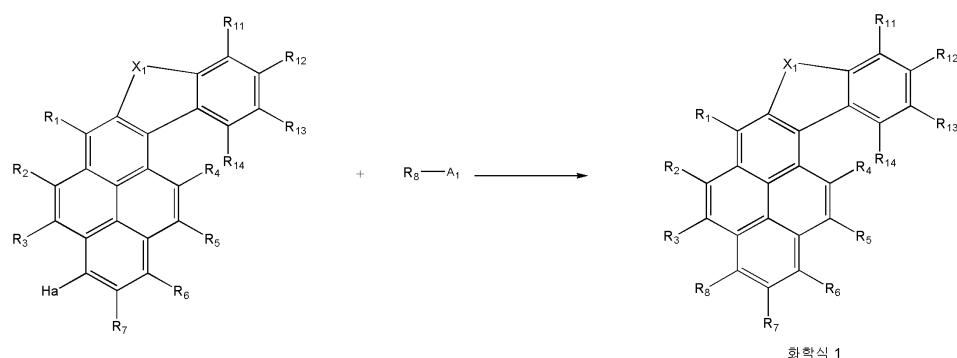
[0104] 본 명세서 중 비치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub>헤테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하고 나머지 고리원자가 C인 하나 이상의 방향족 고리로 이루어진 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>헤테로아릴렌기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하고 나머지 고리원자가 C인 하나 이상의 방향족 고리로 이루어진 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 여기서, 상기 헤테로아릴기 및 헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리는 서로 융합될 수 있다. 상기 헤테로아릴기 및 헤테로아릴렌기 중 하나 이상의 수소원자는 상술한 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>알킬기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.

[0105] 상기 비치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub>헤테로아릴기의 예에는, 피라졸일기, 이미다졸일기, 옥사졸일기, 티아졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 피리다닐기, 피리다지닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조이미다졸일기, 이미다조피리다닐기, 이미다조피리미디닐기 등을 들 수 있다. 상기 비치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub>헤테로아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub>아릴렌기의 예를 참조하여 용이하게 인식될 수 있다.

[0106] 상기 화학식 1을 갖는 축합환 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 축합환 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자에게 용이하게 인식될 수 있다.

[0107] 예를 들어, 하기 반응식 1A는 상기 화학식 1의 일 구현예를 합성하기 위한 반응식이다:

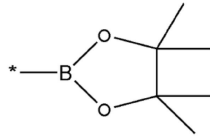
[0108] <반응식 1A>



[0109]

[0110] 상기 반응식 1A 중 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub> 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>14</sub> 및 X<sub>1</sub>은 상술한 바를 참조한다.

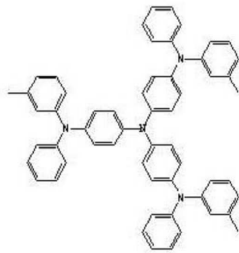
[0111] 상기 반응식 1A 중 Ha는 할로젠 원자, 예를 들면, -F, -Cl, -Br 또는 -I일 수 있다.



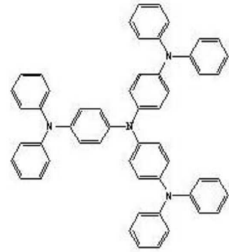
- [0112] 상기 반응식 1A 중  $A_1$ 은 수소, , 또는  $-B(OH)_2$ 일 수 있으나, 이에 한정된 것은 아니며, 선택된  $R_8$ 에 따라 공지된 다양한 모이어티 중에서 선택될 수 있다.
- [0113] 상기 반응식 1A는 화학식 1의 축합환 화합물의 합성 방법의 일례로서, 당업자는 상기 반응식 1A 및 화학식 1의 구조를 참조하여 공지된 유기 합성 방법을 이용하여 화학식 1을 합성할 수 있다.
- [0114] 상기 화학식 1을 갖는 축합환 화합물은 유기 발광 소자의 유기층에 사용될 수 있다. 따라서, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층을 포함하고, 상기 유기층이 상술한 바와 같은 화학식 1을 갖는 축합환 화합물을 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0115] 여기서, 상기 유기층은 발광층, 정공 수송층 또는 전자 수송층일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 화학식 1의 축합환 화합물이 발광층에 사용될 경우, 호스트 또는 도펀트로 사용될 수 있다.
- [0116] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.
- [0117] 유기 발광 소자(10)는 기판(11), 제1전극(13) 유기층(15) 및 제2전극(17)을 차례로 구비한다.
- [0118] 상기 기판(11)으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.
- [0119] 상기 제1전극(13)은 기판 상부에 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(13)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록 제1전극용 물질은 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(13)은 반사형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석( $SnO_2$ ), 산화아연( $ZnO$ ) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 이용하면, 상기 제1전극(13)을 반사형 전극으로 형성할 수도 있다.
- [0120] 상기 제1전극(13) 상부로는 유기층(15)이 구비되어 있다. 본 명세서에 있어서, "유기층"이란, 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 모든 층을 포괄하여 지칭하는 것으로서, 상기 유기층은 금속 착체 등도 포함할 수 있는 것으로서, 반드시 유기물로만 이루어진 층을 의미하는 것은 아니다.
- [0121] 상기 유기층(15)은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 하나 이상의 층을 포함할 수 있다.
- [0122] 정공 주입층(HIL)은 상기 제1전극(13) 상부에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0123] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500  $^{\circ}C$ , 진공도 약  $10^{-8}$  내지 약  $10^{-3}$  torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100  $\text{\AA}/\text{sec}$ 의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0124] 스펀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80  $^{\circ}C$  내지 200  $^{\circ}C$ 의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0125] 정공 주입층 물질로는 공지된 정공 주입 재료를 사용할 수 있는데, 예를 들면, N,N'-디페닐-N,N'-비스-[4-(페닐-m-톨일-아미노)-페닐]-비페닐-4,4'-디아민(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine: DNTPD), 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA [4,4',4''-tris (3-methylphenylphenylamino) triphenylamine], NPB(N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)), TDATA, 2T-NATA, Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐



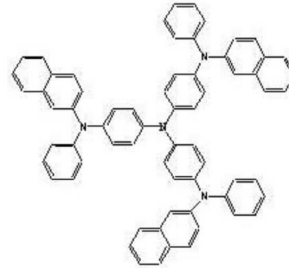
린/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid:폴리아닐린/캄퍼술포산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트))등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.



m-MTDATA



TDATA



2T-NATA

[0126]

[0127]

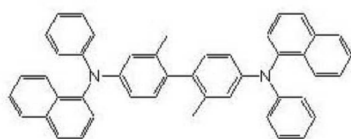
상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스러운 정도의 정공 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0128]

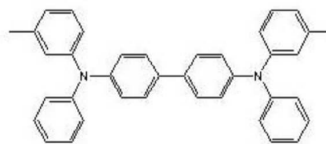
다음으로 상기 정공 주입층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공 수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의하여 정공 수송층을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건 범위 중에서 선택될 수 있다.

[0129]

정공 수송층 물질로는 상술한 바와 같은 화학식 1의 축합환 화합물을 사용할 수 있다. 또는, 상기 정공 수송층 물질로는 공지된 정공 수송 재료를 이용하여 형성할 수 있는데, 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐 벤지딘(NPD) 등의 방향족 축합환을 갖는 아민 유도체, TCTA(4,4',4''-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4''-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)) 등과 같은 트리페닐아민계 물질과 같은 공지된 정공수송 물질을 사용할 수 있다. 이 중, 예를 들면, TCTA의 경우, 정공 수송 역할 외에도, 발광층으로부터 엑시톤이 확산되는 것을 방지하는 역할도 수행할 수 있다.



α-NPD



TPD

[0130]

[0131]

상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 800Å일 수 있다. 상기 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0132]

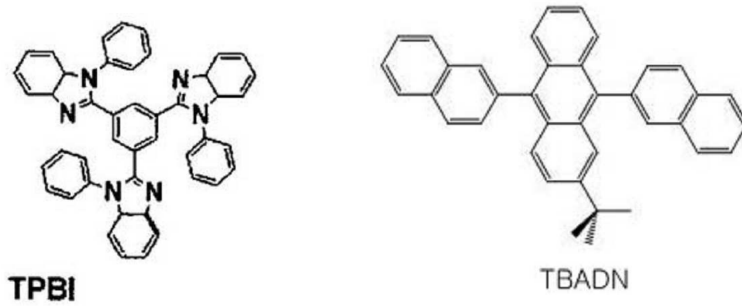
상기 정공 수송층 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0133]

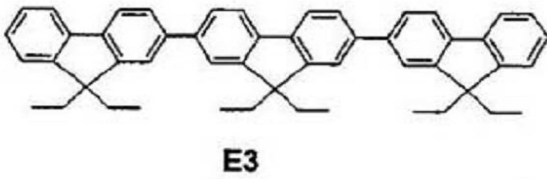
상기 발광층은 상술한 바와 같은 화학식 1을 갖는 축합환 화합물을 포함할 수 있다. 상기 발광층은 상기 화학식 1의 축합환 화합물을 단독으로 포함하거나; 호스트인 상기 화학식 1의 축합환 화합물 및 공지의 도펀트를 포함하거나; 또는 공지의 호스트 및 도펀트인 상기 화학식 1의 축합환 화합물을 포함할 수 있다. 공지의 호스트의 예로는 Alq<sub>3</sub>, CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), PVK(폴리(n-비닐카바졸)), 9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센(ADN), TCTA, TPBI(1,3,5-트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene)), TBADN(3-tert-부틸-9,10-디(나프틸-2-일) 안트라센), E3, DSA(디스티릴아릴렌) 등을 사용할 수



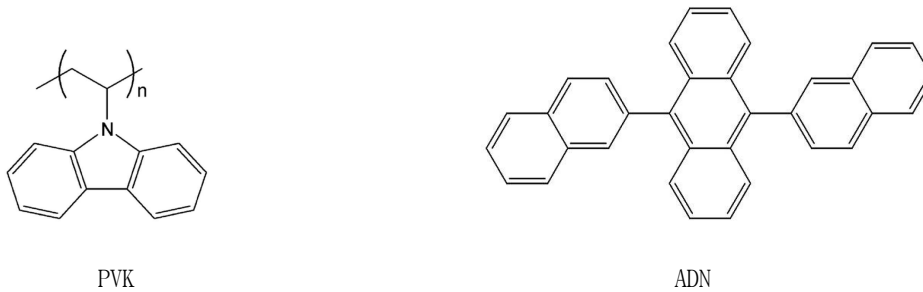
있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0134]



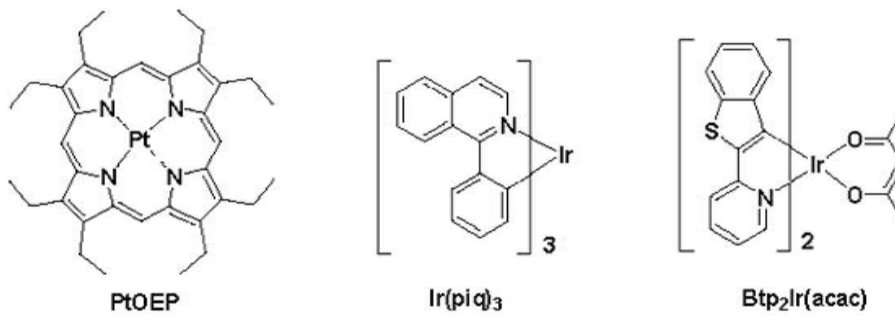
[0135]



[0136]

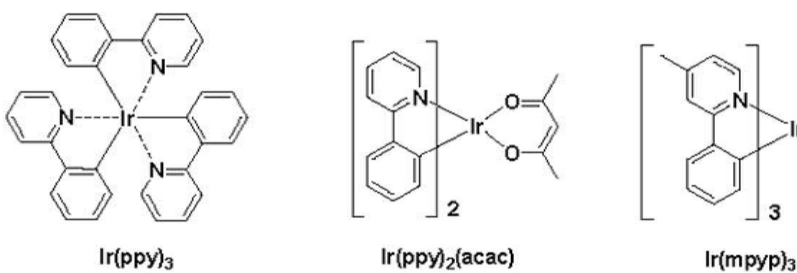
[0137]

[0138] 한편, 공지된 적색 도펀트로서 PtOEP, Ir(piq)<sub>3</sub>, Btp<sub>2</sub>Ir(acac) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



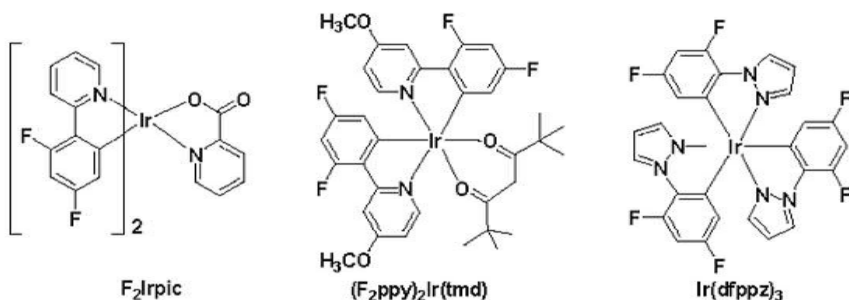
[0139]

[0140] 또한, 공지된 녹색 도펀트로서, Ir(ppy)<sub>3</sub> (ppy = 페닐피리딘), Ir(ppy)<sub>2</sub>(acac), Ir(mppy)<sub>3</sub> 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

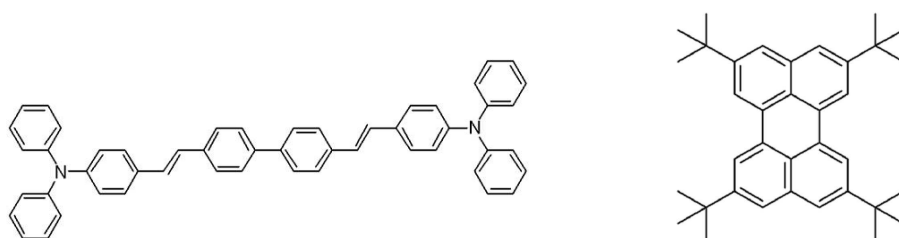


[0141]

[0142] 한편, 공지된 청색 도펀트로서,  $F_2Irpic$ ,  $(F_2ppy)_2Ir(tmd)$ ,  $Ir(dfppz)_3$ , *ter*-플루오렌(*fluorene*), 4,4'-비스(4-디페닐아미노스타릴) 비페닐 (DPAVB<sub>i</sub>), 2,5,8,11-테트라-*tert*-부틸 페틸렌 (TBPe) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0143]



[0144]

[0145]

DPAVB<sub>i</sub>

TBPe

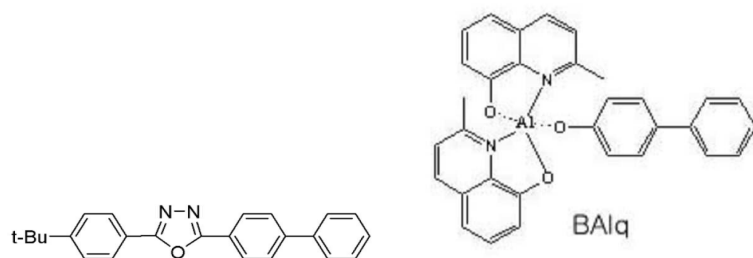
[0146] 상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0147] 상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

[0148] 발광층에 인광 도펀트와 함께 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 정공 수송층과 발광층 사이에 진공증착법, 스프인코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공 저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스프인코팅법에 의해 정공 저지층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 될 수 있다. 공지의 정공 저지 재료도 사용할 수 있는데, 이의 예로는, 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체 등을 들 수 있다.

[0149] 상기 정공 저지층의 두께는 약 50Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

[0150] 다음으로 전자 수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스프인코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공증착법 및 스프인코팅법에 의해 전자수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 상기 전자 수송층 재료로는 상기 화학식 1의 축합환 화합물을 사용할 수 있다. 또는, 상기 전자 수송층 재료로는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 공지의 전자 수송 물질을 이용할 수 있다. 이의 예로는, 퀸올린 유도체, 특히 트리스(8-퀸올리노레이트)알루미늄( $Alq_3$ ), TAZ, Balq, 베릴륨 비스(벤조퀸올리노-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate:  $Bebq_2$ ))등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0151]

[0152]

TAZ

[0153]

상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0154]

또한 전자 수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

[0155]

상기 전자 주입층 형성 재료로는 LiF, NaCl, CsF, Li<sub>2</sub>O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0156]

상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0157]

이와 같은 유기층(15) 상부로는 투과형 전극인 제2전극(17)이 구비되어 있다. 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드(Cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극 형성에 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 박막으로 형성하여 투과형 전극을 얻을 수 있다. 한편, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용한 투과형 전극을 형성할 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0158]

이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0159]

[실시예]

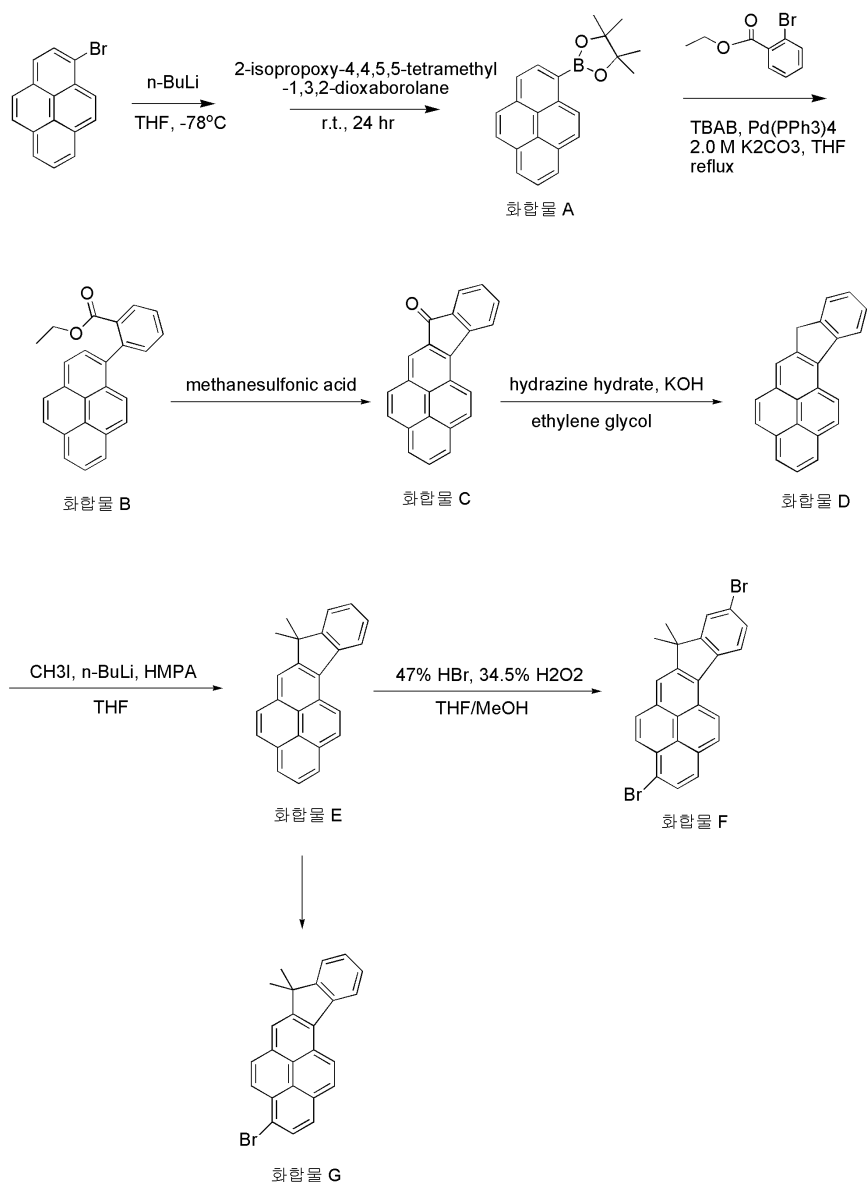
[0160]

**합성예 1: 화합물 F 및 G의 합성**

[0161]

하기 반응식 2에 따라 화합물 F 및 G를 합성하였다:

[0162] <반응식 2>



[0163]

[0164] 화합물 A의 합성

[0165] 플라스크에 2-bromopyrene (100 g, 355.68 mmol)을 THF 1L에 희석시키고  $-78^{\circ}\text{C}$  로 온도를 낮춘 뒤 질소 기류하에서 헥산 중 2.5M n-BuLi 용액(213.4 mL, 533.52 mmol)을 천천히 적가하고 30분 동안 교반하였다. 상기 반응물에 2-이소프로폭시-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란(2-isopropoxy-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane)(99.41 mL, 487.28 mmol)을 천천히 넣은 뒤 상온에서 밤새 정치시켰다.

[0166] 완결된 반응물에 1N HCl로 반응을 종료 한 후 에틸아세테이트(EA)로 추출하였다. 이 후, 물과 브라인(brine)으로 세척한 후  $\text{MgSO}_4$ 로 건조시키고 감압 농축하였다. 헥산(Hexane)으로 현탁하여 충분히 씻어주어 75 g (Yield = 64 %)의 고체 화합물 A를 얻었다.

[0167]  $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3, 300\text{MHz}) \delta$  1.48 (s, 12H), 7.97 - 8.04 (m, 3H), 8.07 - 8.22 (m, 4H), 8.53 (d,  $J = 6.9 \text{ Hz}$ , 1H), 8.06 (d,  $J = 9.3 \text{ Hz}$ , 1H).

[0168] 화합물 B의 합성

[0169] 4,4,5,5-테트라메틸-2-(파이렌-1-일)-1,3,2-디옥사보로란(4,4,5,5-tetramethyl-2-(pyren-1-yl)-1,3,2-

dioxaborolane) (85 g, 258.98 mmol), 에틸 2-브로모벤조에이트(Ethyl 2-bromobenzoate) (45.23 mL, 284.88 mmol), 테트라부틸 암모늄 브로마이드(tetrabutylammonium bromide) (83.49 g, 258.98 mmol), 2M 포타슘 카보네이트(potassium carbonate) (259 mL, 517.96 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (14.96 g, 12.95 mmol)를 톨루엔에 희석시키고 교반하면서 온도를 올리고 12시간동안 반응을 진행하였다. 이로부터 얻은 혼합물에 물을 가해 반응을 종료한 후 에틸 아세테이트(EA)로 추출하였다. 이를 물과 브라인(brine)으로 세척한 후 MgSO<sub>4</sub>로 건조시키고 감압 농축한다. 컬럼크로마토그래피(EA : Hex = 1 : 50)으로 분리하여 옅은 노란색 고체 화합물 B 83 g (Yield = 91.5 %)을 얻었다.

[0170] <sup>1</sup>H-NMR(CDC13, 300MHz) δ 0.38 (t, J = 6.9 Hz, 3H), 3.66 - 3.81 (m, 2H), 7.50 (d, J = 6.9 Hz, 1H), 7.56 - 7.61, (m, 1H), 7.65 - 7.70 (m, 1H), 7.75 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 7.87 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 7.96 - 8.03 (m, 2H), 8.11 (m, 2H), 8.13 - 8.14 (m, 2H), 8.20 - 8.22 (m, 2H).

[0171] 화합물 C의 합성

[0172] 상기 화합물 B 35 g (99.88 mmol)를 메탄설폰산(methanesulfonic acid) (500 mL)에 첨가하고 외부온도를 약 75 °C까지 온도를 올린 후, 약 4시간 동안 반응을 진행하였다. 박막 크로마토그래피(TLC)로 출발물질이 사라진 것을 확인하고 0°C까지 냉각시킨 후 반응물을 천천히 첨가하였다. 이로부터 붉은색 고체가 형성되며, 그 후 충분히 교반하고 고체를 여과 했다. 여과액을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 감압 농축하여 붉은색 고체 화합물인 화합물 C 29g (95% 수율)을 수득하였다.

[0173] <sup>1</sup>H-NMR(300MHz) δ 7.97 - 7.99 (m, 4H), 8.05 - 8.15 (m, 4H), 8.32 (m, 1H), 8.44 - 8.49 (m, 2H) 8.75 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 9.36 (s, 1H).

[0174] 화합물 D의 합성

[0175] 상기 화합물 C 30 g (98.57mmol)을 에틸렌글리콜 (500mL)에 첨가하고 히드라진 하이드레이트(hydrazine hydrate) (148.08mL, 2957.1mmol)를 첨가하였다. 이로부터 수득한 반응물에 수산화칼륨 (132.74 g, 2365.8 mmol)을 넣은 뒤 180 ~ 190 °C에서 밤새 정치시켰다. 이로부터 수득한 반응물을 상온에서 식힌 후 얼음물에 부었다. 2N HCl를 조금씩 넣으면서 중화시키면 고체가 생성되며 이 고체를 여과한 후 메틸렌 클로라이드(methylene chloride)에 용해시켜 수득한 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 감압농축하였다. 생성물로서 노란색 고체인 화합물 D 10g (35%)을 수득하였다.

[0176] <sup>1</sup>H-NMR(CDC13, 300MHz) δ 4.29 (s, 2H), 7.41 (t, J = 7.5 Hz, 1H), 7.55 (t, J = 7.5 Hz, 1H), 7.72 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 8.00 - 8.09 (m, 3H), 8.20-8.27 (m, 3H), 8.35 (s, 1H), 8.59 (d, J = 7.5Hz, 1H), 9.02 (d, J = 6.3 Hz, 1H).

[0177] 화합물 E의 합성

[0178] 플라스크에 hexan 중 2.5M n-BuLi 용액(55.1 mL, 137.76 mmol)을 -78°C에서 넣은 뒤 상기 화합물 D (16 g, 55.1 mmol)을 건조한 THF 에 녹여 -78°C에서 천천히 첨가 하였다. -78°C에서 반응물에 메틸 아이오다이드(methyl iodide)(8.58 mL, 137.76 mmol)을 첨가한 뒤 천천히 상온으로 올려 약 2 ~ 3시간 동안 반응을 진행하였다. 이로부터 수득한 반응물을 물(water)에 붓고 2N - HCl 로 중화하였다. 이를 메틸렌 클로라이드(MC)로 추출 한 후 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 다음 감압농축하였다. 컬럼크로마토그리피(에틸 아세테이트(EA) : hexan(HEX) = 1 : 100)로 정제하여 노란색 고체인 화합물 E 11 g (Yield = 63 %)을 수득하였다.

[0179] <sup>1</sup>H-NMR(CDC13, 300MHz) δ 1.63 (s, 6H), 7.41 (t, J = 7.2 Hz, 1H), 7.50 (t, J = 7.2 Hz, 1H), 7.60 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 7.98 (t, J = 7.2 Hz, 1H), 8.09 - 8.16 (m, 2H), 8.19 - 8.26 (m, 4H), 8.53 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 9.00 (d, J = 9.3 Hz, 1H).

[0180] 화합물 F의 합성

[0181] 1L RBF에 상기 화합물 E (11 g, 34.55 mmol)를 THF (80mL)에 녹이고 MeOH (400 mL) 천천히 넣었다. 0℃에서 반응물에 48% 히드로브롬산(HydroBromic acid) (9.5 mL, 76.00 mmol)을 천천히 넣은 뒤 34.5% 히드로 퍼옥사이드(Hydroperoxide)를 천천히 첨가하였다. 이를 0℃에서 천천히 상온으로 온도 올리면서 교반하였다. 2일 후 생성된 고체를 여과한 후 메틸렌 클로라이드(MC)에 녹여 물로 세척한 후 NaHCO<sub>3</sub>포화용액으로 중화하고 MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 감압농축하였다. 이를 컬럼크로마토그래피로 정제하여 (헥산(hexane) 100%) 노란색 고체인 화합물 F 5.2 g (Yield = 31.6 %)을 얻었다.

[0182] <sup>1</sup>H-NMR(CDC13, 300MHz) δ 1.70 (s, 6H), 7.45 (t, J = 7.2 Hz, 1H) 7.52 (t, J = 7.8 Hz, 1H), 7.63 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 8.21 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 8.32 (s, 1H), 8.38 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 8.51-8.56 (m, 3H), 9.11 (d, J = 9.9 Hz, 1H).

[0183] 화합물 G의 합성

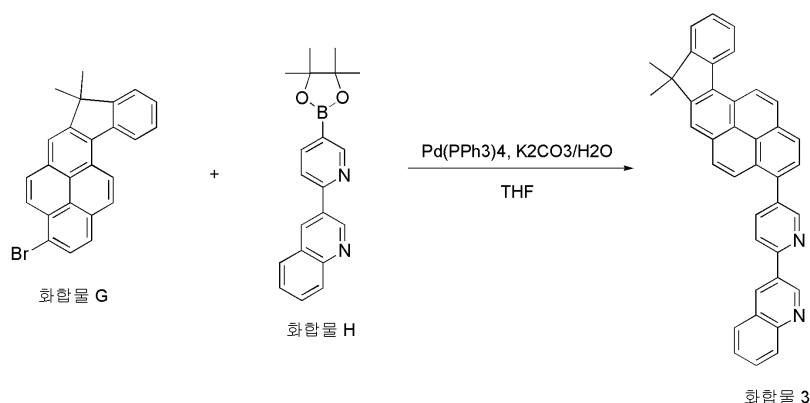
[0184] 반응 시간을 8시간으로 줄였다는 점을 제외하고는 상기 화합물 F의 합성 방법과 동일한 방법으로 화합물 G (7.8)g (수율 = 56%)을 얻었다.

[0185] <sup>1</sup>H-NMR(CDC13, 300MHz) δ 1.70 (s, 6H), 7.24 (t, J = 7.1 Hz, 1H) 7.45 (t, J = 7.8 Hz, 1H), 7.52 (t, J = 7.8 Hz, 1H), 7.61 (d, J = 7.1 Hz, 1H), 8.21 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 8.32 (s, 1H), 8.38 (d, J = 9.3 Hz, 1H), 8.51 - 8.56 (m, 3H), 9.11 (d, J = 9.9 Hz, 1H).

[0186] 합성예 2: 화합물 3의 합성

[0187] 하기 반응식 3에 따라 화합물 3을 합성하였다:

[0188] <반응식 3>



[0189]

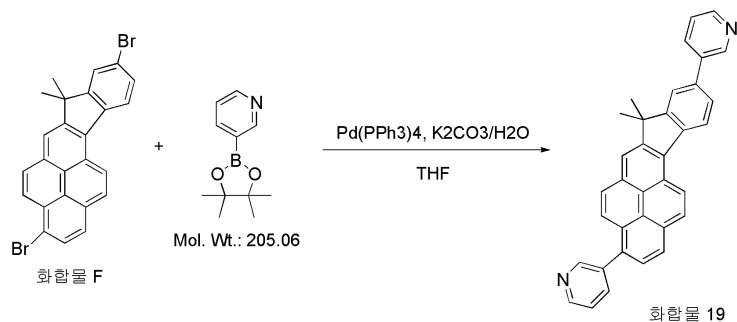
[0190] 상기 화합물 G 2.0g (5.0mmol)와 화합물 H 1.84g (5.5mmol)을 탄산칼륨 2.07g (15.0mmol) 수용액과 THF의 혼합 용매에 넣고 교반하면서 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 173mg (3mol%)를 넣고 24시간 동안 가열하였다. 상온으로 냉각한 후 반응 혼합물을 디클로로메탄으로 추출하고, 유기층을 모아 무수 황산마그네슘으로 건조시키고 감압하여 용매를 제거한 다음, 컬럼 크로마토그래피(에틸아세테이트:디클로로메탄=3:7)로 여과하여 노란색 고체인 화합물 3을 2.07g (수율 79%)로 수득하였다. 화합물 3의 구조를 <sup>1</sup>H-NMR로 확인 하였다.

[0191] <sup>1</sup>H NMR (CDC13, 300MHz) δ 9.21(1H), 8.82(1H), 8.73(1H), 8.18 - 8.03(4H), 7.81(1H), 7.71 - 7.60(8H), 7.45 - 7.43(2H), 7.24(2H), 1.71(6H)

[0192] 합성예 3: 화합물 19의 합성

[0193] 하기 반응식 4에 따라 화합물 19을 합성하였다:

[0194] <반응식 4>



[0195]

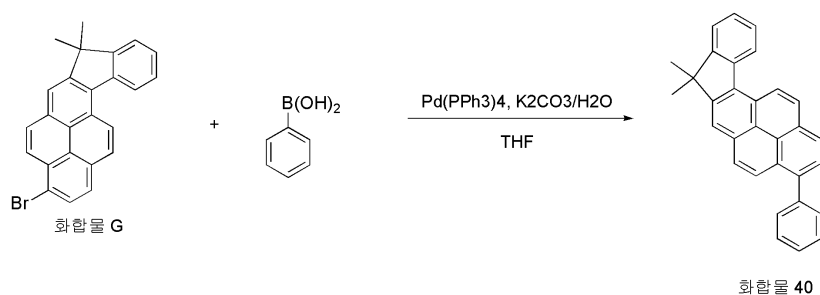
[0196] 상기 화합물 F 2.0g (4.20mmol)와 3-피리딜보론산 피나콜에스테르 2.58g (12.6mmol)을 탄산칼륨 2.32g (16.8mmol) 수용액과 THF의 혼합 용매에 넣고 교반하면서 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 194mg (4mol%)를 넣고 24시간 동안 가열하였다. 상온으로 냉각한 후 반응 혼합물을 디클로로메탄으로 추출하고, 유기층을 모아 무수 황산마그네슘으로 건조시키고 감압하여 용매를 제거한 다음, 컬럼 크로마토그래피(에틸아세이트:디클로로메탄=3:7)로 여과하여 노란색 고체인 화합물 19를 1.59g (수율 80%)으로 얻었다. 화합물 19의 구조는 <sup>1</sup>H-NMR로 확인 하였다.

[0197] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 300MHz) δ 8.72(2H), 8.51(2H), 8.18 - 8.12(2H), 8.02 - 7.97(3H), 7.85 - 7.81(2H), 7.71 - 7.65(5H), 7.45 - 7.41(2H), 1.72(6H)

[0198] **합성예 4: 화합물 40의 합성**

[0199] 하기 반응식 5에 따라 화합물 40을 합성하였다:

[0200] <반응식 5>



[0201]

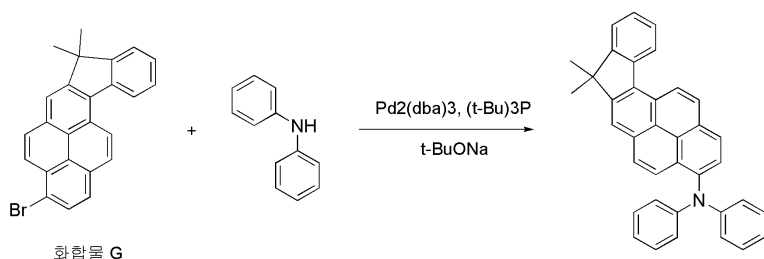
[0202] 상기 합성예 3에서 화합물 F 대신 화합물 G를 사용하고 3-피리딜보론산 피나콜에스테르 대신 페닐보론산을 이용한 것을 제외하고는 상기 합성예 3와 동일한 방법으로 화합물 40을 합성하였다(수율 84%). 화합물 40의 구조는 <sup>1</sup>H-NMR로 확인 하였다.

[0203] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 300MHz) δ 8.21(1H), 8.06 - 8.01(2H), 7.81(1H), 7.78 - 7.62(5H) 7.48 - 7.43(3H), 7.32 - 7.25(4H), 1.70(6H)

[0204] **합성예 5: 화합물 35의 합성**

[0205] 하기 반응식 6에 따라 화합물 35를 합성하였다:

[0206] <반응식 6>



[0207]

[0208] 화합물 G 2g (5.0mmol)과 디페닐아민 1.28g (7.55mmol)을 톨루엔 50mL에 녹인 후, 여기에 t-BuONa 2.40g(25mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0) (이하  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ ) 90.6mg (2mol%), (t-Bu) $_3$ P 20mg (2mol%)을 가하고 90℃에서 4시간 교반하였다.

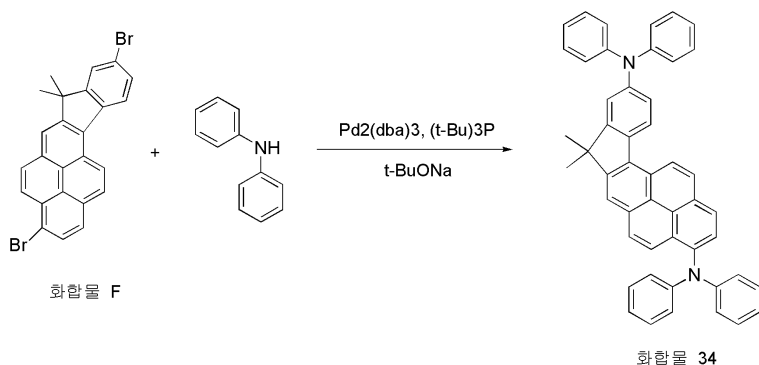
[0209] 반응 혼합물을 디클로로메탄 50mL로 3번 추출하여 유기층을 수득하였다. 수득된 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 35를 1.76g (수율 72%)으로 얻었다. 구조는  $^1\text{H}$ -NMR로 확인 하였다.

[0210]  $^1\text{H}$ -NMR(300MHz)  $\delta$  7.98(1H) 7.87 - 7.81(2H) 7.72 - 7.63(5H), 7.44(1H), 7.21(1H), 7.05 - 6.97(6H), 6.65 - 6.46(5H), 1.71(6H)

#### [0211] 합성예 6: 화합물 34의 합성

[0212] 하기 반응식 7에 따라 화합물 34를 합성하였다:

[0213] <반응식 7>



[0214]

[0215] 화합물 F 2.4g (5.0mmol) 과 디페닐아민 2.54g (15.0mmol)을 톨루엔 100mL에 녹인 후, 여기에 t-BuONa 2.40g(25mmol),  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$  137mg (3mol%), (t-Bu) $_3$ P 30mg (3mol%)을 가하고 90℃에서 6시간 교반하였다.

[0216] 반응 혼합물을 디클로로메탄 100mL로 3번 추출하여 유기층을 수득하였다. 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 34를 2.27g (수율 69%)로 얻었다. 구조는  $^1\text{H}$ -NMR로 확인 하였다.

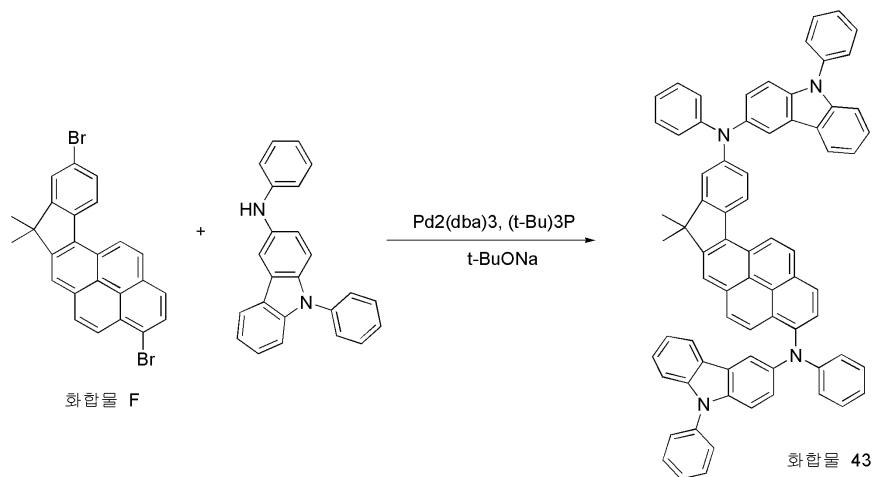
[0217]  $^1\text{H}$ -NMR(300MHz)  $\delta$  7.89(1H), 7.82-7.80(2H), 7.83 - 7.70(4H), 7.11 - 7.04(10H), 6.82(2H), 6.65 - 6.59(4H), 6.52 - 6.47(7H), 1.72(6H)

#### [0218] 합성예 7: 화합물 43의 합성

[0219] 하기 반응식 8에 따라 화합물 43을 합성하였다:



[0220] <반응식 8>



[0221]

[0222] 화합물 F 2.4g (5.0mmol)과 페닐-(페닐카바졸)아민 5.01g (15.0mmol)을 톨루엔 200mL에 녹인 후, 여기에 t-BuONa 2.40g(25mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> 137mg (3mol%), (t-Bu)<sub>3</sub>P 30mg (3mol%)을 가하고 90℃에서 6시간 교반하였다.

[0223] 반응 혼합물을 디클로로메탄 100mL로 3번 추출하여 유기층을 수득하였다. 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 43를 2.73g (수율 56%)로 얻었다. 구조는 <sup>1</sup>H-NMR로 확인 하였다.

[0224] <sup>1</sup>H-NMR(300MHz) δ 7.87(1H), 7.82(1H), 7.76-7.72(5H), 7.56(2H), 7.42(2H), 7.39 - 7.13(12H), 7.08 - 6.98(10H), 6.81 - 6.46(9H), 6.28(2H), 1.71(6H)

### [0225] 비교예 1

[0226] 애노드로는 코닝사(Corning)의 15Ω/cm<sup>2</sup> (1200Å) ITO 유리 기판을 50mm×50mm×0.7mm 크기로 잘라 이소프로필 알콜과 순수에서 각각 5분간 초음파 세정한 후 30분간 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 m-MTDATA를 진공 증착하여 750Å 두께의 정공 주입층을 형성한 다음, 상기 정공 주입층 상부에 α-NPD를 진공 증착하여 150Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 상기 정공 수송층 상부에 호스트로서 DSA 97중량%, 도펀트로서 TBPe를 3중량% 사용하여 300Å 두께의 발광층을 형성 하였다. 상기 발광층 상부에 Alq3를 진공 증착하여 200Å 두께의 전자 수송층을 형성하였다. 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 진공 증착하여 80Å 두께의 전자 주입층을 형성한 다음, Al을 진공 증착하여 3000Å 두께의 캐소드를 형성함으로써, 유기 발광 소자를 완성하였다.

### [0227] 실시예 1

[0228] 정공 수송층 재료로서 m-MTDATA 대신 화합물 34를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 완성하였다.

### [0229] 실시예 2

[0230] 발광층의 호스트로서 DSA 대신 화합물 40을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 완성하였다.

### [0231] 실시예 3

[0232] 발광층의 도펀트로서 TBPe 대신 화합물 35를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0233] 실시예 4

[0234] 전자 수송층 재료로서 Alq3 대신 화합물 43을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0235] 실시예 5

[0236] 전자 수송층 재료로서 Alq3 대신 화합물 19를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0237] 실시예 6

[0238] 전자 수송층 재료로서 Alq3 대신 화합물 3을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0239] 평가예

[0240] 실시예 1 내지 6과 비교예 1의 유기 발광 소자의 발광 효율 및 반감 수명을 PR650 Spectroscan Source Measurement Unit.(PhotoResearch사 제품임)을 이용하여 평가하였다. 그 결과는 하기 표 1과 같다:

표 1

	실시예의 화합물	실시예의 화합물의 용도	발광효율 (cd/A)	반감수명 (시간) @1000nit
실시예 1	화합물 34	정공수송층	4.2	3700
실시예 2	화합물 40	호스트	4.3	4200
실시예 3	화합물 35	도판트	3.7	3800
실시예 4	화합물 43	정공수송층	4.1	4200
실시예 5	화합물 19	전자수송층	4.4	4500
실시예 6	화합물 3	전자수송층	3.9	2600
비교예	-	-	2.8	1400

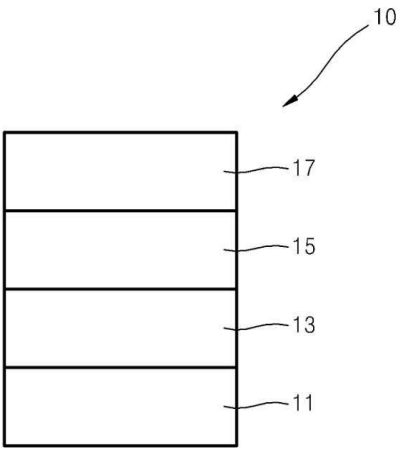
[0242] 상기 표 1로부터 실시예 1 내지 6의 유기 발광 소자는 비교예 1의 유기 발광 소자에 비하여 효율 및 수명 특성이 향상되었음을 확인할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0243] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

도면

도면1



专利名称(译)	缩合环化合物和具有含有其的有机层的有机发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR101202347B1</a>	公开(公告)日	2012-11-16
申请号	KR1020090096393	申请日	2009-10-09
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
[标]发明人	KIM HEE YEON 김희연 YANG SEUNG GAK 양승각 LEE KWAN HEE 이관희		
发明人	김희연 양승각 이관희		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/54		
CPC分类号	C07D213/06 C07C13/62 C07C211/61 C07C2103/18 C07C2103/54 C07C2603/18 C07C2603/54 C07D213/22 C07D235/08 C07D401/04 C07D487/04 H01L51/0056 H01L51/5048 H01L51/5052		
其他公开文献	KR1020110039108A		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

# 摘要(译)

用途：提供一种稠环化合物，用于制备具有高效率 and 长寿命的有机发光器件。组成：稠环化合物由化学式1表示。有机发光器件包括第一电极，a第二电极面对第一电极，有机层插入第一电极和第二电极之间，其中有有机层包括稠环化合物。有机层是空穴传输层，电致发光层或电子传输层。

