



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2019년02월14일
 (11) 등록번호 10-1921550
 (24) 등록일자 2018년11월19일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H05B 33/14* (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2011-0104825
 (22) 출원일자 2011년10월13일
 심사청구일자 2016년10월12일
 (65) 공개번호 10-2012-0083203
 (43) 공개일자 2012년07월25일
 (30) 우선권주장
 1020110004523 2011년01월17일 대한민국(KR)
 (56) 선행기술조사문헌
 KR1020100112903 A*
 JP2010111621 A*
 US20080176099 A1*
 *는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
삼성디스플레이 주식회사
 경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
에스에프씨 주식회사
 충청북도 청주시 청원구 오창읍 과학산업5로 89
 (72) 발명자
김명숙
 경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
제종태
 충청북도 청주시 상당구 중흥로 71 106동 801호
 (용암동, 건영아파트)
 (뒷면에 계속)
 (74) 대리인
리엔목특허법인

전체 청구항 수 : 총 14 항

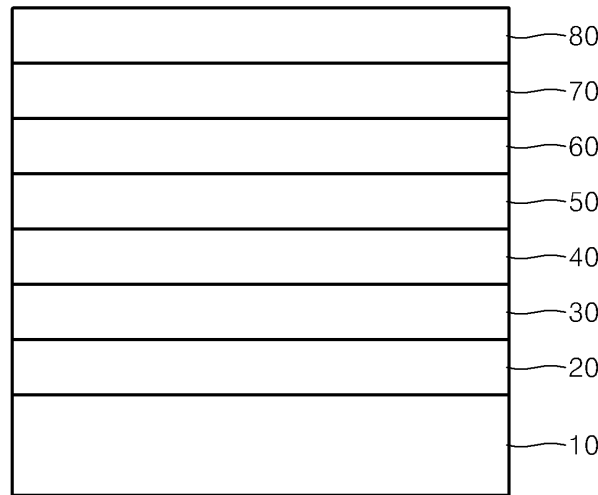
심사관 : 송이화

(54) 발명의 명칭 **축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자**

(57) 요약

축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

이세진

대전광역시 동구 성동로7번길 52-1 (자양동)

박석배

충청남도 금산군 금산읍 후곶천길 18, 1동 201호
(해맑은 아파트)

유세진

경상북도 경산시 백자로10길 57 109동 1105호 (사
동, 사동휴먼시아1단지아파트)

임재건

대전광역시 중구 대종로593번길 20-1 (선화동)

최병기

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

김태경

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

이정인

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

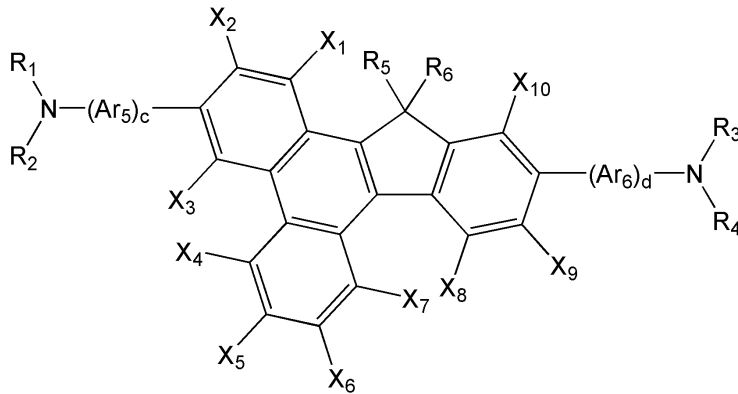
명세서

청구범위

청구항 1

제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함하고, 상기 도펀트가 하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

R₁은 -(Ar₁)_{a1}-(R₁₁)_{b1}으로 표시되고, R₂는 -(Ar₂)_{a2}-(R₁₂)_{b2}으로 표시되고, R₃는 -(Ar₃)_{a3}-(R₁₃)_{b3}로 표시되고, R₄은 -(Ar₄)_{a4}-(R₁₄)_{b4}로 표시되고;

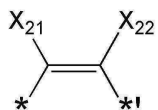
상기 R₁와 R₂ 및 R₃와 R₄ 중 하나 이상의 조합은 선택적으로(optionally) 서로 연결될 수 있고,

상기 Ar₁ 내지 Ar₄은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀ 방향족 연결기(aromatic linking group), 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀ 헤테로방향족 연결기이고;

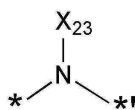
상기 Ar₅ 및 Ar₆은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기이고;

R₅ 및 R₆은 서로 독립적으로, i) 수소, 중수소, C₁-C₁₀알킬기, 페닐기 및 나프틸기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기 및 나프틸기; 중 하나이거나, 또는 ii) R₅과 R₆이, 단일 결합, 하기 화학식 4A의 연결기, 또는 하기 화학식 4B의 연결기를 사이에 두고 서로 연결되고,

<화학식 4A>



<화학식 4B>



상기 화학식 4A 및 4B 중, X₂₁ 내지 X₂₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환

또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴싸이오기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기이고,

R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 비공유 전자쌍, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀축합환기이고;

상기 a₁ 내지 a₄는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수이고;

상기 b₁ 내지 b₄는 서로 독립적으로 1 내지 5의 정수이고;

c 및 d는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수이고;

X₁ 내지 X₁₀은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기 또는 -Si(R₂₁)(R₂₂)(R₂₃)이고;

R₂₁ 내지 R₂₃는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴싸이오기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기이고,

상기 치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환된 C₃-C₁₀시클로알킬기, 치환된 C₆-C₆₀아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴옥시기, 치환된 C₆-C₆₀아릴싸이오기, 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기, 치환된 C₆-C₆₀아릴렌기 및 치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기의 치환기 중 적어도 하나의 치환기는,

중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염;

C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴싸이오기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기;

중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴싸이오기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기; 및

-Si(Q₃)(Q₄)(Q₅); 중에서 선택되고,

상기 Q₃ 내지 Q₅은 서로 독립적으로, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴싸이오기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기; 및

중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알

록시기 중 하나 이상으로 치환된, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₁₀시클로알킬기, C₆-C₆₀아릴기, C₆-C₆₀아릴옥시기, C₆-C₆₀아릴싸이오기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기; 중 하나이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 펜탈레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인데닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphthyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphthyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 페날레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 파이레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크라이세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 나프타세닐기(naphthacenyl), 치환 또는 비치환된 피세닐기(picenyl), 치환 또는 비치환된 페릴레닐기(perylene), 치환 또는 비치환된 펜타세닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl), 치환 또는 비치환된 시클로펜틸기, 치환 또는 비치환된 시클로헥실기, 치환 또는 비치환된 시클로헵틸기, 치환 또는 비치환된 디히드로나프틸기, 치환 또는 비치환된 테트라히드로나프틸기, 또는 치환 또는 비치환된 디히드로-인데닐기인, 유기 발광 소자.

청구항 3

제1항에 있어서,

Ar₁ 내지 Ar₄는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 벤젠 연결기, 치환 또는 비치환된 펜탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 인덴 연결기, 치환 또는 비치환된 나프탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 아줄렌 연결기, 치환 또는 비치환된 헵탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 인다센 연결기, 치환 또는 비치환된 아세나프탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 플루오렌 연결기, 치환 또는 비치환된 페날렌 연결기, 치환 또는 비치환된 페난트렌 연결기, 치환 또는 비치환된 안트라센 연결기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐 연결기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌 연결기, 치환 또는 비치환된 파이렌 연결기, 치환 또는 비치환된 크라이센 연결기, 치환 또는 비치환된 나프타센 연결기, 치환 또는 비치환된 피센 연결기, 치환 또는 비치환된 페릴렌 연결기, 치환 또는 비치환된 펜타센 연결기, 또는 치환 또는 비치환된 헥사센 연결기인, 유기 발광 소자.

청구항 4

제1항에 있어서,

a₁ 내지 a₄는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고, b₁ 내지 b₄는 서로 독립적으로 1 또는 2인, 유기 발광 소자.

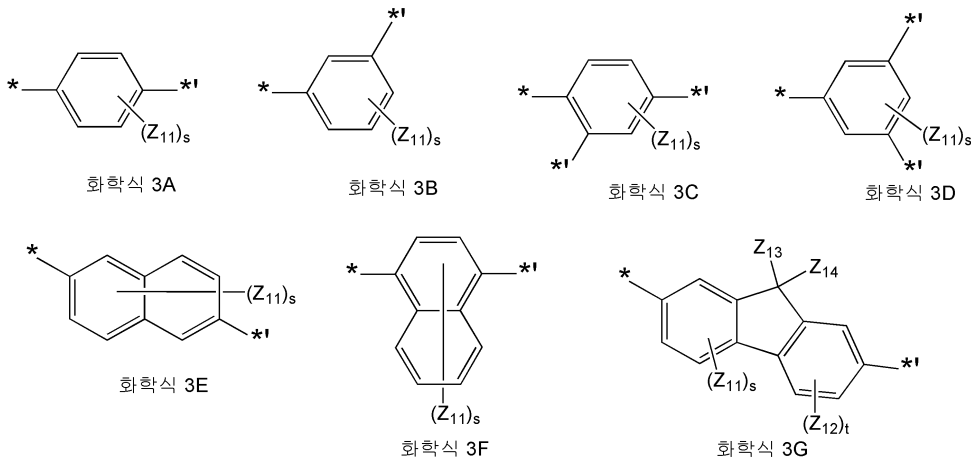
청구항 5

제1항에 있어서,

상기 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, C₁-C₁₀알킬기; 페닐기; 나프틸기; 페난트레닐기; 플루오레닐기; 파이레닐기; 시클로펜틸기; 시클로헥실기; 테트라히드로나프틸기; 디히드로-인데닐기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기 및 -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃) 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 테트라히드로나프틸기 및 디히드로-인데닐기; 중 하나이고;

상기 Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기 또는 C₆-C₁₄아릴기이고;

Ar₁ 내지 Ar₄는 서로 독립적으로, 하기 화학식 3A 내지 3G 중 어느 하나로 표시되는, 유기 발광 소자:



상기 화학식 3A 내지 3G 중

Z₁₁ 내지 Z₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알킬닐기 또는 C₁-C₆₀알록시기이고;

s는 1 내지 6의 정수이고;

t는 1 내지 3의 정수이다.

청구항 6

삭제

청구항 7

삭제

청구항 8

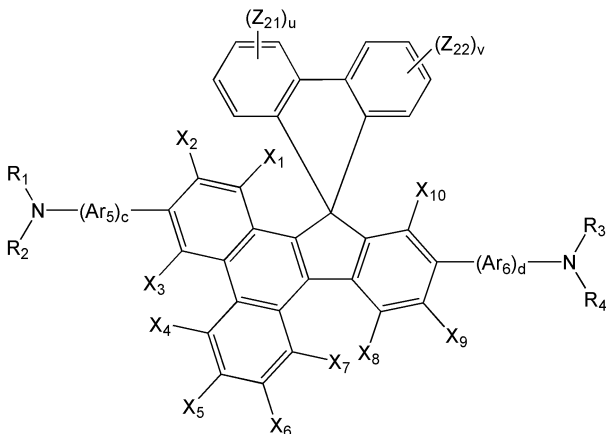
삭제

청구항 9

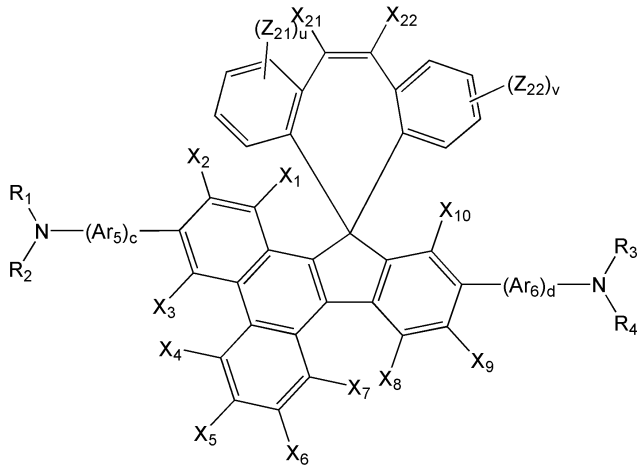
제1항에 있어서,

상기 축합환 화합물이 하기 화학식 1A 내지 1D 중 어느 하나로 표시되는, 유기 발광 소자:

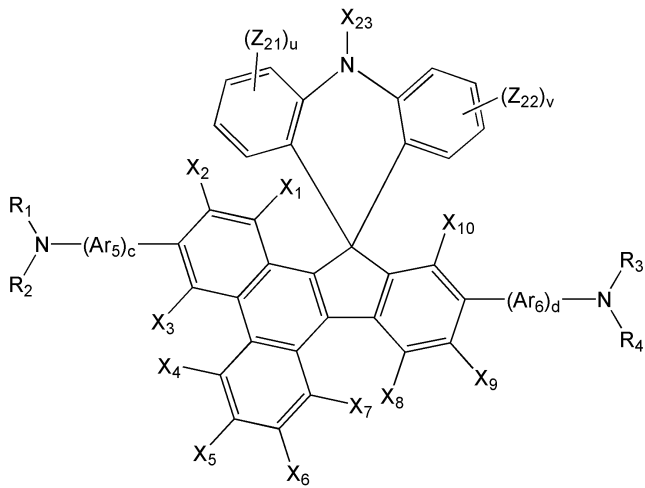
<화학식 1A>



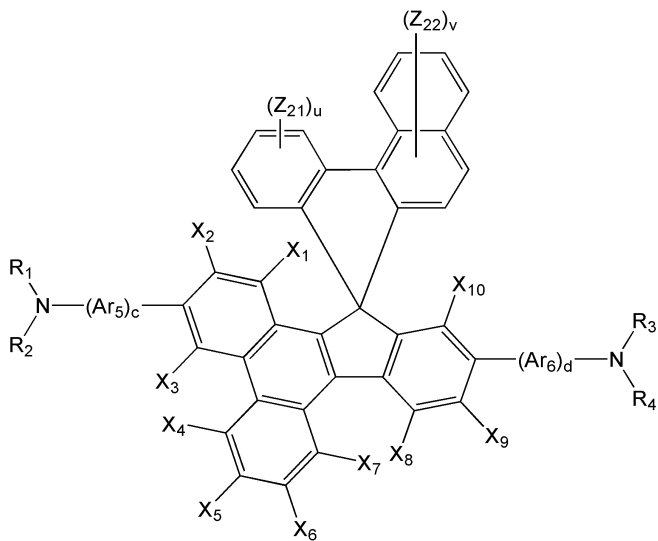
<화학식 1B>



<화학식 1C>



<화학식 1D>



상기 화학식 1A 내지 1D 중,

R₁ 내지 R₄, Ar₅, Ar₆, c, d 및 X₁ 내지 X₁₀에 대한 정의는 제1항에 기재된 바와 동일하고;

X₂₁ 내지 X₂₃에 대한 정의는 제1항에 기재된 바와 동일하고;

Z₂₁ 및 Z₂₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기이고;

u는 1 내지 4의 정수이고;

v는 1 내지 6의 정수이다.

청구항 10

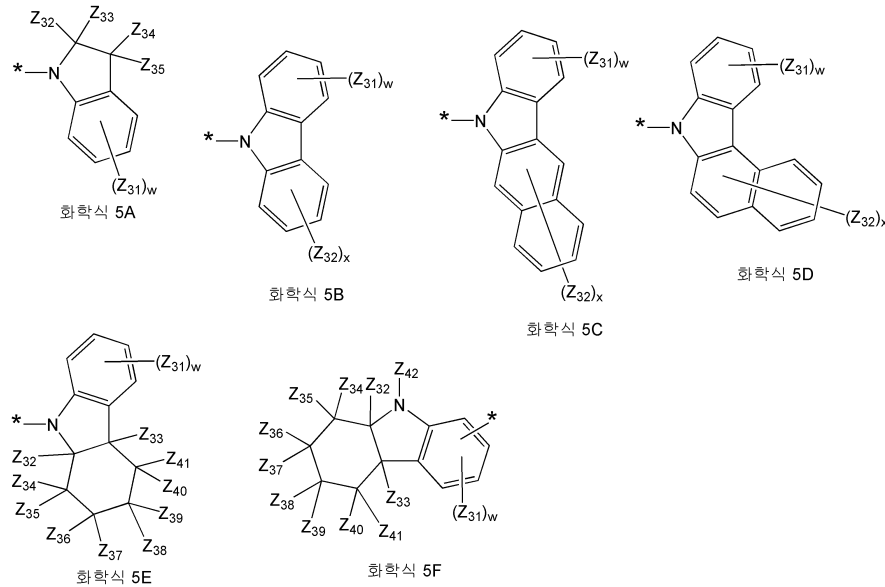
제1항에 있어서,

상기 R₁와 R₂ 및 R₃와 R₄ 중 하나 이상의 조합이 서로 연결되어 있는, 유기 발광 소자.

청구항 11

제1항에 있어서,

상기 화학식 1 중, -N(R₁)(R₂) 및 -N(R₃)(R₄) 중 하나 이상이 하기 화학식 5A 내지 5F 중 하나로 표시되는, 유기 발광 소자:



상기 화학식 5A 내지 5F 중,

Z₃₁ 내지 Z₄₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기 또는 C₆-C₆₀아릴기이고;

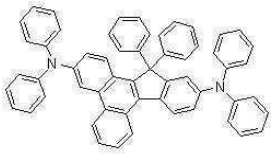
w 및 x는 서로 독립적으로, 1 내지 8의 정수이다.

청구항 12

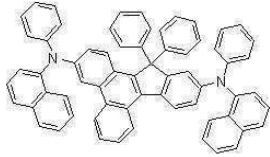
제1항에 있어서,

상기 축합환 화합물이 하기 화합물 1 내지 78 중 어느 하나인, 유기 발광 소자:

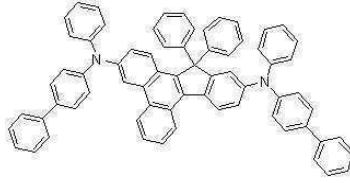
<화합물 1>



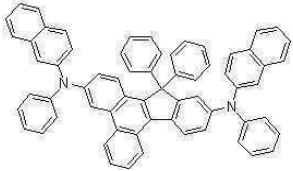
<화합물 2>



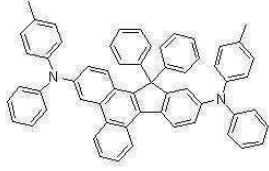
<화합물 3>



<화합물 4>



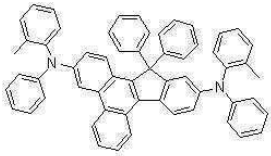
<화합물 5>



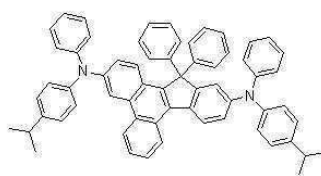
<화합물 6>



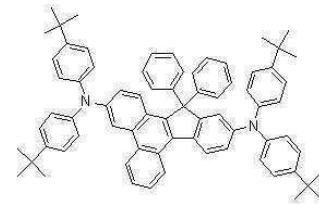
<화합물 7>



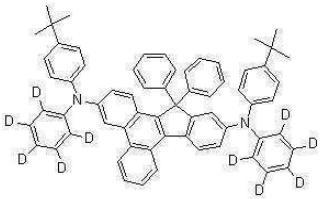
<화합물 8>



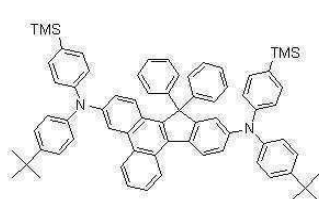
<화합물 9>



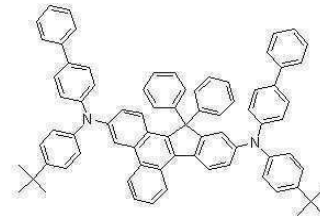
<화합물 10>



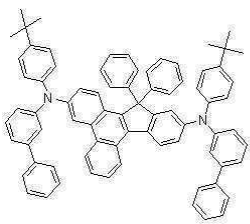
<화합물 11>



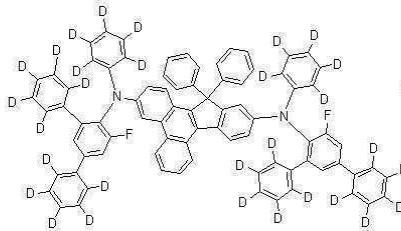
<화합물 12>



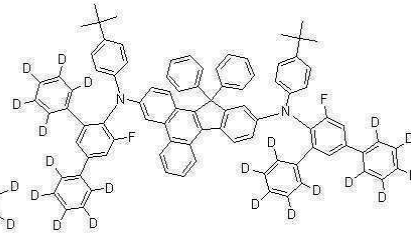
<화합물 13>



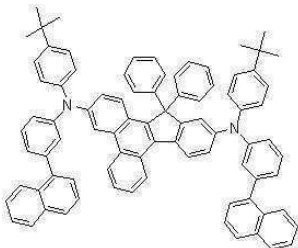
<화합물 14>



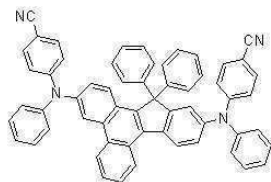
<화합물 15>



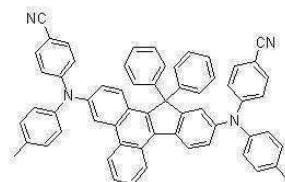
<화합물 16>



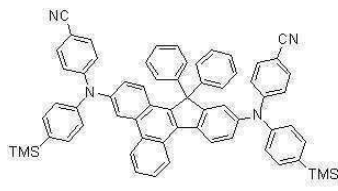
<화합물 17>



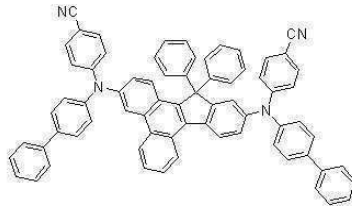
<화합물 18>



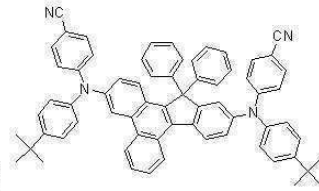
<화합물 19>



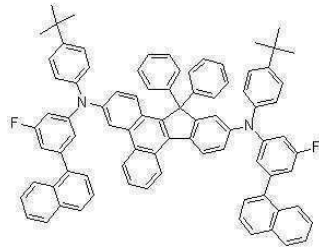
<화합물 20>



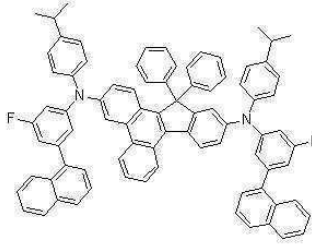
<화합물 21>



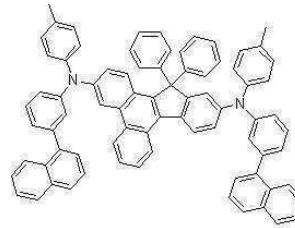
<화합물 22>



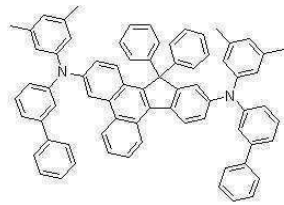
<화합물 23>



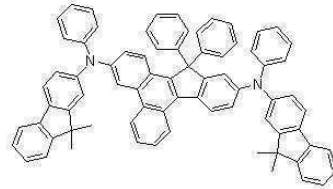
<화합물 24>



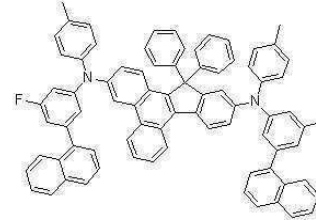
<화합물 25>



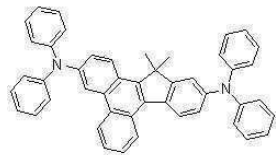
<화합물 26>



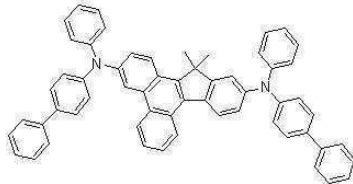
<화합물 27>



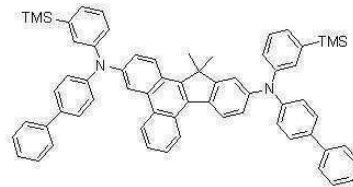
<화합물 28>



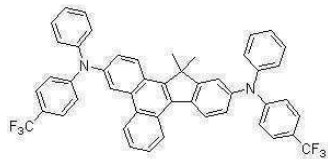
<화합물 29>



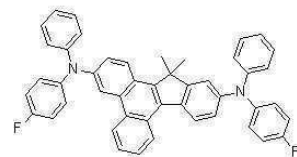
<화합물 30>



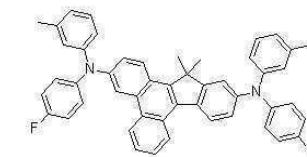
<화합물 31>



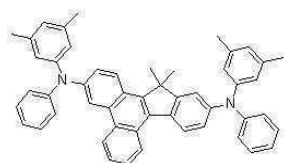
<화합물 32>



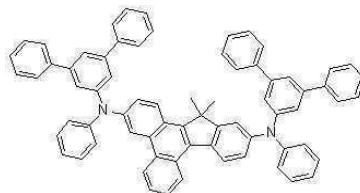
<화합물 33>



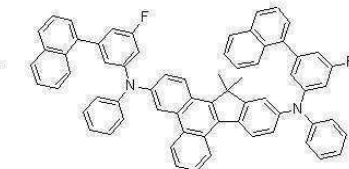
<화합물 34>



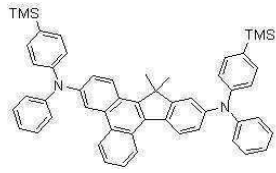
<화합물 35>



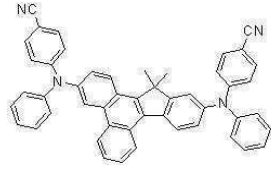
<화합물 36>



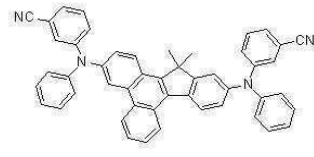
<화합물 37>



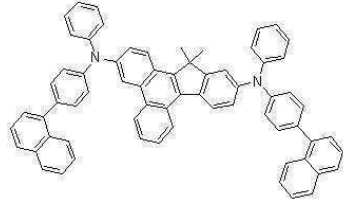
<화합물 38>



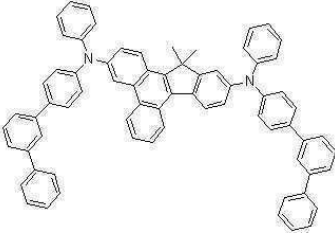
<화합물 39>



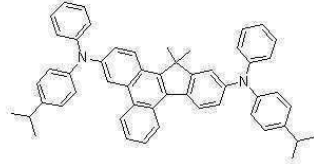
<화합물 40>



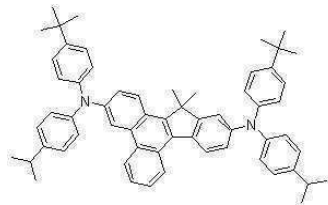
<화합물 41>



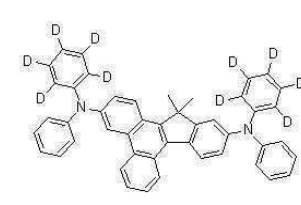
<화합물 42>



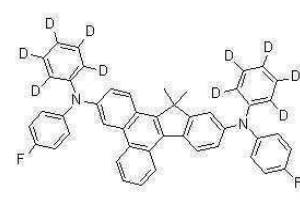
<화합물 43>



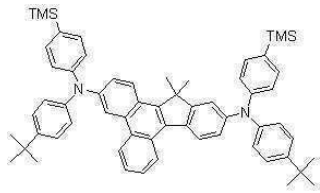
<화합물 44>



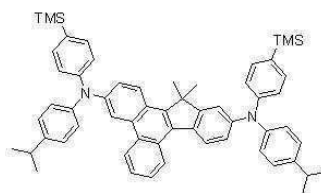
<화합물 45>



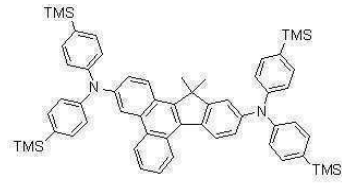
<화합물 46>



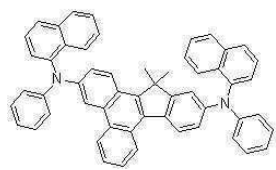
<화합물 47>



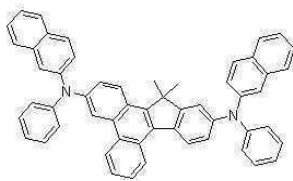
<화합물 48>



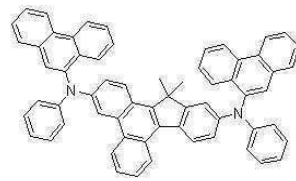
<화합물 49>



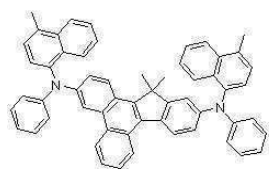
<화합물 50>



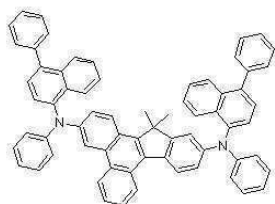
<화합물 51>



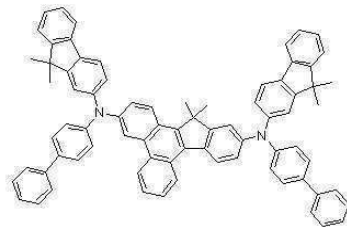
<화합물 52>



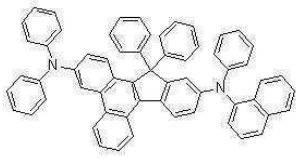
<화합물 53>



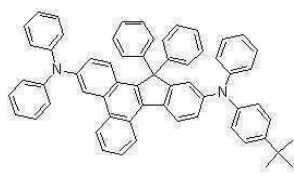
<화합물 54>



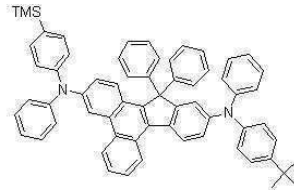
<화합물 55>



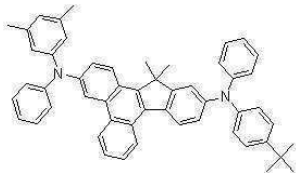
<화합물 56>



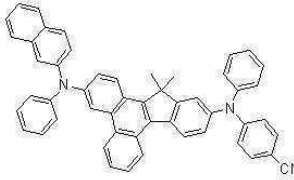
<화합물 57>



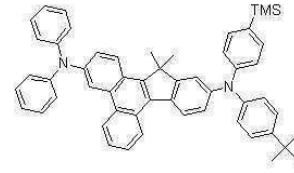
<화합물 58>



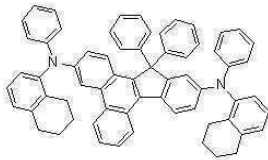
<화합물 59>



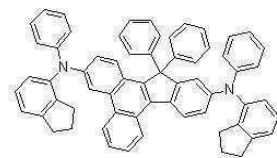
<화합물 60>



<화합물 61>



<화합물 62>



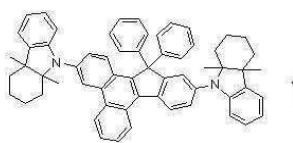
<화합물 63>



<화합물 64>



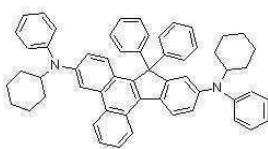
<화합물 65>



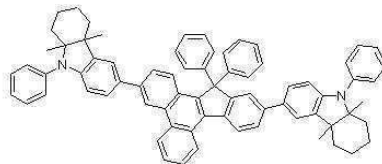
<화합물 66>



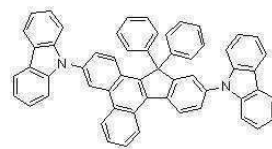
<화합물 67>



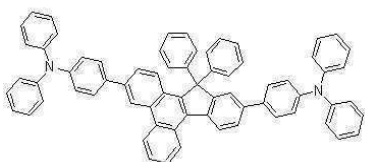
<화합물 68>



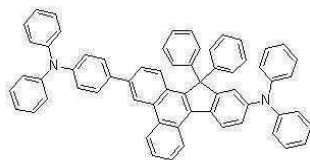
<화합물 69>



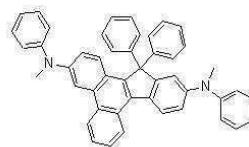
<화합물 70>



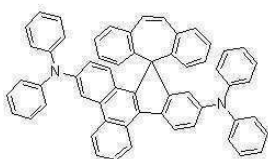
<화합물 71>



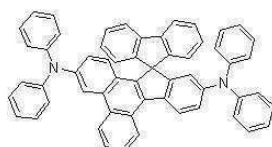
<화합물 72>



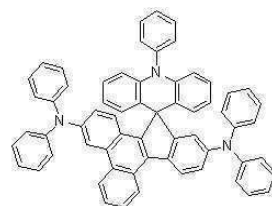
<화합물 73>



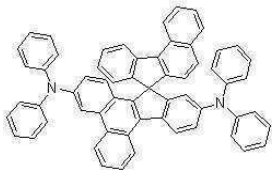
<화합물 74>



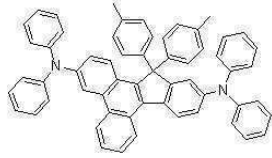
<화합물 75>



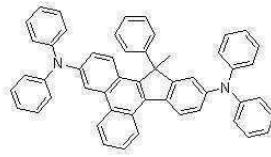
<화합물 76>



<화합물 77>



<화합물 78>



청구항 13

삭제

청구항 14

제1항에 있어서,

상기 유기층이, 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층, 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 15

삭제

청구항 16

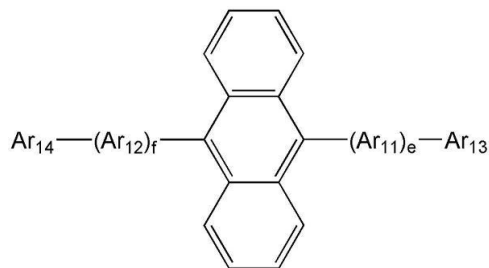
삭제

청구항 17

제1항에 있어서,

상기 호스트가 하기 화학식 60으로 표시되는 안트라센계 화합물인, 유기 발광 소자:

<화학식 60>



상기 화학식 60 중,

상기 Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴렌기이고;

상기 Ar₁₃ 및 Ar₁₄는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C₆-C₆₀아릴기이고;

e 및 f는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수이다.

청구항 18

제14항에 있어서,

상기 유기층이 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층이 전자 수송성 유기 화합물 및 금속-함유 물질을 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 19

제18항에 있어서,

상기 금속-함유 물질이 리튬 착체인, 유기 발광 소자.

청구항 20

제14항에 있어서,

상기 유기층이 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나가, 전하-생성 물질을 포함한, 유기 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 축합환 화합물 및 이를 포함한 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 기관 상부에 애노드가 형성되어 있고, 이 애노드 상부에 정공수송층, 발광층, 전자수송층 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

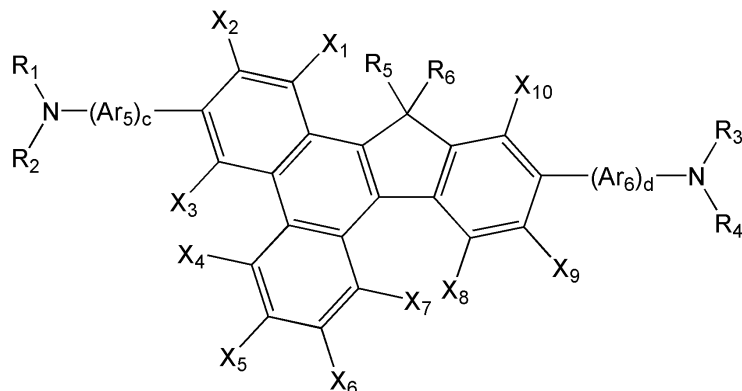
해결하려는 과제

[0006] 신규 구조를 갖는 축합환 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자를 제공한다.

과제의 해결 수단

[0007] 하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 제공된다:

[0008] <화학식 1>



[0009]

[0010] 상기 화학식 1 중,

- [0011] R_1 은 $-(Ar_1)_{a1}-(R_{11})_{b1}$ 으로 표시되고, R_2 는 $-(Ar_2)_{a2}-(R_{12})_{b2}$ 으로 표시되고, R_3 는 $-(Ar_3)_{a3}-(R_{13})_{b3}$ 로 표시되고, R_4 은 $-(Ar_4)_{a4}-(R_{14})_{b4}$ 로 표시되고;
- [0012] 상기 Ar_1 내지 Ar_4 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 방향족 연결기(aromatic linking group), 또는 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로방향족 연결기이고;
- [0013] 상기 Ar_5 및 Ar_6 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴렌기이고;
- [0014] R_5 , R_6 및 R_{11} 내지 R_{14} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 비공유 전자쌍, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 축합환기이고;
- [0015] 상기 a_1 내지 a_4 는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수이고;
- [0016] 상기 b_1 내지 b_4 는 서로 독립적으로 1 내지 5의 정수이고;
- [0017] c 및 d 는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수이고;
- [0018] X_1 내지 X_{10} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴기, $-Si(R_{21})(R_{22})(R_{23})$ 또는 $-N(R_{24})(R_{25})$ 이고;
- [0019] R_{21} 내지 R_{25} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴싸이오기, 또는 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴기이다.
- [0020] 또한, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상기 축합환 화합물을 단일 물질 또는 서로 다른 물질의 조합의 형태로 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

발명의 효과

- [0021] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 우수한 내열성 및 발광 특성을 제공할 수 있으므로, 이를 채용한 유기 발광 소자의 구동 전압, 효율, 휘도, 양자 효율, 수명 등이 향상될 수 있다.

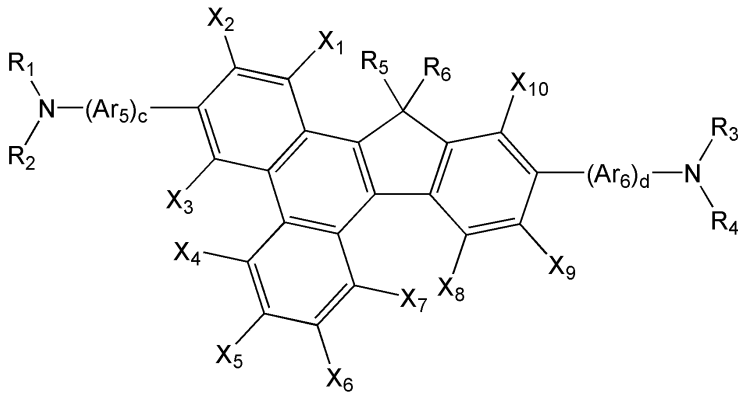
도면의 간단한 설명

- [0022] 도 1은 유기 발광 소자의 일 구현예를 개략적으로 나타낸 도면이다.
 도 2는 실시예 1 내지 4 및 비교예 1의 수명특성을 나타낸 그래프이다.
 도 3은 실시예 5 내지 8 및 비교예 2의 수명특성을 나타낸 그래프이다.
 도 4는 실시예 1 내지 4 및 비교예 1의 전류밀도 및 전압변화를 나타낸 그래프이다.
 도 5는 실시예 5 내지 8 비교예 2의 전류밀도 및 전압변화를 나타낸 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0023] 상기 축합환 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0024] <화학식 1>



[0025]

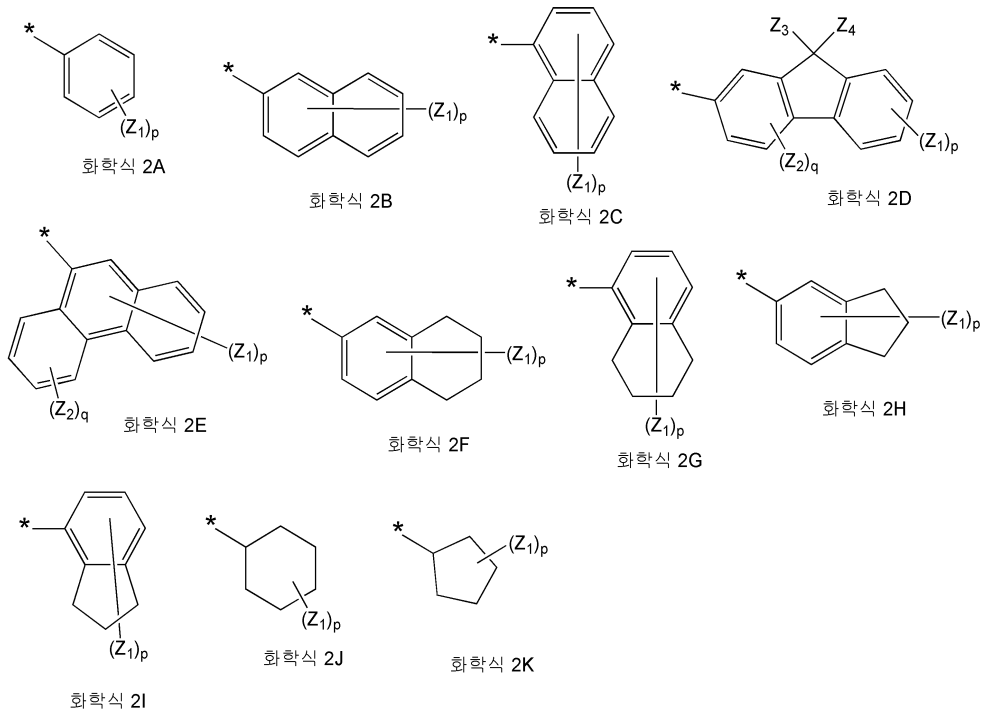
[0026] 상기 화학식 1 중, R₁은 -(Ar₁)_{a1}-(R₁₁)_{b1}으로 표시되고, R₂는 -(Ar₂)_{a2}-(R₁₂)_{b2}으로 표시되고, R₃는 -(Ar₃)_{a3}-(R₁₃)_{b3}로 표시되고, R₄은 -(Ar₄)_{a4}-(R₁₄)_{b4}로 표시된다.

[0027] 상기 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 비공유 전자쌍, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀축합환기일 수 있다.

[0028] 예를 들어, 상기 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 펜탈레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인데닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphthyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphthyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(flourenyl), 치환 또는 비치환된 페날레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 파이레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크라이세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 나프타세닐기(naphthacenyl), 치환 또는 비치환된 피세닐기(picenyl), 치환 또는 비치환된 페릴레닐기(perylenyl), 치환 또는 비치환된 펜타세닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl), 치환 또는 비치환된 시클로펜틸기, 치환 또는 비치환된 시클로헥실기, 치환 또는 비치환된 시클로헵틸기, 치환 또는 비치환된 디히드로나프틸기, 치환 또는 비치환된 테트라히드로나프틸기, 또는 치환 또는 비치환된 디히드로-인데닐기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0029] 일 구현예에 따르면, 상기 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; C₁-C₁₀알킬기; 페닐기; 나프틸기; 페난트레닐기; 플루오레닐기; 파이레닐기; 시클로펜틸기; 시클로헥실기; 테트라히드로나프틸기; 디히드로-인데닐기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃) 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 테트라히드로나프틸기 및 디히드로-인데닐기; 중 하나일 수 있다.

[0030] 예를 들어, 상기 R₁₁ 내지 R₁₄는 수소, 중수소, 또는 하기 화학식 2A 내지 2K 중 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0031]

[0032]

상기 화학식 2A 내지 2K 중, Z_1 내지 Z_4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C_1 - C_{60} 알킬기(예를 들면, C_1 - C_{10} 알킬기), C_2 - C_{60} 알케닐기(예를 들면, C_2 - C_{10} 알케닐기), C_2 - C_{60} 알키닐기(예를 들면, C_2 - C_{10} 알키닐기), C_1 - C_{60} 알콕시기(예를 들면, C_1 - C_{10} 알콕시기) 또는 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 이고; p 는 1 내지 11의 정수이고; q 는 1 내지 4의 정수이다. 여기서, 상기 Q_1 내지 Q_3 는 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기 또는 C_5 - C_{14} 아릴기일 수 있다.

[0033]

예를 들어, 상기 화학식 2A 내지 2K 중, Z_1 내지 Z_4 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 또는 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 이고; 상기 Q_1 내지 Q_3 는 서로 독립적으로, C_1 - C_{10} 알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기 등)일 수 있다.

[0034]

상기 화학식 2A 내지 2K 중, *는, a_1 내지 a_4 각각이 0일 경우에는 화학식 1 중 "N"과의 결합 사이트를 나타내는 것이고, a_1 내지 a_4 각각이 0이 아닐 경우에는, Ar_1 내지 Ar_4 각각과의 결합 사이트를 나타내는 것이다.

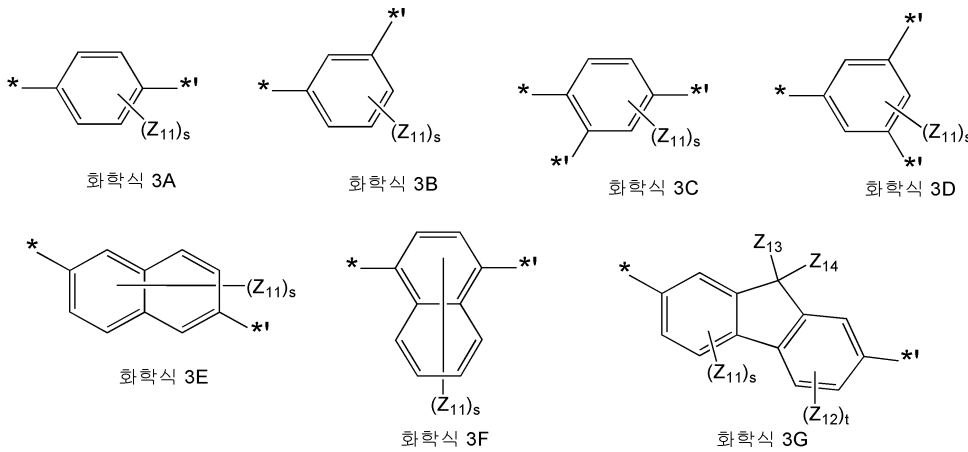
[0035]

상기 화학식 1 중, 상기 Ar_1 내지 Ar_4 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_5 - C_{60} 방향족 연결기(aromatic linking group), 또는 치환 또는 비치환된 C_2 - C_{60} 헤테로방향족 연결기이다. 상기 Ar_1 내지 Ar_4 은 이들과 결합되는 R_{11} 내지 R_{14} 각각의 개수에 따라, 2가 연결기(예를 들면, 하기 화학식 3A 참조), 3가 연결기(예를 들면, 하기 화학식 3C 참조), 4가 연결기, 5가 연결기 등일 수 있으며, 이는 상기 축합환 화합물의 구체예인 화합물 1 내지 78을 참조하여 용이하게 이해될 수 있는 것이다.

[0036]

상기 화학식 1 중, Ar_1 내지 Ar_4 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 벤젠 연결기, 치환 또는 비치환된 펜탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 인덴 연결기, 치환 또는 비치환된 나프탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 아줄렌 연결기, 치환 또는 비치환된 헵탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 인다센 연결기, 치환 또는 비치환된 아세나프탈렌 연결기, 치환 또는 비치환된 플루오렌 연결기, 치환 또는 비치환된 페날렌 연결기, 치환 또는 비치환된 페난트렌 연결기, 치환 또는 비치환된 안트라센 연결기, 치환 또는 비치환된 플루오란텐 연결기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌 연결기, 치환 또는 비치환된 파이렌 연결기, 치환 또는 비치환된 크라이센 연결기, 치환 또는 비치환된 나프타센 연결기, 치환 또는 비치환된 피센 연결기, 치환 또는 비치환된 페틸렌 연결기, 치환 또는 비치환된 펜타센 연결기, 또는 치환 또는 비치환된 헥사센 연결기일 수 있다.

[0037] 예를 들어, 상기 Ar₁ 내지 Ar₄은 서로 독립적으로, 하기 화학식 3A 내지 3G 중 어느 하나로 표시될 수 있다:



[0038]

[0039] 상기 화학식 3A 내지 3G 중, Z₁₁ 내지 Z₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기(예를 들면, C₁-C₁₀알킬기), C₂-C₆₀알케닐기(예를 들면, C₂-C₁₀알케닐기), C₂-C₆₀알키닐기(예를 들면, C₂-C₁₀알키닐기), C₁-C₆₀알콕시기(예를 들면, C₁-C₁₀알콕시기)이고; s는 1 내지 6의 정수이고; t는 1 내지 3의 정수일 수 있다.

[0040]

예를 들어, 상기 화학식 3A 내지 3G 중, Z₁₁ 내지 Z₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 또는 헥톡시기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0041]

상기 화학식 3A 내지 3G 중 *는 화학식 1 중 "N"과의 결합 사이트를 나타낸 것이고, *'은 R₁₁ 내지 R₁₄ 각각과의 결합 사이트를 나타낸 것이다.

[0042]

상기 화학식 1 중, 상기 a₁ 내지 a₄는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수이고, 상기 b₁ 내지 b₄는 서로 독립적으로 1 내지 5의 정수일 수 있다. 예를 들어, a₁ 내지 a₄는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고, b₁ 내지 b₄는 서로 독립적으로 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. a₁이 2 이상일 경우, 2 이상의 Ar₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, a₂이 2 이상일 경우, 2 이상의 Ar₂은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, a₃이 2 이상일 경우, 2 이상의 Ar₃은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, a₄가 2 이상일 경우, 2 이상의 Ar₄는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 또한, b₁이 2 이상일 경우 2 이상의 R₁₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, b₂이 2 이상일 경우 2 이상의 R₁₂은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, b₃가 2 이상일 경우 2 이상의 R₁₃은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, b₄가 2 이상일 경우 2 이상의 R₁₄는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0043]

상술한 바를 참조하여, 화학식 1 중, R₁ 내지 R₄가 서로 독립적으로, 선택될 수 있다. 예를 들어, 상기 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; C₁-C₁₀알킬기; 페닐기; 나프틸기; 페난트레닐기; 플루오레닐기; 파이레닐기; 시클로펜틸기; 시클로헥실기; 테트라히드로나프틸기; 디히드로-인테닐기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, -Si(Q₁)(Q₂)(Q₃) 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 페난트레닐기, 플루오레닐기, 파이레닐기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 테트라히드로나프틸기 및 디히드로-인테닐기; 중 하나이고(여기서, 상기 Q₁ 내지 Q₃는 서로 독립적으로, C₁-C₁₀알킬기 또는 C₅-C₁₄아릴기임); Ar₁ 내지 Ar₄는 서로 독립적으로, 상기 화학식 3A 내지 3G 중 어느 하나로 표시되도록 R₁ 내지 R₄가 서로 독립적으로 선택될 수 있다.

[0044]

또는, 상기 R₁₁ 내지 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소 및 상기 화학식 2A 내지 2K 중 어느 하나로

표시되고, Ar₁ 내지 Ar₄는 서로 독립적으로, 상기 화학식 3A 내지 3G 중 어느 하나로 표시되도록, R₁ 내지 R₄가 서로 독립적으로 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0045] 상기 화학식 1 중 R₁ 내지 R₄는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0046] 상기 화학식 1 중, 상기 Ar₅ 및 Ar₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아틸렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아틸렌기일 수 있다.

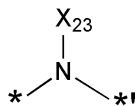
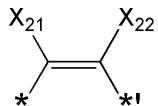
[0047] 예를 들어, 상기 Ar₅ 및 Ar₆은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인데닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기, 치환 또는 비치환된 헵탈레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페날레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기, 치환 또는 비치환된 파이레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기일 수 있다.

[0048] 예를 들어, 상기 R₅ 및 R₆은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; C₁-C₁₀알킬기; 페닐기; 나프틸기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기 등), C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기 등) 중 하나 이상으로 치환된 페닐기 및 나프틸기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0049] 상기 화학식 1 중, c 및 d는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수일 수 있다. 예를 들어, 상기 c 및 d는 서로 독립적으로 0 또는 1일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0050] 상기 화학식 1 중, 상기 R₅과 R₆는, 단일 결합, 하기 화학식 4A의 연결기, 또는 하기 화학식 4B의 연결기를 사이에 두고 서로 연결될 수 있다:

[0051] <화학식 4A> <화학식 4B>



[0052]

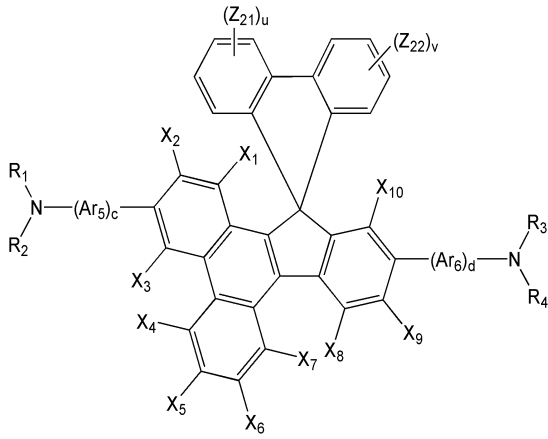
[0053] 상기 화학식 4A 및 4B 중, X₂₁ 내지 X₂₃은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₆₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아틸기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아틸옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아틸싸이오기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아틸기일 수 있다.

[0054] 예를 들어, 상기 화학식 4A 및 4B 중, X₂₁ 내지 X₂₃은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C₁-C₁₀알킬기; 페닐기; 나프틸기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기 등), C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기 등) 중 하나 이상으로 치환된 페닐기 및 나프틸기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0055] 상술한 바와 같이, 상기 화학식 1 중, 상기 R₅과 R₆이 단일 결합, 하기 화학식 4A의 연결기, 또는 하기 화학식

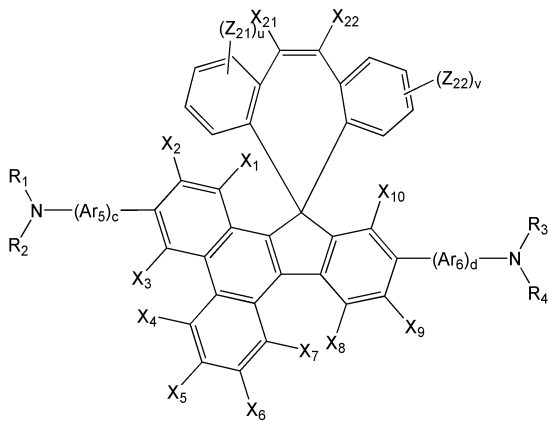
4B의 연결기를 사이에 두고 서로 연결될 경우, 상기 축합환 화합물은 하기 화학식 1A 내지 1D(화학식 1 중, R₅ 및 R₆ = 치환 또는 비치환된 페닐기) 중 어느 하나로 표시될 수 있다:

[0056] <화학식 1A>



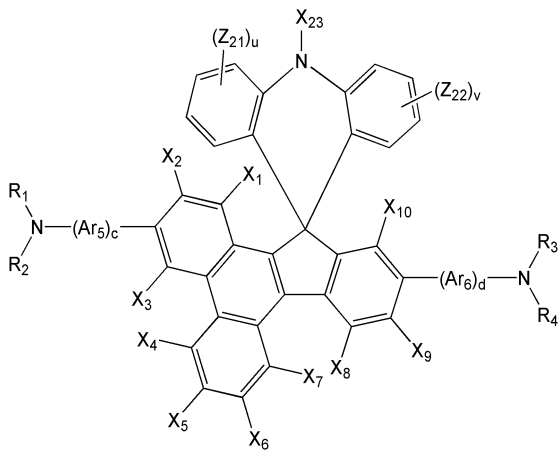
[0057]

[0058] <화학식 1B>



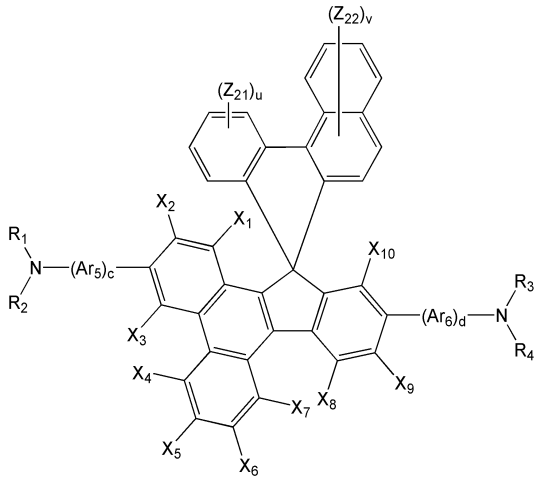
[0059]

[0060] <화학식 1C>



[0061]

[0062] <화학식 1D>

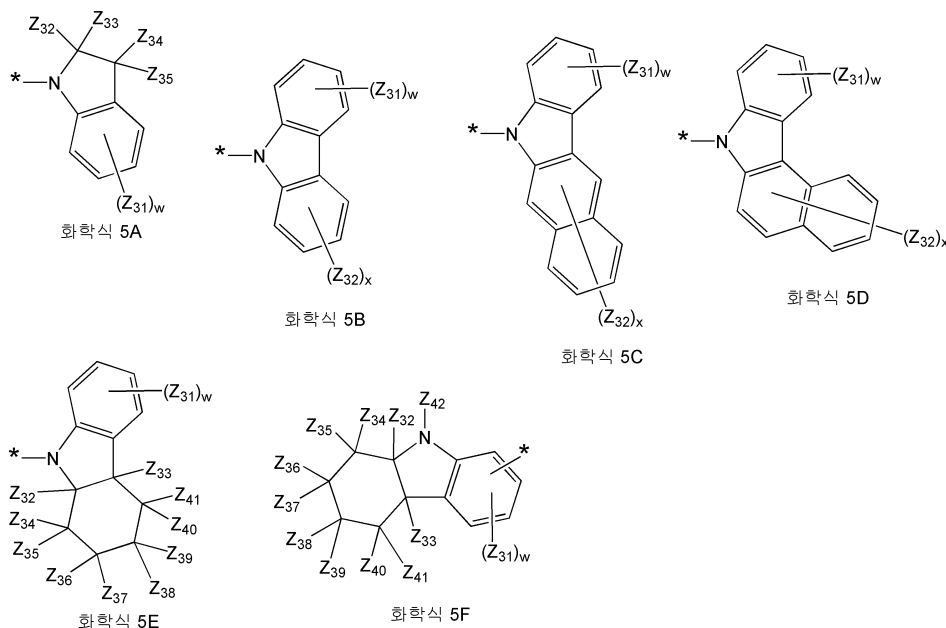


[0063]

[0064] 상기 화학식 1A 내지 1D 중, R₁ 내지 R₄, Ar₅, Ar₆, c, d, X₁ 내지 X₁₀ 및 X₂₁ 내지 X₂₃에 대한 정의는 상술한 바와 동일하고; Z₂₁ 및 Z₂₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 또는 C₁-C₆₀알콕시기이고; u는 1 내지 4의 정수이고; v는 1 내지 6의 정수일 수 있다.

[0065] 예를 들어, 상기 화학식 1A 내지 1D 중, Z₂₁ 및 Z₂₂는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 또는 페톡시기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0066] 상기 화학식 1 중, 상기 R₁와 R₂ 및 R₃와 R₄ 중 하나 이상의 조합은 서로 연결될 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1 중, -N(R₁)(R₂) 및 -N(R₃)(R₄) 중 하나 이상은 하기 화학식 5A 내지 5F 중 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



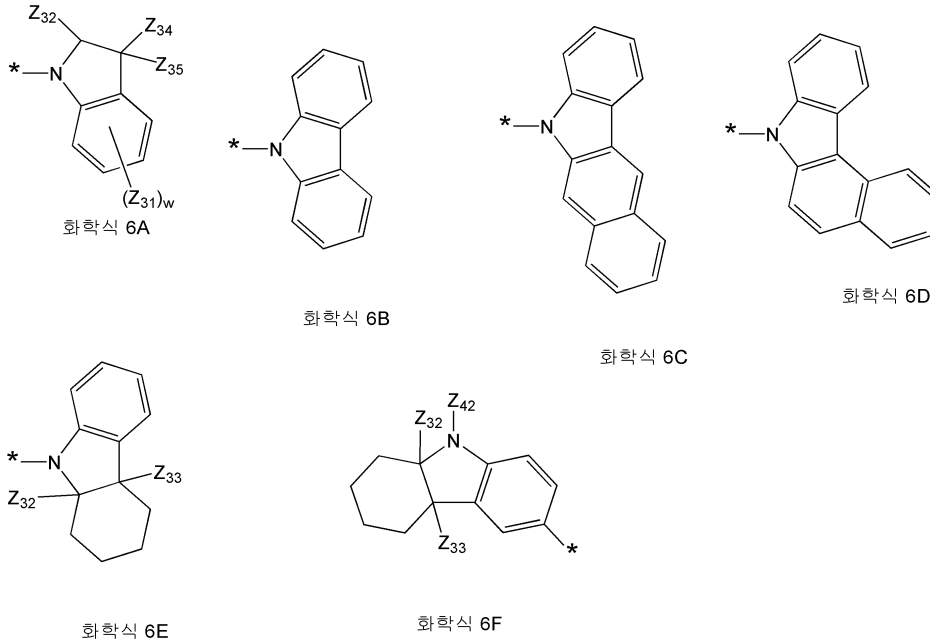
[0067]

[0068] 상기 화학식 5A 내지 5F 중, Z₃₁ 내지 Z₄₂는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기 또는 C₅-C₆₀아릴기이고; w 및 x는 서로

로 독립적으로, 1 내지 8의 정수일 수 있다.

[0069] 예를 들어, 상기 화학식 5A 내지 5F 중, Z_{31} 내지 Z_{42} 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기, 페닐기, 나프틸기 또는 안트릴기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0070] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, $-N(R_1)(R_2)$ 및 $-N(R_3)(R_4)$ 중 하나 이상은 하기 화학식 6A 내지 6F 중 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0071]

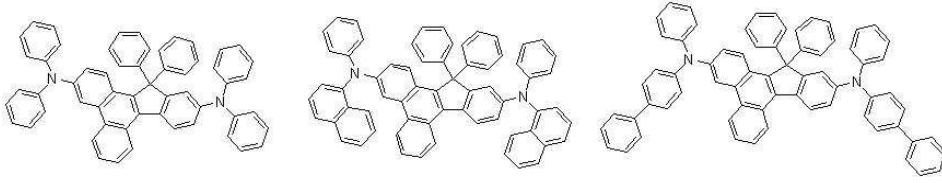
[0072] 상기 화학식 6A 내지 6F 중 Z_{31} , Z_{32} , Z_{33} , Z_{34} , Z_{35} 및 Z_{42} 에 대한 설명은 상술한 바를 참조한다. 예를 들어, 상기 Z_{31} , Z_{32} , Z_{33} , Z_{34} 및 Z_{35} 는 서로 독립적으로 수소 또는 C_1-C_{10} 알킬기일 수 있고, Z_{42} 는 페닐기, 나프틸기 또는 안트릴기일 수 있다.

[0073] 상기 화학식 1 중, X_1 내지 X_{10} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴기, $-Si(R_{21})(R_{22})(R_{23})$ 또는 $-N(R_{24})(R_{25})$ 이 되, 여기서, R_{21} 내지 R_{25} 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{60} 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{60} 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{60} 아릴싸이오기, 또는 치환 또는 비치환된 C_2-C_{60} 헤테로아릴기일 수 있다.

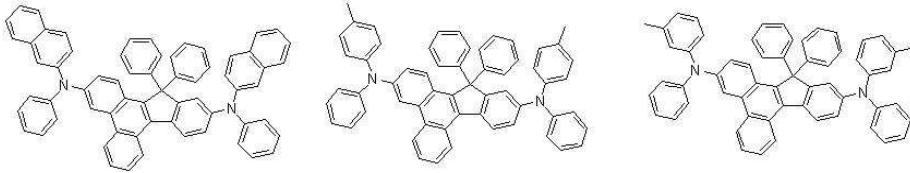
[0074] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, X_1 내지 X_{10} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 알킬기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{10} 알콕시기 또는 치환 또는 비치환된 C_5-C_{14} 아릴기일 수 있다. X_1 내지 X_{10} 중 인접한 2 이상의 치환기를 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[0075] 일 구현예에 따르면, 상기 축합환 화합물은, 하기 화합물 1 내지 78 중 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다(TMS = 트리메틸실릴):

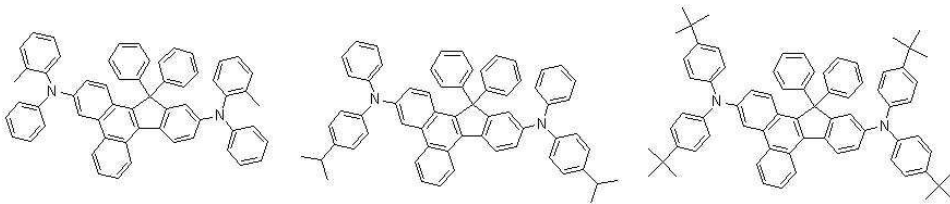
[0076] <화합물 1> <화합물 2> <화합물 3>



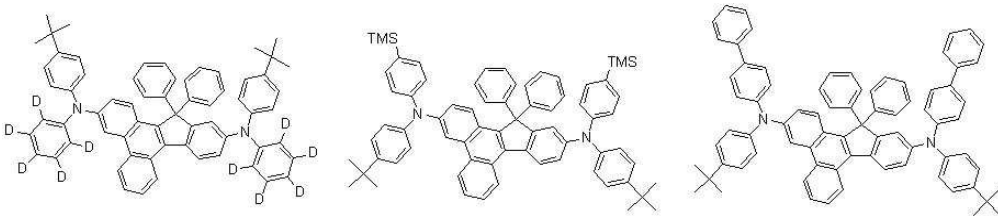
[0077]
[0078] <화합물 4> <화합물 5> <화합물 6>



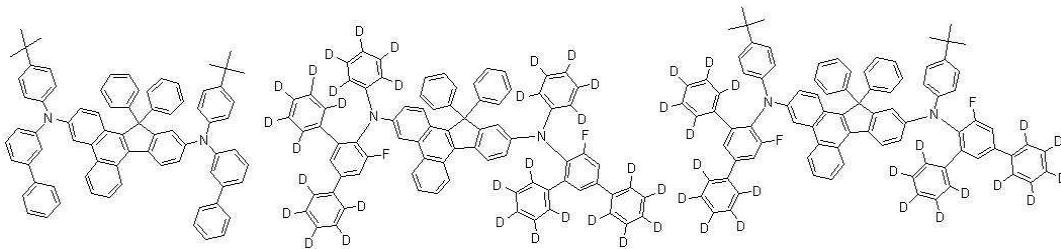
[0079]
[0080] <화합물 7> <화합물 8> <화합물 9>



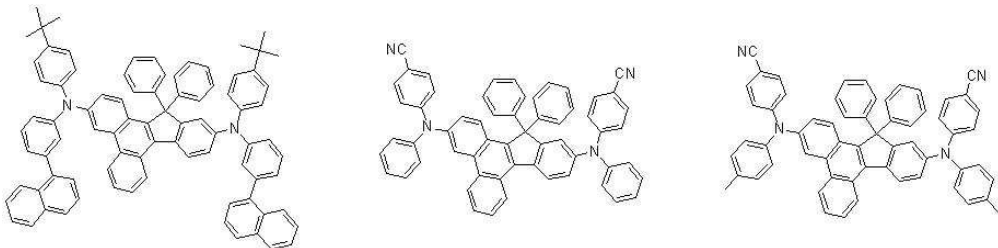
[0081]
[0082] <화합물 10> <화합물 11> <화합물 12>



[0083]
[0084] <화합물 13> <화합물 14> <화합물 15>

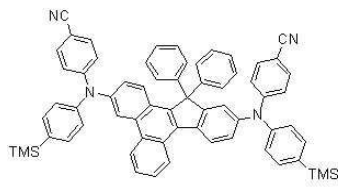


[0085]
[0086] <화합물 16> <화합물 17> <화합물 18>

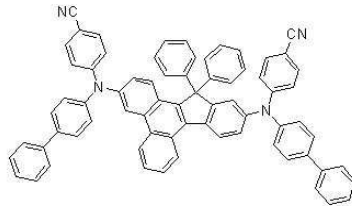


[0087]

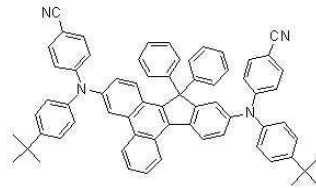
[0088] <화합물 19>



<화합물 20>

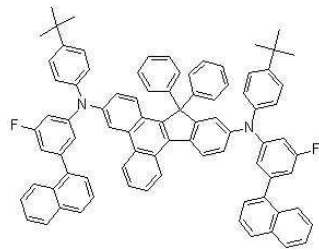


<화합물 21>

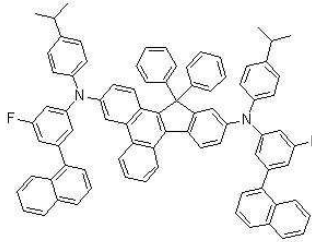


[0089]

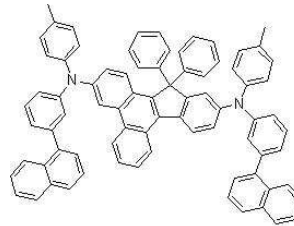
[0090] <화합물 22>



<화합물 23>

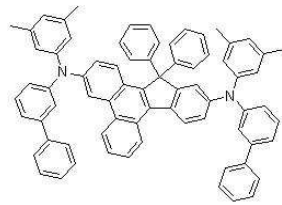


<화합물 24>

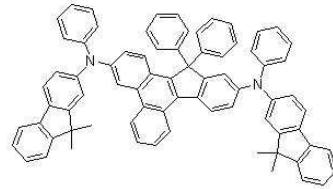


[0091]

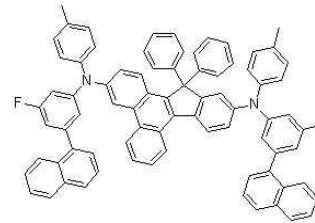
[0092] <화합물 25>



<화합물 26>

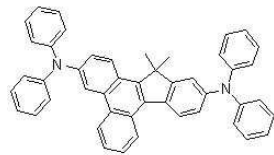


<화합물 27>

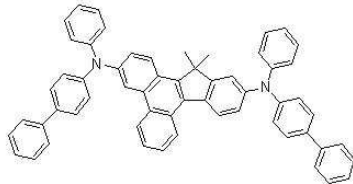


[0093]

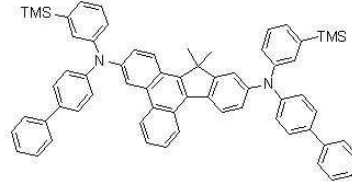
[0094] <화합물 28>



<화합물 29>

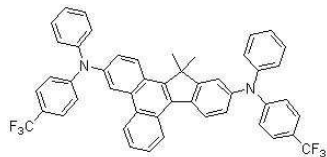


<화합물 30>

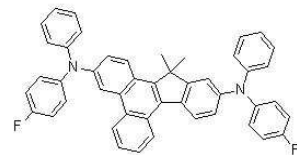


[0095]

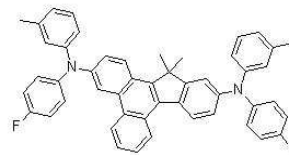
[0096] <화합물 31>



<화합물 32>

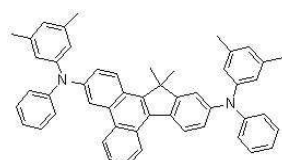


<화합물 33>

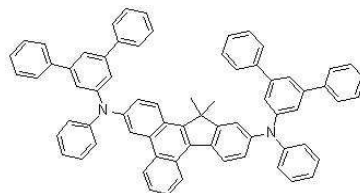


[0097]

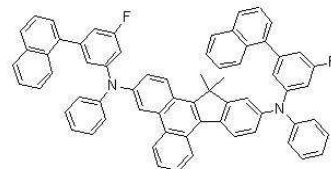
[0098] <화합물 34>



<화합물 35>



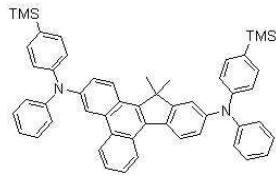
<화합물 36>



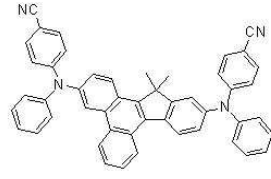
[0099]

[0100]

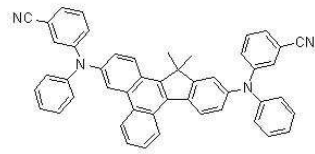
<화합물 37>



<화합물 38>



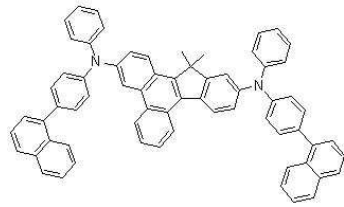
<화합물 39>



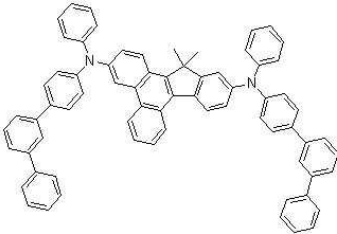
[0101]

[0102]

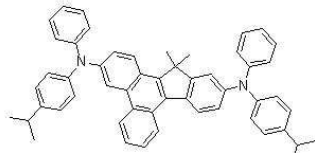
<화합물 40>



<화합물 41>



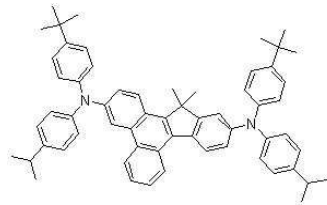
<화합물 42>



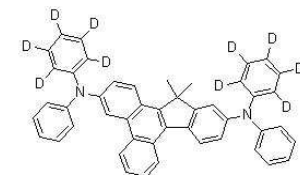
[0103]

[0104]

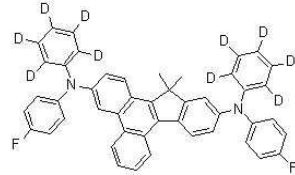
<화합물 43>



<화합물 44>



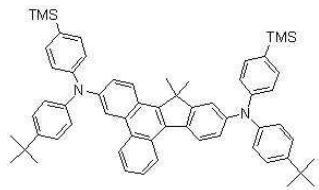
<화합물 45>



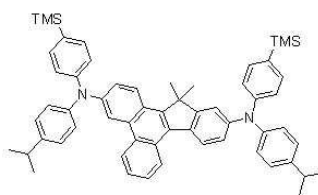
[0105]

[0106]

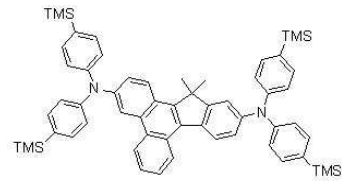
<화합물 46>



<화합물 47>



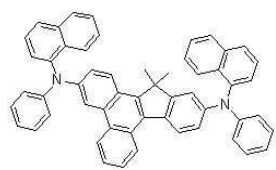
<화합물 48>



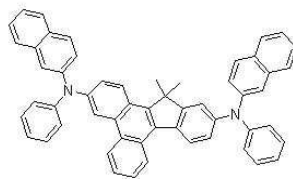
[0107]

[0108]

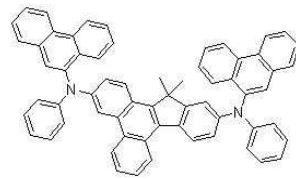
<화합물 49>



<화합물 50>



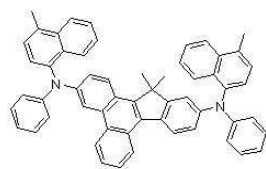
<화합물 51>



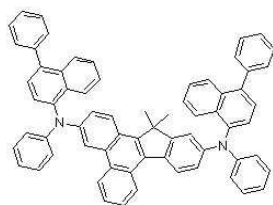
[0109]

[0110]

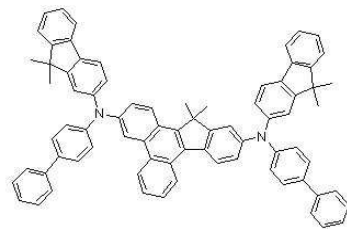
<화합물 52>



<화합물 53>



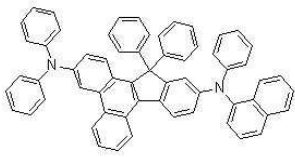
<화합물 54>



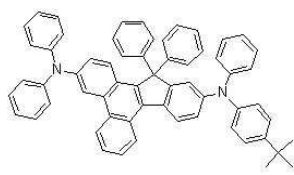
[0111]

[0112]

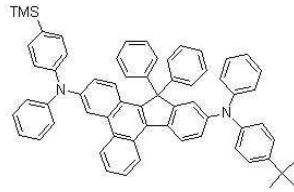
<화합물 55>



<화합물 56>



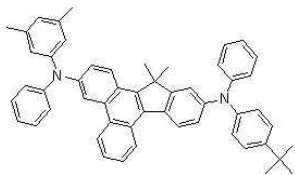
<화합물 57>



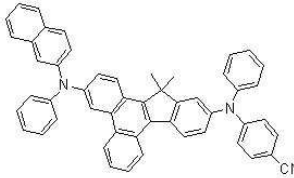
[0113]

[0114]

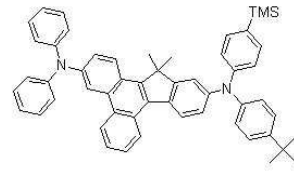
<화합물 58>



<화합물 59>



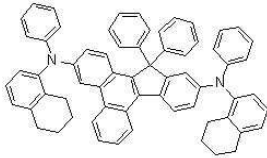
<화합물 60>



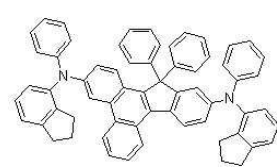
[0115]

[0116]

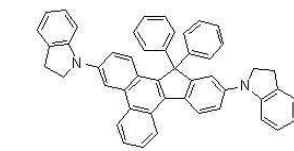
<화합물 61>



<화합물 62>



<화합물 63>



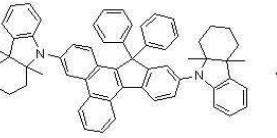
[0117]

[0118]

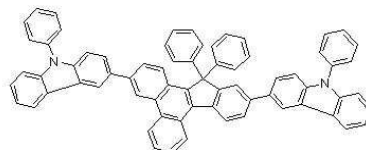
<화합물 64>



<화합물 65>



<화합물 66>



[0119]

[0120]

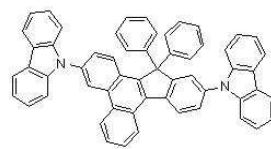
<화합물 67>



<화합물 68>



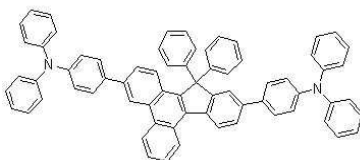
<화합물 69>



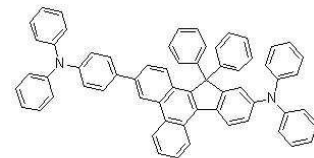
[0121]

[0122]

<화합물 70>



<화합물 71>



<화합물 72>



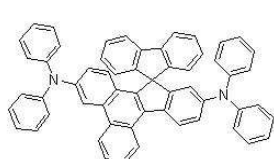
[0123]

[0124]

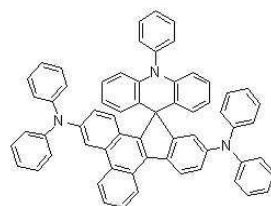
<화합물 73>



<화합물 74>

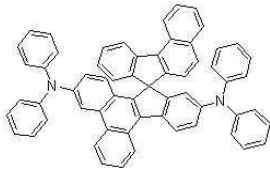


<화합물 75>

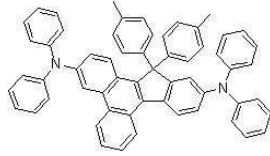


[0125]

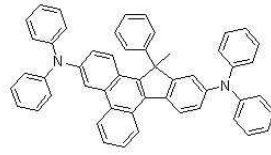
[0126] <화합물 76>



<화합물 77>



<화합물 78>



[0127]

[0128]

본 명세서 중, 비치환된 C₁-C₆₀알킬기(또는 C₁-C₆₀알킬기)의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있고, 치환된 C₁-C₆₀알킬기는 상기 비치환된 C₁-C₆₀알킬기 중 하나 이상의 수소가, 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C₁-C₆₀알킬기; C₂-C₆₀알케닐기; C₂-C₆₀알키닐기; C₁-C₆₀알콕시기; C₃-C₆₀시클로알킬기; C₅-C₆₀아릴기; C₅-C₆₀아릴옥시기; C₅-C₆₀아릴싸이오기; C₂-C₆₀헤테로아릴기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₆₀시클로알킬기, C₅-C₆₀아릴기, C₅-C₆₀아릴옥시기, C₅-C₆₀아릴싸이오기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기; -N(Q₁)(Q₂); 또는 -Si(Q₃)(Q₄)(Q₅);로 치환된 것이다(여기서, 상기 Q₁ 내지 Q₅은 서로 독립적으로, C₃-C₆₀시클로알킬기; C₅-C₆₀아릴기; C₅-C₆₀아릴옥시기; C₅-C₆₀아릴싸이오기; C₂-C₆₀헤테로아릴기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기, C₁-C₆₀알콕시기, C₃-C₆₀시클로알킬기, C₅-C₆₀아릴기, C₅-C₆₀아릴옥시기, C₅-C₆₀아릴싸이오기 및 C₂-C₆₀헤테로아릴기; 중 하나이다).

[0129]

본 명세서 중 비치환된 C₁-C₆₀알콕시기(또는 C₁-C₆₀알콕시기)는 -OA(단, A는 상술한 바와 같은 비치환된 C₁-C₆₀알킬기임)의 화학식을 가지며, 이의 구체적인 예로서, 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시, 등이 있고, 이들 알콕시기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0130]

본 명세서 중 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기(또는 C₂-C₆₀알케닐기)는 상기 비치환된 C₂-C₆₀알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 에테닐, 프로페닐, 부테닐 등이 있다. 이들 비치환된 C₂-C₆₀알케닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0131]

본 명세서 중 비치환된 C₂-C₆₀알키닐기(또는 C₂-C₆₀알키닐기)는 상기 정의된 바와 같은 C₂-C₆₀알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 에티닐(ethynyl), 프로피닐(propynyl), 등이 있다. 이들 알키닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0132]

본 명세서 중 비치환된 C₅-C₆₀아릴기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 5 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 5 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 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 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0133]

상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기의 예로는 페닐기, C₁-C₁₀알킬페닐기(예를 들면, 에틸페닐기), C₁-C₁₀알킬비페닐기(예를 들면, 에틸비페닐기), 할로페닐기(예를 들면, o-, m- 및 p-플루오로페닐기, 디클로로페닐기), 디시아노페닐기, 트리플루오로메톡시페닐기, o-, m-, 및 p-톨릴기, o-, m- 및 p-쿠메닐기, 메시틸기, 페녹시페닐기,

(α , α -디메틸벤젠)페닐기, (N,N'-디메틸)아미노페닐기, (N,N'-디페닐)아미노페닐기, 펜타레닐기, 인테닐기, 나프틸기, 할로나프틸기(예를 들면, 플루오로나프틸기), C₁-C₁₀알킬나프틸기(예를 들면, 메틸나프틸기), C₁-C₁₀알콕시나프틸기(예를 들면, 메톡시나프틸기), 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 안트라퀴놀일기, 메틸안트릴기, 페난트릴기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리세닐기, 에틸-크리세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 클로로페릴레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기 등을 들 수 있으며, 치환된 C₅-C₆₀아릴기의 예는 상술한 바와 같은 비치환된 C₅-C₆₀아릴기의 예와 상기 치환된 C₁-C₆₀알킬기의 치환기를 참조하여 용이하게 인식할 수 있다. 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기의 예를 참조하여 용이하게 인식될 수 있다.

[0134] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기는 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 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기는 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 C₁-C₆₀알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

[0135] 상기 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴기의 예에는, 피라졸일기, 이미다졸일기, 옥사졸일기, 티아졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조이미다졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 등을 들 수 있다. 상기 비치환된 C₂-C₆₀헤테로아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C₂-C₆₀아릴렌기의 예를 참조하여 용이하게 인식될 수 있다.

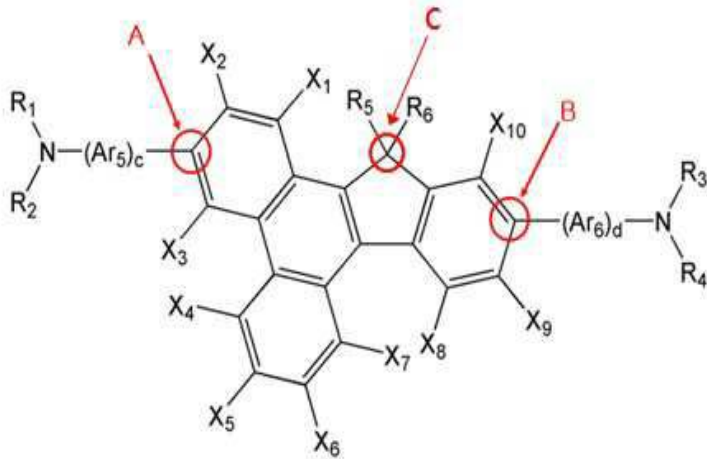
[0136] 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴옥시기는 -OA₂(여기서, A₂는 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기임)를 가리키고, 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴싸이오기는 -SA₃(여기서, A₃는 상기 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기임)를 가리킨다.

[0137] 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.

[0138] 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 우수한 내열성 및 발광 특성을 가질 수 있다. 구체적으로, 화학식 1의 A 위치의 탄소 및 B 위치의 탄소가, 선택적으로 Ar₅ 및 Ar₆을 사이에 두고, -N(R₁)(R₂) 및 -N(R₃)(R₄)와 결합되어 있다.

[0139] 일반적으로 본체 축합고리의 콘주게이션 길이가 길어지는 경우 밴드갭이 작아져 발광파장이 장파장 쪽으로 이동하게 되나, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 아민이 연결된 A 및 B의 탄소사이의 축합고리중 C 위치가 콘주게이션이 깨진 형태로서 콘주게이션으로 이어진 구조보다 넓은 밴드갭을 형성할 수 있다. 따라서, 상기 축합환 화합물은 적절한 콘주게이션 상태에 의한 넓은 밴드갭 효과에 의해 청색 발광물질로 유용하게 사용될 수 있다.

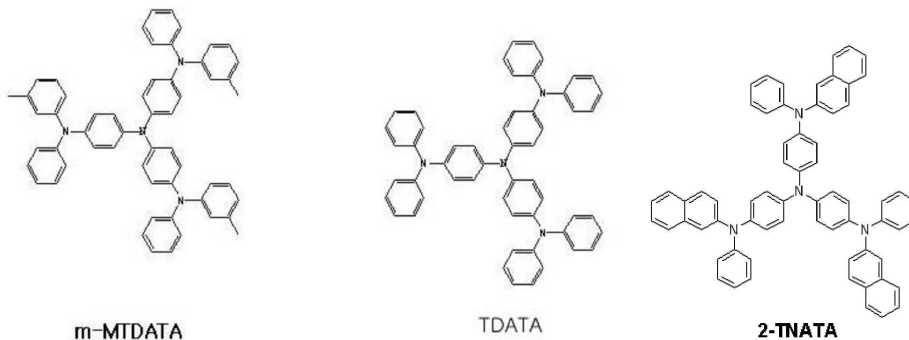
[0140] <화학식 1>



- [0141] 이러한 축합환 화합물을 한 쌍의 전극(애노드 및 캐소드) 사이에 채용한 유기 발광 소자의 구동시, 상기 축합환 화합물은 한 쌍의 전극 사이의 유기층 중, 유기층들 사이 또는 유기층과 전극 사이에 발생하는 줄 열에 대하여 높은 내열성을 가질 수 있는 바, 상기 축합환 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 우수한 구동 전압, 효율, 휘도, 수명 특성을 가질 수 있다.
- [0142] 상기 화학식 1의 축합환 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 축합환 화합물은 발광 재료로 사용될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0143] 따라서, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층을 포함하고, 상기 유기층이 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시된 축합환 화합물을 포함한 유기 발광 소자가 제공된다.
- [0144] 상기 축합환 화합물은 단일 물질 또는 서로 다른 물질의 조합의 형태로 상기 유기층에 포함될 수 있다. 예를 들어, 후술할 실시예 1의 유기 발광 소자는 상기 축합환 화합물로서 화합물 1(청색 도펀트의 역할을 함)만을 단일 물질 형태로 포함한다. 또는, 예를 들어, 상기 유기 발광 소자의 발광층은, 상기 축합환 화합물로서 화합물 1 및 3의 조합(청색 도펀트의 역할을 함)을 포함할 수 있는 등, 다양한 변형예가 가능하다. 본 명세서 중, "상기 유기층은 상기 축합환 화합물은 단일 물질 또는 서로 다른 물질의 혼합물의 형태로 포함한다"란 표현은 상술한 바를 참조하여, 당업자에게 용이하게 이해될 수 있다.
- [0145] 상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송 기능 및 전자 주입 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0146] 예를 들어, 상기 유기층은,
- [0147] 1) 정공 주입층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/전자 주입층; 또는
- [0148] 2) 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층/발광층/전자 수송층/전자 주입층;
- [0149] 의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0150] 본 명세서 중 "유기층"은 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일층 또는 복수의 층을 가리키는 용어로서, 유기물 외에 금속 착체 등도 포함할 수 있다.
- [0151] 예를 들어, 상기 유기층은 발광층을 포함하되, 상기 발광층에 상기 축합환 화합물이 존재할 수 있다. 즉, 상기 축합환 화합물은 발광 재료로 사용될 수 있다. 이 때, 상기 발광층은 호스트를 더 포함하고, 상기 발광층에 포함된 축합환 화합물은 도펀트의 역할을 할 수 있다.
- [0152] 상기 발광층은 적색, 녹색 또는 청색 발광층일 수 있다. 예를 들어, 상기 발광층은 청색 발광층일 수 있다. 이 때, 상기 축합환 화합물은 청색 도펀트로 사용되어, 고효율, 고휘도, 고색순도, 및 장수명을 갖는 유기 발광 소자를 제공할 수 있다.
- [0153] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참

조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다. 상기 유기 발광 소자는 기관(10), 제1전극(20), 정공 주입층(30), 정공 수송층(40), 발광층(50), 전자 수송층(60), 전자 주입층(70) 및 제2전극(80)을 차례로 구비한다.

- [0155] 먼저, 상기 기관(10)으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기관을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기관 또는 투명 플라스틱 기관을 사용할 수 있다.
- [0156] 상기 제1전극(20)은 기관 상부에 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(20)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록 제1전극용 물질은 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(20)은 반사형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 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(20)을 반사형 전극으로 형성할 수도 있다.
- [0157] 상기 제1전극(20)은 단일층 또는 2 이상의 다층 구조를 가질 수 있는 등, 다양한 변형예가 가능하다.
- [0158] 상기 제1전극(20) 상부로는 정공 주입층(30), 정공 수송층(40), 발광층(50), 전자 수송층(60) 및 전자 주입층(70)을 포함한 유기층이 형성되어 있다.
- [0159] 상기 정공 주입층(30)은 상기 제1전극(20) 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0160] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층(30)을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층(30)의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층(30)의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500℃, 진공도 약 10⁻⁸ 내지 약 10⁻³ torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0161] 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층(30)을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공 주입층(30)의 재료로서 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층(30)의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80℃ 내지 200℃의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0162] 정공 주입 물질로는 공지된 정공 주입 물질을 사용할 수 있는데, 공지된 정공 주입 물질로는, 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(CuPc) 등의 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA [4,4',4''-tris (3-methylphenylphenylamino) triphenylamine], TDATA, 2-TNATA, Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리아닐린/캠퍼술포산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트))등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.



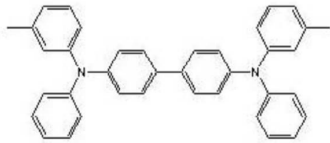
- [0163]
- [0164] 상기 정공 주입층(30)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 주입층(30)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스

러운 정도의 정공 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0165] 다음으로 상기 정공 주입층(30) 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공 수송층(40)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의하여 정공 수송층(40)을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층(30)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0166] 정공 수송 물질로는 공지된 정공 수송 물질을 사용할 수 있다. 공지된 정공 수송 재료로는, 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), TCTA(4,4',4''-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4''-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), NPD(N,N'-di-1-naphthyl-N,N'-diphenyl-1,1'-

biphenyl-4,4'diamine) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



TPD

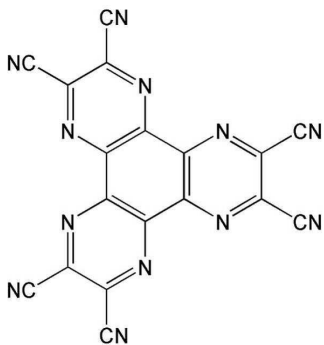
[0168] 상기 정공 수송층(40)의 두께는 약 50Å 내지 약 2000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1500Å일 수 있다. 상기 정공 수송층(40)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0170] 또는, 상술한 바와 같은 정공 주입층과 정공 수송층 대신, 정공 주입 기능과 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층을 형성할 수 있다. 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 물질은 공지된 재료 중에서 선택될 수 있다.

[0171] 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 공지된 정공 주입 물질, 공지된 정공 수송 물질 및/또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 물질 외에, 막의 도전성 등을 향상시키기 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.

[0172] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라사이아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라사이아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 200 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0173] <화합물 200>



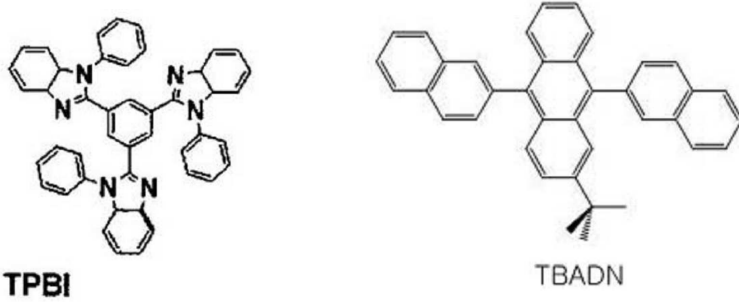
[0174] 상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층이 상기 전하-생성 물질을 더 포함할 경우, 상기 전하-생성 물질은 상기 층들 중에 균일하게(homogeneous) 분산되거나, 또는 불균일하게 분포될 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0176] 상기 정공 수송층(40) (또는, 선택적으로 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층) 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(50)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 발광층(50)을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반

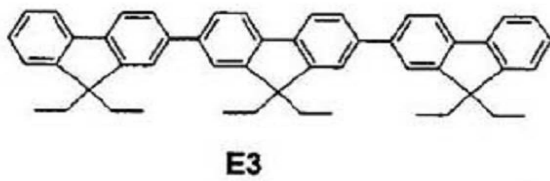
적으로 정공 주입층(30)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0177] 상기 발광층 물질로는 상기 화학식 1의 축합환 화합물 및/또는 공지의 발광 재료(호스트 및/또는 도펀트) 중 1종 이상의 물질을 사용할 수 있다. 예를 들어, 상기 발광층은 공지의 호스트를 포함하고, 도펀트로서, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함할 수 있다. 여기서, 상기 축합환 화합물은 청색 도펀트로서의 역할을 할 수 있다.

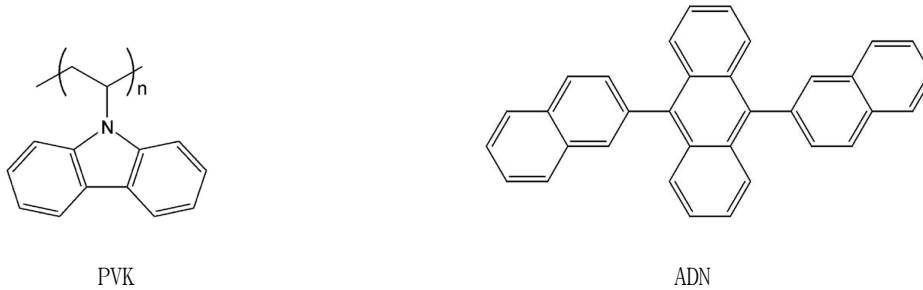
[0178] 공지의 호스트의 예로는 Alq₃, CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), PVK(폴리(n-비닐카바졸)), 9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센(ADN), TCTA, TPBI(1,3,5-트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene)), TBADN(3-tert-부틸-9,10-디(나프트-2-일) 안트라센), E3, DSA(디스티릴 아릴렌) 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0179]

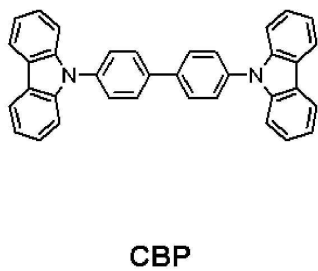


[0180]



[0181]

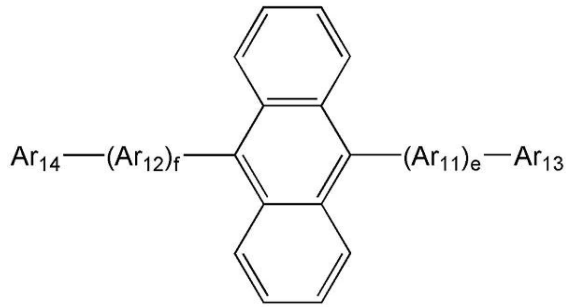
[0182]



[0183]

[0184] 또는, 상기 호스트는 하기 화학식 60으로 표시되는 안트라센계 화합물일 수 있다:

[0185] <화학식 60>



[0186]

[0187] 상기 화학식 60 중, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴렌기이고; 상기 Ar₁₃ 및 Ar₁₄는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₁-C₁₀알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C₅-C₆₀아릴기이고; e 및 f는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수일 수 있다.

[0188] 예를 들어, 상기 화학식 60 중, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 페닐렌기; 또는 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중 하나 이상으로 치환된 페닐렌기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

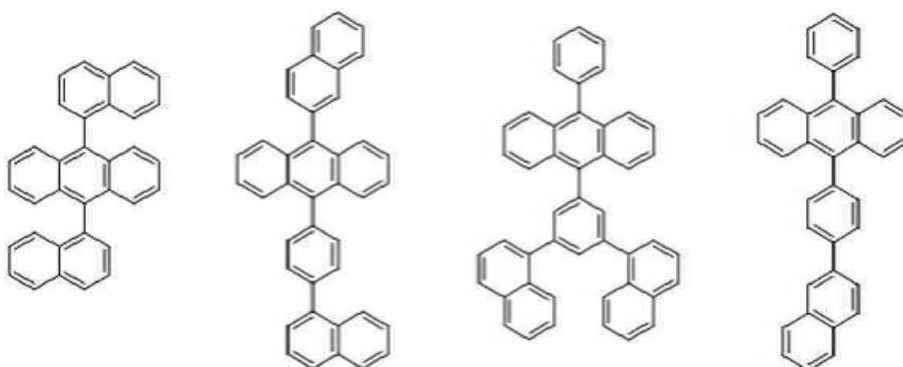
[0189] 상기 화학식 60 중 e 및 f는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0190] 상기 화학식 60 중, Ar₁₃ 및 Ar₁₄는 서로 독립적으로, 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중 하나 이상으로 치환된 C₁-C₁₀알킬기; 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 파이레닐기; 페난트레닐기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C₁-C₆₀알킬기, C₂-C₆₀알케닐기, C₂-C₆₀알키닐기 및 C₁-C₆₀알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 파이레닐기 및 페난트레닐기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0191] 예를 들어, 상기 화학식 60 중, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 페닐렌기; 또는 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중 하나 이상으로 치환된 페닐렌기;이고, e 및 f는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2이고; Ar₁₃ 및 Ar₁₄는 서로 독립적으로, 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중 하나 이상으로 치환된 C₁-C₁₀알킬기; 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 파이레닐기; 및 페난트레닐기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0192] 예를 들어, 상기 화학식 60으로 표시된 안트라센계 화합물은 하기 화합물 BH1 내지 BH39 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

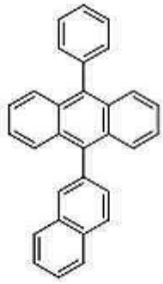
[0193] BH01 BH02 BH03 BH04



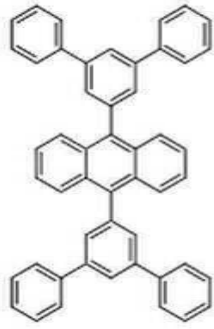
[0194]

[0195]

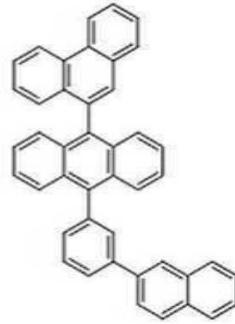
BH05



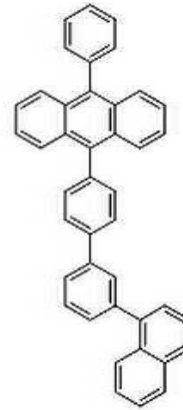
BH06



BH07



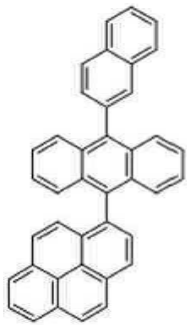
BH08



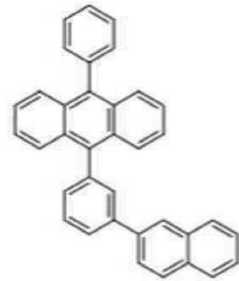
[0196]

[0197]

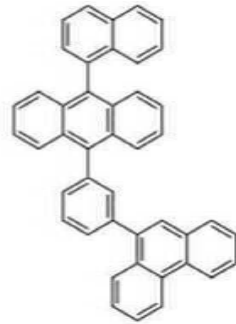
BH09



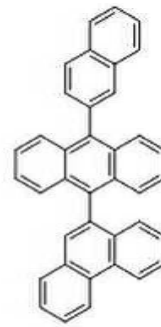
BH10



BH11



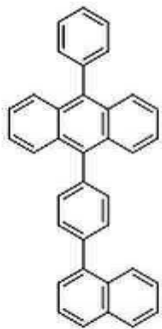
BH12



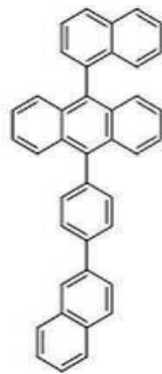
[0198]

[0199]

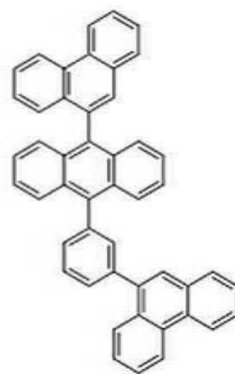
BH13



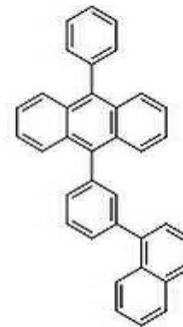
BH14



BH15

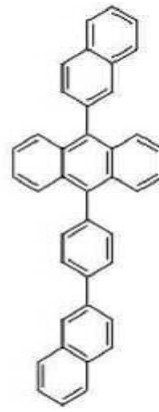
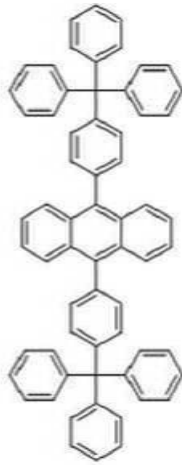
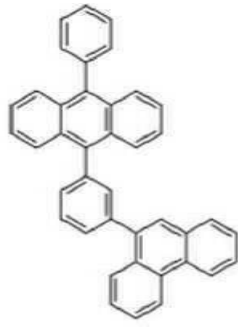
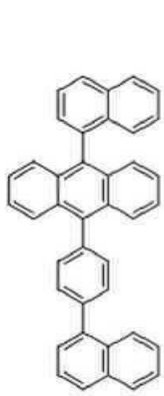


BH16



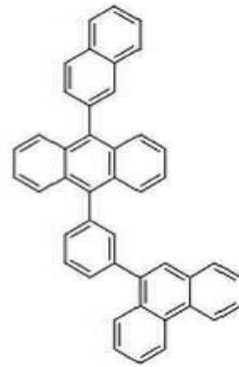
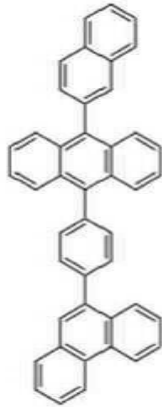
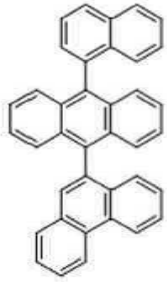
[0200]

[0201] BH17 BH18 BH19 BH20



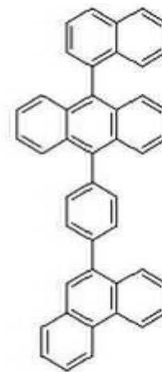
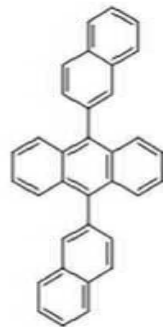
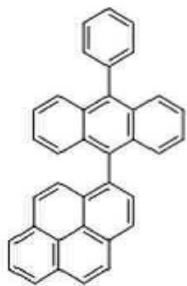
[0202]

[0203] BH21 BH22 BH23 BH24



[0204]

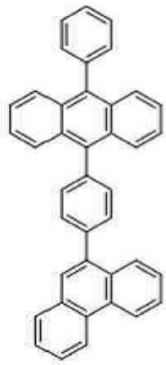
[0205] BH25 BH26 BH27 BH28



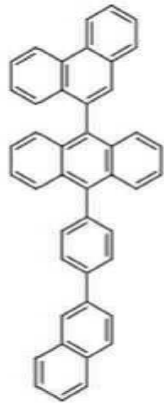
[0206]

[0207]

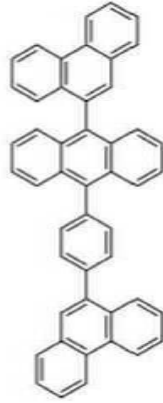
BH29



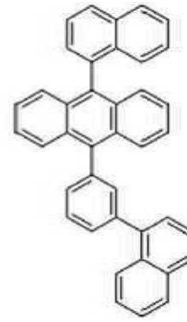
BH30



BH31



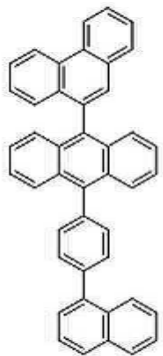
BH32



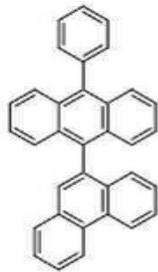
[0208]

[0209]

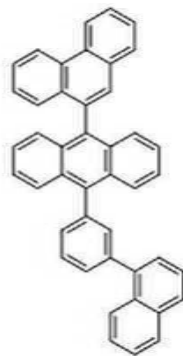
BH33



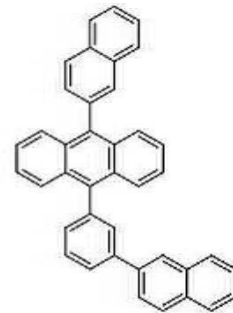
BH34



BH35



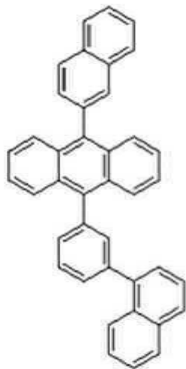
BH36



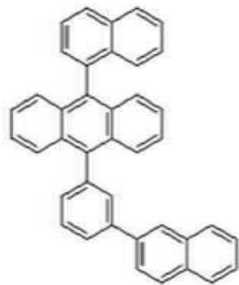
[0210]

[0211]

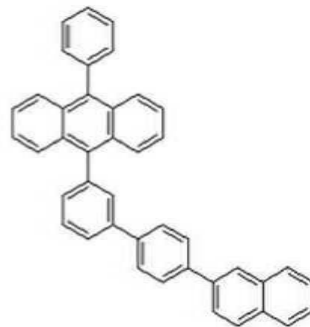
BH37



BH38



BH39



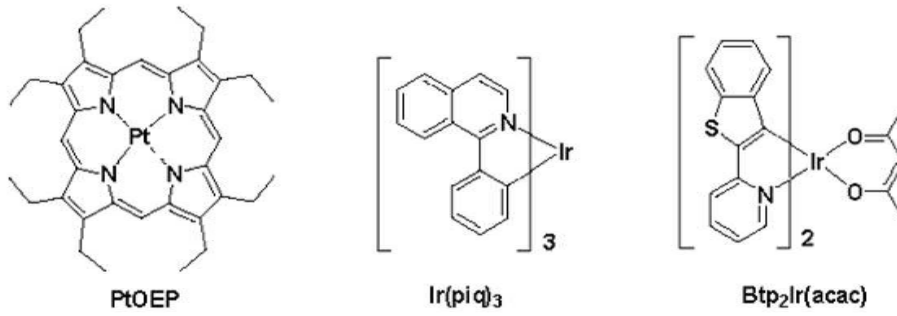
[0212]

[0213]

한편, 풀 컬러 유기 발광 소자를 형성하기 위하여, 적색 발광층 및 녹색 발광층을 추가로 패터닝할 수 있다.

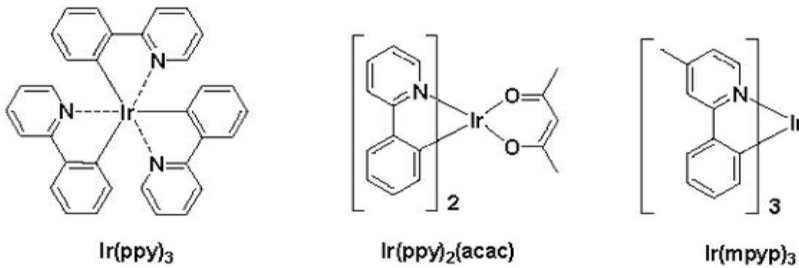
[0214]

이 때, 공지된 적색 도펀트로서 PtOEP, Ir(piq)₃, Btp₂Ir(acac) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

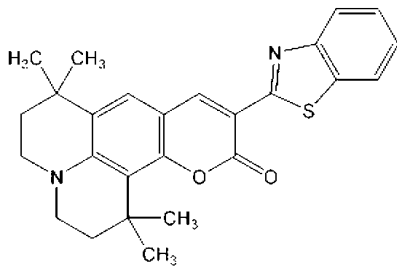


[0215]

[0216] 또한, 공지된 녹색 도펀트로서, Ir(ppy)₃ (ppy = 페닐피리딘), Ir(ppy)₂(acac), Ir(mppy)₃, C545T 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0217]



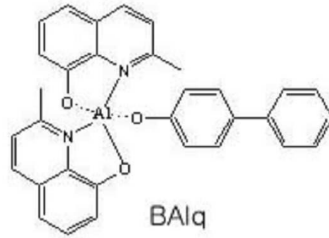
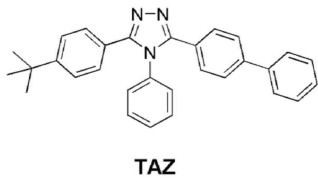
[0218]

[0219] C545T

[0220] 상기 발광층(50) 중 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0221] 상기 발광층(50)의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층(50)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

[0222] 다음으로 전자 수송층(60)을 진공증착법, 또는 스펀코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공증착법 및 스펀코팅법에 의해 전자 수송층(60)을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층(30)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 상기 전자 수송층 재료로는 전자 주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 공지의 전자 수송 물질을 사용할 수 있다. 공지의 전자 수송 물질의 예로는, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq₃), TAZ, Balq, 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: Bebq₂), ADN, 화합물 201, 화합물 202 등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

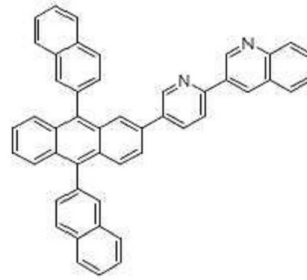
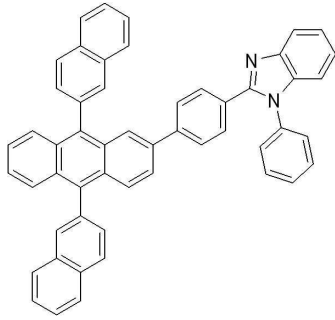


[0223]

[0224]

<화합물 201>

<화합물 202>



[0225]

[0226]

상기 전자 수송층(60)의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층(60)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0227]

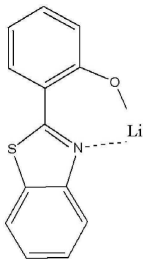
또는, 상기 전자 수송층(60)은 상술한 바와 같은 공지의 전자 수송성 유기 화합물 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0228]

상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체의 비제한적인 예로는, 리튬 퀴놀레이트(LiQ) 또는 하기 화합물 203 등을 들 수 있다:

[0229]

<화합물 203>



[0230]

[0231]

또한 전자 수송층(60) 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(70)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

[0232]

상기 전자 주입층 형성 재료로는 LiF, NaCl, CsF, Li₂O, 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.

[0233]

상기 전자 주입층(70)의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층(70)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0234]

전자 주입층(70) 상부로는 제2전극(80)이 구비되어 있다. 상기 제2전극(80)은 전자 주입 전극인 캐소드(Cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극 형성용 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.

[0235] 상기 유기 발광 소자는 디스플레이 장치 및 단색 또는 백색 조명 장치 등에 사용될 수 있다. 상기 디스플레이 장치 및 조명 장치는 하나 이상의 박막 트랜지스터를 더 구비할 수 있으며, 상기 유기 발광 소자의 제1전극은 상기 박막 트랜지스터에 포함된 소스 및 드레인 전극 중 하나와 컨택될 수 있다.

[0236] 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.

[0237] [실시예]

[0238] **합성예 1: 화합물 1의 합성**

[0239] **합성예 1-(1): 중간체 1-a의 합성**

[0240] 하기 반응식 1에 따라, 중간체 1-a를 합성하였다:

[0241] <반응식 1>



[0242]

[0243]

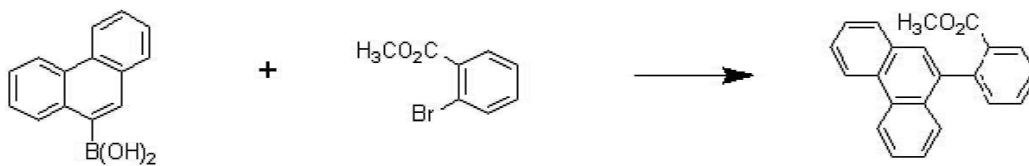
중간체 1-a

[0244] 테트라하이드로퓨란 500ml가 들어 있는 둥근 바닥 플라스크에 9-브로모 페난트렌 50g(194mmol)을 넣어준 후 질소 분위기 하에서 온도를 -78℃로 조절하였다. 30분 후 노르말 부틸리튬 146ml(233mmol)을 천천히 적가한 다음, 1시간 후 트리메틸보레이트 28.3g(274mmol)을 천천히 적가하고, 상온까지 승온시켰다. 상온에서 약 12시간 정도 교반 후 2N(노르말) 염산 수용액을 산이 될 때까지 반응 용액에 적가한 다음, 추출하여 유기층을 모아 감압증류하였다. 노르말 hex산을 가지고 재결정을 한 후 필터하여 건조한 결과, 흰색 고체의 중간체 1-a (35g, 수율 81%)를 수득하였다.

[0245] **합성예 1-(2): 중간체 1-b의 합성**

[0246] 하기 반응식 2에 따라 중간체 1-b를 합성하였다:

[0247] <반응식 2>



[0248]

[0249]

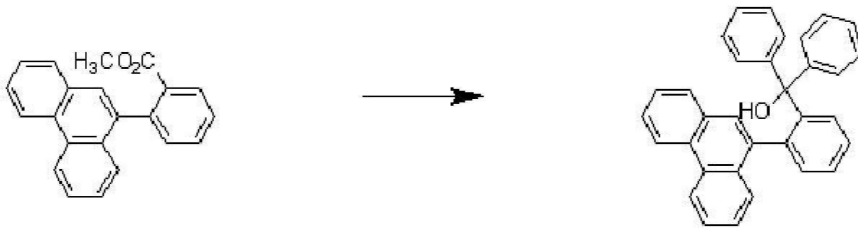
중간체 1-b

[0250] 둥근 바닥 플라스크에 메틸 2-브로모벤조에이트 24g (112mmol), 중간체 1-a 34.7g(0.156mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 {Pd(PPh₃)₄} 2.6 g (2 mmol), 탄산칼륨 30.9 g (223mmol), 물 50 mL, 톨루엔 125 mL 및 테트라하이드로퓨란 125 mL를 투입하고 12시간 동안 환류시켰다. 반응 종결 후 반응물을 층 분리하여 유기층을 감압 농축 후, 컬럼분리 하여 건조한 결과, 흰색 고체인 중간체 1-b(25 g, 수율 72%)를 수득하였다.

[0251] **합성예 1-(3): 중간체 1-c의 합성**

[0252] 하기 반응식 3에 따라, 중간체 1-c를 합성하였다:

[0253] <반응식 3>



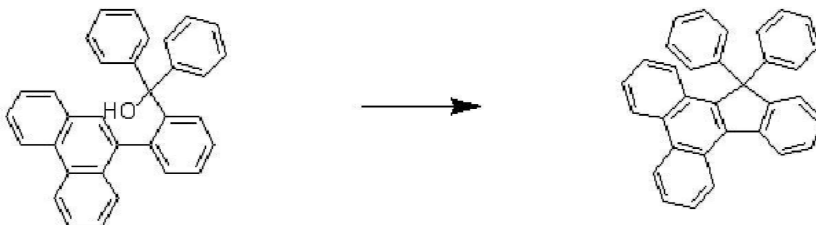
[0254]
 [0255] 중간체 1-c

[0256] 테트라하이드로퓨란 250ml가 들어 있는 둥근 바닥 플라스크에 중간체 1-b 25g(80mmol)을 넣어준 후, 질소 분위기 하에서 온도를 -78℃까지 내렸다. 30분 후 1.6M 페닐리튬 150ml(240mmol)을 천천히 적가하면서, 1시간 후 상온까지 승온시켰다. 상온에서 약 2 시간 정도 교반 후 염화 암모니움 수용액을 적가한 다음, 추출하여 유기층을 모아 감압증류하였다. 노르말 헥산으로 재결정한 후 필터하여 건조한 결과, 흰색 고체인 중간체 1-c(29g, 수율 83%)를 수득하였다.

[0257] 합성예 1-(4): 중간체 1-d의 합성

[0258] 하기 반응식 4에 따라 중간체 1-d를 합성하였다:

[0259] <반응식 4>



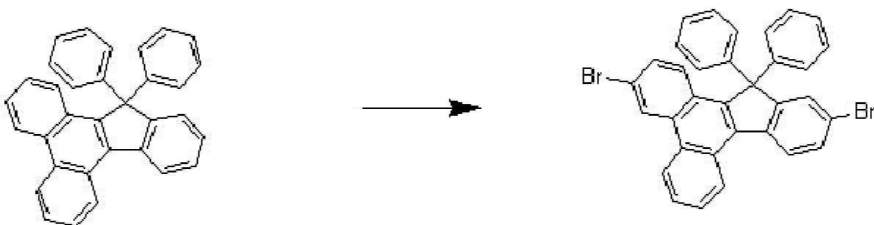
[0260]
 [0261] 중간체 1-d

[0262] 아세트산 290ml가 들어 있는 둥근 바닥 플라스크에 중간체 1-c 29g(66mmol)을 넣었다. 이후, 온도를 80℃까지 승온시킨 후 염산 수용액 1~2방울을 추가하고, 2시간 정도 환류시킨 다음, 온도를 상온으로 조정하였다. 이로부터 생성된 고체를 필터하여 건조시킨 결과, 흰색 고체인 중간체 1-d(27g, 수율 93%)의 흰색 고체를 수득하였다.

[0263] 합성예 1-(5): 중간체 1-e의 합성

[0264] 하기 반응식 5에 따라 중간체 1-e를 합성하였다:

[0265] <반응식 5>



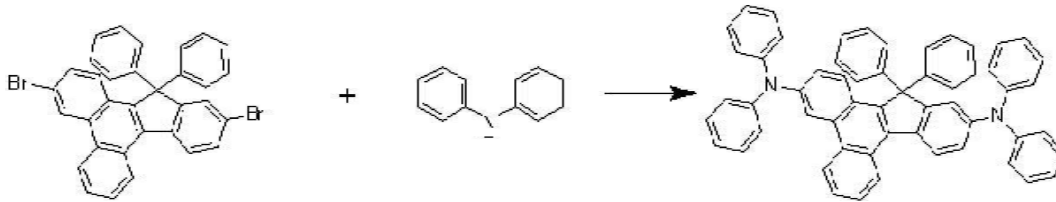
[0266]
 [0267] 중간체 1-e

[0268] 클로로포름 216ml가 들어 있는 둥근 바닥 플라스크에 중간체 1-d 27g(65mmol)을 넣어준 후 교반하였다. 브로민 28.9g(181mmol)을 클로로포름 54ml로 희석시킨 후 이를 천천히 적가하고, 48시간 동안 상온에서 교반시켰다. 이로부터 생성된 고체를 필터 후 건조시킨 결과, 흰색 고체인 중간체 1-e(27g, 수율 93%)를 수득하였다.

[0269] 합성예 1-(6): 화합물 1의 합성

[0270] 하기 반응식 7에 따라 화합물 1을 합성하였다:

[0271] <반응식 7>



[0272]

[0273]

화합물 1

[0274] 둥근 바닥 플라스크에 중간체 1-e 10g (17 mmol), 디페닐아민 7.6 g(45mmol), 팔라듐 아세테이트 {Pd(OAc)₂} 0.2 g (0.7 mmol), 소듐 터셔리 부톡사이드 6.7 g (69 mmol), 트리 터셔리 부틸포스핀 0.14 g (0.7 mmol) 및 톨루엔 100ml를 투입하고 100℃의 반응온도 하에서 2시간 동안 반응시켰다. 반응이 종결되면, 필터 후 여액을 농축시킨 후 컬럼크로마토그래피로 분리하였다. 톨루엔과 메탄올로 재결정하여 생성된 고체를 여과 후 건조한 결과, 화합물 1(5.7 g, 연노란색 고체, 수율 40%)을 수득하였다.

[0275] MS: m/z 752 [M]⁺

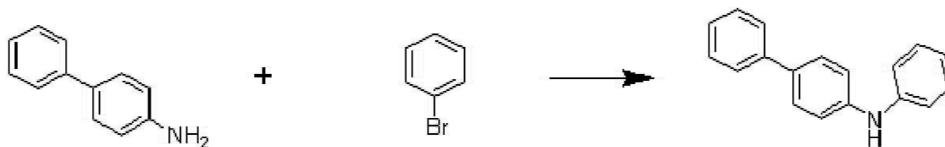
[0276] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.89 (d, 1H), 8.47(d, 1H), 8.40(s, 1H), 8.24(d, 1H), 7.73(t, 1H), 7.63(m, 2H), 7.27(m, 23H), 7.01(m, 10H)

[0277] **합성예 2: 화합물 3의 합성**

[0278] 합성예 2-(1): 중간체 2-a의 합성

[0279] 하기 반응식 8에 따라 중간체 2-a를 합성하였다:

[0280] <반응식 8>



[0281]

[0282]

중간체 2-a

[0283] 둥근 바닥 플라스크에 4-아미노 비페닐 16.3g (96 mmol), 브로모벤젠 15.8g(101 mmol), 팔라듐 아세테이트 0.32g(1.4mmol), 2,2-비스 다이페닐포스포노-1,1'-바이나프틸 0.9g(1.4mmol), 소듐 터셔리 부톡사이드 18.5g(193mmol)과 톨루엔 160ml를 투입 후 24시간 환류하였다. 상온으로 온도를 조절한 후, 필터하여 여액을 농축하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하였다. 이 후, 디클로로메탄과 메탄올로 재결정하여 여과 후 건조한 결과 흰색 고체인 중간체 2-a(15g, 수율 60%)를 수득하였다.

[0284] 합성예 2-(2): 화합물 3의 합성

[0285] 상기 합성예 1-(6)에서 디페닐 아민 대신 중간체 2-a를 사용한 것을 제외하고는, 합성예 1-(6)과 동일한 방법을 이용하여 화합물 3(3.7g, 연노란색 고체, 수율 31%)을 수득하였다.

[0286] MS: m/z 904[M]⁺

[0287] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.90(d, 1H), 8.51(m, 2H), 8.27(d, 1H), 7.75(t, 2H), 7.61(m, 6H), 7.48(m, 9H), 7.36(m, 9H), 7.23(m, 11H), 7.12(m, 7H)

[0288] **합성예 3: 화합물 9의 합성**

[0289] 합성예 2-(1)에서 4-아미노 비페닐 대신 4-터셔리-부틸아닐린을 사용하고, 브로모 벤젠 대신 1-브로모-4-터셔리

-부틸벤젠을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 9(4.7g, 연노란색 고체, 수율 39%)를 수득하였다.

[0290] MS: m/z 977[M]⁺

[0291] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.89(s, 1H), 8.49(d, 1H), 8.23(s, 1H), 7.68(m, 3H), 7.31(m, 21H), 7.05(m, 9H), 1.38(s, 18H), 1.37(s, 18H)

[0292] **합성예 4: 화합물 10의 합성**

[0293] 합성예 2-(1)에서 4-아미노 비페닐 대신 4-터셔리-부틸아닐린을 사용하고, 브로모 벤젠 대신 브로모 벤젠-d₅을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 10(2.7g, 연노란색 고체, 수율 24%)을 수득하였다.

[0294] MS: m/z 875[M]⁺

[0295] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.91(d, 1H), 8.45(m, 2H), 8.26(d, 1H), 7.67(m, 3H), 7.30(m, 15H), 7.07(m, 6H)

[0296] **합성예 5: 화합물 11의 합성**

[0297] 합성예 2-(1)에서 4-아미노 비페닐 대신 4-터셔리-부틸아닐린을 사용하고, 브로모 벤젠 대신 1-브로모-4-(트리 메틸실릴)벤젠을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여, 화합물 11(6.4g, 연노란색 고체, 수율 67%)을 수득하였다.

[0298] MS: m/z 1009[M]⁺

[0299] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.88(d, 1H), 8.51(d, 1H), 8.43(s, 1H), 8.24(d, 1H), 7.73(t, 1H), 7.64(m, 2H), 7.21(m, 29H), 1.36(s, 9H), 1.35(s, 9H), 0.30(s, 9H), 0.29(s, 9H)

[0300] **합성예 6: 화합물 12의 합성**

[0301] 합성예 2-(1)에서 브로모 벤젠 대신 브로모 벤젠 대신 1-브로모-4-터셔리-부틸벤젠을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여, 화합물 12(5.1g, 연노란색 고체, 수율 49%)를 수득하였다.

[0302] MS: m/z 1017[M]⁺

[0303] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.93(s, 1H), 8.50(m, 2H), 8.29(d, 1H), 7.40(m, 42H), 1.41(s, 9H), 1.40(s, 9H)

[0304] **합성예 7: 화합물 28의 합성**

[0305] 합성예 1-(3)에서 페닐 리튬 대신 메틸 마그네슘 브로마이드를 사용한 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 연노란색 고체인 화합물 28(3.3g, 연노란색 고체, 수율 38%)을 수득하였다.

[0306] MS: m/z 628[M]⁺

[0307] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.84(s, 1H), 8.53(m, 2H), 8.26(s, 2H), 7.42(m, 25H), 1.75(s, 6H)

[0308] **합성예 8: 화합물 29의 합성**

[0309] 합성예 1-(3)에서 페닐 리튬 대신 메틸 마그네슘 브로마이드를 사용하고, 합성예 1-(6)에서 디페닐 아민 대신

중간체 2-a를 사용한 것을 제외하고는, 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 29(3.3g, 연노란색 고체, 수율 38%)를 수득하였다.

[0310] MS: m/z 780[M]⁺

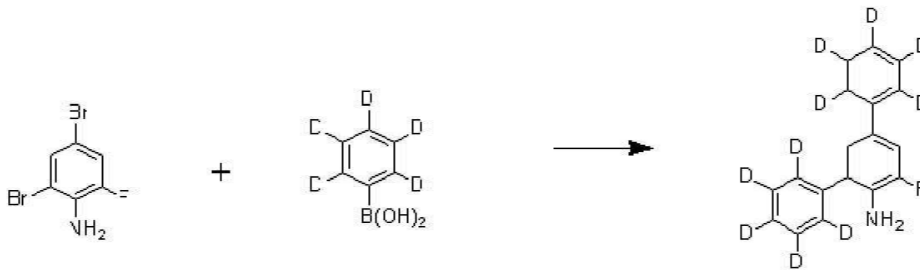
[0311] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.85(s, 1H), 8.55(m, 2H), 8.28(s, 2H), 7.47(m, 33H), 1.76(s, 6H)

[0312] **합성예 9: 화합물 14의 합성**

[0313] 합성예 9-(1): 중간체 9-a의 합성

[0314] 하기 반응식 9에 따라 중간체 9-a를 합성하였다:

[0315] <반응식 9>



[0316]

[0317]

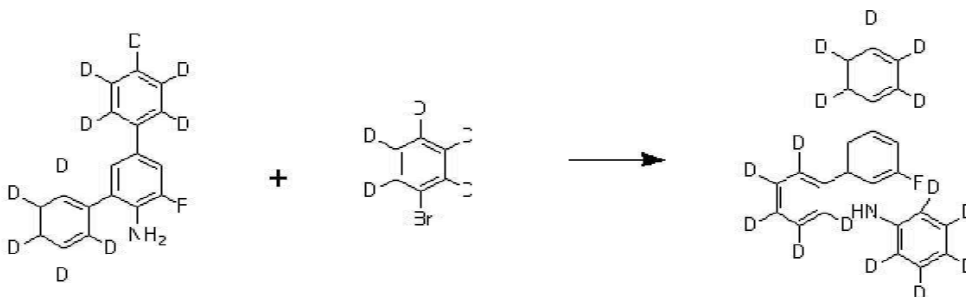
중간체 9-a

[0318] 1L 둥근 바닥 플라스크에 2,4-다이브로모-6-플루오로아닐린 30 g(111.56 mmol), 페닐보론산-d₅ 31.2 g(245.44 mmol), 탄산칼륨 61.9 g(446.27 mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 2.6 g(2.20 mmol), 물 120mL, 톨루엔 300ml 및 테트라하이드로퓨란 300mL를 투입하고 80°C의 반응온도 하에서 24시간 동안 반응시켰다. 반응이 종결 되면, 반응의 결과물을 층 분리하여 수층을 제거하고 유기층을 분리하여 감압농축한 후, 헥산과 디클로로메탄을 전개용매로 사용하여 칼럼크로마토그래피로 분리하여 얻은 고체를 건조한 결과, 흰색고체인 중간체 9-a(24.2 g 수율 79.4%)를 수득하였다.

[0319] 합성예 9-(2): 중간체 9-b의 합성

[0320] 하기 반응식 10에 따라 중간체 9-b를 합성하였다:

[0321] <반응식 10>



[0322]

[0323]

중간체 9-b

[0324] 둥근 바닥 플라스크에 중간체 9-b 15g (55 mmol), 브로모벤젠-d₅ 8.9g(55mmol), 팔라듐 아세테이트 0.25g(1.1mmol), 2,2-비스(다이페닐포스피노)-1,1'-바이나프틸 0.68g(1.1mmol), 소듐 터셔리 부톡사이드 10.6g(110mmol)과 톨루엔 150ml를 투입 후 24시간 환류하였다. 필터하여 여액을 농축하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하였다. 이 후, 디클로로메탄과 메탄올로 재결정하여 여과 후 건조한 결과 흰색 고체인 중간체 9-

b(14g, 수율 72%)를 수득하였다.

[0325] 합성예9-(3): 화합물 14의 합성

[0326] 합성예 1-(6) 중 디페닐아민 대신 상기 중간체 9-b를 사용하였다는 점을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 14(3.1g, 연노란색 고체, 수율 24%)를 수득하였다.

[0327] 합성예 1-6 과 동일한 방법을 이용하여 화합물 14(3.1g, 연노란색 고체, 수율 24%)를 수득하였다.

[0328] MS: m/z 1123[M]⁺

[0329] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.81(s, 1H), 8.35(d, 1H), 8.05(s, 2H), 7.71(t, 2H), 7.34(m, 16H), 6.84(d, 2H)

[0330] 합성예 10: 화합물 17의 합성

[0331] 합성예 2-(1) 중 4-아미노 비페닐 대신 3-시아노아닐린을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 17(4.3g, 연노란색 고체, 수율 42%)를 수득하였다.

[0332] MS: m/z 803[M]⁺

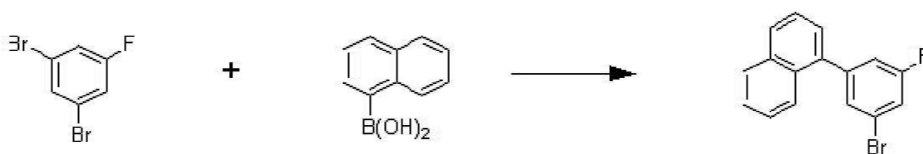
[0333] ¹H NMR (CDCl₃) δ 8.90(d, 1H), 8.51(m, 2H), 8.33(d, 1H), 7.74(m, 3H), 7.25(m, 29H), 6.93(d, 2H)

[0334] 합성예 11: 화합물 22의 합성

[0335] 합성예 11-(1): 중간체 11-a의 합성

[0336] 하기 반응식 11에 따라 중간체 11-a를 합성하였다:

[0337] <반응식 11>



[0338]

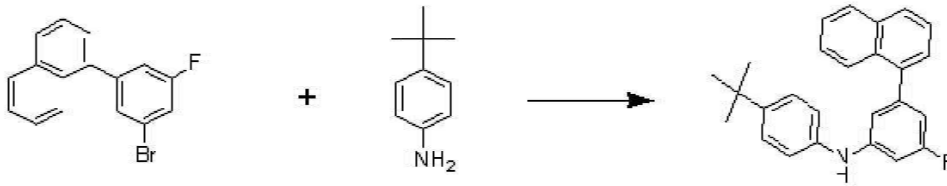
[0339] 중간체 11-a

[0340] 반응 용기에 중간체 1,3-디브로모-5-플루오로벤젠 50g (197mmol), 중간체 1-나프틸 보론산28.8(167mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 4.6g(3.9mmol), 포타슘카보네이트 54.4g(394mmol), 톨루엔 450ml과 물 150ml를 넣은 후 환류시켰다. 반응이 완료되면 추출하여 유기층을 감압증류하고, 컬럼크로마토그래피로 분리하여 투명한 액상의 중간체 11-a(25g, 수율42%)를 수득하였다.

[0341] 합성예 11-(2): 중간체 11-b의 합성

[0342] 하기 반응식 12에 따라 중간체 11-b를 합성하였다:

[0343] <반응식 12>



[0344]

[0345]

중간체 11-b

[0346]

상기 반응식 8에서 4-아미노 비페닐 대신 4-tert-부틸아닐린, 브로모벤젠 대신 중간체 15-a를 사용한 것을 제외하고 동일한 방법을 사용하여 중간체 11-b를 합성하였다.

[0347]

합성예 11-(3): 화합물 22의 합성

[0348]

합성예 1-(6) 중 디페닐아민 대신 상기 중간체 11-b을 사용하였다는 점을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 22(1.6g, 연노란색 고체, 수율 21%)를 수득하였다.

[0349]

합성예 1-6과 동일한 방법을 이용하여 화합물 22(1.6g, 연노란색 고체, 수율 21%)를 수득하였다.

[0350]

MS: m/z 1153[M]⁺

[0351]

¹H NMR (CDCl₃) δ 8.88(d, 1H), 8.56(m, 2H), 8.28(d, 1H), 7.88(m, 6H), 7.71(m, 3H), 7.30(m, 30H), 6.86(m, 5H), 1.35(s, 9H), 1.34(s, 9H)

[0352]

합성예 12: 화합물 26의 합성

[0353]

합성예 1-(6) 중 디페닐아민 대신 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluorene-2-amine)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 26(2.7g, 연노란색 고체, 수율 36%)를 수득하였다.

[0354]

MS: m/z 985[M]⁺

[0355]

¹H NMR (CDCl₃) δ 8.89(s, 1H), 8.37(m, 3H), 7.64(m, 7H), 7.24(m, 33H), 1.42(s, 6H), 1.36(s, 6H)

[0356]

합성예 13: 화합물 54의 합성

[0357]

합성예 2-(1) 중, 브로모벤젠 대신 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 54(3.3g, 연노란색 고체, 수율 37%)를 수득하였다.

[0358]

MS: m/z 1013[M]⁺

[0359]

¹H NMR (CDCl₃) δ 8.86(s, 1H), 8.50(d, 1H), 8.30(s, 2H), 7.53(m, 39H), 1.76(s, 6H), 1.49(s, 12H)

[0360]

합성예 14: 화합물 64의 합성

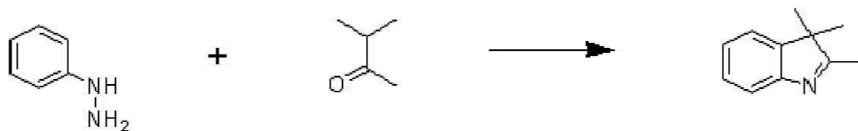
[0361]

합성예 14-(1): 중간체 14-a의 합성

[0362]

하기 반응식 13에 따라 중간체 14-a를 합성하였다:

[0363] <반응식 13>



[0364]

[0365]

중간체 14-a

[0366]

반응용기에 아세트산 500ml, 3-메틸-2부탄논 120g(1.39mol)을 넣은 후 60도 까지 승온시킨다. 페닐히드라진 150g(1.39mol)을 천천히 적가 후 환류시킨다. 반응이 종료되면 물 500ml 넣고 수산화 나트륨으로 중화시킨다. 에틸아세테이트를 넣어 여러 차례 추출을 반복 후 유기층을 감압증류한다. 컬럼크로마토 그래피로 분리하여 중간체 14-a(156g, 수율 71%)를 얻었다.

[0367]

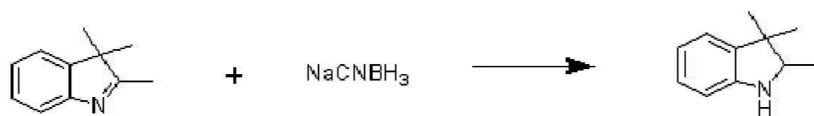
합성예 14-(2): 중간체 14-b의 합성

[0368]

하기 반응식 14에 따라 중간체 14-b를 합성하였다:

[0369]

<반응식 14>



[0370]

중간체 14-b

[0371]

중간체 14-a 100g(0.628mol) 과 아세트산 500ml를 반응용기에 넣는다. 소듐 사이아노 보로 하이드라이드 118g(1.88mo)을 발열이 심하지 않게 천천히 적가해준다. 5시간동안 교반시켜준 후 물 300ml를 넣고 수산화 나트륨으로 염기성을 만든다. 에틸아세테이트로 넣은 후 여러 번 추출하여 유기층을 농축한다. 컬럼 크로마토 그래피로 분리하여, 중간체 14-b(55g, 수율 54%)를 얻었다.

[0372]

합성예 14-(3): 화합물 64의 합성

[0373]

합성예 1-(6) 중 디페닐아민 대신 상기 중간체 14-b을 사용하였다는 점을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 64(1.8g, 연노란색 고체, 수율 34%)를 수득하였다.

[0374]

MS: m/z 737[M]⁺

[0375]

¹H NMR (CDCl₃) δ 8.90(s, 1H), 8.76(d, 1H), 8.57(s, 1H), 8.43(d, 1H), 7.78(m, 3H), 7.16(m, 2H), 4.01(s, 1H), 3.83(s, 1H), 1.37(s, 3H), 1.35(s, 3H), 1.26(m, 6H), 1.14(m, 6H)

[0376]

합성예15: 화합물 68의 합성

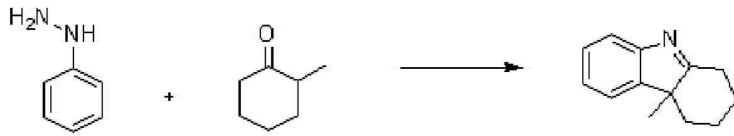
[0377]

합성예 15-(1): 중간체 15-a의 합성

[0378]

하기 반응식 15에 따라 중간체 15-a를 합성하였다:

[0379] <반응식 15>



[0380]

[0381]

중간체 15-a

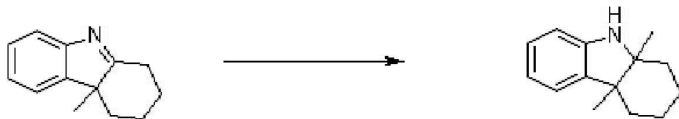
[0382] 500ml의 둥근 바닥 플라스크에 페닐하이드라진 50g(0.462mol)과 아세트산 170ml를 60도까지 가열한다. 가열된 플라스크에 2-메틸싸이클로헥사논 51.9g(0.462mol)을 적가 한다. 적가가 완료되면 8시간 동안 환류시킨다. 반응이 완료되면 물 100ml를 첨가한 후 수산화 나트륨으로 염기화시켰다.

[0383] 물과 에틸아세테이트로 추출하여 유기층을 황산 마그네슘으로 무수 처리하여 감압 농축한 후, 헥산과 에틸아세테이트를 전개용매로 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하여, 중간체 15-a(72g, 수율84%)를 수득하였다.

[0384] 합성예 15-(2): 중간체 15-b의 합성

[0385] 하기 반응식 16에 따라 중간체 15-b를 합성하였다:

[0386] <반응식 16>



[0387]

[0388]

중간체 15-b

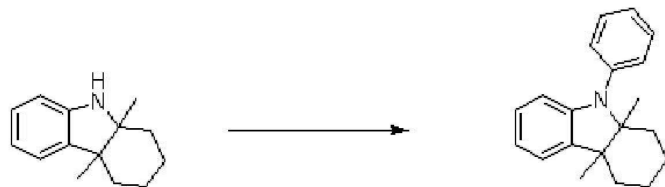
[0389] 질소 분위기의 2L 둥근 바닥 플라스크에 반응식 1로부터 얻은 중간체 15-a 57g (0.308mol)을 톨루엔 570ml에 녹인 후, 영하 10도로 온도를 낮추었다. 1.6M 메틸리튬 300ml(0.474mol)을 위 용액에 천천히 적가한 후 영하 10도에서 3시간 동안 반응시킨다. 반응이 완료되면 반응성이 없어 질 때까지 천천히 물을 넣었다.

[0390] 물과 에틸아세테이트로 추출하여 유기층을 황산 마그네슘으로 무수 처리하여 감압 농축한다. 헥산과 에틸아세테이트를 전개용매로 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리한다. 중간체 15-b(47g 수율76%)를 수득하였다.

[0391] 합성예 15-(3): 중간체 15-c의 합성

[0392] 하기 반응식 17에 따라 중간체 15-b를 합성하였다:

[0393] <반응식 17>



[0394]

[0395]

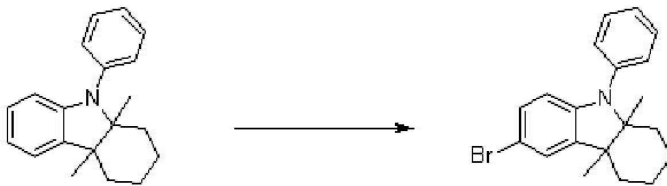
중간체 15-c

[0396] 1L 둥근 바닥 플라스크에 반응식 2로부터 얻은 중간체 15-b 40g (0.199mol), 아이오도벤젠 48.6g(0.238mol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) 0.89g(0.004mol), 2,2-비스(다이페닐포스포피노-1,1'-바이나프틸) 2.47g(0.004mol), 소듐 터셔리부톡사이드 38.19g(0.397mol)과 톨루엔 400ml를 넣은 후 8시간 동안 환류시켰다. 반응이 완료되면 셀라이트를 깔고 여과한 후 감압 농축하여, 헥산을 전개 용매로 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하여, 중간체 15-c(44g, 수율79%)를 수득하였다.

[0397] 합성예 15-(4): 중간체 15-d의 합성

[0398] 하기 반응식 18에 따라 중간체 15-d를 합성하였다:

[0399] <반응식 18>



[0400]

[0401]

중간체 15-d

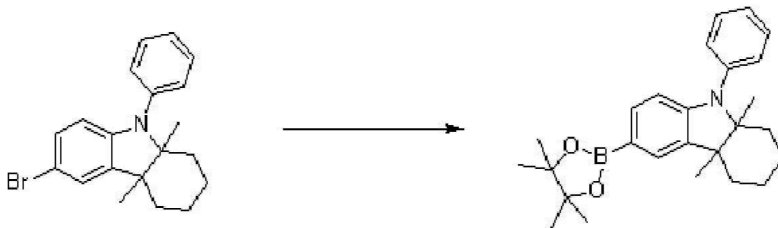
[0402] 500ml 둥근 바닥 플라스크에 반응식 3로부터 얻은 중간체 1-c 44g (0.158mol)와 디메틸포름아마이드 130ml를 넣은 후 0도로 온도를 낮춘다. N-브로모수신이미드 25.2g(0.142mol)을 디메틸포름아마이드 220ml에 녹여 천천히 적가하였다. 적가 완료 후 상온으로 승온하여 2시간 동안 교반하였다.

[0403] 반응이 완료되면 물과 디클로로메탄으로 추출하여 유기층을 황산 마그네슘으로 무수 처리하여 감압 농축한다. 헥산을 부어 생성된 결정을 여과한다. 중간체 15-d(45g 수율80%)를 수득하였다.

[0404] 합성예 15-(5): 중간체 15-e의 합성

[0405] 하기 반응식 19에 따라 중간체 15-e를 합성하였다:

[0406] <반응식 19>



[0407]

[0408]

중간체 15-e

[0409] 1L 둥근 바닥 플라스크에 반응식 4로부터 얻은 중간체 1-d 40g (0.112mol), 비스(피나콜라토)디보론 34g(0.134mol), 팔라듐(II) 클로라이드-1-,1'-비스(디페닐포스피노)페로센 2.73g(0.003mol), 포타슘아세테이트 32.9g(0.335mol)과 톨루엔 480ml를 넣은 후 8시간 동안 환류시킨다. 반응이 완료되면 셀라이트를 깔고 여과한 후 감압 농축한다. 헥산과 에틸아세테이트를 전개 용매로 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하여, 중간체 1-e(26g 수율58%)를 수득하였다.

[0410] 합성예 15-(6): 화합물 68의 합성

[0411] 둥근 바닥 플라스크에 중간체 1-e 5.0g (9mmol), 중간체 1-e 8.4g(2.1mmol), 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.4g(0.3mmol), 포타슘카보네이트 3.6g(26mmol), 1,4-다이옥산 25ml, 톨루엔 25ml과 물 10ml를 넣은 후 환류시켰다. 반응이 완료되면 물과 헥산을 넣는다. 생성된 결정을 여과한다. 결정을 재결정하여 화합물 68(5.3g 수율57%)를 수득하였다.

[0412] MS: m/z 969[M]⁺

[0413] ¹H NMR (CDC₁₃) δ 9.07(d, 1H), 8.95(m, 2H), 8.48(d, 1H), 7.75(m, 6H), 7.37(m, 24H), 6.62(s, 2H), 2.00(m, 2H), 1.60(m, 14H), 1.30(s, 3H), 1.28(s, 3H), 1.18(s, 3H), 1.15(s, 3H)

[0414] **실시예 1**

[0415] ITO 글래스의 발광면적이 2mm × mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 상기 ITO 글래스를 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1×10^{-7} torr가 되도록 한 후 상기 ITO 상에 CuPc를 증착하여 800Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상에 α-NPD를 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 상기 정공 수송층 상에 화합물 BH1 및 화합물 1(3중량%)을 공증착하여 250Å 두께의 발광층을 형성한 다음, 상기 발광층 상에 Alq₃를 증착하여 350Å 두께의 전자 수송층을 형성하였다. 이어서, 5Å 두께의 LiF 전자 주입층 및 500Å 두께의 Al 전극을 차례로 형성하여, 유기 발광 소자를 완성하였다.

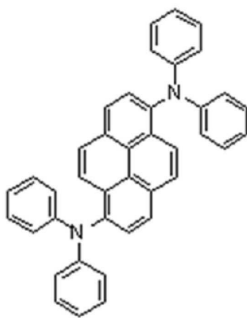
[0416] **실시예 2 내지 8**

[0417] 화합물 1 대신 화합물 3, 9, 10, 11, 12, 28 및 29을 각각 사용하였다는 점을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0418] **비교예 1**

[0419] 화합물 1 대신 하기 화합물 A를 사용하였다는 점을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0420] <화합물 A>

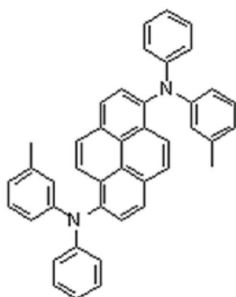


[0421]

[0422] **비교예 2**

[0423] 화합물 1 대신 하기 화합물 B를 사용하였다는 점을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0424] <화합물 B>



[0425]

[0426] **평가예 1**

[0427] 실시예 1 내지 8 및 비교예 1 및 2에 따라 제조된 유기 발광 소자에 대하여, 구동 전압, 전류, 휘도(0.4mA에서 측정), 색 좌표 및 수명(T80)을 PR650 Spectroscan Source Measurement Unit.(PhotoResearch사 제품임)을 이용하여 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 아울러, 수명 데이터는 도 2 및 3에, 전류 밀도 데이터는 도 4 및 5에 각각 나타내었다. T80은 측정 휘도가 초기 휘도에 비해 80%로 감소되는데 소요되는 시간을 의미하

며 3,000 nit에서 측정하였다.

표 1

	도펀트	전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	외부양자 효율	휘도 (cd/m ²)	CIE _x	CIE _y	T80 (hr)
실시예1	1	4.0	10	5.61	471	0.145	0.096	187
실시예2	3	3.6	10	6.83	690	0.142	0.123	379
실시예3	9	3.8	10	6.09	695	0.141	0.148	257
실시예4	10	3.8	10	6.33	624	0.143	0.120	207
실시예5	11	4.0	10	6.71	677	0.142	0.125	180
실시예6	12	3.8	10	6.16	693	0.141	0.145	211
실시예7	28	3.8	10	5.43	480	0.145	0.103	150
실시예8	29	3.9	10	6.46	663	0.141	0.127	194
비교예1	A	4.3	10	5.06	534	0.133	0.137	45
비교예2	B	4.3	10	4.59	504	0.134	0.144	35

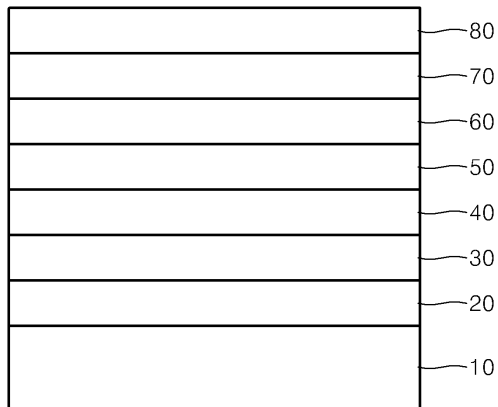
[0429] 표 1 및 도 2 내지 5로부터, 실시예 1 내지 8의 유기 발광 소자는 비교예 1 및 2의 유기 발광 소자에 비하여 우수한 구동 전압, 외부 양자 효율, 휘도, 색순도 및 수명 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

부호의 설명

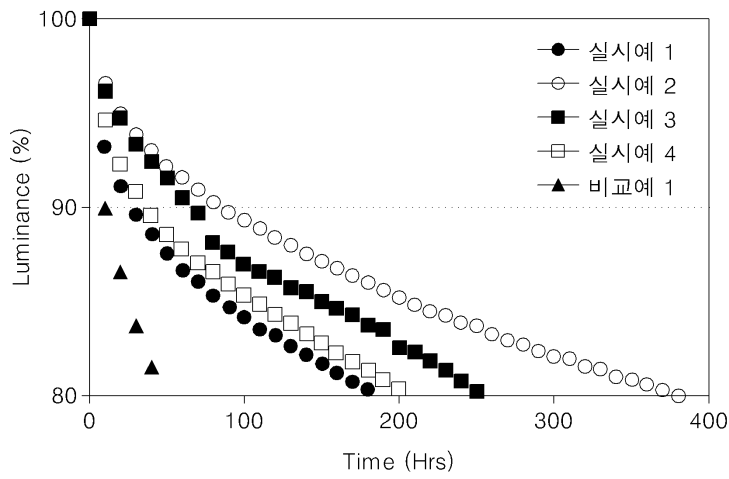
- [0430] 80: 제2전극
- 70: 전자 주입층
- 60: 전자 수송층
- 50: 발광층
- 40: 정공 수송층
- 30: 정공 주입층
- 20: 제1전극
- 10: 기판

도면

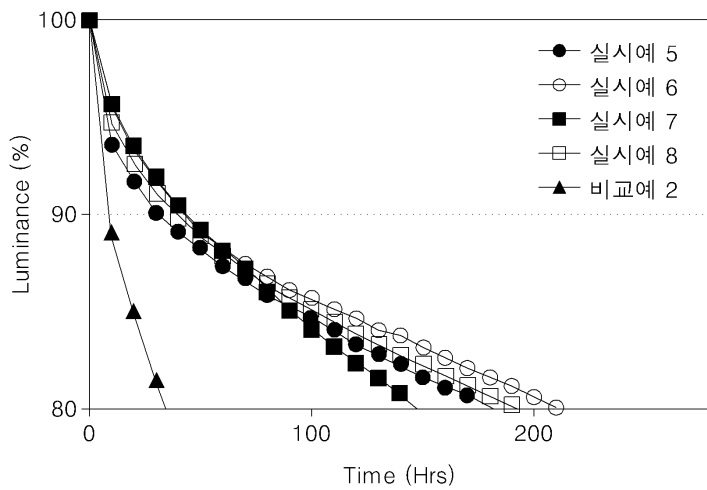
도면1



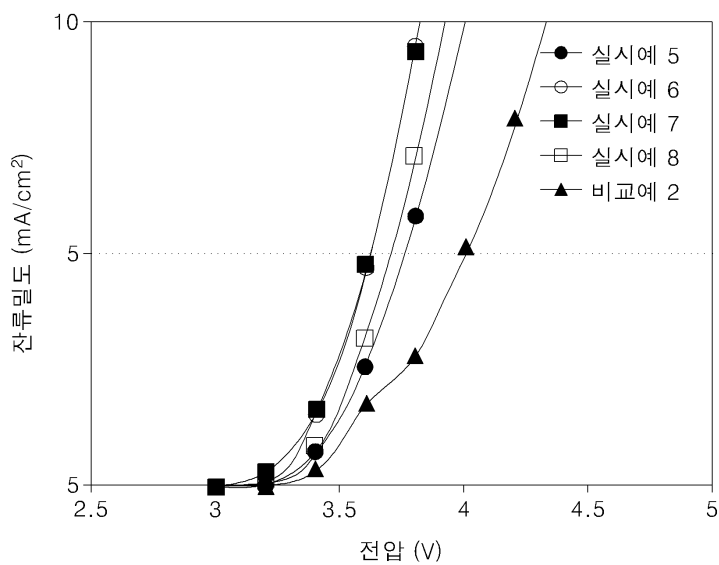
도면2



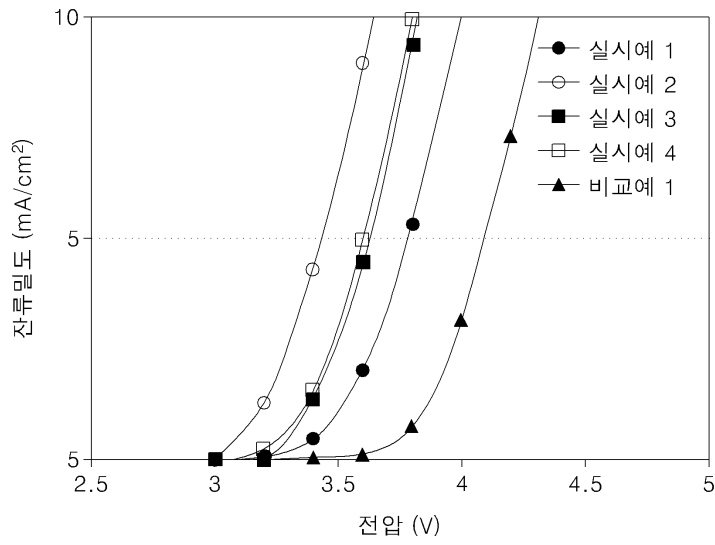
도면3



도면4



도면5



【심사관 직권보정사항】

【직권보정 1】

【보정항목】 청구범위

【보정세부항목】 청구항 제 1항

【변경전】

상기 Q1 내지 Q5

【변경후】

상기 Q3 내지 Q5

专利名称(译)	缩合环化合物和含有它的有机发光器件		
公开(公告)号	KR101921550B1	公开(公告)日	2019-02-14
申请号	KR1020110104825	申请日	2011-10-13
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司 SFC股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司 에스에프씨주식회사		
当前申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司 에스에프씨주식회사		
[标]发明人	김명숙 제종태 이세진 박석배 유세진 임재건 최병기 김태경 이정인		
发明人	김명숙 제종태 이세진 박석배 유세진 임재건 최병기 김태경 이정인		
IPC分类号	C09K11/06 H05B33/14		
CPC分类号	C09K11/06 C09K2211/1011 H01L51/0059 H01L51/50 H05B33/14		
审查员(译)	周二集群		
优先权	1020110004523 2011-01-17 KR		
其他公开文献	KR1020120083203A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

目的：提供稠环化合物和包括该稠环化合物的有机发光器件以提高耐热性和发光性能。构成：稠环化合物用化学式1表示。有机发光器件包括第一电极，面向第一电极的第二电极以及位于第一电极和第二电极之间的有机层。有机层包括单一物质或不同材料的组合形式的稠环化合物。有机层包括空穴注入层，空穴传输层，同时具有空穴注入功能和空穴传输功能的功能层，电致发光层，电子传输层和电子注入层之一。

