(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년10월05일
(11) 등록번호 10-1894023
(24) 등록일자 2018년08월27일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
(21) 출원번호 10-2011-0044076
(22) 출원일자 2011년05월11일
심사청구일자 2016년05월10일
(65) 공개번호 10-2012-0127550
(43) 공개일자 2012년11월22일
(56) 선행기술조사문헌
KR1020100067062 A*
KR1020100106014 A*
JP2010150169 A*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(72) 발명자
김희연
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
양승각
경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
리앤목특허법인

전체 청구항 수 : 총 16 항 심사관 : 송이화

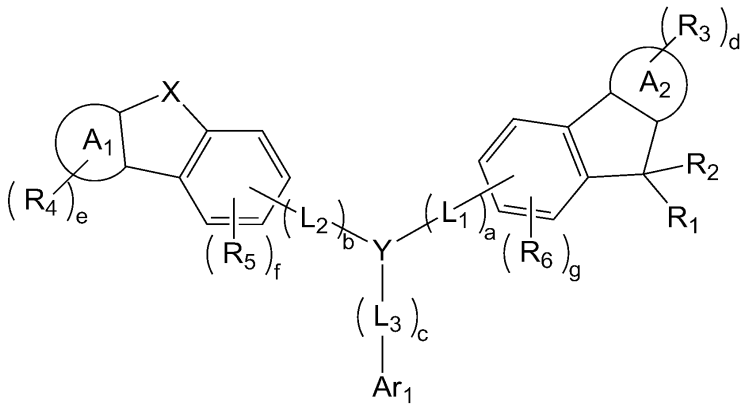
(54) 발명의 명칭 **축합환 화합물, 이를 포함하는 유기 발광 소자 및 평판 표시 장치**

(57) 요 약

하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물, 이를 포함하는 유기 발광 소자 및 상기 유기 발광 소자를 포함하는 평

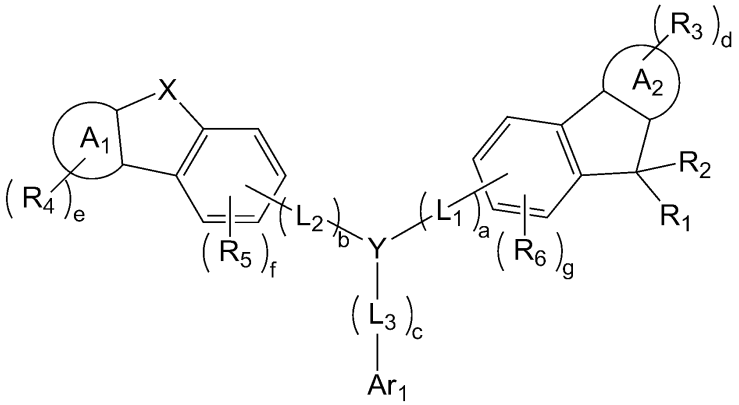
(뒷면에 계속)

대 표 도 - 도2



판 표시 장치가 제공된다:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중, X, Y, A_1, A_2, L_1, L_2, L_3, Ar_1, R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, a, b, c, d, e, f 및 g는 발명의 상세한 설명을 참조한다. 상기 화합물을 포함하는 유기층을 구비한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고발광 효율 및 장수명의 특성을 가진다.

(72) 발명자

이정인

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

이재용

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

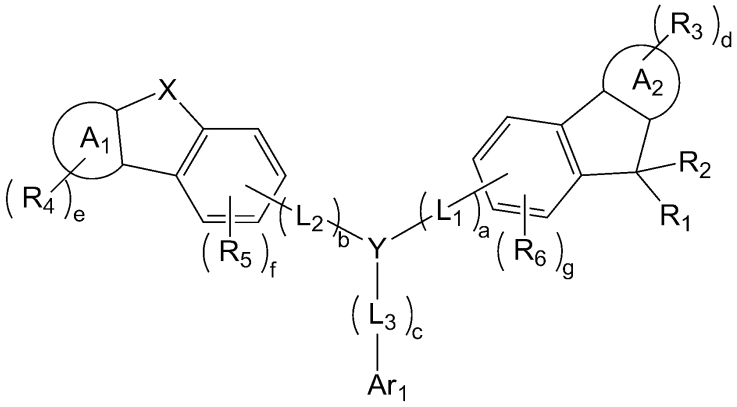
명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물(condensed cyclic compound):

<화학식 1>



상기 식 중,

X는 $N(Ar_2)$이고;

Y는 N이고;

A_1 및 A_2는 바이시클릭(bicyclic) 방향족 고리이고;

L_1, L_2 및 L_3는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴렌기이고;

Ar_1 및 Ar_2는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴기 그룹 중 하나이고;

R_3, R_4, R_5 및 R_6는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹 중 하나이고, R_3 내지 R_6 중 서로 인접한 2 이상은 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고, R_3 내지 R_6 중 복수개 존재하는 것들은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

R_1 및 R_2는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알킬기이고;

a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 또는 1이고, d 및 e는 서로 독립적으로 1 내지 10의 정수 중 하나이고, f 및 g는 서로 독립적으로 1 내지 3의 정수 중 하나이다.

청구항 2

삭제

청구항 3

삭제

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 A_1 및 A_2가 C_8-C_{10}바이시클릭 방향족 고리인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

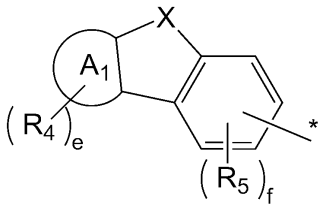
청구항 5

제1항에 있어서,

상기 A_1 및 A_2가 서로 독립적으로 나프탈렌 고리 또는 인덴 고리인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

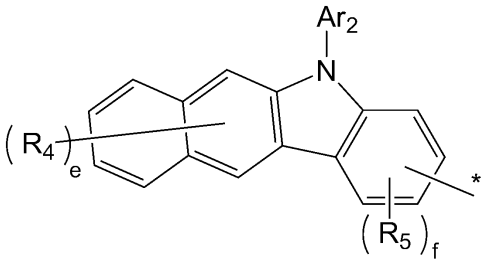
청구항 6

제1항에 있어서,

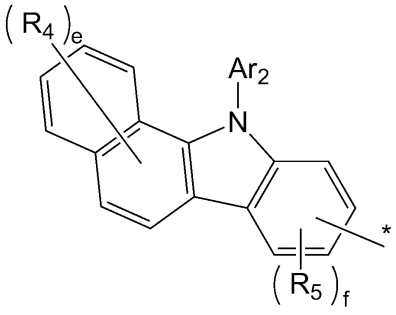


상기 화학식 1 중, 이 하기 화학식 2A 내지 2C 중 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 축합환 화합물:

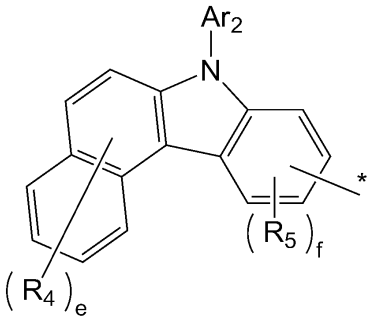
<화학식 2A>



<화학식 2B>



<화학식 2C>



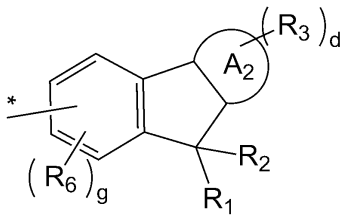
상기 식 중, Ar_2는 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기 중 하나이고, e는 1 내지 6의 정수 중 하나이다.

청구항 7

삭제

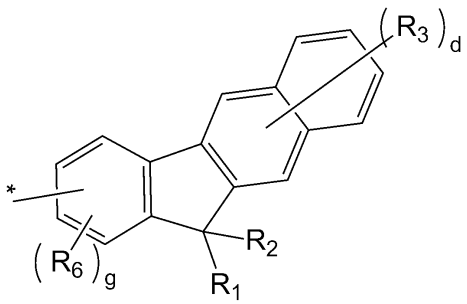
청구항 8

제1항에 있어서,

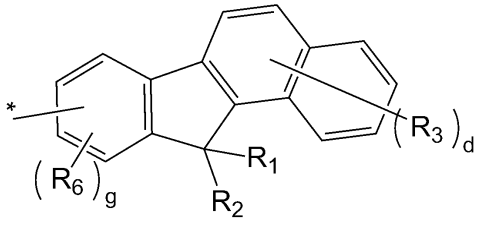


상기 화학식 1 중, 이 하기 화학식 4A 내지 4C 중 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 축합환 화합물:

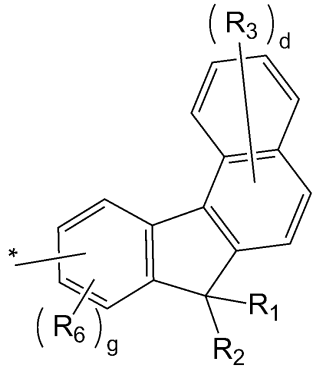
<화학식 4A>



<화학식 4B>



<화학식 4C>



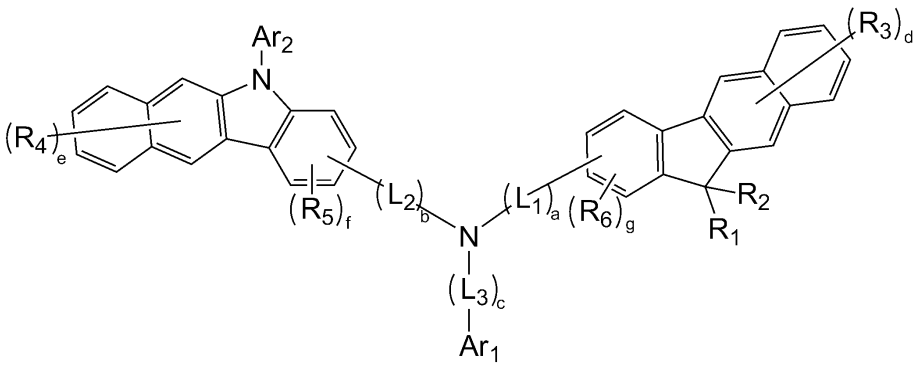
상기 식 중, R_1 및 R_2는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기 중 하나이고, d는 1 내지 6의 정수 중 하나이다.

청구항 9

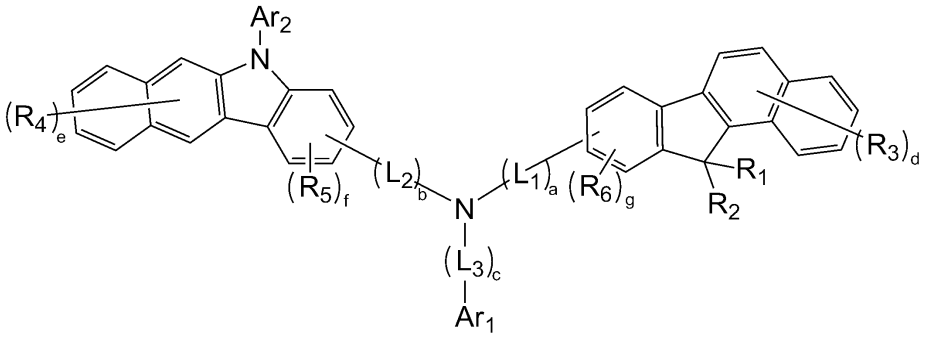
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 하기 화학식 5A 내지 5I 중 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 축합환 화합물:

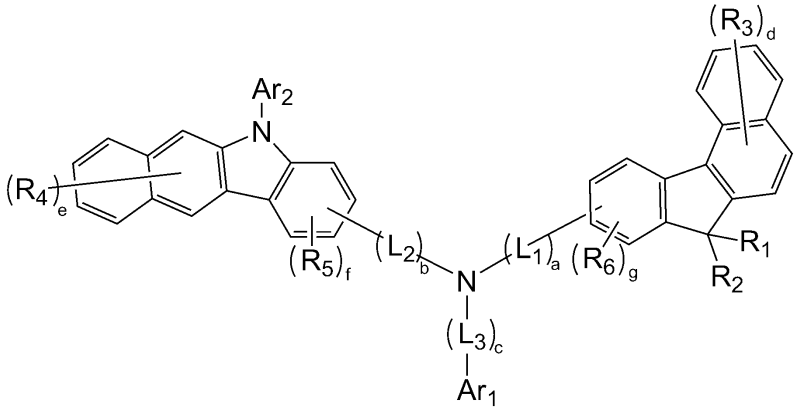
<화학식 5A>



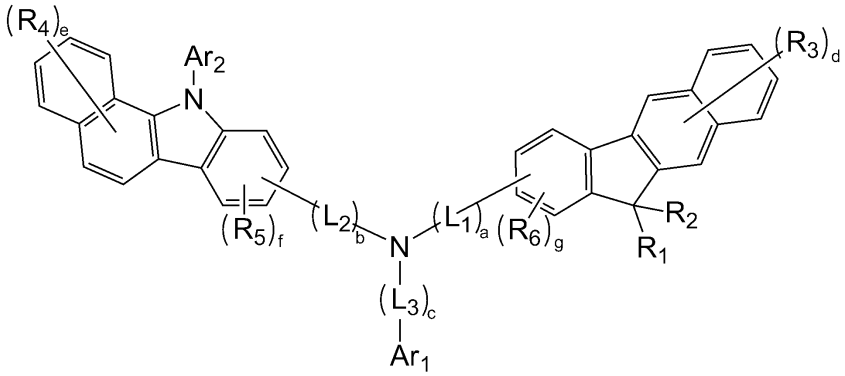
<화학식 5B>



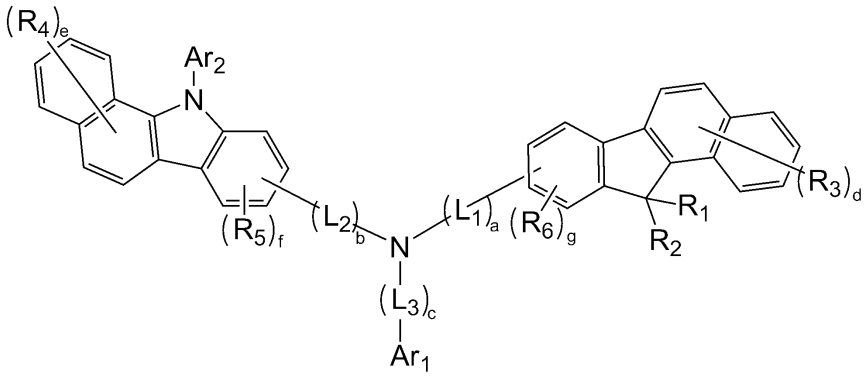
<화학식 5C>



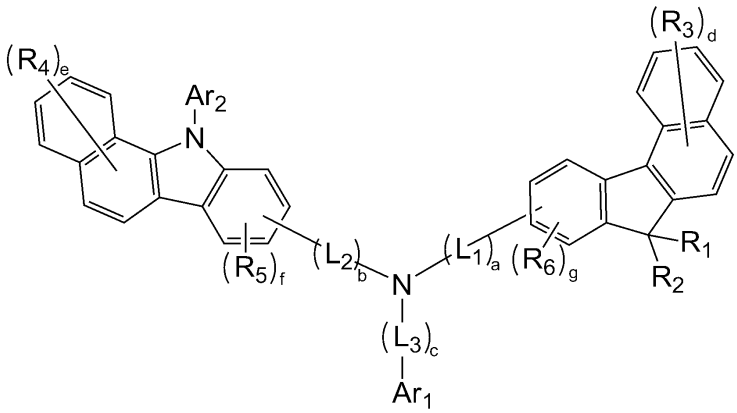
<화학식 5D>



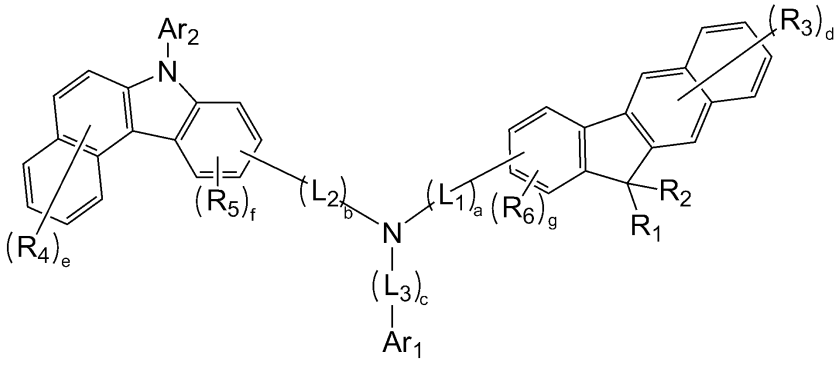
<화학식 5E>



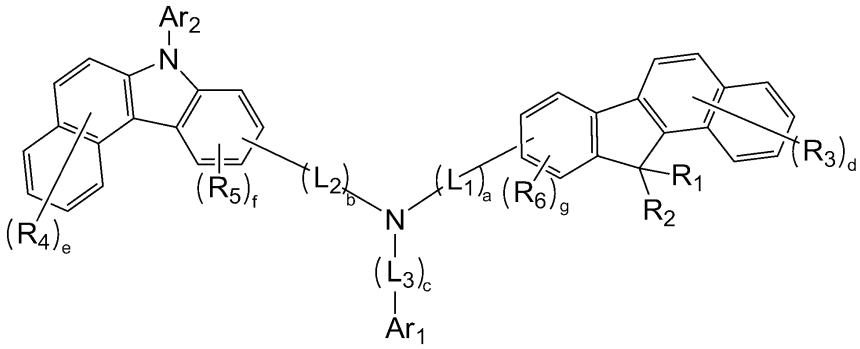
<화학식 5F>



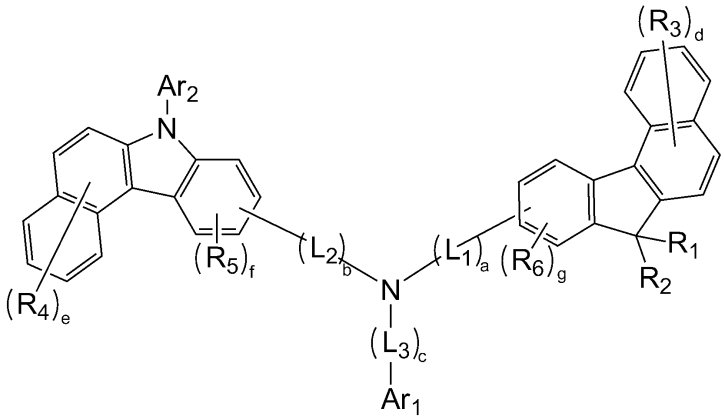
<화학식 5G>



<화학식 5H>



<화학식 5I>



상기 식 중,

Ar_1 및 Ar_2는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기 중 하나이고;

R_1 및 R_2는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기 중 하나이고;

d 및 e는 서로 독립적으로 1 내지 6의 정수 중 하나이다.

청구항 10

제1항에 있어서,

상기 L_1, L_2 및 L_3가 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인데닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기, 치환 또는 비치환

된 헵타레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 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 펜타페닐렌기 및 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기 중 하나인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

청구항 11

삭제

청구항 12

제1항에 있어서,

상기 Ar_1 및 Ar_2가 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 파이레닐기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기 중 하나인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

청구항 13

제1항에 있어서,

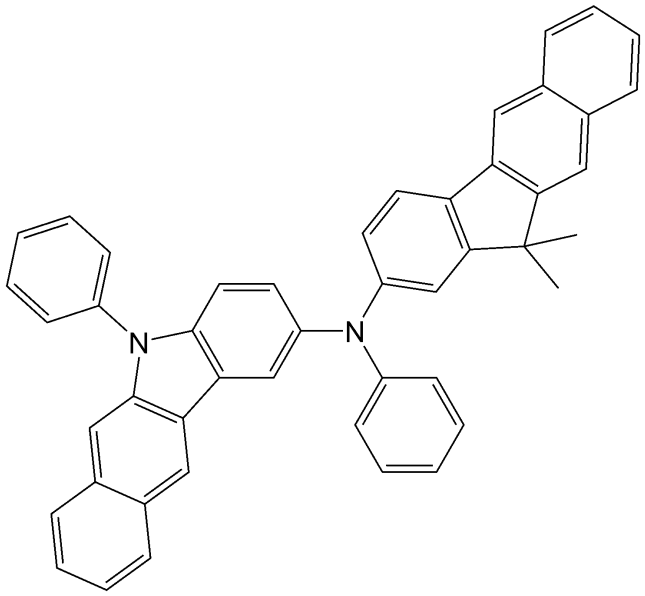
상기 R_1 및 R_2가 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기 중 하나이고, 상기 R_3, R_4, R_5 및 R_6는 수소 원자인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

청구항 14

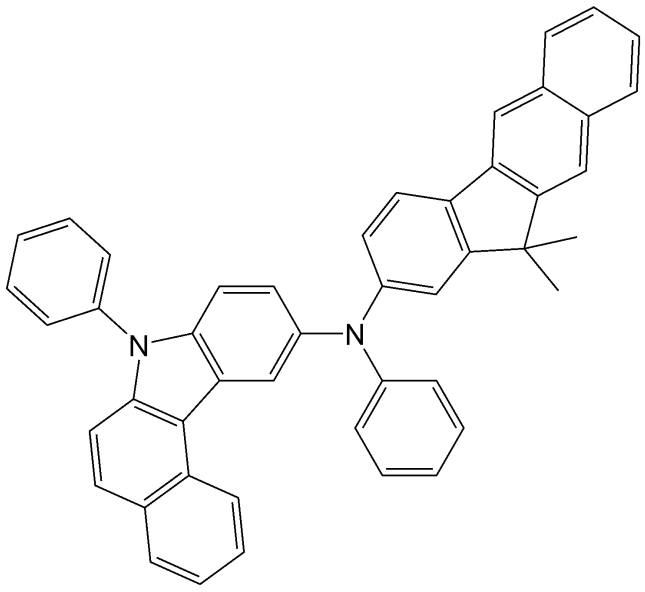
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 하기 화합물 1 내지 15로 표시되는 화합물 중 하나인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물:

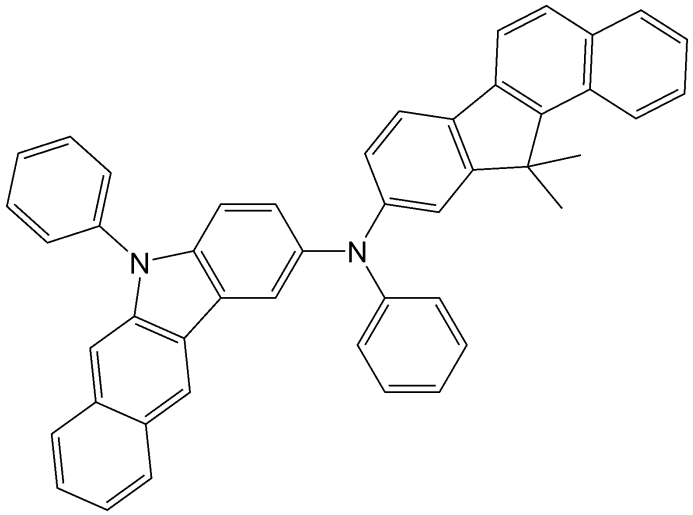
<화합물 1>



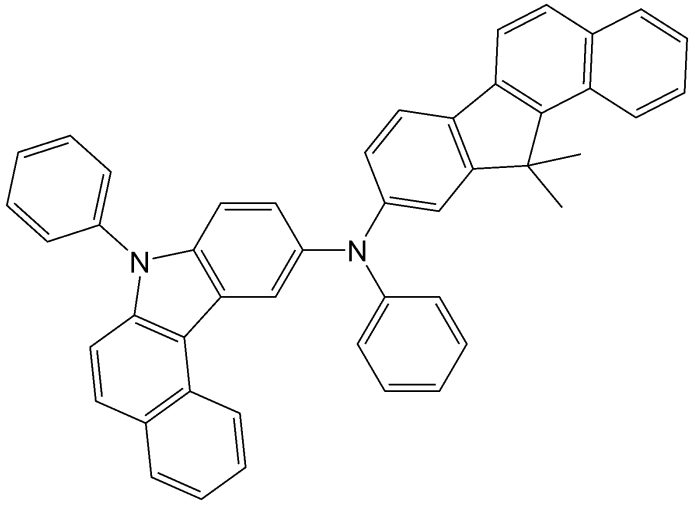
<화합물 2>



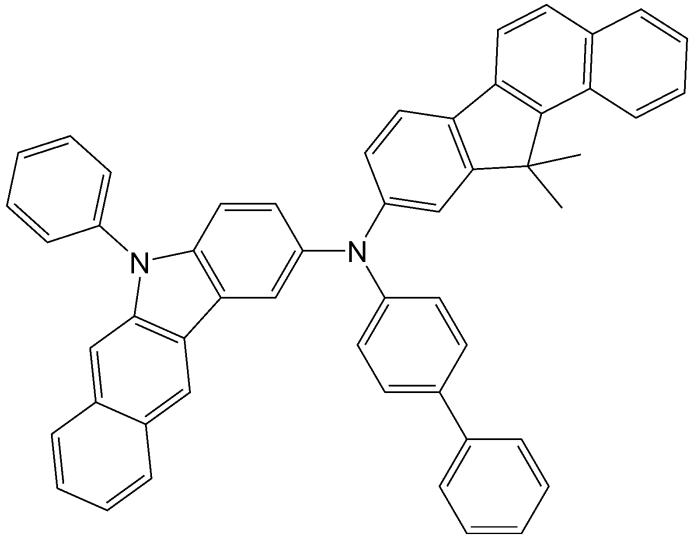
<화합물 3>



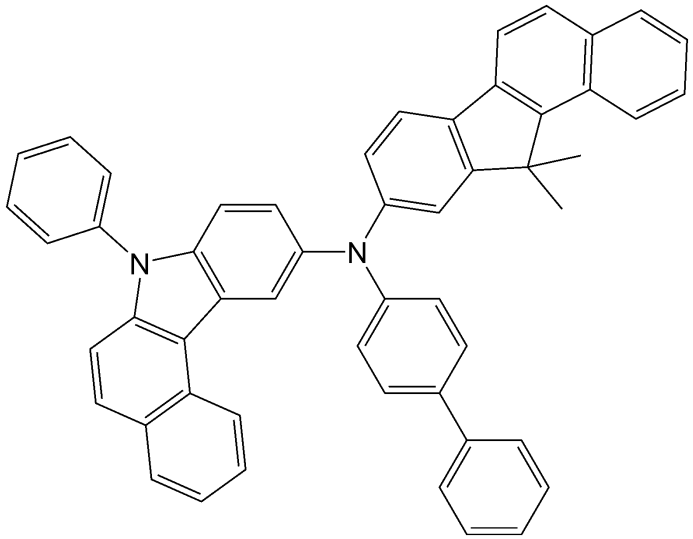
<화합물 4>



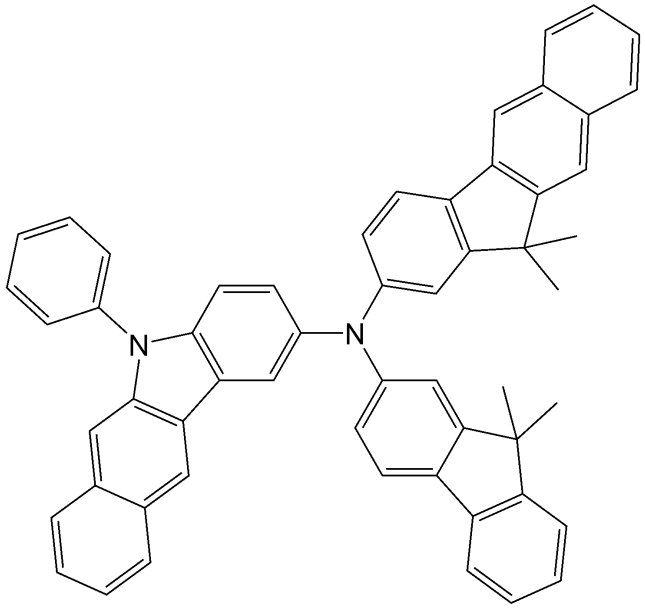
<화합물 5>



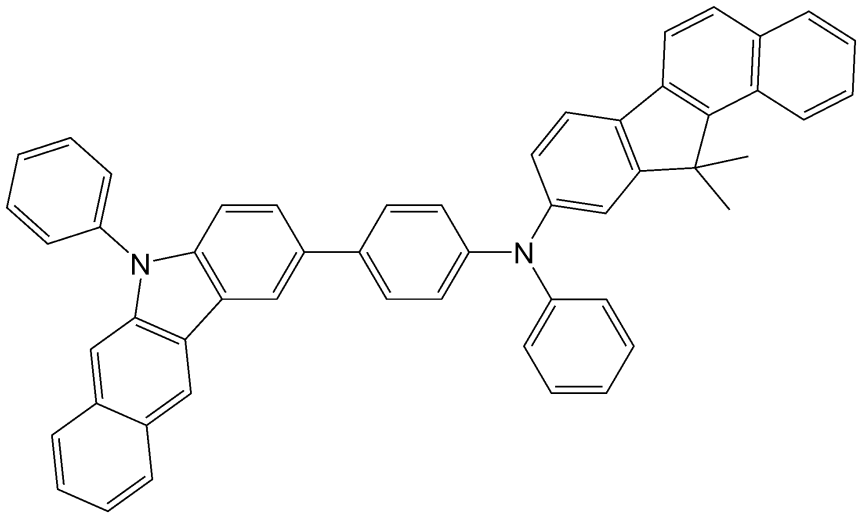
<화합물 6>



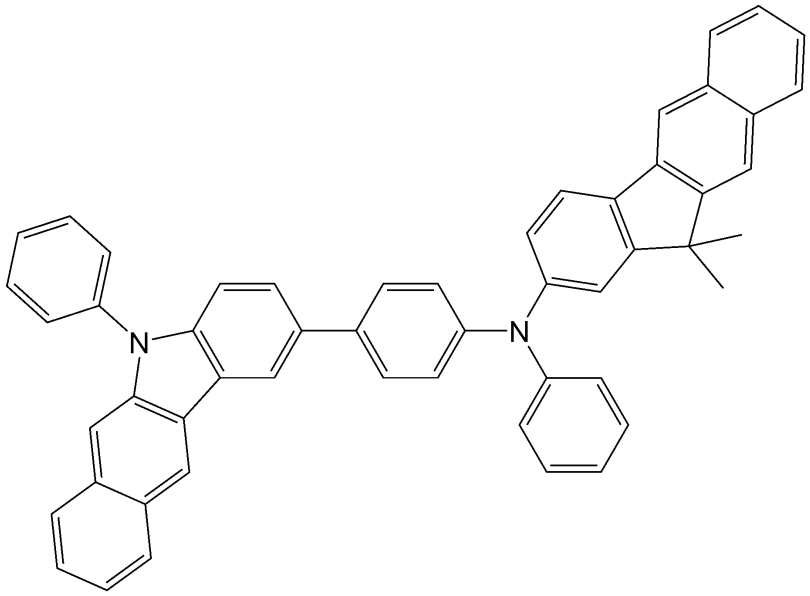
<화합물 7>



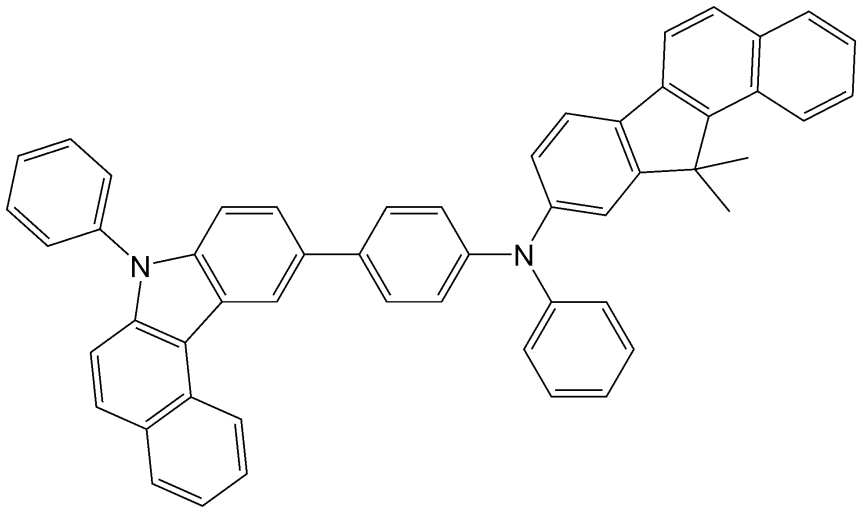
<화합물 8>



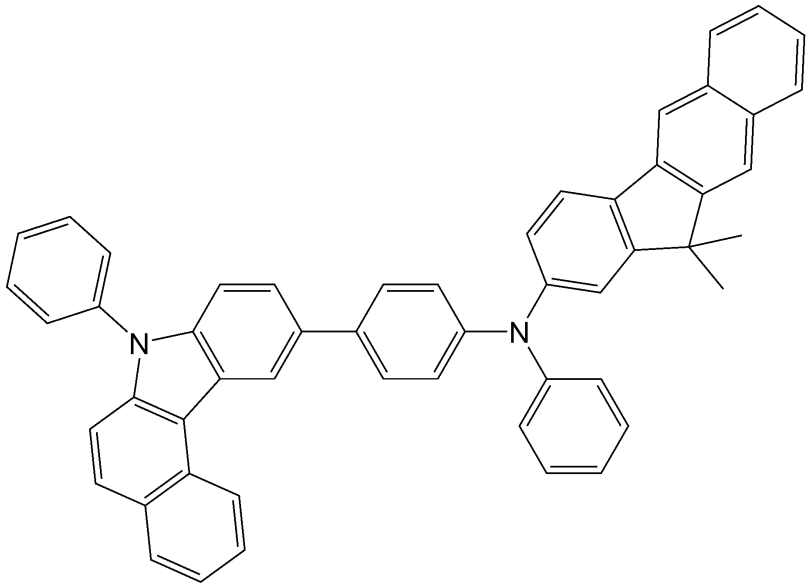
<화합물 9>



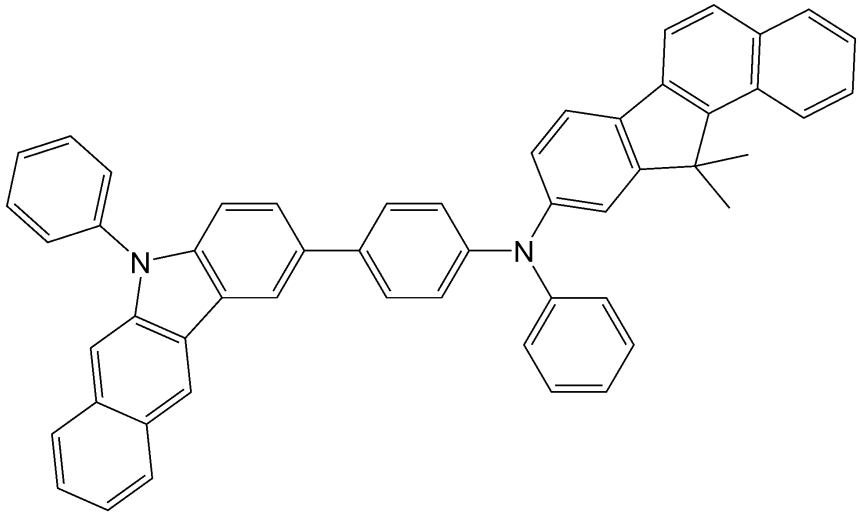
<화합물 10>



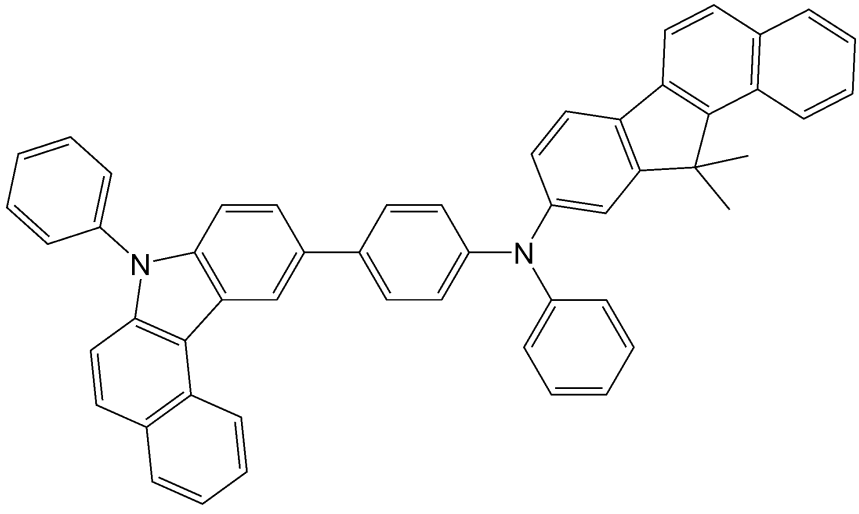
<화합물 11>



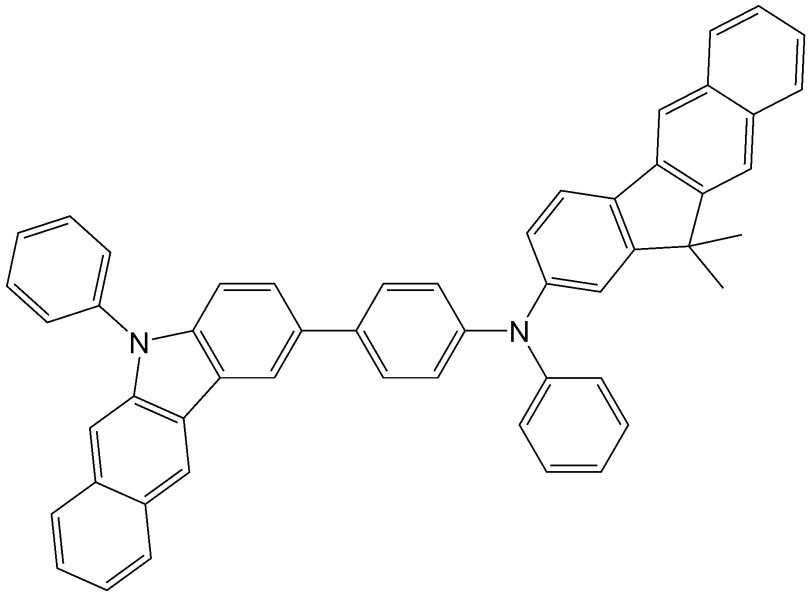
<화합물 12>



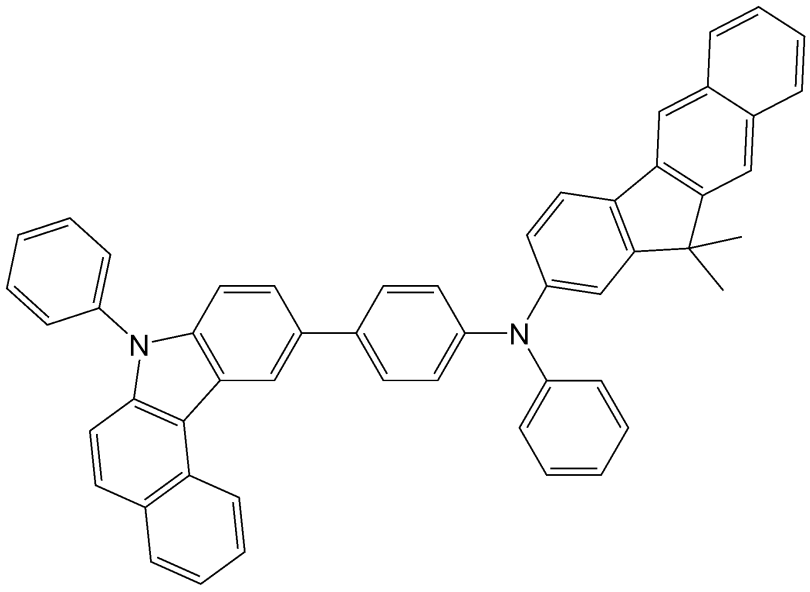
<화합물 13>



<화합물 14>



<화합물 15>



.

청구항 15

제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 적어도 하나의 유기층을 포함하는 유기 발광 소자에 있어서,

상기 유기층이 제 1항, 제 4항 내지 제 6항, 제 8항 내지 제 10항, 제 12항 내지 제 14항 중 어느 한 항의 축합환 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 16

제15항에 있어서,

상기 유기층이 정공 주입층, 정공 수송층, 또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 가지는 단일막을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 17

제15항에 있어서,

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 적어도 하나의 발광층을 더 포함하고,

상기 유기층은 정공 수송층이고 상기 발광층은 형광 또는 인광 호스트를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 18

제15항에 있어서,

상기 유기층이 발광층인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 19

제15항에 있어서,

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 하나 이상의 층을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 20

소스 전극, 드레인 전극, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 제15항의 유기 발광 소자를 구비하고,

상기 유기 발광 소자의 제1전극이 상기 소스 전극 및 드레인 전극 중 하나와 전기적으로 연결된 평판 표시 장치.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 축합환 화합물, 이를 포함하는 유기 발광 소자 및 상기 유기 발광 소자를 포함하는 평판 표시 장치에 관한 것으로서, 보다 상세하기로는 유기 발광 소자의 정공 수송층에 사용하기 적합한 축합환 화합물, 이를 포함하는 유기 발광 소자 및 상기 유기 발광 소자를 포함하는 평판 표시 장치에 관한 것이다. 상기 축합환 화합물을 포함하는 유기층을 구비한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고발광 효율 및 장수명의 특성을 가진다.

배 경 기 술

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

[0003] 일반적인 유기 발광 소자는 기판 상부에 애노드가 형성되어 있고, 애노드 상부에 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 여기에서 정공수송층, 발광층 및 전자수송층은 유기화합물로 이루어진 유기 박막층들이다.

[0004] 유기 발광 소자의 구동 원리는 다음과 같다. 애노드 및 캐소드 간에 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.

[0005] 종래의 유기 발광 소자는 구동 전압, 발광 효율 및 수명 측면에서 아직 개선의 여지가 많다.

발명의 내용

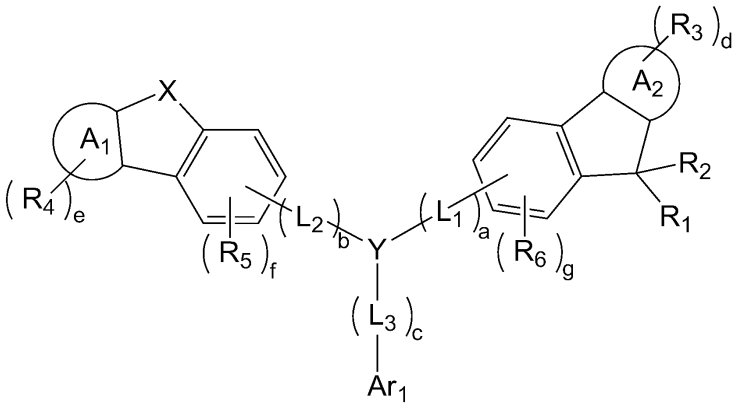
해결하려는 과제

[0006] 신규한 구조의 축합환 화합물, 이를 포함하는 유기 발광 소자 및 상기 유기 발광 소자를 포함하는 평판 표시 장치를 제공한다.

과제의 해결 수단

[0007] 한 측면에 따라, 하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 제공된다:

[0008] <화학식 1>



[0009]

[0010] 상기 식 중, X는 $N(Ar_2)$ 및 S 중 하나이고; Y는 N, B 및 P 중 하나이고; A_1 및 A_2는 바이시클릭(bicyclic) 방향족 고리이고; L_1, L_2 및 L_3는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 2가 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹 중 하나이고; Ar_1 및 Ar_2는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹, $N(Q_1)(Q_2)$로 표시되는 그룹 및 $Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q_1 내지 Q_5는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹 중 하나이고; R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹 중 하나이고, R_3 내지 R_6 중 서로 인접한 2 이상은 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고, R_3 내지 R_6 중 복수개 존재하는 것들은 서로 동일하거나 상이할 수 있고; a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수 중 하나이고, d 및 e는 서로 독립적으로 1 내지 10의 정수 중 하나이고, f 및 g는 서로 독립적으로 1 내지 3의 정수 중 하나이다.

[0011] 다른 한 측면에 따라, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극, 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 적어도 하나의 유기층을 포함하고, 상기 유기층이 상기 화학식1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 유기 발광 소자가 제공된다.

[0012] 또 다른 한 측면에 따라, 소스 전극, 드레인 전극, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 상기 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 상기 소스 전극 및 드레인 전극 중 하나와 전기적으로 연결된 평판 표시 장치가 제공된다.

발명의 효과

[0013] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 발광 효율이 높으며 수명이 길어 우수한 성능의 평판 표시 장치를 제공한다.

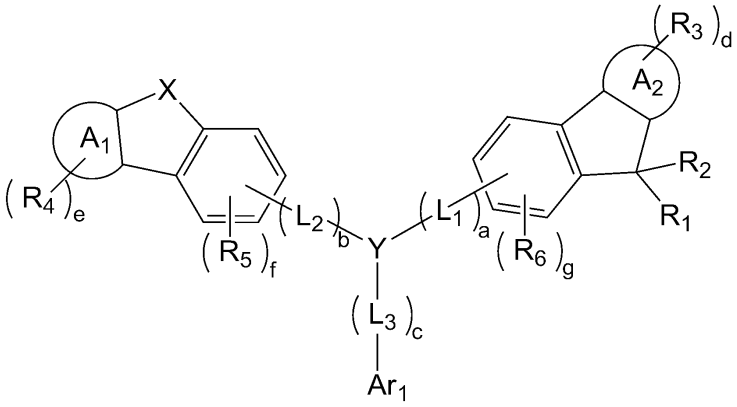
도면의 간단한 설명

[0014] 도 1은 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0015] 한 측면에 따라, 하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 제공된다:

[0016] <화학식 1>

[0017] 

[0018] 상기 식 중, X는 $N(Ar_2)$ 및 S 중 하나이고;

[0019] Y는 N, B 및 P 중 하나이고;

[0020] A_1 및 A_2는 바이시클릭(bicyclic) 방향족 고리이고;

[0021] L_1, L_2 및 L_3는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 2가 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹 중 하나이고;

[0022] Ar_1 및 Ar_2는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹, $N(Q_1)(Q_2)$로 표시되는 그룹 및 $Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$로 표시되는 그룹 중 하나이고,

[0023] R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹 중 하나이고, R_3 내지 R_6 중 서로 인접한 2 이상은 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고, R_3 내지 R_6 중 복수개 존재하는 것들은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

[0024] a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수 중 하나이고, d 및 e는 서로 독립적으로 1 내지 10의 정수 중 하나이고, f 및 g는 서로 독립적으로 1 내지 3의 정수 중 하나이다.

[0025] 여기서, Q_1 내지 Q_5는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기,

니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알킬기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}알키닐기, 치환 또는 비치환된 C_1-C_{30}알콕시기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C_3-C_{30}시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C_5-C_{30}아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹 중 하나이다. 예를 들면, Q_1 내지 Q_5는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 파이레닐기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸라닐, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기 및 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기 중 하나일 수 있다.

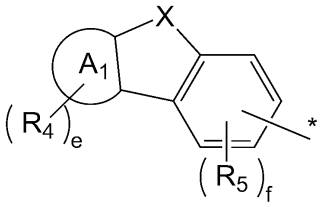
[0026] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 인덴(indene)에 바이시클릭 방향족 고리가 융합된 구조 및 인돌린(indoline) 또는 벤조티오펜(benzothiophene)에 바이시클릭 방향족 고리가 융합된 구조를 각각 적어도 하나씩 가진다. 상기 축합환 화합물은 유리 전이가 온도가 높고 전하 수송 능력이 우수한 특징을 가진다.

[0027] 예를 들면 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 적어도 하나의 벤조플루오렌 구조 및 적어도 하나의 벤조카바졸 구조를 가지거나, 또는 적어도 하나의 벤조플루오렌 구조 및 적어도 하나의 벤조나프토티오펜 구조를 가지는 화합물일 수 있다.

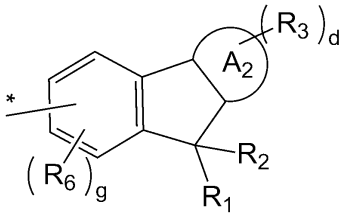
[0028] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 X는 $N(Ar_2)$일 수 있다. 상기 Ar_2는 본 명세서에서 정의된 바와 동일하다. 이 경우 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 인돌린에 바이시클릭 방향족 고리가 융합된 구조를 포함할 수 있으므로, 상기 축합환 화합물은 인덴에 바이시클릭 고리가 융합된 구조 및 인돌린에 바이시클릭 방향족 고리가 융합된 구조를 각각 적어도 하나씩 포함할 수 있다. 상기 화학식 1 중 인돌린에 바이시클릭 고리가 융합된 구조는 예를 들면 카바졸 유도체를 나타낼 수 있다.

[0029] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 Y는 N일 수 있다. 이 경우 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 아릴 아민 계열 화합물의 특성을 가질 수 있다.

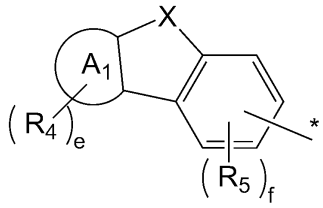
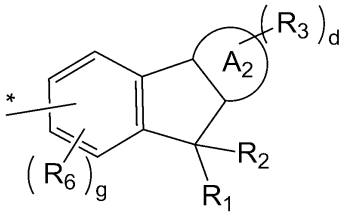
[0030] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 A_1 및 A_2는 C_8-C_{10}바이시클릭 방향족 고리일 수 있다.

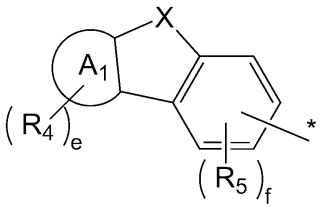


[0031] 상기 화학식 1 중, 는 인돌린 또는 벤조티오펜에 바이시클릭 방향족 고리가 융합된 구조로서, A_1은 예를 들면 8, 9 또는 10개의 탄소 원자를 함유할 수 있는 융합된 바이시클릭 방향족 고리일 수 있다.



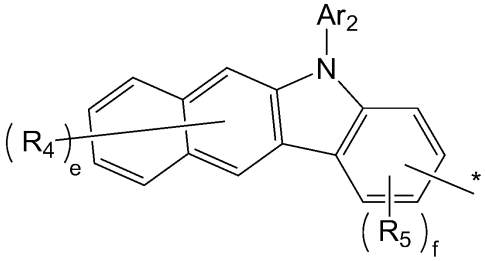
[0032] 한편, 상기 화학식 1 중, 는 인덴에 바이시클릭 방향족 고리가 융합된 구조로서, A_2는 예를 들면 8, 9 또는 10개의 탄소 원자를 함유할 수 있는 융합된 바이시클릭 방향족 고리일 수 있다.

[0033] 일 구현예에 따르면, 상기 A_1 및 A_2는 서로 독립적으로 10개의 탄소 원자를 함유하는 나프탈렌 고리 또는 9개의 탄소 원자를 포함하는 인덴 고리일 수 있다. 이 경우 상기 화학식 1 중,  은 벤조카바졸 유도체 또는 벤조나프토티오펜 유도체의 구조일 수 있고,  은 벤조플루오렌 유도체의 구조일 수 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 상기 나프탈렌 고리 또는 인덴 고리가 인덴, 인돌린 또는 벤조티오펜과 융합하는 위치에 따라 다양한 구조를 가질 수 있다.



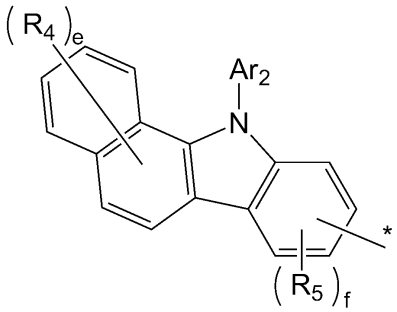
[0034] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중, 은 하기 화학식 2A 내지 2C 중 하나로 표시되는 벤조카바졸 구조일 수 있다:

[0035] <화학식 2A>



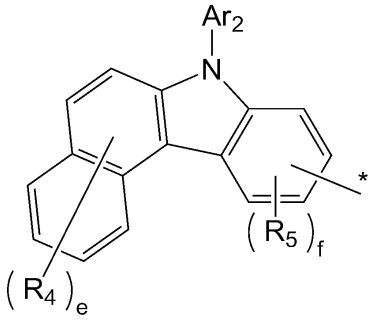
[0036]

[0037] <화학식 2B>



[0038]

[0039] <화학식 2C>

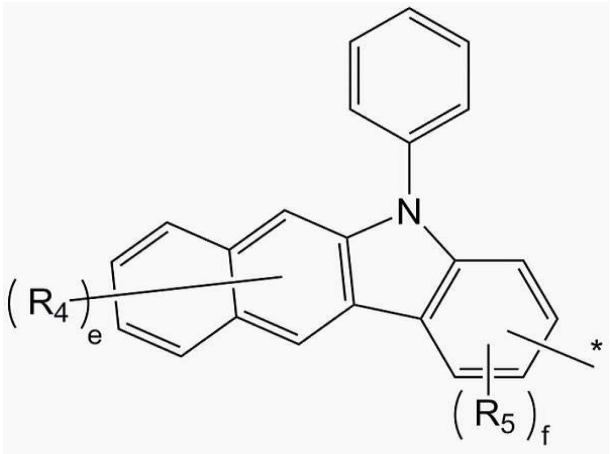


[0040]

[0041] 상기 식 중, Ar_2는 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리다지닐기 중 하나이고, R_4 및 R_5는 본 명세서에 정의된 바와 동일하고, e는 1 내지 6의 정수 중 하나이고, f는 1 내지 3의 정수 중 하나이다.

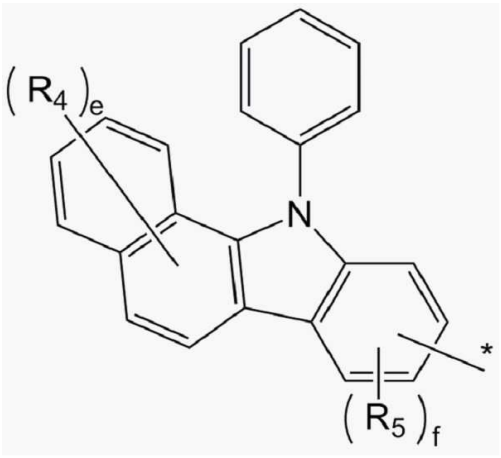
[0042] 예를 들면, 상기 화학식 2A 내지 2C 중 하나로 표시되는 벤조카바졸 구조는 구체적으로 다음과 같은 화학식 2D 내지 2O 중 하나로 표시되는 벤조카바졸 구조를 가질 수 있다:

[0043] <화학식 2D>



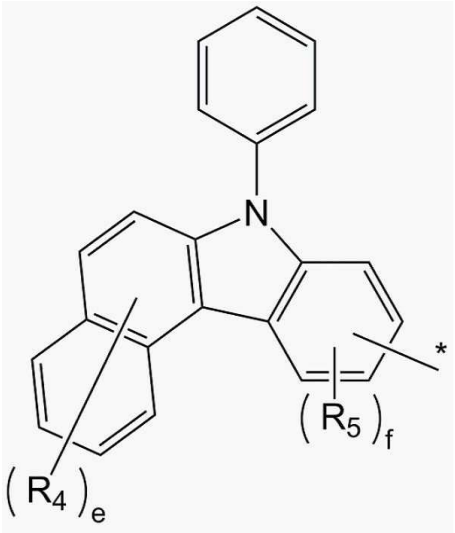
[0044]

[0045] <화학식 2E>



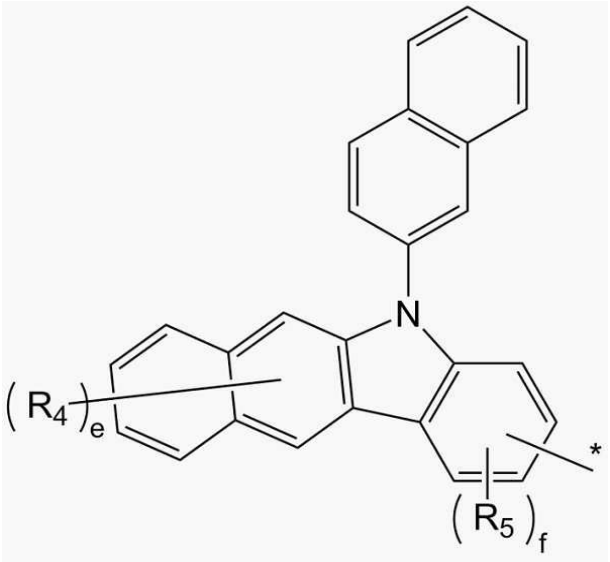
[0046]

[0047] <화학식 2F>



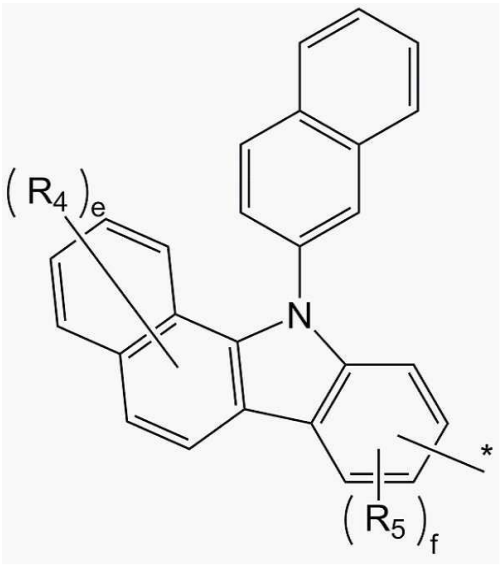
[0048]

[0049] <화학식 2G>



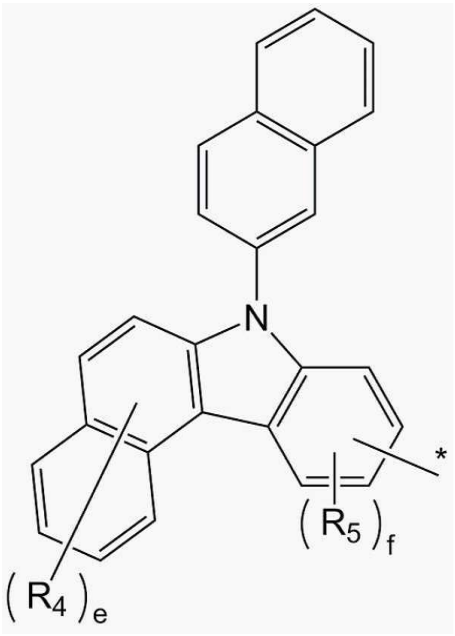
[0050]

[0051] <화학식 2H>



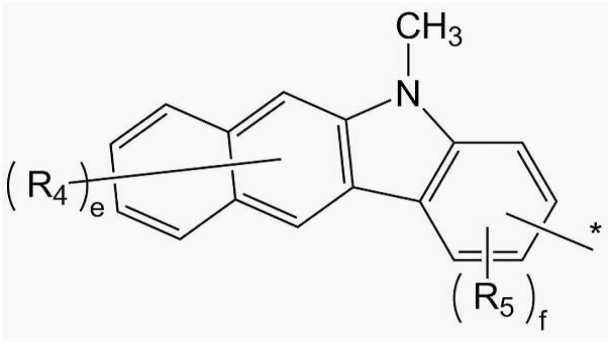
[0052]

[0053] <화학식 2I>



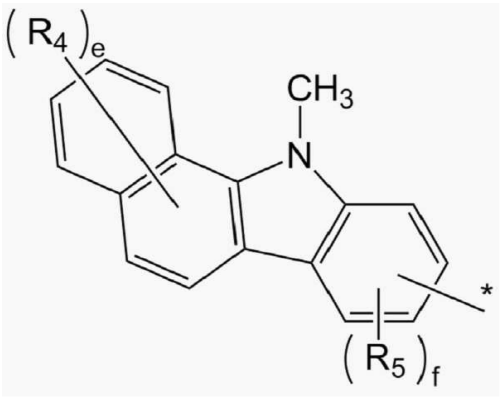
[0054]

[0055] <화학식 2J>



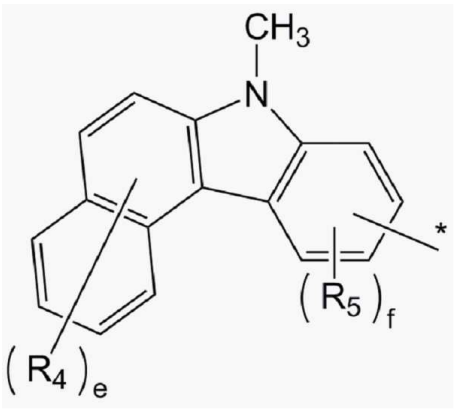
[0056]

[0057] <화학식 2K>



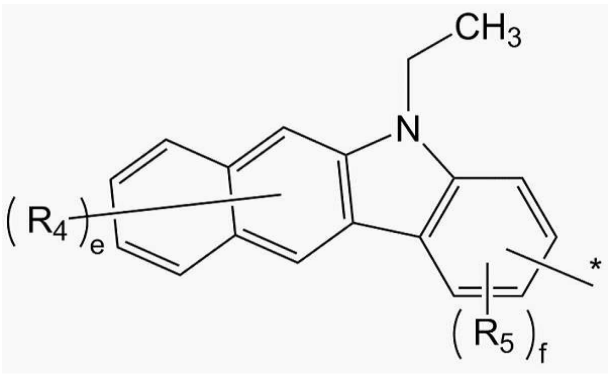
[0058]

[0059] <화학식 2L>



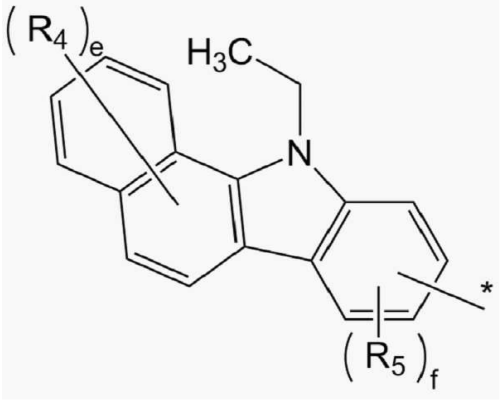
[0060]

[0061] <화학식 2M>



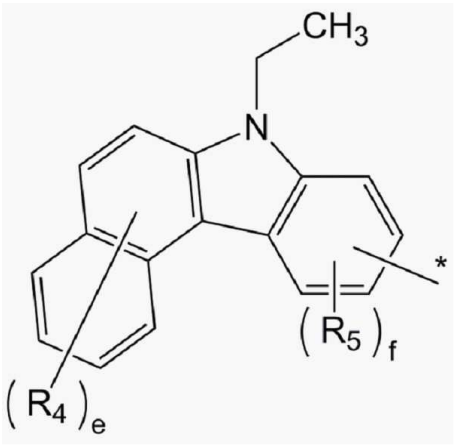
[0062]

[0063] <화학식 2N>

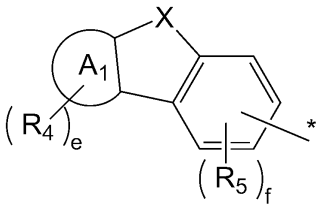


[0064]

[0065] <화학식 20>

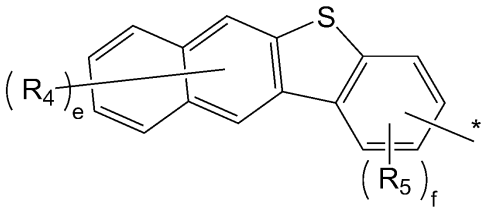


[0066] .



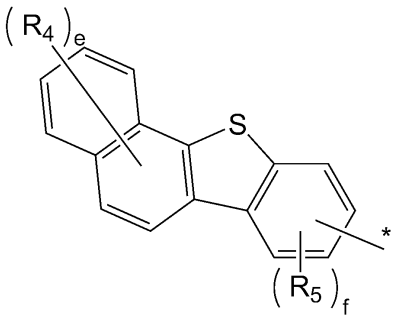
[0067] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중, 은 하기 화학식 3A 내지 3C 중 하나로 표시되는 벤조나프토티오펜 구조일 수 있다:

[0068] <화학식 3A>



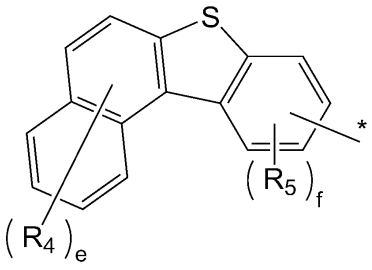
[0069]

[0070] <화학식 3B>



[0071]

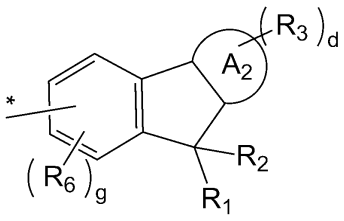
[0072] <화학식 3C>



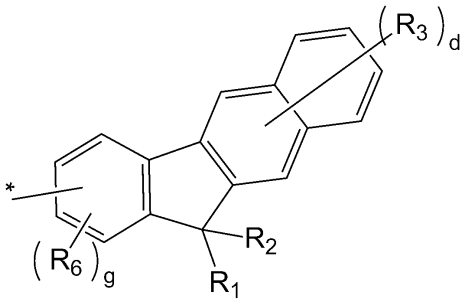
[0073]

[0074] 상기 식 중, R_4 및 R_5는 본 명세서에 정의된 바와 동일하고, e는 1 내지 6의 정수 중 하나이고, f는 1 내지 3의

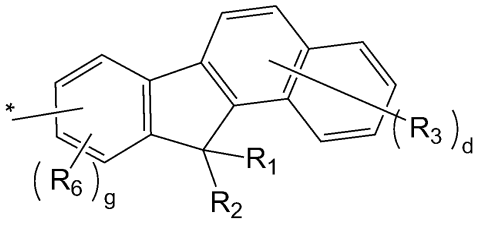
정수 중 하나이다.

[0075] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중,  은 하기 화학식 4A 내지 4C 중 하나로 표시되는 벤조플루오렌 구조일 수 있다:

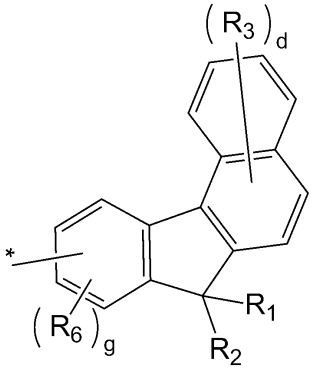
[0076] <화학식 4A>

[0077] 

[0078] <화학식 4B>

[0079] 

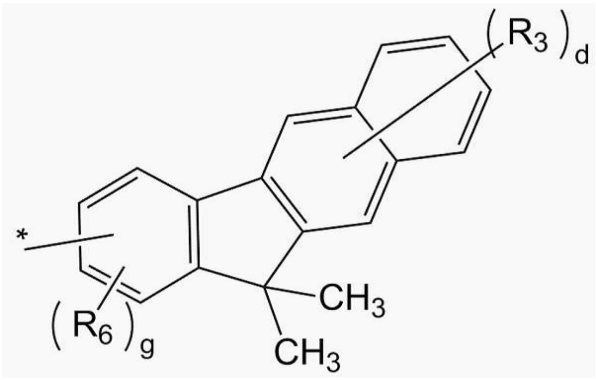
[0080] <화학식 4C>

[0081] 

[0082] 상기 식 중, R_1 및 R_2는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리다지닐기 중 하나이고, R_3 및 R_6은 본 명세서에 정의된 바와 동일하고, d는 1 내지 6의 정수 중 하나이고, g는 1 내지 3의 정수 중 하나이다.

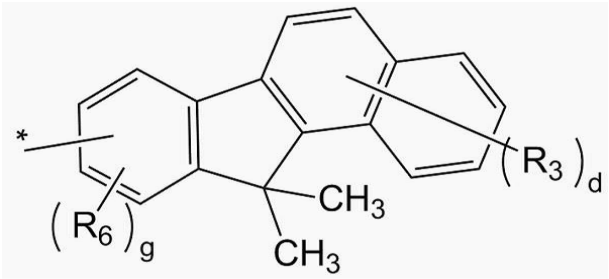
[0083] 예를 들면, 상기 화학식 4A 내지 4C 중 하나로 표시되는 벤조플루오렌 구조는 구체적으로 다음과 같은 화학식 4D 내지 4I 중 하나로 표시되는 벤조플루오렌 구조를 가질 수 있다:

[0084] <화학식 4D>



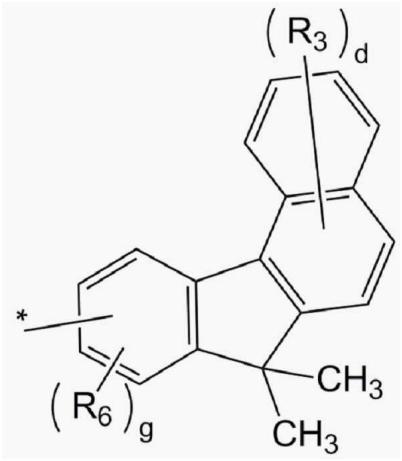
[0085]

[0086] <화학식 4E>



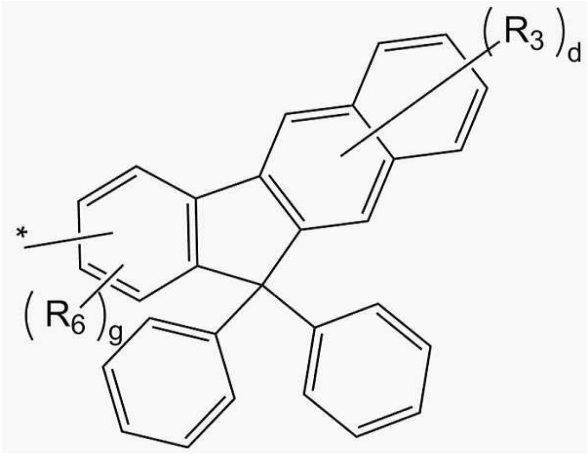
[0087]

[0088] <화학식 4F>



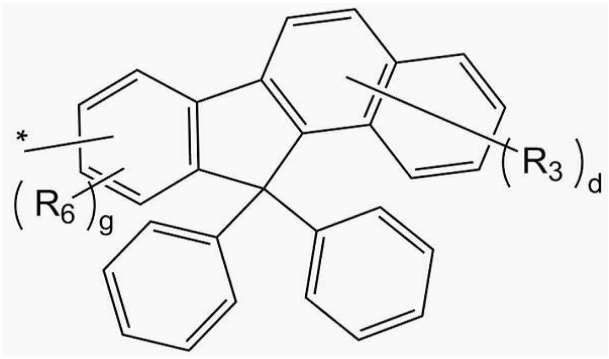
[0089]

[0090] <화학식 4G>

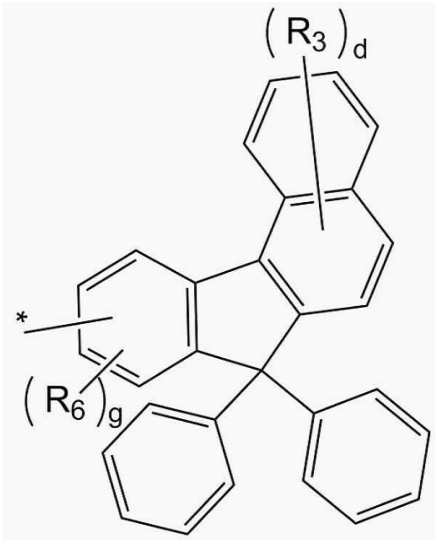


[0091]

[0092] <화학식 4H>

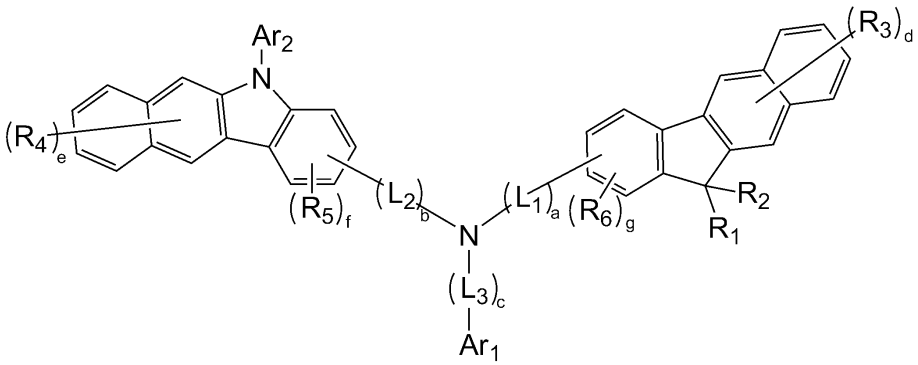
[0093] 

[0094] <화학식 4I>

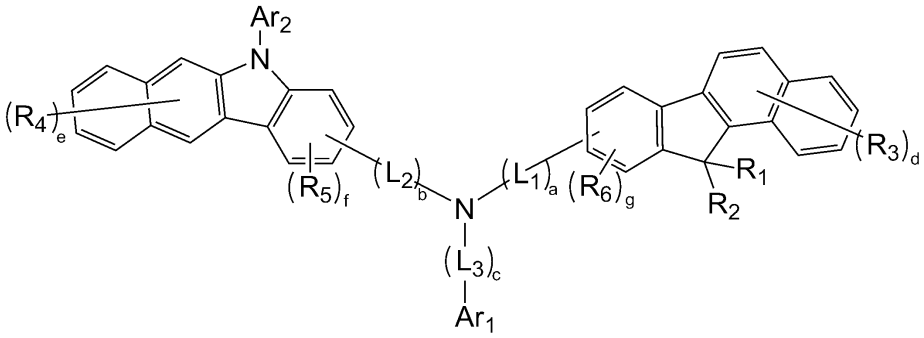
[0095] 
.

[0096] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 하기 화학식 5A 내지 5I 중 하나로 표시될 수 있다:

[0097] <화학식 5A>

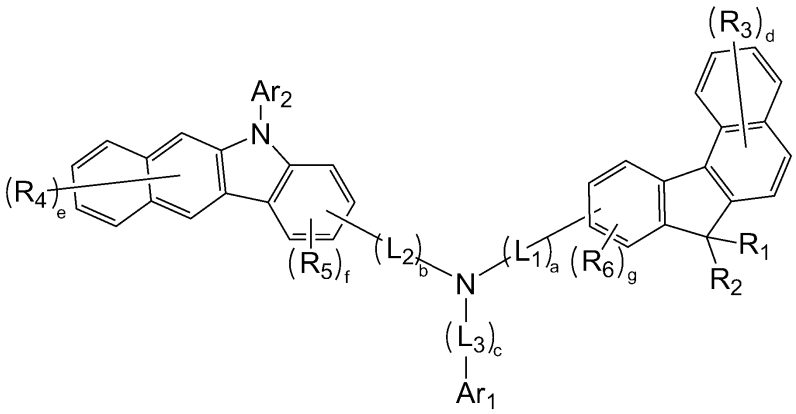
[0098] 

[0099] <화학식 5B>



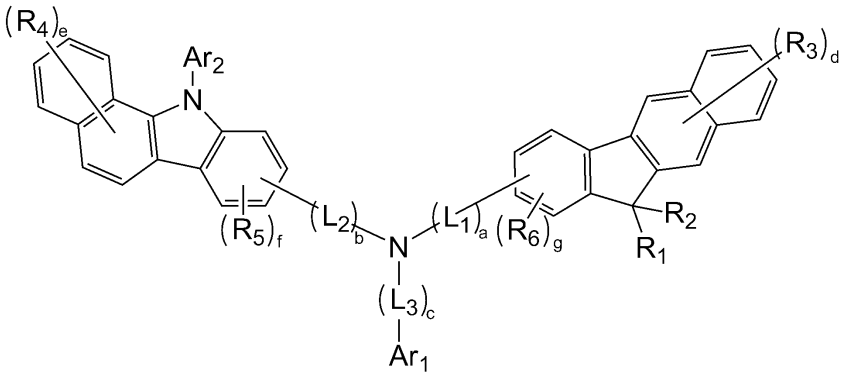
[0100]

[0101] <화학식 5C>



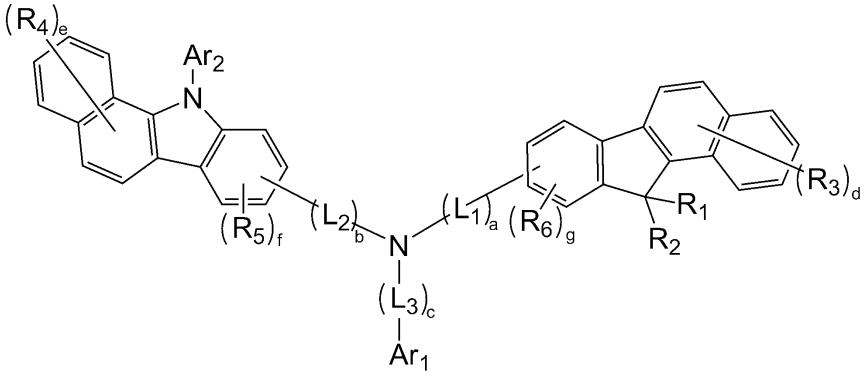
[0102]

[0103] <화학식 5D>



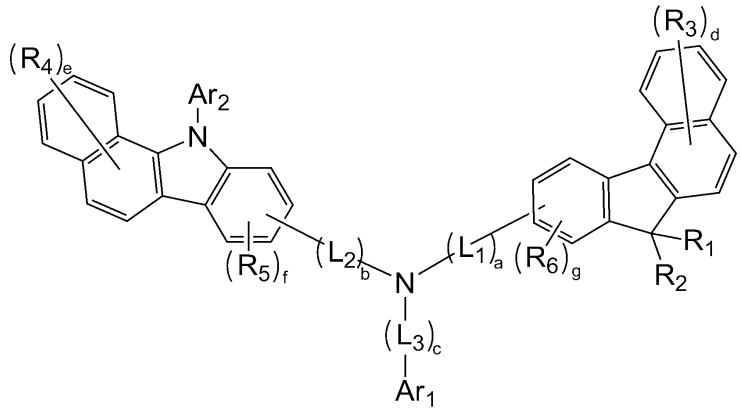
[0104]

[0105] <화학식 5E>



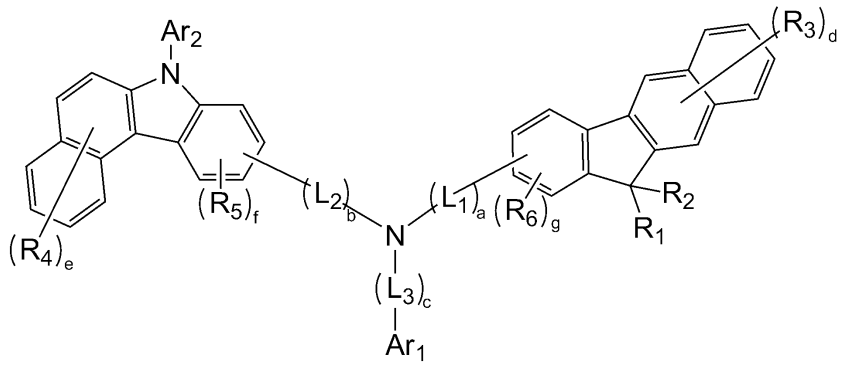
[0106]

[0107] <화학식 5F>



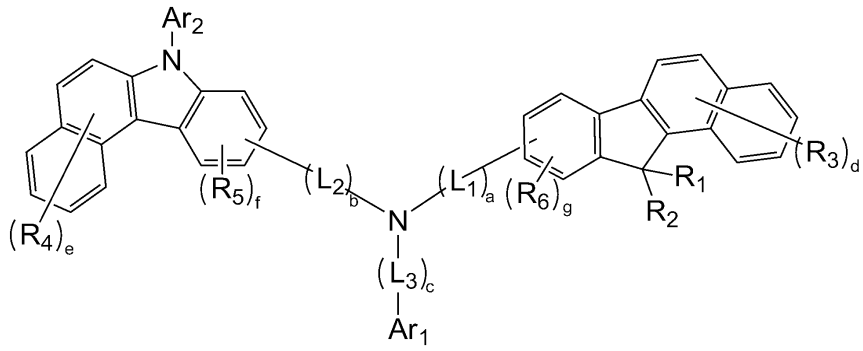
[0108]

[0109] <화학식 5G>



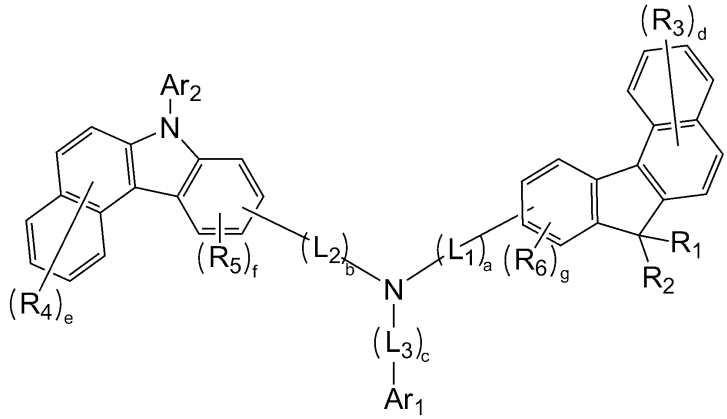
[0110]

[0111] <화학식 5H>



[0112]

[0113] <화학식 5I>



[0114]

[0115] 상기 식 중, Ar_1 및 Ar_2는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미

노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리다지닐기 중 하나이고; R_1 및 R_2는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리다지닐기 중 하나이고; R_3, R_4, R_5, R_6, L_1, L_2 및 L_3는 본 명세서에 정의된 바와 동일하고; a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수 중 하나이고, d 및 e는 서로 독립적으로 1 내지 6의 정수 중 하나이고, f 및 g는 서로 독립적으로 1 내지 3의 정수 중 하나이다.

[0116] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 L_1, L_2 및 L_3는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인데닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 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 펜타페닐렌기 및 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기 중 하나일 수 있다.

[0117] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 a, b 및 c는 서로 독립적으로 0 또는 1일 수 있다. a, b 및 c가 0인 경우는 단일 결합을 의미한다. 예를 들면 a, b 및 c는 모두 0일 수 있다.

[0118] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 Ar_1 및 Ar_2는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 파이레닐기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸라닐, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기, $N(Q_1)(Q_2)$로 표시되는 그룹 및 $Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있다. 특히, Ar_1은 화학식 1 중 말단에 위치하며, 예를 들면, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또

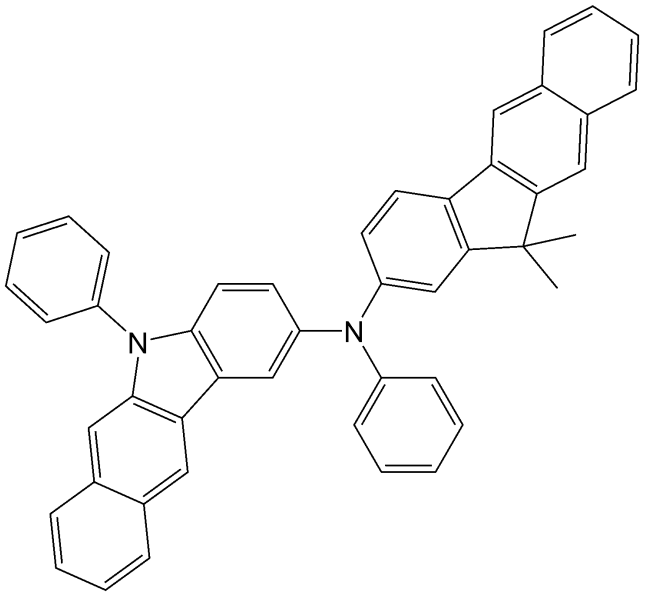
는 비치환된 피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리다지닐기 중 하나일 수 있다.

[0119] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기(methyl), 치환 또는 비치환된 에틸기(ethyl), 치환 또는 비치환된 프로필기(propyl), 치환 또는 비치환된 부틸기(butyl), 치환 또는 비치환된 펜틸기(pentyl), 치환 또는 비치환된 페닐기(phenyl), 치환 또는 비치환된 펜타레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인데닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphtyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐기(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵타레닐기(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐기(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphtyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 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 펜타페닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl), 치환 또는 비치환된 피롤일기(pyrrolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸일기(imidazolyl), 치환 또는 비치환된 피라졸일기(pyrazolyl), 치환 또는 비치환된 피리디닐기(pyridinyl), 치환 또는 비치환된 피라지닐기(pyrazinyl), 치환 또는 비치환된 피리미디닐기(pyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 피리다지닐기(pyridazinyl), 치환 또는 비치환된 이소인돌일기(isoindolyl), 치환 또는 비치환된 인돌일기(indolyl), 치환 또는 비치환된 인다졸일기(indazolyl), 치환 또는 비치환된 푸리닐기(purinyl), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기(quinolinyl), 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기(benzoquinolinyl), 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기(phthalazinyl), 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기(quinoxalinyl), 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기(quinazolinyl), 치환 또는 비치환된 시놀리닐기(cinnolinyl), 치환 또는 비치환된 카바졸일기(carbazolyl), 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 치환 또는 비치환된 아크리디닐기(acridinyl), 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기(phenanthrolinyl), 치환 또는 비치환된 페나지닐기(phenazinyl), 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기(benzoimidazolyl), 치환 또는 비치환된 푸라닐기(furanyl), 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기(benzofuranyl), 치환 또는 비치환된 티오페닐기(thiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기(benzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 티아졸일기(thiazolyl), 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기(isothiazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기(benzothiazolyl), 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기(isoxazolyl), 치환 또는 비치환된 옥사졸일기(oxazolyl), 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기(oxadiazolyl), 치환 또는 비치환된 트리아지닐기(triazinyl), 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기(dibenzopuranyl) 및 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기(dibenzothiophenyl) 중 하나일 수 있다. 예를 들면, R_1 및 R_2는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리다지닐기 중 하나일 수 있다.

[0120] 예를 들면, 상기 화학식 1은 R_3, R_4, R_5 및 R_6가 수소 원자이고, R_1 및 R_2는 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리다지닐기 중 하나인 축합환 화합물일 수 있다.

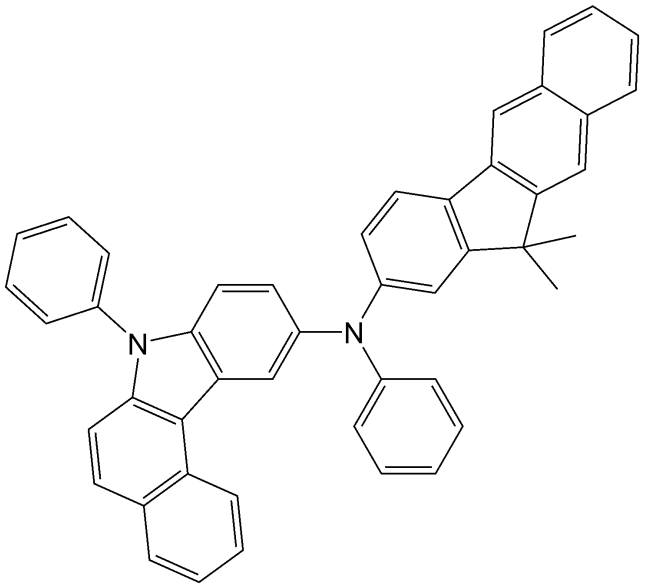
[0121] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 하기 화합물 1 내지 15로 표시되는 화합물들 중 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0122] <화합물 1>



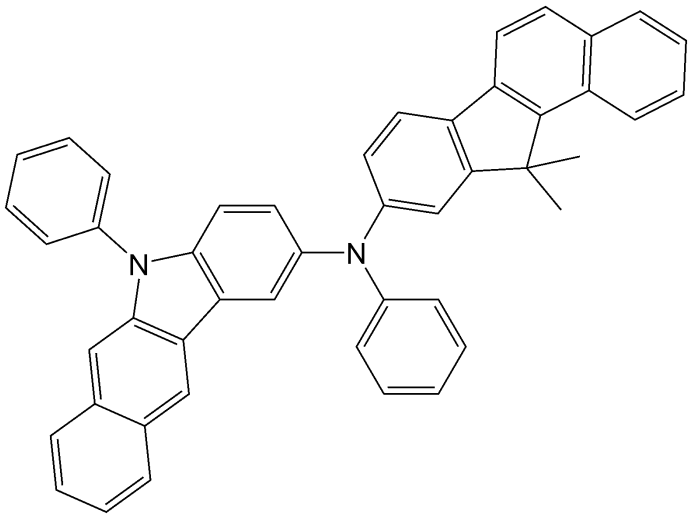
[0123]

[0124] <화합물 2>



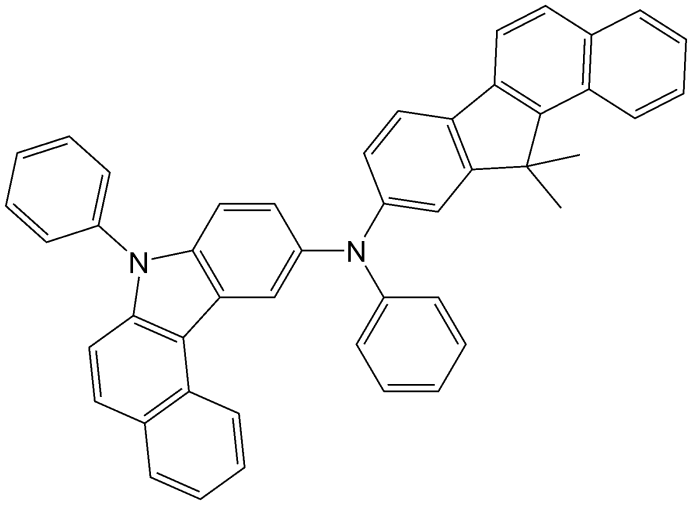
[0125]

[0126] <화합물 3>



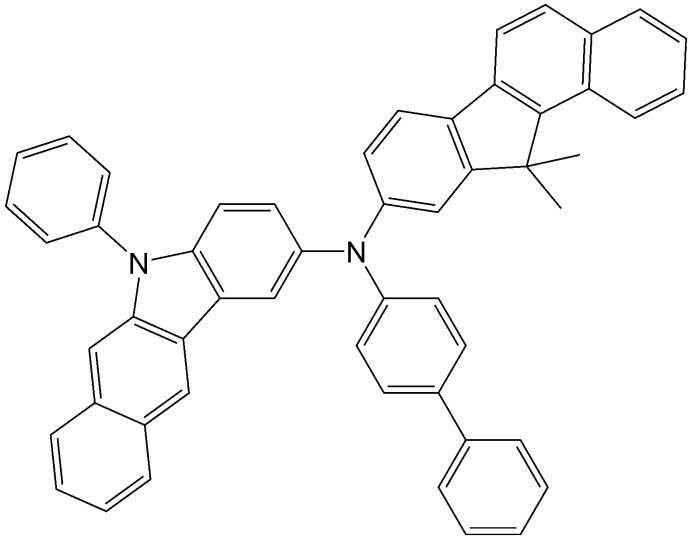
[0127]

[0128] <화합물 4>



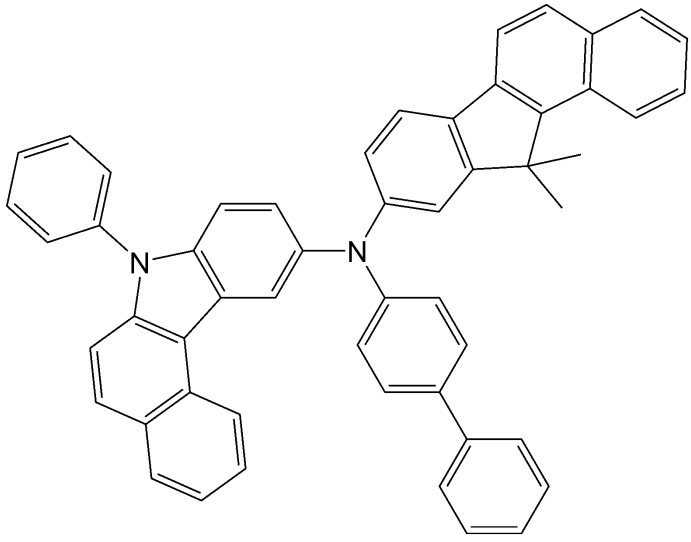
[0129]

[0130] <화합물 5>



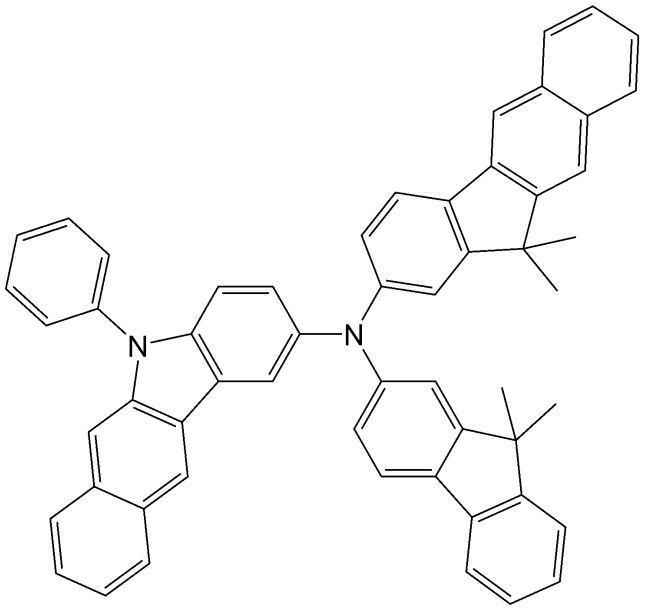
[0131]

[0132] <화합물 6>



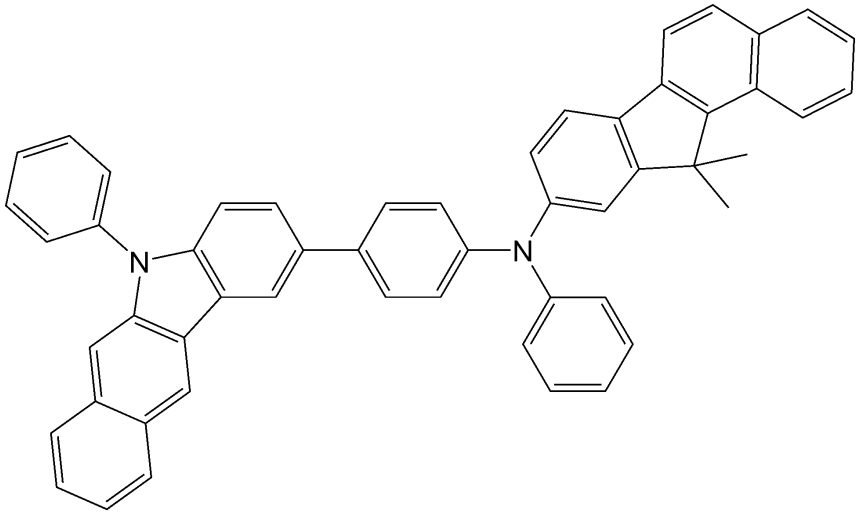
[0133]

[0134] <화합물 7>



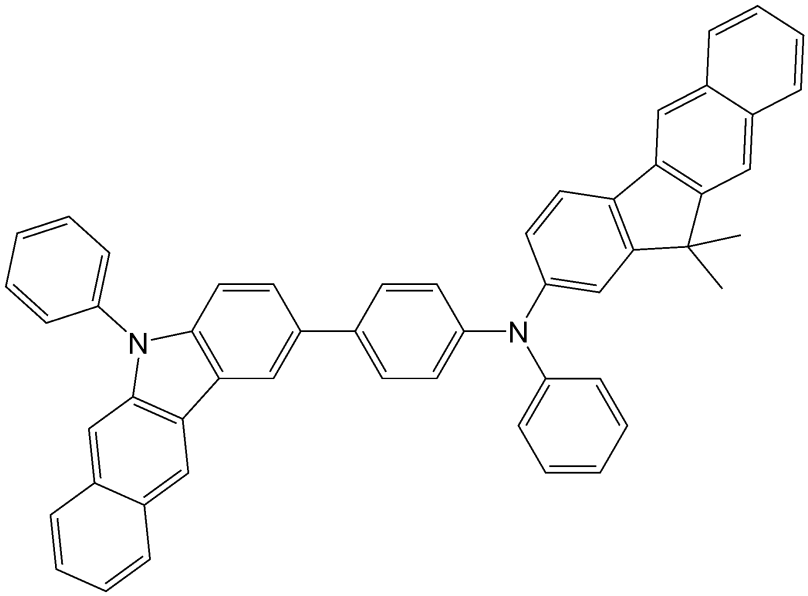
[0135]

[0136] <화합물 8>



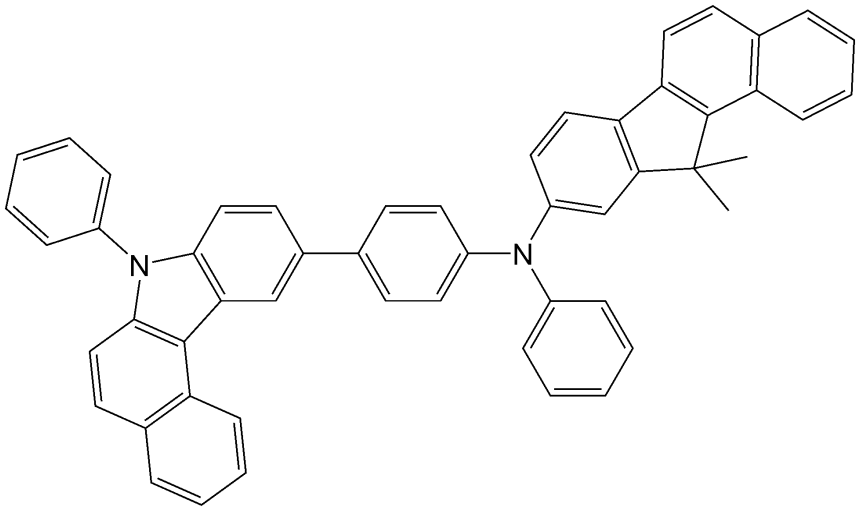
[0137]

[0138] <화합물 9>



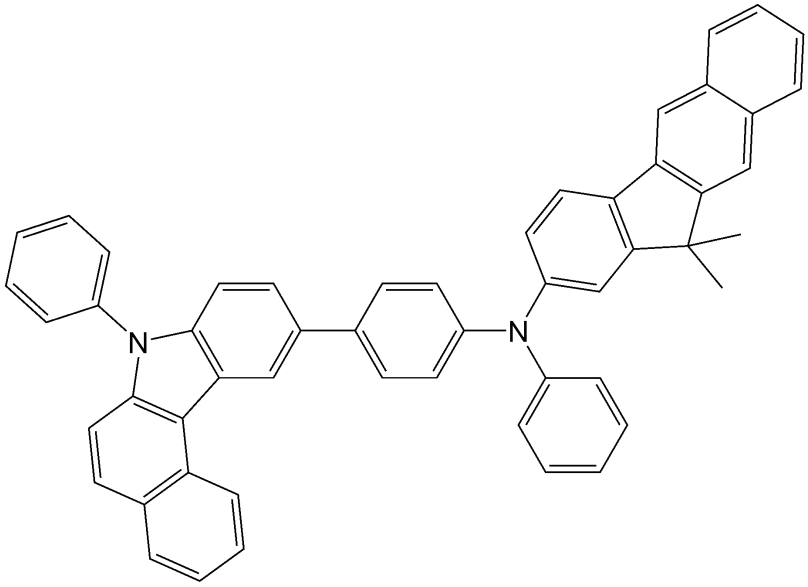
[0139]

[0140] <화합물 10>



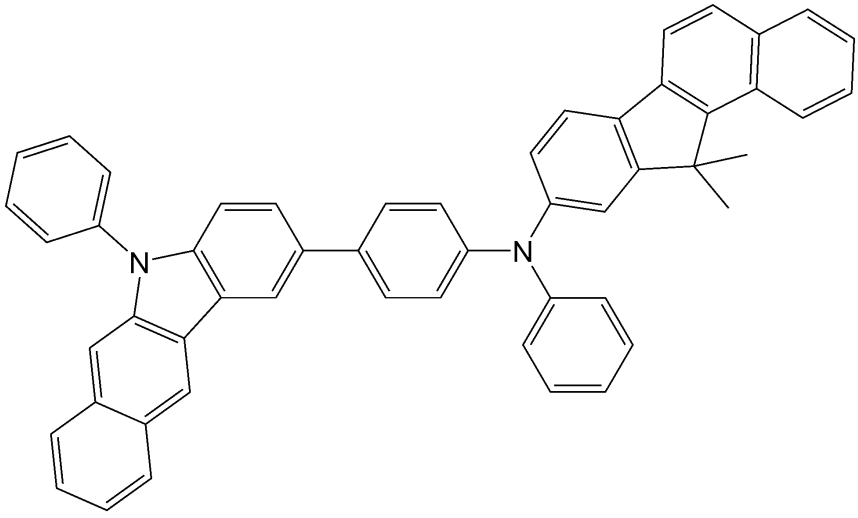
[0141]

[0142] <화합물 11>



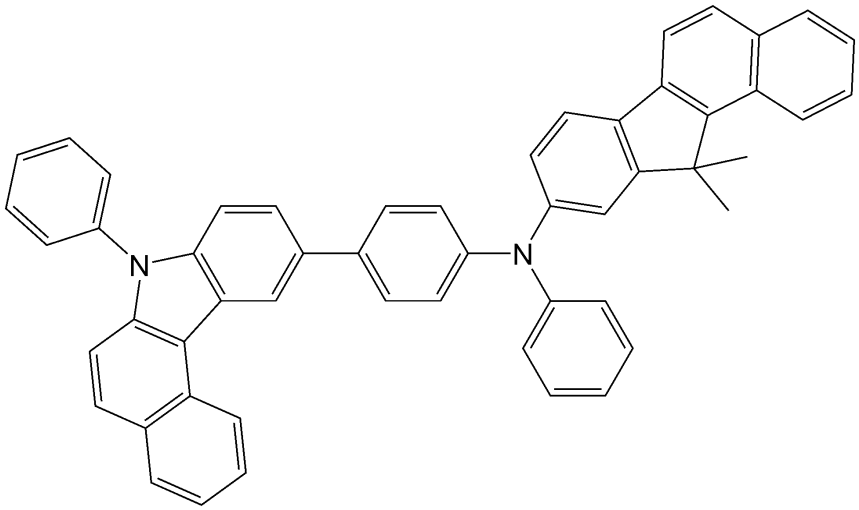
[0143]

[0144] <화합물 12>



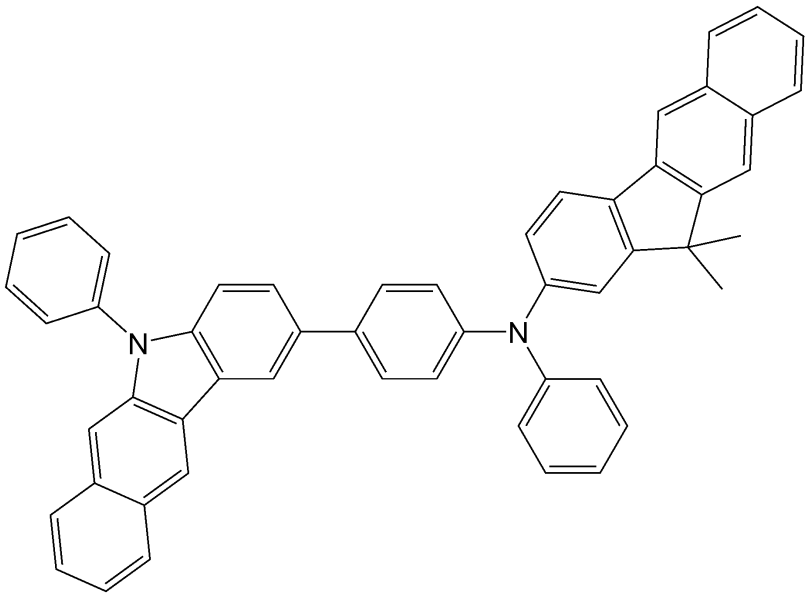
[0145]

[0146] <화합물 13>



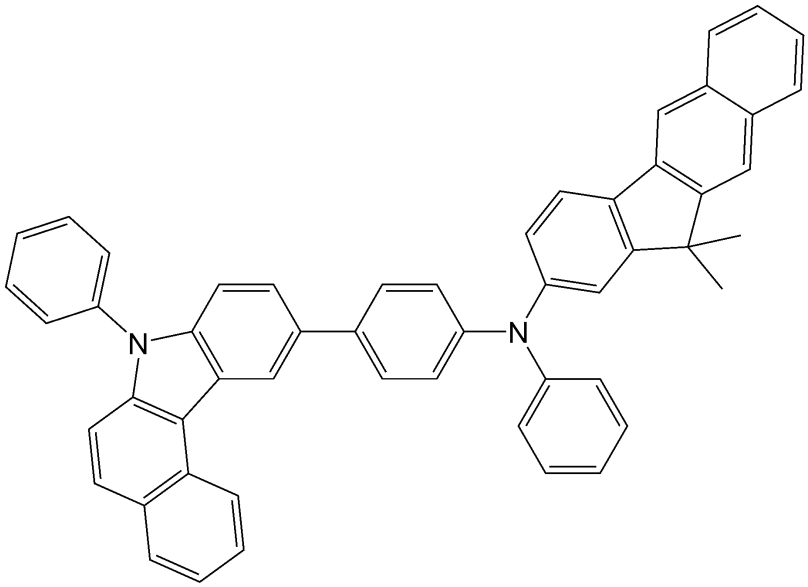
[0147]

[0148] <화합물 14>



[0149]

[0150] <화합물 15>

[0151] 

.

[0152] 본 명세서 중의 "치환 또는 비치환된 A(A는 임의의 치환기)"라는 표현 중 "치환된 A"란 용어는 "상기 A의 하나 이상의 수소 원자가 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기 또는 이의 염 유도체, 술폰산기 또는 이의 염 유도체, 인산기 또는 이의 염 유도체, C1-C30알킬기, C2-C30알케닐기, C2-C30알키닐기, C1-C30알콕시기, C3-C30시클로알킬기, C3-C30시클로알케닐기, C5-C30아릴기, C5-C30아릴옥시기, C5-C30아릴티오기, C2-C30헤테로시클릭 그룹, N(Q101)(Q102)로 표시되는 그룹 및 Si(Q103)(Q104)(Q105)로 표시되는 그룹 중 하나의 치환기로 치환된 A"를 의미한다. 여기서, 상기 Q101 내지 Q105는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, C1-C30알킬기, C2-C30알케닐기, C2-C30알키닐기, C1-C30알콕시기, C3-C30시클로알킬기, C3-C30시클로알케닐기, C5-C30아릴기, C5-C30아릴옥시기, C5-C30아릴티오기, C2-C30헤테로시클릭 그룹일 수 있다.

[0153] 예를 들어, 상기 "치환된 A"란 상기 A의 하나 이상의 수소 원자가 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 아줄레닐기, 헵타레닐기, 인다세닐기, 아세나프틸기, 플루오레닐기, 스파이로-플루오레닐기, 페날레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 나프타세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 펜타페닐기, 헥사세닐기, 피롤일기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 프탈라지닐기, 나프티리디닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트리디닐기, 아크리디닐기, 페난트롤리닐기, 페나지닐기, 벤조옥사졸일기, 벤조이미다졸일기, 푸라닐, 벤조푸라닐기, 티오페닐기, 벤조티오페닐기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 벤조티아졸일기, 이소옥사졸일기, 옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 벤조옥사졸일기, 디벤조푸라닐기, 또는 디벤조티오페닐기로 치환된 A"를 의미할 수 있다.

[0154] 본 명세서 중 치환된 C_1-C_{30}알킬기는 알칸(alkane)에서 수소 원자 1 개가 결여된 선형 및 분지형 구조의 포화 탄화수소기를 의미한다. 비치환된 C_1-C_{30}알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있다. 치환된 C_1-C_{30}알킬기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0155] 본 명세서 중 비치환된 C_2-C_{30}알케닐기는 상기 비치환된 C_2-C_{30}알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 말단기를 의미한다. 비치환된 C_2-C_{30}알케닐기의 예로는 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 헥세닐, 헵테닐, 옥테닐, 프로파디에닐(propadienyl), 이소프레닐(isoprenyl), 알릴(allyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C_2-C_{30}알케닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0156] 본 명세서 중 비치환된 C_2-C_{30}알키닐기는 상기 비치환된 C_2-C_{60}알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 말단기를 의미한다. 비치환된 C_2-C_{30}알키닐기의 예로는 아세틸레닐(acetyleny1) 등을 들

수 있다. 치환된 C_2-C_{30}알키닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0157] 본 명세서 중 비치환된 C_1-C_{30}알콕시기는 -OY(단, Y는 상기 비치환된 C_1-C_{30}알킬기임)의 화학식을 가지며, 이의 구체적인 예로서 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시, 부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있다. 치환된 C_1-C_{30}알콕시기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0158] 본 명세서 중 비치환된 C_3-C_{30}시클로알킬기는 고리형 포화 탄화수소기를 가리키는 것으로서, 이의 구체예로는 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로옥틸 등을 들 수 있다. 치환된 C_3-C_{30}시클로알킬기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0159] 본 명세서 중 비치환된 C_3-C_{30}시클로알케닐기는 하나 이상의 탄소 이중결합을 가지면서 방향족 고리가 아닌 고리형 불포화 탄화수소기를 의미한다. 비치환된 C_3-C_{30}시클로알케닐기의 예로는 시클로프로페닐(cyclopropenyl), 시클로부테닐(cyclobutenyl), 시클로펜테닐, 시클로헥세닐, 시클로헵테닐, 1,3-시클로헥사디에닐기, 1,4-시클로헥사디에닐기, 2,4-시클로헵타디에닐기, 1,5-히클로옥타디에닐기 등을 들 수 있다. 치환된 C_3-C_{60}시클로알케닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0160] 본 명세서 중 비치환된 C_5-C_{30}아릴기는 탄소 원자수 5 내지 30개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭(monocyclic) 또는 폴리시클릭(polycyclic) 그룹 등일 수 있다. 폴리시클릭 그룹인 경우, 이에 포함된 2 이상의 고리는 서로 융합될(fused) 수 있다. 비치환된 C_5-C_{30}아릴기의 예로는 페닐(phenyl), 펜타레닐(pentalenyl), 인데닐(indenyl), 나프틸(naphtyl), 아줄레닐(azulenyl), 헵타레닐(heptalenyl), 인다세닐(indacenyl), 아세나프틸(acenaphtyl), 플루오레닐(fluorenyl), 스파이로-플루오레닐, 페날레닐(phenalenyl), 페난트레닐(phenanthrenyl), 안트릴(anthryl), 플루오란테닐(fluoranthenyl), 트리페닐레닐(triphenylenyl), 파이레닐(pyrenyl), 크라이세닐(chrysenyl), 나프타세닐(naphthacenyl). 피세닐(picenyl), 페릴레닐(perylenyl), 펜타페닐(pentaphenyl), 헥사세닐(hexacenyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C_5-C_{30}아릴기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0161] 본 명세서 중 비치환된 C_5-C_{30}아릴옥시기는 상기 C_5-C_{30}아릴기의 탄소 원자가 산소 연결기(-O-)를 통하여 부착된 1가 그룹을 의미한다. 치환된 C_5-C_{30}아릴옥시기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0162] 본 명세서 중 비치환된 C_5-C_{30}아릴티오기는 상기 C_5-C_{30}아릴기의 탄소 원자가 황 연결기(-S-)를 통하여 부착된 1가 그룹을 의미한다. 비치환된 C_5-C_{30}아릴티오기의 예로는 페닐티오, 나프틸티오, 인다닐티오 및 인데닐티오 등을 들 수 있다. 치환된 C_5-C_{30}아릴티오기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0163] 본 명세서 중 비치환된 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹은 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함한 고리를 하나 이상 포함하는 모노시클릭(monocyclic) 또는 폴리시클릭(polycyclic) 그룹을 의미한다. 폴리시클릭 그룹일 경우, 이에 포함된 2 이상의 고리는 서로 융합될(fused) 수 있다. 비치환된 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹의 구체예로는 피롤일(pyrrolyl), 이미다졸일(imidazolyl), 피라졸일(pyrazolyl), 피리디닐(pyridinyl), 피라지닐(pyrazinyl), 피리미디닐(pyrimidinyl), 피리다지닐(pyridazinyl), 이소인돌일(isoindolyl), 인돌일(indolyl), 인다졸일(indazolyl), 푸리닐(purinyl), 퀴놀리닐(quinolinyl), 벤조퀴놀리닐(benzoquinolinyl), 프탈라지닐(phthalazinyl), 나프티리디닐(naphthyridinyl), 퀴녹살리닐(quinoxalinyl), 퀴나졸리닐(quinazolinyl), 시놀리닐(cinnolinyl), 카바졸일(carbazolyl), 페난트리닐(phenanthridinyl), 아크리디닐(acridinyl), 페난트롤리닐(phenanthrolinyl), 페나지닐(phenazinyl), 벤조옥사졸일(benzooxazolyl), 벤조이미다졸일(benzoimidazolyl), 푸라닐(furanyl), 벤조푸라닐(benzofuranyl), 티오페닐(thiophenyl), 벤조티오페닐(benzothiophenyl), 티아졸일(thiazolyl), 이소티아졸일(isothiazolyl), 벤조티아졸일(benzothiazolyl), 이소옥사졸일(isoxazolyl), 옥사졸일(oxazolyl), 트리아졸일, 테트라졸, 옥사디아졸일, 트리아지닐, 벤조옥사졸일(benzooxazolyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0164] 본 명세서 중 비치환된 C_1-C_{30}알킬렌기는 알칸에서 수소 원자 2 개가 결여된 선형 및 분지형 구조의 2가

(divalent) 그룹을 의미한다. 비치환된 C_1-C_{30}알킬렌기의 예는 상기 비치환된 C_1-C_{30}알킬기의 예를 참조하여 이해될 수 있다. 치환된 C_1-C_{30}알킬렌기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0165] 본 명세서 중 비치환된 C_5-C_{30}아릴렌기는 탄소 원자수 5 내지 30개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다. 비치환된 C_5-C_{30}아릴렌기의 구체예는 상기 비치환된 C_5-C_{30}아릴기의 예를 참조하여 이해될 수 있다. 치환된 C_5-C_{30}아릴렌기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0166] 본 명세서 중 비치환된 2가 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹이란 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함한 고리를 하나 이상 포함하는 모노시클릭 또는 폴리시클릭 2가 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다. 비치환된 2가 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹의 구체예는 상기 비치환된 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹의 예를 참조하여 이해될 수 있다. 치환된 2가 C_2-C_{30}헤테로시클릭 그룹의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0167] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 축합환 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자에게 용이하게 인식될 수 있다.

[0168] 다른 한 측면에 따라, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 적어도 하나의 유기층을 포함하고, 상기 유기층이 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 유기 발광 소자가 제공된다.

[0169] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 유기 발광 소자에 사용될 수 있다. 상기 화학식 1로 표시도는 축합환 화합물은 유기 발광 소자 내에서 적색, 녹색, 청색 및 백색 등 모든 색을 우수하게 표현할 수 있으며 구동 전압을 낮추고 효율을 높여주고 수명을 개선시킨다.

[0170] 상기 유기층은 유기 발광 소자에서 정공 주입층 또는 정공 수송층일 수 있다. 이 경우 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이. 정공 주입층 재료 또는 정공 수송층 재료로 포함될 수 있다. 한편, 상기 유기층은 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 가지는 기능층(functional layer) 일 수 있고 이 경우 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 상기 단일막의 재료로 포함될 수 있다.

[0171] 상기 유기 발광 소자는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 정공 수송층과 형광 또는 인광 호스트를 포함하는 발광층을 포함할 수 있다.

[0172] 예를 들면, 상기 유기 발광 소자는 제1전극/정공 주입층/ 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 정공 수송층/발광층/ 전자 수송층/전자 주입층/제2전극의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0173] 또한, 상기 유기층은 유기 발광 소자에서 발광층일 수 있어, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 발광층 재료로 포함할 수 있다. 상세하게는, 상기 발광층이 상기 화학식1로 표시되는 축합환 화합물만을 포함할 수 있거나 또는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 이외에 이종의 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0174] 예를 들면, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 발광층의 형광 호스트 또는 인광 호스트로 사용될 수 있다. 이 경우, 상기 발광층은 형광 도펀트 또는 인광 도펀트를 더 포함할 수 있다. 즉, 상기 발광층은 형광 호스트의 역할을 하는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물과 형광 도펀트를 포함하거나, 또는 인광 호스트의 역할을 하는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물과 인광 도펀트를 포함할 수 있다. 또한, 예를 들면, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 발광층의 형광 도펀트로 사용될 수 있다. 이 경우, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 형광 호스트 또는 인광 호스트를 더 포함할 수 있다. 즉, 상기 발광층은 형광 도펀트의 역할을 하는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물과 인광 호스트 또는 형광 호스트를 포함할 수 있다.

[0175] 상기 유기 발광 소자는, 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 발광층 이외에 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 하나 이상의 층을 포함할 수 있다.

[0176] 상기 유기 발광 소자의 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 층들 중 하나 이상의 층은 증착법 또는 습식 공정에 의하여 형성될 수 있다. 예를 들면 제1전극 및 제2전극 사이에 포함되는 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 하나 이상의 층이 증착법 또는 습식 공정에 의하여 형성될 수 있다.

[0177] 본 명세서 중 "습식 공정"이란 소정의 물질을 소정의 용매와 혼합하여 수득한 혼합물을 소정의 기판 상에 제공한 후, 건조 및/또는 열처리하여 상기 소정의 용매의 일부 이상을 제거함으로써, 상기 기판 상에 상기 소정의 물질을 포함한 막을 형성하는 공정을 말한다.

[0178] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 유기층은 통상의 진공 증착법에 의하여 형성될 수 있거나 습식 공정에 의하여 형성될 수 있다.

[0179] 예를 들면 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 및 용매를 포함한 혼합물을 스핀 코팅법, 스프레잉법, 잉크젯 프린팅법, 디핑법, 캐스팅, 그라비아 코팅, 바 코팅, 롤 코팅, 와이어 바 코팅, 스크린 코팅, 플렉소 코팅, 오프셋 코팅 또는 레이저 전사법 등을 이용하여 정공 수송층 형성 영역에 제공한 후, 상기 정공 수송층 형성 영역에 제공된 상기 혼합물을 건조 및/또는 열처리하여 상기 용매의 일부 이상을 제거함으로써 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 정공 수송층을 형성할 수 있다.

[0180] 한편, 베이스 필름에 상술한 바와 같은 습식 공정을 이용하여 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 층을 형성하고 상기 층을 정공 수송층 형성 영역에 레이저 등을 이용하여 전사시키는 레이저 전사법도 이용할 수 있다.

[0181] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명한다.

[0182] 유기 발광 소자(10)는 기판(11), 제1전극(12), 정공 주입층(13), 정공 수송층(14), 발광층(15), 전자 수송층(16), 전자 주입층(17) 및 제2전극(18)을 차례로 구비한다.

[0183] 상기 기판(11)으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.

[0184] 상기 제1전극(12)은 기판 상부에 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(12)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록 제1전극용 물질은 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(12)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(12)을 반사형 전극으로 형성할 수도 있다. 상기 제1전극(12)은 서로 다른 2종의 물질을 포함할 수 있다. 예를 들면, 상기 제1전극(12)을 서로 다른 2종의 물질을 포함한 2층 구조로 형성할 수 있는 등 다양한 변형예가 가능하다.

[0185] 상기 제1전극(12) 상부로는 정공 주입층(13)이 구비되어 있다.

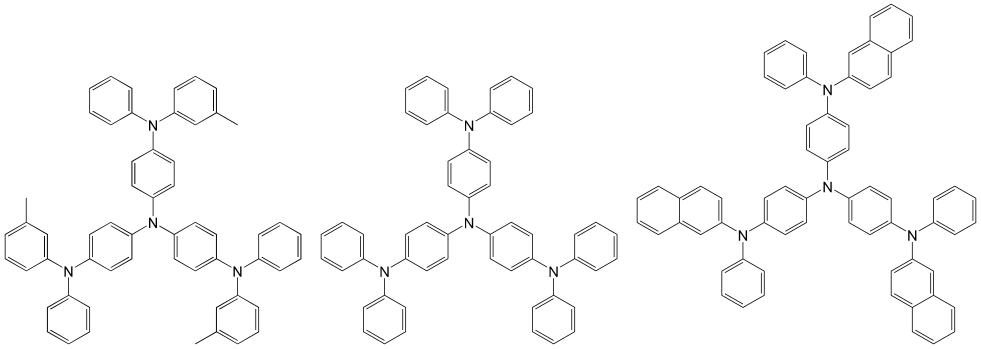
[0186] 정공 주입층(13)은 상기 제1전극(12) 상부에 상술한 바와 같은 진공 증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

[0187] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층(13)을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500℃, 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.

[0188] 습식 공정으로서, 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80℃ 내지 200℃의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0189] 정공 주입층 물질로는 상술한 바와 같은 축합환 화합물을 이용할 수 있다. 또는, 축합환 화합물 및 공지된 정공 주입 재료 중 1종 이상을 사용할 수 있는데, 예를 들면, 구리프탈로시아닌 등과 같은 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA(하기 화학식 참조), TDATA(하기 화학식 참조), 2-TNATA(하기 화학식 참조), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠술폰산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonicacid:폴리아닐린/캠퍼술폰산) 또는 PANI/PSS

(Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린)/폴리(4-스티렌술포네이트))등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.

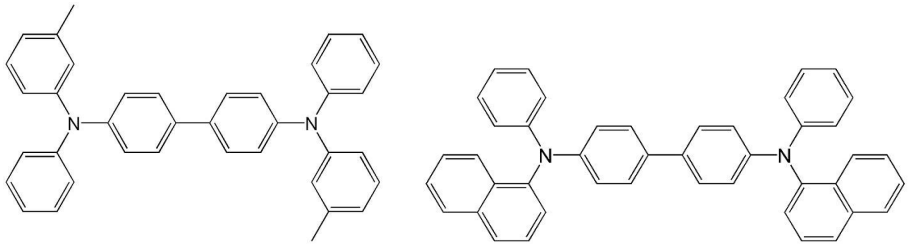
[0190] 

[0191] m-MTDATA TDATA 2-TNATA

[0192] 상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스러운 정도의 정공 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0193] 다음으로 상기 정공 주입층(13) 상부에 진공 증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등을 이용하여 정공 수송층(14)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의하여 정공 수송층(14)을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0194] 정공 수송층 물질로는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 사용할 수 있다. 또한, 정공 수송층은 공지된 정공 수송 재료를 더 포함할 수 있는데, 예를 들면 TPD(하기 화학식 참조), NPB(하기 화학식 참조) 등을 포함할 수 있다.

[0195] 

[0196] TPD NPB

[0197] 상기 정공 수송층(14)의 두께는 약 50Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 800Å일 수 있다. 상기 정공 수송층(14)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0198] 정공 주입층(13)과 정공 수송층(14) 대신, 정공 주입 기능과 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층(미도시)을 형성할 수 있다. 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 물질은 공지된 재료 중에서 선택될 수 있다.

[0199] 상기 정공주입층(13), 정공수송층(14) 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나는 상술한 바와 같은 화학식 1의 축합환 화합물, 공지된 정공 주입 재료 및 공지된 정공 수송 재료 외에, 막의 도전성 등을 향상시키기 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.

[0200] 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 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

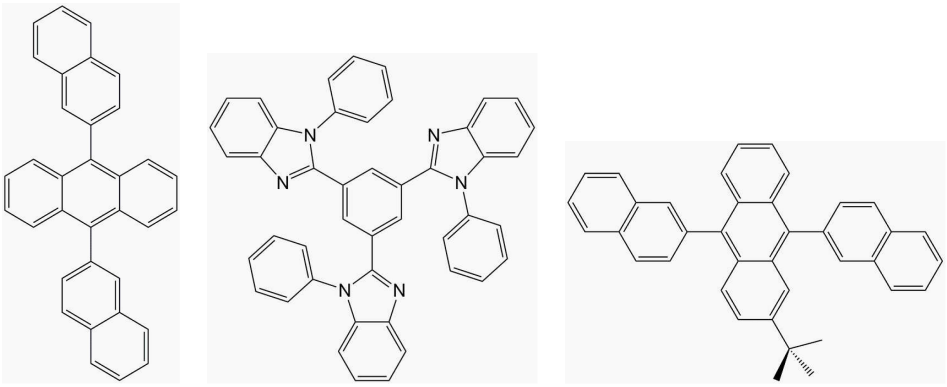
[0201] 상기 정공주입층, 상기 정공수송층 또는 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층이 상기 전하-생성 물질을 더 포함할 경우, 상기 전하-생성 물질은 상기 층들 중에 균일하게(homogeneous) 분산되거나,

또는 불균일하게 분포되어 있을 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.

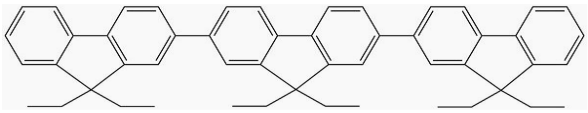
[0202] 상기 정공 수송층 또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 상부에 진공 증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(15)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 발광층(15)을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0203] 상기 발광층(15)은 상기 화학식 1의 축합환 화합물, 공지의 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도펀트 또는 및 형광 도펀트 중 1종 이상의 물질을 포함할 수 있다. 상기 발광층(15)이 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 경우 상기 축합환 화합물은 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도펀트 또는 형광 도펀트로서의 역할을 할 수 있다.

[0204] 공지의 호스트로서, CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), ADN(9, 10-디-나프탈렌-2-일-안트라센, 하기 화학식 참조), TPBI(하기 화학식 참조), TBADN(하기 화학식 참조) E3(하기 화학식 참조), 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0205] 

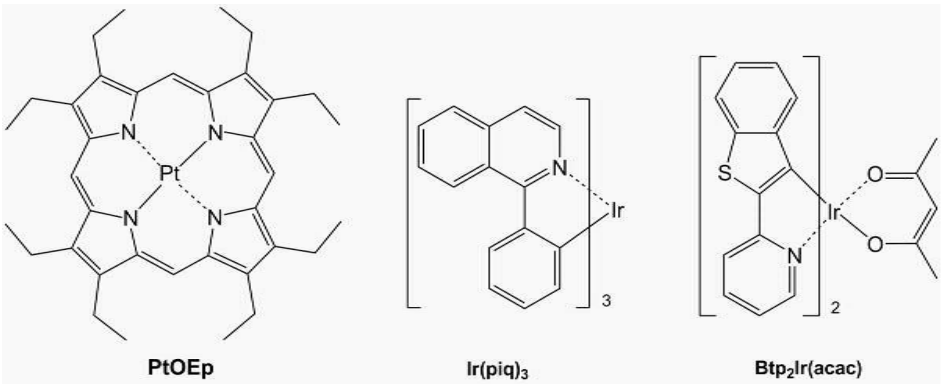
[0206] ADN TPBI TBADN

[0207] 

[0208] E3

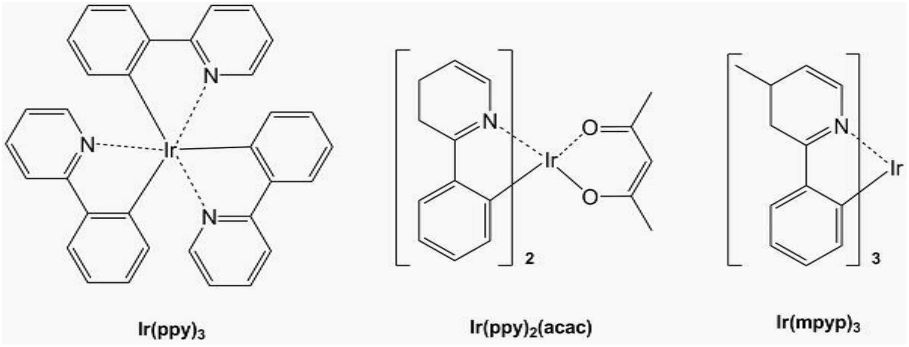
[0209] 도펀트로는 형광 도펀트 및 인광 도펀트 중 적어도 하나를 사용할 수 있다. 상기 인광 도펀트는, Ir, Pt, Os, Re, Ti, Zr, Hf 또는 이들 중 2 이상의 조합을 포함한 유기 금속 착체일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0210] 한편, 적색 도펀트로서 PtOEP(하기 화학식 참조), $Ir(piq)_3$(하기 화학식 참조) $Btp_2Ir(acac)$(하기 화학식 참조) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

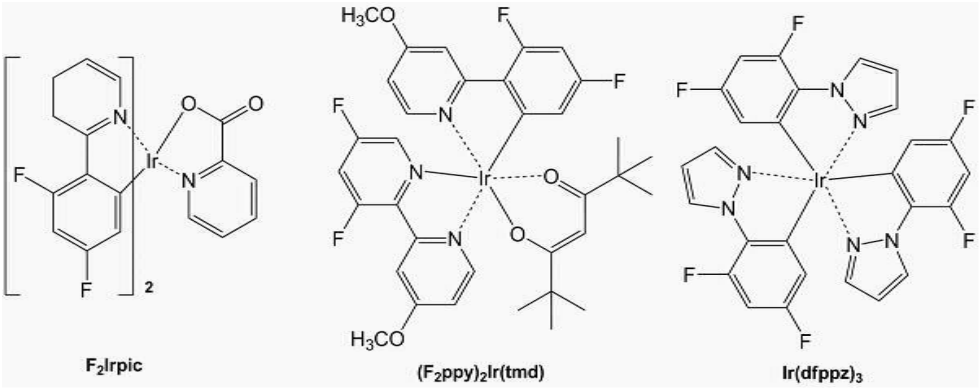
[0211] 

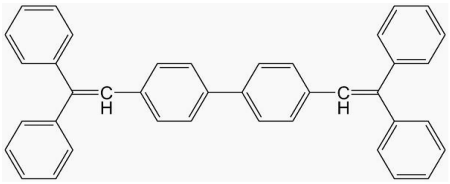
[0212] 또한, 녹색 도펀트로서, $Ir(ppy)_3$ (ppy = 페닐피리딘, 하기 화학식 참조), $Ir(ppy)_2(acac)$(하기 화학식 참조),

$Ir(mpyp)_3$(하기 화학식 참조) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

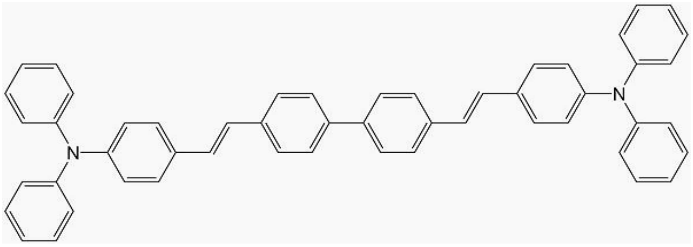
[0213] 

[0214] 청색 도펀트로서, F_2Irpic(하기 화학식 참조), $(F_2ppy)_2Ir(tmd)$(하기 화학식 참조), $Ir(dfppz)_3$(하기 화학식 참조), DPVBi(하기 화학식 참조), DPAVBi(4,4'-비스(4-디페닐아미노스타릴) 비페닐, 하기 화학식 참조), 2,5,8,11-테트라-*tert*-부틸 페릴렌 (TBPe, 하기 화학식 참조) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

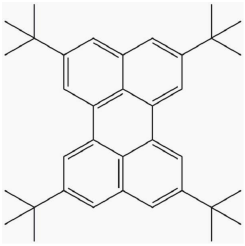
[0215] 

[0216] 

[0217] DPVBi

[0218] 

[0219] DPAVBi

[0220] 

[0221] TBPe

[0222] 상기 발광층(15)이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

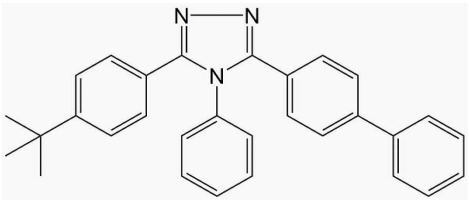
[0223] 상기 발광층(15)의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층(15)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

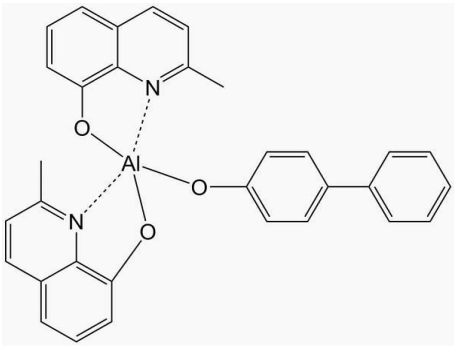
[0224] 발광층(15)에 인광 도펀트가 포함될 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층(16)으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 정공 수송층(16)과 발광층(15) 사이에 진공 증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등과 같은 방법을 이용하여 정공 저지층(HBL, 도 1에는 미도시함)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 정공 저지층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 될 수 있다. 공지의 정공 저지 재료도 사용할 수 있는데, 이의 예로는, 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체 등을 들 수 있다.

[0225] 상기 정공 저지층의 두께는 약 50Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

[0226] 다음으로 전자 수송층(16)을 진공 증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 전자 수송층(16)을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 상기 전자 수송층 재료로는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 공지의 전자 수송 물질을 이용할 수 있다. 이의 예로는, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq_3), TAZ(하기 화학식 참조), BAlq(하기 화학식 참조), 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: $Bebq_2$)등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0227]



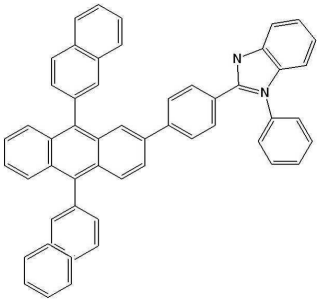
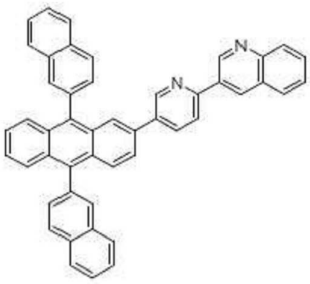


[0228] TAZ BAlq

[0229] 상기 전자 수송층(16)의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층(16)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

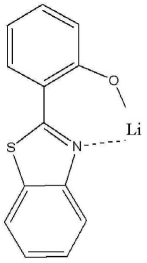
[0230] 또는, 상기 전자 수송층(16)은 전자 수송성 유기 화합물 및 금속-함유 물질을 포함할 수 있다. 상기 전자 수송성 유기 화합물의 비제한적인 예로는, ADN(9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센); 및 하기 화합물 301 및 302와 같은 안트라센계 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0231] <화합물 301> <화합물 302>

[0232]  

[0233] 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체의 비제한적인 예로는, 리튬 퀴놀레이트(LiQ) 또는 하기 화합물 303 등을 들 수 있다:

[0234] <화합물 303>

[0235] 

[0236] 또한 전자 수송층(16) 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(17)이 적층될 수 있다. 상기 전자 주입층(17) 형성 재료로는 LiF, NaCl, CsF, Li_2O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층(17)의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0237] 상기 전자 주입층(17)의 두께는 약 10Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층(17)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0238] 상기 전자 주입층(17) 상부로는 투과형 전극인 제2전극(18)이 구비되어 있다. 상기 제2전극(18)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.

[0239] 또 다른 일 측면에 따라, 소스 전극, 드레인 전극, 게이트 및 활성층을 포함하는 트랜지스터 및 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 유기층을 포함한 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 상기 소스 전극 및 드레인 전극 중 하나와 전기적으로 연결된 평판 표시 장치가 제공된다.

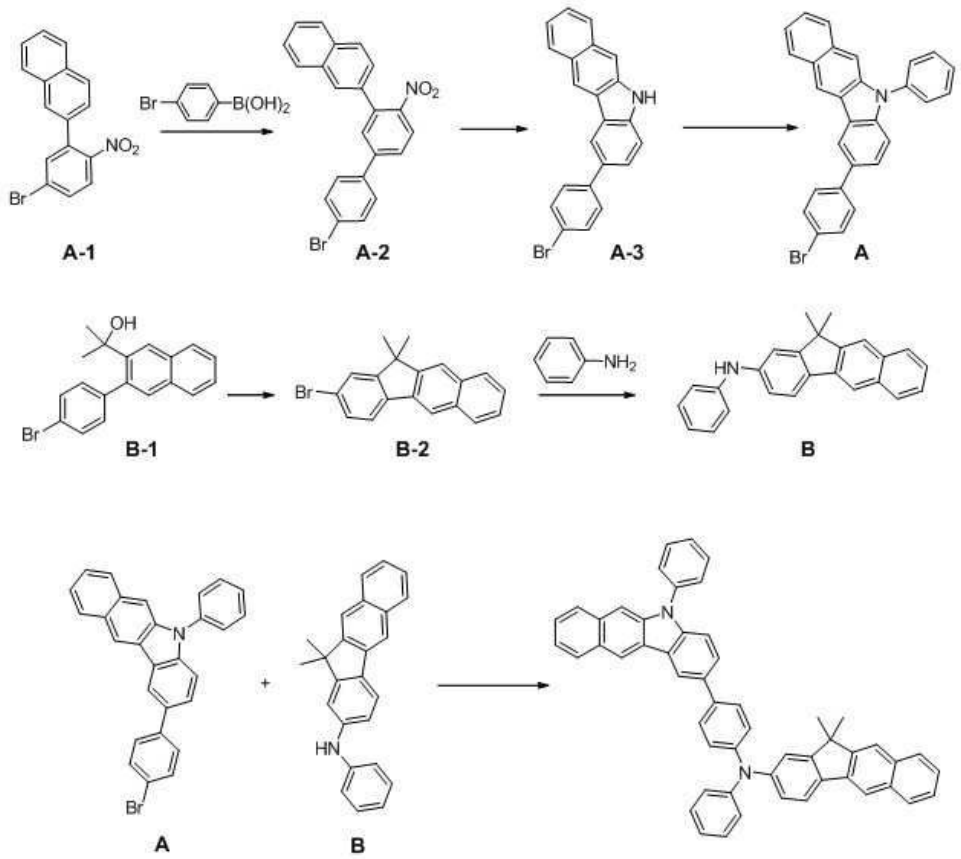
[0240] 상기 유기 발광 소자는 트랜지스터를 포함한 평판 표시 장치에 포함될 수 있다. 상기 트랜지스터의 활성층은 비정질 실리콘층, 결정질 실리콘층, 유기 반도체층, 산화물 반도체층 등으로 다양한 변형이 가능하다.

[0241] 이하에서, 합성예 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성예 및 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0242] **합성예 1: 화합물 1의 합성**

[0243] 하기 반응식 1의 경로를 거쳐 화합물 1을 제조하였다:

[0244] <반응식 1>



[0245]

[0246] (1) 중간체 A-1의 합성

[0247] 화합물 A-1 14.8g(45mmol), 4-브로모페닐 보론산 6g(30mmol), Pd(PPh3)4 1.7g(1.5mmol) 및 K2CO3 20g(150mmol)을 500㎖의 THF/H2O(2:1) 혼합용액에 녹이고 80℃에서 5시간 동안 교반 하였다. 상기 반응 용액을 디에틸에테르 200㎖로 3회 추출한 후, 유기층을 모아 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 디클로로메탄과 노르말 헥산으로 재결정하여 중간체 A-2 8.97g(수율 74%)을 얻었다.

[0248] 1H NMR (CDCl3, 400MHz) δ(ppm) 8.39 (1H), 8.11-8.02 (4H), 7.73-7.68 (4H), 7.59-7.43 (5H)

[0249] (2) 중간체 A-3의 합성

[0250] 화합물 A-2 8.97g (22mmol)에 트리에틸포스파이트 (154mmol)를 가하고 반응 혼합물을 12시간 동안 가열 환류한다. 반응 종료 후 과량의 트레에틸포스파이트를 증류해낸다. 잔류물에 증류수와 메탄올을 첨가하고 생성된 고체를 여과하여 노르말헥산:디클로로메탄으로 재결정한다. 생성물은 4.9g (수율 60%)을 얻었다.

[0251] 1H NMR (CDCl3, 400MHz) δ(ppm) 8.23(2H), 8.03(1H), 7.89(1H), 7.74-7.62(5H), 7.53(3H), 7.28(1H)

[0252] (3) 중간체 A의 합성

[0253] 중간체 A-3 32.8g (88.0mmol)과 13.1g의 요오드벤젠 (64.2mmol)을 용매 xylene에 용해시킨 후, $P(t\text{-}Bu)_3$ 1.5ml (6.1mmol)을 첨가하고 팔라듐아세테이트 0.25g (1.2mmol)을 첨가한 후 고체 상태의 K_3PO_4 40g (476mmol)를 첨가한다. 상기 반응 혼합물을 환류하에 가열한다. 12시간 후 실온으로 냉각시킨 후, 500mL의 물을 천천히 가한다. 고체 생성물을 여과하여 증류수로 3회 세척하고 무수마그네슘설페이트로 건조한 후 용매를 제거하여 고체 생성물을 얻었다. 노르말헥산과 디클로로메탄으로 재결정하여 중간체 A를 26.4g (67%) 얻었다.

[0254] 1H NMR (CDCl3, 400MHz) δ(ppm) 8.23(2H), 8.19(1H), 8.03(1H), 7.91-7.87(2H), 7.75-7.58(8H), 7.51-7.42(4H)

[0255] (4) 중간체 B의 합성

[0256] 중간체 B-1 10.2g (30mmol)을 건조한 클로로포름에 녹이고 3-불화붕소 에테르 (Boron trifluoride-diethyl

etherate) 5.1g (36mmol)을 10분간 천천히 적하하였다. 50℃까지 온도를 올리고 2시간 동안 교반한다. 다시 실온으로 냉각하고 증류수를 첨가한 후 디에틸에테르로 3회 추출한다. 얻어진 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조한다. 용매를 제거하고 농축된 잔류물을 실리카겔 크로마토그래피를 이용하여 분리 정제하여 5.1g의 중간체 B-2를 얻었다. (수율 53%) 앞서 얻어진 중간체 B-2 3.2g(10mmol), 아닐린 0.91㎖(10mmol), t-BuONa 1.4g(15mmol), Pd2(dba)3 0.18g(0.2mmol) 및 P(t-Bu)3 0.04g(0.2mmol)을 톨루엔 50㎖에 녹인 후 90℃에서 3시간 교반하였다. 반응이 완결된 후, 반응 용액을 상온으로 식히고, 증류수와 디에틸에테르 40㎖로 3회 추출하였다. 유기층을 무수 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 제거하여 얻어진 잔류물을 실리카겔 관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 B 2.08g(수율 62%)을 얻었다.

[0257] 1H NMR (CDCl3, 400MHz) δ(ppm) 8.43(1H), 8.21(2H), 7.98(1H), 7.73-7.62(3H), 7.31-7.28(4H), 7.03-6.97(3H), 1.79(6H)

[0258] (5) 화합물 1의 합성

[0259] 중간체 A 4.48g (10mmol), 화합물 B 3.4g(10mmol), t-BuONa 1.4g(15mmol), $Pd_2(dba)_3$

[0260] 0.18g(0.2mmol) 및 $P(t\text{-}Bu)_3$ 0.04g(0.2mmol)을 톨루엔 50㎖에 녹인 후 90℃에서 3시간 교반하였다. 반응이 완결된 후, 반응 용액을 상온으로 식히고, 이를 증류수와 디에틸에테르 40㎖로 3회 추출하였다. 유기층을 모아 무수 마그네슘 설페이트로 건조하고 용매를 제거하여 얻어진 잔류물을 실리카겔 관 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 1 5.5g(수율 87%)을 얻었다.

[0261] 1H NMR (CDCl3, 400MHz) δ(ppm) 8.43(1H), 8.21(2H), 7.02(2H), 7.92-7.85(3H), 7.68-7.52(12H), 7.49-7.27(6H), 7.09-6.83(6H), 1.79(6H)

[0262] **실시예 1**

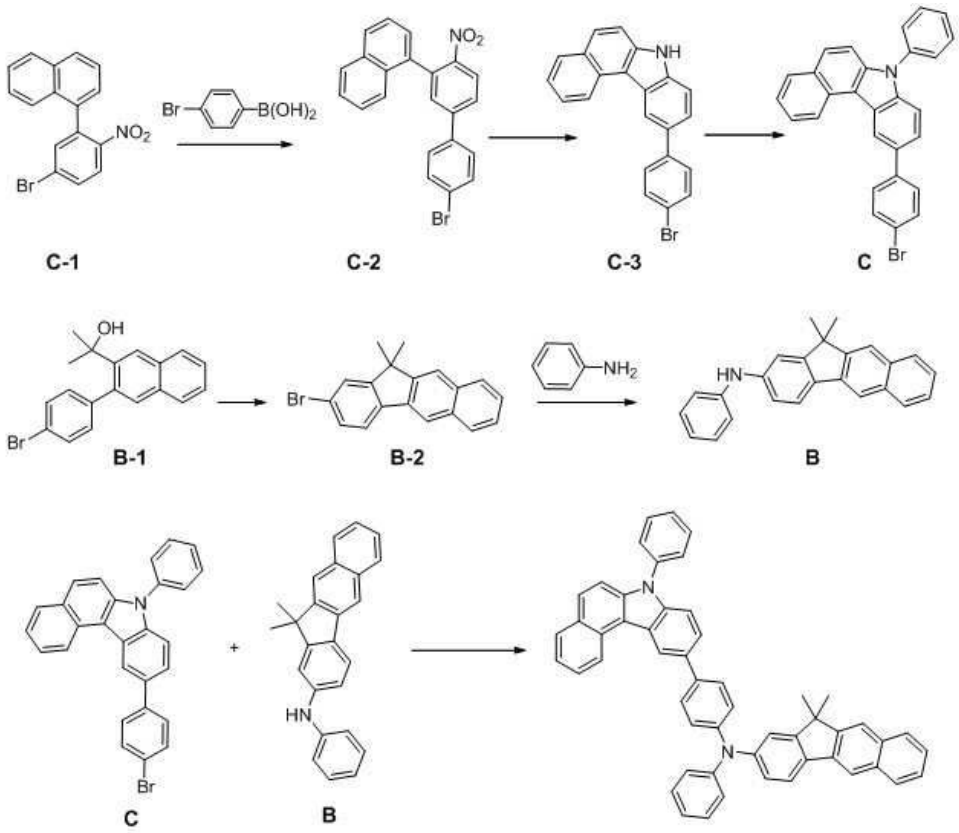
[0263] 애노드로는 코닝사(Corning)의 15Ω/㎠ (1200Å) ITO 유리 기판을 50㎜×50㎜×0.7㎜ 크기로 잘라 이소프로필 알콜과 순수에서 각각 5분간 초음파 세정한 후 15분간 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 4,4´,4˝-tris[3-methylphenyl(phenyl)-amino]triphenylamine (m-MTDATA)를 진공 증착하여 600Å두께의 정공 주입층을 형성한 다음, 상기 정공 주입층 상부에 **화합물1**을 진공 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 청색 형광 호스트인 IDE215 (이데미츠사)와 청색 형광 도펀트인 IDE118(이데미츠사)을 중량비 97:3로 동시 증착하여 200Å의 두께로 발광층을 형성하였다. 상기 발광층 상부에 Alq3 (aluminum tris(8-hydroxyquinoline))을 진공 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성하였다. 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 진공 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성한 다음, Al을 진공 증착하여 3000Å 두께의 캐소드를 형성함으로써 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0264] 이 소자는 전류밀도 100mA/cm^2에서 구동전압 6.63V이며, 색좌표는 (0.143, 0.241), 발광 효율은 7.11cd/A였다.

[0265] **합성예 2: 화합물 2의 합성**

[0266] 하기 반응식 2의 경로를 거쳐 화합물 2를 제조하였다:

[0267] <반응식 2>



[0268]

[0269] (1) 중간체 C의 합성

[0270] 상기 합성예 1에서 A-1 대신 C-1을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 중간체 C를 합성하였다.

[0271] (2) 화합물 2의 합성

[0272] 중간체 A 대신 C를 사용하여 합성예1와 동일한 방법으로 커플링 반응을 수행하여 수율 78%로 화합물 2를 얻었다.

[0273] 1H NMR (CDCl3, 400MHz) δ(ppm) 8.64(1H), 8.36(1H), 8.21(1H), 8.08-7.83(6H), 7.73-7.48(13H), 7.33(2H), 7.21(2H), 6.97-4.79(6H), 1.79(6H)

[0274] **실시예 2**

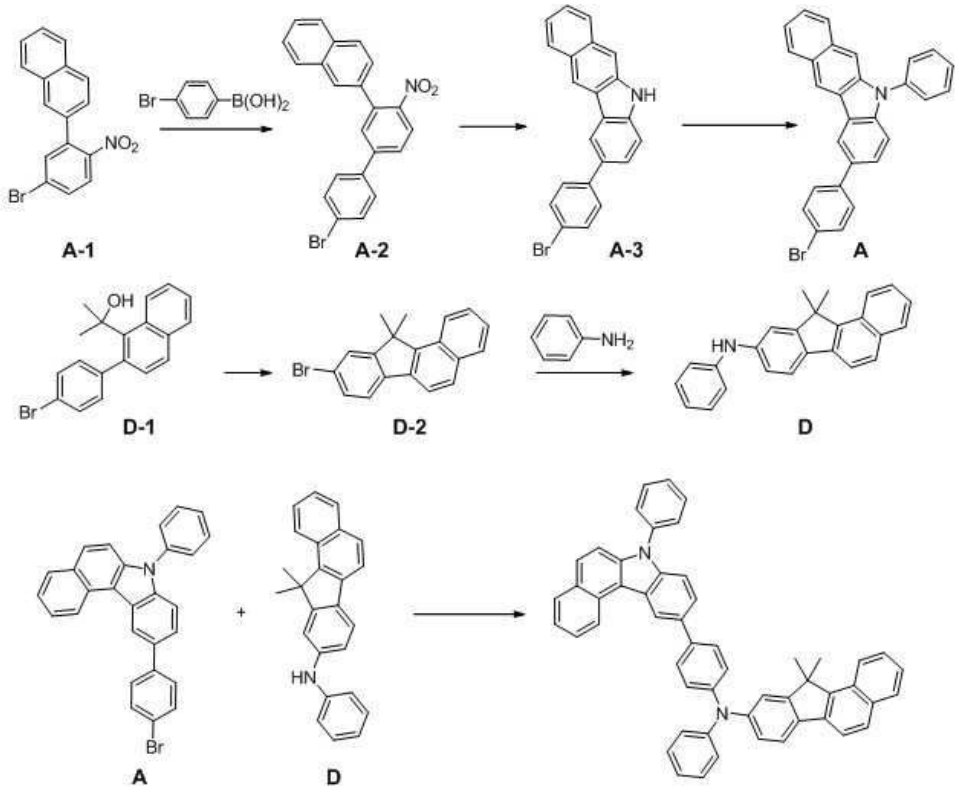
[0275] 정공 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 2를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0276] 이 소자는 전류밀도 100mA/cm^2에서 구동전압 6.75V이며, 색좌표는 (0.143, 0.242), 발광 효율은 7.34cd/A였다.

[0277] **합성예 3: 화합물 3의 합성**

[0278] 하기 반응식 3의 경로를 거쳐 화합물 3을 제조하였다:

[0279] <반응식 3>



[0280]

[0281] (1) 중간체 D의 합성

[0282] 상기 합성예 1에서 B-1 대신 D-1을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 중간체 D를 합성하였다.

[0283] (2) 화합물 3의 합성

[0284] 중간체 B 대신 D를 사용하여 합성예1와 동일한 방법으로 커플링 반응을 수행하여 수율 81%로 화합물 2를 얻었다.

[0285] 1H NMR (CDCl3, 400MHz) δ(ppm) 8.64(1H), 8.34(2H), 8.11-7.75(8H), 7.70-7.56(12H), 7.28(2H), 6.83(2H), 6.73-6.64(5H), 1.79(6H)

[0286] **실시예 3**

[0287] 정공 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 3을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0288] 이 소자는 전류밀도 100mA/cm^2에서 구동전압 6.59V이며, 색좌표는 (0.143, 0.242), 발광 효율은 7.21cd/A였다.

[0289] **합성예 4: 화합물 4의 합성**

[0290] 합성예1과 유사한 방법으로 화합물 4를 얻었으며 수율은 81%이었다.

[0291] 1H NMR (CDCl3, 400MHz) δ(ppm) 8.64(1H), 8.34(2H), 8.11-7.75(8H), 7.70-7.56(12H), 7.28(2H), 6.83(2H), 6.73-6.64(5H), 1.79(6H)

[0292] **실시예 4**

[0293] 정공 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 4를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0294] 이 소자는 전류밀도 100mA/cm^2에서 구동전압 6.69V이며, 색좌표는 (0.143, 0.241), 발광 효율은 7.09cd/A였다.

[0295] **합성예 5: 화합물 5의 합성**

[0296] 합성예1과 유사한 방법으로 화합물 5를 얻었으며 수율은 67%이었다.

[0297] 1H NMR (CDCl3, 400MHz) δ(ppm) 8.36(3H), 8.15(2H), 7.91(2H), 7.63-7.59(2H), 7.53-7.43(17H), 6.83-6.69(6H), 1.79(6H)

[0298] **실시예 5**

[0299] 전공 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 5를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0300] 이 소자는 전류밀도 100mA/cm^2에서 구동전압 6.78V이며, 색좌표는 (0.144, 0.241), 발광 효율은 7.28cd/A였다.

[0301] **비교예 1**

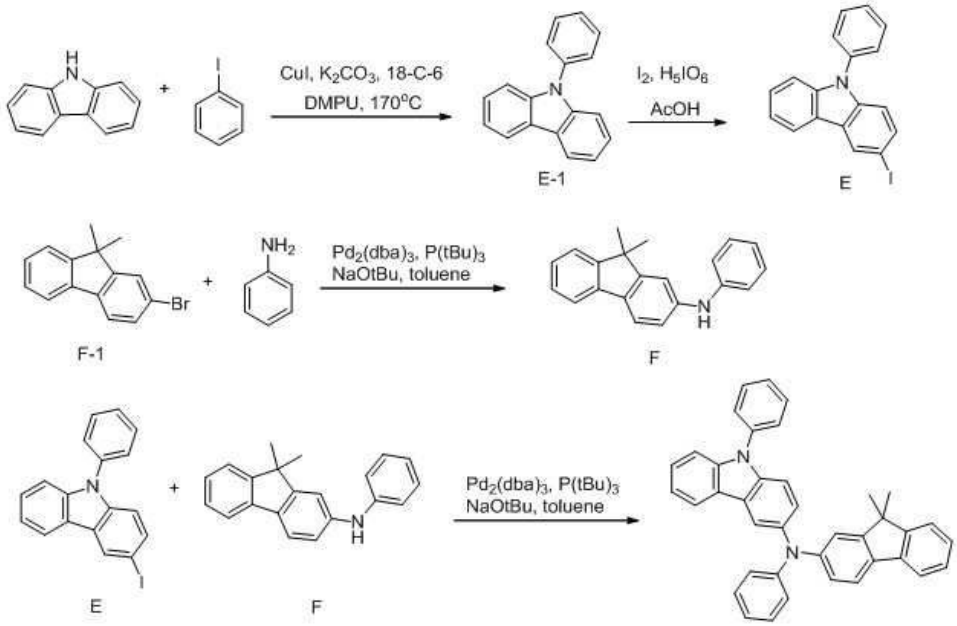
[0302] 정공 수송층 형성시 화합물 1 대신 4,4'-비스[N-4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB)를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0303] 이 소자는 전류밀도 100mA/cm^2에서 구동전압 7.82V이며, 색좌표는 (0.143, 0.242), 발광 효율은 5.72cd/A였다.

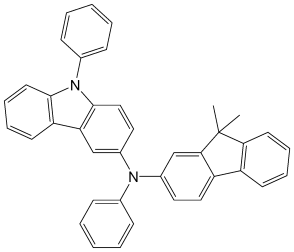
[0304] **비교 합성예 2: 화합물 202의 합성**

[0305] 하기 반응식 4의 경로를 거쳐 화합물 202를 제조하였다:

[0306] <반응식 4>

[0307] 

[0308] <화합물 202>

[0309] 

[0310] 카바졸 (16.7g, 100mmol), 요오도벤젠 (26.5g, 130mmol), CuI (1.9g, 10mmol), K2CO3 (138g, 1mol), 및 18-크라운-6 (530mg, 2mmol)을 DMPU (1,3-Dimethyl-3,4,5,6-tetrahydro-(1H)-pyrimidinone) (500 mL)에 녹인 후 170℃에서 8시간 동안 가열하였다. 반응이 완결된 후, 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후 고체물질을 여과하고 여과액에 암모니아수 소량을 첨가한 후 디에틸에테르 (300 mL) 로 세번 세척하였다. 세척된 디에틸에테르층을 MgSO4로 건조시킨 후 감압 건조하여 생성물을 얻고 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 E-1을 흰색

고체로 22g(수율 90%)을 얻었다.

[0311] E-1 2.433g(10mmol)을 80% 아세트산 100mL에 넣은 후, 여기에 요오드(I2) 1.357g(5.35mmol)과 오르토-과요오드산(H5IO6) 0.333g(1.46mmol)을 고체상태에서 가한 후, 질소분위기에서 80℃, 2시간 교반하였다. 반응 종료후, 에틸에테르(50mL)으로 세번 추출한다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 E를 흰색 고체로 3.23g (수율87%)을 얻었다.

[0312] F-1 2.73g (10 mmol), 아닐린 1.1g (12 mmol), t-BuONa 1.44g(15 mmol), Pd2(dba)3 183mg(0.2 mmol), P(t-Bu)3 40mg(0.2 mmol)을 톨루엔 50mL에 녹인 후 90℃에서 3시간 교반하였다. 상기 반응이 완결된 후, 이를 상온으로 식히고 증류수와 디에틸에테르 50mL로 3번 추출한다. 모아진 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로분리 정제하여 중간체 F 1.71g (수율 60%)을 얻었다.

[0313] 중간체 E 369mg (1 mmol), 중간체 F 285mg (1 mmol), t-BuONa 300mg (1.5 mmol), Pd2(dba)3 40mg (0.02mmol), P(t-Bu)3 3mg(0.01 mmol)을 톨루엔 5mL에 녹인 후 90℃에서 3시간 교반하였다. 상기 반응이 완결된 후, 상온으로 식히고, 이를 증류수와 디에틸에테르 30mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카젤관 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 202를 368mg (수율 70%) 얻었다.

[0314] 1H NMR (CDCl3, 300MHz) δ(ppm) 8.74(1H), 8.14-7.08(2H), 7.73-7.41(8H), 7.38-7.26(6H), 6.92-6.83(4H), 6.71-6.61(3H), 1.74(6H)

[0315] **비교예 2**

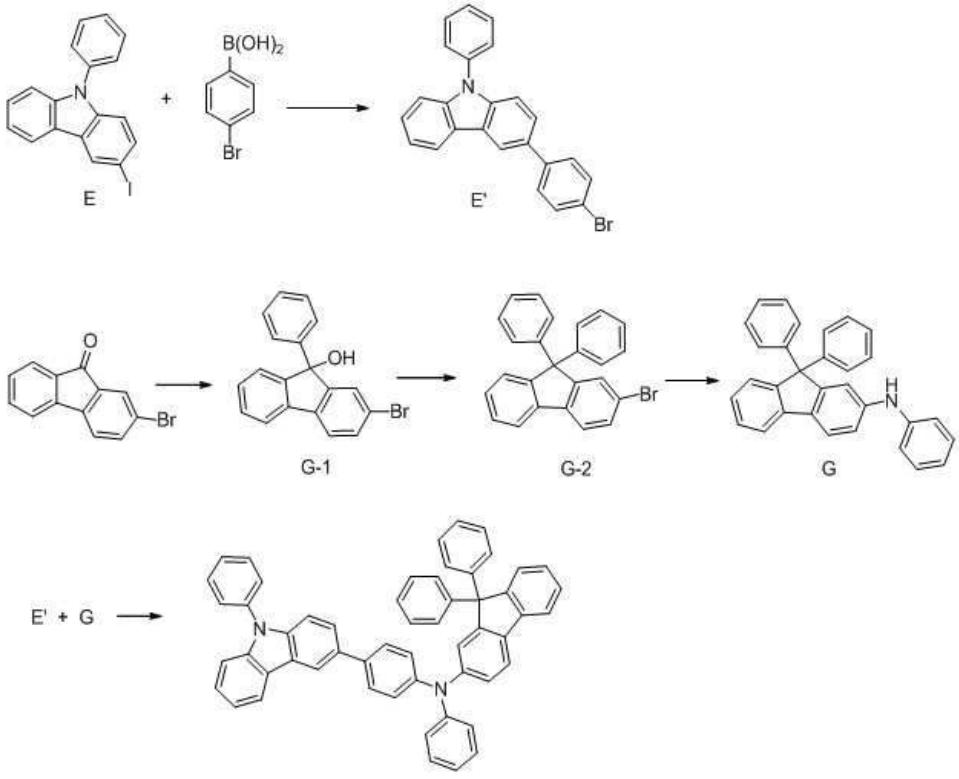
[0316] 정공 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 202를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0317] 이 소자는 전류밀도 100mA/cm^2에서 구동전압 6.71V이며, 색좌표는 (0.143, 0.241), 발광 효율은 6.52cd/A였다.

[0318] **비교 합성예 3: 화합물 203의 합성**

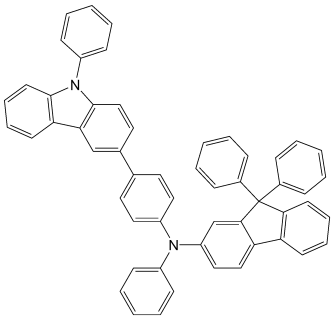
[0319] 하기 반응식 5의 경로를 거쳐 화합물 203을 제조하였다:

[0320] <반응식 5>



[0321]

[0322] <화합물 203>



[0323]

[0324] 화합물 E 16.6g(45mmol), 4-브로모페닐 보론산 6g(30mmol), Pd(PPh3)4 1.7g(1.5mmol) 및 K2CO3 20g(150mmol)을 500㎖의 THF/H2O(2:1) 혼합용액에 녹이고 80℃에서 5시간 동안 교반하였다. 상기 반응 용액을 디에틸에테르 200㎖로 3회 추출한 후, 유기층을 모아 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 디클로로메탄과 노르말 헥산으로 재결정하여 중간체 E' 13.4g(수율 75%)을 얻었다.

[0325] 2-bromofluorenone 8g(31.6 mmol)을 THF 60mL에 녹이고 -78℃에서 1M 페닐마그네슘 브로마이드 38mL(38 mmol)를 천천히 첨가하였다. 2시간 후에 온도를 상온으로 유지하고 5시간 동안 교반하였다. 암모늄클로라이드 수용액 50mL로 묽힌 후 에틸아세테이트(40mL)로 세 번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카젤관 크로마토그래피로 분리 정제하여 G-1 10g(수율 95%)을 얻었다.

[0326] 중간체 G-1 10g(30mmol)을 벤젠 60mL에 녹이고 진한 황산 2.4mL(45 mmol) 을 소량의 벤젠에 희석하여 첨가하였다. 80?에서 5시간 동안 교반한 후 벤젠을 증발시키고 남은 여액에 1N 수산화나트륨 수용액을 첨가하여 PH~7로 만든 후 에틸아세테이트(40 mL)로 세 번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카젤관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 G-2를 6g(수율 50%) 얻었다.

[0327] 상기 합성예2의 화합물 2의 합성과정 중 중간제 B-2대신 G-2를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 중간체 G를 얻었으며(4.3g, 수율 75%), 이를 앞서 얻어진 E'과 커플링 반응을 진행하여 화합물 203을 합성하였다.(5.9g, 수율 77%)

[0328] 1H NMR (CDCl3, 300MHz) δ(ppm) 8.73(1H), 8.03-7.92(3H), 7.81(1H), 7.73(2H), 7.68-7.48(9H), 7.45-7.23(11H), 7.18-7.05(4H), 6.85-6.69(7H)

[0329] **비교예 3**

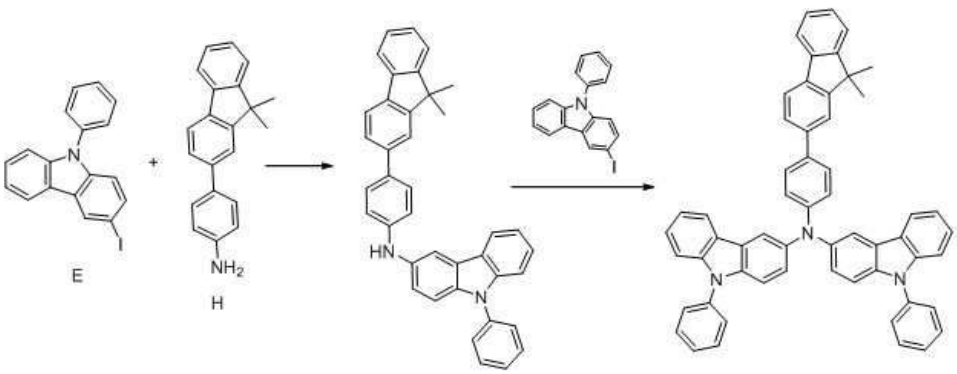
[0330] 정공 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 203을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0331] 이 소자는 전류밀도 100mA/cm^2에서 구동전압 6.83V이며, 색좌표는 (0.143, 0.241), 발광 효율은 6.85cd/A였다.

[0332] **비교 합성예 4: 화합물 204의 합성**

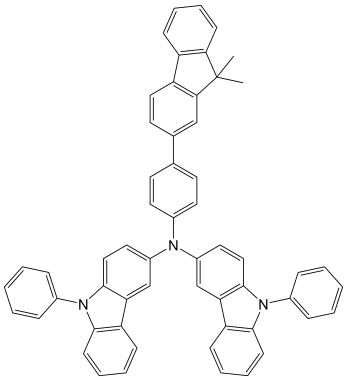
[0333] 하기 반응식 6의 경로를 거쳐 화합물 204를 제조하였다:

[0334] <반응식 6>



[0335]

[0336] <화합물 204>



[0337]

[0338] 중간체 E 3.69g (10 mmol), 중간체 H 2.85g (10 mmol), t-BuONa 3g (15 mmol), Pd2(dba)3 400mg (0.2mmol), P(t-Bu)3 30mg(0.1 mmol)을 톨루엔 500mL에 녹인 후 90℃에서 3시간 교반하였다. 상기 반응이 완결된 후, 상온으로 식히고, 이를 증류수와 디에틸에테르 200mL로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔관 크로마토그래피로 분리 정제하여 3.7g의 중간체 화합물을 얻었다.(수율 70%) 이 화합물에 중간체 E 2.58g (7mmol), t-BuONa 2.1g (10.5 mmol), Pd2(dba)3 280mg (0.15mmol), P(t-Bu)3 21mg(0.07 mmol)을 톨루엔 300mL에 녹인 후 90℃에서 3시간 교반하였다. 반응이 완결된 후 동일한 방법으로 분리 정제하여 화합물 204를 3.6g (수율 67%) 얻었다.

[0339] 1H NMR (CDCl3, 300MHz) δ(ppm) 8.67(1H), 8.31(1H), 8.06-7.88(3H), 7.78(1H), 7.74-7.46(15H), 7.39-7.28(9H), 6.93-6.74(4H), 6.43(1H), 1.68(6H)

[0340] **비교예 4**

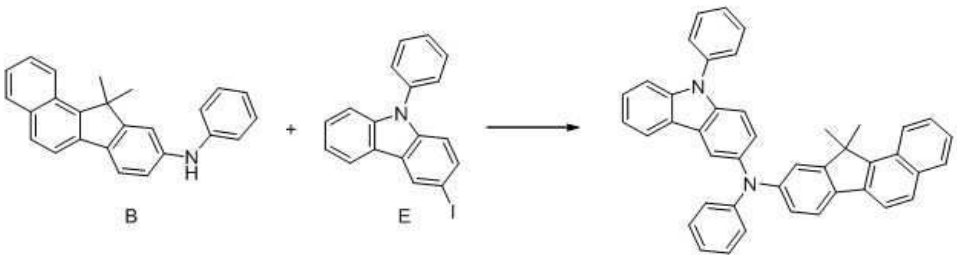
[0341] 정공 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 204를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0342] 이 소자는 전류밀도 100mA/cm^2에서 구동전압 7.11V이며, 색좌표는 (0.144, 0.242), 발광 효율은 5.93cd/A였다.

[0343] **비교 합성예 5: 화합물 205의 합성**

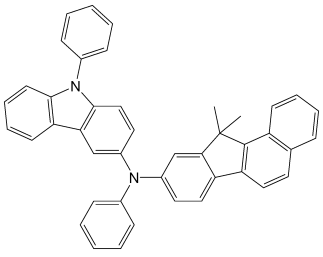
[0344] 하기 반응식 7의 경로를 거쳐 화합물 205를 제조하였다:

[0345] <반응식 7>



[0346]

[0347] <화합물 205>



[0348]

[0349] 중간체 B와 E를 이용하여 동일한 방법으로 화합물 205를 합성하였다.

[0350] 1H NMR (CDCl3, 300MHz) δ(ppm) 8.72(1H), 8.28(1H), 8.07-7.95(3H), 7.85(2H), 7.63-7.47(7H), 7.41-7.29(5H), 7.028-6.85(4H), 6.73(3H), 1.79(6H)

[0351] **비교예 5**

[0352] 정공 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 205를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0353] 이 소자는 전류밀도 100mA/cm^2에서 구동전압 6.85V이며, 색좌표는 (0.143, 0.242), 발광 효율은 6.64cd/A였다.

[0354] **평가예**

[0355] 상기 실시예 1 내지 5의 유기 발광 소자 및 비교예 1 내지 5의 유기 발광 소자에 대하여, PR650 (Spectroscan) Source Measurement Unit.(PhotoResearch사 제품)을 이용하여 전류밀도, 구동전압, 효율 및 반감수명을 평가하였고 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. (단, 반감수명은 인가전류 4mA에서 측정하였음)

표 1

[0356]

	전자수송층	구동전압 (V)	전류밀도 (mA/㎠)	발광효율 (cd/A)	반감수명(h)
실시예 1	화합물 1	6.63	100	7.11	362
실시예 2	화합물 2	6.75	100	7.34	370
실시예 3	화합물 3	6.59	100	7.21	334
실시예 4	화합물 4	6.69	100	7.09	358
실시예 5	화합물 5	6.78	100	7.28	348
비교예 1	NPB	7.82	100	5.72	273
비교예 2	화합물 202	6.71	100	6.52	226
비교예 3	화합물 203	6.83	100	6.85	258
비교예 4	화합물 204	7.11	100	5.93	182
비교예 5	화합물 205	6.85	100	6.64	251

[0357] 상기 표 1로부터, 실시예 1 내지 5의 유기 발광 소자가 비교예 1 내지 5의 유기 발광 소자보다 발광효율이 높고 반감수명이 길다는 것을 확인할 수 있다. 또한 실시예 1, 3 및 4의 유기 발광 소자는 비교예 1 내지 5의 유기 발광 소자보다 구동 전압이 낮음을 알 수 있다. 이러한 결과로부터 실시예 1 내지 5의 유기 발광 소자는 고발광 효율 및 장수명의 우수한 성능을 가짐을 확인할 수 있다.

[0358] 본 발명에 대하여 상기 합성예 및 실시예를 참조하여 설명하였으나, 이는 예시적인 것에 불과하며, 본 발명에 속하는 기술 분야의 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서, 본 발명의 진정한 기술적 보호 범위는 첨부된 특허청구범위의 기술적 사항에 의하여 정해져야 할 것이다.

부호의 설명

[0359] 10: 유기 발광 소자

11: 기판

12: 제1전극

13: 정공 주입층

14: 정공 수송층

15: 발광층

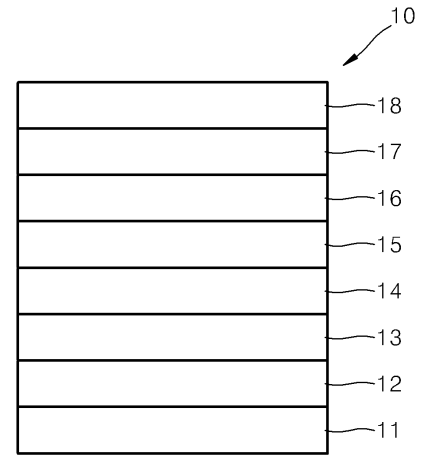
16: 전자 수송층

17: 전자 주입층

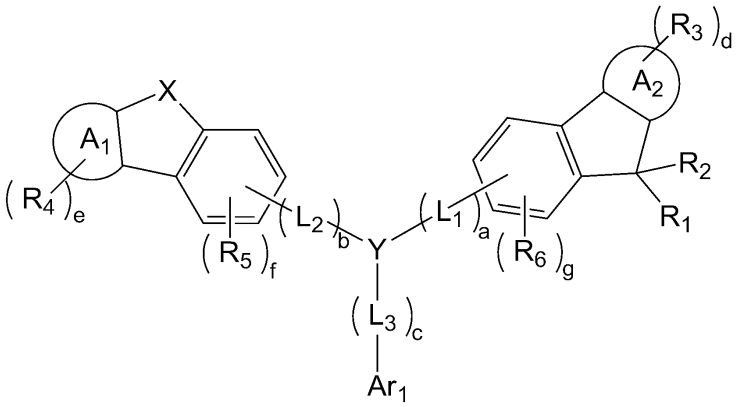
18: 제2전극

도면

도면1



도면2



【심사관 직권보정사항】

【직권보정 1】

【보정항목】 청구범위

【보정세부항목】 청구항 제 15항

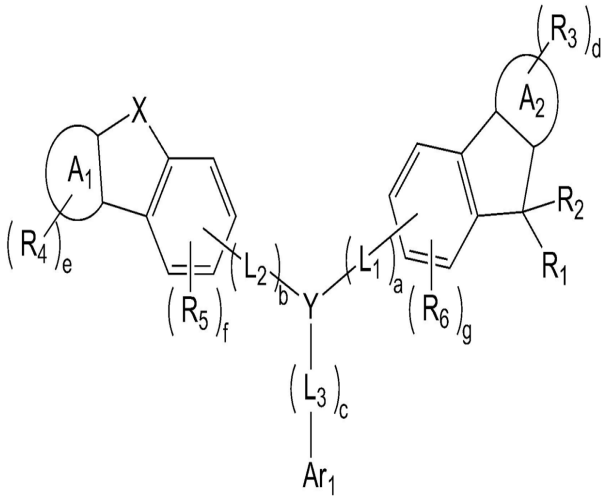
【변경전】

제 1항 내지 제 14항 중

【변경후】

제 1항, 제 4항 내지 제 6항, 제 8항 내지 제 10항, 제 12항 내지 제 14항 중

专利名称(译)	缩合环化合物，包括其的有机发光器件和平板显示器		
公开(公告)号	KR101894023B1	公开(公告)日	2018-10-05
申请号	KR1020110044076	申请日	2011-05-11
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
[标]发明人	KIM HEE YEON 김희연 YANG SEUNG GAK 양승각 YI JEOUNG IN 이정인 LEE JAE YONG 이재용		
发明人	김희연 양승각 이정인 이재용		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0072 H01L51/006 H01L51/0061 C07D209/56 C07D209/86 C07D209/88 H01L51/5056 H01L51/0074 H01L51/5012		
其他公开文献	KR1020120127550A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

提供由下式（1）表示的稠环化合物，包含该化合物的有机发光器件，以及包括该有机发光器件的平板显示器： <式1> 式中的R 1，R 2，R 3，R 4，R 5，R 6，a，b，c，d，e，f和g请参阅说明。具有含有上述化合物的有机层的有机发光器件具有低驱动电压，高发光效率和长寿命的特性。