



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2019-0033131  
 (43) 공개일자 2019년03월29일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C09K 11/06* (2006.01) *C09D 5/22* (2006.01)  
*H01L 51/50* (2006.01)  
 (52) CPC특허분류  
*C09K 11/06* (2013.01)  
*C09D 5/22* (2013.01)  
 (21) 출원번호 10-2017-0121537  
 (22) 출원일자 2017년09월21일  
 심사청구일자 2018년12월04일

(71) 출원인  
**주식회사 엘지화학**  
 서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)  
 (72) 발명자  
**이길선**  
 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
**배재순**  
 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
 (뒷면에 계속)  
 (74) 대리인  
**정순성**

전체 청구항 수 : 총 12 항

(54) 발명의 명칭 **화합물, 이를 포함하는 코팅 조성물, 이를 이용한 유기 발광 소자 및 이의 제조방법**

**(57) 요약**

본 명세서에는 화학식 1의 화합물, 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 코팅 조성물, 이를 이용한 유기 발광 소자 및 이의 제조 방법에 관한 것이다.

**대표도** - 도1

<b>801</b>
<b>701</b>
<b>601</b>
<b>501</b>
<b>401</b>
<b>301</b>
<b>201</b>
<b>101</b>

(52) CPC특허분류

*H01L 51/50* (2013.01)

*C09K 2211/1011* (2013.01)

(72) 발명자

**박형일**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**이재철**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

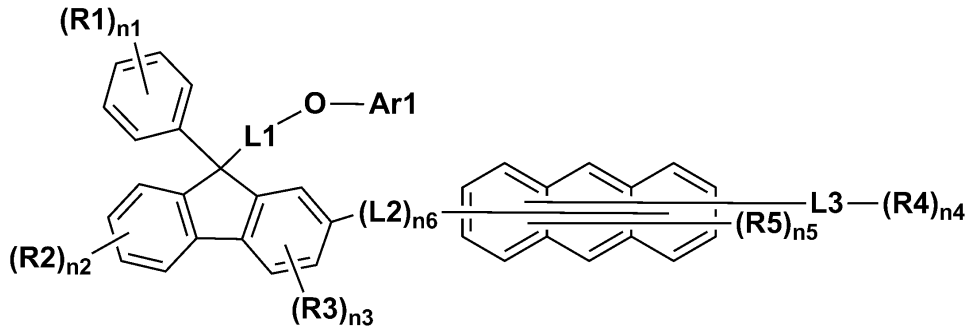
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

L1 내지 L3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고,

R1 내지 R3 및 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로겐기; 니트릴기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

Ar1은 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,

R4는 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

n1은 0 내지 5의 정수이고, n1이 2 이상인 경우 R1은 서로 같거나 상이하며,

n2는 0 내지 4의 정수이고, n2이 2 이상인 경우 R2는 서로 같거나 상이하며,

n3은 0 내지 3의 정수이고, n3이 2 이상인 경우 R3은 서로 같거나 상이하며,

n4는 0 내지 9의 정수이고, n4가 2 이상인 경우 R4는 서로 같거나 상이하며,

n5는 0 내지 8의 정수이고, n5가 2 이상인 경우 R5는 서로 같거나 상이하고,

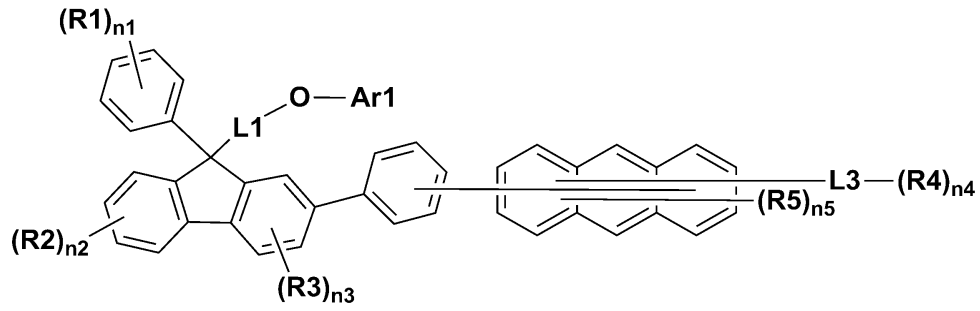
n6는 0 내지 2의 정수이고, n6가 2 인 경우 L2는 서로 같거나 상이하다.

청구항 2

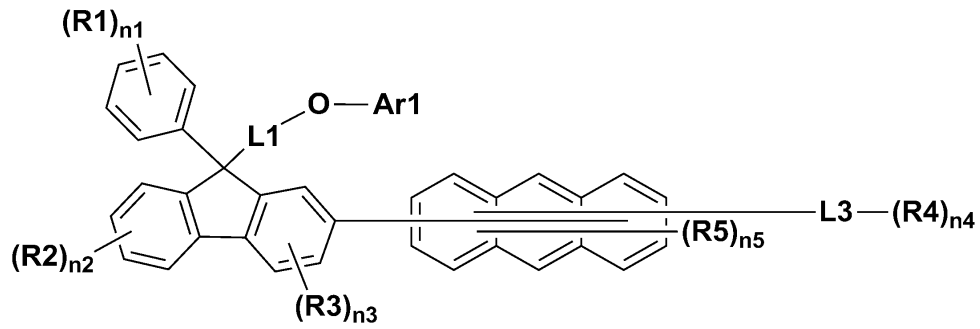
청구항 1에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 화학식 5 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:

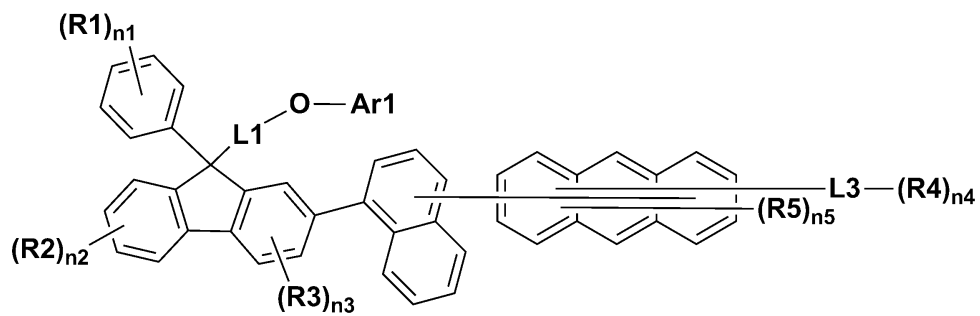
[화학식 2]



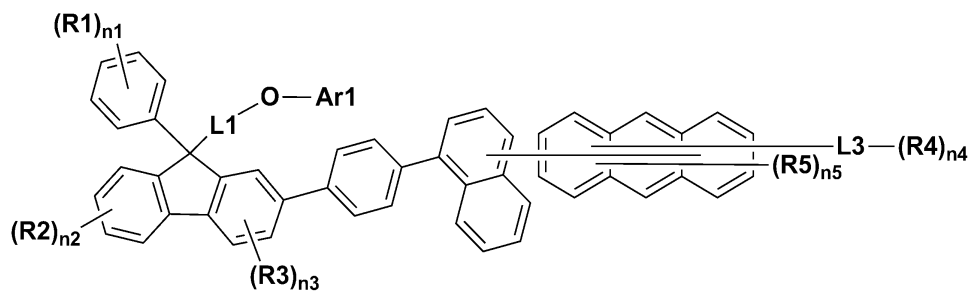
[화학식 3]



[화학식 4]



[화학식 5]



상기 화학식 2 내지 화학식 5에 있어서,

R1 내지 R5, n1 내지 n5, L1, L3 및 Ar1의 정의는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

**청구항 3**

청구항 1에 있어서,

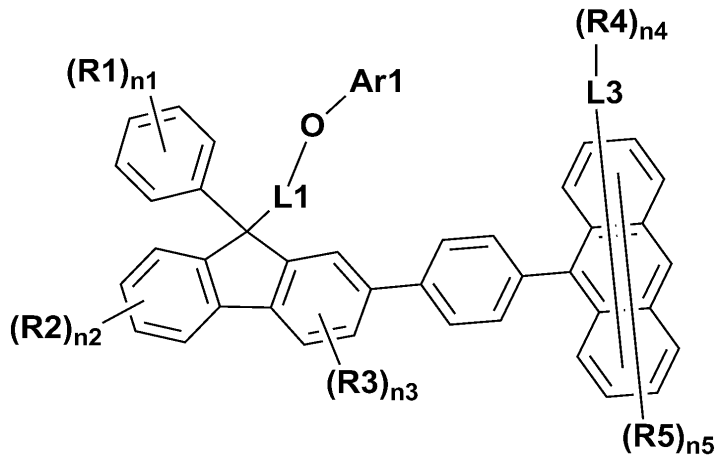
상기 L1은 치환 또는 비치환된 아릴렌기인 것인 화합물.

**청구항 4**

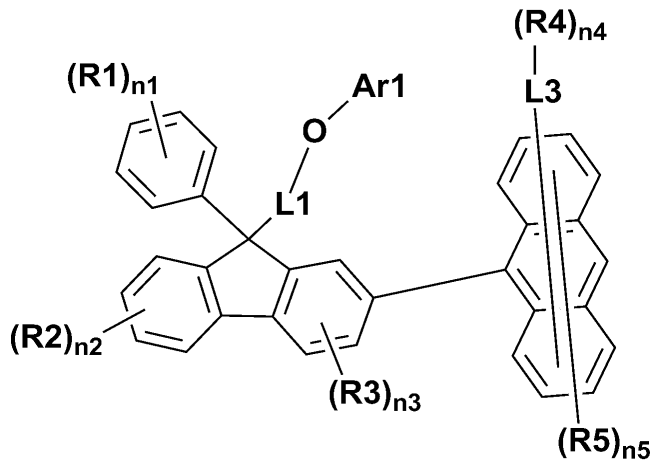
청구항 1에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 6 내지 화학식 9 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:

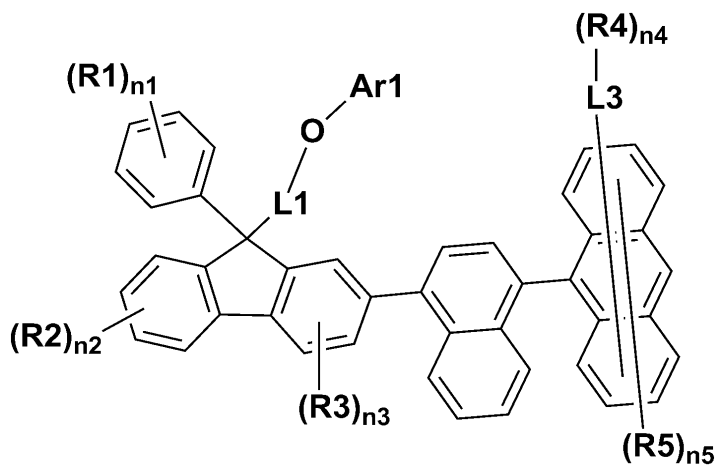
[화학식 6]



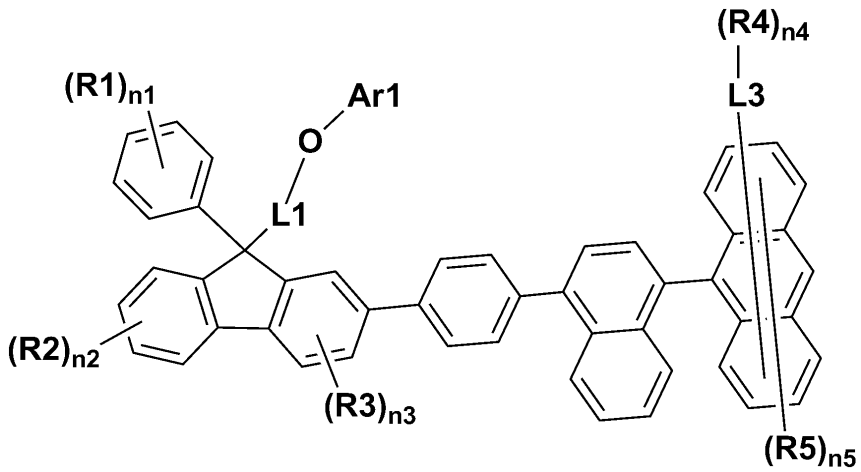
[화학식 7]



[화학식 8]



[화학식 9]



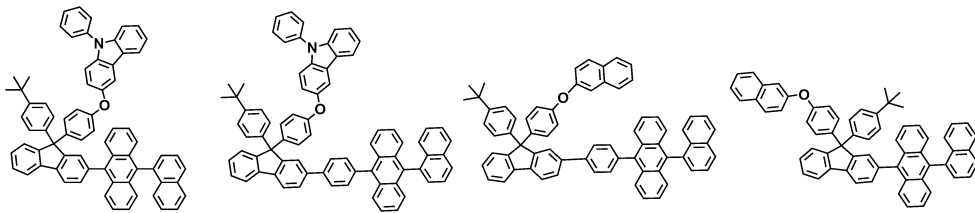
상기 화학식 6 내지 화학식 9에 있어서,

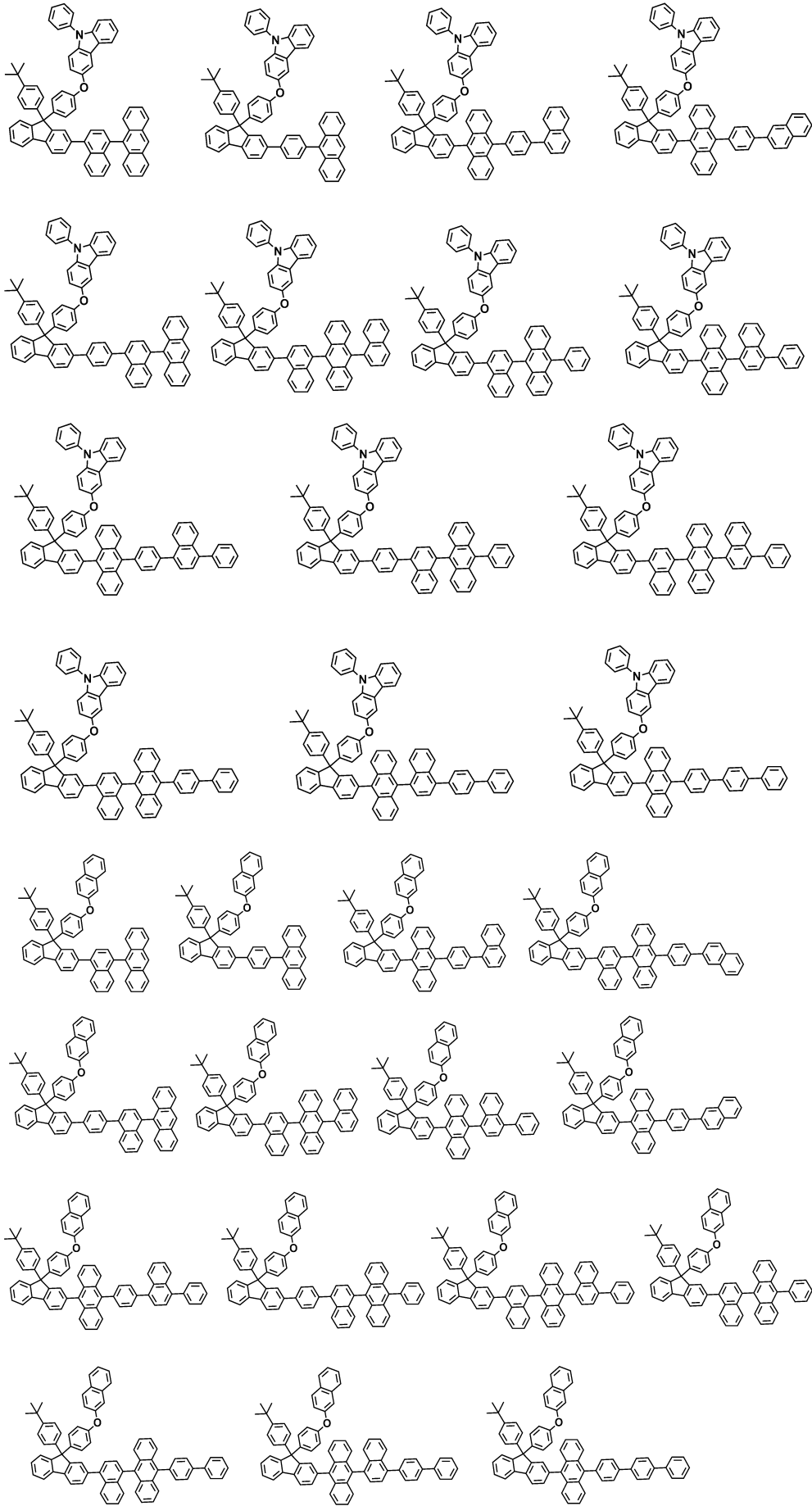
R1 내지 R5, n1 내지 n5, L1, Ar1 및 L3의 정의는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

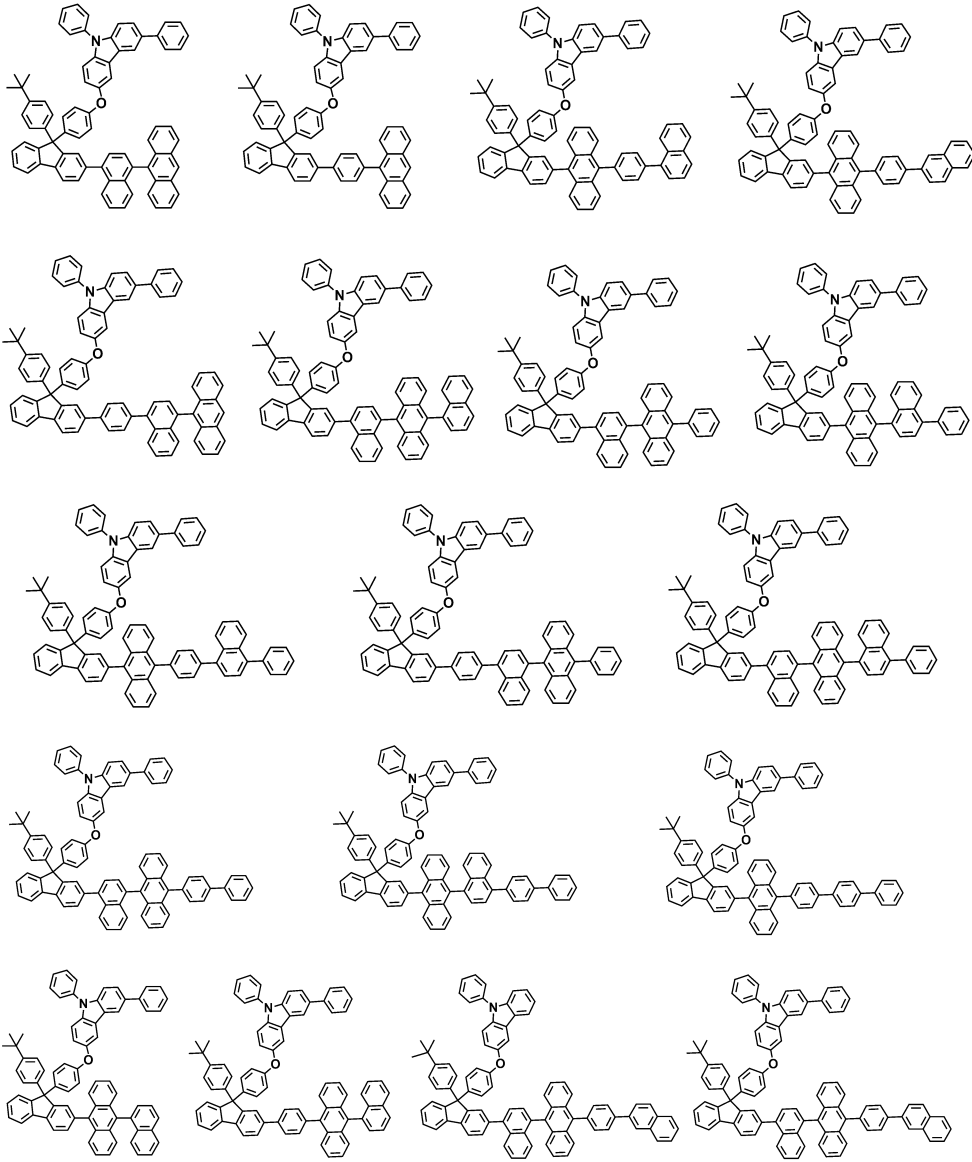
**청구항 5**

청구항 1에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:







**청구항 6**

청구항 1 내지 5 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 코팅 조성물.

**청구항 7**

청구항 6에 있어서, 상기 코팅 조성물의 점도는 2 cP 내지 15 cP인 것인 코팅 조성물.

**청구항 8**

제1 전극;

제2 전극; 및

상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하고,

상기 유기물층 중 1층 이상은 청구항 6의 코팅 조성물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

**청구항 9**

청구항 8에 있어서, 상기 코팅 조성물을 포함하는 유기물층은 발광층인 것인 유기 발광 소자.

**청구항 10**

기관을 준비하는 단계;

상기 기관 상에 제1 전극을 형성하는 단계;

상기 제1 전극 상에 1층 이상의 유기물층을 형성하는 단계; 및

상기 유기물층 상에 제2 전극을 형성하는 단계를 포함하고,

상기 유기물층을 형성하는 단계는 청구항 6의 코팅 조성물을 이용하여 1층 이상의 유기물층을 형성하는 단계를 포함하는 것인 유기 발광 소자의 제조 방법.

**청구항 11**

청구항 10에 있어서, 상기 코팅 조성물을 이용하여 1층 이상의 유기물층을 형성하는 단계는 스핀 코팅 방법을 이용하는 것인 유기 발광 소자의 제조 방법.

**청구항 12**

청구항 10에 있어서, 상기 코팅 조성물을 이용하여 1층 이상의 유기물층을 형성하는 단계는

상기 제1 전극 상에 상기 코팅 조성물을 코팅하는 단계; 및

상기 코팅된 코팅 조성물을 건조하는 단계를 포함하는 것인 유기 발광 소자의 제조 방법.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 명세서는 화합물, 상기 화합물을 포함하는 코팅 조성물, 상기 코팅 조성물을 이용하여 형성된 유기 발광 소자 및 이의 제조 방법에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 유기 발광 현상은 특정 유기 분자의 내부 프로세스에 의하여 전류가 가시광으로 전환되는 예의 하나이다. 유기 발광 현상의 원리는 다음과 같다. 애노드와 캐소드 사이에 유기물 층을 위치시켰을 때 두 전극 사이에 전류를 걸어주게 되면 캐소드와 애노드로부터 각각 전자와 정공이 유기물 층으로 주입된다. 유기물 층으로 주입된 전자와 정공은 재결합하여 엑시톤(exciton)을 형성하고, 이 엑시톤이 다시 바닥 상태로 떨어지면서 빛이 나게 된다. 이러한 원리를 이용하는 유기 발광 소자는 일반적으로 캐소드와 애노드 및 그 사이에 위치한 유기물층, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층을 포함하는 유기물 층으로 구성될 수 있다.

[0003] 종래에는 유기 발광 소자를 제조하기 위하여 증착 공정을 주로 사용해 왔다. 그러나, 증착 공정으로 유기 발광 소자의 제조 시, 재료의 손실이 많이 발생한다는 문제점이 있어, 이를 해결하기 위하여, 재료의 손실이 적어 생산 효율을 증대시킬 수 있는 용액 공정을 통하여 소자를 제조하는 기술이 개발되고 있으며, 용액 공정 시 사용될 수 있는 물질의 개발이 요구되고 있다.

[0004] 용액 공정용 유기 발광 소자에서 사용되는 물질은 다음과 같은 성질을 가져야 한다.

[0005] 첫째로, 저장 가능한 균질한 용액을 형성할 수 있어야 한다. 상용화된 증착 공정용 물질의 경우 결정성이 좋아서 용액에 잘 녹지 않거나 용액을 형성하더라도 결정이 쉽게 잡히기 때문에 저장기간에 따라 용액의 농도 구배가 달라지거나 불량 소자를 형성할 가능성이 크다.

[0006] 둘째로, 용액 공정에 사용되는 물질은 박막 형성시, 구멍이나 뭉침 현상이 발생하지 않고 균일한 두께의 박막을 형성할 수 있도록 코팅성이 우수해야 하고, 유기 발광 소자 제조 시 전류 효율이 우수하며, 우수한 수명 특성이 요구된다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0007] (특허문헌 0001) 한국 특허공개공보 2009-0114716호

**발명의 내용**

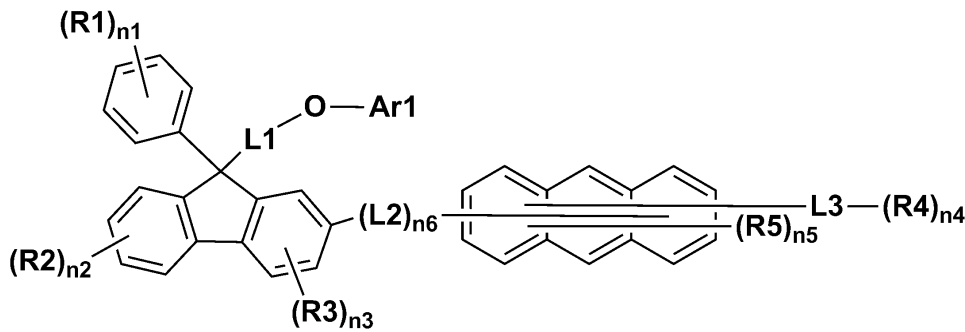
**해결하려는 과제**

[0008] 본 명세서는 용액 공정용 유기 발광 소자에서 사용 가능한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공하는 것이 목적이다.

**과제의 해결 수단**

[0009] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0010] [화학식 1]



- [0011]
- [0012] 상기 화학식 1에 있어서,
- [0013] L1 내지 L3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고,
- [0014] R1 내지 R3 및 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
- [0015] Ar1은 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,
- [0016] R4는 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
- [0017] n1은 0 내지 5의 정수이고, n1이 2 이상인 경우 R1은 서로 같거나 상이하며,
- [0018] n2는 0 내지 4의 정수이고, n2이 2 이상인 경우 R2는 서로 같거나 상이하며,
- [0019] n3은 0 내지 3의 정수이고, n3이 2 이상인 경우 R3은 서로 같거나 상이하며,
- [0020] n4는 0 내지 9의 정수이고, n4가 2 이상인 경우 R4는 서로 같거나 상이하며,
- [0021] n5는 0 내지 8의 정수이고, n5가 2 이상인 경우 R5는 서로 같거나 상이하고,
- [0022] n6는 0 내지 2의 정수이고, n6가 2 인 경우 L2는 서로 같거나 상이하다.
- [0023] 본 명세서는 상기 화합물을 포함하는 코팅 조성물을 제공한다.
- [0024] 본 명세서는 또한, 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 코팅 조성물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.
- [0025] 마지막으로, 본 명세서는 기판을 준비하는 단계; 상기 기판 상에 제1 전극을 형성하는 단계; 상기 제1 전극 상에 1층 이상의 유기물층을 형성하는 단계; 및 상기 유기물층 상에 제2 전극을 형성하는 단계를 포함하고, 상기 유기물층을 형성하는 단계는 상기 코팅 조성물을 이용하여 1층 이상의 유기물층을 형성하는 단계를 포함하는 것인 유기 발광 소자의 제조 방법을 제공한다.

**발명의 효과**

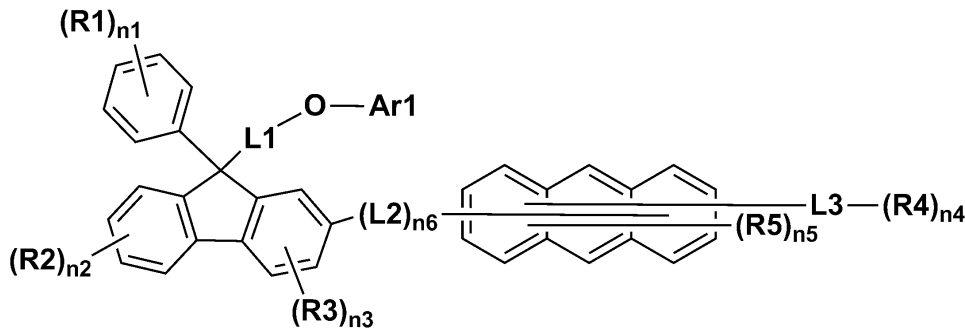
- [0026] 본 발명의 일 실시상태에 따른 화합물은 용액 공정이 가능하며, 소자의 대면적화가 가능하고, 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로 사용될 수 있으며, 낮은 구동전압, 높은 발광효율 및 높은 수명 특성을 제공할 수 있다.
- [0027] 또한, 본 발명의 일 실시상태에 따른 화합물은 화합물 내에 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기를 포함함으로써, 유기 용매에 대한 용해성(용매성) 및 코팅성이 우수한 코팅 조성물을 얻을 수 있어, 용액 공정 시 공정성이 개선되는 이점이 있다.

**도면의 간단한 설명**

- [0028] 도 1은 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.
- 도 2 내지 4는 화합물 1의 LC-MS data를 나타낸 도이다.
- 도 5는 화합물 1의 wavelength-intensity 값을 나타낸 도이다.
- 도 6 내지 8은 화합물 2의 LC-MS data를 나타낸 도이다.
- 도 9는 화합물 2의 wavelength-intensity 값을 나타낸 도이다.
- 도 10 내지 12는 화합물 3의 LC-MS data를 나타낸 도이다.
- 도 13은 화합물 3의 wavelength-intensity 값을 나타낸 도이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

- [0029] 이하, 본 명세서를 상세히 설명한다.
- [0030] 본 명세서의 일 실시상태는 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.
- [0031] [화학식 1]



- [0032] 상기 화학식 1에 있어서,
- [0033] L1 내지 L3는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고,
- [0035] R1 내지 R3 및 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
- [0036] Ar1은 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,
- [0037] R4는 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
- [0038] n1은 0 내지 5의 정수이고, n1이 2 이상인 경우 R1은 서로 같거나 상이하며,
- [0039] n2는 0 내지 4의 정수이고, n2이 2 이상인 경우 R2는 서로 같거나 상이하며,
- [0040] n3은 0 내지 3의 정수이고, n3이 2 이상인 경우 R3은 서로 같거나 상이하며,
- [0041] n4는 0 내지 9의 정수이고, n4가 2 이상인 경우 R4는 서로 같거나 상이하며,

- [0042] n5는 0 내지 8의 정수이고, n5가 2 이상인 경우 R5는 서로 같거나 상이하고,
- [0043] n6는 0 내지 2의 정수이고, n6가 2 인 경우 L2는 서로 같거나 상이하다.
- [0044] 본 발명의 일 실시상태에 따른 화합물에 포함된 플루오렌은 형광이 우수할 뿐만 아니라 우수한 전기적 특성 및 우수한 전하 수송 능력을 가지므로 고효율, 낮은 구동전압, 높은 휘도 및 긴 수명을 갖는 유기 발광 소자를 제조할 수 있으며, 플루오렌에 소자 특성이 우수한 안트라센을 도입함으로써 높은 용점을 가지게 되어 유기 발광 소자의 내구성 향상에도 기인하게 된다.
- [0045] 또한, 본 발명의 화합물은 전기적 특성과 전하 수송 능력이 우수한 플루오렌과 소자 특성이 우수한 안트라센이 결합된 코어를 형성하며, 플루오렌의 9번 탄소 위치에 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기를 포함함으로써, 유기 용매에 대한 용해성을 향상시켜 박막 제조시 용액 공정이 용이하며, 코팅성이 우수한 이점이 있다.
- [0046] 일 예에 따르면, 플루오렌에 결합된 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기가 안트라센의 에너지 준위에 영향을 주지 않으므로 발광층의 호스트로 사용될 수 있다.
- [0047] 본 명세서에 있어서, 어떤 부재가 다른 부재 “상에” 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부재가 다른 부재에 접해 있는 경우뿐 아니라 두 부재 사이에 또 다른 부재가 존재하는 경우도 포함한다.
- [0048] 본 명세서에 있어서, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 “포함” 한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성 요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.
- [0049] 본 명세서의 일 실시상태는 상기 화학식 1의 화합물은 적당한 유기용매에 대해 용해성을 갖는 화합물들이 바람직하다.
- [0050] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물의 경우, 용액 도포법에 의하여 유기 발광 소자를 제조할 수 있어 소자의 대면적화가 가능할 수 있다.
- [0051] 이하, 본 명세서의 치환기를 상세하게 설명한다.



- [0052] 본 명세서에 있어서, 는 다른 치환기 또는 결합부에 결합되는 부위를 의미한다.
- [0053] 본 명세서에 있어서, 상기 “치환”이라는 용어는 화합물의 탄소 원자에 결합된 수소 원자가 다른 치환기로 바뀌는 것을 의미하며, 치환되는 위치는 수소 원자가 치환되는 위치 즉, 치환기가 치환 가능한 위치라면 한정하지 않으며, 2 이상 치환되는 경우, 2 이상의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0054] 본 명세서에서 “치환 또는 비치환된”이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 실릴기; 붕소기; 알킬기; 시클로알킬기; 알콕시기; 알케닐기; 아릴기; 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환 또는 비치환된 것을 의미한다. 예컨대, “2 이상의 치환기가 연결된 치환기”는 바이페닐기일 수 있다. 즉, 바이페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다.
- [0055] 본 명세서에 있어서, 할로젠기는 불소(F), 염소(Cl), 브롬(Br) 또는 요오드(I)이다.
- [0056] 본 명세서에 있어서, 실릴기는 -SiR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>R<sub>c</sub>의 화학식으로 표시될 수 있고, 상기 R<sub>a</sub>, R<sub>b</sub> 및 R<sub>c</sub>는 각각 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다. 상기 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.
- [0057] 본 명세서에 있어서, 붕소기는 -BR<sub>d</sub>R<sub>e</sub>의 화학식으로 표시될 수 있고, 상기 R<sub>d</sub> 및 R<sub>e</sub>는 각각 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다. 상기 붕소기는 구체적으로 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.
- [0058] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 60일 수 있고, 일 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 30일 수 있다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 상기 알킬기의 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, sec-부틸기, 1-메틸-부틸기, 1-에틸-부틸기, 펜틸기, 이소펜틸기, 네오펜틸기, tert-펜틸기, 1-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, 헥실기, 이소헥실기, 4-메틸헥실기,

5-메틸헥실기, 헵틸기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

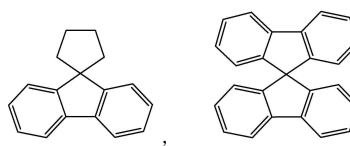
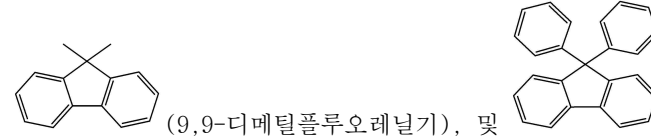
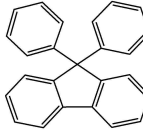
[0059] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60일 수 있고, 일 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 40이다. 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 상기 시클로알킬기의 구체적인 예로는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 3-메틸시클로펜틸기, 2,3-디메틸시클로펜틸기, 시클로헥실기, 3-메틸시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 2,3-디메틸시클로헥실기, 3,4,5-트리메틸시클로헥실기, 4-tert-부틸시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0060] 본 명세서에 있어서, 상기 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 상기 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 20일 수 있다. 상기 알콕시기의 구체적인 예로는 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, 이소프로폭시기, i-프로필옥시기, n-부톡시기, 이소부톡시기, tert-부톡시기, sec-부톡시기, n-펜틸옥시기, 네오펜틸옥시기, 이소펜틸옥시기, n-헥실옥시기, 3,3-디메틸부틸옥시기, 2-에틸부틸옥시기, n-옥틸옥시기, n-노닐옥시기, n-데실옥시기, 벤질옥시기, p-메틸벤질옥시기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0061] 본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 30일 수 있고, 일 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 20일 수 있다. 상기 알케닐기의 구체적인 예로는 비닐기, 1-프로페닐기, 이소프로페닐기, 1-부테닐기, 2-부테닐기, 3-부테닐기, 1-펜테닐기, 2-펜테닐기, 3-펜테닐기, 3-메틸-1-부테닐기, 1,3-부타디에닐기, 알릴기, 1-페닐비닐-1-일기, 2-페닐비닐-1-일기, 2,2-디페닐비닐-1-일기, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일기, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일기, 스티베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.

[0062] 본 명세서에 있어서, 상기 아릴기는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 60일 수 있으며, 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 20이다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 트리페닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0063] 본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있다.

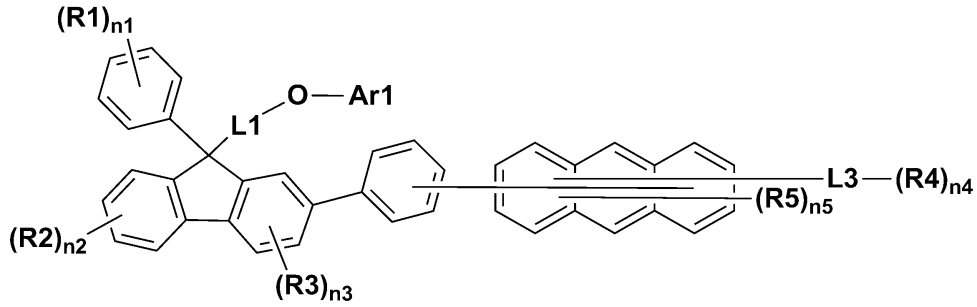
[0064] 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우,  등의 스피로플루오레닐기,  (9,9-디메틸플루오레닐기), 및  (9,9-디페닐플루오레닐기) 등의 치환된 플루오레닐기가 될 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0065] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리기는 이종원자로 N, O, P, S, Si 및 Se 중 1개 이상을 포함하는 헤테로고리로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 2 내지 60일 수 있다. 일 실시상태에 따르면, 상기 헤테로고리기의 탄소수는 2 내지 30이다. 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 헤테로고리기의 탄소수는 2 내지 20이다. 헤테로고리기의 예로는 예로는 피리딘기, 피롤기, 피리미딘기, 피리다지닐기, 퓨라닐기, 티오펜기, 이미다졸기, 피라졸기, 옥사졸기, 이소옥사졸기, 티아졸기, 이소티아졸기, 트리아졸기, 옥사디아졸기, 티아디아졸기, 디티아졸기, 테트라졸기, 피라닐기, 티오피라닐기, 피라지닐기, 옥사지닐기, 티아지닐기, 디옥시닐기, 트리아지닐기, 테트라지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴놀릴기, 퀴나졸리닐기, 퀴녹살리닐기, 나프티리디닐기, 아크리딘기, 크산테닐기, 페난트리디닐기, 디아자나프탈레닐기, 트리아자인테닐기, 인돌기, 인돌리닐기, 인돌리지닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 벤조티아졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈이미다졸기, 벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 디벤조퓨라닐기, 카바졸기, 벤조카바졸기, 디벤조카바졸기, 인돌로카바졸기, 인데노카바졸기, 페나지닐기, 이미다조피리딘기, 페녹사지닐기, 페난트리딘기, 페난트롤린(phenanthroline)기, 페노티아진(phenothiazine)기, 이미다조피리딘기,

이미다조페난트리딘기, 벤조이미다조퀴나졸린기, 또는 벤조이미다조페난트리딘기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

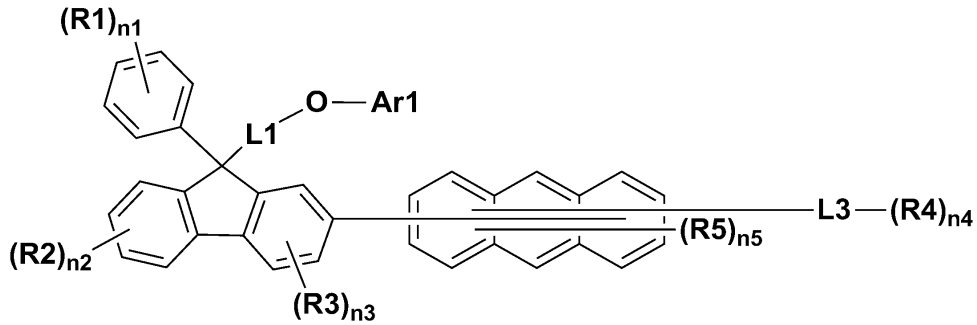
- [0066] 본 명세서에 있어서, 서로 결합하여 형성되는 치환 또는 비치환된 고리에서, "고리"는 치환 또는 비치환된 탄화수소고리; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리를 의미한다.
- [0067] 본 명세서에 있어서, 탄화수소고리는 방향족, 지방족 또는 방향족과 지방족의 축합고리일 수 있으며, 상기 2가 기인 것을 제외하고 상기 시클로알킬기 또는 아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [0068] 본 명세서에 있어서, 방향족 탄화수소고리는 2가기인 것을 제외하고는 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [0069] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리는 탄소가 아닌 원자, 이종원자를 1 이상 포함하는 것으로서, 구체적으로 상기 이종 원자는 N, O, P, S, Si 및 Se 등으로 이루어진 군에서 선택되는 원자를 1 이상 포함할 수 있다. 상기 헤테로고리는 단환 또는 다환일 수 있으며, 방향족, 지방족 또는 방향족과 지방족의 축합고리일 수 있으며, 방향족 헤테로고리는 2가기인 것을 제외하고 상기 헤테로아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [0070] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴기는 방향족인 것을 제외하고는 전술한 헤테로 고리기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [0071] 본 명세서에 있어서, 상기 아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는, 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용된다.
- [0072] 본 명세서에 있어서, 상기 헤테로아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는, 전술한 헤테로아릴기에 관한 설명이 적용된다.
- [0073] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬렌기는 2가기인 것을 제외하고는, 전술한 알킬기에 관한 설명이 적용된다.
- [0074] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L2는 직접결합; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴렌기이다.
- [0075] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L2는 직접결합; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴렌기이다.
- [0076] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 L2는 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 아릴렌기이다.
- [0077] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L2는 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기이다.
- [0078] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 L2는 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이다.
- [0079] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L2는 직접결합; 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸렌기이다.
- [0080] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 L2는 직접결합; 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸렌기이다.
- [0081] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L2는 직접결합; 페닐렌기; 또는 나프틸렌기이다.
- [0082] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 n6는 1 또는 2이다.
- [0083] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 화학식 5 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0084] [화학식 2]



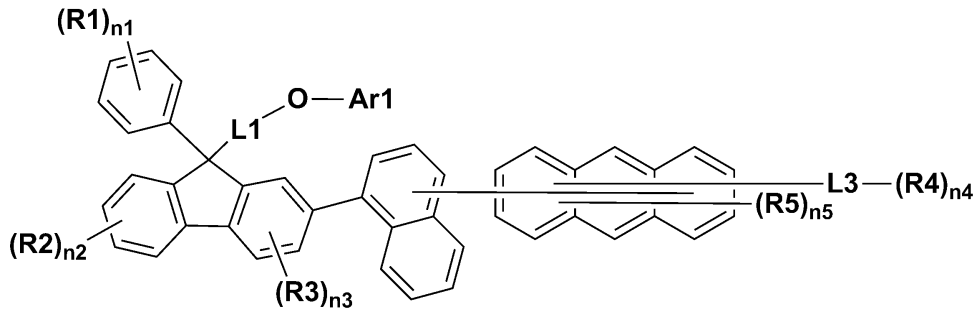
[0085]

[0086] [화학식 3]



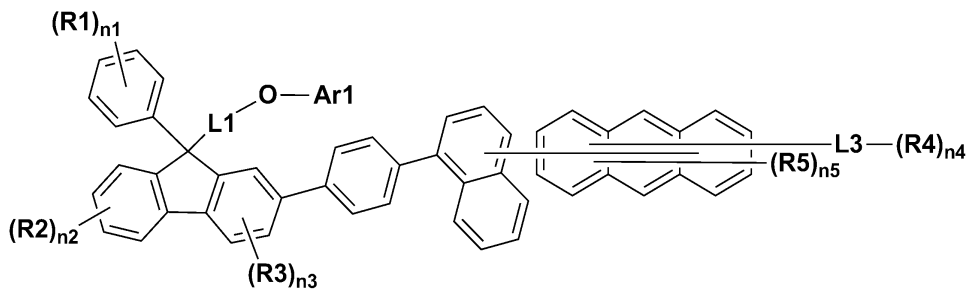
[0087]

[0088] [화학식 4]



[0089]

[0090] [화학식 5]



[0091]

[0092] 상기 화학식 2 내지 화학식 5에 있어서,

[0093] R1 내지 R5, n1 내지 n5, L1, L3 및 Ar1의 정의는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

[0094] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1은 치환 또는 비치환된 아릴렌기이다.

[0095] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기이다.

[0096] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 L1은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이다.

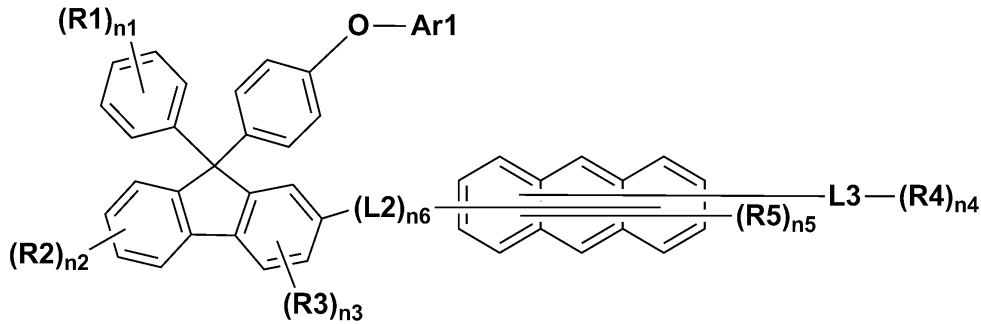
[0097] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1은 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸렌기이다.

[0098] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 L1은 치환 또는 비치환된 페닐렌기이다.

[0099] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1은 페닐렌기이다.

[0100] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-A로 표시될 수 있다.

[0101] [화학식 1-A]



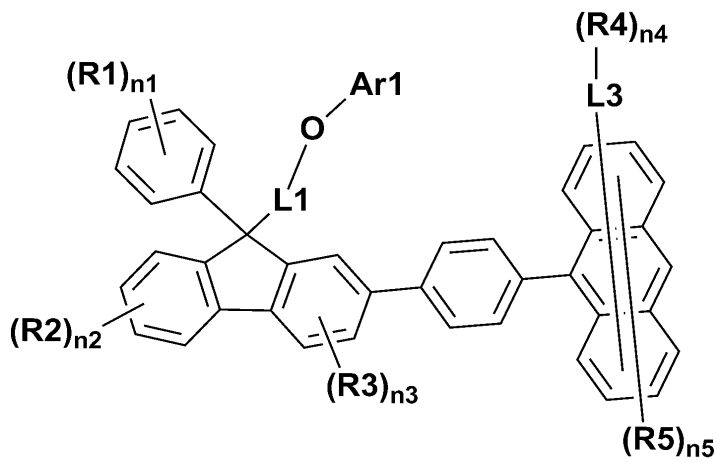
[0102]

[0103] 상기 화학식 1-A에 있어서,

[0104] R1 내지 R5, n1 내지 n6, L2, L3 및 Ar1의 정의는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

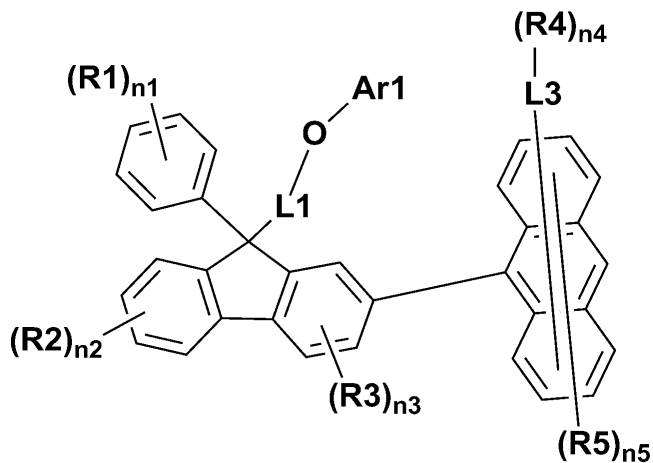
[0105] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 6 내지 화학식 9 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0106] [화학식 6]



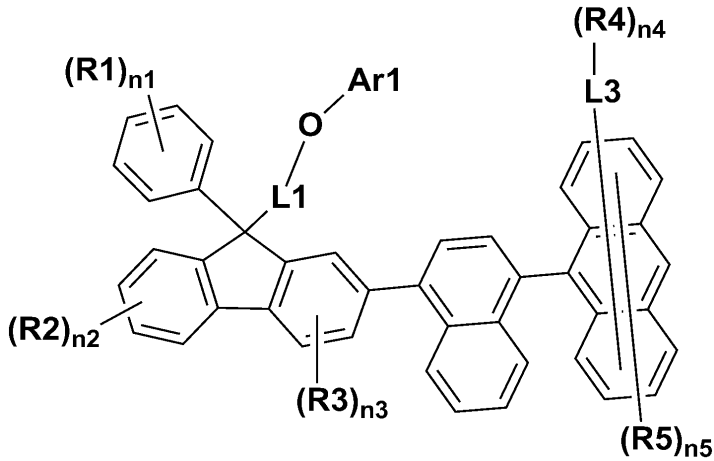
[0107]

[0108] [화학식 7]



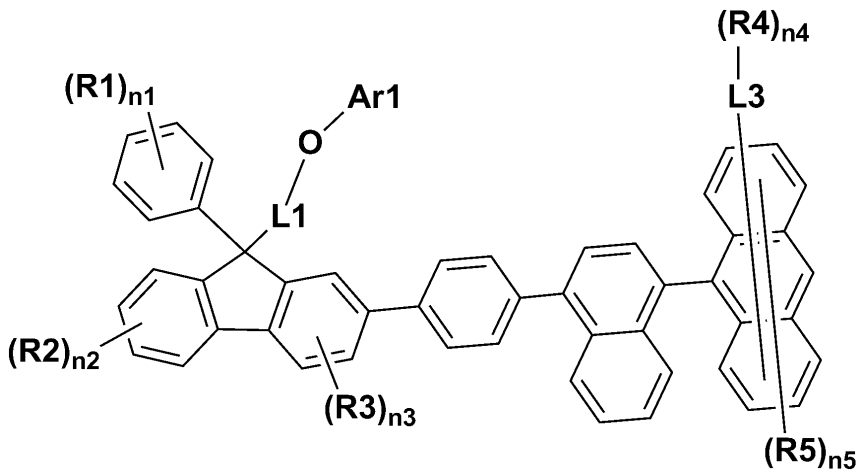
[0109]

[0110] [화학식 8]



[0111]

[0112] [화학식 9]



[0113]

[0114] 상기 화학식 6 내지 화학식 9에 있어서,

[0115] R1 내지 R5, n1 내지 n5, L1, Ar1 및 L3의 정의는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

[0116] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1은 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이다.

[0117] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1은 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기이다.

[0118] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1은 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이다.

[0119] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1은 수소; 치환 또는 비치환된 메틸기; 치환 또는 비치환된 에틸기; 치환 또는 비치환된 n-프로필기; 치환 또는 비치환된 이소프로필기; 치환 또는 비치환된 n-부틸기; 치환 또는 비치환된 tert-부틸기; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.

[0120] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1은 수소; 메틸기; 에틸기; n-프로필기; 이소프로필기; n-부틸기; tert-부틸기; 페닐기; 바이페닐기; 또는 나프틸기이다.

[0121] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1은 수소; 또는 tert-부틸기이다.

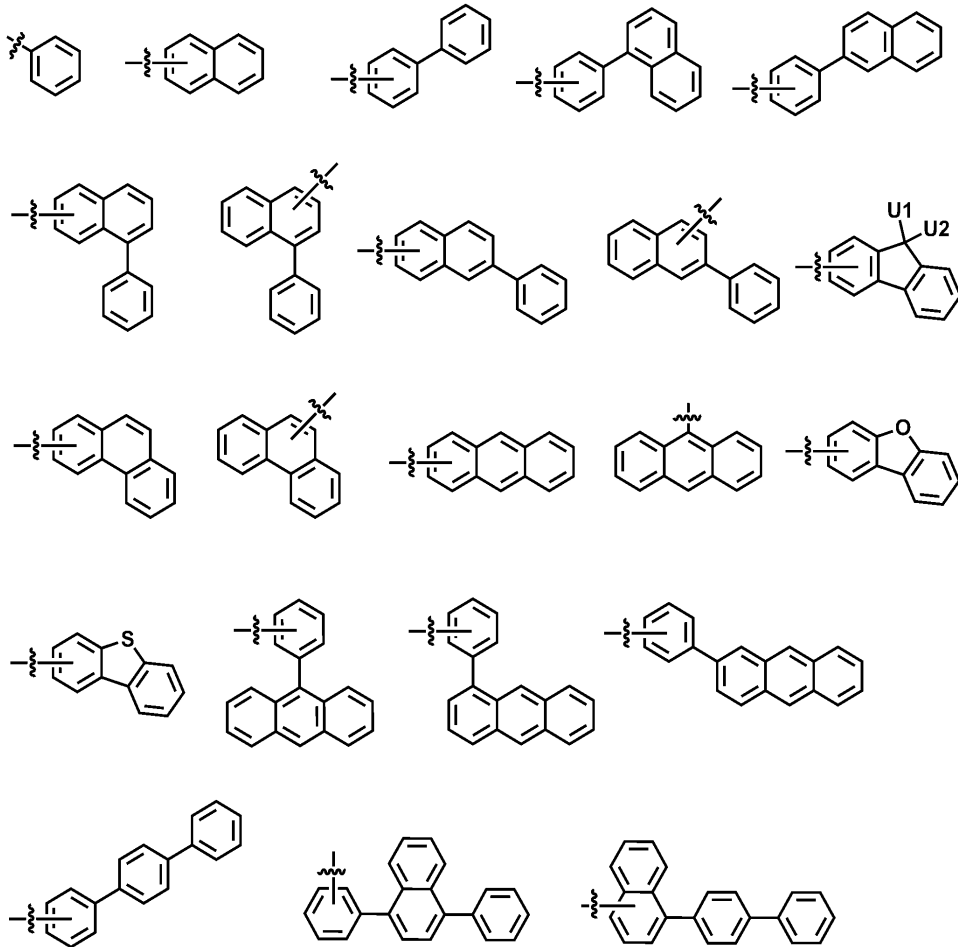
[0122] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 n1은 0 내지 2의 정수이다.

[0123] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 n1은 0 또는 1이다.

- [0124] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R2, R3 및 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.
- [0125] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R2, R3 및 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리기이다.
- [0126] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R2, R3 및 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로고리기이다.
- [0127] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R2, R3 및 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 메틸기; 치환 또는 비치환된 에틸기; 치환 또는 비치환된 n-프로필기; 치환 또는 비치환된 이소프로필기; 치환 또는 비치환된 n-부틸기; 치환 또는 비치환된 tert-부틸기; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이다.
- [0128] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R2, R3 및 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 메틸기; 에틸기; n-프로필기; 이소프로필기; n-부틸기; tert-부틸기; 페닐기; 바이페닐기; 나프틸기; 디벤조퓨란기; 또는 디벤조티오펜기이다.
- [0129] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R2, R3 및 R5는 수소이다.
- [0130] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 n2는 0 내지 2의 정수이다.
- [0131] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 n2는 0 또는 1이다.
- [0132] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 n3는 0 내지 2의 정수이다.
- [0133] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 n3는 0 또는 1이다.
- [0134] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 n5는 0 내지 2의 정수이다.
- [0135] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 n5는 0 또는 1이다.
- [0136] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴기이다.
- [0137] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이다.
- [0138] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이다.
- [0139] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1은 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 터페닐기; 치환 또는 비치환된 안트라세닐기; 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기; 또는 치환 또는 비치환된 카바졸기이다.
- [0140] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1은 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 터페닐기; 치환 또는 비치환된 안트라세닐기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기; 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 카바졸기이다.
- [0141] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1은 페닐기; 바이페닐기; 나프틸기; 터페닐기; 안트라세닐기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 3,9-디페닐카바졸기 또는 9-페닐카바졸기이다.
- [0142] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L3는 직접결합; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴렌기이다.
- [0143] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 L3는 직접결합; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴렌기이다.

- [0144] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 L3는 직접결합; 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기; 치환 또는 비치환된 나프틸렌기; 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기; 또는 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기이다.
- [0145] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 L3는 직접결합; 페닐렌기; 바이페닐렌기; 나프틸렌기; 안트라세닐렌기; 또는 페난트레닐렌기이다.
- [0146] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R4는 수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리기이다.
- [0147] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R4는 수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로고리기이다.
- [0148] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R4는 수소; 알킬기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 알킬기로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로고리기이다.
- [0149] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R4는 수소; 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로고리기이다.
- [0150] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R4는 수소; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 터페닐기; 치환 또는 비치환된 안트라세닐기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 페난트레닐기; 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이다.
- [0151] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 R4는 수소; 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 나프틸기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 터페닐기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 안트라세닐기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 페난트레닐기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 또는 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이다.
- [0152] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 R4는 수소; 나프틸기, 안트라세닐기 또는 페닐나프틸기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 바이페닐기; 페닐기 또는 바이페닐기로 치환 또는 비치환된 나프틸기; 터페닐기; 안트라세닐기; 9,9-디메틸플루오레닐기; 페난트레닐기; 디벤조퓨란기; 또는 디벤조티오펜기이다.
- [0153] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 n4는 0 내지 2의 정수이다.
- [0154] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 n4는 0 또는 1이다.

[0155] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R4는 수소; 또는 하기 구조들 중 선택되는 어느 하나일 수 있다.



[0156]

[0157] 상기 구조들에 있어서,

[0158] U1 및 U2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이거나, 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.

[0159] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 U1 및 U2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기이거나, 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.

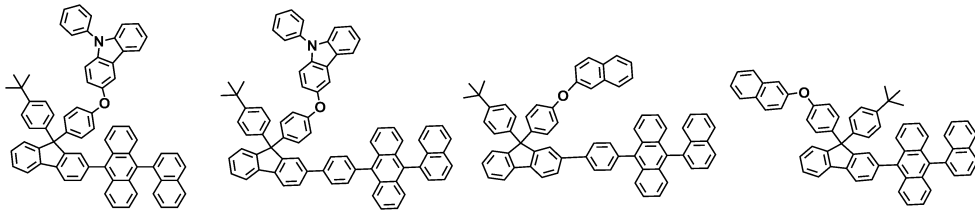
[0160] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 U1 및 U2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이거나, 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.

[0161] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 U1 및 U2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 메틸기; 치환 또는 비치환된 에틸기; 치환 또는 비치환된 프로필기; 치환 또는 비치환된 이소프로필기; 치환 또는 비치환된 부틸기; 치환 또는 비치환된 tert-부틸기; 치환 또는 비치환된 펜틸기; 치환 또는 비치환된 헥실기; 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 터페닐기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기이거나, 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리를 형성한다.

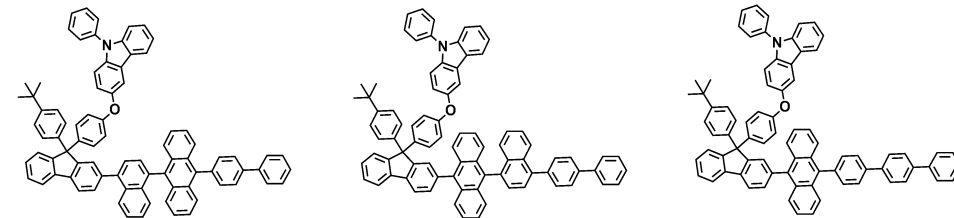
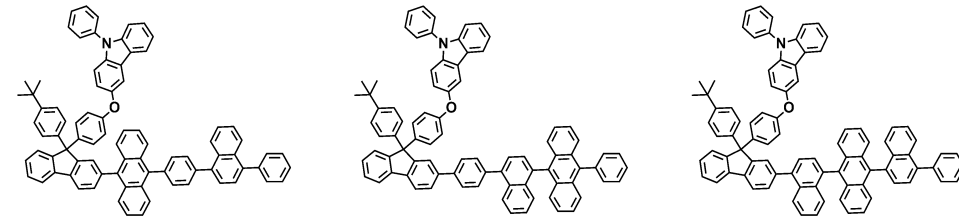
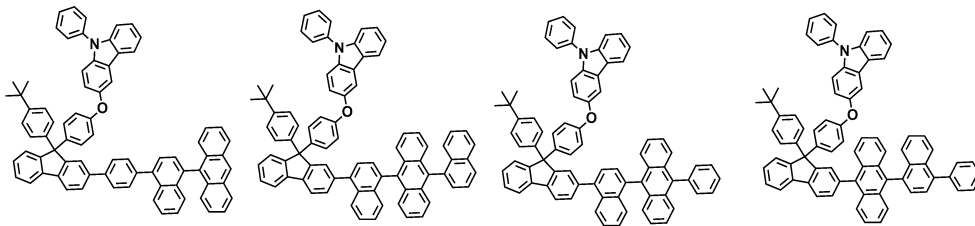
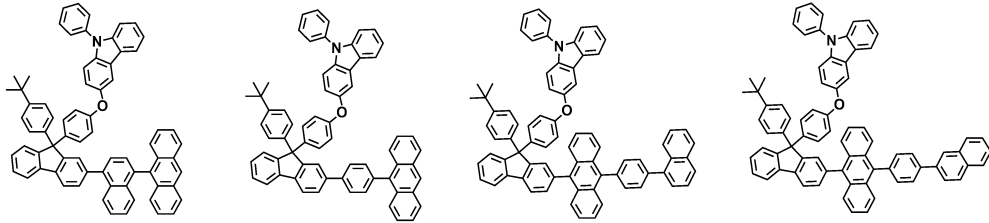
[0162] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 U1 및 U2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 메틸기; 치환 또는 비치환된 에틸기; 프로필기; 이소프로필기; 부틸기; tert-부틸기; 펜틸기; 헥실기; 페닐기; 바이페닐기; 터페닐기; 또는 나프틸기이거나, 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리를 형성한다.

[0163] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 U1 및 U2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 메틸기; 치환 또는 비치환된 에틸기; 프로필기; 이소프로필기; 부틸기; tert-부틸기; 펜틸기; 헥실기; 페닐기; 바이페닐기; 터페닐기; 또는 나프틸기이거나, 서로 결합하여 시클로펜틸기 또는 플루오레닐기를 형성한다.

[0164] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화합물들 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

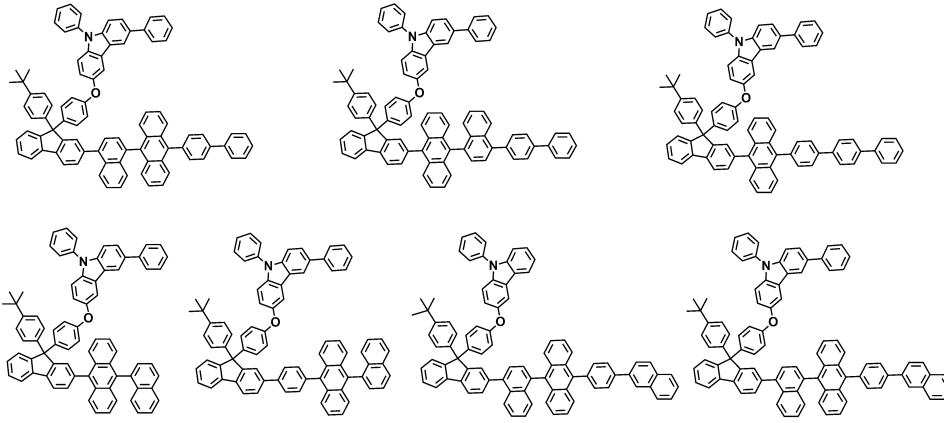


[0165]



[0166]



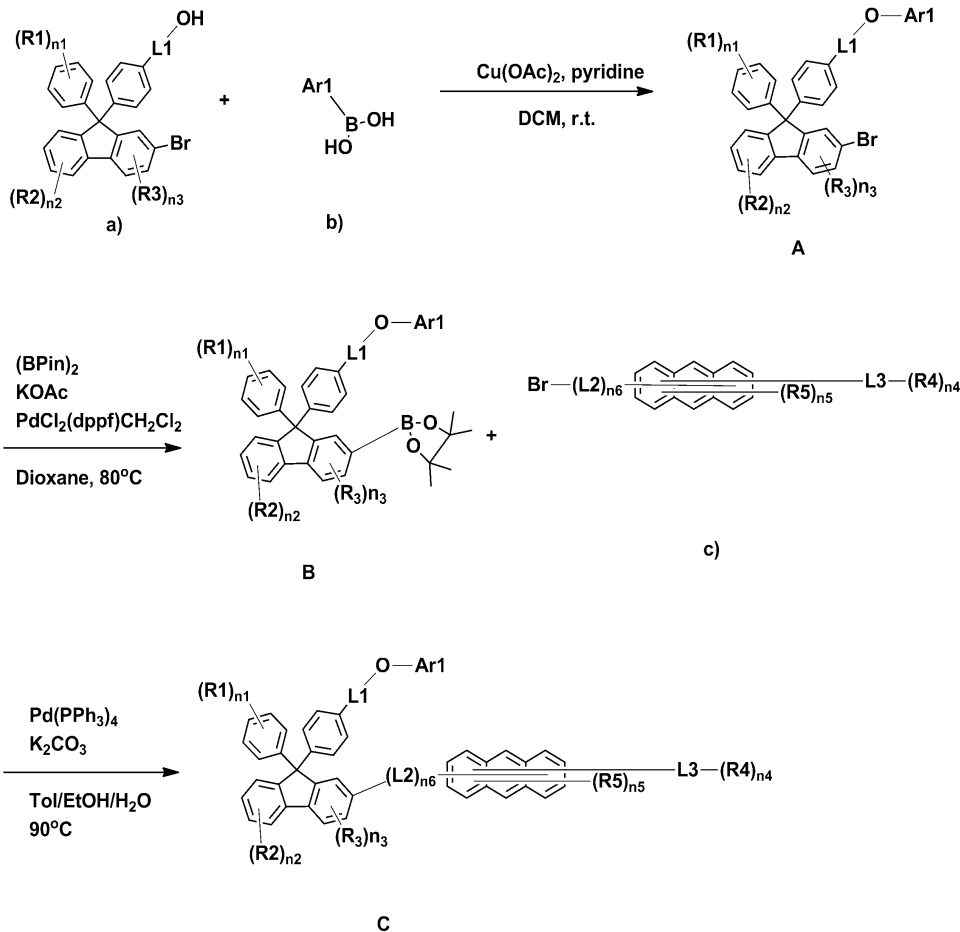


[0169]

[0170] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물은 후술하는 제조방법으로 제조될 수 있다.

[0171] 예컨대 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 1의 일반적인 제조방법에 기재한 방법으로 제조될 수 있다. 치환기는 당 기술분야에 알려져 있는 방법에 의하여 결합될 수 있으며, 치환기의 종류, 위치 또는 개수는 당 기술분야에 알려져 있는 기술에 따라 변경될 수 있다.

[0172] <화학식 1의 일반적인 제조방법>



[0173]

[0174] a) (1eq.), b) (1.5eq.), Cu(OAc)<sub>2</sub> (1.5eq.), 피리딘(pyridine) (5eq.), 4A 분자체를 둥근플라스크에 넣고 탈가스(degassing)한 다이클로로메테인(dichloromethane)을 넣은 후 공기 분위기(air condition)로 상온에서 24시간 교반시켰다. 반응 과정에서 피리딘(pyridine)을 넣으면 용액 색깔이 블루사파이어에서 청록색으로 변하게 된다. 박층 확인을 통해 반응이 완료된 것을 확인한 후, 셀라이트 여과(celite filtration)를 통해 분자체를 제거하고 다이클로로메테인(DCM)/brine을 사용하여 추출(extraction) 하였다. 정제는 회전농축기를 통해 농축시킨 뒤 다이클로로메테인(dichloromethane)에 최소량으로 녹인 뒤에 에탄올에 침전시켜 얻은 파우더를 컬럼(column)을 사용하여 분리하였고 이때 용리액(eluent)은 에틸아세테이트(ethyl acetate)/헥산(Hexane)[1:10] 혼합용

액을 사용하였다. (6g) 다음으로 미야우라 보틸레이션(Miyaura borylation) 반응을 통해 A를 합성하였다. A (1eq.), (BPin)<sub>2</sub> (4eq.), KOAc (6eq.)를 둥근플라스크에 넣고 다이옥산(dioxane)에 녹인 뒤 80° C로 유지시킨 뒤 PdCl<sub>2</sub>(1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센: 1,1'-Bis(diphenylphosphino)ferrocene) (0.06eq.)를 넣고 밤새 환류(reflux) 해주었다. 반응이 완료된 것을 박층 확인을 통해 확인한 후, 다이클로로메테인(DCM)/brine로 work-up 하고 산성백토와 MgSO<sub>4</sub>를 넣어 30분 정도 교반시킨 뒤 셀라이트/실리카 패드(celite/silca pad)를 통과시켰다. 컬럼을 통해서 정제하였고 용리액(eluent)은 에틸아세테이트(ethyl acetate)/헥산(Hexane)[1:15] 혼합용매를 사용하였다. (1g) 마지막으로 스즈키 반응(Suzuki reaction)을 통해서 B를 합성하였다. B (1.1eq.), c) (1eq.), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (3eq.)를 둥근플라스크에 넣고 톨루엔/에탄올/H<sub>2</sub>O(toluene/ethanol/H<sub>2</sub>O)를 넣은 후, 90° C로 유지시킨 뒤 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.1eq.)를 넣고 환류(reflux) 해주었다. 반응 종결 후, 다이클로로메테인(DCM)/H<sub>2</sub>O로 work-up하고 산성백토와 MgSO<sub>4</sub>를 넣어 30분 정도 교반시킨 뒤 셀라이트/실리카 패드(celite/silca pad)를 통과시켰다. 컬럼을 통해서 1차 정제하였고 용리액(eluent)은 에틸아세테이트(ethyl acetate)/헥산(Hexane) [1:20] 혼합용매를 사용하여 본원 화학식 1에 해당하는 C를 제조하였다.

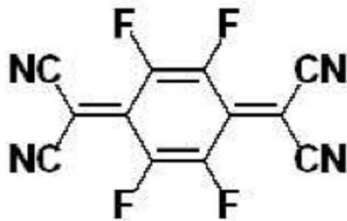
- [0175] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 전술한 화학식 1의 화합물을 포함하는 코팅 조성물을 제공한다.
- [0176] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 코팅 조성물은 상기 화학식 1의 화합물 및 용매를 포함한다.
- [0177] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 코팅 조성물은 액상일 수 있다. 상기 "액상"은 상온 및 상압에서 액체 상태인 것을 의미한다.
- [0178] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 용매는 에칸대, 클로로포름, 염화메틸렌, 1,2-디클로로에탄, 1,1,2-트리클로로에탄, 클로로벤젠, o-디클로로벤젠 등의 염소계 용매; 테트라히드로푸란, 디옥산 등의 에테르계 용매; 톨루엔, 크실렌, 트리메틸벤젠, 메시틸렌 등의 방향족 탄화수소계 용매; 시클로헥산, 메틸시클로헥산, n-펜탄, n-헥산, n-헵탄, n-옥탄, n-노난, n-데칸 등의 지방족 탄화수소계 용매; 아세톤, 메틸에틸케톤, 시클로헥사논, 이소포론(Isophorone), 테트라론(Tetralone), 데칼론(Decalone), 아세틸아세톤(Acetylacetone) 등의 케톤계 용매; 아세트산에틸, 아세트산부틸, 에틸셀로솔브아세테이트 등의 에스테르계 용매; 에틸렌글리콜, 에틸렌글리콜 모노부틸에테르, 에틸렌글리콜모노에틸에테르, 에틸렌글리콜모노메틸에테르, 디메톡시에탄, 프로필렌글리콜, 디에톡시메탄, 트리에틸렌글리콜모노에틸에테르, 글리세린, 1,2-헥산디올 등의 다가 알코올 및 그의 유도체; 메탄올, 에탄올, 프로판올, 이소프로판올, 시클로헥산올 등의 알코올계 용매; 디메틸술폰 등 술폰계 용매; 및 N-메틸-2-피롤리돈, N,N-디메틸포름아미드 등의 아미드계 용매; 테트라린 등의 용매가 예시되나, 본원 발명의 일 실시상태에 따른 화학식 1의 화합물을 용해 또는 분산시킬 수 있는 용매면 족하고, 이들을 한정하지 않는다.
- [0179] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 용매는 1 종 단독으로 사용하거나, 또는 2 종 이상의 용매를 혼합하여 사용할 수 있다.
- [0180] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 코팅 조성물의 점도는 2 cP 내지 15 cP이다.
- [0181] 상기 점도를 만족하는 경우 소제 제조에 용이하다.
- [0182] 본 명세서는 또한, 상기 코팅 조성물을 이용하여 형성된 유기 발광 소자를 제공한다.
- [0183] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 코팅 조성물을 포함한다.
- [0184] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 코팅 조성물을 포함하는 유기물층은 정공수송층, 정공주입층 또는 정공수송과 정공주입을 동시에 하는 층이다.
- [0185] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 코팅 조성물을 포함하는 유기물층은 발광층이다.
- [0186] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 코팅 조성물을 포함하는 유기물층은 발광층이고, 상기 발광층은 상기 화학식 1의 화합물을 발광층의 호스트로서 포함한다.
- [0187] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 코팅 조성물을 포함하는 유기물층은 발광층이고, 상기 발광층은 상기 화학식 1의 화합물을 발광층의 호스트로서 포함하며, 도펀트 재료를 더 포함할 수 있다. 이때 호스트와 도펀트의 질량비(호스트:도펀트)는 80:20 내지 99:1이다. 구체적으로 90:10 내지 99:1일 수 있으며, 보다 구체적으로

90:10 내지 95:5일 수 있다.

- [0188] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 코팅 조성물을 포함하는 유기물층은 발광층이고, 상기 발광층은 상기 화학식 1의 화합물을 발광층의 도펀트로서 포함한다.
- [0189] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 정공주입층, 정공수송층, 전자수송층, 전자주입층, 전자저지층 및 정공저지층으로 이루어진 균에서 선택되는 1층 또는 2층 이상을 더 포함한다.
- [0190] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 애노드이고, 제2 전극은 캐소드이다.
- [0191] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 제1 전극은 캐소드이고, 제2 전극은 애노드이다.
- [0192] 또 하나의 실시상태에 있어서, 유기 발광 소자는 기관 상에 애노드, 1층 이상의 유기물층 및 캐소드가 순차적으로 적층된 구조(normal type)의 유기 발광 소자일 수 있다.
- [0193] 또 하나의 실시상태에 있어서, 유기 발광 소자는 기관 상에 캐소드, 1층 이상의 유기물층 및 애노드가 순차적으로 적층된 역방향 구조(inverted type)의 유기 발광 소자일 수 있다.
- [0194] 본 명세서의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기층을 포함할 수 있다.
- [0195] 예컨대, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 구조는 도 1에 예시되어 있다.
- [0196] 도 1에는 기관(101) 상에 애노드(201), 정공 주입층(301), 정공 수송층(401), 발광층(501), 전자 수송층(601), 전자 주입층(701) 및 캐소드(801)가 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다.
- [0197] 상기 도 1은 유기 발광 소자를 예시한 것이며 이에 한정되지 않는다.
- [0198] 본 발명의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자는 기관 / 애노드 / 정공 주입층 / 정공 수송층 / 발광층 / 전자 수송층 / 전자 주입층 / 캐소드 순으로 적층될 수 있으며, 상기 유기 발광 소자에서 정공 수송층 또는 발광층은 전술한 화합물을 포함하는 코팅 조성물을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0199] 상기 유기 발광 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.
- [0200] 본 명세서의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 코팅 조성물을 이용하여 형성하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.
- [0201] 예컨대, 본 명세서의 유기 발광 소자는 기관 상에 애노드, 유기물층 및 캐소드를 순차적으로 적층시킴으로써 제조할 수 있다. 이 때 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical Vapor Deposition)방법을 이용하여, 기관 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 애노드를 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 주입층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 증착 또는 용액 공정을 통하여 형성한 후, 그 위에 캐소드로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기관 상에 캐소드 물질부터 유기물층, 애노드 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수 있다.
- [0202] 본 명세서는 또한, 상기 코팅 조성물을 이용하여 형성된 유기 발광 소자의 제조 방법을 제공한다.
- [0203] 구체적으로 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 기관을 준비하는 단계; 상기 기관 상에 제1 전극을 형성하는 단계; 상기 제1 전극 상에 1층 이상의 유기물층을 형성하는 단계; 및 상기 유기물층 상에 제2 전극을 형성하는 단계를 포함하고, 상기 유기물층을 형성하는 단계는 상기 코팅 조성물을 이용하여 1층 이상의 유기물층을 형성하는 단계를 포함한다.
- [0204] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 코팅 조성물을 이용하여 1층 이상의 유기물층을 형성하는 단계는 스핀 코팅 방법을 이용한다.
- [0205] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 코팅 조성물을 이용하여 1층 이상의 유기물층을 형성하는 단계는 인쇄법을 이용한다.
- [0206] 본 명세서의 상태에 있어서, 상기 인쇄법은 예컨대, 잉크젯 프린팅, 노즐 프린팅, 오프셋 프린팅, 전사 프린팅

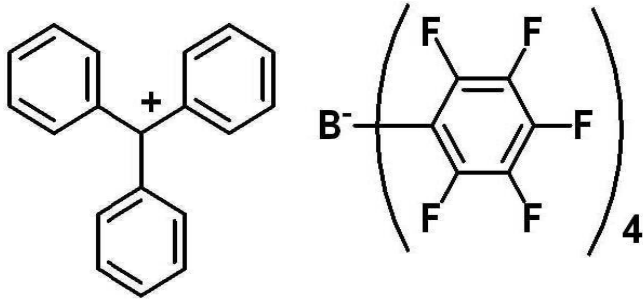
또는 스크린 프린팅 등이 있으나, 이를 한정하지 않는다.

- [0207] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 코팅 조성물은 구조적인 특성으로 용액 공정이 적합하여 인쇄법에 의하여 형성될 수 있으므로 소자의 제조 시에 시간 및 비용적으로 경제적인 효과가 있다.
- [0208] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 건조하는 단계는 열처리를 통하여 행해질 수 있으며, 열처리하여 건조하는 단계에서의 열처리 온도는 60 °C 내지 180 °C이고, 일 실시상태에 따르면 80 °C 내지 180 °C일 수 있으며, 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 120 °C 내지 180°C일 수 있다.
- [0209] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 열처리하여 건조하는 단계에서의 열처리 시간은 1분 내지 1시간이고, 일 실시상태에 따르면 1분 내지 30분일 수 있으며, 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 10분 내지 30분일 수 있다. 상기 열처리 시간의 범위를 만족하는 경우, 용매를 완벽하게 제거할 수 있다.
- [0210] 상기 코팅 조성물을 이용하여 1층 이상의 유기물층을 형성하는 단계에서 상기 열처리하여 건조하는 단계를 포함하는 경우, 상기 코팅 조성물을 이용하여 형성된 유기물층의 표면 위에 다른 층을 적층할 시, 용매에 의하여 용해되거나, 형태학적으로 영향을 받거나, 분해되는 것을 방지할 수 있다.
- [0211] 상기 애노드 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 애노드 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO<sub>2</sub> : Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0212] 상기 캐소드 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 캐소드 물질의 구체적인 예로는 바륨, 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0213] 상기 정공 주입층은 전극으로부터 정공을 주입하는 층으로, 정공 주입 물질로는 정공을 수송하는 능력을 가져 애노드에서의 정공 주입효과, 발광층 또는 발광재료에 대하여 우수한 정공 주입 효과를 갖고, 발광층에서 생성된 여기자의 전자 주입층 또는 전자 주입 재료에의 이동을 방지하며, 또한, 박막 형성 능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 애노드 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrin), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone)계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정 되는 것은 아니며, 하기 화학식 A 내지 E 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 더 포함할 수 있다.
- [0214] [화학식 A]



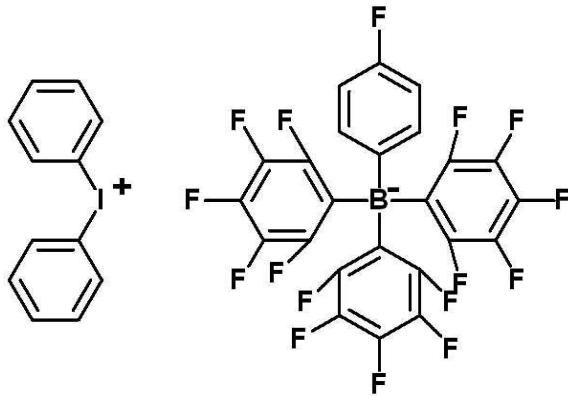
[0215]

[0216] [화학식 B]



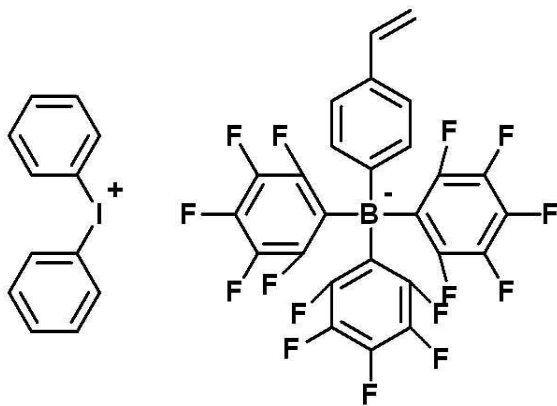
[0217]

[0218] [화학식 C]



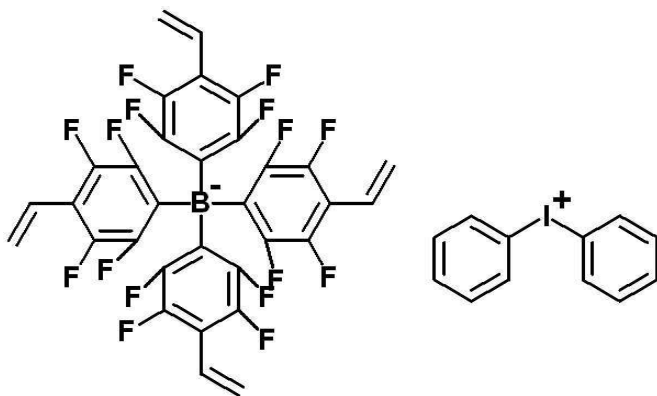
[0219]

[0220] [화학식 D]



[0221]

[0222] [화학식 E]



[0223]

[0224] 상기 정공 수송층은 정공 주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층으로, 정공 수송 물질로는 애노드나 정공 주입층으로부터 정공을 수송 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이

큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0225] 상기 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물( $AlQ_3$ ); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물;  $BAlq$ ; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0226] 상기 발광층은 호스트 재료 및 도펀트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로 축합방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0227] 도펀트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스티릴아민 화합물, 붕소 착체, 플루오란텐 화합물, 피렌 유도체, 금속 착체 등이 있다. 구체적으로 방향족 아민 유도체로는 치환 또는 비치환된 아릴아미노기를 갖는 축합 방향족환 유도체로서, 아릴아미노기를 갖는 피렌, 안트라센, 크리센, 페리플란텐 등이 있으며, 스티릴아민 화합물로는 치환 또는 비치환된 아릴아민에 적어도 1개의 아릴비닐기가 치환되어 있는 화합물로, 아릴기, 실릴기, 알킬기, 시클로알킬기 및 아릴아미노기로 이루어진 군에서 1 또는 2이상 선택되는 치환기가 치환 또는 비치환된다. 구체적으로 스티릴아민, 스티릴디아민, 스티릴트리아민, 스티릴테트라아민 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 또한, 금속 착체로는 이리듐 착체, 백금 착체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0228] 상기 전자 수송층은 전자 주입층으로부터 전자를 수취하여 발광층까지 전자를 수송하는 층으로 전자 수송 물질로는 캐소드로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물;  $AlQ_3$ 를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시폴라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 전자 수송층은 종래기술에 따라 사용된 바와 같이 임의의 원하는 캐소드 물질과 함께 사용할 수 있다. 특히, 적절한 캐소드 물질의 예는 낮은 일함수를 가지고 알루미늄층 또는 실버층이 뒤따르는 통상적인 물질이다. 구체적으로 세슘, 바륨, 칼슘, 이테르븀 및 사마륨이고, 각 경우 알루미늄 층 또는 실버층이 뒤따른다.

[0229] 상기 전자 주입층은 전극으로부터 전자를 주입하는 층으로, 전자 주입 물질로는 전자를 수송하는 능력을 갖고, 캐소드로부터의 전자주입 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 전자주입 효과를 가지며, 발광층에서 생성된 여기자의 정공 주입층에의 이동을 방지하고, 또한, 박막형성능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 구체적으로는 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀸논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사디아졸, 트리아졸, 이미다졸, 벤조이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 합질소 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0230] 상기 금속 착체 화합물로서는 8-하이드록시퀴놀리나토 리튬, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)아연, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)구리, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)망간, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(2-메틸-8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)갈륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)아연, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)클로로갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(o-크레졸라토)갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(1-나프톨라토)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(2-나프톨라토)갈륨 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0231] 상기 정공저지층은 정공의 캐소드 도달을 저지하는 층으로, 일반적으로 정공주입층과 동일한 조건으로 형성될 수 있다. 구체적으로 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, BCP, 알루미늄 착물 (aluminum complex) 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0232] 본 명세서에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

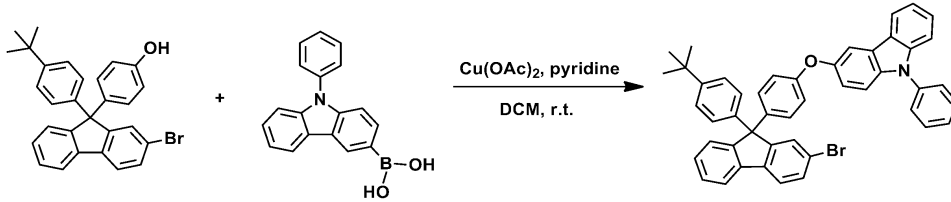
[0233] 이하, 본 명세서를 구체적으로 설명하기 위해 실시예를 들어 상세하게 설명하기로 한다. 그러나, 본 명세서에 따른 실시예들은 여러 가지 다른 형태로 변형될 수 있으며, 본 명세서의 범위가 아래에서 기술하는 실시예들에 한정되는 것으로 해석되지 않는다. 본 명세서의 실시예들은 당업계에서 평균적인 지식을 가진 자에게 본 명세서

를 보다 완전하게 설명하기 위해 제공되는 것이다.

[0235] <제조예>

[0236] 제조예 1. 화합물 1의 제조

[0237] 1) 중간체 1의 제조



[0238]

[0239]

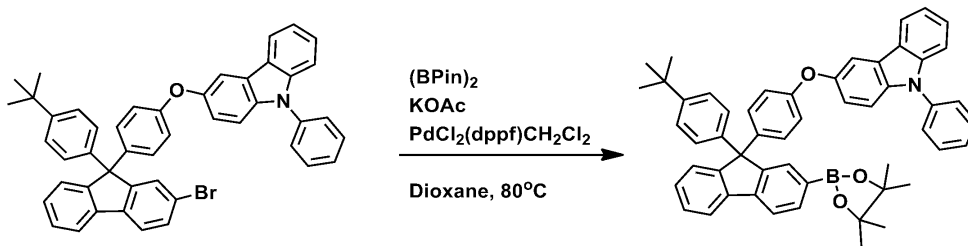
[SM1]

[SM2]

[중간체 1]

[0240] SM1(10g, 21.3mmol), SM2(9.17g, 31.0mmol), Cu(OAc)<sub>2</sub>(5.79g, 31.9mmol)을 넣고, 4Å 분자체(4Å molecular sieve) 넣었다. 무수 다이클로로메테인(Anhydrous DCM)을 SM1 대비 0.03M 넣어서 용해시켰다. 8.59mL의 피리딘을 천천히 떨어뜨리면 용액의 색깔이 블루 사파이어에서 점점 청록색으로 변하였다. 그 후, 공기 중(Air condition)에서 상온 24시간 교반시키고 반응 종결 후, 여과(filtration)를 하고 여액을 DCM/H<sub>2</sub>O로 추출하고, 회전농축기로 미정제 화합물(crude compound)을 농축시킨 후 에탄올에 침전시켜 흰색 파우더 형태의 중간체 1를 얻었다.

[0242] 2) 중간체 2의 제조



[0243]

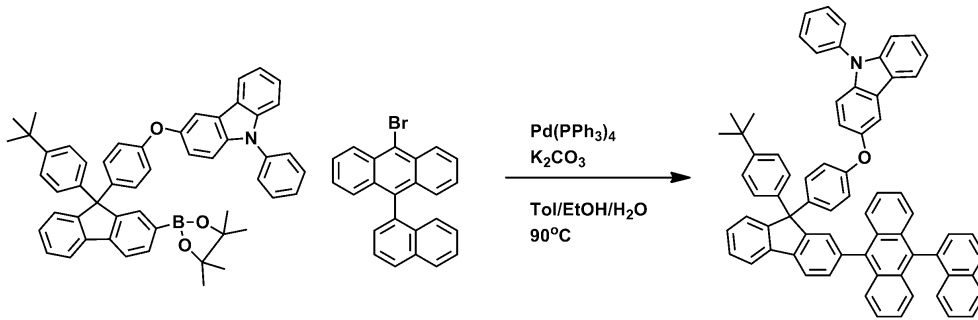
[0244]

[중간체 1]

[중간체 2]

[0245] 중간체 1(3.4g, 4.8mmol), (Bpin)<sub>2</sub>(4.8g, 19mmol), KOAc(2.8g, 28.6mmol)를 100mL 둥근플라스크에 넣은 후 다이옥산(dioxane)으로 용해시켰다. 80°C를 유지한 상태에서 Pd 촉매(0.23g, 0.28mmol)을 넣고 환류시켰다. 반응 종결 후, 다이클로로메테인(DCM)과 brine으로 work-up 한 후, 에터(ether)로 추출하고, 산성백토와 MgSO<sub>4</sub>로 처리한 후 셀라이트/실리카 패드(celite/silica pad)로 여과 (filtration)하여 중간체 2를 수득하였다 (EA:Hex=1:15로 컬럼).

[0247] 3) 화합물 1의 제조



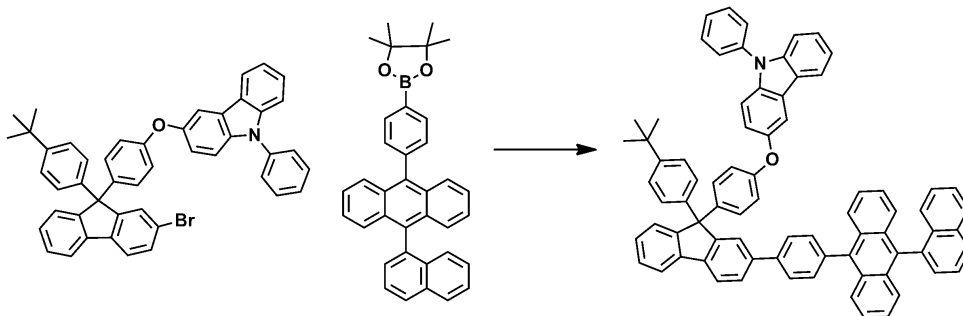
[0248] [중간체 2] [SM3] [화합물 1]

[0250] 중간체 2(1g, 1.3mmol), SM3(0.45g, 1.2mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(0.49g, 3.5mmol)을 100ml 둥근플라스크에 넣은 후, 톨루엔/에탄올/H<sub>2</sub>O 18ml를 넣었다. 90℃로 유지시킨 후, Pd 촉매(0.13g, 0.11mmol)을 넣고 환류시켰다. 반응 종결 후, 다이클로로메테인(DCM)과 brine으로 work-up 한 후, 에터(ether)로 추출하고, 산성백토와 MgSO<sub>4</sub>로 처리한 후 셀라이트/실리카 패드(celite/silica pad)로 여과하여 아이보리 파우더 형태의 화합물 1을 수득하였다(MC:Hex=1:4로 컬럼).

[0251] 하기 도 2 내지 4에 화합물 1의 LC-MS data 를 나타내었으며, 하기 도 5에 화합물 1의 UV absorption을 측정된 데이터를 나타내었다. 도 5로부터 상기 화합물 1의 uv edge는 422.55nm이고, bandgap은 2.93 eV임을 확인하였다.

[0253] 제조예 2. 화합물 2의 제조

[0254] 1) 화합물 2의 제조



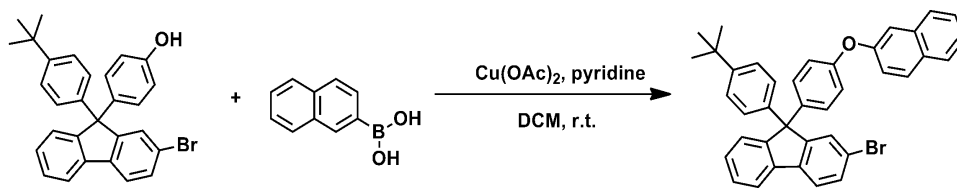
[0255] [중간체 1] [SM4] [화합물 2]

[0257] 중간체 1(2.64g, 3.7mmol), SM4(1.3g, 3mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(1.28g, 9.3mmol)을 100ml 둥근플라스크에 넣은 후, 톨루엔/에탄올/H<sub>2</sub>O 44ml를 넣었다. 90℃로 유지시킨 후, Pd 촉매(0.35g, 0.3mmol)을 넣고 환류시켰다. 반응 종결 후, 다이클로로메테인(DCM)과 brine으로 work-up 한 후, 에터(ether)로 추출하고, 산성백토와 MgSO<sub>4</sub>로 처리한 후 셀라이트/실리카 패드(celite/silica pad)로 여과하여 아이보리 파우더 형태의 화합물 2를 수득하였다(MC:Hex=1:4로 컬럼).

[0258] 하기 도 6 내지 8에 화합물 2의 LC-MS data 를 나타내었으며, 하기 도 9에 화합물 1의 UV absorption을 측정된 데이터를 나타내었다. 도 9로부터 상기 화합물 2의 uv edge는 420.75nm이고, bandgap은 2.94 eV임을 확인하였다.

[0260] 제조예 3. 화합물 3의 제조

[0261] 1) 중간체 3의 제조



[0262]

[0263]

[SM1]

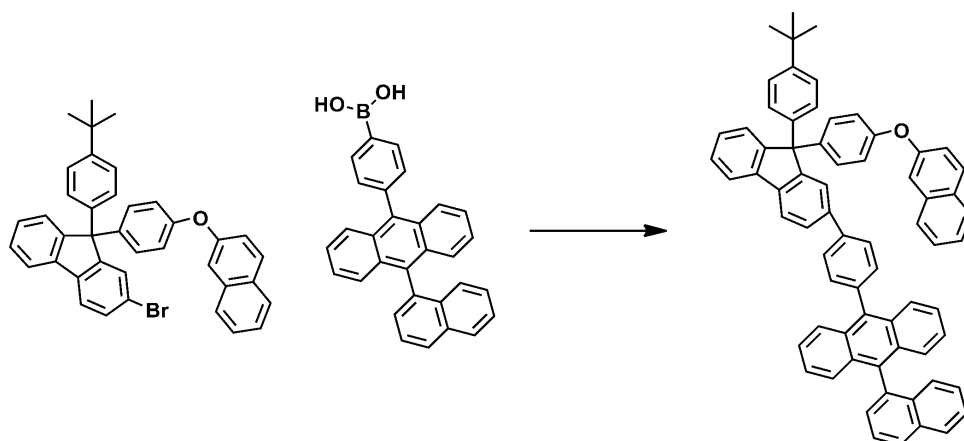
[SM5]

[중간체 3]

[0264]

SM1(8g, 17mmol), SM5(4.39g, 25.56mmol), Cu(OAc)<sub>2</sub>(4.64g, 25.56mmol)을 넣고, 4Å 분자체(4Å molecular sieve) 넣었다. 무수 다이클로로메테인(Anhydrous DCM)을 SM1 대비 0.03M 넣어서 용해시켰다. 6.8mL의 피리딘을 천천히 떨어뜨리면 용액의 색깔이 블루 사파이어에서 점점 청록색으로 변하였다. 그 후, 공기 중에서 상온 24시간 교반시키고 반응 종결 후, 여과를 하고 여액을 다이클로로메테인(DCM)/H<sub>2</sub>O로 추출하고, 회전농축기로 미정제 화합물(crude compound)을 농축시켜 중간체 3을 수득하였다(MC:Hex=1:13으로 컬럼).

[0266] 2) 화합물 3의 제조



[0267]

[0268]

[중간체 3]

[SM6]

[화합물 3]

[0269]

중간체 3(2.24g, 3.15mmol), SM6(1.6g, 3.78mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(1.3g, 9.45mmol)을 100ml 둥근플라스크에 넣은 후, 테트라하이드로퓨란(THF)/H<sub>2</sub>O 40ml를 넣었다. 80°C로 유지시킨 후, Pd 촉매(0.34g, 0.3mmol)을 넣고 환류시켰다. 반응 종결 후, 다이클로로메테인(DCM)과 brine으로 work-up 한 후, 에터(ether)로 추출하고, 산성 백토와 MgSO<sub>4</sub>로 처리한 후 셀라티프/실리카 패드(celite/silica pad)로 여과시켜 아이보리 파우더 형태의 화합물 3을 수득하였다(MC:Hex=1:4로 컬럼).

[0270]

하기 도 10 내지 12에 화합물 3의 LC-MS data 를 나타내었으며, 하기 도 13에 화합물 1의 UV absorption을 측정한 데이터를 나타내었다. 도 13으로부터 상기 화합물 3의 uv edge는 421nm이고, bandgap은 2.94 eV임을 확인하였다.

[0272]

상기 제조예 1 및 3에서 SM2 또는 SM5와 보론산에 결합된 치환기가 N-페닐카바졸기 또는 나프틸기가 아닌 아릴기 또는 헤테로아릴기이거나, N-페닐카바졸기 또는 나프틸기에 결합된 보론산의 결합위치가 상이한 시판되는 화합물을 사용하는 경우, 상기 화합물 1 내지 3 외에, 본원 화학식 1에 해당하는 화합물을 제조할 수 있다.

[0274]

<실험예>

[0275]

1. 코팅 조성물 제조

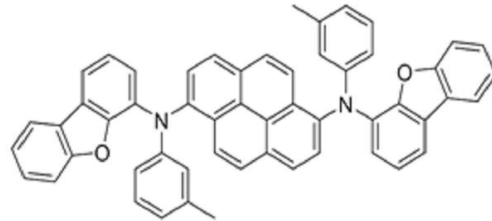
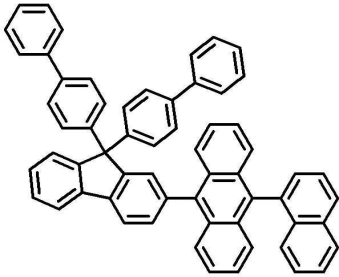
[0276] 하기 표 1에 기재된 바와 같이, 상기 제조예 1 내지 3에서 제조된 화합물 1 내지 3 및 하기 화합물 4 중 어느 하나와 하기 화합물 5를 유기 용매(톨루엔: toluene)에 혼합하여 코팅 조성물 1 내지 4를 제조하였다.

표 1

코팅 조성물	EML 호스트	EML 도펀트	호스트 : 도펀트 (질량비)
1	화합물 1	화합물 5	94 : 6
2	화합물 2	화합물 5	94 : 6
3	화합물 3	화합물 5	94 : 6
4	화합물 4	화합물 5	94 : 6

[0278] [화합물 A]

[화합물 5]



[0279]

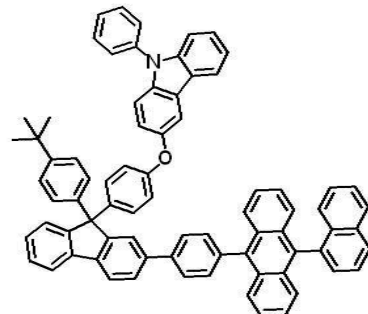
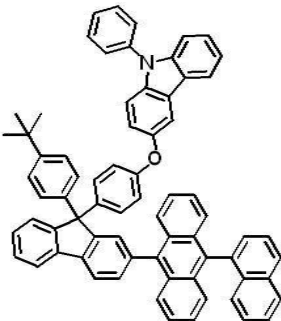
[0281] 실시예 1.

[0282] ITO (indium tin oxide)가 500Å의 두께로 박막 증착된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. ITO를 30분간 세척한 후, 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 아이소프로필알콜, 아세톤의 용제로 초음파 세척을 각각 30분씩 하고 건조시킨 후, 상기 기판을 글러브 박스로 수송시켰다.

[0283] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 화합물 6과 화합물 7을 7:3 비율로 시클로헥사논(cyclohexanone)에 녹인 용액을 스핀 코팅하여 400Å 두께로 코팅하고 N<sub>2</sub> 분위기 하에 220°C로 30분 동안 코팅 조성물을 경화시켜 정공 주입층을 형성하였다. 이후, 상기 정공 주입층 위에 폴리(3,4-에틸렌다이옥시티오펜)/폴리(스티렌술포네이트) [poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/poly(styrene sulfonate)] 수용액을 스핀코팅하여 정공 수송층을 형성하였다.

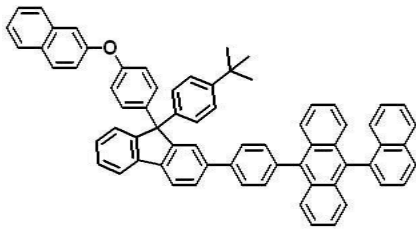
[0284] [화합물 1]

[화합물 2]

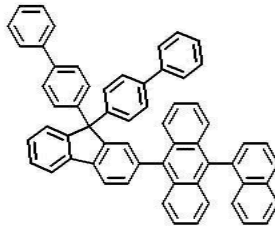


[0285]

[0286] [화합물 3]

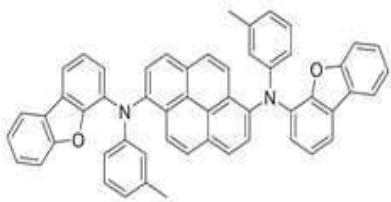


[화합물 4]

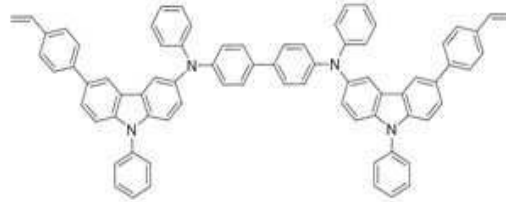


[0287]

[0288] [화합물 5]

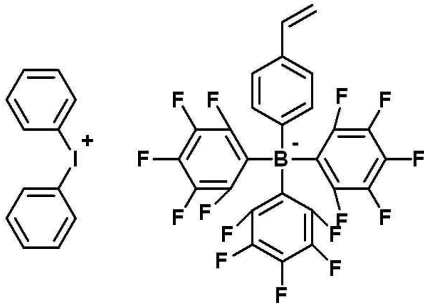


[화합물 6]

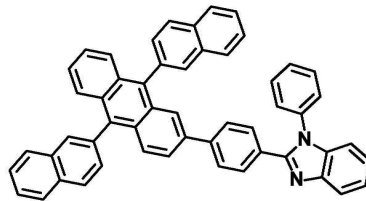


[0289]

[0290] [화합물 7]



[화합물 8]



[0291]

[0292] 이어서 상기 정공 수송층 위에 상기 표 1에 기재된 코팅 조성물 1을 200 Å의 두께로 스프인코팅하고 120℃로 10 분 동안 열처리하여 발광층을 형성하였다. 이후 진공 증착기로 이송하여 상기 발광층 위에 화합물 8을 350 Å의 두께로 진공 증착하여 전자 수송층을 형성하였다. 상기 전자 수송층 위에 순차적으로 10Å의 두께로 LiF와 1400 Å의 두께로 알루미늄을 증착하여 전자 주입층과 캐소드를 형성하였다.

[0293] 상기의 과정에서 유기물의 증착 속도는 2 Å/sec 를 유지하였고, 캐소드의 LiF는 0.1 Å/sec, 알루미늄은 2 Å /sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 2 x 10<sup>-7</sup> 내지 5 x 10<sup>-8</sup> torr를 유지하였다.

[0294] 그 후, 유리에 밀봉 유리와 유리 기판을 광경화성 에폭시 수지를 이용하여 접합시킴으로써 밀봉을 행하여, 다층 구조의 유기 발광 소자를 제조하였다. 이후의 조작은 대기중, 실온(25℃)에서 행하였다.

[0296] **실시예 2.**

[0297] 상기 실시예 1에서 발광층을 코팅 조성물 1 대신 코팅 조성물 2를 사용하여 형성한 것을 제외하고, 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0299] **실시예 3.**

[0300] 상기 실시예 1에서 발광층을 코팅 조성물 1 대신 코팅 조성물 3을 사용하여 형성한 것을 제외하고, 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0302] **비교예 1.**

[0303] 상기 실시예 1에서 발광층을 코팅 조성물 1 대신 코팅 조성물 4를 사용하여 형성한 것을 제외하고, 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0305] 전술한 방법으로 제조한 유기 발광 소자를 10mA/cm<sup>2</sup>의 전류 밀도에서 구동 전압과 발광 효율을 측정한 결과를 하기 표 2에 나타냈었다.

**표 2**

실시예	구동 전압(V)	전류 효율(cd/A)	전력 효율(lm/ W)
실시예 1	4.58	3.6	2.47
실시예 2	4.68	3.75	2.52
실시예 3	4.67	3.66	2.46
비교예 1	5.02	2.59	1.78

[0307] 상기 표 2에 나타난 바와 같이, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기; 및 안트라센을 포함하는 화합물을 발광층의 호스트 물질로 사용하였을 경우, 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기를 포함하지 않는 화합물을 사용한 비교예 1에 비하여 구동 전압이 낮고 효율이 높음을 알 수 있다. 이상을 통해, 본 명세서의 바람직한 실시예(발광층)에 대하여 설명하였지만, 본 발명은 이에 한정되는 것이 아니고 특허청구범위와 발명의 상세한 설명의 범위 안에서 여러 가지로 변형하여 실시하는 것이 가능하고 이 또한 발명의 범주에 속한다.

**부호의 설명**

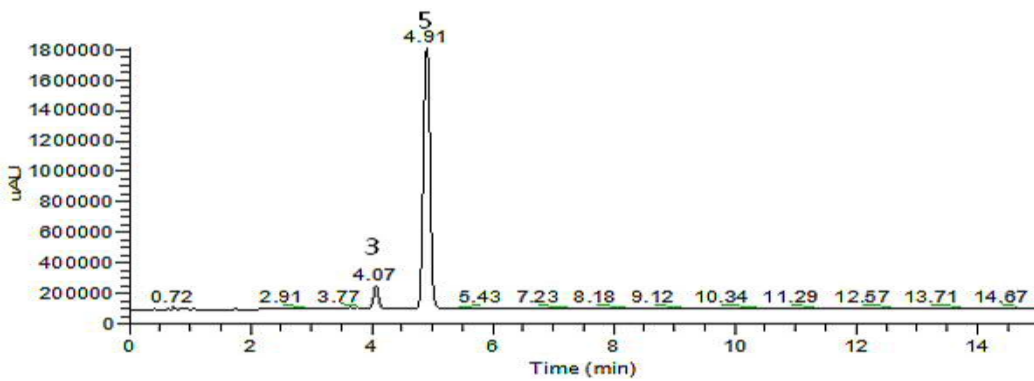
- [0308] 101: 기판
- 201: 애노드
- 301: 정공주입층
- 401: 정공수송층
- 501: 발광층
- 601: 전자수송층
- 701: 전자주입층
- 801: 캐소드

도면

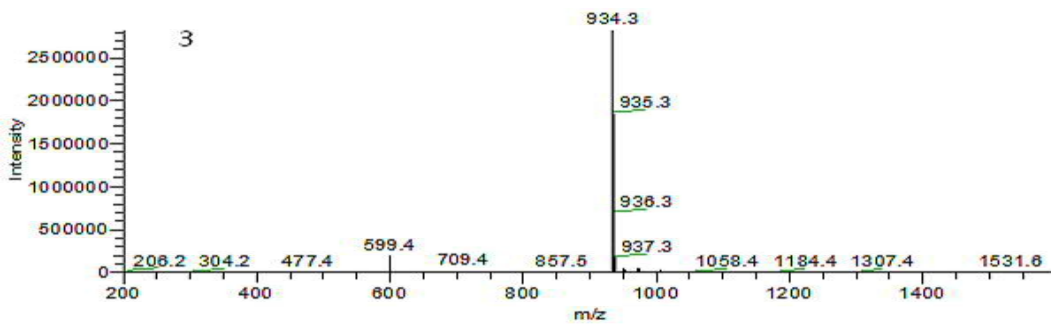
도면1

801
701
601
501
401
301
201
101

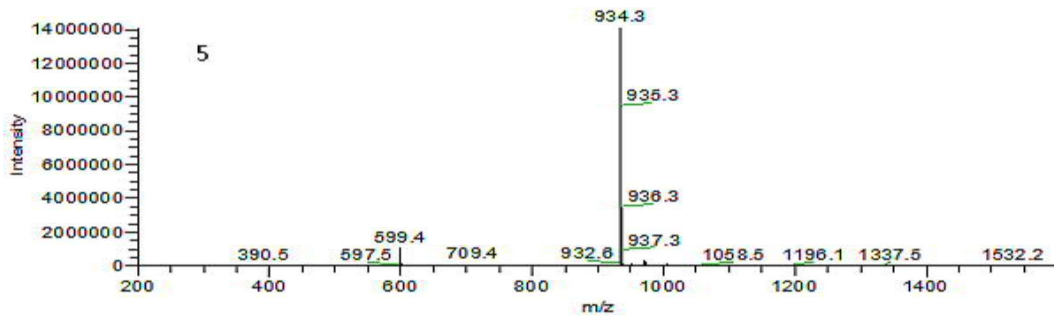
도면2



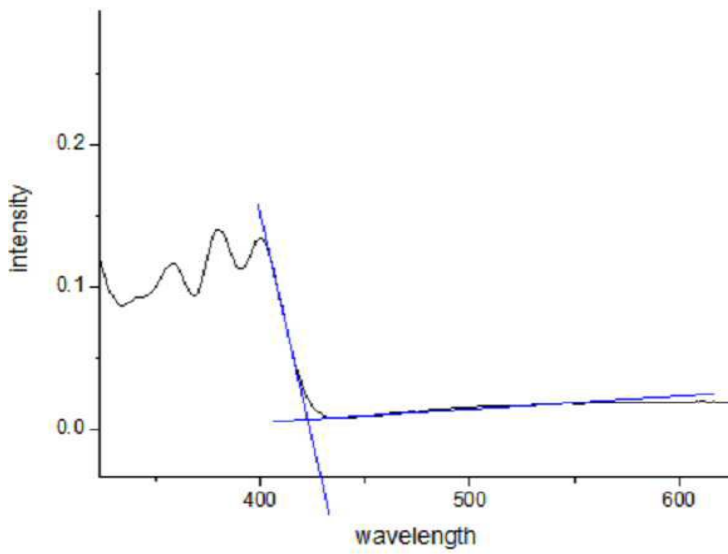
도면3



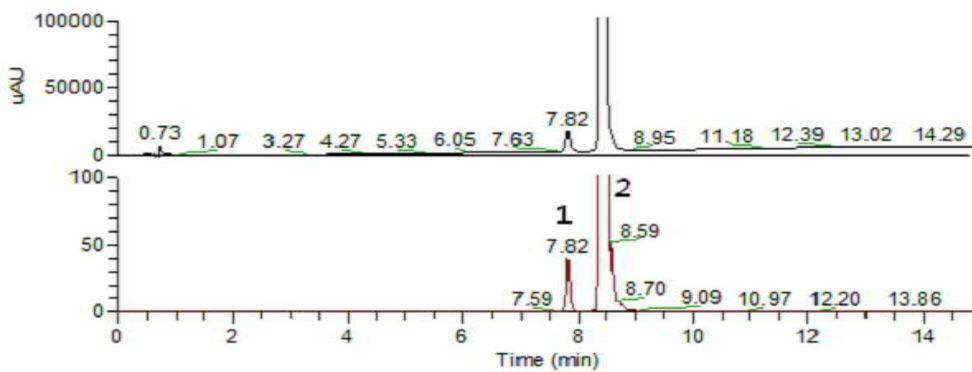
도면4



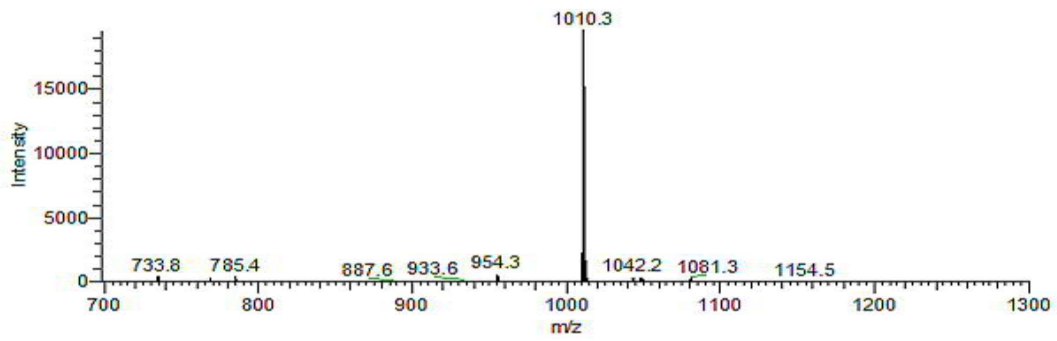
도면5



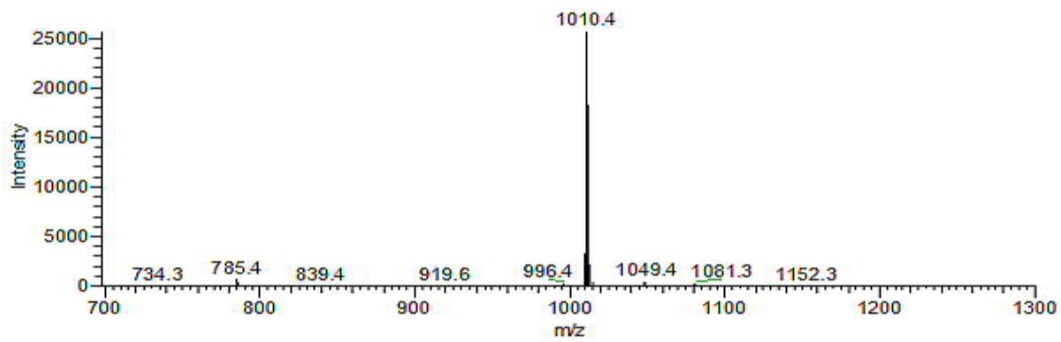
도면6



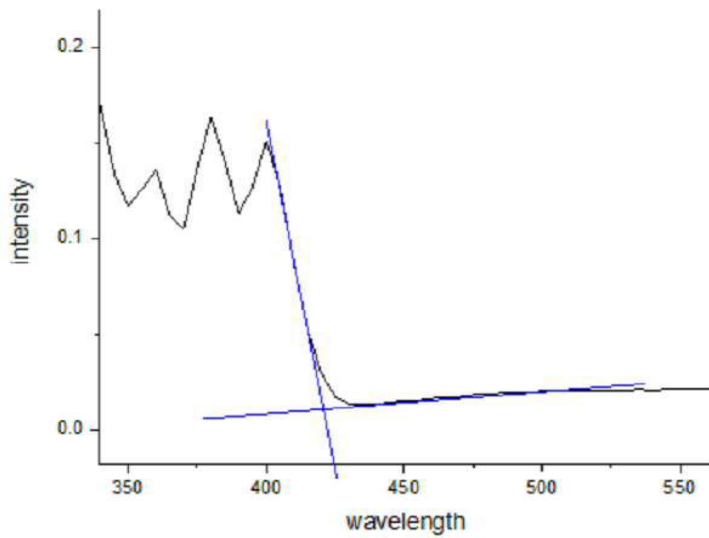
도면7



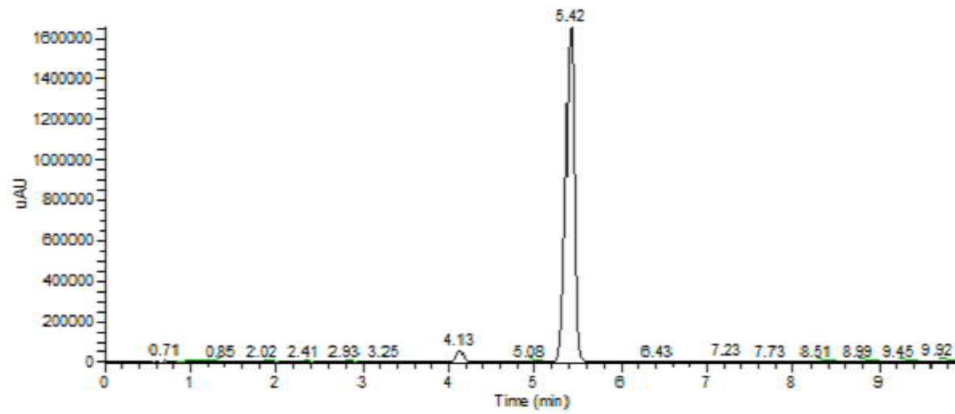
도면8



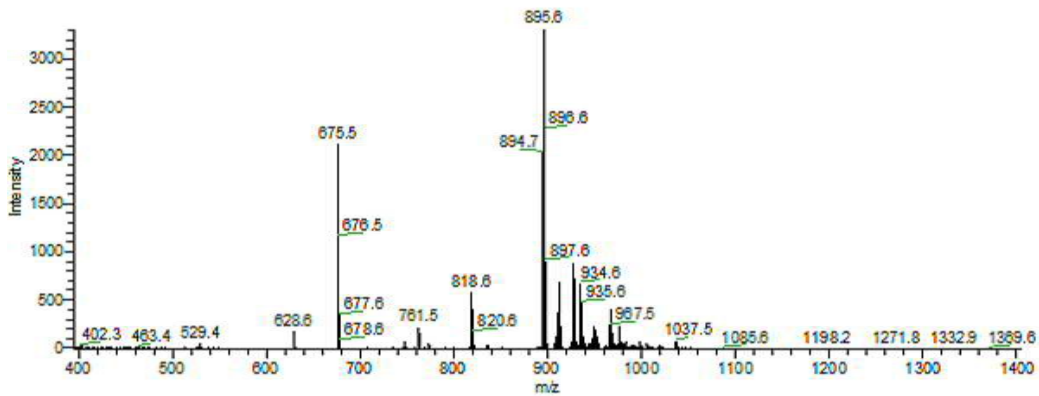
도면9



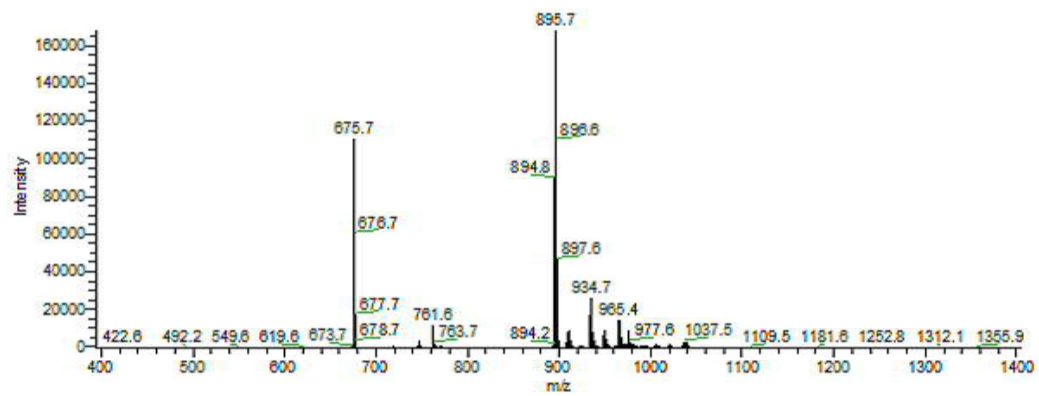
도면10



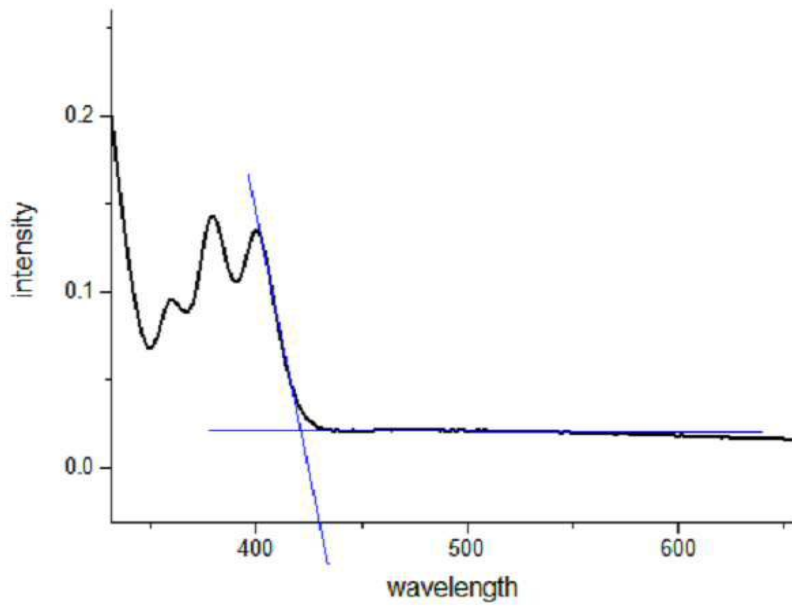
도면11



도면12



도면13



专利名称(译)	化合物, 含有其的涂料组合物, 使用其的有机发光器件及其制造方法		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020190033131A</a>	公开(公告)日	2019-03-29
申请号	KR1020170121537	申请日	2017-09-21
[标]申请(专利权)人(译)	乐金化学股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	LG化学有限公司		
[标]发明人	이길선 배재순 박형일 이재철		
发明人	이길선 배재순 박형일 이재철		
IPC分类号	C09K11/06 C09D5/22 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C09D5/22 H01L51/50 C09K2211/1011		
代理人(译)	Jeongsunseong		
其他公开文献	KR102115070B1		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

本说明书涉及式1的化合物, 包含式1的化合物的涂料组合物, 使用其的有机发光器件及其制造方法。

<b>801</b>
<b>701</b>
<b>601</b>
<b>501</b>
<b>401</b>
<b>301</b>
<b>201</b>
<b>101</b>