



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

(11) 공개번호 10-2018-0058472  
(43) 공개일자 2018년06월01일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)  
H01L 51/50 (2006.01)  
(52) CPC특허분류  
C09K 11/06 (2013.01)  
H01L 51/0062 (2013.01)  
(21) 출원번호 10-2016-0157490  
(22) 출원일자 2016년11월24일  
심사청구일자 2017년11월30일

(71) 출원인  
삼성에스디아이 주식회사  
경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20 (공세동)  
(72) 발명자  
류진현  
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)  
정호국  
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
팬코리아특허법인

전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 **유기 광전자 소자 및 표시 장치**

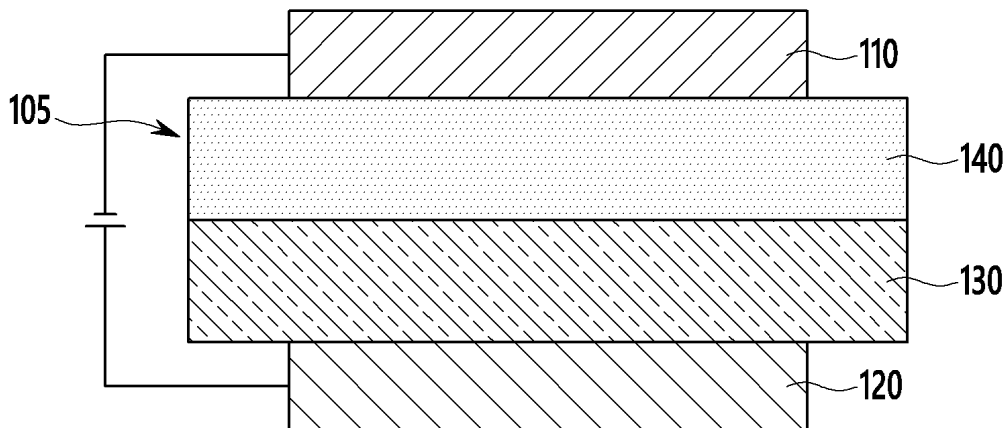
**(57) 요약**

서로 마주하는 음극과 양극; 상기 음극과 상기 양극 사이에 위치하는 발광층; 및 상기 음극과 상기 발광층 사이에 위치하는 전자수송층을 포함하고, 상기 발광층은 화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제1 유기 광전자 소자용 화합물, 및 화학식 2로 표현되는 적어도 1종의 제2 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하고, 상기 전자수송층은 화학식 3으로 표현되는 적어도 1종의 제3 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자에 관한 것이다.

상기 화학식 1 내지 화학식 3에 대한 상세 내용은 명세서에서 정의한 바와 같다.

**대표도** - 도1

**100**



(52) CPC특허분류

*H01L 51/5012* (2013.01)  
*H01L 51/5056* (2013.01)  
*H01L 51/5072* (2013.01)  
*H01L 51/5076* (2013.01)  
*C09K 2211/1029* (2013.01)  
*C09K 2211/1044* (2013.01)  
*C09K 2211/1062* (2013.01)  
*C09K 2211/1088* (2013.01)  
*C09K 2211/1092* (2013.01)

(72) 발명자

**김동영**

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

**장기포**

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

**허달호**

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

**유은선**

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

**정성현**

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

명세서

청구범위

청구항 1

서로 마주하는 음극과 양극;

상기 음극과 상기 양극 사이에 위치하는 발광층; 및

상기 음극과 상기 발광층 사이에 위치하는 전자수송층을 포함하고,

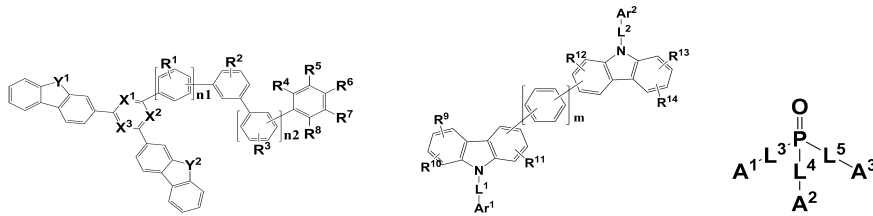
상기 발광층은 하기 화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제1 유기 광전자 소자용 화합물, 및 하기 화학식 2로 표현되는 적어도 1종의 제2 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하고,

상기 전자수송층은 하기 화학식 3으로 표현되는 적어도 1종의 제3 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자:

[화학식 1]

[화학식 2]

[화학식 3]



상기 화학식 1에서,

$X^1$  내지  $X^3$ 은 각각 독립적으로 N 또는  $CR^a$ 이고,

$X^1$  내지  $X^3$  중 적어도 둘은 N이고,

$Y^1$  및  $Y^2$ 는 각각 독립적으로 O 또는 S이고,

$n1$  및  $n2$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

$R^a$  및  $R^1$  내지  $R^8$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고;

상기 화학식 2에서,

$L^1$  및  $L^2$ 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기, 또는 이들의 조합이고,

$Ar^1$  및  $Ar^2$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 또는 이들의 조합이고,

$R^9$  내지  $R^{14}$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

$m$ 은 0 내지 2의 정수 중 하나이고;

상기 화학식 3에서,

$L^3$  내지  $L^5$ 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내

지 C30 헤테로아릴렌기, 또는 이들의 조합이고,

A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup>은 각각 독립적으로 존재하거나 인접한 기기리 연결되어 적어도 하나의 치환 또는 비치환된 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족의 단환식 또는 다환식 고리를 형성하고,

A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup>은 각각 독립적으로 존재할 때, A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup> 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 융합 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합 헤테로고리기이고,

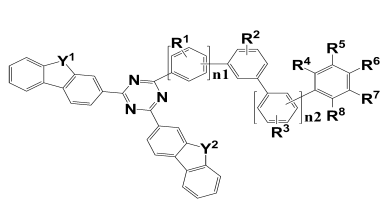
상기 화학식 1 내지 3의 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C4 알킬기, C6 내지 C18 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다.

### 청구항 2

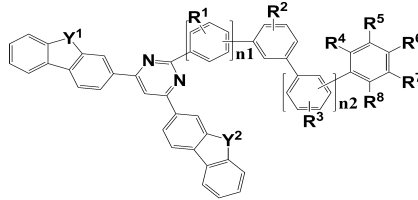
제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-I, 화학식 1-II 또는 화학식 1-III로 표현되는 유기 광전자 소자:

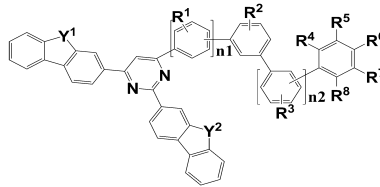
[화학식 1-I]



[화학식 1-II]



[화학식 1-III]



상기 화학식 1-I, 화학식 1-II 및 화학식 1-III에서,

Y<sup>1</sup> 및 Y<sup>2</sup>는 각각 독립적으로 0 또는 S이고,

n1 및 n2는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

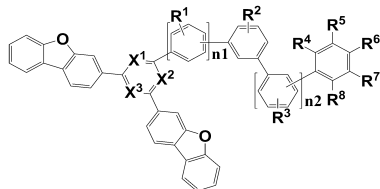
R<sup>1</sup> 내지 R<sup>8</sup>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이다.

### 청구항 3

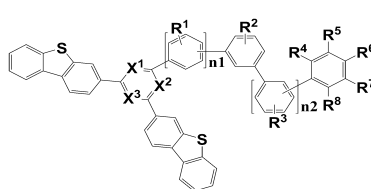
제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1A, 화학식 1B 또는 화학식 1C로 표현되는 유기 광전자 소자:

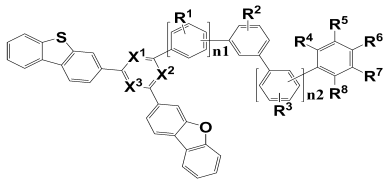
[화학식 1A]



[화학식 1B]



[화학식 1C]



상기 화학식 1A, 화학식 1B 및 화학식 1C에서,

$X^1$  내지  $X^3$ 은 각각 독립적으로 N 또는 CH이고,

$X^1$  내지  $X^3$  중 적어도 둘은 N이고,

$n_1$  및  $n_2$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

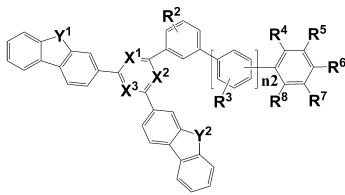
$R^1$  내지  $R^8$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리, 또는 이들의 조합이다.

**청구항 4**

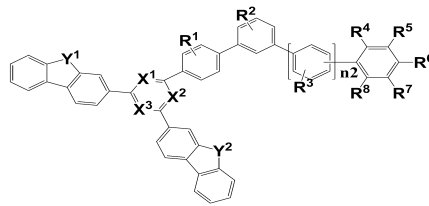
제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 또는 1-2로 표현되는 유기 광전자 소자:

[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



상기 화학식 1-1 내지 1-2에서,

$X^1$  내지  $X^3$ 은 각각 독립적으로 N 또는 CH이고,

$X^1$  내지  $X^3$  중 적어도 둘은 N이고,

$Y^1$  및  $Y^2$ 은 각각 독립적으로 0 또는 S이고,

$n_2$ 는 0 또는 1의 정수이고,

$R^1$  내지  $R^8$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리, 또는 이들의 조합이다.

**청구항 5**

제1항에 있어서,

상기 화학식 1의  $R^1$  내지  $R^8$ 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 o-터페닐기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기인 유기 광전자 소자.

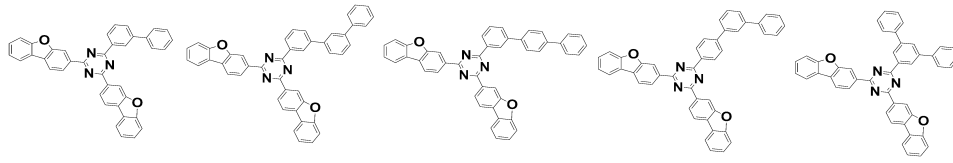
**청구항 6**

제1항에 있어서,

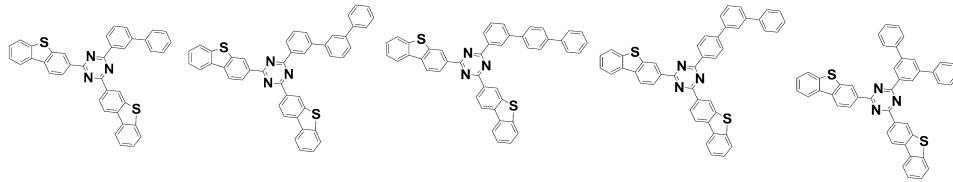
상기 제1 유기 광전자 소자용 화합물은 하기 그룹 1에 나열된 화합물에서 선택되는 유기 광전자 소자:

[그룹 1]

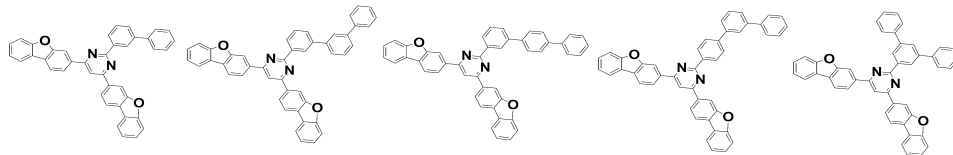
[A-1][A-2][A-3][A-4][A-5]



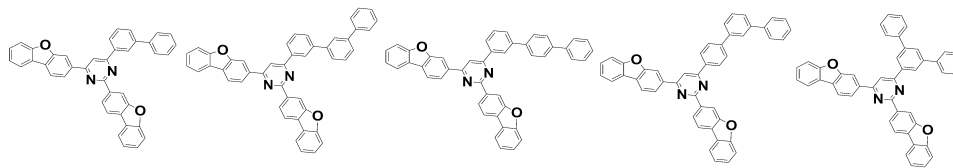
[A-6][A-7][A-8][A-9][A-10]



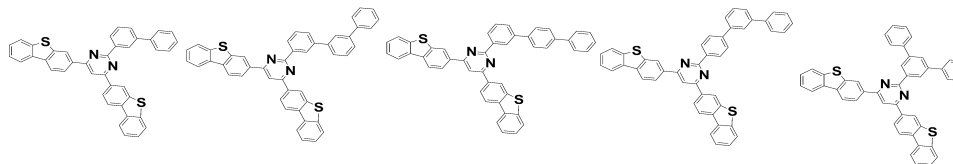
[A-11][A-12][A-13][A-14][A-15]



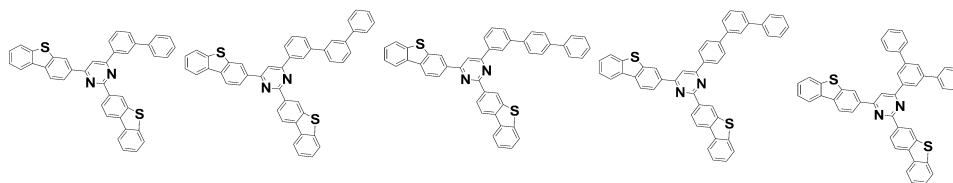
[A-16][A-17][A-18][A-19][A-20]



[A-21][A-22][A-23][A-24][A-25]



[A-26][A-27][A-28][A-29][A-30]



### 청구항 7

제1항에 있어서,

상기 화학식 2의 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 또는 이들의 조합인 유기 광전자 소자.

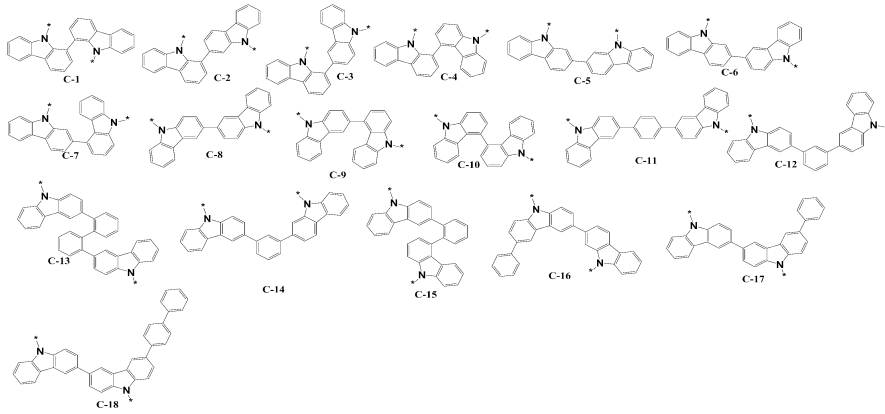
**청구항 8**

제1항에 있어서,

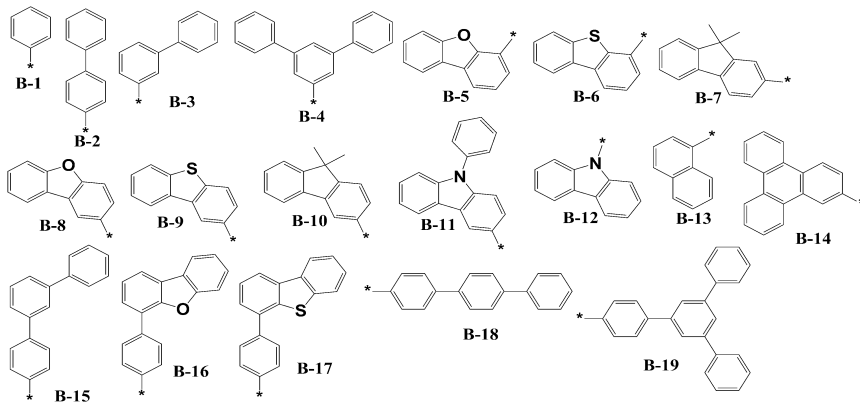
상기 화학식 2는 하기 그룹 I에 나열된 구조 중 하나이고,

상기  $*-L^1-Ar^1$  및  $*-L^2-Ar^2$ 은 하기 그룹 II에 나열된 치환기 중 하나인 유기 광전자 소자:

[그룹 I]



[그룹 II]



상기 그룹 I 및 II에서, \*은 연결 지점이다.

**청구항 9**

제7항에 있어서,

상기 화학식 2는 상기 그룹 I의 화학식 C-8 또는 화학식 C-17로 표현되고,

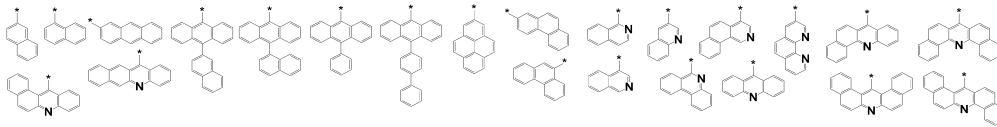
상기  $*-L^1-Ar^1$  및  $*-L^2-Ar^2$ 은 상기 그룹 II의 B-1, B-2, B-3 및 B-16에서 선택되는 유기 광전자 소자.

**청구항 10**

제1항에 있어서,

상기 화학식 3의  $A^1$  내지  $A^3$ 이 각각 독립적으로 존재할 때,  $A^1$  내지  $A^3$  중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 융합 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합 헤테로고리기이고, 상기 치환 또는 비치환된 융합 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합 헤테로고리기는 하기 그룹 III에 나열된 치환기 중 하나인 유기 광전자 소자:

[그룹 III]



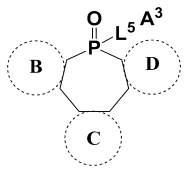
상기 그룹 III에서, \*은 연결 지점이다.

**청구항 11**

제1항에 있어서,

상기 A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup> 중 인접한 기끼리 연결되어 상기 화학식 3은 하기 화학식 3a로 표현되는 유기 광전자 소자:

[화학식 3a]



상기 화학식 3a에서,

B, C 및 D는 각각 독립적으로 7각 코어와 2개의 탄소를 공유하는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리이고,

A<sup>3</sup>은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

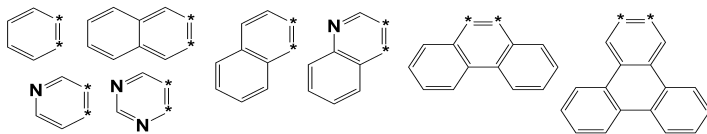
L<sup>5</sup>는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기, 또는 이들의 조합이다.

**청구항 12**

제11항에 있어서,

상기 B, C 및 D는 각각 독립적으로 하기 그룹 IV에 나열된 치환 또는 비치환된 모이어티에서 선택되는 유기 광전자 소자:

[그룹 IV]



상기 그룹 IV에서, \*은 상기 화학식 3a의 7각 코어와 공유되는 탄소를 의미한다.

**청구항 13**

제1항에 있어서,

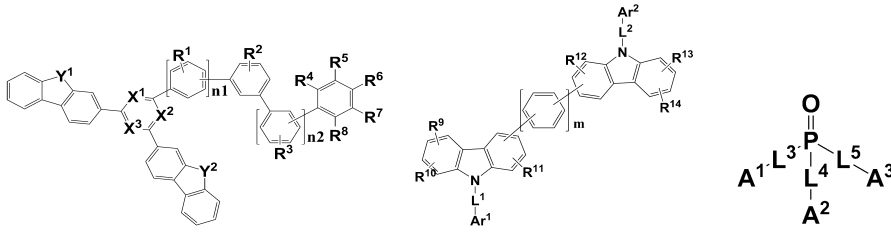
상기 전자수송층은 도펀트를 더 포함하는 유기 광전자 소자.

**청구항 14**

제1항에 있어서,

상기 양극과 상기 발광층 사이에 위치하는 정공 보조층을 더 포함하는 유기 광전자 소자.





- [0012]
- [0013] 상기 화학식 1에서,
- [0014]  $X^1$  내지  $X^3$ 은 각각 독립적으로 N 또는  $CR^a$ 이고,
- [0015]  $X^1$  내지  $X^3$  중 적어도 둘은 N이고,
- [0016]  $Y^1$  및  $Y^2$ 는 각각 독립적으로 O 또는 S이고,
- [0017]  $n_1$  및  $n_2$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,
- [0018]  $R^a$  및  $R^1$  내지  $R^8$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고;
- [0019] 상기 화학식 2에서,
- [0020]  $L^1$  및  $L^2$ 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기, 또는 이들의 조합이고,
- [0021]  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 또는 이들의 조합이고,
- [0022]  $R^9$  내지  $R^{14}$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,
- [0023]  $m$ 은 0 내지 2의 정수 중 하나이고;
- [0024] 상기 화학식 3에서,
- [0025]  $L^3$  내지  $L^5$ 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기, 또는 이들의 조합이고,
- [0026]  $A^1$  내지  $A^3$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,
- [0027]  $A^1$  내지  $A^3$ 은 각각 독립적으로 존재하거나 인접한 기끼리 연결되어 적어도 하나의 치환 또는 비치환된 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족의 단환식 또는 다환식 고리를 형성하고,
- [0028]  $A^1$  내지  $A^3$ 은 각각 독립적으로 존재할 때,  $A^1$  내지  $A^3$  중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 융합 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합 헤테로고리기이고,
- [0029] 상기 화학식 1 내지 3의 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C4 알킬기, C6 내지 C18 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다.
- [0030] 다른 구현예에 따르면 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를 제공한다.

**발명의 효과**

- [0031] 고효율 장수명 유기 광전자 소자를 구현할 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

[0032] 도 1 및 도 2는 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 도시한 단면도이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0033] 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

[0034] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C6 내지 C30 아릴실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C3 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 시아노기, 또는 이들의 조합으로 치환된 것을 의미한다.

[0035] 본 발명의 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C6 내지 C30 아릴실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C3 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C30 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C5 알킬기, C6 내지 C18 아릴기, 디벤조퓨란일기, 디벤조티오펜일기 또는 카바졸일기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 메틸기, 에틸기, 프로판일기, 부틸기, 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 트리페닐기, 플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨란일기 또는 디벤조티오펜일기로 치환된 것을 의미한다.

[0036] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

[0037] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"이란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다. 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.

[0038] 상기 알킬기는 C1 내지 C30인 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C20 알킬기 또는 C1 내지 C10 알킬기일 수도 있다. 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자가 포함되는 것을 의미하며, 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.

[0039] 상기 알킬기는 구체적인 예를 들어 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.

[0040] 본 명세서에서 "아릴(aryl)기"는 탄화수소 방향족 모이어티를 하나 이상 갖는 그룹을 총괄하는 개념으로서,

[0041] 탄화수소 방향족 모이어티의 모든 원소가 p-오비탈을 가지면서, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 형태, 예컨대 페닐기, 나프틸기 등을 포함하고,

[0042] 2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 시그마 결합을 통하여 연결된 형태, 예컨대 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기 등을 포함하며,

[0043] 2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 직접 또는 간접적으로 융합된 비방향족 융합 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, 플루오레닐기 등을 들 수 있다.

[0044] 아릴기는 모노시클릭, 폴리시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

[0045] 본 명세서에서 "헤테로고리기(heterocyclic group)"는 헤테로아릴기를 포함하는 상위 개념으로서, 아릴기, 시클로알킬기, 이들의 융합고리 또는 이들의 조합과 같은 고리 화합물 내에 탄소 (C) 대신 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개를 함유하는 것을 의미한다. 상기 헤테로고리기가 융합고리인 경우, 상기 헤테로고리기 전체 또는 각각의 고리마다 헤테로 원자를 한 개 이상 포함할 수 있다.

- [0046] 일 예로 "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개를 함유하는 것을 의미한다. 2 이상의 헤테로아릴기는 시그마 결합을 통하여 직접 연결되거나, 상기 헤테로아릴기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.
- [0047] 상기 헤테로고리기는 구체적인 예를 들어, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 카바졸일기, 디벤조퓨란일기, 디벤조티오펜일기 등을 포함할 수 있다.
- [0048] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및/또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기는, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 o-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸일기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기, 치환 또는 비치환된 페녹사진일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.
- [0049] 본 명세서에서, 정공 특성이란, 전기장(electric field)을 가했을 때 전자를 공여하여 정공을 형성할 수 있는 특성을 말하는 것으로, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입, 발광층에서 형성된 정공의 양극으로의 이동 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.
- [0050] 또한 전자 특성이란, 전기장을 가했을 때 전자를 받을 수 있는 특성을 말하는 것으로, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입, 발광층에서 형성된 전자의 음극으로의 이동 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.
- [0052] 이하 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자를 도 1 및 도 2를 예로 들어 설명한다.
- [0053] 유기 광전자 소자의 일 예인 유기 발광 소자를 설명하지만, 이에 한정되지 않고 다른 유기 광전자 소자에도 동일하게 적용될 수 있다.
- [0054] 도 1 및 도 2는 유기 발광 소자를 개략적으로 도시한 단면도이다.
- [0055] 도 1을 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자는, 서로 마주하는 음극(110)과 양극(120); 상기 음극(110)과 상기 양극(120) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.
- [0056] 상기 유기층(105)은 발광층(130), 및 상기 음극(110)과 상기 발광층(130) 사이에 위치하는 전자수송층(140)을 포함한다.
- [0057] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 발광층은 화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제1 유기 광전자 소자용 화합물, 및 화학식 2로 표현되는 적어도 1종의 제2 유기 광전자 소자용 화합물을 포함하고, 상기 전자수송층은 화학식 3으로 표현되는 적어도 1종의 제3 유기 광전자 소자용 화합물을 포함할 수 있다.
- [0058] 유기층 내에서 화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제1 유기 광전자 소자용 화합물, 및 화학식 2로 표현되는 적어도 1종의 제2 유기 광전자 소자용 화합물을 발광층에 포함하고, 동시에 화학식 3으로 표현되는 적어도 1종의 제3 유기 광전자 소자용 화합물을 전자수송층에 포함함으로써, 저구동 고효율 특성을 극대화할 수 있다.

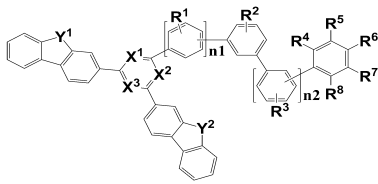
[0059] 구체적으로, 상기 제1 유기 광전자 소자용 화합물 및 상기 제2 유기 광전자 소자용 화합물이 함께 발광층에 사용되어 전하의 이동성 및 안정성을 높임으로써 발광 효율 및 수명 특성을 개선할 수 있고, 쌍극자 모멘트가 큰 제3 유기 광전자 소자용 화합물을 동시에 전자수송층에 적용함으로써 장수명, 고효율을 유지하면서 구동 전압을 특히 낮출 수 있다.

[0060] 상기 발광층(130)은 발광 기능을 갖는 유기층으로서, 도핑 시스템을 채용하는 경우, 호스트와 도펀트를 포함하고 있다. 이때, 호스트는, 주로 전자와 정공의 재결합을 촉진하고, 여기자를 발광층 내에 가두는 기능을 가지며, 도펀트는, 재결합으로 얻어진 여기자를 효율적으로 발광시키는 기능을 갖는다.

[0061] 발광층(130)은 적어도 두 종류의 호스트(host)와 도펀트(dopant)를 포함하며, 상기 호스트는 전자 특성이 상대적으로 강한 특성을 가지는 제1 유기 광전자 소자용 화합물과 정공 특성이 상대적으로 강한 특성을 가지는 제2 유기 광전자 소자용 화합물을 포함한다.

[0062] 상기 제1 유기 광전자 소자용 화합물은 하기 화학식 1로 표현될 수 있다.

[0063] [화학식 1]



[0064]

[0065] 상기 화학식 1에서,

[0066]  $X^1$  내지  $X^3$ 은 각각 독립적으로 N 또는  $CR^a$ 이고,

[0067]  $X^1$  내지  $X^3$  중 적어도 둘은 N이고,

[0068]  $Y^1$  및  $Y^2$ 는 각각 독립적으로 O 또는 S이고,

[0069]  $n_1$  및  $n_2$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

[0070]  $R^a$  및  $R^1$  내지  $R^8$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

[0071] 상기 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C30 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다.

[0072] 본 발명의 일 예에서 상기 화학식 1에서의 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C4 알킬기, C6 내지 C20 아릴기, 또는 C2 내지 C20 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미할 수 있고, 구체적으로 상기 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C4 알킬기, 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 디벤조퓨란일기, 또는 디벤조티오펜일기로 치환된 것을 의미할 수 있다.

[0073] 상기 제1 유기 광전자 소자용 화합물은 N 함유 6원환을 포함하는 ET 코어가 적어도 2개의 디벤조퓨란 또는 디벤조티오펜의 3번 위치에서 연결기 없이 직접 연결된 치환기를 포함함으로써 LUMO 에너지 밴드가 효과적으로 확장되고 분자 구조의 평면성이 증가되어, 전기장 인가 시 전자를 받기 쉬운 구조가 될 수 있고, 이에 따라 상기 유기 광전자 소자용 화합물을 적용한 유기 광전자 소자의 구동 전압을 낮출 수 있다. 또한 이러한 LUMO의 확장고리의 융합은 ET 코어의 전자에 대한 안정성을 증가시켜 소자 수명 향상에도 효과적이다.

[0074] 또한, 적어도 하나의 메타(meta) 결합된 아릴렌을 포함함으로써 입체 장애 특성으로 인하여 이웃한 분자와의 상호 작용을 억제하여 결정화를 줄일 수 있고 이에 따라 상기 유기 광전자 소자용 화합물을 적용한 유기 광전자 소자의 효율 및 수명 특성을 개선할 수 있다.

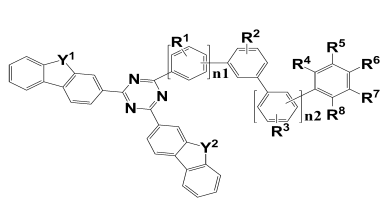
[0075] 뿐만 아니라, 메타(meta) 결합된 아릴렌과 같은 격임 부분이 포함되는 경우, 화합물의 유리전이온도(Tg)가 높아져 소자에 적용 시 공정 중 화합물의 안정성을 높이고 열화를 방지할 수 있다.

[0076] 또한, 본 발명의 일 실시예에서, 화학식 1의 중심 6각 고리에 연결된 페닐기는 적어도 3개 이상인 것이 보다 우

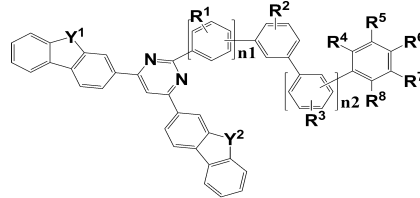
수한 효과를 나타낼 수 있다. 여기서 3개의 페닐기는 적어도 하나의 메타 결합된 것이 바람직하며, 직쇄형태로 나열된 것일 수도 있으며, 분지쇄 형태로 나열된 것일 수도 있다.

[0077] 본 발명의 일 실시예에서, 상기  $X^1$  내지  $X^3$ 으로 이루어진 ET 코어는 피리미딘 또는 트리아진일 수 있고, 예컨대 하기 화학식 1-I, 화학식 1-II 또는 화학식 1-III로 표현될 수 있다. 가장 구체적으로 하기 화학식 1-I 또는 화학식 1-II로 표현될 수 있다.

[0078] [화학식 1-I]

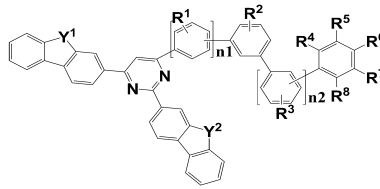


[화학식 1-II]



[0079]

[0080] [화학식 1-III]



[0081]

[0082] 상기 화학식 1-I, 화학식 1-II 및 화학식 1-III에서,  $Y^1$  및  $Y^2$ ,  $n1$  및  $n2$ , 및  $R^1$  내지  $R^8$ 은 전술한 바와 같다.

[0083] 본 발명의 일 실시예에서, 상기  $R^1$  내지  $R^8$ 은 각각 독립적으로 수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴 기일 수 있고, 구체적으로 수소, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 o-터페닐기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기일 수 있으며, 더욱 구체적으로 수소, 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 또는 나프틸기일 수 있다.

[0084] 예컨대,  $R^1$  내지  $R^3$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 페닐기, 바이페닐기 또는 나프틸기일 수 있다.

[0085] 또한, 본 발명의 일예에서,  $R^4$  내지  $R^8$  중 어느 하나는 중수소, 페닐기, 바이페닐기 또는 터페닐기이고 나머지는 수소일 수 있다.

[0086] 또한, 본 발명의 일예에서,  $R^5$  및  $R^7$  중 어느 하나 또는  $R^5$  및  $R^7$  모두 중수소, 수소, 페닐기, 바이페닐기 또는 터페닐기이고  $R^4$ ,  $R^6$  및  $R^8$ 은 모두 수소일 수 있다.

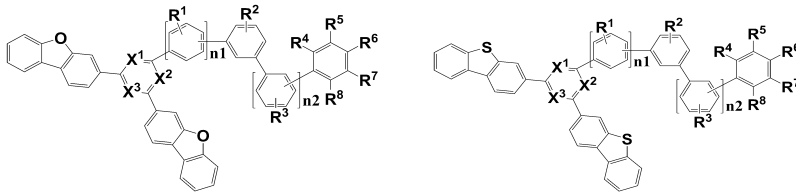
[0087] 예컨대,  $R^1$ 은 수소, 또는 페닐기일 수 있고,  $R^2$  및  $R^3$ 은 모두 수소이고,  $R^4$  내지  $R^8$ 은 모두 수소이거나  $R^4$  내지  $R^8$  중 어느 하나가 페닐기, 바이페닐기, 또는 터페닐기이고 나머지는 수소일 수 있다.

[0088] 본 발명의 일예에서,  $R^1$ 은 페닐기일 수 있다.

[0089] 상기 화학식 1은 예컨대 하기 화학식 1A, 화학식 1B 또는 화학식 1C로 표현될 수 있다.

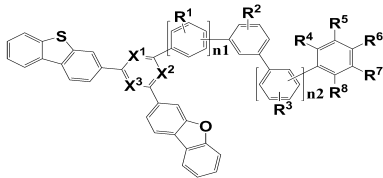
[0090] [화학식 1A]

[화학식 1B]



[0091]

[0092] [화학식 1C]



[0093]

[0094] 상기 화학식 1A, 화학식 1B 및 화학식 1C에서, n1 및 n2, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>8</sup>은 전술한 바와 같고,

[0095] X<sup>1</sup> 내지 X<sup>3</sup>은 각각 독립적으로 N 또는 CH이고, X<sup>1</sup> 내지 X<sup>3</sup> 중 적어도 둘은 N일 수 있다.

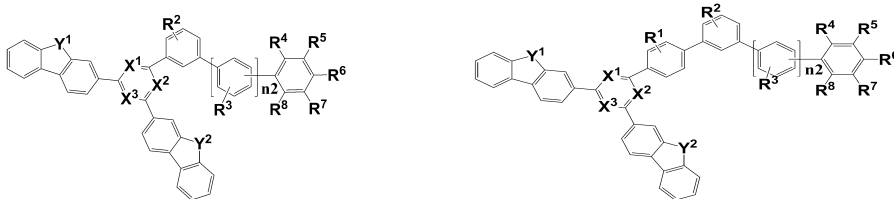
[0096] 상기 화학식 1A 내지 1C와 같이 N 함유 6원환에 디벤조퓨란일기 및/또는 디벤조티오펜일기의 3번 위치에서 연결기 없이 직접 연결된 치환기를 포함하는 경우, LUMO phore를 한 평면에 위치시켜 확장 효과를 극대화할 수 있게 되므로, 구동 감소와 수명 증가의 측면에서 최적의 효과를 얻을 수 있다. N 함유 6원환과 디벤조퓨란 및/또는 디벤조티오펜이 3번 이외에 다른 위치로 연결되거나 또는 N 함유 6원환과 디벤조퓨란 및/또는 디벤조티오펜 사이에 아릴렌 링커 등이 포함되는 경우에는 이러한 LUMO 확장을 통한 구동 감소 및 고리의 융합을 통한 안정성 증가 효과가 줄어들게 된다.

[0097] 본 발명의 일 실시예에서 상기 화학식 1A, 또는 상기 화학식 1B로 표현될 수 있고, 예컨대 화학식 1A로 표현될 수 있다.

[0098] 본 발명의 일 실시예에서 상기 n1 및 n2는 모두 0이거나, n1=1, n2=0; 또는 n1=0, n2=1일 수 있고, 상기 화학식 1은 메타(meta) 결합된 아릴렌을 포함하는 구조로서, 예컨대 하기 화학식 1-1 또는 화학식 1-2로 표현될 수 있으며, 가장 구체적으로 하기 화학식 1-1로 표현될 수 있다.

[0099] [화학식 1-1]

[화학식 1-2]



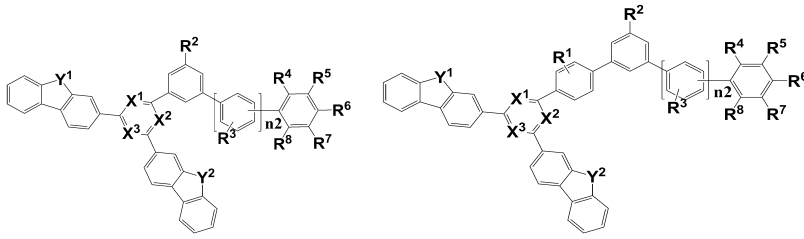
[0100]

[0101] 상기 화학식 1-1 내지 1-2에서, X<sup>1</sup> 내지 X<sup>3</sup>, Y<sup>1</sup> 및 Y<sup>2</sup>, n2, 및 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>8</sup>은 전술한 바와 같다.

[0102] 특히, 상기 화학식 1-1 및 1-2의 R<sup>2</sup>는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리일 수 있고, 더욱 구체적으로 R<sup>2</sup>가 메타 위치로 치환되어 하기 화학식 1-1a 또는 화학식 1-2a와 같이 표현될 수 있다. 이 때 R<sup>2</sup>가 치환된 페닐렌은 꺾임 터페닐(kinked terphenyl)기를 포함할 수 있다.

[0103] [화학식 1-1a]

[화학식 1-2a]

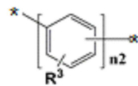


[0104]

[0105] 본 발명의 일 실시예에서, 상기 R<sup>2</sup>은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C4 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기일 수 있고, 예를 들어, 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 나프틸기 일 수 있으며, 가장 구체적으로 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다.

[0106] 즉, R<sup>2</sup>에 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기가 치환된 상기 꺾임 터페닐(kinked terphenyl)기를 포함하는 경우, 매우 효과적으로 유리전이온도(Tg)를 높일 수 있고, 저분자량의 높은 유리전이온도(Tg) 화합물을 설계 및 이를 통한 열적 특성을 개선 및 안정성 확보 등의 효과를 얻을 수 있다.

[0107] 유리전이온도(Tg)는 화합물 및 이를 적용한 소자의 열안정성과 관련될 수 있다. 즉 높은 유리전이온도(Tg)를 가지는 유기 광전자 소자용 화합물은, 유기발광소자에 박막 형태로 적용되었을 때, 상기 유기 광전자 소자용 화합물을 증착한 후에 이루어지는 후속 공정, 예컨대 봉지(encapsulation) 공정에서 온도에 의해 열화되는 것이 방지되어 유기 화합물 및 소자의 수명 특성을 확보할 수 있다.

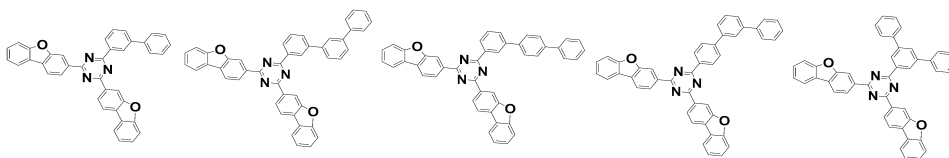


[0108] 한편, 상기 화학식 1-1 및 1-2에서, \* 로 표시되는 연결기는 메타(meta) 결합 또는 파라(para)결합 일 수 있다.

[0109] 상기 화학식 1로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물은 예컨대 하기 그룹 1에 나열된 화합물에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

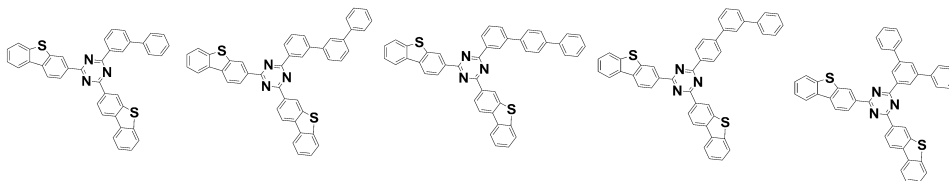
[0110] [그룹 1]

[0111] [A-1][A-2][A-3][A-4][A-5]



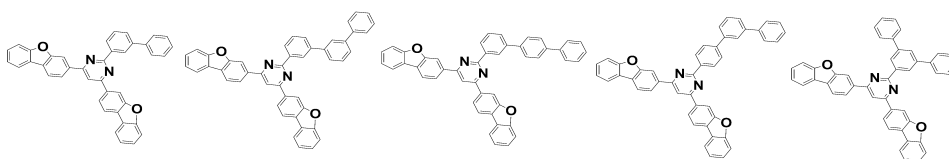
[0112]

[0113] [A-6][A-7][A-8][A-9][A-10]



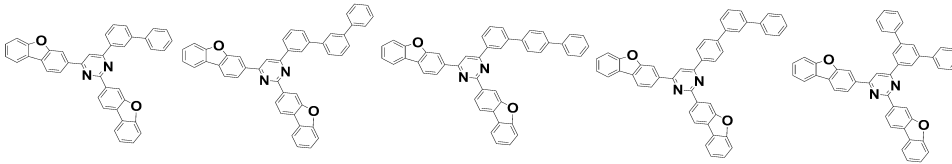
[0114]

[0115] [A-11][A-12][A-13][A-14][A-15]



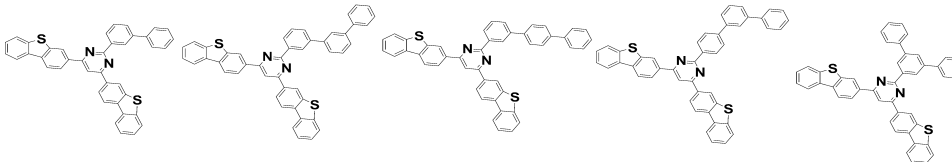
[0116]

[0117] [A-16][A-17][A-18][A-19][A-20]



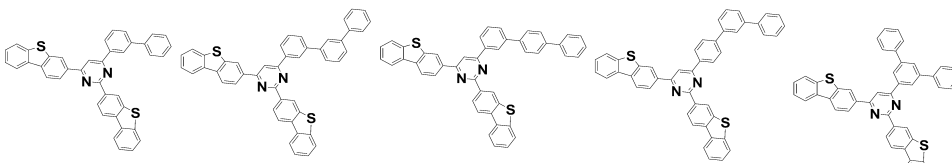
[0118]

[0119] [A-21][A-22][A-23][A-24][A-25]



[0120]

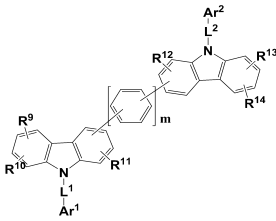
[0121] [A-26][A-27][A-28][A-29][A-30]



[0122]

[0123] 상기 제2 유기 광전자 소자용 화합물은 하기 화학식 2로 표현될 수 있다.

[0124] [화학식 2]



[0125]

[0126] 상기 화학식 2에서,  $L^1$  및  $L^2$ 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기, 또는 이들의 조합이고,

[0127]  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 또는 이들의 조합이고,

[0128]  $R^9$  내지  $R^{14}$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리, 또는 이들의 조합이고,

[0129]  $m$ 은 0 내지 2의 정수 중 하나이고;

[0130] 상기 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C4 알킬기, C6 내지 C18 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다.

[0131] 본 발명의 일 예에서 상기 화학식 2에서의 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C4 알킬기, C6 내지 C20 아릴기, 또는 C2 내지 C20 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미할 수 있고, 구체적으로 상기 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C4 알킬기, 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 플루오레닐기, 트리페닐렌기, 카바졸일기, 디벤조퓨란일기, 또는 디벤조티오펜일기로 치환된 것을 의미할 수 있다.

[0132] 본 발명의 일 실시예에서, 상기 화학식 2의  $L^1$  및  $L^2$ 는 각각 독립적으로 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C18 아릴렌기일 수 있다.

[0133] 본 발명의 일 실시예에서, 상기 화학식 2의  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는

는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 또는 이들의 조합일 수 있다.

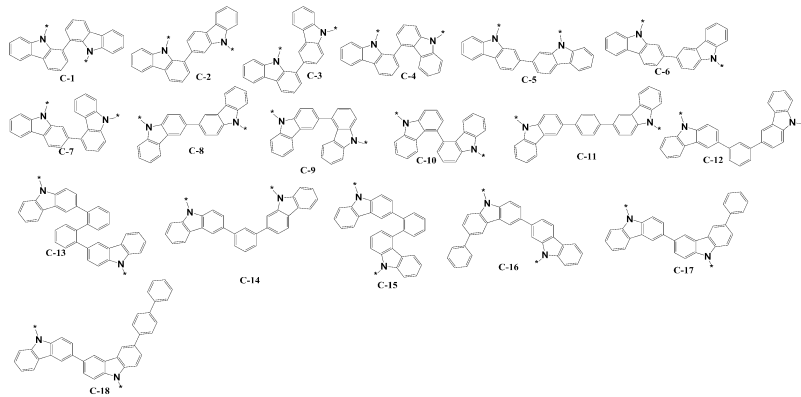
[0134] 본 발명의 일 실시예에서, 상기 화학식 2의 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 또는 이들의 조합일 수 있다.

[0135] 본 발명의 일 실시예에서, 상기 화학식 2의 R<sup>9</sup> 내지 R<sup>14</sup>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기일 수 있다.

[0136] 본 발명의 일 실시예에서, 상기 화학식 2의 m은 0 또는 1일 수 있다.

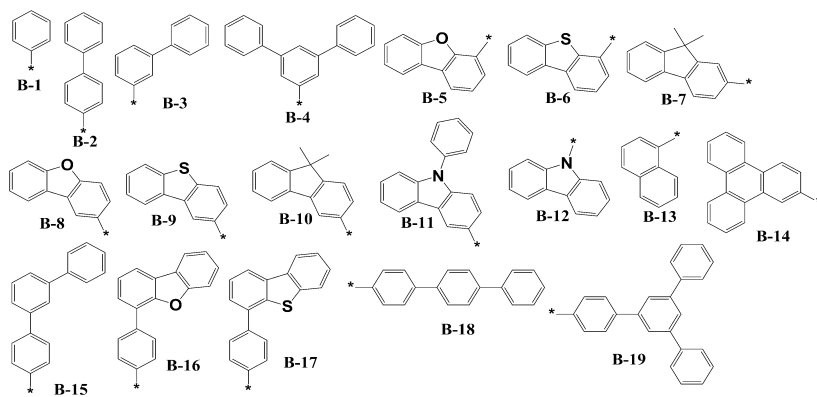
[0137] 본 발명의 구체적인 일 실시예에서, 상기 화학식 2는 하기 그룹 I에 나열된 구조 중 하나이고, 상기 \*-L<sup>1</sup>-Ar<sup>1</sup> 및 \*-L<sup>2</sup>-Ar<sup>2</sup>는 하기 그룹 II에 나열된 치환기 중 하나일 수 있다.

[0138] [그룹 I]



[0139]

[0140] [그룹 II]



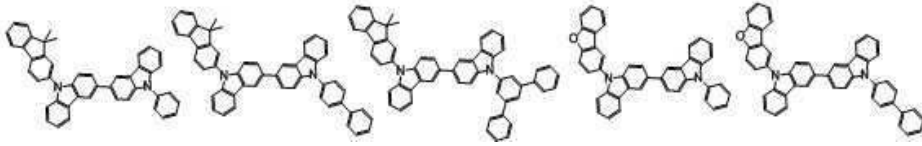
[0141]

[0142] 상기 그룹 I 및 II에서, \*은 연결 지점이다.

[0143] 상기 화학식 2로 표시되는 유기 광전자 소자용 화합물은 예컨대 하기 그룹 2에 나열된 화합물에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

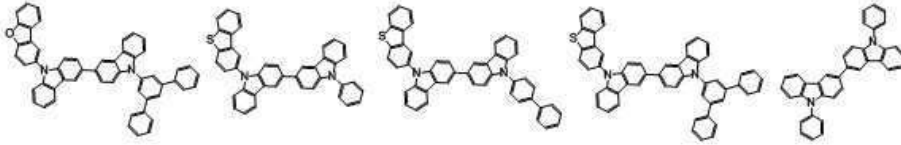
[0144] [그룹 2]

[0145] [B-1] [B-2] [B-3] [B-4] [B-5]



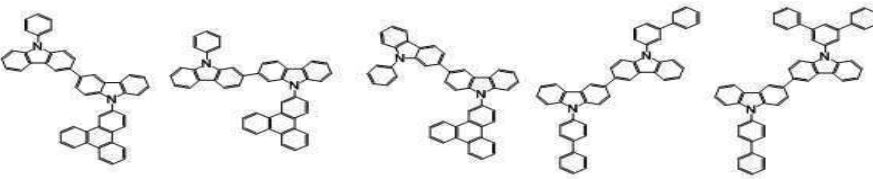
[0146]

[0147] [B-6] [B-7] [B-8] [B-9] [B-10]



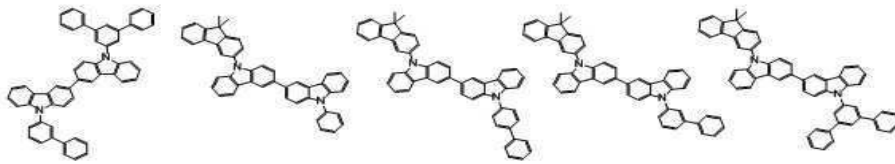
[0148]

[0149] [B-11] [B-12] [B-13] [B-14] [B-15]



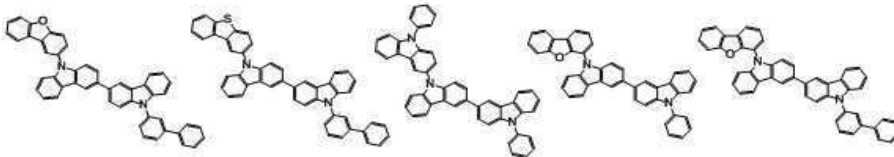
[0150]

[0151] [B-16] [B-17] [B-18] [B-19] [B-20]



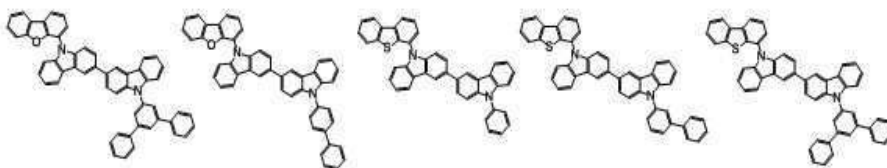
[0152]

[0153] [B-21] [B-22] [B-23] [B-24] [B-25]



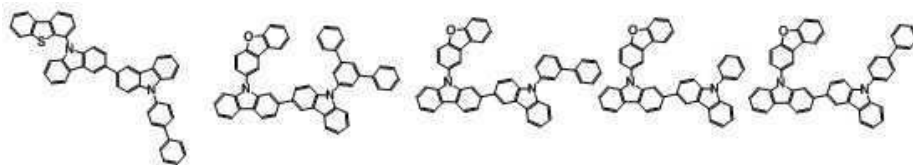
[0154]

[0155] [B-26] [B-27] [B-28] [B-29] [B-30]



[0156]

[0157] [B-31] [B-32] [B-33] [B-34] [B-35]



[0158]

[0159]

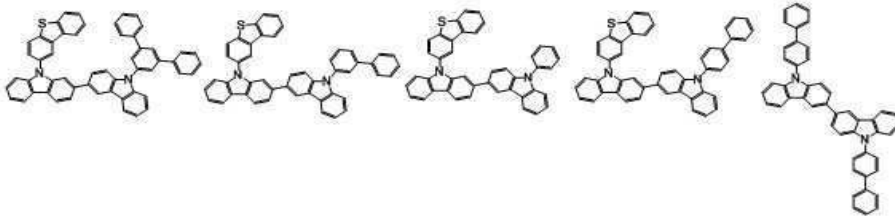
[B-36]

[B-37]

[B-38]

[B-39]

[B-40]



[0160]

[0161]

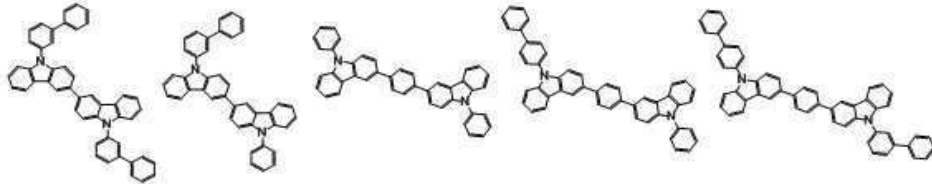
[B-41]

[B-42]

[B-43]

[B-44]

[B-45]



[0162]

[0163]

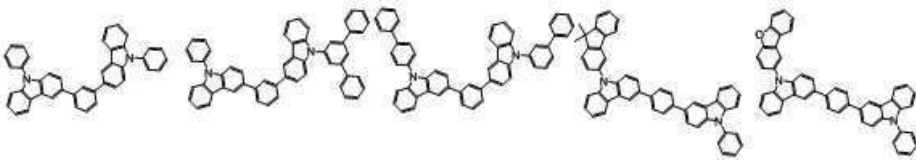
[B-46]

[B-47]

[B-48]

[B-49]

[B-50]



[0164]

[0165]

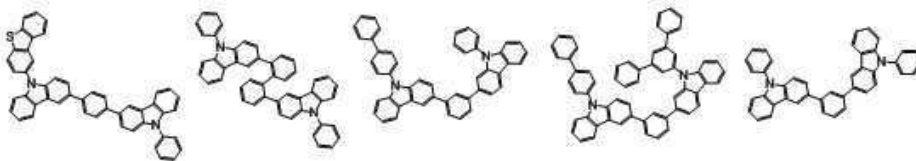
[B-51]

[B-52]

[B-53]

[B-54]

[B-55]



[0166]

[0167]

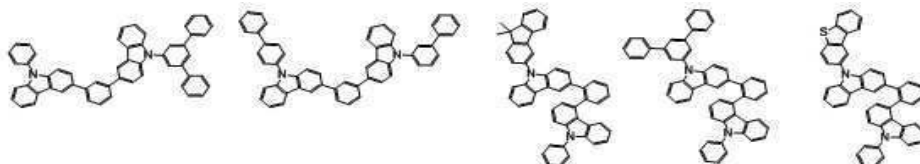
[B-56]

[B-57]

[B-58]

[B-59]

[B-60]



[0168]

[0169]

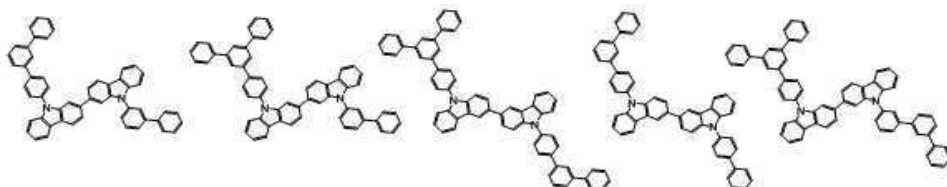
[B-61]

[B-62]

[B-63]

[B-64]

[B-65]



[0170]

[0171]

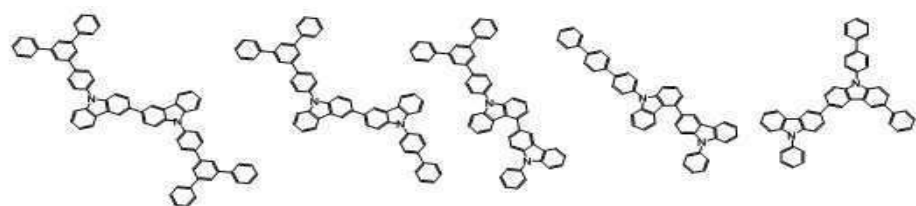
[B-66]

[B-67]

[B-68]

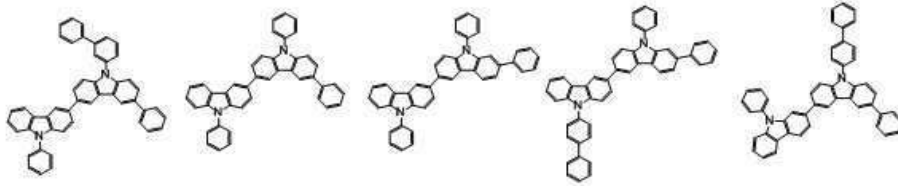
[B-69]

[B-70]



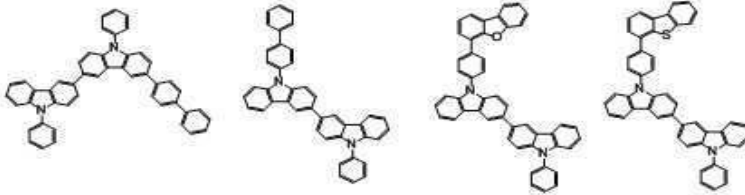
[0172]

[0173] [B-71] [B-72] [B-73] [B-74] [B-75]



[0174]

[0175] [B-76] [B-77] [B-78] [B-79]



[0176]

[0177] 전술한 제1 유기 광전자 소자용 화합물과 제2 유기 광전자 소자용 화합물은 다양한 조합에 의해 다양한 조성물로 준비될 수 있다.

[0178] 일 예로 본 발명의 조성물이 발광층(130)에서 호스트로 사용되는 경우, 가장 구체적으로는 그린 인광호스트일 수 있고, 이들의 조합 비율은 사용된 도판트의 종류나 도판트의 성향에 따라 달라질 수 있으며, 예컨대 약 1:9 내지 9:1의 중량비로 포함될 수 있고, 구체적으로 1:9 내지 8:2, 1:9 내지 7:3, 1:9 내지 6:4, 1:9 내지 5:5의 범위로 포함될 수 있으며, 2:8 내지 8:2, 2:8 내지 7:3, 2:8 내지 6:4, 2:8 내지 5:5의 범위로 포함될 수 있다.

[0179] 구체적으로, 제1 유기 광전자 소자용 화합물 및 제2 유기 광전자 소자용 화합물은 1:9 내지 5:5, 2:8 내지 5:5, 3:7 내지 5:5의 중량비 범위로 포함될 수 있으며, 예컨대 제1 유기 광전자 소자용 화합물 및 제2 유기 광전자 소자용 화합물이 5:5의 범위로 포함될 수 있다. 상기 범위로 포함됨으로써 효율과 수명을 동시에 개선할 수 있다.

[0180] 상기 범위로 포함됨으로써 바이폴라 특성이 더욱 효과적으로 구현되어 효율과 수명을 동시에 개선할 수 있다.

[0181] 본 발명의 일 실시예에 따른 조성물은 상기 화학식 1-I, 또는 화학식 1-II로 표현되는 화합물을 제1 호스트로서 포함하고, 상기 그룹 I의 화학식 C-8 또는 화학식 C-17로 표현되는 화합물을 제2 호스트로서 포함할 수 있다.

[0182] 또한, 상기 화학식 1A, 또는 화학식 1B로 표현되는 제1 호스트와 상기 그룹 I의 화학식 C-8 또는 화학식 C-17로 표현되는 제2 호스트를 포함할 수 있다.

[0183] 또한, 상기 화학식 1-1로 표현되는 제1 호스트와 상기 그룹 I의 화학식 C-8 또는 화학식 C-17로 표현되는 제2 호스트를 포함할 수 있다.

[0184] 예컨대, 상기 화학식 2의  $*-L^1-Ar^1$ , 및  $*-L^2-Ar^2$ 은 상기 그룹 II의 B-1, B-2, B-3, 및 B-16에서 선택될 수 있다.

[0185] 발광층(130)은 도펀트를 더 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 상기 호스트에 미량 혼합되어 발광을 일으키는 물질로, 일반적으로 삼중항 상태 이상으로 여기시키는 다중항 여기(multiple excitation)에 의해 발광하는 금속 착체(metal complex)와 같은 물질이 사용될 수 있다. 상기 도펀트는 예컨대 무기, 유기, 유무기 화합물일 수 있으며, 1종 또는 2종 이상 포함될 수 있다.

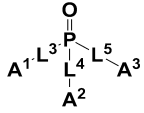
[0186] 상기 도펀트는 적색, 녹색 또는 청색의 도펀트일 수 있으며, 예컨대 인광 도펀트일 수 있다. 상기 인광 도펀트의 예로는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합을 포함하는 유기 금속화합물을 들 수 있다. 상기 인광 도펀트는 예컨대 하기 화학식 Z로 표현되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0187] [화학식 Z]

[0188]  $L_2MX$

- [0189] 상기 화학식 Z에서, M은 금속이고, L 및 X는 서로 같거나 다르며 M과 착화합물을 형성하는 리간드이다.
- [0190] 상기 M은 예컨대 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합일 수 있고, 상기 L 및 X는 예컨대 바이덴테이트 리간드일 수 있다.
- [0191] 상기 전자수송층(140)은, 음극(110)으로부터 발광층(130)으로 전자 전달을 용이하게 하기 위한 층으로, 하기 화학식 3으로 표현될 수 있다.

[0192] [화학식 3]



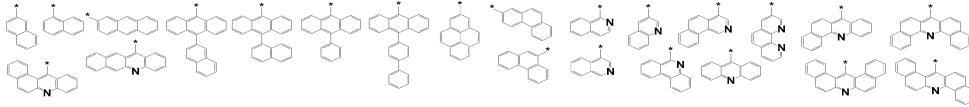
- [0193]
- [0194] 상기 화학식 3에서,
- [0195] L<sup>3</sup> 내지 L<sup>5</sup>는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기, 또는 이들의 조합이고,
- [0196] A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,
- [0197] A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup>은 각각 독립적으로 존재하거나 인접한 기끼리 연결되어 적어도 하나의 치환 또는 비치환된 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족의 단환식 또는 다환식 고리를 형성할 수 있고,
- [0198] A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup>이 각각 독립적으로 존재할 때, A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup> 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 융합 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합 헤테로고리기일 수 있다.
- [0199] 본 발명 중 화학식 3에서 A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup>이 각각 독립적으로 존재할 때, A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup> 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 융합 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합 헤테로고리기를 가짐으로써, 비융합 형태의 치환기를 가지는 구조 대비 인 원자의 전자 특성을 융합된 치환기 영역부분까지 확장시켜 전자 주입 및 이동특성을 효과적으로 개선할 수 있다.

[0200] 상기 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C4 알킬기, C6 내지 C18 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다.

[0201] 본 발명의 일 예에서 상기 화학식 3에서의 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C4 알킬기, C6 내지 C20 아릴기, 또는 C2 내지 C20 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미할 수 있고, 구체적으로 상기 "치환"이란, 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C4 알킬기, 페닐기, 바이페닐기, 나프틸기, 터페닐기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 플루오레닐기, 트리페닐렌기, 플루오란텐일기, 카바졸일기, 디벤조퓨란일기, 디벤조티오펜일기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 아자페난트레닐기, 또는 페난트롤리닐기로 치환된 것을 의미할 수 있다.

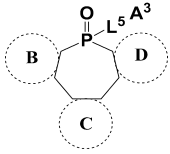
[0202] 본 발명의 일예에서, A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup>이 각각 독립적으로 존재할 때, A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup> 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 융합 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합 헤테로고리기일 수 있고, 상기 치환 또는 비치환된 융합 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합 헤테로고리기는 하기 그룹 III에 나열된 치환기에서 선택될 수 있다.

[0203] [그룹 III]



- [0204]
- [0205] 또한, 본 발명의 일예에서, A<sup>1</sup> 내지 A<sup>3</sup> 중 인접한 기끼리 연결되어 적어도 하나의 치환 또는 비치환된 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족의 단환식 또는 다환식 고리를 형성할 수 있고, 예컨대 하기와 같은 치환 또는 비치환된 방향족의 단환식 7각 고리를 형성할 수 있다.

[0206] [화학식 3a]

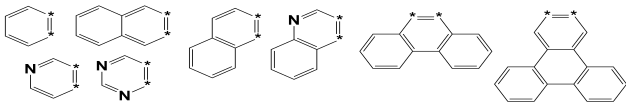


[0207]

[0208] 상기 화학식 3a에서,  $L^5$  및  $A^3$ 은 전술한 바와 같고, B, C 및 D는 전술한  $L^3$ ,  $L^4$ ,  $A^1$  및  $A^2$ 로부터 형성된 것으로서, 각각 7각 코어와 2개의 탄소를 공유하는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리일 수 있다.

[0209] 본 발명의 일 예에서, 상기 B, C 및 D는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 페난트렌, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌, 치환 또는 비치환된 피리딘, 치환 또는 비치환된 피리미딘, 치환 또는 비치환된 퀴놀린, 또는 치환 또는 비치환된 이소퀴놀린일 수 있고, 구체적인 일 예에서 하기 그룹 IV에 나열된 치환 또는 비치환된 모이어티에서 선택될 수 있다.

[0210] [그룹 IV]



[0211]

[0212] 상기 그룹 IV에서, \*은 상기 화학식 3a의 7각 코어와 공유되는 탄소를 의미한다.

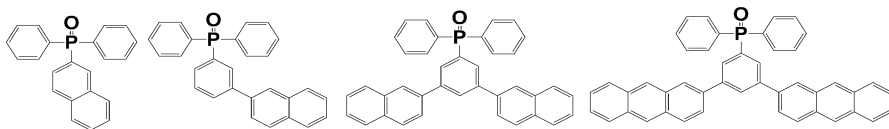
[0213] 본 발명의 구체적인 일 예에서, 상기 B, C 및 D는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐, 또는 치환 또는 비치환된 나프틸일 수 있다.

[0214] 본 발명의 일 예에서,  $L^3$  내지  $L^5$ 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 피리딜렌기일 수 있다.

[0215] 상기 화학식 3으로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물은 예컨대 하기 그룹 3에 나열된 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

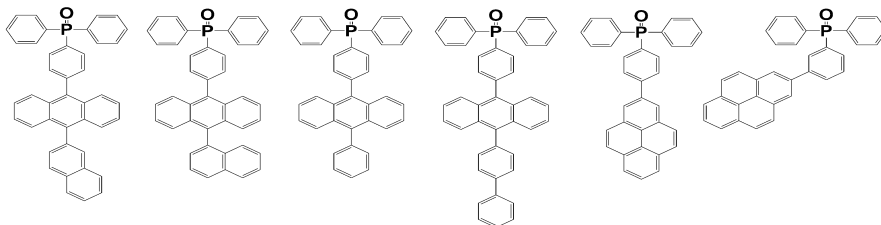
[0216] [그룹 3]

[0217] [E-1] [E-2] [E-3] [E-4]



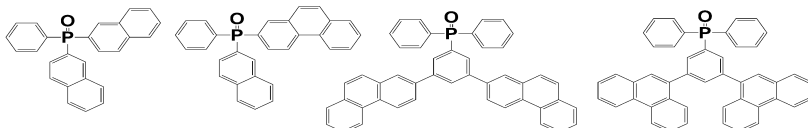
[0218]

[0219] [E-5] [E-6] [E-7] [E-8] [E-9] [E-10]



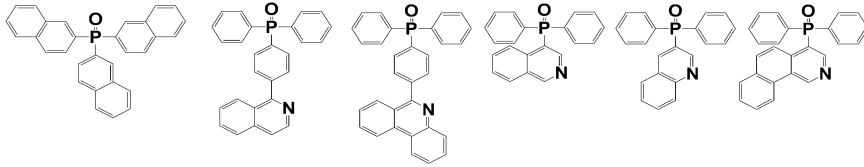
[0220]

[0221] [E-11] [E-12] [E-13] [E-14]



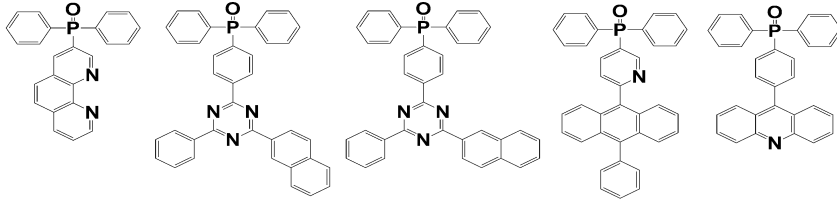
[0222]

[0223] [E-15] [E-16] [E-17] [E-18] [E-19] [E-20]



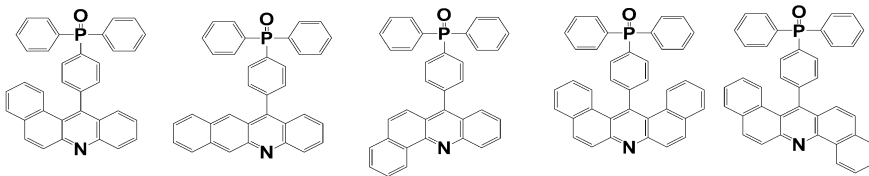
[0224]

[0225] [E-21] [E-22] [E-23] [E-24] [E-25]



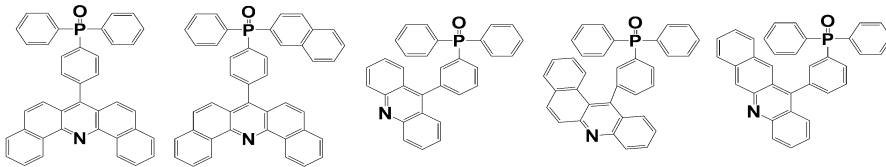
[0226]

[0227] [E-26] [E-27] [E-28] [E-29] [E-30]



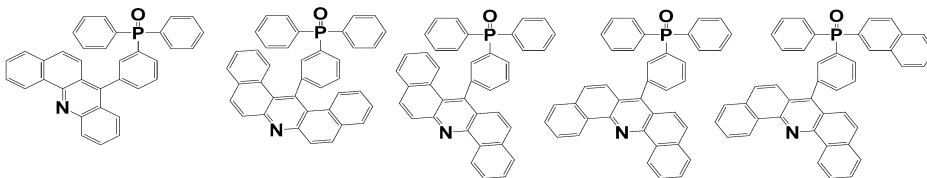
[0228]

[0229] [E-31] [E-32] [E-33] [E-34] [E-35]



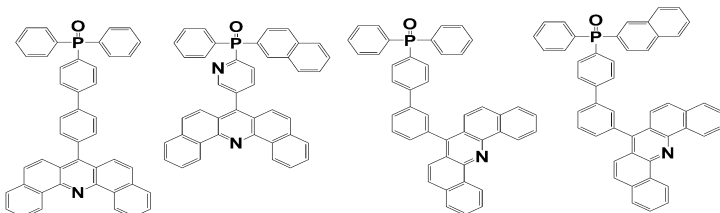
[0230]

[0231] [E-36] [E-37] [E-38] [E-39] [E-40]



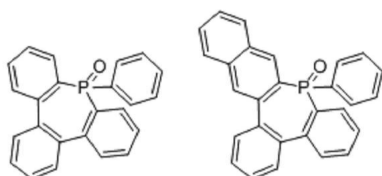
[0232]

[0233] [E-41] [E-42] [E-43] [E-44]



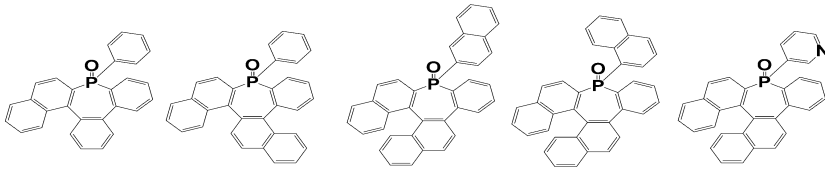
[0234]

[0235] [E-45] [E-46]



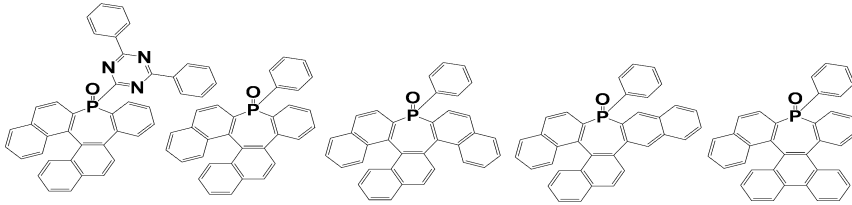
[0236]

[0237] [E-47] [E-48] [E-49] [E-50] [E-51]



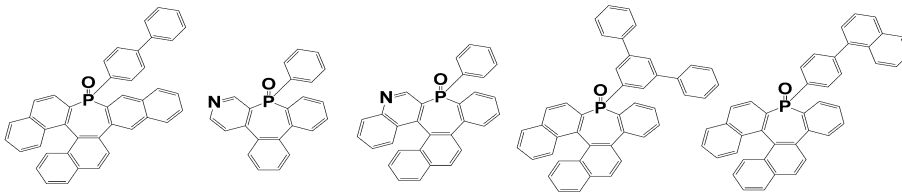
[0238]

[0239] [E-52] [E-53] [E-54] [E-55] [E-56]



[0240]

[0241] [E-57] [E-58] [E-59] [E-60] [E-61]



[0242]

[0243] 또한, 전자수송층은 전술한 포스핀 옥사이드 화합물이 단독으로 사용되거나 또는 도펀트와 혼합하여 사용될 수 있다.

[0244] 상기 도펀트는 음극으로부터 전자 추출을 용이하게 하기 위해 미량 사용되는 것으로서 n-형 도펀트일 수 있다. 상기 도펀트는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토금속, 알칼리 토금속 화합물일 수 있다.

[0245] 예컨대, 하기 화학식 c로 표시되는 유기 금속 화합물일 수 있다.

[0246] [화학식 c]



[0248] 상기 화학식 c에서,

[0249] Y는 C, N, O 및 S에서 선택되는 어느 하나가 상기 M에 직접 결합되어 단일결합을 이루는 부분과, C, N, O 및 S에서 선택되는 어느 하나가 상기 M에 배위결합을 이루는 부분을 포함하며, 상기 단일결합과 배위결합에 의해 킬레이트된 리간드이고,

[0250] 상기 M은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 알루미늄(Al) 또는 붕소(B)원자이고, 상기 OA는 상기 M과 단일결합 또는 배위결합 가능한 1가의 리간드로서,

[0251] 상기 O는 산소이며,

[0252] A는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기 및 치환 또는 비치환된 이중 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택되는 어느 하나이고,

[0253] 상기 M이 알칼리 금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는 m=1, n=0이고,

[0254] 상기 M이 알칼리 토금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는 m=1, n=1이거나, 또는 m=2, n=0이고,

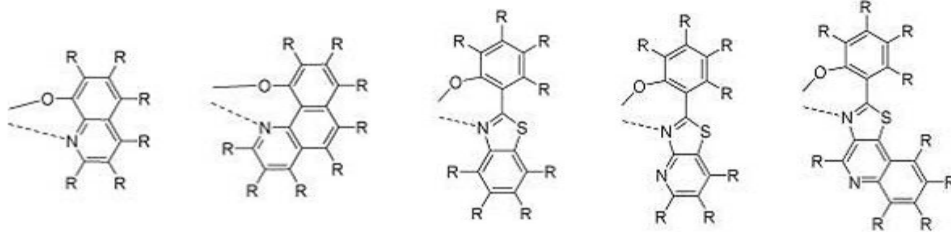
[0255] 상기 M이 붕소 또는 알루미늄인 경우에는 m = 1 내지 3중 어느 하나이며, n은 0 내지 2 중 어느 하나로서 m+n=3을 만족하며;

[0256] 상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록실기, 니트로기, 알킬기, 알콕

시기, 알킬아미노기, 아릴아미노기, 헤테로 아릴아미노기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 아릴옥시기, 아릴기, 헤테로아릴기, 게르마늄, 인 및 보론으로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

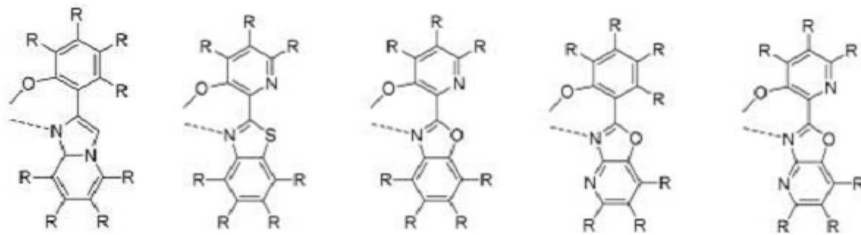
[0257] 본 발명에서 Y는 각각 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 하기 화학식 c1 내지 화학식 c39 로부터 선택되는 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정된 것은 아니다.

[0258] [화학식 c1] [화학식 c2] [화학식 c3][화학식 c4] [화학식 c5]



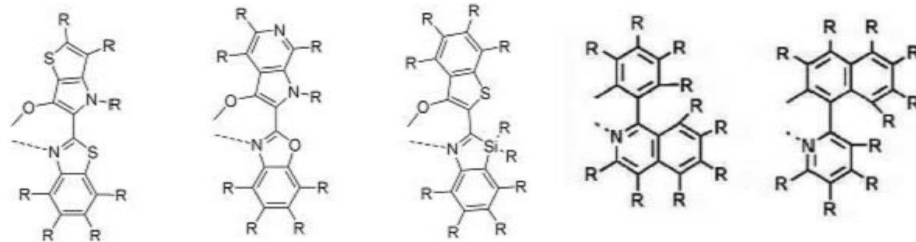
[0259]

[0260] [화학식 c6][화학식 c7] [화학식 c8] [화학식 c9] [화학식 c10]



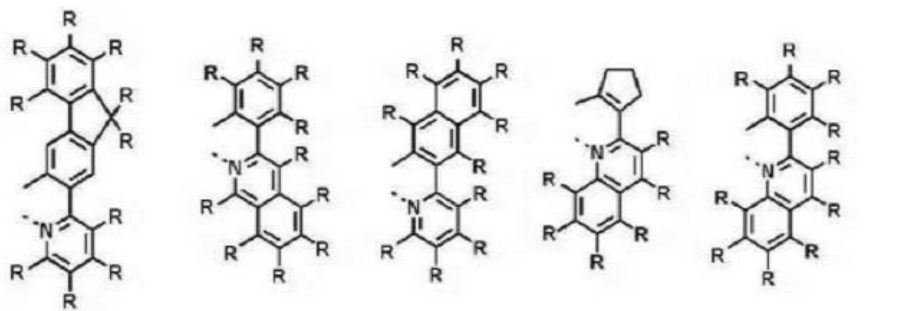
[0261]

[0262] [화학식 c11] [화학식 c12] [화학식 c13][화학식 c14] [화학식 c15]



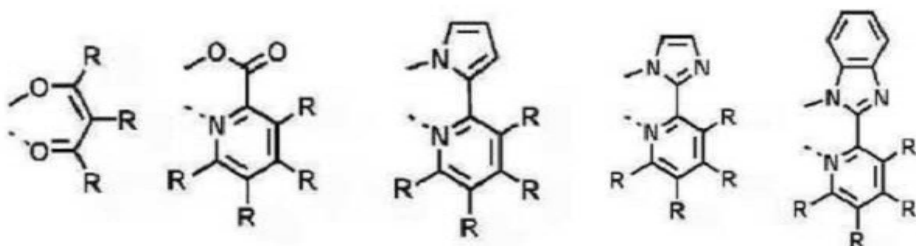
[0263]

[0264] [화학식 c16][화학식 c17] [화학식 c18] [화학식 c19] [화학식 c20]



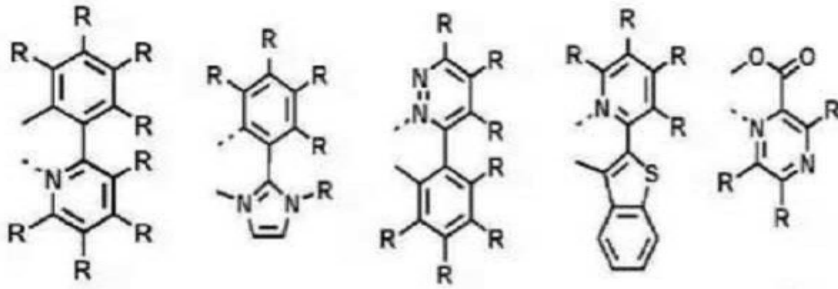
[0265]

[0266] [화학식 c21] [화학식 c22] [화학식 c23][화학식 c24] [화학식 c25]

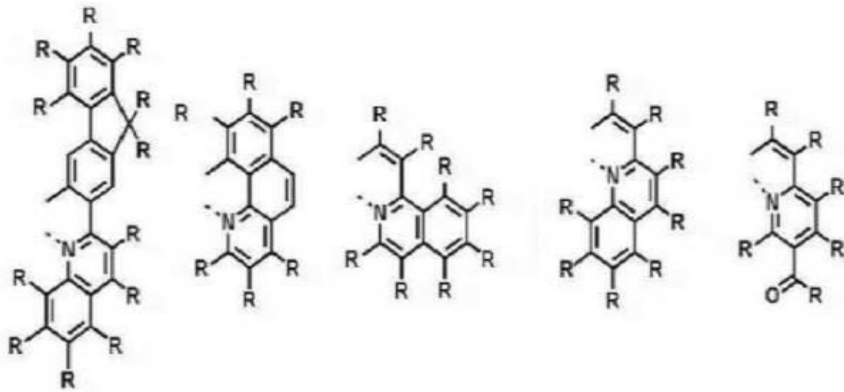


[0267]

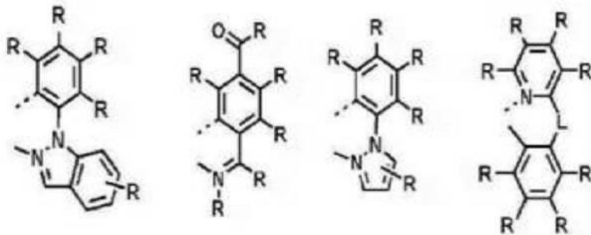
[0268] [화학식 c26][화학식 c27] [화학식 c28] [화학식 c29] [화학식 c30]



[0269]  
[0270] [화학식 c31] [화학식 c32] [화학식 c33][화학식 c34] [화학식 c35]



[0271]  
[0272] [화학식 c36][화학식 c37] [화학식 c38] [화학식 c39]



[0273]  
[0274] 상기 화학식 c1 내지 화학식 c39에서,

[0275] R은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아미노기 및 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴실릴기 중에서 선택되고, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로고리 또는 융합고리를 형성할 수 있다.

[0276] 또한, 도 2를 참고하면, 상기 유기층(105)은 양극(120)과 발광층(130) 사이에 정공 보조층(150)을 더 포함할 수 있다.

[0277] 상기 정공 보조층(150)은 정공주입층, 정공수송층, 및 전자차단층에서 선택된 적어도 하나일 수 있다.

[0278] 상기 양극(110)은 예컨대 정공 주입이 원활하도록 일 함수가 높은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 양극(110)은 예컨대 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO와 Al 또는 SnO2와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리(3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜)(polyethylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 도전성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0279] 상기 음극(120)은 예컨대 전자 주입이 원활하도록 일 함수가 낮은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 음극(120)은 예컨대 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al, LiO<sub>2</sub>/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF<sub>2</sub>/Ca와 같은 다층 구조 물질을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0280] 상기 유기 광전자 소자는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이면 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 및 유기 감광체 드럼 등을 들 수 있다.

[0281] 유기 발광 소자(100, 200)는 기판 위에 양극 또는 음극을 형성한 후, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금 및 이온도금과 같은 건식성막법; 또는 스핀코팅(spin coating), 침지법(dipping), 유동코팅법(flow coating)과 같은 습식성막법 등으로 유기층을 형성한 후, 그 위에 음극 또는 양극을 형성하여 제조할 수 있다.

[0282] 전술한 유기 발광 소자는 유기 발광 표시 장치에 적용될 수 있다.

[0284] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

[0285] 이하, 실시예 및 합성에에서 사용된 출발물질 및 반응물질은 특별한 언급이 없는 한, Sigma-Aldrich 社 또는 TCI 社에서 구입하였거나, 공지된 방법을 통해 합성하였다.

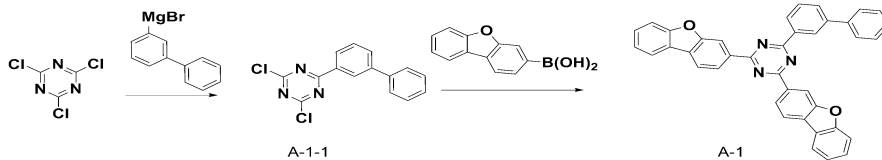
[0287] **(유기 광전자 소자용 화합물의 제조)**

[0288] 본 발명의 화합물의 보다 구체적인 예로서 제시된 화합물을 하기 단계를 통해 합성하였다.

[0289] **(제1 유기 광전자 소자용 화합물)**

[0290] **합성예 1: 화합물 A-1의 합성**

[0291] [반응식 1]



[0292]

[0293] **a) 중간체 A-1-1의 합성**

[0294] 500 mL 둥근바닥플라스크에 시아누릭클로라이드 15 g(81.34 mmol)을 무수 테트라하이드로퓨란 200 mL에 녹이고, 질소대기하에서 3-바이페닐 마그네슘브로마이드 용액 (0.5M 테트라하이드로퓨란) 1 당량을 0℃에서 적가하고 서서히 상온으로 올린다. 상온에서 1 시간 동안 교반한 후, 반응액을 얼음물 500 mL에 넣고 충분히시킨다. 유기층을 분리하고 무수 황산마그네슘을 처리하고 농축한다. 농축된 잔사를 테트라하이드로퓨란과 메탄올로 재결정하여 중간체 A-1-1을 17.2 g 얻었다.

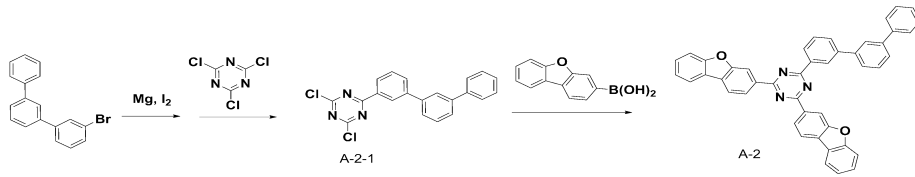
[0295] **b) 화합물 A-1의 합성**

[0296] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 A-1-1 17.2g (56.9 mmol)을 테트라하이드로퓨란 200 mL, 증류수 100 mL를 넣고, 다이벤조퓨란-3-보론산(cas: 395087-89-5) 2 당량, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 0.03 당량, 탄산칼륨 2 당량을 넣고 질소 대기하에서 가열 환류한다. 18 시간 후 반응액을 냉각시키고, 석출된 고체를 여과하고, 물 500 mL로 씻는다. 고체를 모노클로로벤젠 500 mL로 재결정하여 화합물 A-1을 12.87 g 얻었다.

[0297] LC/MS calculated for: C<sub>39</sub>H<sub>23</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub> Exact Mass: 565.1790 found for: 566.18 [M+H]

[0299] **합성예 2: 화합물 A-2의 합성**

[0300] [반응식 2]



[0301]

[0302] a) 중간체 A-2-1의 합성

[0303] 질소 환경에서 magnesium(7.86 g, 323 mmol)과 iodine(1.64 g, 6.46 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.1 L에 넣고 30분간 교반시킨 후, 여기에 THF 0.3 L에 녹아있는 3-bromo-tert-phenyl(100 g, 323 mmol)을 0 °C에서 30분에 걸쳐 천천히 적가한다. 이렇게 만들어진 혼합액을 THF 0.5 L에 녹아있는 시아누릭클로라이드 64.5 g (350 mmol) 용액에 0 °C에서 30분에 걸쳐 천천히 적가한다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 A-2-1(85.5 g, 70 %)을 얻었다.

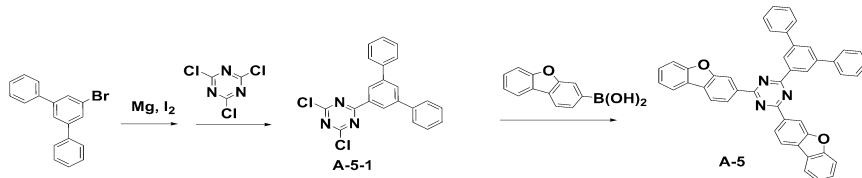
[0305] b) 화합물 A-2의 합성

[0306] 중간체 A-2-1을 사용하여 상기 합성예 1의 (b)와 같은 방법으로 화합물 A-2을 합성하였다.

[0307] LC/MS calculated for: C<sub>45</sub>H<sub>27</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub> Exact Mass: 641.2103 found for 642.21 [M+H]

[0309] **합성예 3: 화합물 A-5의 합성**

[0310] [반응식 3]



[0311]

[0313] a) 중간체 A-5-1의 합성

[0314] 질소 환경에서 magnesium(7.86 g, 323 mmol)과 iodine(1.64 g, 6.46 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.1 L에 넣고 30분간 교반시킨 후, 여기에 THF 0.3 L에 녹아있는 1-bromo-3,5-diphenylbenzene(100 g, 323 mmol)을 0 °C에서 30분에 걸쳐 천천히 적가한다. 이렇게 만들어진 혼합액을 THF 0.5 L에 녹아있는 시아누릭클로라이드 64.5 g (350 mmol) 용액에 0 °C에서 30분에 걸쳐 천천히 적가한다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 A-5-1(79.4 g, 65 %)을 얻었다.

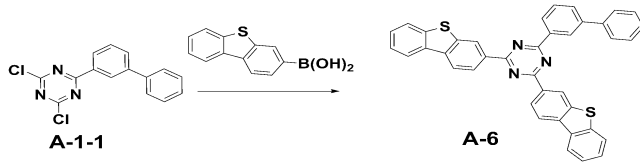
[0316] b) 화합물 A-5의 합성

[0317] 중간체 A-5-1을 사용하여 상기 합성예 1의 (b)와 같은 방법으로 화합물 A-5을 합성하였다.

[0318] LC/MS calculated for: C<sub>45</sub>H<sub>27</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub> Exact Mass: 641.2103 found for 642.21 [M+H]

[0320] **합성예 4: 화합물 A-6의 합성**

[0321] [반응식 4]



[0322]

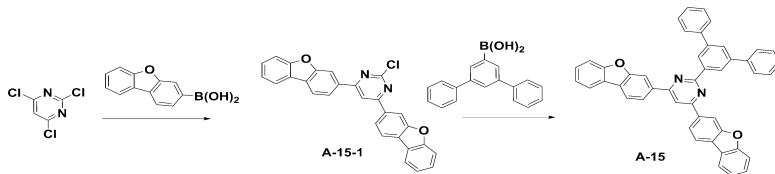
[0323] a) 화합물 A-6의 합성

[0324] 중간체 A-1-1와 다이벤조퓨란-3-보론산(Cas No.: 395087-89-5) 대신 다이벤조티오펜-3-보론산 (Cas No.: 108847-24-1)을 사용하여 상기 합성예 1의 (b)와 같은 방법으로 화합물 A-6을 합성하였다.

[0325] LC/MS calculated for: C<sub>39</sub>H<sub>23</sub>N<sub>3</sub>S<sub>2</sub> Exact Mass: 597.1333 found for 598.13 [M+H]

[0327] **합성예 5: 화합물 A-15의 합성**

[0328] [반응식 5]



[0329]

[0330] a) 중간체 A-15-1의 합성

[0331] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 2,4,6-트리클로로피리미딘 18.3g (100 mmol)을 테트라하이드로퓨란 200 mL, 증류수 100 mL를 넣고, 다이벤조퓨란-3-보론산(Cas No.: 395087-89-5) 1.9 당량, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 0.03 당량, 탄산칼륨 2 당량을 넣고 질소 대기하에서 가열 환류한다. 18 시간 후 반응액을 냉각시키고, 석출된 고체를 여과하고, 물 500 mL로 씻는다. 고체를 모노클로로벤젠 500 mL로 재결정하여 중간체 A-15-1을 26.8 g(60% 수율) 얻었다.

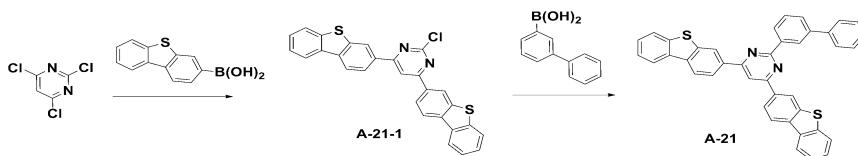
[0332] b) 화합물 A-15의 합성

[0333] 중간체 A-15-1과 1.1 당량의 3,5-다이페닐벤젠보론산을 사용하여 상기 합성예 1의 (b)와 같은 방법으로 화합물 A-15을 합성하였다.

[0334] LC/MS calculated for: C<sub>46</sub>H<sub>28</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub> Exact Mass: 640.2151 found for 641.21 [M+H]

[0336] **합성예 6: 화합물 A-21의 합성**

[0337] [반응식 6]



[0338]

[0339] a) 중간체 A-21-1의 합성

[0340] 다이벤조퓨란-3-보론산(cas: 395087-89-5) 대신 다이벤조티오펜-3-보론산(Cas No. 108847-24-1)을 사용하여 상기 합성예 5의 (a)와 같은 방법으로 중간체 A-21-1을 합성하였다.

[0341] b) 화합물 A-21의 합성

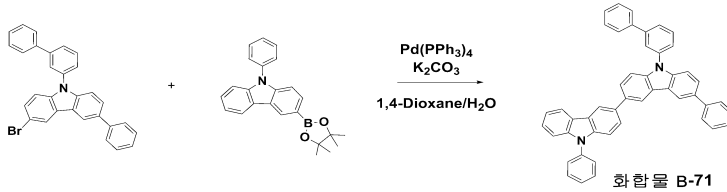
[0342] 중간체 A-21-1과 1.1 당량의 바이페닐-3-보론산을 사용하여 상기 합성예 5의 (b)와 같은 방법으로 화합물 A-21을 합성하였다.

[0343] LC/MS calculated for: C<sub>40</sub>H<sub>24</sub>N<sub>2</sub>S<sub>2</sub> Exact Mass: 596.1381 found for 597.14 [M+H]

[0345] (제2 유기 광전자 소자용 화합물의 합성)

[0346] **합성예 7: 화합물 B-71의 합성**

[0347] [반응식 7]



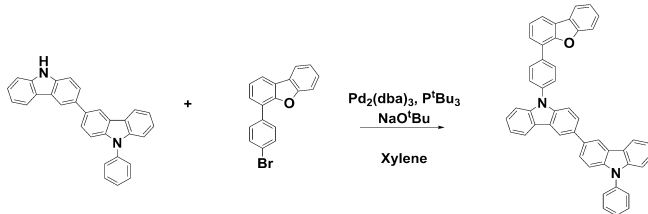
[0348]

[0349] 질소 분위기 하 교반기가 부착된 500 mL 둥근바닥 플라스크에 3-브로모-6-페닐-N-메타바이페닐카바졸 20.00 g(42.16 mmol), N-페닐카바졸-3-보로닉에스터 17.12 g(46.38 mmol) 및 테트라하이드로퓨란:톨루엔(1:1) 175 mL 와 2M-탄산칼륨 수용액 75 mL를 혼합한 후, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 1.46 g(1.26 mmol)을 넣고 질소 기류하에서 12 시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 반응물을 메탄올에 부어 고형물을 여과한 다음 수득한 고형물을 물과 메탄올로 충분히 세정하고 건조하였다. 이로부터 수득한 결과물을 700 mL의 클로로벤젠에 가열하여 녹인 다음 용액을 실리카겔 필터하고 용매를 완전히 제거한 후, 400mL의 클로로벤젠에 가열하여 녹인 다음 재결정 하여 화합물 B-71 18.52 g(수율 69%)을 수득하였다.

[0350] calcd. C<sub>42</sub>H<sub>32</sub>N<sub>2</sub>: C, 90.54; H, 5.07; N, 4.40; found: C, 90.54; H, 5.07; N, 4.40

[0352] **합성예 8: 화합물 B-78의 합성**

[0353] [반응식 8]



[0354]

[0355] 250 mL 둥근 플라스크에서 N-페닐-3,3'-바이카바졸 6.3 g (15.4 mmol), 4-(4-브로모페닐)다이벤조[b,d]퓨란 5.0 g (15.4 mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.0 g (30.7 mmol), 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐 0.9 g (1.5 mmol) 및 트리 t-부틸포스핀 1.2 mL (50% in 톨루엔)를 자일렌 100 mL과 혼합하고 질소 기류 하에서 15시간 동안 가열하여 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 300 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 다이클로로벤젠에 녹여 실리카겔/ 셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 화합물 B-78 (7.3 g, 73%의 수율)를 수득하였다.

[0356] calcd. C<sub>48</sub>H<sub>30</sub>N<sub>2</sub>O : C, 88.59; H, 4.65; N, 4.30; O, 2.46; found : C, 88.56; H, 4.62; N, 4.20; O, 2.43

[0358] (제3 유기 광전자 소자용 화합물의 합성)

[0359] **합성예 9: 화합물 E-7의 합성**

[0360] 국제 공개 공보 WO2016-162440의 76페이지, B15 화합물의 합성법을 참고하여 동일한 방법으로 화합물 E-7을 13.5g 수득하였다.

[0361] LC/MS calculated for: C<sub>38</sub>H<sub>27</sub>O<sub>1</sub>P<sub>1</sub> Exact Mass: 530.1800 found for: 531.18 [M+H]

[0363] **합성예 10: 화합물 E-39의 합성**

[0364] 미국 공개 공보 US2014-0332790의 176번 단락, Synthesis of Structure 34의 합성법을 참고하여 동일한 방법으로 화합물 E-39를 8.3g 수득하였다.

[0365] LC/MS calculated for: C39H26N10I1P1 Exact Mass: 555.1752 found for: 556.18 [M+H]

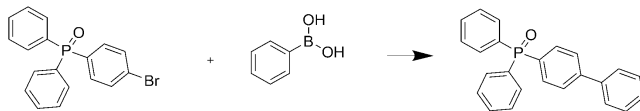
[0367] **합성예 11: 화합물 E-53의 합성**

[0368] 한국 공개 공보 KR2016-0102528의 101번 단락에 기재되어 있는 합성법을 참고하여 동일한 방법으로 화합물 E-53를 5.7g 수득하였다.

[0369] LC/MS calculated for: C32H21O1P1 Exact Mass: 452.1330 found for: 453.13 [M+H]

[0371] **비교합성예 1: 비교화합물 6 (비-6)의 합성**

[0372] [반응식 9]



[0373] 질소 분위기 하 교반기가 부착된 500 mL 둥근바닥 플라스크에 (4-브로모페닐)디페닐포스핀옥사이드 20.00 g(56.00 mmol), 페닐보로닉에씨드 7.51 g(61.59 mmol) 및 테트라하이드로퓨란:톨루엔(1:1) 250 mL 와 2M-탄산 칼륨 수용액 100 mL를 혼합한 후, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 3.00 g(2.59 mmol)을 넣고 질소기류하에서 12 시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 반응물을 메탄올에 부어 고형물을 여과한 다음 수득한 고형물을 물과 메탄올로 충분히 세정하고 건조하였다. 이로부터 수득한 결과물을 700 mL의 클로로벤젠에 가열하여 녹인 다음 용액을 실리카겔 필터하고 용매를 완전히 제거한 후, 400mL의 클로로벤젠에 가열하여 녹인 다음 재결정하여 비교화합물 6 14.88 g(수율 75%)을 수득하였다.

[0375] LC/MS calculated for: C24H19OP Exact Mass : 354.1220 found for : 354.12 [M+H]

[0377] **(유기 발광 소자의 제작)**

[0378] **실시예 1**

[0379] ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 10분간 세정 한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상부에 화합물 A을 진공 증착하여 700Å 두께의 정공 주입층을 형성하고 상기 주입층 상부에 화합물 B를 50Å의 두께로 증착한 후, 화합물 C를 1020Å의 두께로 증착하여 정공수송층을 형성하였다. 정공수송층 상부에 합성예 3의 화합물 A-5 및 화합물 B-40을 동시에 호스트로 사용하고 도판트로 트리스(2-페닐피리딘)이리듐(III) [Ir(ppy)<sub>3</sub>]를 10wt%로 도핑하여 진공 증착으로 400Å 두께의 발광층을 형성하였다. 여기서 화합물 A-5와 화합물 B-40은 25:75 중량비로 사용되었으며, 하기 실시예의 경우 별도로 비율을 기술하였다. 이어서 상기 발광층 상부에 합성예 9의 화합물 E-7과 Liq를 동시에 1:1 비율로 진공 증착하여 300Å 두께의 전자수송층을 형성하고 상기 전자수송층 상부에 Liq 15Å과 Al 1200Å을 순차적으로 진공 증착 하여 음극을 형성함으로써 유기발광소자를 제작하였다.

[0380] 상기 유기발광소자는 5층의 유기 박막층을 가지는 구조로 되어 있으며, 구체적으로 다음과 같다.

[0381] ITO/화합물A(700Å)/화합물B(50Å)/화합물C(1020Å)/EML[화합물A-5:B-40:Ir(ppy)<sub>3</sub>=22.5wt%:67.5wt%:10wt%](400Å)/화합물E-7:Liq(300Å)/Liq(15Å)/Al(1200Å)의 구조로 제작하였다.

- [0382] 화합물 A: N4,N4'-diphenyl-N4,N4'-bis(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)biphenyl-4,4'-diamine
- [0383] 화합물 B: 1,4,5,8,9,11-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile (HAT-CN),
- [0384] 화합물 C: N-(biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-N-(4-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)phenyl)-9H-fluoren-2-amine

[0386] **실시예 2 내지 30**

[0387] 하기 표 1에 기재된 호스트와 ETL을 사용한 것을 제외고는 실시예 1과 동일한 방법으로 실시예 2 내지 30의 유기발광소자를 제작하였다.

[0389] **참고예 1 내지 20**

[0390] 하기 표 1에 기재된 호스트와 ETL로서 Alq3 (Aluminium quinolate) 또는 비교화합물 6을 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법으로 참고예 1 내지 20의 소자를 제작하였다.

[0392] **평가 1: 발광 효율 및 수명 상승 효과 확인**

[0393] 상기 실시예 1 내지 30, 및 참고예 1 내지 20에 따른 유기발광소자의 발광효율 및 수명 특성을 평가하였다. 구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 표 1과 같다.

[0394] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[0395] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[0396] (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

[0397] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

[0398] (3) 발광효율 측정

[0399] 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도( $10 \text{ mA/cm}^2$ )의 전력 효율 ( $\text{lm/W}$ )을 계산하였다. 효율은 참고예 1의 값을 100%로 하여, 상대치로 나타내었다.

[0400] (4) 수명 측정

[0401] 제조된 유기발광소자에 대해 플라로닉스 수명측정 시스템을 사용하여 실시예 1 내지 30 및 참고예 1 내지 20의 소자를 초기휘도( $\text{cd/m}^2$ )를  $18000 \text{ cd/m}^2$ 로 발광시키고 시간경과에 따른 휘도의 감소를 측정하여 초기 휘도 대비 97%로 휘도가 감소된 시점을 T97 수명으로 측정하였다. 수명은 참고예 1의 값을 100%로 하여, 상대치로 나타내었다.

**표 1**

[0402]

실험이름	EML	EML 의 호스트 혼합비(중량 비)	ETL	Vd(V)	lm/W(상대값)	T97 (@18000nit, 상대값)
참고예 1	A-5:B-40	25:75	AlQ3	5.41	100%	100%
실시예 1	A-5:B-40	25:75	E-7	4.48	137%	1000%
실시예 2	A-5:B-40	25:75	E-39	4.58	129%	522%
실시예 3	A-5:B-40	25:75	E-53	4.49	130%	544%
참고예 2	A-5:B-40	25:75	비-6	5.24	93%	50%
참고예 3	A-5:B-14	30:70	AlQ3	5.00	101%	119%
실시예 4	A-5:B-14	30:70	E-7	4.49	130%	912%
실시예 5	A-5:B-14	30:70	E-39	4.54	124%	482%
실시예 6	A-5:B-14	30:70	E-53	4.50	124%	502%
참고예 4	A-5:B-14	30:70	비-6	5.31	72%	53%

참고예 5	A-1:B-71	30:70	AlQ3	4.87	100%	91%
실시예 7	A-1:B-71	30:70	E-7	4.43	130%	909%
실시예 8	A-1:B-71	30:70	E-39	4.48	123%	479%
실시예 9	A-1:B-71	30:70	E-53	4.43	124%	499%
참고예 6	A-1:B-71	30:70	비-6	5.11	68%	72%
참고예 7	A-2:B-71	30:70	AlQ3	4.77	102%	105%
실시예 10	A-2:B-71	30:70	E-7	4.37	130%	911%
실시예 11	A-2:B-71	30:70	E-39	4.42	124%	481%
실시예 12	A-2:B-71	30:70	E-53	4.38	124%	501%
참고예 8	A-2:B-71	30:70	비-6	5.10	101%	13%
참고예 9	A-2:B-40	30:70	AlQ3	4.58	98%	119%
실시예 13	A-2:B-40	30:70	E-7	4.28	130%	912%
실시예 14	A-2:B-40	30:70	E-39	4.33	123%	482%
실시예 15	A-2:B-40	30:70	E-53	4.28	124%	502%
참고예 10	A-2:B-40	30:70	비-6	4.78	66%	44%
참고예 11	A-2:B-14	30:70	AlQ3	4.76	100%	129%
실시예 16	A-2:B-14	30:70	E-7	4.37	130%	913%
실시예 17	A-2:B-14	30:70	E-39	4.42	123%	483%
실시예 18	A-2:B-14	30:70	E-53	4.37	124%	503%
참고예 12	A-2:B-14	30:70	비-6	5.01	78%	40%
참고예 13	A-2:B-78	30:70	AlQ3	5.06	98%	113%
실시예 19	A-2:B-78	30:70	E-7	4.52	130%	911%
실시예 20	A-2:B-78	30:70	E-39	4.57	123%	481%
실시예 21	A-2:B-78	30:70	E-53	4.53	124%	501%
참고예 14	A-2:B-78	30:70	비-6	5.10	99%	42%
참고예 15	A-6:B-14	30:70	AlQ3	4.70	96%	95%
실시예 22	A-6:B-14	30:70	E-7	4.34	129%	910%
실시예 23	A-6:B-14	30:70	E-39	4.39	123%	480%
실시예 24	A-6:B-14	30:70	E-53	4.34	123%	500%
참고예 16	A-6:B-14	30:70	비-6	4.99	43%	27%
참고예 17	A-15:B-14	30:70	AlQ3	5.17	102%	68%
실시예 25	A-15:B-14	30:70	E-7	4.57	130%	907%
실시예 26	A-15:B-14	30:70	E-39	4.62	124%	477%
실시예 27	A-15:B-14	30:70	E-53	4.58	124%	497%
참고예 18	A-15:B-14	30:70	비-6	5.10	22%	59%
참고예 19	A-21:B-14	30:70	AlQ3	5.09	104%	75%
실시예 28	A-21:B-14	30:70	E-7	4.53	131%	908%
실시예 29	A-21:B-14	30:70	E-39	4.58	124%	478%
실시예 30	A-21:B-14	30:70	E-53	4.54	125%	498%
참고예 20	A-21:B-14	30:70	비-6	5.17	89%	55%

[0403] 상기 표 1의 결과를 보면, 본 발명의 특정 호스트의 조합과 특정 전자 수송층 물질을 조합하여 사용한 유기발광 소자의 경우, 일반적으로 사용되는 Alq3 대비 구동전압은 떨어지며, 효율은 상승하고, 특히 수명이 크게 증가하는 것을 모든 실시예에서 확인 할 수 있다. 또한 전자 수송층 물질에 융합고리를 갖지 않는 비교화합물 6을 사용한 참고예와 비교할 경우, 구동, 효율, 수명 면에서 모두 우수하며 특히 수명 면에서 크게 효과가 있는 것을 확인 할 수 있다.

[0404] 이러한 효과는 트리아진 코어뿐만이 아니라 피리미딘 코어에서도 동일하게 나타났다. 따라서, 해당 소자데이터로부터 제1 호스트의 디벤조퓨란 또는 디벤조티오펜이 ET core 그룹과 직접 연결될 경우 효과적인 LUMO 확장과 고리의 융합 효과를 통해 해당 재료의 소자 내 수명이 향상됨을 확인할 수 있다.

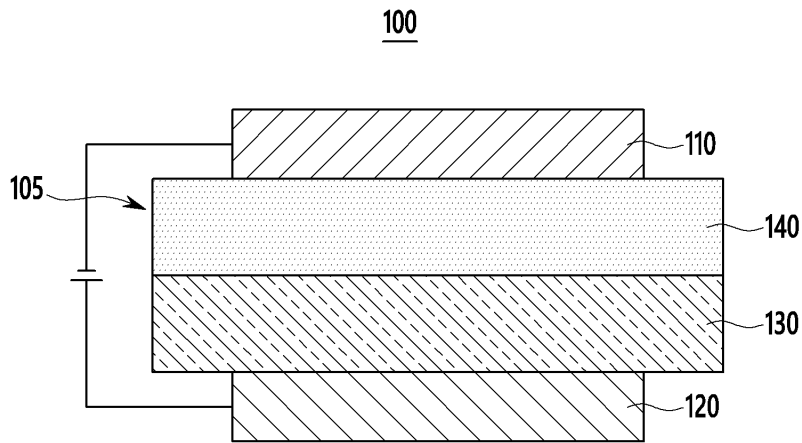
[0406] 본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

**부호의 설명**

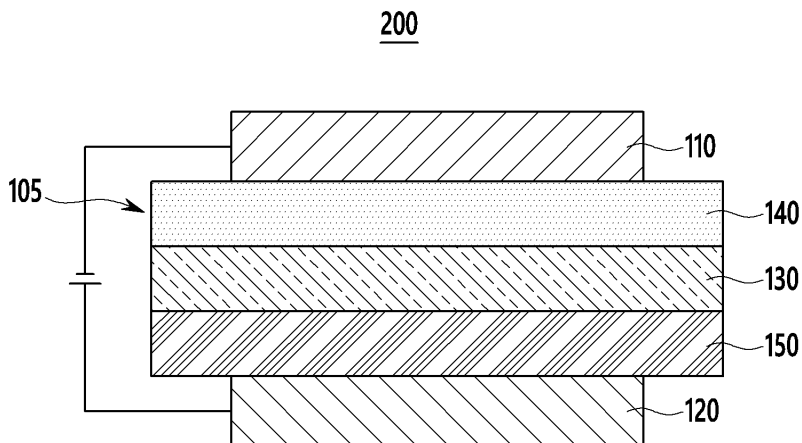
- [0407] 100, 200: 유기 발광 소자  
 105: 유기층  
 110: 음극  
 120: 양극  
 130: 발광층  
 140: 전자수송층  
 150: 정공 보조층

**도면**

**도면1**



**도면2**



专利名称(译)	有机光电器件和显示器		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020180058472A</a>	公开(公告)日	2018-06-01
申请号	KR1020160157490	申请日	2016-11-24
申请(专利权)人(译)	三星SD眼有限公司		
[标]发明人	LUI JINHYUN 류진현 JUNG HO KUK 정호국 KIM DONGYEONG 김동영 JANG KIPO 장기포 HUH DALHO 허달호 YU EUN SUN 유은선 JUNG SUNG HYUN 정성현		
发明人	류진현 정호국 김동영 장기포 허달호 유은선 정성현		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 H01L51/00		
CPC分类号	H01L51/5072 C09K2211/1044 C09K2211/1029 H01L51/0062 C09K2211/1088 H01L51/5056 C09K11/06 H01L51/5012 H01L51/5076 C09K2211/1062 C09K2211/1092 C07D209/86 C07D405/14 C07D409/14 H01L51/0067 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/0085 H01L51/5016 H01L2251/5384 H01L51/00 H01L51/50 C09K2211/1018 H01L51/001 H01L51/0021 H01L51/5088 H01L51/5092 H01L51/5206 H01L51/5221 H01L51/56 H01L2251/301 H01L2251/308 H01L2251/558		
其他公开文献	KR102037817B1		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

本发明的目的是提供一种能够实现高效率和长寿命特性的有机光电装置。有机光电器件技术领域本发明涉及一种有机光电器件，包括：彼此面对的阴极和阳极；以及彼此相对的阴极。位于阴极和阳极之间的发光层；电子传输层位于阴极和发光层之间。发光层包括用于化学式1表示的用于第一有机光电器件的至少一种化合物和用于化学式2表示的用于第二有机光电器件的至少一种化合物。电子传输层包括用于第三有机化合物的至少一种化合物。用化学式3表示的光电子器件。化学式1至3的细节如说明书中所定义。

