



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 등록특허공보(B1)**

(45) 공고일자 2016년05월27일  
 (11) 등록번호 10-1625284  
 (24) 등록일자 2016년05월23일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C07D 487/10* (2006.01) *C07D 495/10* (2006.01)  
*C09K 11/06* (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2014-0086088  
 (22) 출원일자 2014년07월09일  
 심사청구일자 2014년07월09일  
 (65) 공개번호 10-2015-0006802  
 (43) 공개일자 2015년01월19일  
 (30) 우선권주장  
 1020130080539 2013년07월09일 대한민국(KR)  
 (56) 선행기술조사문헌  
 KR1020110100762 A\*  
 KR1020120136618 A  
 KR1020110132721 A  
 WO2012048819 A1  
 \*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자  
**주식회사 엘지화학**  
 서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)  
 (72) 발명자  
**박태운**  
 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
**전상영**  
 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원  
 (뒷면에 계속)  
 (74) 대리인  
**정순성**

전체 청구항 수 : 총 13 항

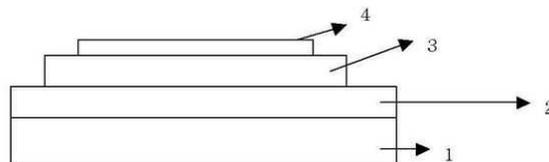
심사관 : 정현아

(54) 발명의 명칭 **방향족 화합물 및 이를 이용한 유기 전자 소자**

**(57) 요약**

본 명세서는 유기 전자 소자의 수명, 효율, 구동 전압 하강 및 안정성을 향상시킬 수 있는 신규한 화합물이 유기 물층에 함유되어 있는 유기 전자 소자에 관한 것이다.

**대표도** - 도1



(72) 발명자

**천민승**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**조성미**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**김형석**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**김동현**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

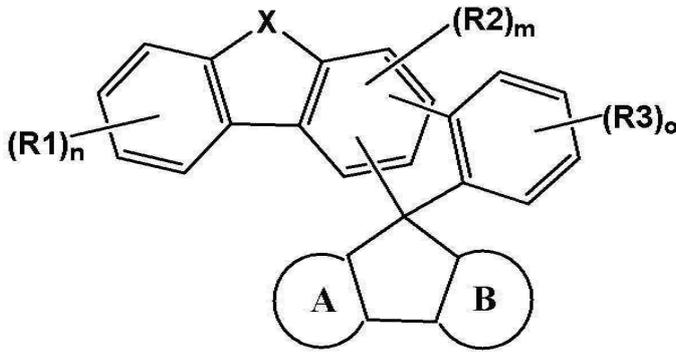
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X는 NR, O 또는 S이고,

환 A 및 환 B는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리기; 또는 N을 2개 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기이며,

상기 환 A 또는 환 B는 N을 2개 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기이고,

R1 내지 R3 및 R은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 플루오렌기; 또는 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기이고, R1 내지 R3 및 R 중 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 단환식 또는 다환식의 고리를 형성할 수 있으며,

n 및 o는 0 내지 4인 정수이고, m은 0 내지 2인 정수이며,

괄호 안의 치환기가 2 이상인 경우 서로 동일하거나 상이하고, 환 A 및 환 B 중 적어도 하나는 헤테로 고리기이며,

상기 "치환 또는 비치환된" 치환기는 중수소, 할로젠기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 실릴기, 아릴알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 카바졸기, 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 및 니트릴기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환 또는 비치환된 것이다.

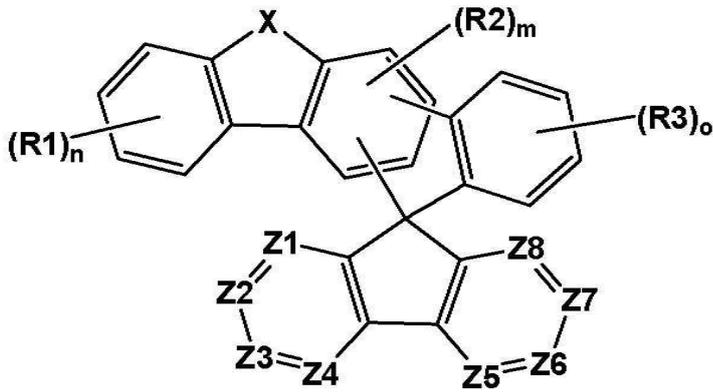
청구항 2

삭제

청구항 3

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2로 표시되는 것인 화합물:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X, R1 내지 R3, n, m 및 o는 화학식 1의 정의와 동일하고,

Z1 내지 Z8은 각각 독립적으로 CR' 또는 N이며,

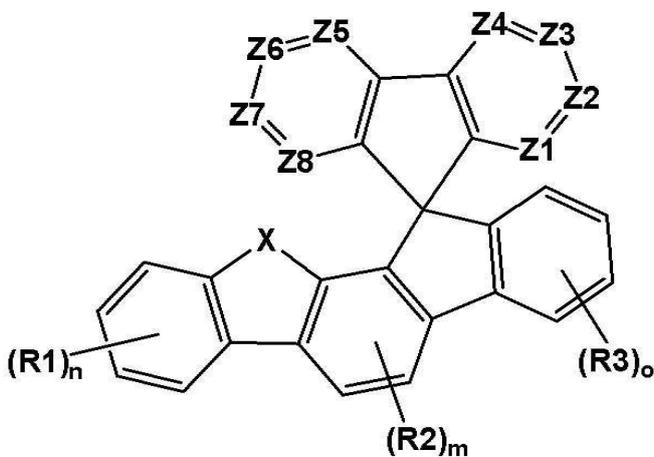
Z1 내지 Z4 중 2 이상이 N이거나 Z5 내지 Z8 중 2 이상이 N이고,

R'은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로겐기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 플루오렌기; 또는 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기이며, R1 내지 R3, R 및 R' 중 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 단환식 또는 다환식의 고리를 형성할 수 있다.

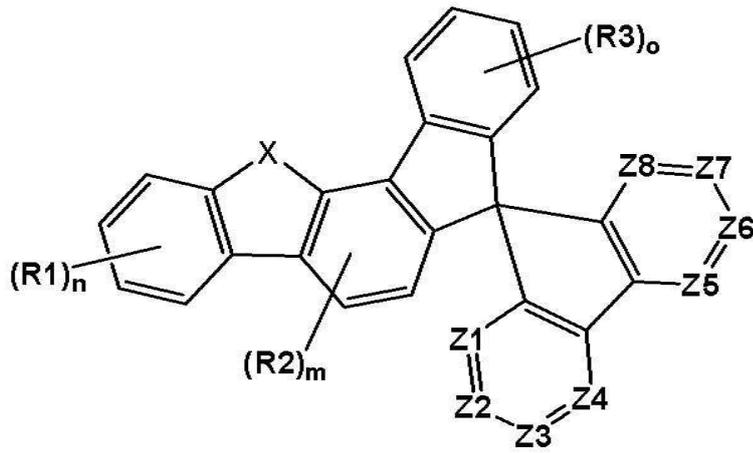
**청구항 4**

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 3 내지 8 중 어느 하나로 표시되는 것인 화합물:

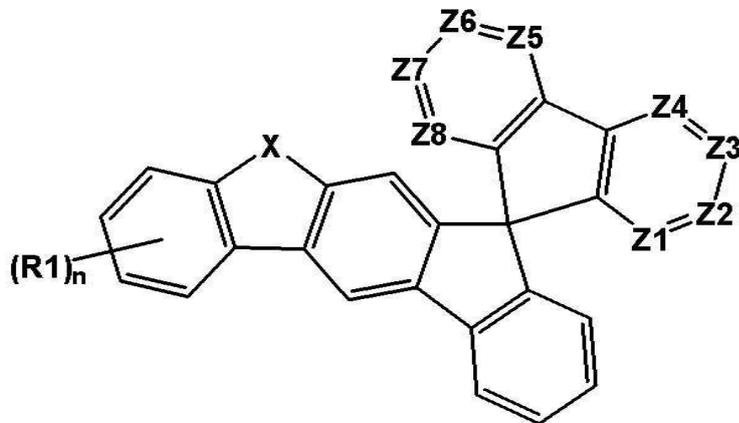
[화학식 3]



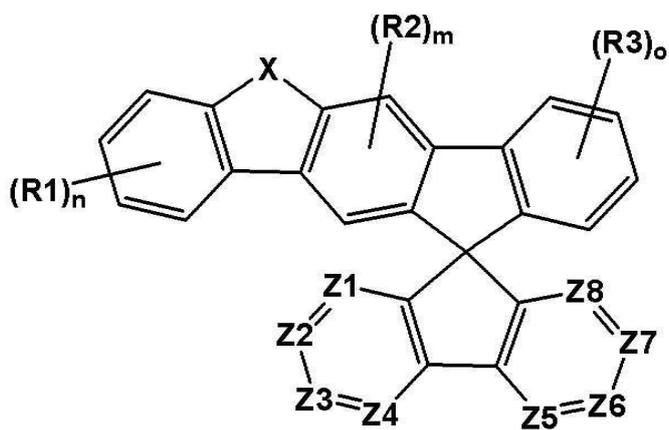
[화학식 4]



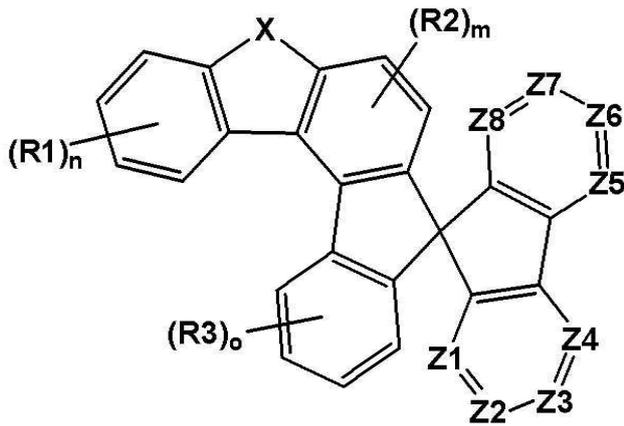
[화학식 5]



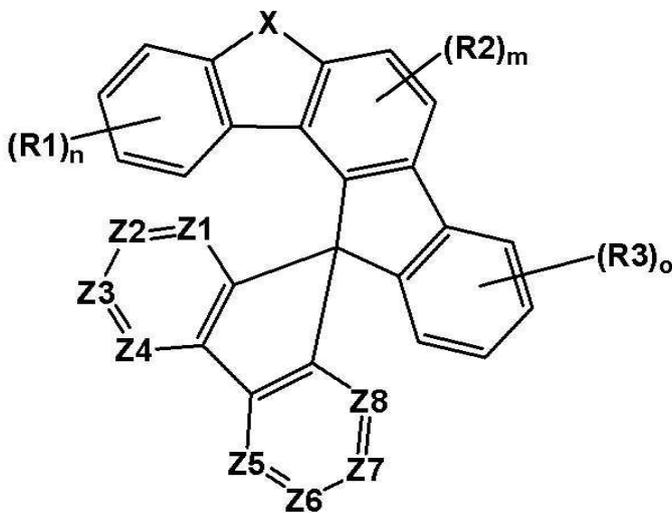
[화학식 6]



[화학식 7]



[화학식 8]



상기 화학식 3 내지 8에서,

X, R1 내지 R3, n, m 및 o는 화학식 1의 정의와 동일하고,

Z1 내지 Z8은 각각 독립적으로 CR' 또는 N이며

Z1 내지 Z4 중 2 이상이 N이거나 Z5 내지 Z8 중 2 이상이 N이고,

R'은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로겐기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 플루오렌기; 또는 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기이며,

R1 내지 R3, R 및 R' 중 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 단환식 또는 다환식의 고리를 형성할 수 있다.

**청구항 5**

청구항 4에 있어서, Z1 내지 Z4 중 두 개가 N이거나 Z5 내지 Z8 중 두 개가 N인 것인 화합물.

**청구항 6**

청구항 4에 있어서, Z2와 Z4는 N이거나 Z5와 Z7은 N인 것인 화합물.

**청구항 7**

청구항 4에 있어서, Z2와 Z4는 N이고, Z1, Z3 및 Z5 내지 Z8은 CR'이며, R'는 각각 독립적으로 청구항 4의 R'의 정의와 같은 것인 화합물.

**청구항 8**

청구항 4에 있어서, Z5와 Z7은 N이고, Z1 내지 Z4, Z6 및 Z8은 CR'이며, R'는 각각 독립적으로 청구항 4의 R'의 정의와 같은 것인 화합물.

**청구항 9**

청구항 4에 있어서, Z2와 Z4는 N이고, Z1은 CR4이며, Z3은 CR5이고, Z5 내지 Z8은 CR'이며,

R'는 각각 독립적으로 청구항 4의 R'의 정의와 같으며,

R4 및 R5는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기인 것인 화합물.

**청구항 10**

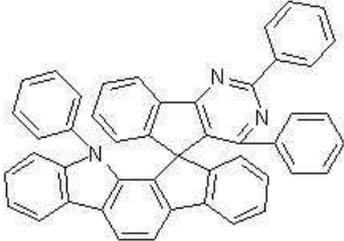
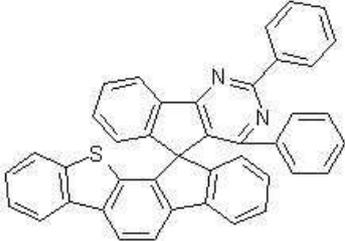
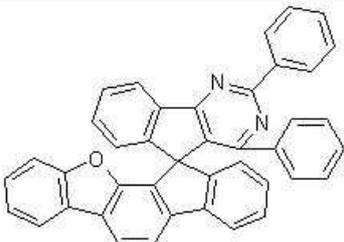
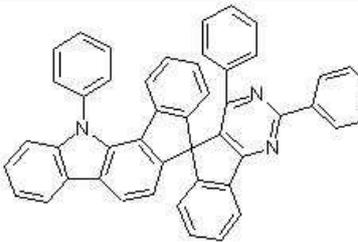
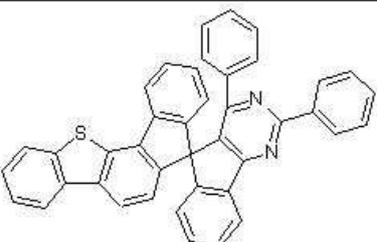
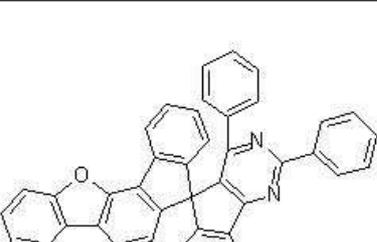
청구항 4에 있어서, Z5와 Z7은 N이고, Z6은 CR6이며, Z8은 CR7이고, Z1 내지 Z4는 CR'이며,

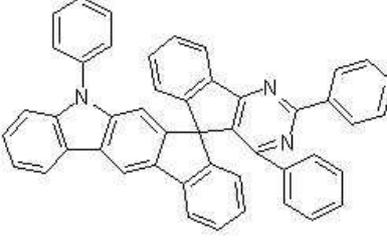
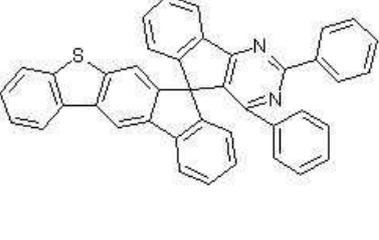
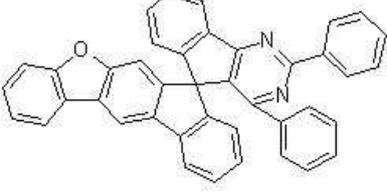
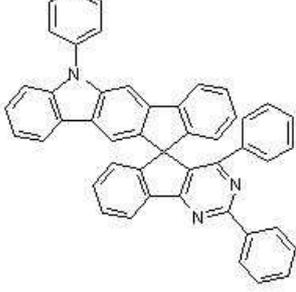
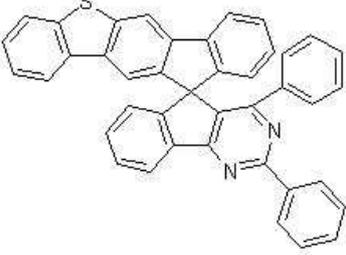
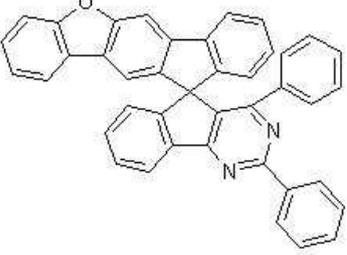
R'는 각각 독립적으로 청구항 4의 R'의 정의와 같으며,

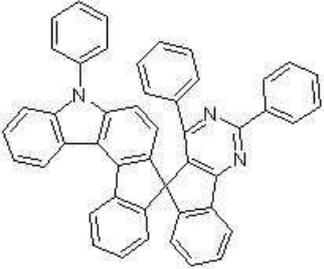
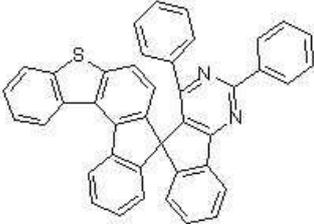
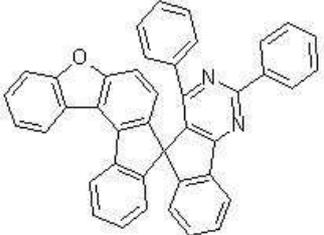
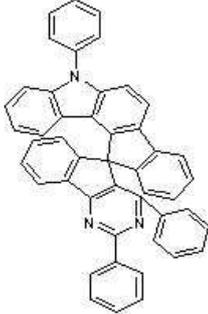
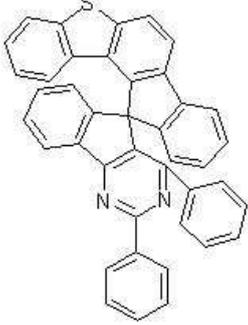
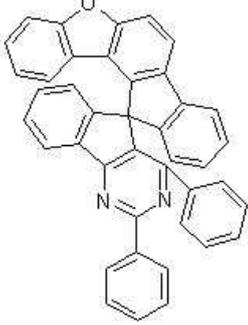
R6 및 R7는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기인 것인 화합물.

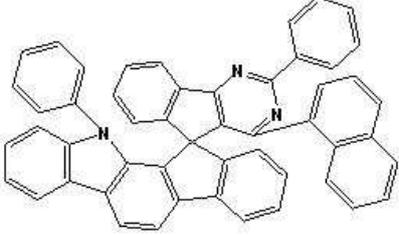
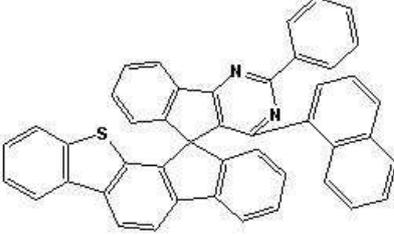
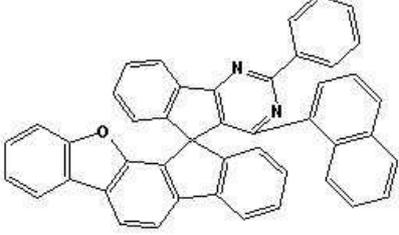
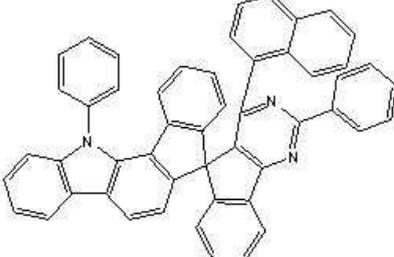
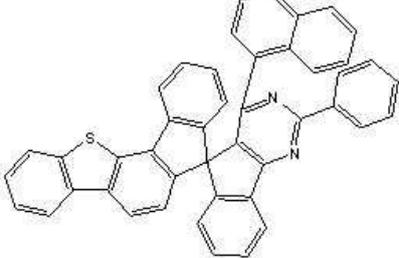
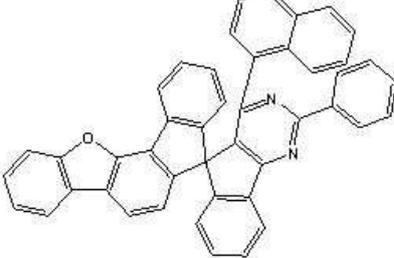
**청구항 11**

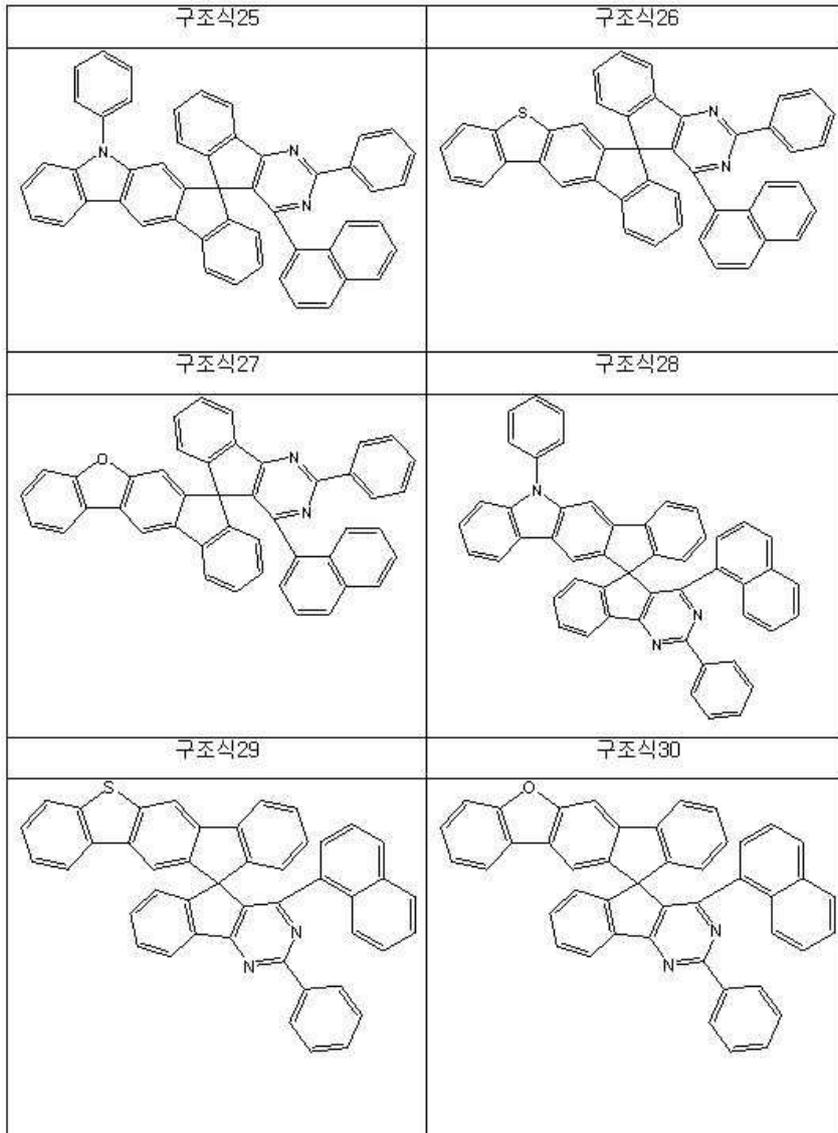
청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 1 내지 54 중 어느 하나인 것인 화합물:

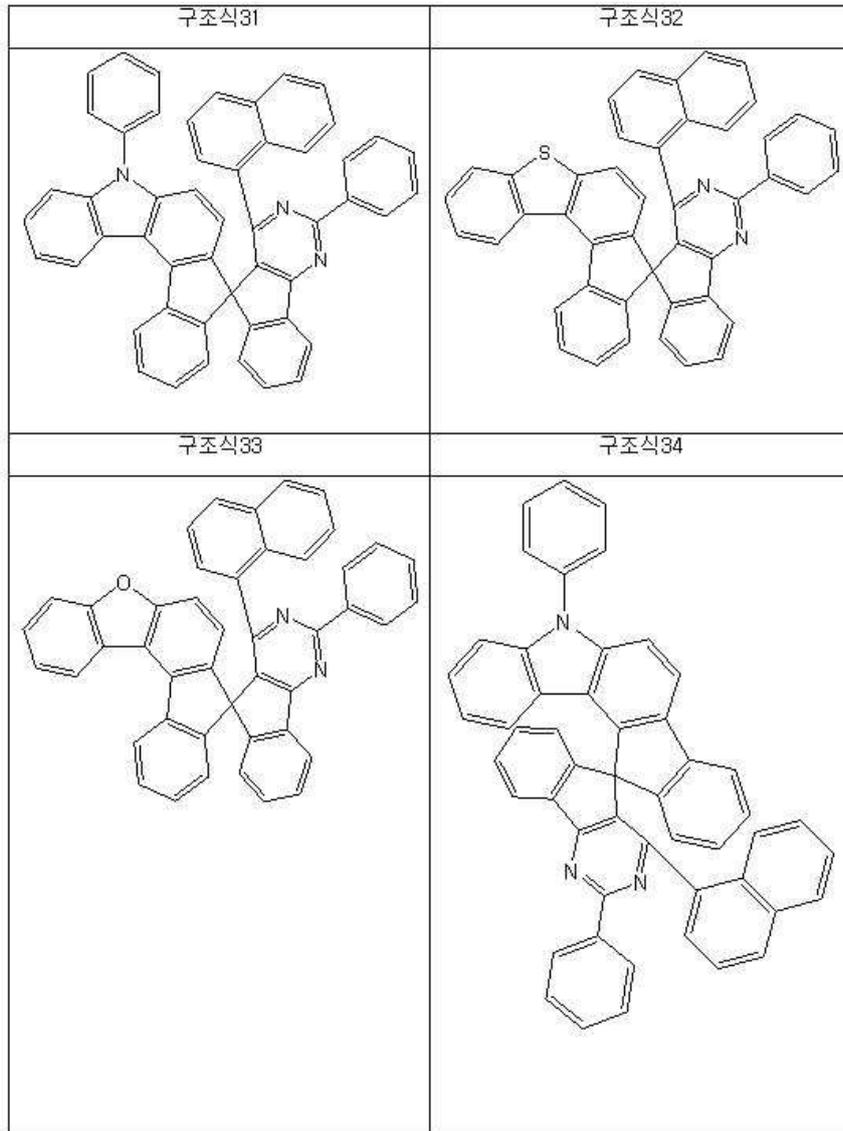
구조식1	구조식2
	
구조식3	구조식4
	
구조식5	구조식6
	

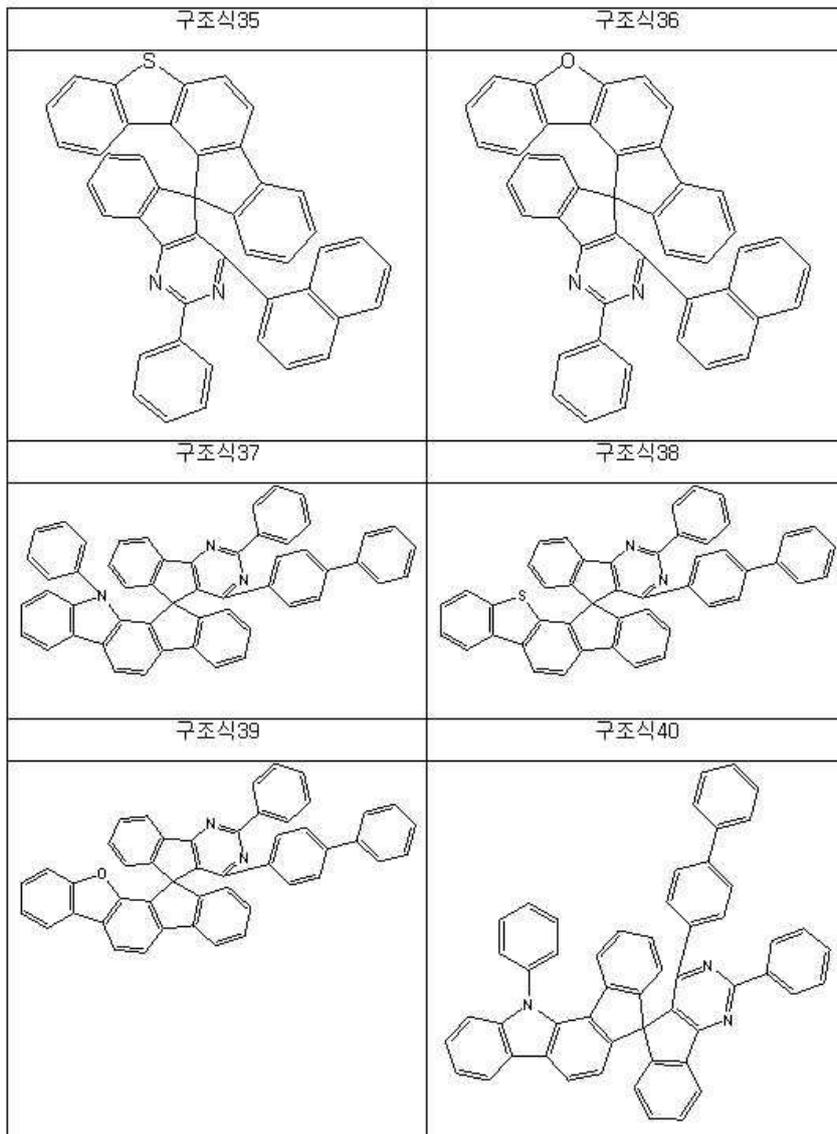
구조식7	구조식8
	
구조식9	구조식10
	
구조식11	구조식12
	

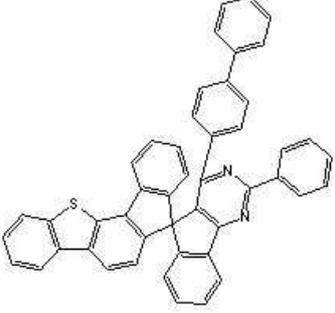
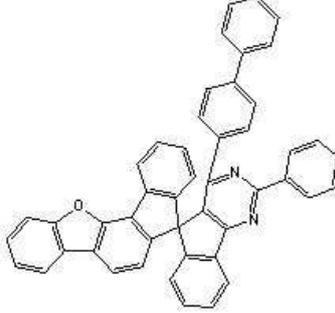
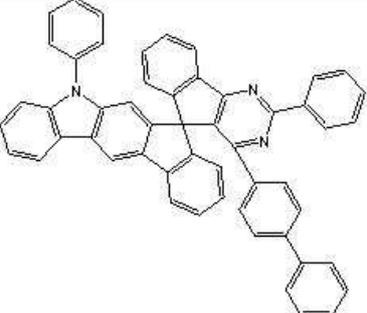
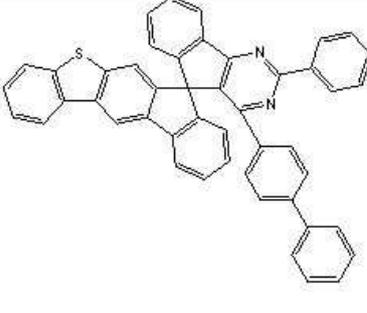
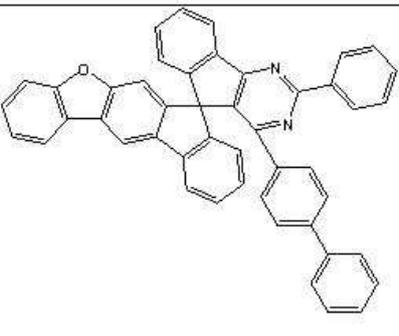
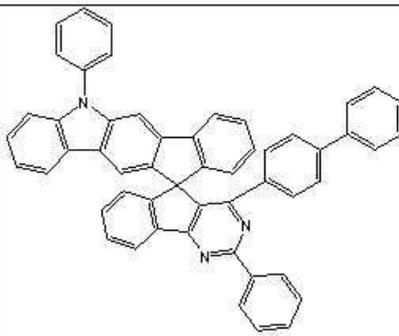
구조식13	구조식14
	
구조식15	구조식16
	
구조식17	구조식18
	

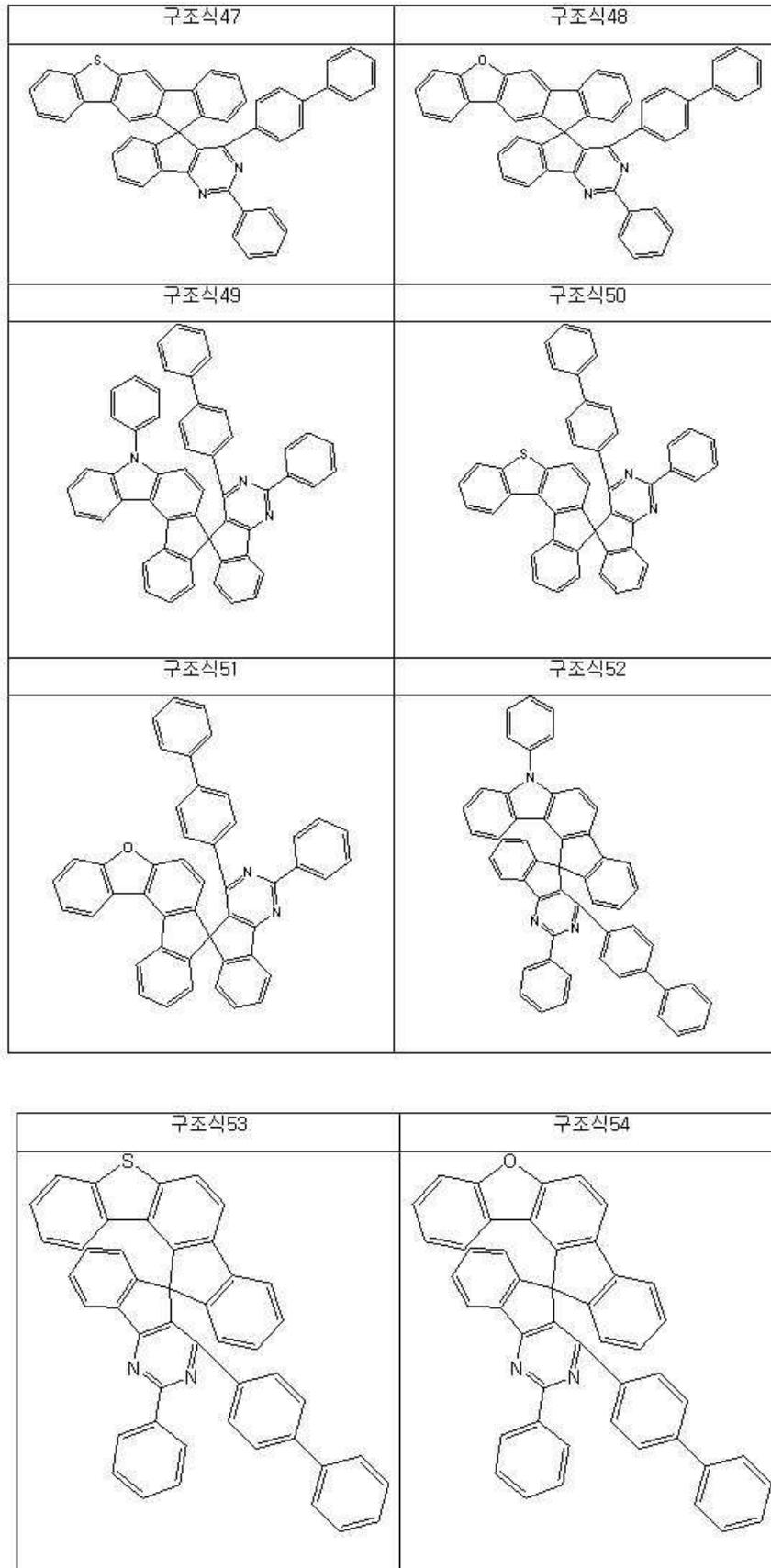
구조식19	구조식20
	
구조식21	구조식22
	
구조식23	구조식24
	







구조식41	구조식42
	
구조식43	구조식44
	
구조식45	구조식46
	



**청구항 12**

제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전자

소자로서,

상기 유기물층 중 1 층 이상은 청구항 1 및 3 내지 11 중 어느 한 항의 화합물을 포함하는 것인 유기 전자 소자.

**청구항 13**

청구항 12에 있어서, 상기 유기물층은 전자 차단층, 전자 주입층 및 전자 수송층 중 적어도 한 층을 포함하고, 상기 전자 차단층, 전자 주입층 및 전자 수송층 중 적어도 한 층이 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 전자 소자.

**청구항 14**

청구항 12에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 전자 소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 명세서는 유기 전자 소자의 수명, 효율, 구동 전압 하강 및 안정성을 향상시킬 수 있는 신규한 화합물이 유기물층에 함유되어 있는 유기 전자 소자에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 유기 전자 소자란 정공 및/또는 전자를 이용한 전극과 유기물 사이에서의 전하 교류를 필요로 하는 소자를 의미한다. 유기 전자 소자는 동작 원리에 따라 하기와 같이 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 첫째는 외부의 광원으로 부터 소자로 유입된 광자에 의하여 유기물층에서 엑시톤(exiton)이 형성되고 이 엑시톤이 전자와 정공으로 분리되고, 이 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되어 전류원(전압원)으로 사용되는 형태의 전기소자이다. 둘째는 2개 이상의 전극에 전압 또는 전류를 가하여 전극과 계면을 이루는 유기물 반도체에 정공 및/또는 전자를 주입하고, 주입된 전자와 정공에 의하여 동작하는 형태의 전자소자이다.

[0003] 유기 전자 소자의 예로는 유기 전자 소자, 유기 태양전지, 유기 감광체(OPC), 유기 트랜지스터 등이 있으며, 이들은 모두 소자의 구동을 위하여 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질을 필요로 한다. 이하에서는 주로 유기발광소자에 대하여 구체적으로 설명하지만, 상기 유기 전자 소자들에서는 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질이 유사한 원리로 작용한다.

[0004] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 전자 소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 전자 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기 전자소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이러한 유기 전자 소자는 자발광, 고휘도, 고효율, 낮은 구동 전압, 넓은 시야각, 높은 콘트라스트, 고속 응답성 등의 특성을 갖는 것으로 알려져 있다.

[0005] 유기 전자 소자에서 유기물층으로 사용되는 물질은 기능에 따라, 발광 물질과 전하 수송 물질, 예컨대 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다. 또한, 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 물질과 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 물질로 구분될 수 있다. 한편, 발광 물질로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 물질로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.

[0006] 유기 전자 소자가 우수한 특성을 충분히 발휘하기 위해서는 소자내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 발광 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정하고 효율적인 유기 전자 소자용 유기물층 재료의 개발

이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있으며, 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기 전자 소자에서도 마찬가지이다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0007] (특허문헌 0001) 한국특허공개 제 2000-0051826 호

**발명의 내용**

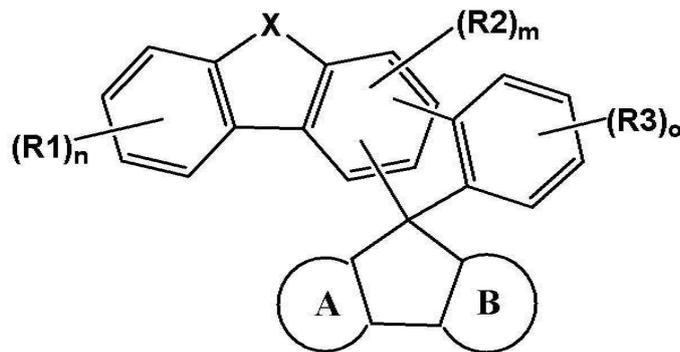
**해결하려는 과제**

[0008] 이에 본 발명자들은 유기 전자 소자에서 사용 가능한 물질에 요구되는 조건, 예컨대 수명, 효율, 구동 전압 하강 및 안정성 등을 만족시킬 수 있으며, 치환기에 따라 유기 전자 소자에서 요구되는 다양한 역할을 할 수 있는 화학 구조를 갖는 화합물을 포함하는 유기 전자 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

**과제의 해결 수단**

[0009] 본 명세서는 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0010] [화학식 1]



[0011]

[0012] 상기 화학식 1에서, X는 NR, O 또는 S이고, 환 A 및 환 B는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리기; 또는 N을 2개 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기이며, R1 내지 R3 및 R은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 플루오렌기; 또는 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기이고, R1 내지 R3 및 R 중 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 단환식 또는 다환식의 고리를 형성할 수 있으며, n 및 o는 0 내지 4인 정수이고, m은 0 내지 2인 정수이며, 괄호 안의 치환기가 2 이상인 경우 서로 동일하거나 상이하고, 환 A 및 환 B 중 적어도 하나는 헤테로 고리기이다.

[0013] 또한, 본 명세서는 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전자 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전자 소자를 제공한다.

**발명의 효과**

[0014] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 전자 소자는 수명 특성이 향상되는 장점이 있다.

[0015] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 전자 소자는 광효율이 향상되는 장점이 있다.

[0016] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 전자 소자는 낮은 구동전압을 갖는 장점이 있다.

[0017] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 전자 소자는 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성이 향상되는 장점이 있다

**도면의 간단한 설명**

[0018] 도 1은 기관(1), 양극(2), 발광층(3), 음극(4)으로 이루어진 유기 전자 소자의 예를 도시한 것이다.

도 2는 기관(1), 양극(2), 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7), 전자 수송층(8) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 전자 소자의 예를 도시한 것이다.

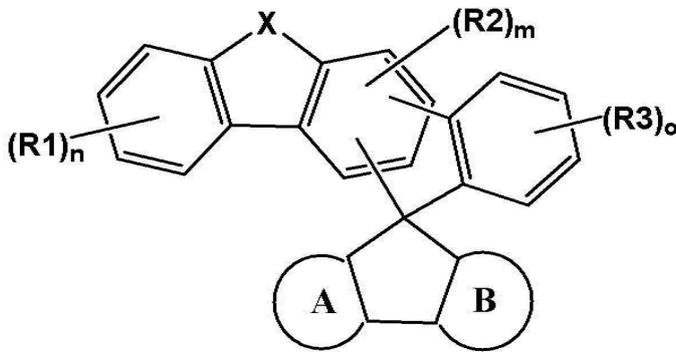
**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0019] 이하 본 명세서를 보다 상세히 설명한다.

[0020] 본 명세서는 방향족 화합물을 제공하며, 구체적으로 합질소 헤테로환 화합물을 제공한다.

[0021] 본 명세서는 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0022] [화학식 1]



[0023]

[0024] 상기 화학식 1에서, X는 NR, O 또는 S이고, 환 A 및 환 B는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리기; 또는 N을 2개 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기이며, R1 내지 R3 및 R은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 플루오렌기; 또는 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기이고, R1 내지 R3 및 R 중 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 단환식 또는 다환식의 고리를 형성할 수 있으며, n 및 o는 0 내지 4인 정수이고, m은 0 내지 2인 정수이며, 괄호 안의 치환기가 2 이상인 경우 서로 동일하거나 상이하고, 환 A 및 환 B 중 적어도 하나는 헤테로 고리기이다.

[0025] 본 명세서의 일 실시상태에서, 상기 환 A 또는 환 B는 N을 2개 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기일 수 있다.

[0026] 본 명세서의 일 실시상태에서, 상기 환 A 또는 환 B는 두 개의 N을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기일 수 있다.

[0027] 본 명세서의 일 실시상태에서, X가 NR인 경우에는 R은 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다.

[0028] 본 명세서의 일 실시상태에서, X가 NR인 경우에는 R은 비치환된 아릴기일 수 있다.

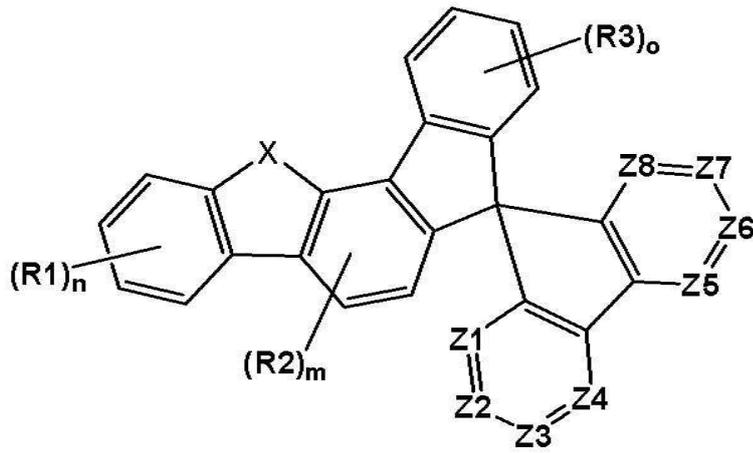
[0029] 본 명세서의 일 실시상태에서, X가 NR인 경우에는 R은 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 또는 안트라세닐기일 수 있다.

[0030] 본 명세서의 일 실시상태에서, X가 NR인 경우에는 R은 페닐기일 수 있다.

[0031] 본 명세서의 일 실시상태에서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

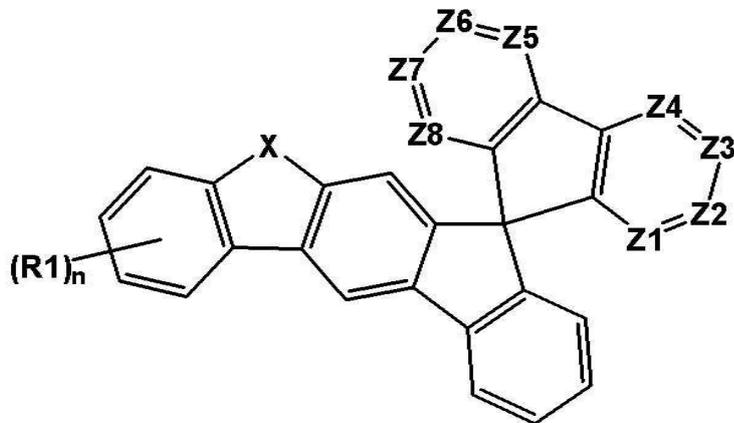


[0038] [화학식 4]



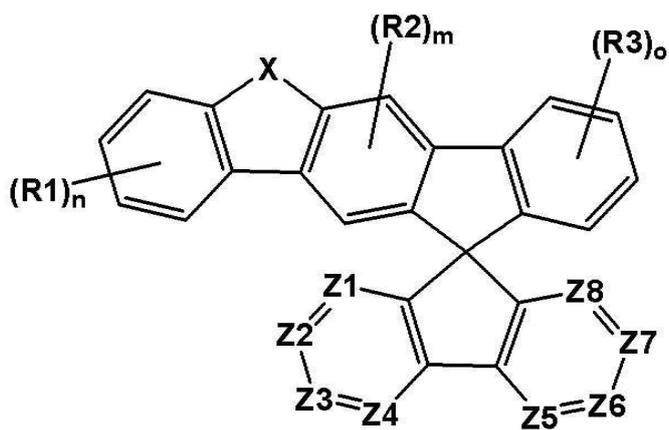
[0039]

[0040] [화학식 5]



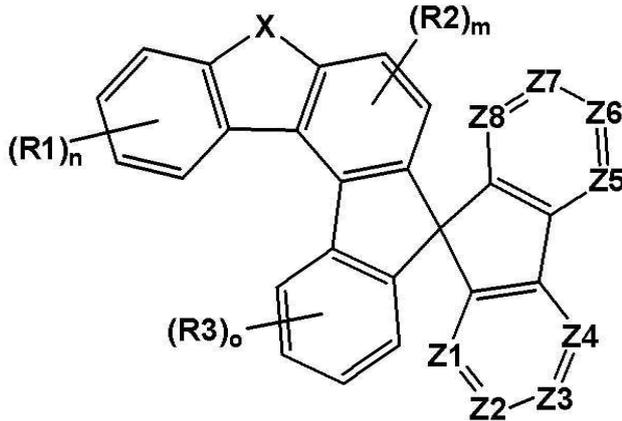
[0041]

[0042] [화학식 6]



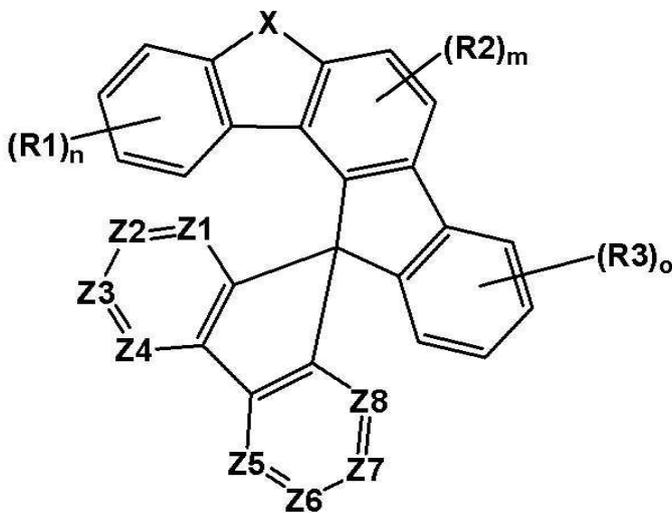
[0043]

[0044] [화학식 7]



[0045]

[0046] [화학식 8]



[0047]

[0048] 상기 화학식 3 내지 8에서, X, R1 내지 R3, n, m 및 o는 화학식 1의 정의와 동일하고, Z1 내지 Z8은 각각 독립적으로 CR' 또는 N이며, Z1 내지 Z4 중 2 이상이 N이거나 Z5 내지 Z8 중 2 이상이 N이고, R'은 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬아민기; 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기; 치환 또는 비치환된 아릴아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 플루오렌기; 또는 N, 0 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기이며, R1 내지 R3, R 및 R' 중 인접하는 2 이상의 기는 서로 결합하여 단환식 또는 다환식의 고리를 형성할 수 있다.

[0049] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z1 내지 Z4 중 두 개가 N이거나 Z5 내지 Z8 중 두 개 N일 수 있다.

[0050] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z2와 Z4는 N이거나 Z5와 Z7은 N일 수 있다.

[0051] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1, Z3 및 Z5 내지 Z8은 CR'일 수 있다.

[0052] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z5와 Z7은 N이고, Z1 내지 Z4, Z6 및 Z8은 CR'일 수 있다.

[0053] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1은 CR4이며, Z3은 CR5이고, Z5 내지 Z8은 CR'이며, R4 및 R5는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다.

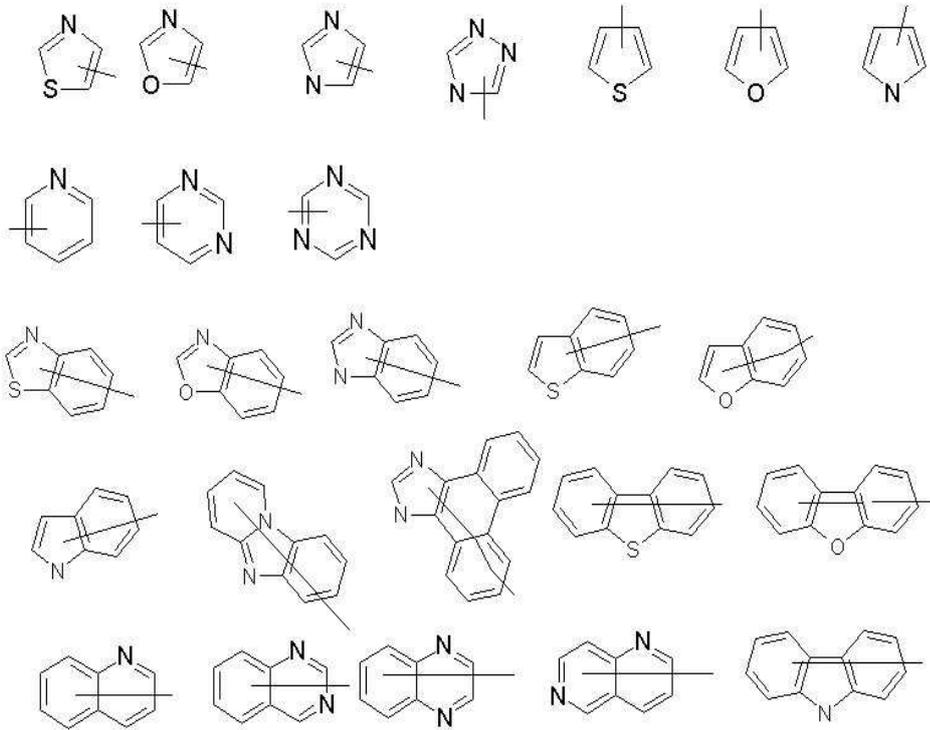
[0054] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1은 CR4이며, Z3은 CR5이고, Z5 내지 Z8은 CR'이며, R4 및 R5는 각각 독립적으로 비치환된 아릴기일 수 있다.

- [0055] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1은 CR4이며, Z3은 CR5이고, Z5 내지 Z8은 CR'이며, R4 및 R5는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 또는 안트라세닐기일 수 있다.
- [0056] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1은 CR4이며, Z3은 CR5이고, Z5 내지 Z8은 CR'이며, R4 및 R5는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기 또는 나프틸기일 수 있다.
- [0057] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1은 CR4이며, Z3은 CR5이고, Z5 내지 Z8은 CR'이며, R'는 수소이고, R4 및 R5는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 또는 안트라세닐기일 수 있다.
- [0058] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1은 CR4이며, Z3은 CR5이고, Z5 내지 Z8은 CR'이며, R'는 수소이고, R4 및 R5는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기 또는 나프틸기일 수 있다.
- [0059] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z5와 Z7은 N이고, Z6은 CR6이며, Z8은 CR7이고, Z1 내지 Z4는 CR'이며, R6 및 R7는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다.
- [0060] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z5와 Z7은 N이고, Z6은 CR6이며, Z8은 CR7이고, Z1 내지 Z4는 CR'이며, R6 및 R7는 각각 독립적으로 비치환된 아릴기일 수 있다.
- [0061] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z5와 Z7은 N이고, Z6은 CR6이며, Z8은 CR7이고, Z1 내지 Z4는 CR'이며, R6 및 R7는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 또는 안트라세닐기일 수 있다.
- [0062] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z5와 Z7은 N이고, Z6은 CR6이며, Z8은 CR7이고, Z1 내지 Z4는 CR'이며, R6 및 R7는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기 또는 나프틸기일 수 있다.
- [0063] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z5와 Z7은 N이고, Z6은 CR6이며, Z8은 CR7이고, Z1 내지 Z4는 CR'이며, R'는 수소이고, R6 및 R7는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 또는 안트라세닐기일 수 있다.
- [0064] 상기 화학식 3 내지 8에서, Z5와 Z7은 N이고, Z6은 CR6이며, Z8은 CR7이고, Z1 내지 Z4는 CR'이며, R'는 수소이고, R6 및 R7는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기 또는 나프틸기일 수 있다.
- [0065] 상기 화학식 3 및 5에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1, Z3 및 Z5 내지 Z8은 CR'일 수 있다.
- [0066] 상기 화학식 3 및 5에서, Z5와 Z7은 N이고, Z1 내지 Z4, Z6 및 Z8은 CR'일 수 있다.
- [0067] 상기 화학식 3 및 5에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1은 CR4이며, Z3은 CR5이고, Z5 내지 Z8은 CR'이며, R4 및 R5는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다.
- [0068] 상기 화학식 3 및 5에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1은 CR4이며, Z3은 CR5이고, Z5 내지 Z8은 CR'이며, R4 및 R5는 각각 독립적으로 비치환된 아릴기일 수 있다.
- [0069] 상기 화학식 3 및 5에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1은 CR4이며, Z3은 CR5이고, Z5 내지 Z8은 CR'이며, R4 및 R5는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 또는 안트라세닐기일 수 있다.
- [0070] 상기 화학식 3 및 5에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1은 CR4이며, Z3은 CR5이고, Z5 내지 Z8은 CR'이며, R4 및 R5는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기 또는 나프틸기일 수 있다.
- [0071] 상기 화학식 3 및 5에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1은 CR4이며, Z3은 CR5이고, Z5 내지 Z8은 CR'이며, R'는 수소이고, R4 및 R5는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 또는 안트라세닐기일 수 있다.
- [0072] 상기 화학식 3 및 5에서, Z2와 Z4는 N이고, Z1은 CR4이며, Z3은 CR5이고, Z5 내지 Z8은 CR'이며, R'는 수소이고, R4 및 R5는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기 또는 나프틸기일 수 있다.
- [0073] 상기 화학식 4, 6, 7 및 8에서, Z5와 Z7은 N이고, Z6은 CR6이며, Z8은 CR7이고, Z1 내지 Z4는 CR'이며, R6 및 R7는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다.
- [0074] 상기 화학식 4, 6, 7 및 8에서, Z5와 Z7은 N이고, Z6은 CR6이며, Z8은 CR7이고, Z1 내지 Z4는 CR'이며, R6 및 R7는 각각 독립적으로 비치환된 아릴기일 수 있다.
- [0075] 상기 화학식 4, 6, 7 및 8에서, Z5와 Z7은 N이고, Z6은 CR6이며, Z8은 CR7이고, Z1 내지 Z4는 CR'이며, R6 및 R7는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 또는 안트라세닐기일 수 있다.
- [0076] 상기 화학식 4, 6, 7 및 8에서, Z5와 Z7은 N이고, Z6은 CR6이며, Z8은 CR7이고, Z1 내지 Z4는 CR'이며, R6 및 R7는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기 또는 나프틸기일 수 있다.

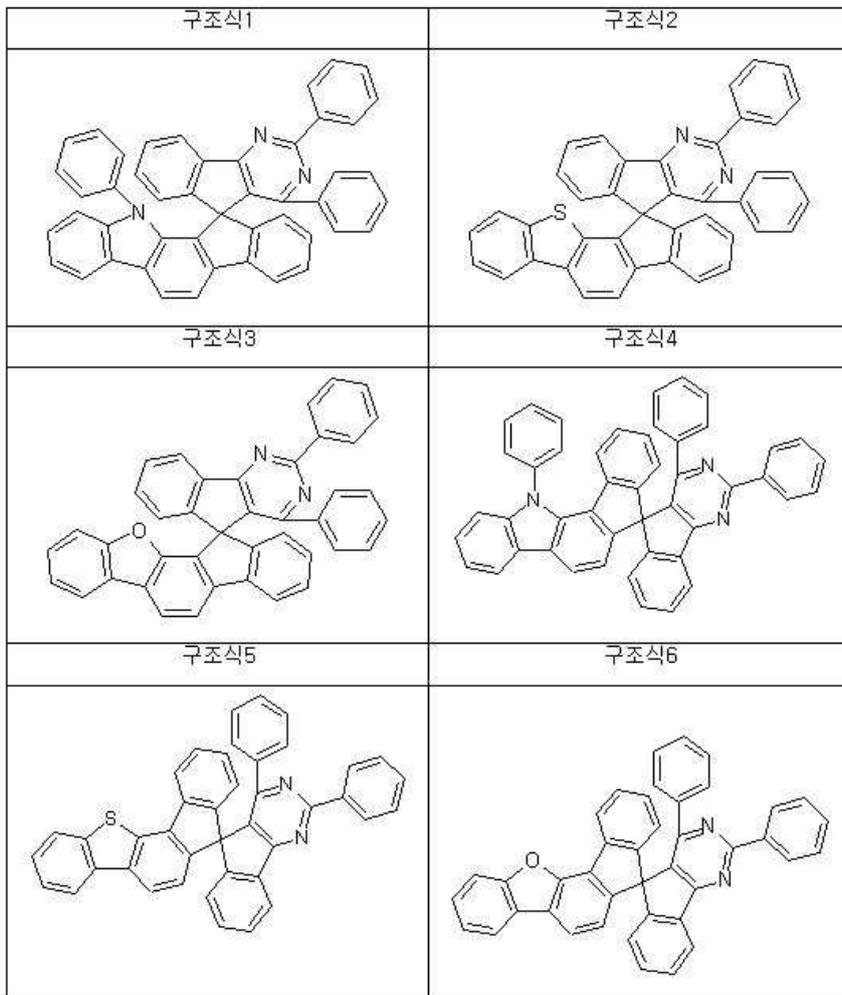
- [0077] 상기 화학식 4, 6, 7 및 8에서, Z5와 Z7은 N이고, Z6은 CR6이며, Z8은 CR7이고, Z1 내지 Z4는 CR'이며, R'는 수소이고, R6 및 R7는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기 또는 안트라세닐기일 수 있다.
- [0078] 상기 화학식 4, 6, 7 및 8에서, Z5와 Z7은 N이고, Z6은 CR6이며, Z8은 CR7이고, Z1 내지 Z4는 CR'이며, R'는 수소이고, R6 및 R7는 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기 또는 나프틸기일 수 있다.
- [0079] 본 명세서의 일 실시상태에서, R1, R2 및 R3 중 어느 하나는 수소일 수 있다.
- [0080] 본 명세서의 일 실시상태에서, R1, R2 및 R3은 수소일 수 있다.
- [0081] 본 명세서에 따른 화합물에 있어서, 상기 화학식 1의 치환기들을 보다 구체적으로 설명하면 하기와 같다.
- [0082] 본 명세서에 있어서, 상기 할로젠기로는 불소, 염소, 브롬, 요오드 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [0083] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 12인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기 등이 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [0084] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 특히 시클로펜틸기, 시클로헥실기가 바람직하다.
- [0085] 본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있으며, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 2 내지 12인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 부테닐기; 펜테닐기; 또는 스티베닐기(stylybenyl), 스티레닐기(styrenyl) 등의 아릴기가 연결된 알케닐기가 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [0086] 본 명세서에 있어서, 상기 알콕시기는 탄소수 1 내지 12인 것이 바람직하고, 보다 구체적으로 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [0087] 본 명세서에 있어서, 상기 아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 6 내지 40인 것이 바람직하다. 단환식 아릴기의 예로는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 스티벤 등을 들 수 있고, 다환식 아릴기의 예로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페나트렌기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오렌기 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [0088] 본 명세서에 있어서, 플루오렌기는 2개의 고리 유기화합물이 1개의 원자를 통하여 연결된 구조로서, 예로는
- 
- 등이 있다.
- [0089] 본 명세서에 있어서, 플루오렌기는 열린 플루오렌기의 구조를 포함하며, 여기서 열린 플루오렌기는 2개의 고리 화합물이 1개의 원자를 통하여 연결된 구조에서 한쪽 고리 화합물이 연결이 끊어진 상태의 구조로서, 예로는
- 
- 등이 있다.
- [0090] 본 명세서에 있어서, 알킬 아민기는 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 내지 30인 것이 바람직하다. 알킬 아민기의 구체적인 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 에틸아민기, 디에틸아민기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0091] 본 명세서에 있어서, 아릴 아민기는 치환기로 아릴기를 갖는 아민기이며, 그 예로는 치환 또는 비치환된 단환식의 디아릴아민기, 치환 또는 비치환된 다환식의 디아릴아민기 또는 치환 또는 비치환된 단환식 및 다환식의 디아릴아민기일 수 있다. 예를 들면, 페닐아민기, 나프틸아민기, 비페닐아민기, 안트라세닐아민기, 디페닐아민기, 페닐나프틸아민기, 디톨릴아민기, 페닐톨릴아민기, 트리페닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0092] 본 명세서에 있어서, 헤테로 고리기는 이종원자로 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 헤테로 고리기로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 헤테로 고리기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 트리아진기, 아크리딘기, 피리다진기, 퀴놀리딘기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈이미다

졸기, 벤즈티아졸기, 벤즈카바졸기, 벤즈티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤즈퓨라닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

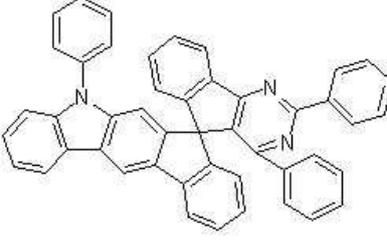
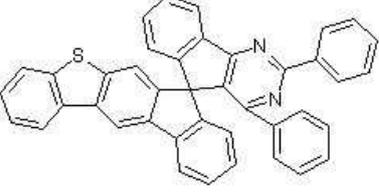
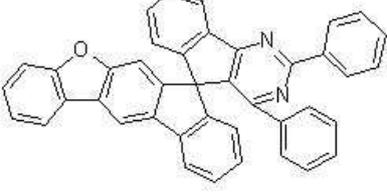
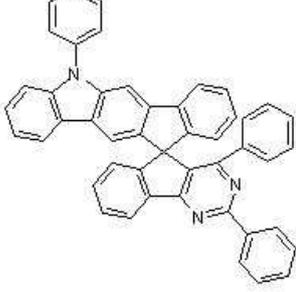
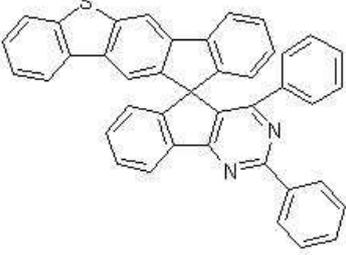
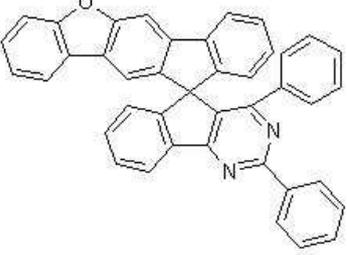
[0093] 구체적으로, 상기 헤테로고리기는, 하기 구조식과 같은 화합물들이 바람직하나, 이에만 한정되는 것은 아니다.



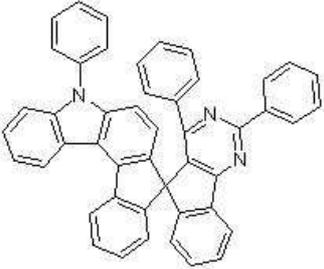
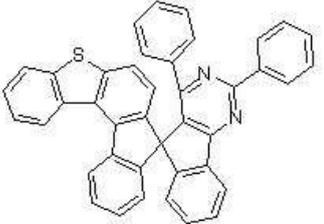
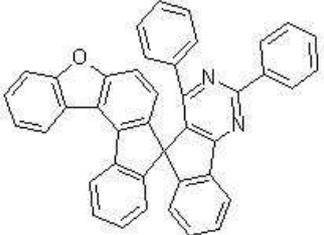
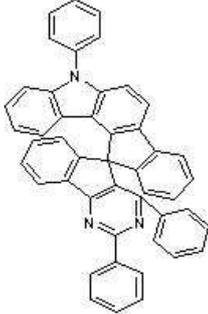
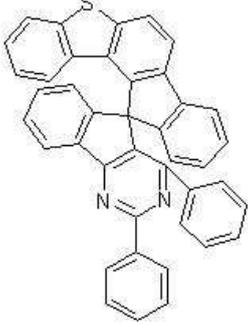
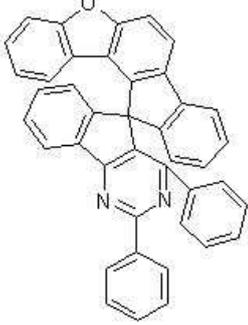
- [0094]
- [0095] 본 명세서에 있어서, 아릴옥시기, 아릴티옥시기, 아릴술폭시기 및 아랄킬아민기종의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다.
- [0096] 본 명세서에 있어서, 알킬티옥시기, 알킬술폭시기, 알킬아민기 및 아랄킬아민기 중의 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다.
- [0097] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민기 중의 헤테로 아릴기는 전술한 헤테로고리기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [0098] 본 명세서에 있어서, 탄화수소 고리기는 탄소 및 수소만으로 구성된 고리기이며, 특별히 한정되지 않는다. 예를 들면, 상기 탄화수소 고리기는 지방족 탄화수소 고리기, 탄소 및 수소만으로 구성된 플루오렌기 또는 방향족 탄화수소 고리기일 수 있다. 이때 지방족 탄화수소 고리기는 전술한 시클로알킬기의 예시 중에서 선택될 수 있고, 상기 방향족 탄화수소 고리기는 전술한 아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [0099] 본 명세서에 있어서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소, 할로겐기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 실릴기, 아릴알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 카바졸기, 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 및 니트릴기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 비페닐기일 수 있다. 즉, 비페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다.
- [0100] 본 명세서에 있어서, "인접한" 기는 해당 치환기가 치환된 원자와 직접 연결된 원자에 치환된 치환기, 해당 치환기와 입체구조적으로 가장 가깝게 위치한 치환기, 또는 해당 치환기가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기를 의미할 수 있다. 예컨대, 벤젠고리에서 오쏘(ortho)위치로 치환된 2개의 치환기 및 지방족 고리에서 동일 탄소에 치환된 2개의 치환기는 서로 "인접한" 기로 해석될 수 있다.
- [0101] 본 명세서에 있어서, 인접하는 기로 서로 결합하여 형성된 "단환식 또는 다환식의 고리"는 탄화수소 고리 또는 헤테로 고리일 수 있다.
- [0102] 본 명세서의 일 실시상태에서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 1 내지 54 중 어느 하나로 표시될 수 있다.



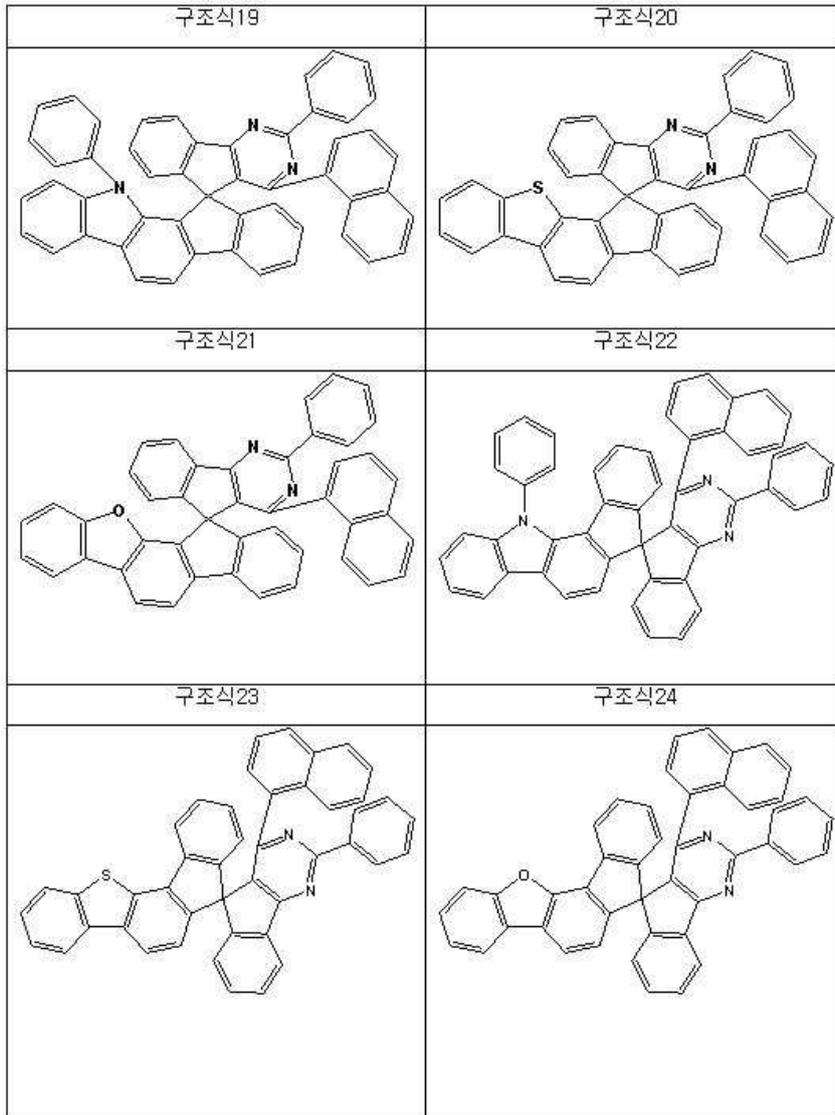
[0103]

구조식7	구조식8
	
구조식9	구조식10
	
구조식11	구조식12
	

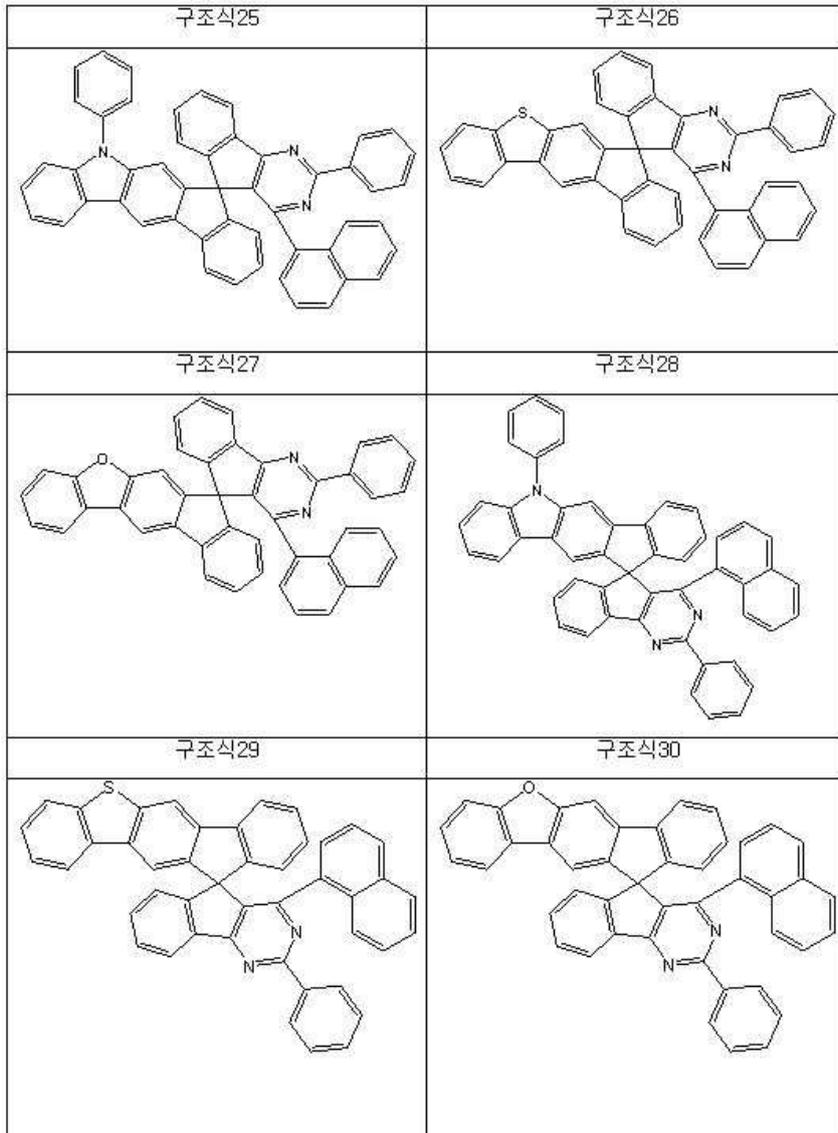
[0104]

구조식13	구조식14
	
구조식15	구조식16
	
구조식17	구조식18
	

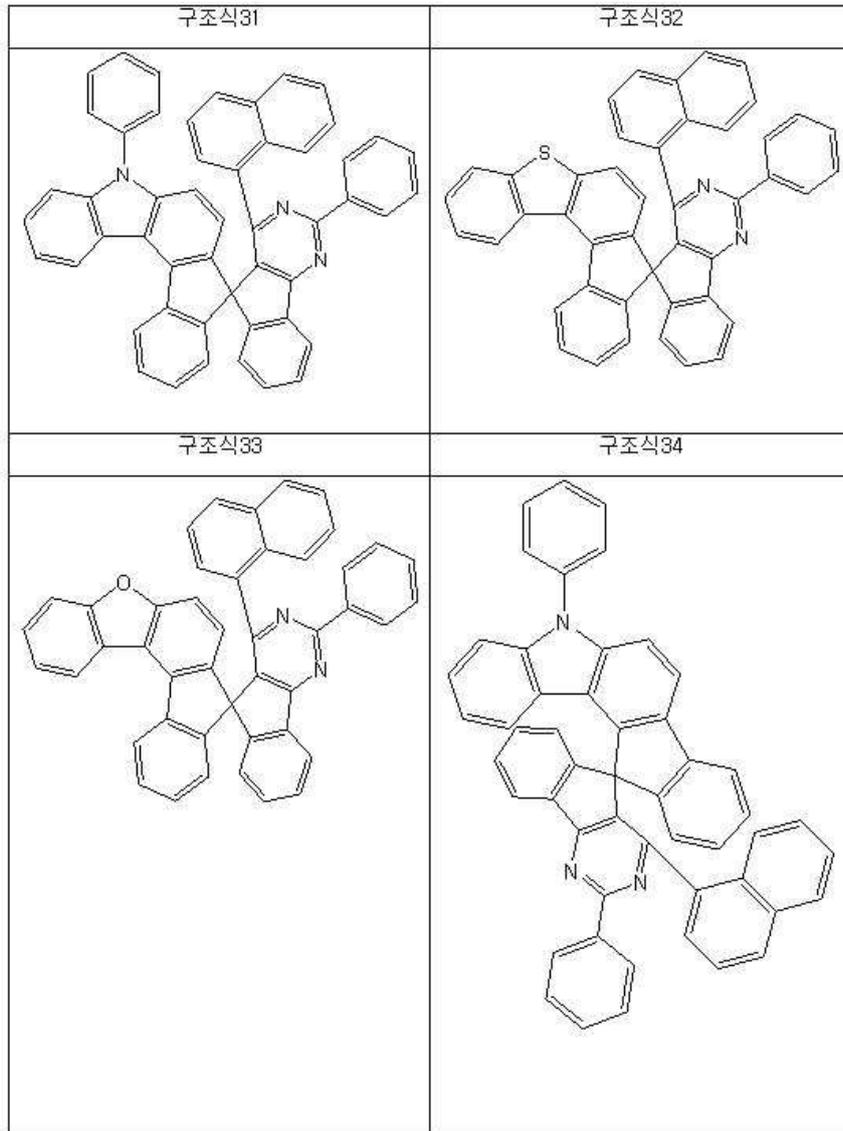
[0105]



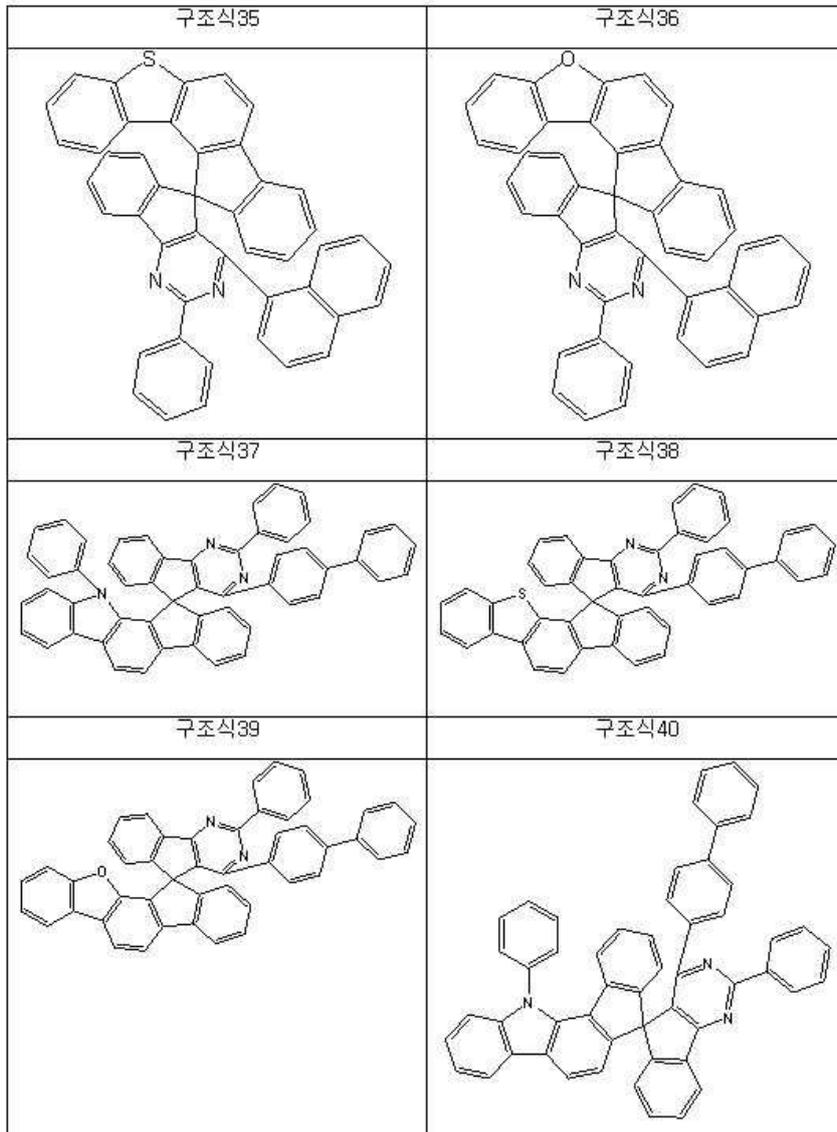
[0106]



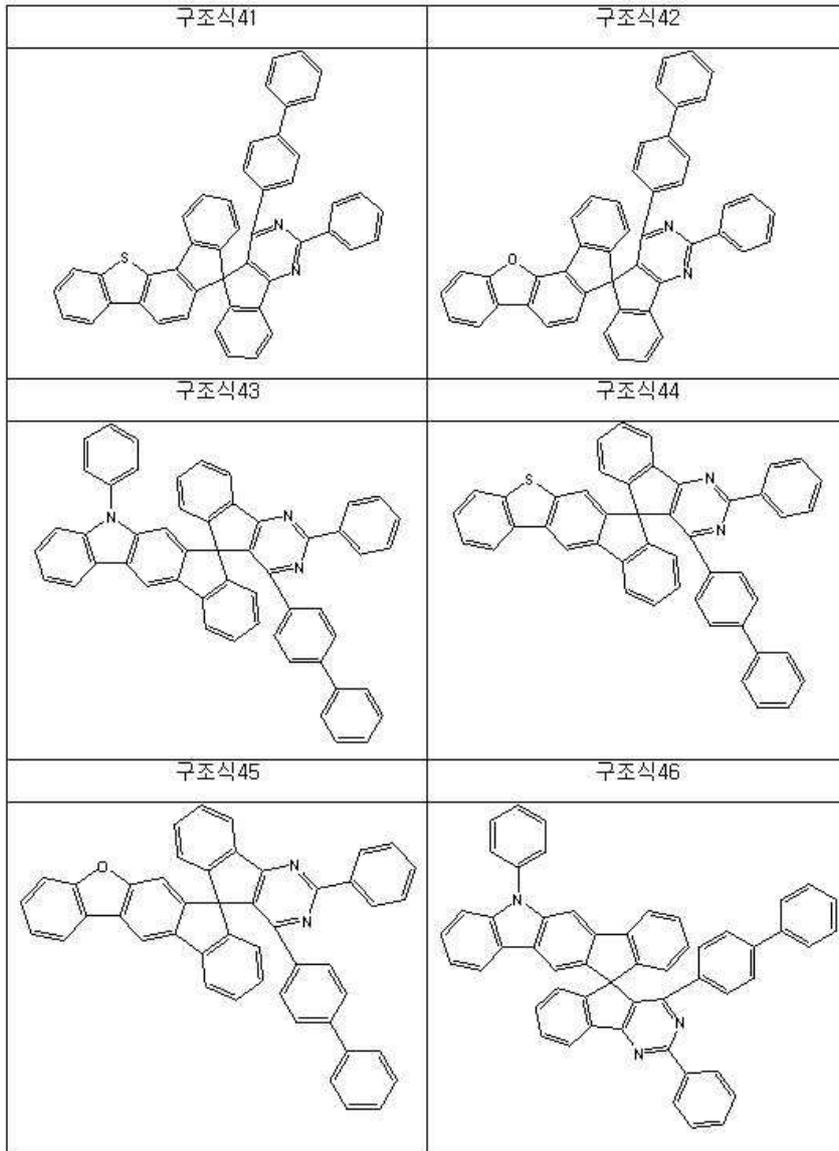
[0107]



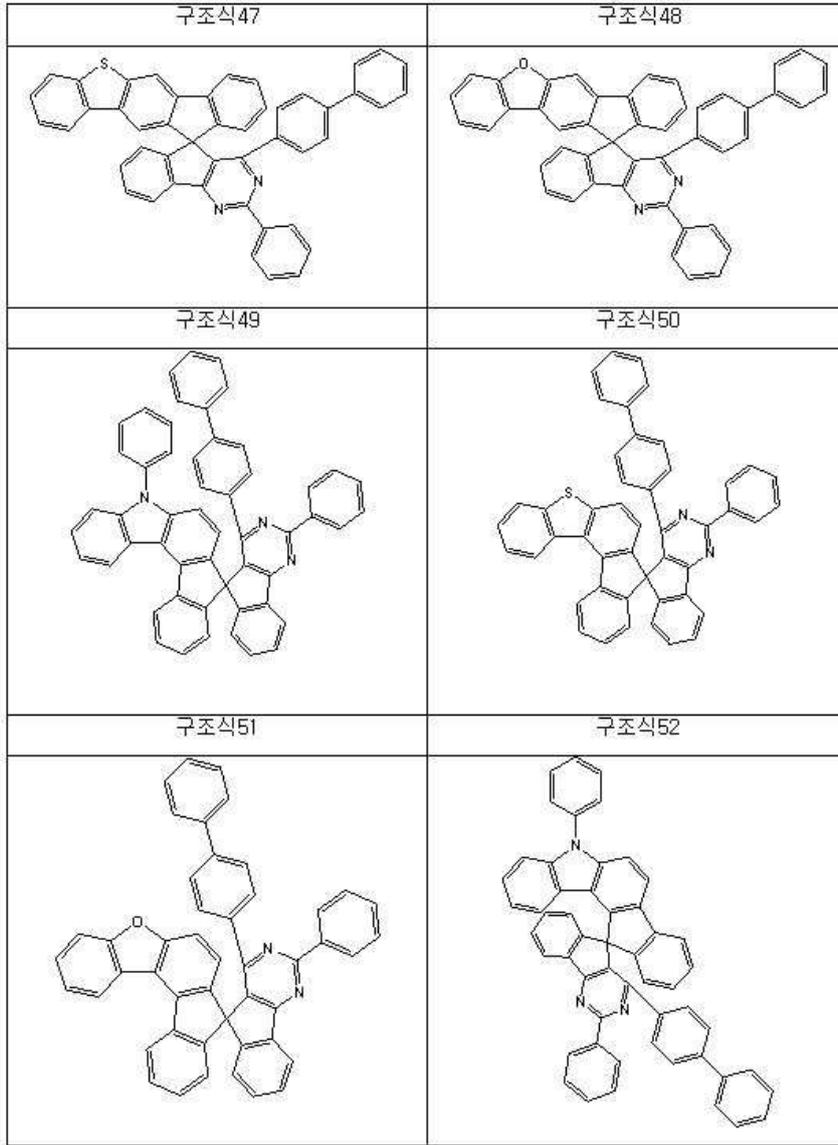
[0108]



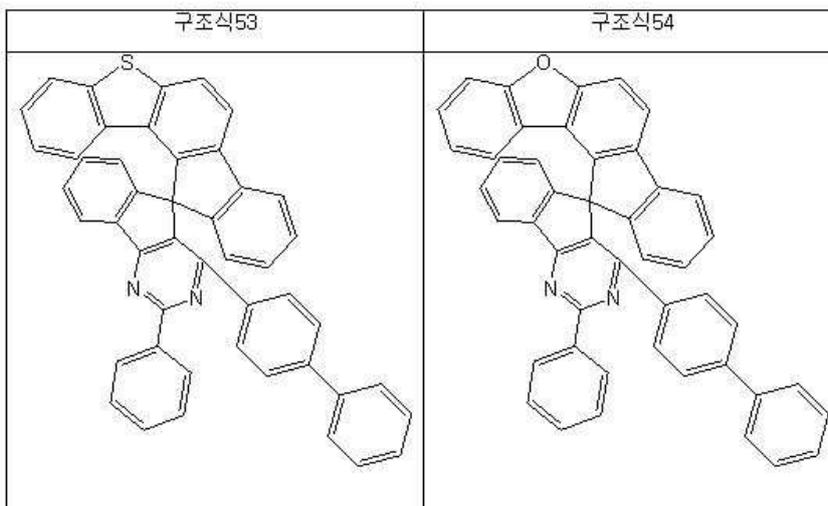
[0109]



[0110]



[0111]



[0112]

[0113] 본 명세서에 따른 신규한 화합물은 열적 안정성이 우수한 장점이 있다.

[0114] 본 명세서에 따른 신규한 화합물은 깊은 최고준위 점유 분자궤도(HOMO)를 갖는 장점이 있다.

- [0115] 본 명세서에 따른 신규한 화합물은 높은 삼중항(triplet) 상태를 갖는 장점이 있다.
- [0116] 본 명세서에 따른 신규한 화합물은 정공 안정성을 갖는 장점이 있다.
- [0117] 본 명세서에 따른 신규한 화합물은 발광 소자를 비롯한 유기 전자 소자에서 순수하게 사용하거나, 불순물을 섞어 사용이 가능하다.
- [0118] 또한, 상기 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 에너지 밴드갭을 미세하게 조절이 가능하게 하며, 한편으로 유기물 사이에서의 계면에서의 특성을 향상되게 하며 물질의 용도를 다양하게 할 수 있다.
- [0119] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유리 전이 온도(Tg)가 높아 열적 안정성이 우수하다. 이러한 열적 안정성의 증가는 소자에 구동 안정성을 제공하는 중요한 요인이 된다.
- [0120] 본 명세서에 따른 유기 전자 소자는 광효율이 향상되고, 높은 열적 안정성에 의하여 소자의 수명 특성을 향상시키는 장점이 있다.
- [0121] 또한, 본 명세서에 따른 유기 전자 소자는 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전자 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [0122] 유기 전자 소자의 예로는 유기 발광 소자, 유기 태양전지, 유기 감광체(OPC), 유기 트랜지스터 등이 있으나, 이에만 한정되지 않는다.
- [0123] 본 명세서의 유기 전자 소자는 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 이용하여 한 층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기 전자 소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- [0124] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 전자 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥 코팅, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.
- [0125] 본 명세서의 유기 전자 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 명세서의 유기 전자 소자는 유기물층으로서 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 유기 전자 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층을 포함할 수 있다.
- [0126] 따라서, 본 명세서의 유기 전자 소자에서, 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 정공 수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0127] 또한, 상기 유기물층은 발광층을 포함할 수 있고, 상기 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0128] 또한, 상기 유기물층은 전자 차단층, 전자 수송층, 전자 주입층, 및 전자 수송 및 전자 주입을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0129] 이와 같은 다층 구조의 유기물층에서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층, 정공 수송/전자 차단층을 동시에 하는 층, 정공 주입/정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 또는 전자 수송과 발광을 동시에 하는 층 등에 포함될 수 있다.
- [0130] 또한, 본 명세서의 화합물은 유기 전자 소자에서 유기물층 물질, 특히 발광층, 전자 수송층 등으로 사용될 수 있다.
- [0131] 본 명세서에 따른 유기 전자 소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 물리증착법(PVD, physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 전자 소자를 만들 수도 있다.
- [0132] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 명세

서에서 사용될 수 있는 양극 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[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리 아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0133] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 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.

[0134] 상기 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입 받을 수 있는 물질로서, 정공 주입 물질의 최고준위 점유 분자궤도(HOMO, highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 최고준위 점유 분자궤도 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리화합물의 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0135] 상기 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 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.

[0136] 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<sub>3</sub>); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAQ; 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.

[0137] 상기 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; AlQ<sub>3</sub>를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0138] 본 명세서에 따른 유기 전자 소자는 유기 발광 소자일 수 있다.

[0139] 본 명세서에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0140] 예컨대, 본 명세서의 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 도 2에 나타난 것과 같은 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[0141] 도 1에는 기관(1) 위에 양극(2), 발광층(3) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화합물은 상기 발광층(3)에 포함될 수 있다.

[0142] 도 2에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7), 전자 수송층(8) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화합물은 상기 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7) 또는 전자 수송층(8)에 포함될 수 있다.

[0143] 본 명세서의 일 구현예에 따른 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층에 사용될 수 있고, 더욱 구체적으로 발광층 또는 전자 수송층에 사용될 수 있다.

[0144] 본 명세서에 따른 유기 태양 전지는 제1 전극과 제2 전극 및 이 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 구조로 이루어질 수 있으며, 유기물층으로서 정공 수송층, 광활성층, 전자 수송층을 포함할 수 있다. 본 명세서의 일 구현예에 따른 화합물은 유기 태양 전지의 유기물층에 사용될 수 있고, 더욱 구체적으로 광활성층 또는 전자 수송층에 사용될 수 있다.

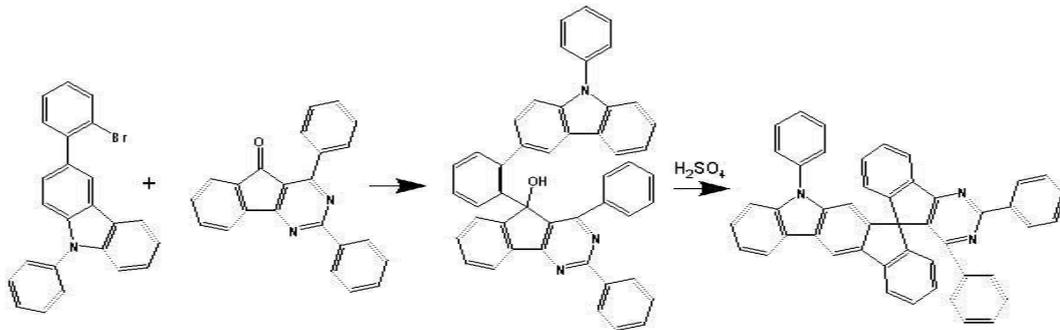
[0145] 본 명세서에 따른 유기 감광체는 도전성 기재, 전자 수송물질을 포함하는 전하 수송층, 전하생성층을 포함할 수 있다. 본 명세서의 일 구현예에 따른 화합물은 유기 감광체의 전하 수송층에 사용될 수 있다.

[0146] 본 명세서에 따른 유기 트랜지스터는 제1 전극, 제2 전극, 정공 주입층, 유기 박막층, 전자 주입층, 전자 수송층 등을 포함할 수 있다. 본 명세서의 일 구현예에 따른 화합물은 유기 트랜지스터의 전자 수송층에 사용될 수 있다.

[0147] 상기 화학식 1의 화합물의 제조방법 및 이들을 이용한 유기 전자 소자의 제조는 이하의 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나, 하기 실시예는 본 명세서를 예시하기 위한 것이며, 본 명세서의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0148] [실시예]

[0149] <제조예 1> 구조식 7의 제조



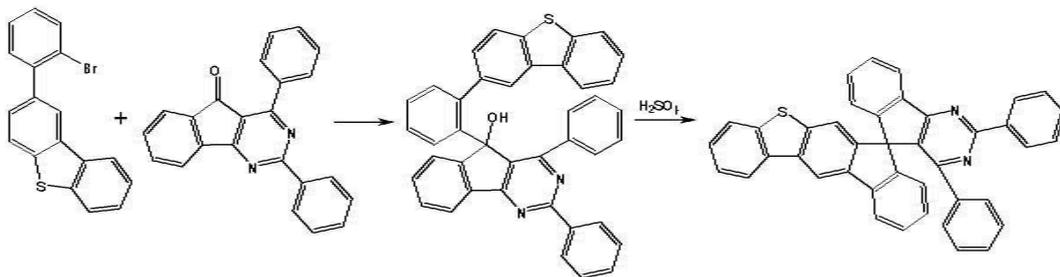
[0150] [화합물 A] [화합물 B] [화합물 C] [구조식 7]

[0152] 화합물 A(20.0g, 50.4mmol)에 테트라하이드로퓨란 (THF, Tetrahydrofuran) (200mL)를 넣고 -78℃로 냉각했다. 2.5M n-부틸리튬(n-BuLi)(20.1ml, 50.4mmol)을 투입한 후 -78℃에서 1시간 동안 교반했다. 화합물 B(15.3g, 45.8mmol)를 투입한 후 -78℃에서 30분 동안 교반한 후 상온으로 승온했다. 염화암모늄 수용액(aq NH<sub>4</sub>Cl)(50ml)을 첨가한 후 유기층을 분리했다. 유기층을 가압증류한 후 실리카 겔(silica gel)에 흡착하고 컬럼하여 화합물 C (19.1 g, 58 %)를 얻었다.

[0153] 화합물 C (19.1g, 29.2mmol), 아세트산(Acetic acid)(200ml) 및 농축 황산(conc. H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) (0.1ml)을 혼합한 후 5 시간 동안 환류(reflux)했다. 상온으로 냉각한 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 실리카 겔(silica gel)에 흡착하고 컬럼하여 구조식 7 (3.2 g, 17 %)을 얻었다.

[0154] MS: [M+H]<sup>+</sup> = 635

[0155] <제조예 2> 구조식 8의 제조



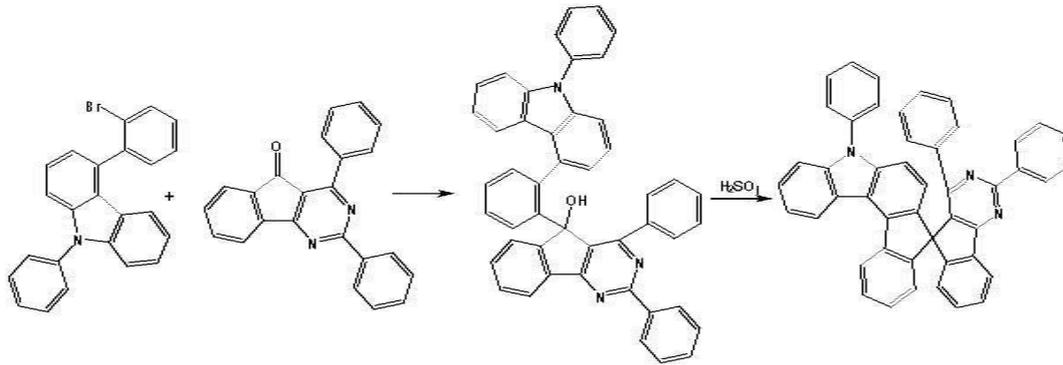
[0156] [화합물 D] [화합물 B] [화합물 E] [구조식 8]

[0158] 화합물 D (20.0g, 59.2mmol)에 테트라하이드로퓨란 (200mL)를 넣고 -78℃로 냉각했다. 2.5M n-부틸리튬 (23.7ml, 59.2mmol)을 투입한 후 -78℃에서 1시간 동안 교반했다. 화합물 B (18.0g, 53.8mmol)를 투입한 후 -78℃에서 30분 동안 교반하고 상온으로 승온했다. 염화암모늄 수용액 (50ml)을 첨가한 후 유기층을 분리했다. 유기층을 가압증류한 후 실리카 겔(silica gel)에 흡착하고 컬럼하여 화합물 E (22.2 g, 63 %)를 얻었다.

[0159] 화합물 E(22.2g, 37.3mmol), 아세트산 (200ml) 및 농축 황산 (0.1ml)을 혼합한 후 5시간 동안 환류했다. 상온으로 냉각한 후 생성된 고체를 여과했다. 고체를 실리카 겔(silica gel)에 흡착하고 컬럼하여 구조식 8 (9.7 g, 45 %)을 얻었다.

[0160] MS:  $[M+H]^+ = 576$

[0161] <제조예 3> 구조식 14의 제조



[0162] [화합물 F] [화합물 B] [화합물 G] [구조식 14]

[0163] 화합물 F (20.0g, 50.4mmol)에 테트라하이드로퓨란 (200mL)를 넣고 -78℃로 냉각했다. 2.5M n-부틸리튬 (20.1ml, 50.4mmol)를 투입한 후 -78℃에서 1시간 동안 교반했다. 화합물 B (15.3g, 45.8mmol)를 투입한 후 -78℃에서 30분 동안 교반하고 상온으로 승온했다. 염화암모늄 수용액 (50ml)을 첨가한 후 유기층을 분리했다. 유기층을 가압증류한 후 실리카 겔(silica gel)에 흡착하고 컬럼하여 화합물 G (17.8 g, 54 %)를 얻었다.

[0164] 화합물 G(17.8g, 27.2mmol), 아세트산 (200ml) 및 농축 황산 (0.1ml)을 혼합한 후 5시간 동안 환류했다. 상온으로 냉각한 후 생성된 고체를 여과했다. 고체를 실리카 겔(silica gel)에 흡착하고 컬럼하여 구조식14 (8.1 g, 47 %)를 얻었다.

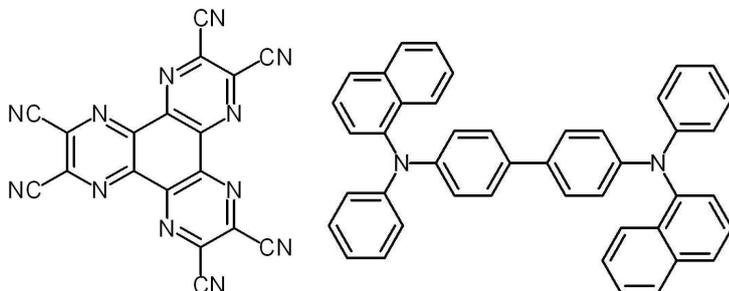
[0165] MS:  $[M+H]^+ = 635$

[0166] <실시에 1>

[0167] 산화인듐주석(ITO, indium tin oxide)이 500Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척했다. 이때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀리포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용했다. 산화인듐주석을 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행했다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

[0168] 이렇게 준비된 산화인듐주석 투명 전극 위에 하기 화학식의 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(hexanitriple hexaazatriphenylene; HAT)을 500 Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성했다.

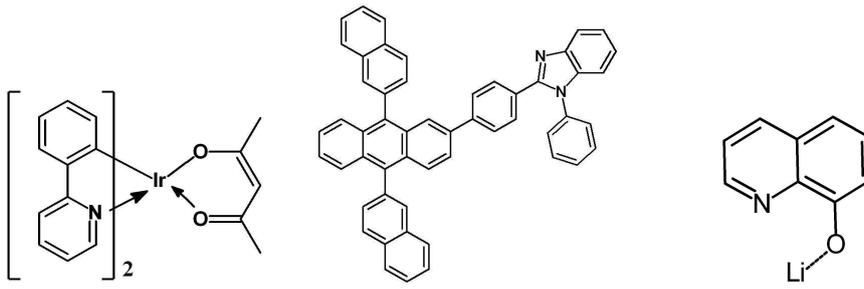
[0169] [HAT] [NPB]



[0170] 상기 정공주입층 위에 상기 화학식의 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB) (250Å), 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(HAT) (50Å) 및 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노] 비페닐(NPB) (400Å)을 순차적으로 진공 증착하여 정공 수송층을 형성했다.

[0171] 이어서, 상기 정공수송층 위에 막 두께 300Å으로 상기 제조한 구조식 7의 화합물과 아래와 같은 도펀트 화합물 GD를 10:1의 중량비로 진공증착하여 발광층을 형성했다.

[0174] [GD] [ET-A] [LiQ]



[0175]

[0176] 상기 발광층 위에 전자수송층물질로써 상기 화학식 ET-A의 화합물과 상기 화학식 리튬 퀴놀린-8-오에이트 (LiQ, Lithium Quinolin-8-olate)를 1:1의 중량비로 진공증착하여 300Å의 두께로 전자 주입 및 수송층을 형성했다.

[0177] 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 15Å 두께로 리튬 플루라이드(LiF)와 1,000Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성했다.

[0178] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4 ~ 0.7 Å/sec를 유지했고, 음극의 리튬플루오라이드는 0.3 Å/sec, 알루미늄은 2 Å/sec의 증착 속도를 유지했으며, 증착시 진공도는  $2 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-8}$  torr를 유지하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0179] <실시예 2>

[0180] 상기 실시예 1의 구조식 7의 화합물 대신, 상기 제조한 구조식 8의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실시예 1 과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

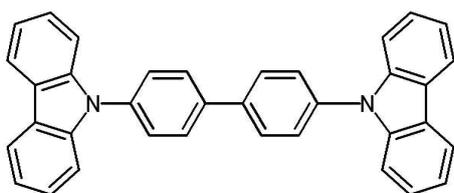
[0181] <실시예 3>

[0182] 상기 실시예 1의 구조식 7의 화합물 대신, 상기 제조한 구조식 14의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실시예 1 과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0183] <비교예 1>

[0184] 상기 실시예 1의 구조식 7의 화합물 대신, 하기 화학식 GH-A의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실시예 1와 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0185] [GH-A]



[0186]

[0187] 상기 실시예 1-3 및 비교예 1에 의해 제작된 유기 발광 소자에 전류( $10 \text{ mA/cm}^2$ )를 인가하였을 때, 하기 표 1의 결과를 얻었다.

표 1

	화합물	전압 (V)	효율 (cd/A)
실시예 1	구조식 7	4.11	59.2
실시예 2	구조식 8	4.55	40.7
실시예 3	구조식 14	4.05	53.5
비교예 1	GH-A	6.10	14.85

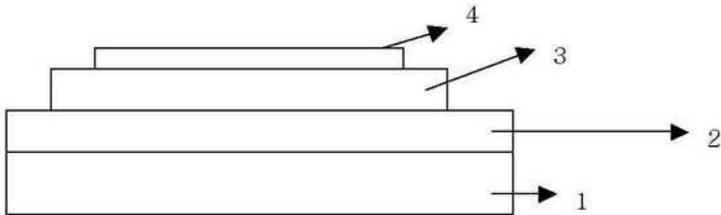
[0188]

[0189]

상기 표 1의 결과로부터, 본 발명에 따른 신규한 화합물은 유기 발광 소자를 비롯한 유기 전자소자의 발광층의 재료로서 사용될 수 있고, 이를 이용한 유기 발광 소자를 비롯한 유기 전자소자는 효율, 구동전압, 안정성 등에서 우수한 특성을 나타냄을 알 수 있다. 특히, 구동전압을 하강시키고, 효율 상승을 유도하여 소비전력을 개선시킬 수 있다.

도면

도면1



도면2

