



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년05월14일
 (11) 등록번호 10-1857250
 (24) 등록일자 2018년05월04일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2011-0045118
 (22) 출원일자 2011년05월13일
 심사청구일자 2016년03월30일
 (65) 공개번호 10-2012-0127683
 (43) 공개일자 2012년11월23일
 (56) 선행기술조사문헌
 KR1020100137243 A*
 KR100810643 B1*
 JP2010138121 A*
 *는 심사관에 의하여 인용된 문헌

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

전체 청구항 수 : 총 19 항

심사관 : 송이화

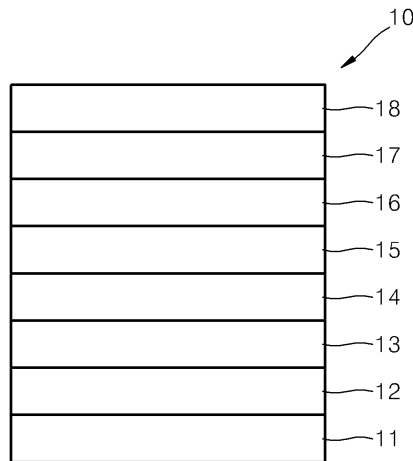
(54) 발명의 명칭 **축합환 화합물, 이를 포함하는 유기 발광 소자 및 평판 표시 장치**

(57) 요약

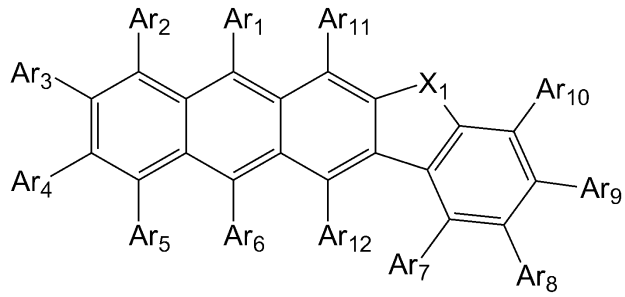
하기 화학식 1을 가지는 축합환 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자 및 평판 표시 장치가 제공된다:

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



<화학식 1>



상기 화학식 1 중, X₁, Ar₁, Ar₂, Ar₃, Ar₄, Ar₅, Ar₆, Ar₇, Ar₈, Ar₉, Ar₁₀, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 발명의 상세한 설명을 참조한다. 상기 화합물을 포함하는 유기층을 구비한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고발광 효율 및 장수명 특성을 가진다.

(72) 발명자

김희연

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

이정인

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

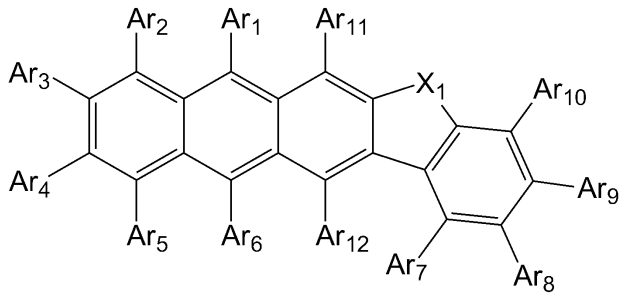
명세서

청구범위

청구항 1

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

<화학식 1>

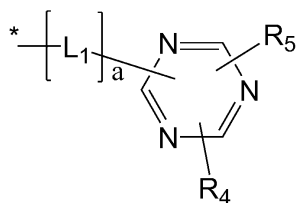


상기 식 중,

X₁은 CR₁R₂, NR₃, O 및 S 중 하나이고;

Ar₁ 내지 Ar₁₂는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 하기 화학식 2로 표시되는 그룹, N(Q₁)(Q₂)로 표시되는 그룹 및 Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q₁ 내지 Q₅는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중 하나이고, Ar₁ 내지 Ar₁₂ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 그룹이며;

<화학식 2>



L₁은 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 2가 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중 하나이고, a는 0 내지 5의 정수이며;

R₁ 내지 R₃는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된

C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중 하나이고,

R₄ 및 R₅는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 인데노안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 비피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기 및 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기 중 하나이고,

R₄ 및 R₅ 중 복수개 존재하는 것들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 X₁이 CR₁R₂인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 X₁이 C(CH₃)(CH₃)인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 R₁ 내지 R₃가 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기(methyl), 치환 또는 비치환된 에틸기(ethyl), 치환 또는 비치환된 프로필기(propyl), 치환 또는 비치환된 부틸기(butyl), 치환 또는 비치환된 펜틸기(pentyl), 치환 또는 비치환된 페닐기(phenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphtyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 피라졸일기(pyrazolyl), 치환 또는 비치환된 피리디닐기(pyridinyl), 치환 또는 비치환된 피라지닐기(pyrazinyl), 치환 또는 비치환된 피리미디닐기(pyrimidinyl) 및 치환 또는 비치환된 피리다지닐기(pyridazinyl) 중 하나인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 Ar₁, Ar₃, Ar₄, Ar₆ 및 Ar₉ 중 적어도 하나가 상기 화학식 2로 표시되는 그룹인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 Ar₂, Ar₅, Ar₇, Ar₈, Ar₁₀, Ar₁₁ 및 Ar₁₂가 수소 원자이고, 상기 Ar₁, Ar₃, Ar₄, Ar₆ 및 Ar₉는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 상기 화학식 2로 표시되는 그룹, N(Q₁)(Q₂)로 표시되는 그룹 및 Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)로 표시

되는 그룹 중 하나이고, 상기 Ar₁, Ar₃, Ar₄, Ar₆ 및 Ar₉ 중 적어도 하나가 상기 화학식 2로 표시되는 그룹인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 Ar₂, Ar₅, Ar₇, Ar₈, Ar₁₀, Ar₁₁ 및 Ar₁₂가 수소 원자이고, 상기 Ar₁, Ar₃, Ar₄, Ar₆ 및 Ar₉는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 헥실기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리다닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸라닐, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기 및 상기 화학식 2로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Ar₁, Ar₃, Ar₄, Ar₆ 및 Ar₉ 중 적어도 하나가 상기 화학식 2로 표시되는 그룹인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 화학식 2 중, L₁이 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인데닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크리세닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기. 치환 또는 비치환된 피세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐렌기 및 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기 중 하나인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 화학식 2 중, a가 0 또는 1인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물.

청구항 10

삭제

청구항 11

제1항에 있어서,

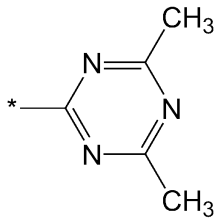
상기 화학식 2 중, R₄ 및 R₅가 서로 동일한 축합환 화합물.

청구항 12

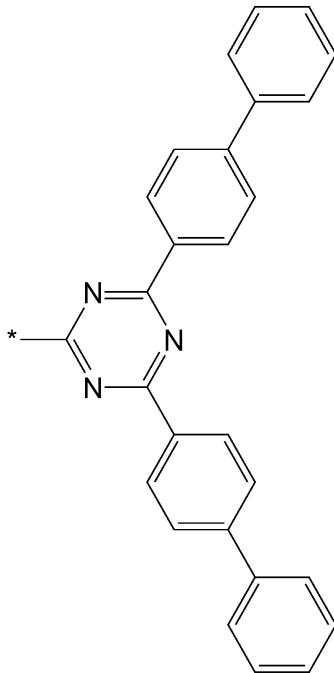
제1항에 있어서,

상기 화학식 2로 표시되는 그룹이 하기 화학식 2A, 2C 내지 2Q, 2Q 및 2R로 표시되는 그룹 중 하나인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물;

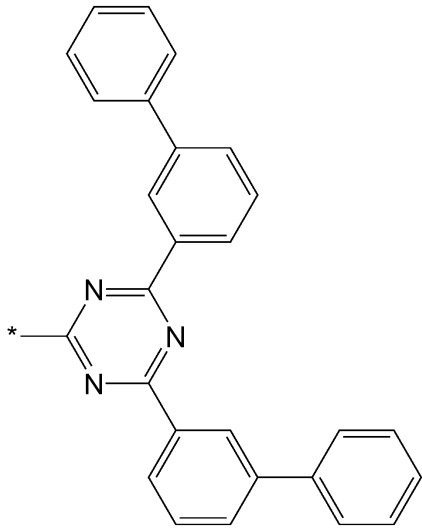
<화학식 2A>



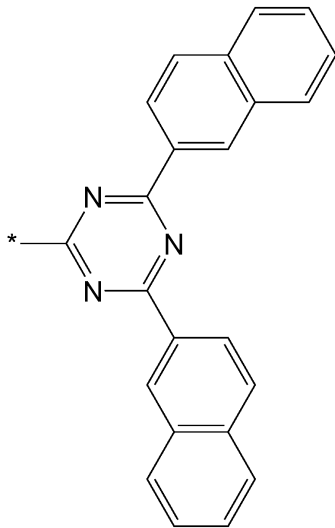
<화학식 2C>



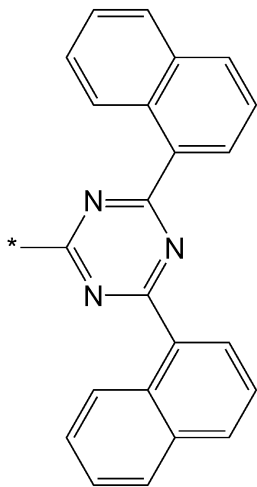
<화학식 2D>



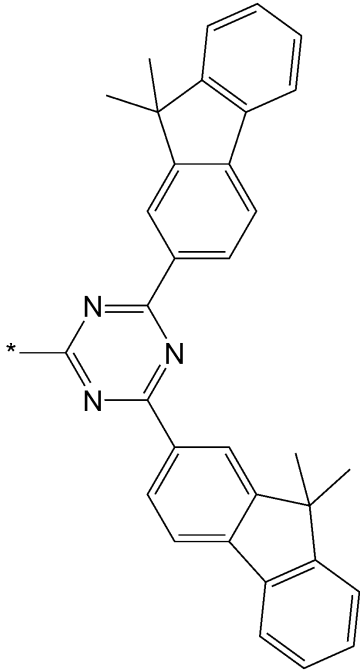
<화학식 2E>



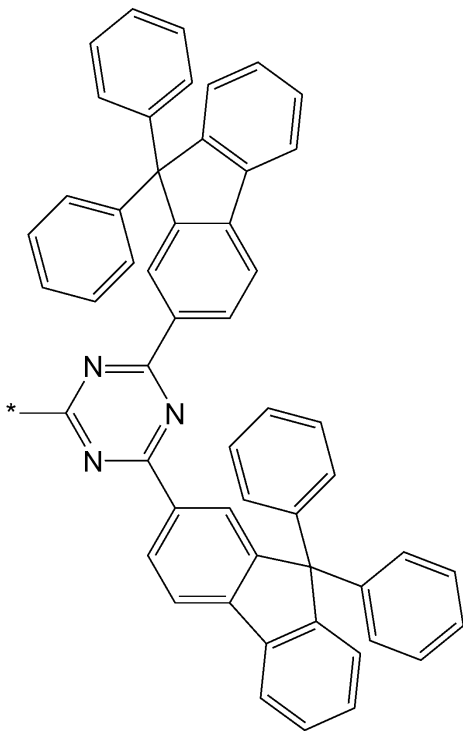
<화학식 2F>



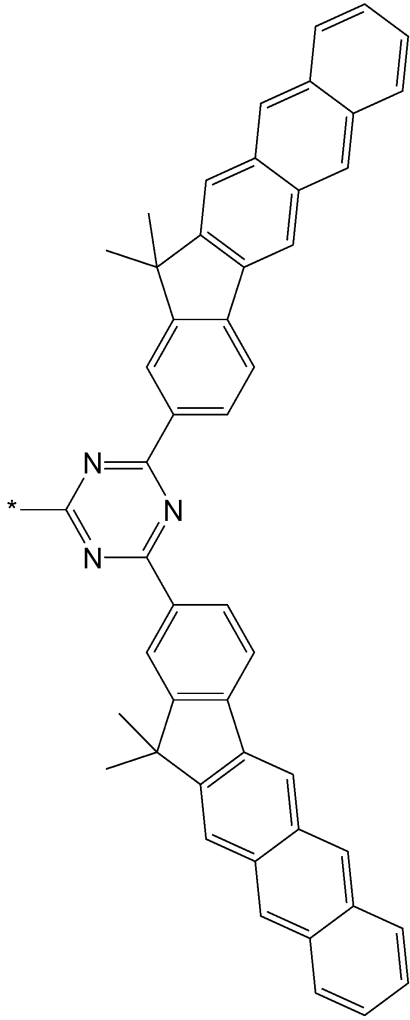
<화학식 2G>



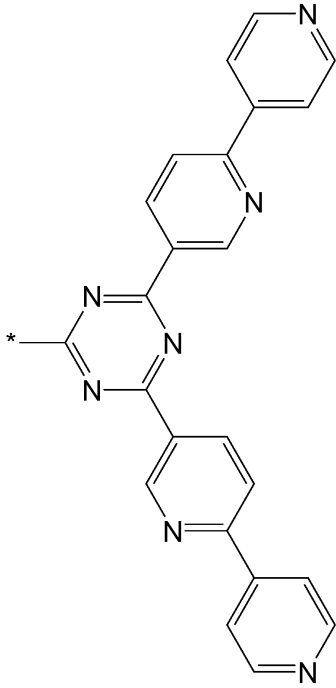
<화학식 2H>



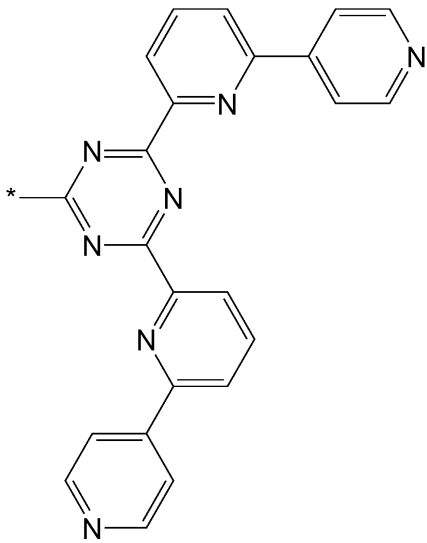
<화학식 21>



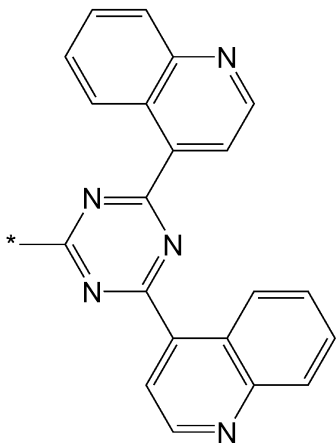
<화학식 2L>



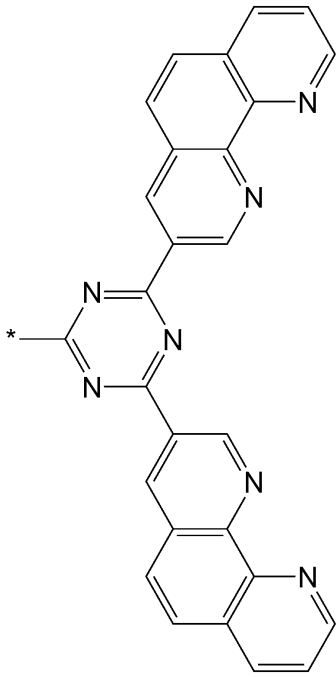
<화학식 2M>



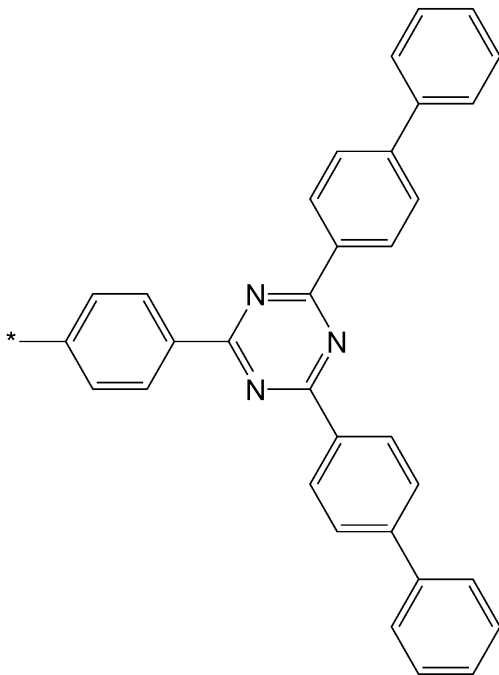
<화학식 2N>



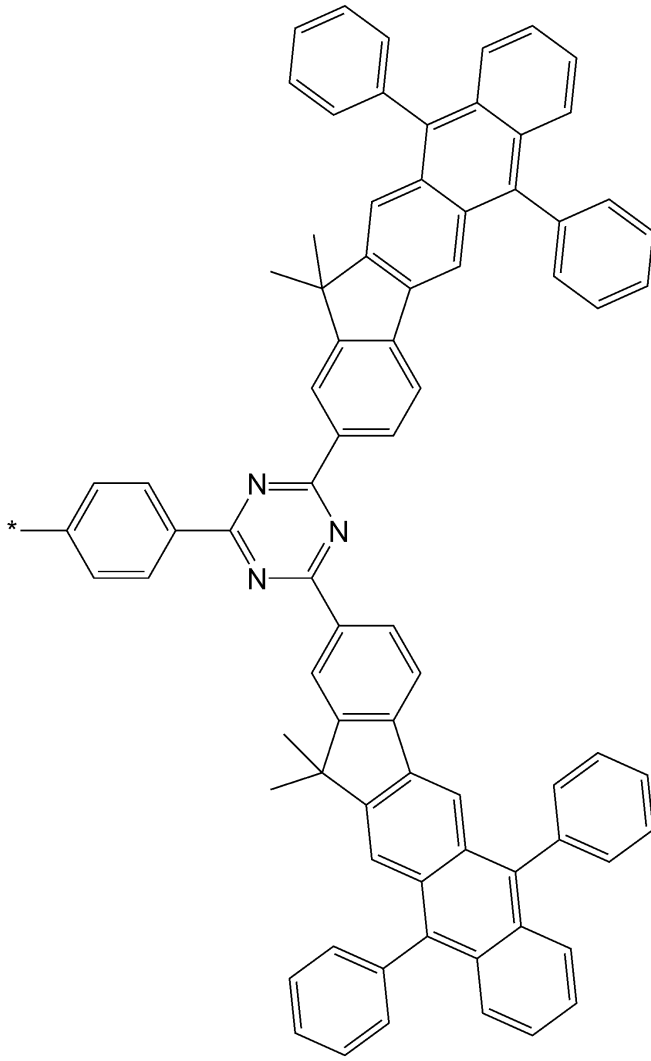
<화학식 20>



<화학식 20>



<화학식 2R>

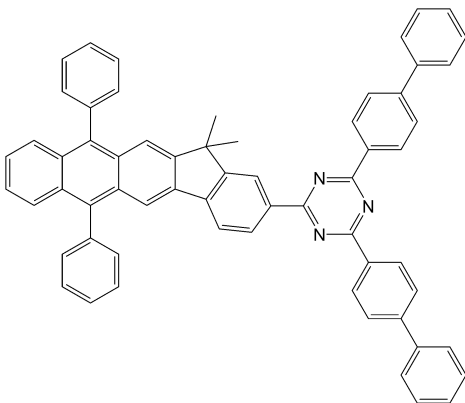


청구항 13

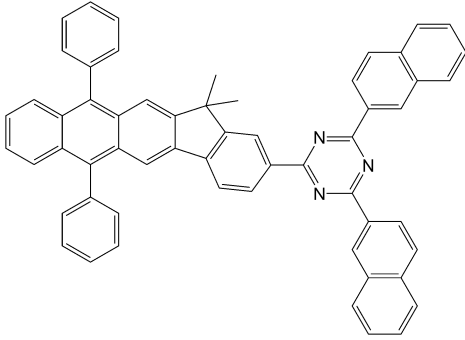
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 하기 화합물 15, 17 및 25로 표시되는 화합물들 중 하나인 것을 특징으로 하는 축합환 화합물:

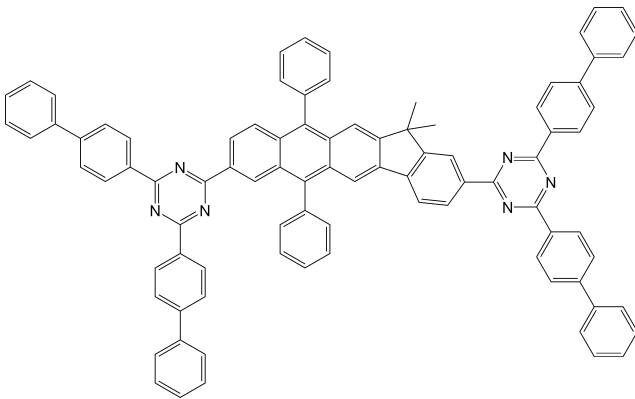
<화합물 15>



<화합물 17>



<화합물 25>



청구항 14

제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

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

상기 유기층이 제1항 내지 제9항 및 제11항 내지 제13항 중 어느 한 항의 축합환 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 15

제14항에 있어서,

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

청구항 16

제14항에 있어서,

상기 유기층이 발광층인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 17

제14항에 있어서,

상기 유기층이 발광층이고, 상기 축합환 화합물이 형광 호스트 또는 인광 호스트로 사용되며, 상기 발광층이 형광 도펀트 또는 인광 도펀트를 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 18

제14항에 있어서,

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

청구항 19

제14항에 있어서,

상기 유기 발광 소자가 제1전극/정공 주입층/발광층/전자 수송층/전자 주입층/제2전극, 제1전극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/전자 주입층/제2전극 또는 제1전극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층/제2전극의 구조를 가지는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 20

소스 전극, 드레인 전극, 게이트 및 활성층을 포함한 트랜지스터 및 제14항의 유기 발광 소자를 구비하고,

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

발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

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

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

[0004] 유기 발광 소자의 구동 원리는 다음과 같다. 애노드 및 캐소드 간에 전압을 인가하면, 애노드로부터 주입된 정공은 정공수송층을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자수송층을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exiton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

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

발명의 내용

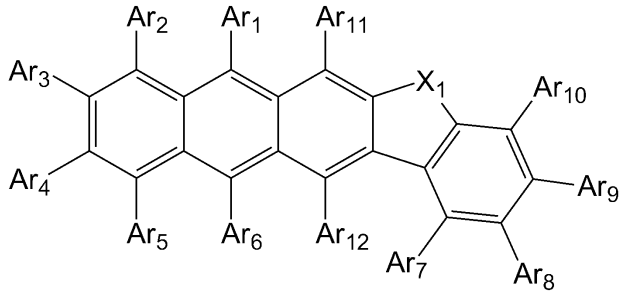
해결하려는 과제

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

과제의 해결 수단

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

[0008] <화학식 1>



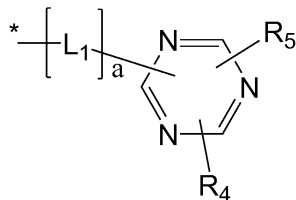
[0009]

[0010]

상기 식 중, X₁은 CR₁R₂, NR₃, O 및 S 중 하나이고; Ar₁ 내지 Ar₁₂는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 하기 화학식 2로 표시되는 그룹, N(Q₁)(Q₂)로 표시되는 그룹 및 Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)로 표시되는 그룹 중 하나이고, 상기 Q₁ 내지 Q₅는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중 하나이고, Ar₁ 내지 Ar₁₂ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 그룹이며;

[0011]

<화학식 2>



[0012]

[0013]

L₁은 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 2가 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중 하나이고, a는 0 내지 5의 정수이며; R₁ 내지 R₅는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중 하나이고, R₄ 및 R₅ 중 복수개 존재하는 것들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0014]

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

[0015]

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

발명의 효과

[0016] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 구동 전압이 낮고 발광 효율이 높으며 장수명 특성을 가져, 우수한 성능의 평판 표시 장치를 제공할 수 있다.

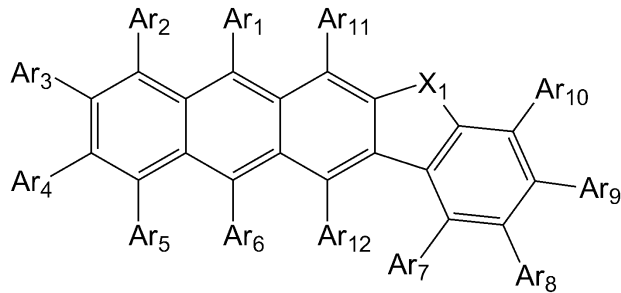
도면의 간단한 설명

[0017] 도 1은 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0018] 하기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 제공된다:

[0019] <화학식 1>

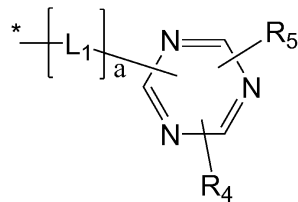


[0020]

[0021] 상기 식 중,

[0022] X₁은 CR₁R₂, NR₃, O 및 S 중 하나이고; Ar₁ 내지 Ar₁₂는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 하기 화학식 2로 표시되는 그룹, N(Q₁)(Q₂)로 표시되는 그룹 및 Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)로 표시되는 그룹 중 하나이며;

[0023] <화학식 2>



[0024]

[0025] L₁은 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 2가 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중 하나이고, a는 0 내지 5의 정수이며; R₁ 내지 R₅는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기 및 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중 하나이고, R₄ 및 R₅ 중 복수개 존재하는 것들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0026] 여기서, Q₁ 내지 Q₅는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는

비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중 하나이다. 예를 들면, Q₁ 내지 Q₅는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸라닐, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기 및 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기 중 하나일 수 있다.

[0027] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 소자 특성이 우수한 안트라센 모이어티에 형광 특성이 우수한 플루오렌 모이어티, 카바졸 모이어티, 푸란 모이어티 또는 티오펜 모이어티가 융합된 코어를 가지며, 상기 코어에는 전자 수송 능력이 우수한 트리아진 모이어티가 적어도 하나 이상 결합된다.

[0028] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물에서 안트라센 모이어티와 융합하여 코어를 형성하는 부분은 형광 특성이 우수한 플루오렌 모이어티일 수 있다. 이 경우에 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 상기 화학식 1 중 X₁이 CR₁R₂인 축합환 화합물일 수 있다. 예를 들면 상기 화학식 1 중 X₁은 C(CH₃)(CH₃)일 수 있다.

[0029] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 R₁ 및 R₃는 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기(methyl), 치환 또는 비치환된 에틸기(ethyl), 치환 또는 비치환된 프로필기(propyl), 치환 또는 비치환된 부틸기(butyl), 치환 또는 비치환된 펜틸기(pentyl), 치환 또는 비치환된 페닐기(phenyl), 치환 또는 비치환된 펜타레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인데닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphtyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐기(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵타레닐기(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐기(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphtyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 피레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크리세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 나프타세닐기(naphacenyl), 치환 또는 비치환된 피세닐기(picenyl), 치환 또는 비치환된 페릴레닐기(perylenyl), 치환 또는 비치환된 펜타페닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl), 치환 또는 비치환된 피롤일기(pyrrolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸일기(imidazolyl), 치환 또는 비치환된 피라졸일기(pyrazolyl), 치환 또는 비치환된 피리디닐기(pyridinyl), 치환 또는 비치환된 피라지닐기(pyrazinyl), 치환 또는 비치환된 피리미디닐기(pyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 피리다지닐기(pyridazinyl), 치환 또는 비치환된 이소인돌일기(isoindolyl), 치환 또는 비치환된 인돌일기(indolyl), 치환 또는 비치환된 인다졸일기(indazolyl), 치환 또는 비치환된 푸리닐기(purinyl), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기(quinolinyl), 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기(benzoquinolinyl), 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기

(phthalazinyl), 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기(quinoxaliny), 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기(quinazoliny), 치환 또는 비치환된 시놀리닐기(cinnoliny), 치환 또는 비치환된 카바졸일기(carbazoly), 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 치환 또는 비치환된 아크리디닐기(acridinyl), 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기(phenanthroliny), 치환 또는 비치환된 페나지닐기(phenazinyl), 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기(benzoimidazolyl), 치환 또는 비치환된 푸라닐기(furanyl), 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기(benzofuranyl), 치환 또는 비치환된 티오펜일기(thiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기(benzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 티아졸일기(thiazolyl), 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기(isothiazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기(benzothiazolyl), 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기(isoxazolyl), 치환 또는 비치환된 옥사졸일기(oxazolyl), 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기(oxadiazolyl), 치환 또는 비치환된 트리아지닐기(triazinyl), 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기(dibenzopuranyl) 및 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기(dibenzothiophenyl) 중 하나일 수 있다. 예를 들면, R₁ 및 R₃는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기 및 치환 또는 비치환된 피리다지닐기 중 하나일 수 있다.

[0030] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 화학식 1의 Ar₁ 내지 Ar₁₂ 중 적어도 하나가 상기 화학식 2로 표시되는 그룹일 수 있으며, 구체적으로는 Ar₁, Ar₃, Ar₄, Ar₆ 및 Ar₉ 중 적어도 하나가 상기 화학식 2로 표시되는 그룹일 수 있다. 예를 들면 Ar₁, Ar₃, Ar₄, Ar₆ 및 Ar₉ 중 어느 하나가 또는 어느 둘이 상기 화학식 2로 표시되는 그룹일 수도 있다.

[0031] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 Ar₂, Ar₅, Ar₇, Ar₈, Ar₁₀, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 모두 수소 원자이고, Ar₁, Ar₃, Ar₄, Ar₆ 및 Ar₉는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹, 상기 화학식 2로 표시되는 그룹, N(Q₁)(Q₂)로 표시되는 그룹 및 Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있으며 이 경우에 Ar₁, Ar₃, Ar₄, Ar₆ 및 Ar₉ 중 적어도 하나는 상기 화학식 2로 표시되는 그룹일 수 있다.

[0032] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 Ar₂, Ar₅, Ar₇, Ar₈, Ar₁₀, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 모두 수소 원자이고, Ar₁, Ar₃, Ar₄, Ar₆ 및 Ar₉는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페틸레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프

티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸라닐, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기 및 상기 화학식 2로 표시되는 그룹 중 하나일 수 있으며 이 경우에 상기 Ar₁, Ar₃, Ar₄, Ar₆ 및 Ar₉ 중 적어도 하나는 상기 화학식 2로 표시되는 그룹일 수 있다.

[0033] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 안트라센 모이어티에 플루오렌 모이어티, 카바졸 모이어티, 푸란 모이어티 또는 티오펜 모이어티가 융합된 코어를 가지고 상기 코어 부분의 치환체인 Ar₁ 내지 Ar₁₂ 중 적어도 하나에 화학식 2로 표시되는 트리아진 모이어티를 가진다. 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 상기 모이어티들의 특성으로 인해 특히 전자 수송 능력이 우수하다.

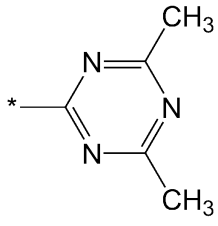
[0034] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 화학식 2의 트리아진 모이어티를 포함하고 상기 화학식 2의 트리아진 모이어티 중 L₁은 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인테닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크리세닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페틸레닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐렌기 및 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기 중 하나일 수 있다.

[0035] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2 중 a는 0 또는 1일 수 있다. a가 0이면 이것은 단순한 단일 결합을 의미한다. a가 0 또는 1을 만족하는 경우에 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물의 전자 수송 능력이 우수해질 수 있다.

[0036] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2 중 R₄ 내지 R₈은 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 인데노안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 비피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기 및 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기 중 하나일 수 있다. 예를 들면 R₄ 및 R₅은 서로 동일하면서, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 펜틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 인데노안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 비피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기 및 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기 중 하나일 수 있다.

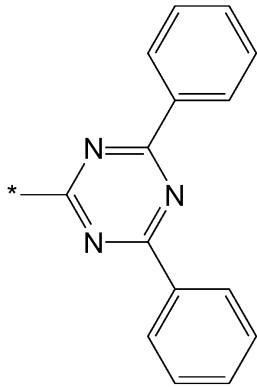
[0037] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 상기 화학식 1 중 상기 화학식 2로 표시되는 그룹이 하기 화합물 2A 내지 2U로 표시되는 화합물일 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다:

[0038] <화학식 2A>



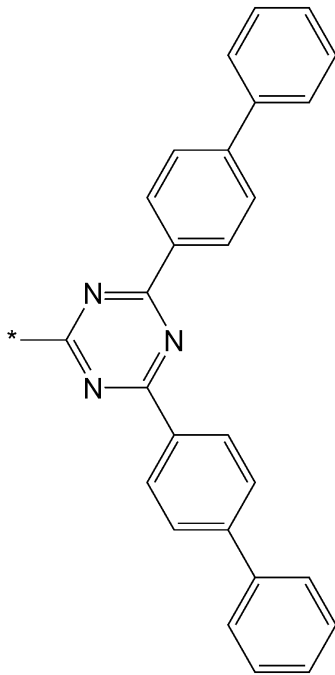
[0039]

[0040] <화학식 2B>



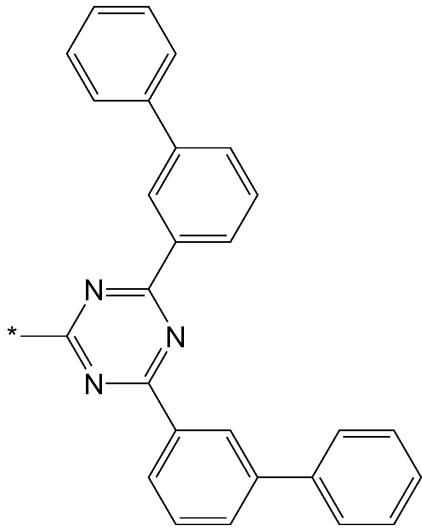
[0041]

[0042] <화학식 2C>



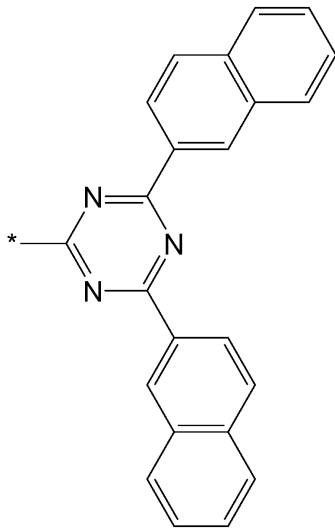
[0043]

[0044] <화학식 2D>



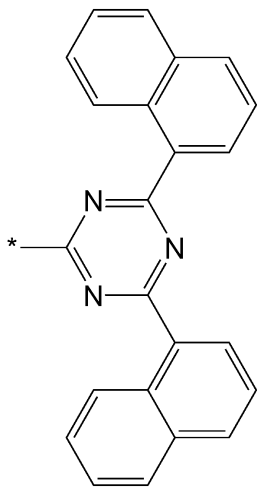
[0045]

[0046] <화학식 2E>



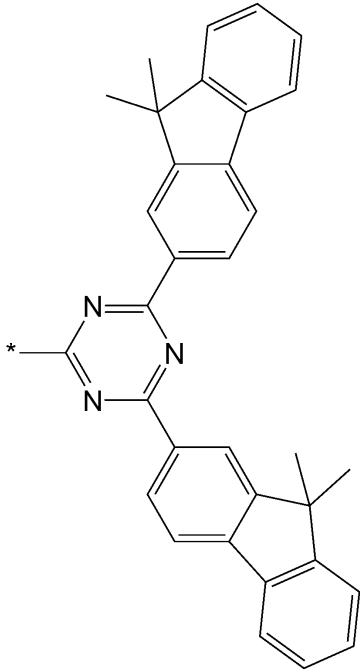
[0047]

[0048] <화학식 2F>



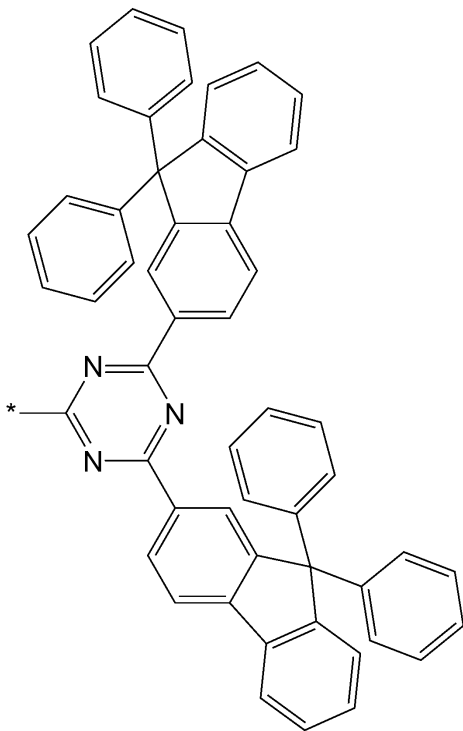
[0049]

[0050] <화학식 2G>



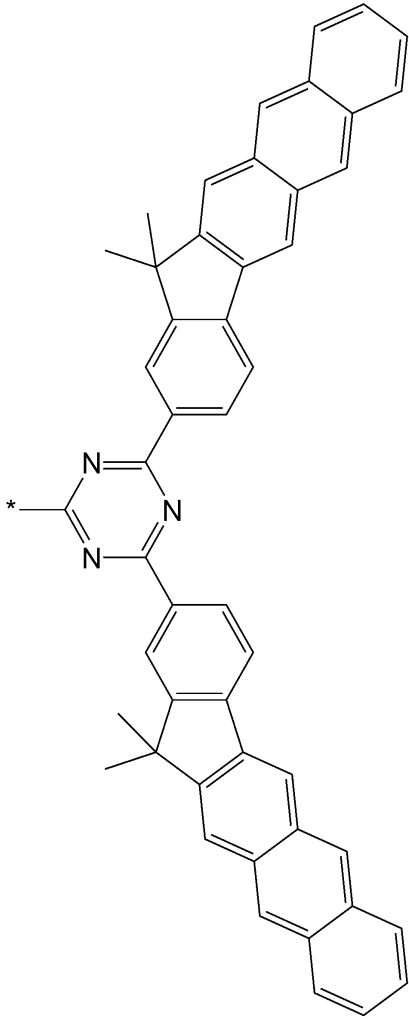
[0051]

[0052] <화학식 2H>



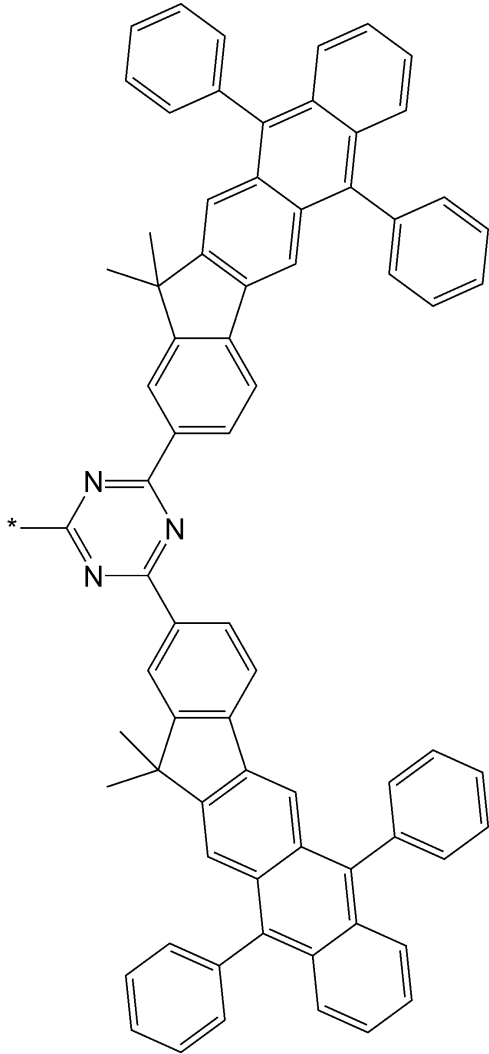
[0053]

[0054] <화학식 21>



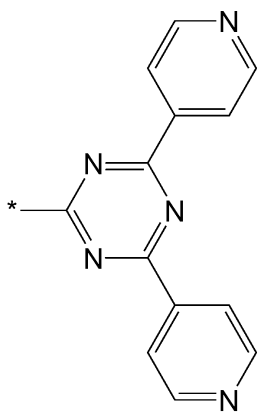
[0055]

[0056] <화학식 2J>



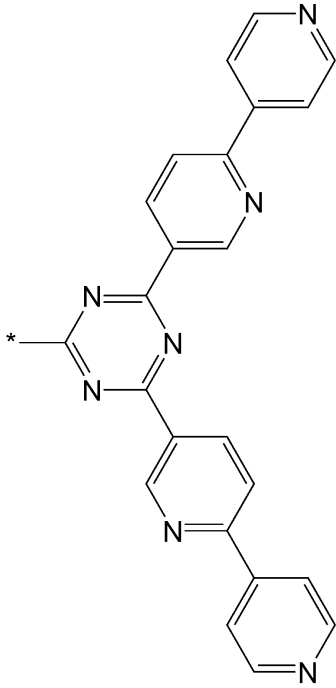
[0057]

[0058] <화학식 2K>



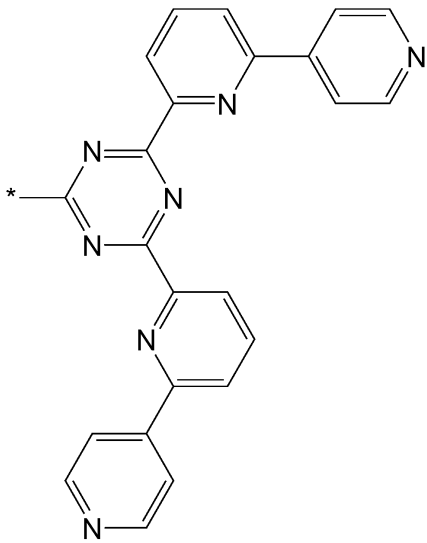
[0059]

[0060] <화학식 2L>



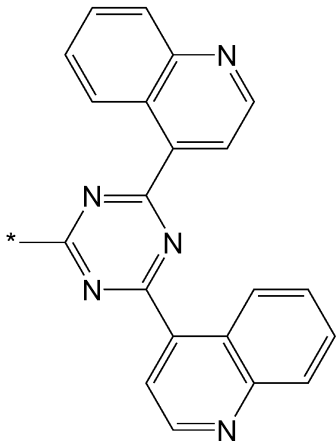
[0061]

[0062] <화학식 2M>



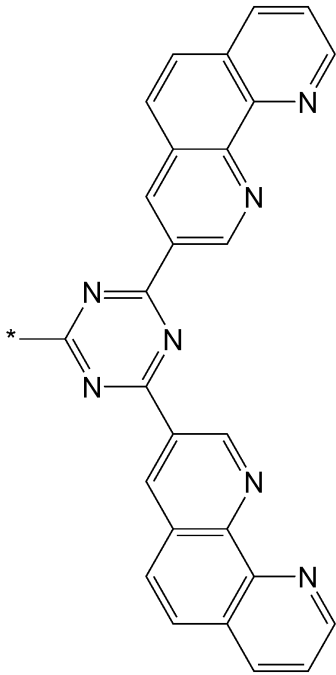
[0063]

[0064] <화학식 2N>



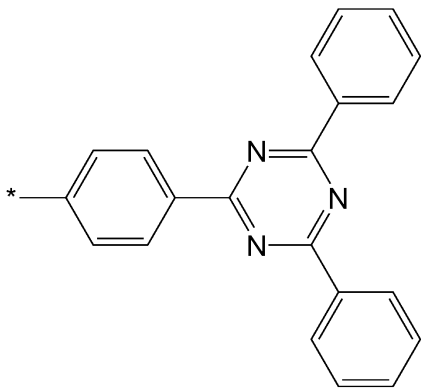
[0065]

[0066] <화학식 20>



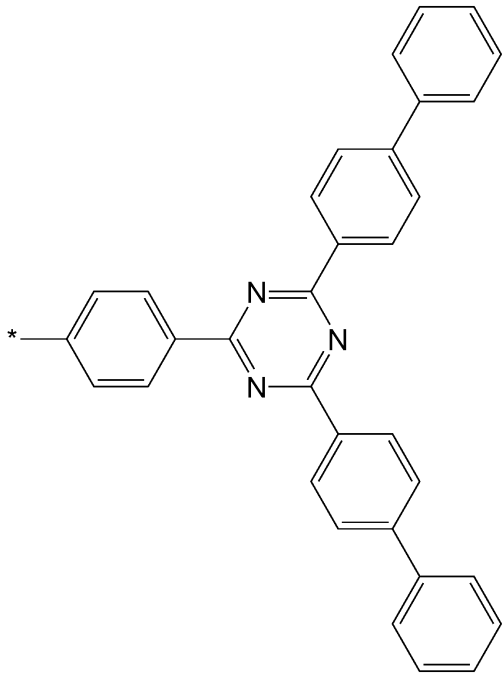
[0067]

[0068] <화학식 2P>



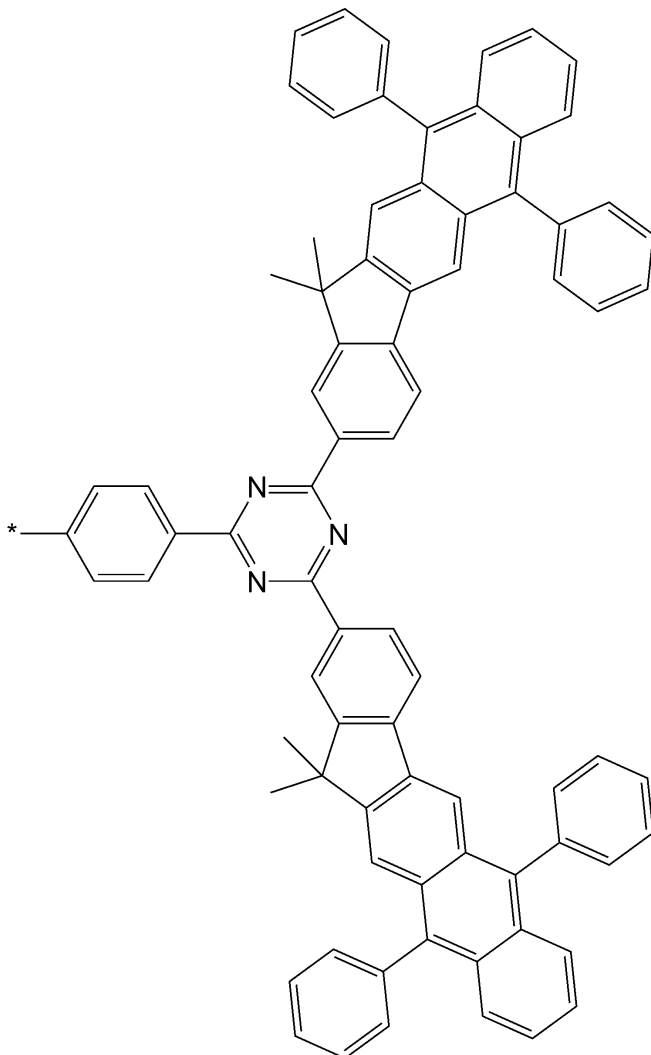
[0069]

[0070] <화학식 2Q>



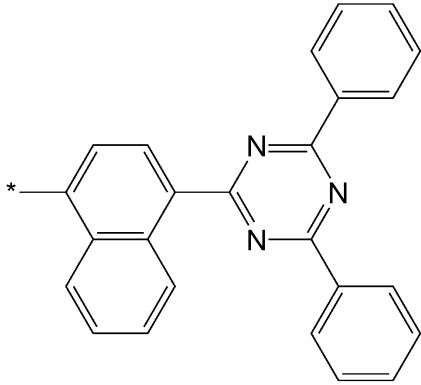
[0071]

[0072] <화학식 2R>



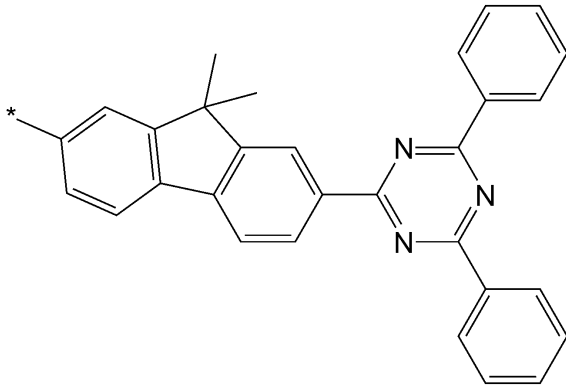
[0073]

[0074] <화학식 2S>



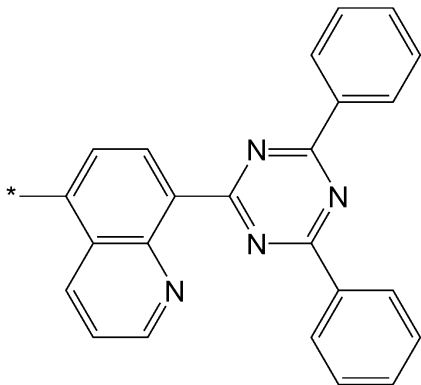
[0075]

[0076] <화학식 2T>



[0077]

[0078] <화학식 2U>

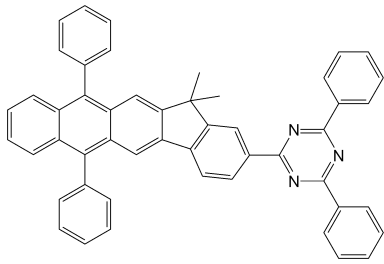


[0079]

[0080] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 하기 화합물 1 내지 40으로 표시되는 화합물들 중 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0081] <화합물 1>

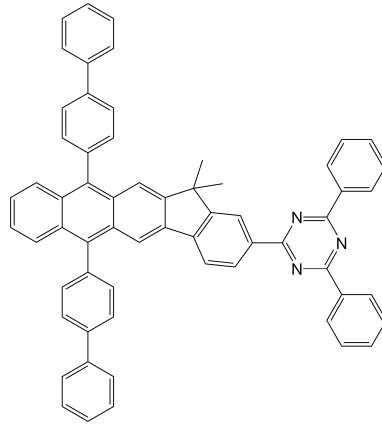
<화합물 2>



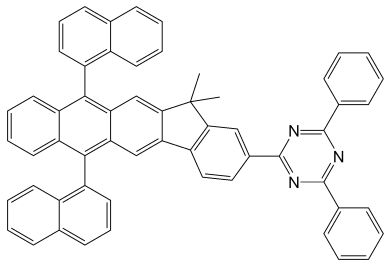
[0082]

[0083]

<화합물 3>



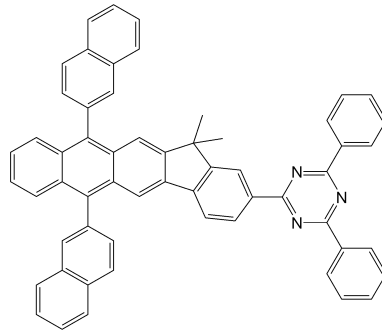
<화합물 4>



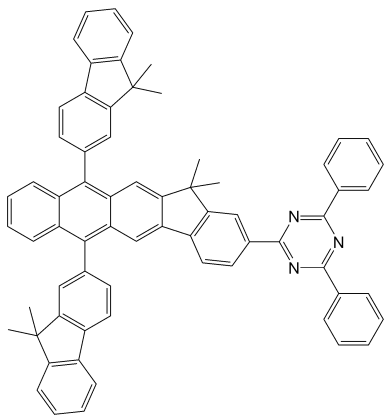
[0084]

[0085]

<화합물 5>



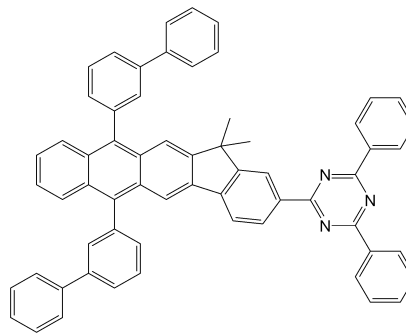
<화합물 6>



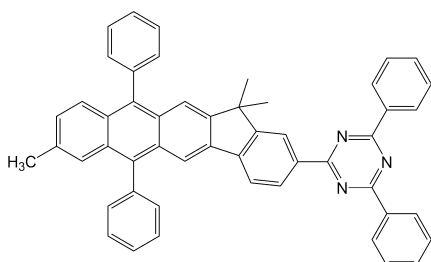
[0086]

[0087]

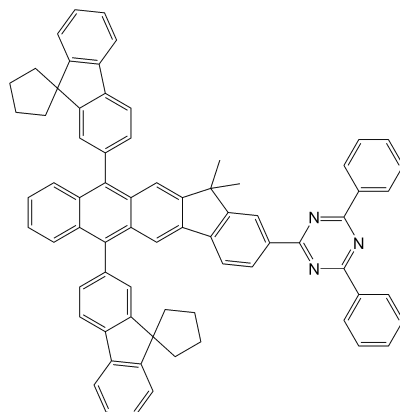
<화합물 7>



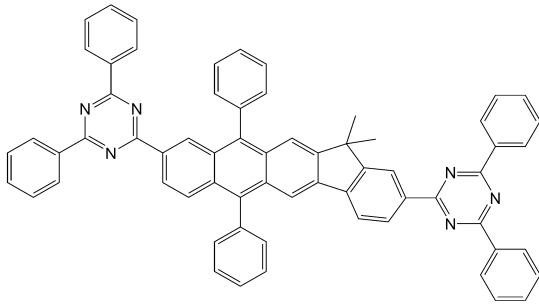
<화합물 8>



[0088]

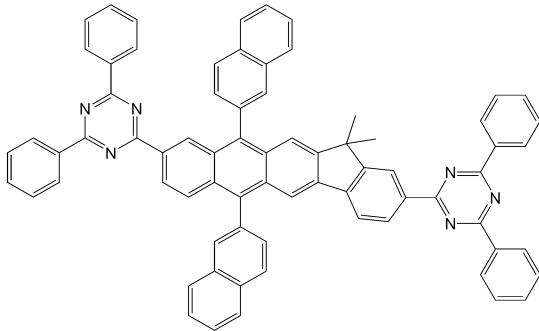


[0089] <화합물 9>



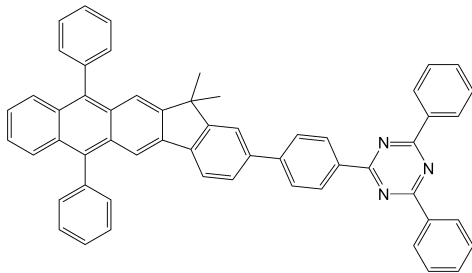
[0090]

[0091] <화합물 10>



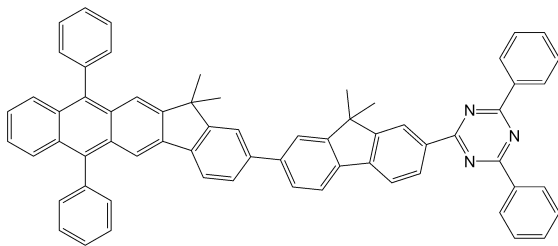
[0092]

[0093] <화합물 11>



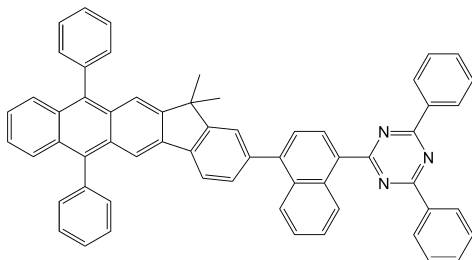
[0094]

[0095] <화합물 12>



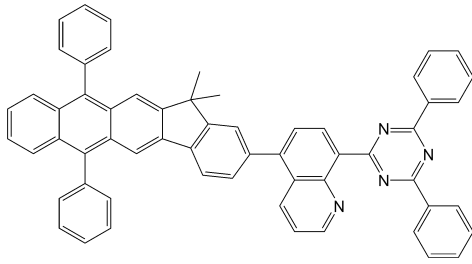
[0096]

[0097] <화합물 13>



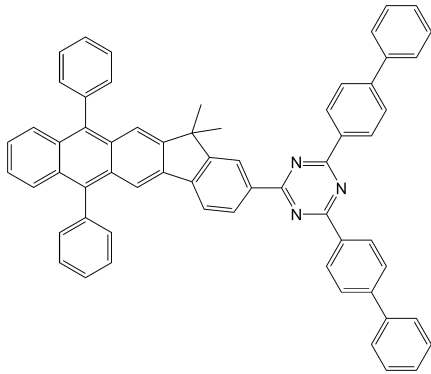
[0098]

[0099] <화합물 14>



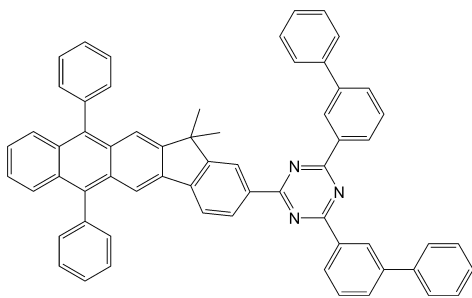
[0100]

[0101] <화합물 15>



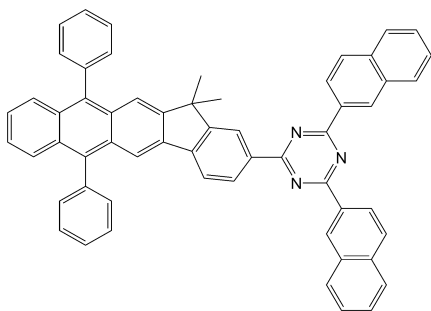
[0102]

[0103] <화합물 16>



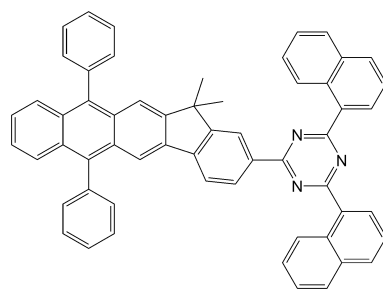
[0104]

[0105] <화합물 17>

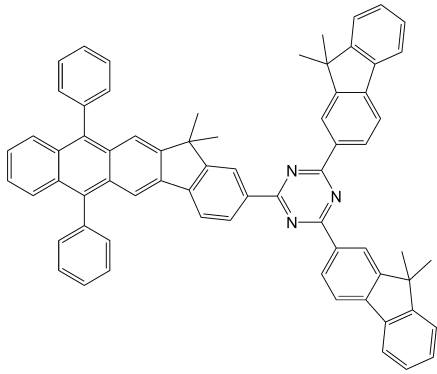


[0106]

<화합물 18>

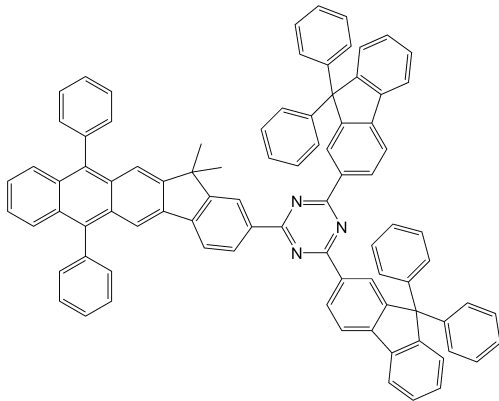


[0107] <화합물 19>



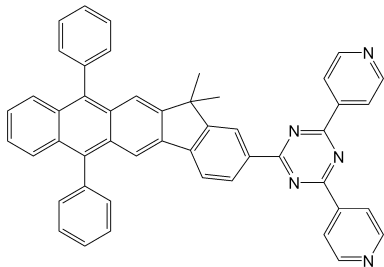
[0108]

[0109] <화합물 20>

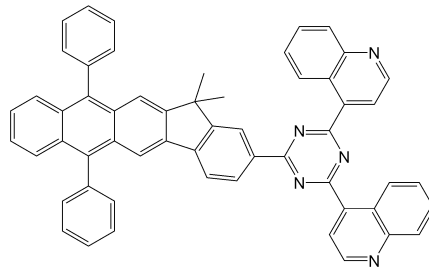


[0110]

[0111] <화합물 21>

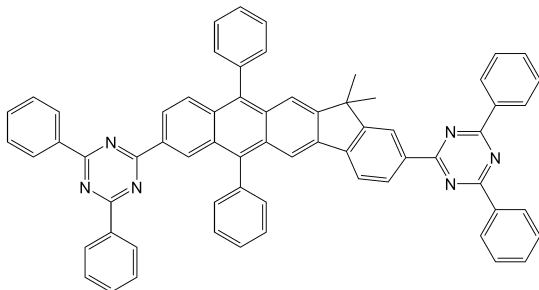


<화합물 22>



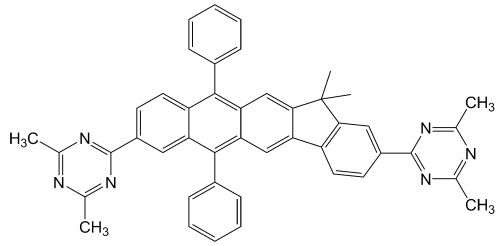
[0112]

[0113] <화합물 23>



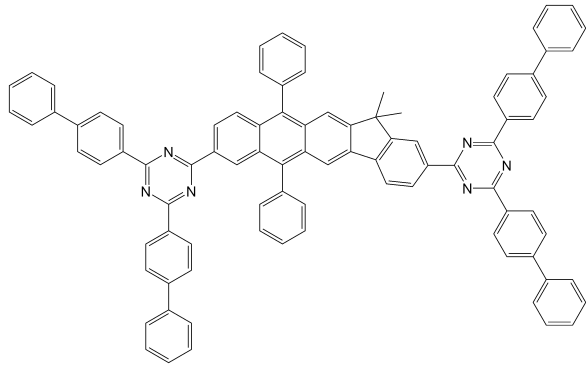
[0114]

[0115] <화합물 24>



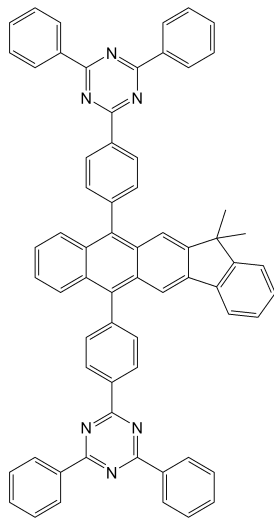
[0116]

[0117] <화합물 25>



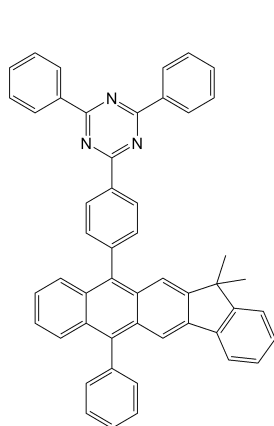
[0118]

[0119] <화합물 26>



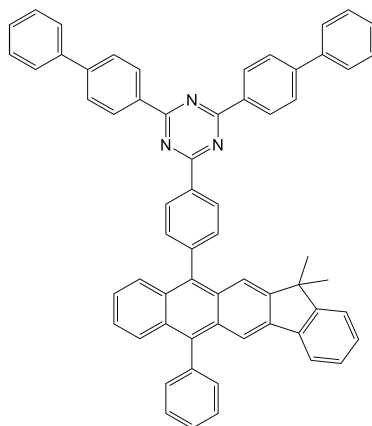
[0120]

[0121] <화합물 27>

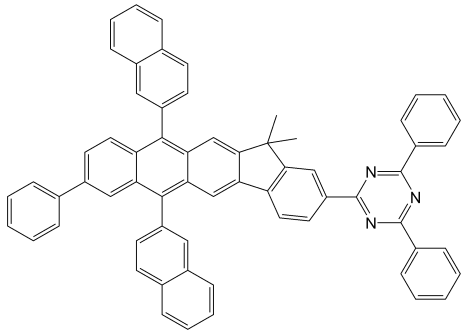


[0122]

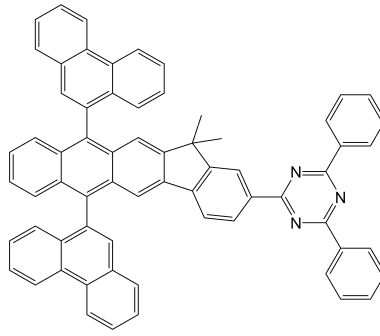
<화합물 28>



[0123] <화합물 29>

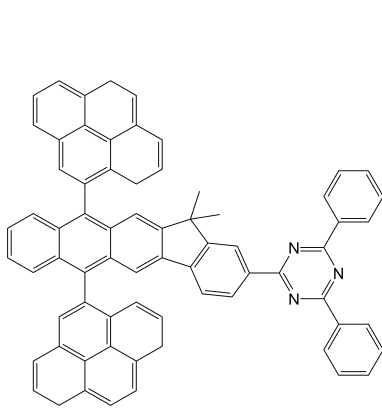


<화합물 30>

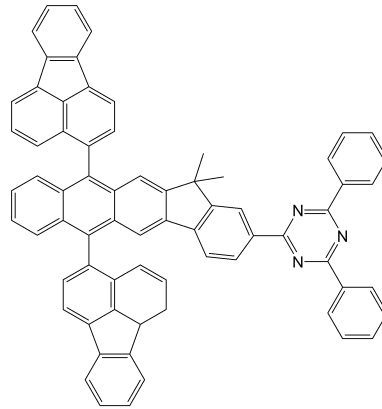


[0124]

[0125] <화합물 31>

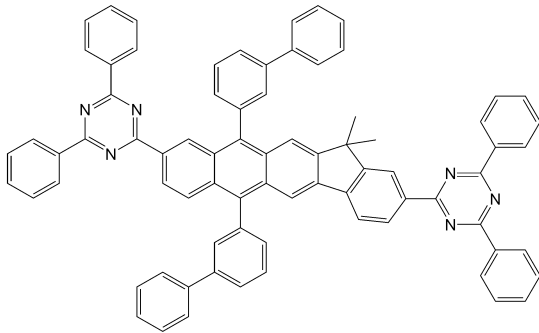


<화합물 32>



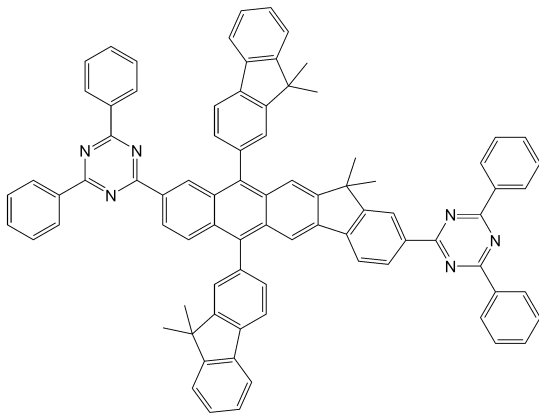
[0126]

[0127] <화합물 33>



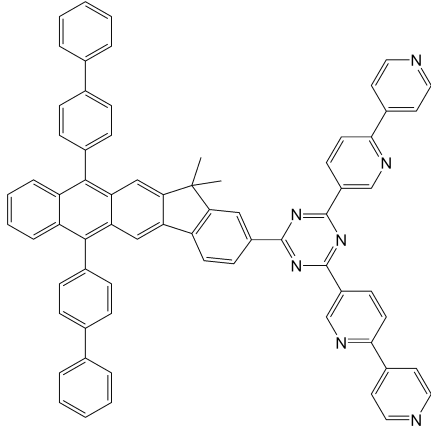
[0128]

[0129] <화합물 34>



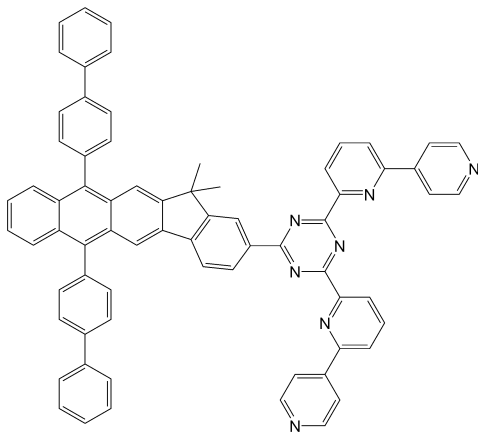
[0130]

[0131] <화합물 35>



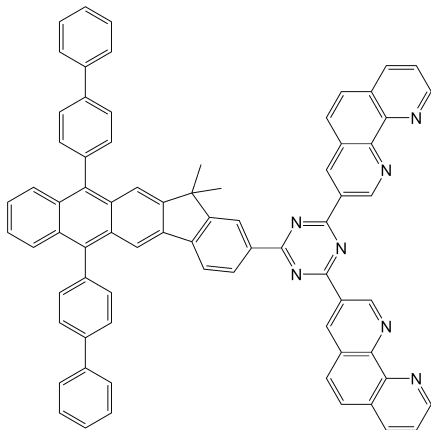
[0132]

[0133] <화합물 36>



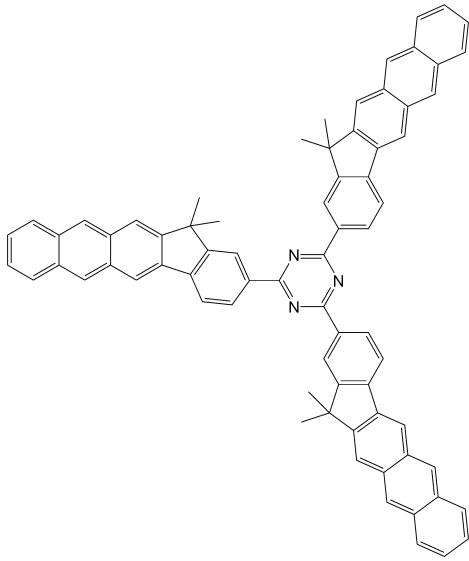
[0134]

[0135] <화합물 37>



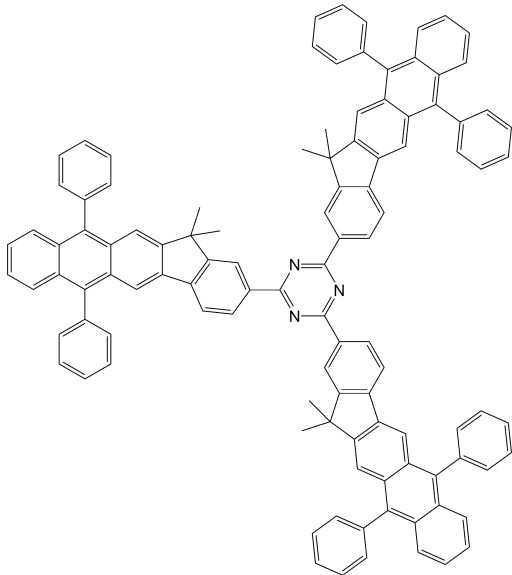
[0136]

[0137] <화합물 38>



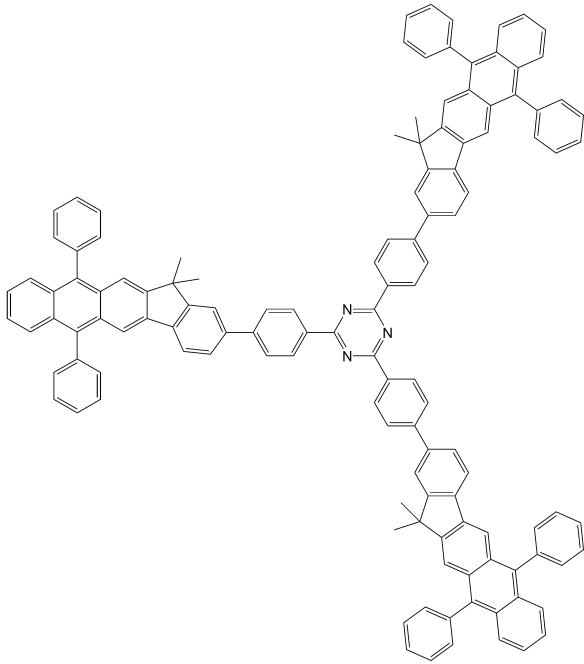
[0138]

[0139] <화합물 39>



[0140]

[0141] <화합물 40>



[0142]

[0143] 본 명세서 중의 "치환 또는 비치환된 A(A는 임의의 치환기)"라는 표현 중 "치환된 A"란 용어는 "상기 A의 수소 원자가 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기 또는 이의 염 유도체, 술폰산기 또는 이의 염 유도체, 인산기 또는 이의 염 유도체, C₁-C₃₀알킬기, C₂-C₃₀알케닐기, C₂-C₃₀알키닐기, C₁-C₃₀알콕시기, C₃-C₃₀시클로알킬기, C₃-C₃₀시클로알케닐기, C₅-C₃₀아릴기, C₅-C₃₀아릴옥시기, C₅-C₃₀아틸티오기, C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹, N(Q₁₀₁)(Q₁₀₂)로 표시되는 그룹 및 Si(Q₁₀₃)(Q₁₀₄)(Q₁₀₅)로 표시되는 그룹 중 하나로 "치환된 A"를 의미한다. 여기서, Q₁₀₁ 내지 Q₁₀₅는 서로 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, C₁-C₃₀알킬기, C₂-C₃₀알케닐기, C₂-C₃₀알키닐기, C₁-C₃₀알콕시기, C₃-C₃₀시클로알킬기, C₃-C₃₀시클로알케닐기, C₅-C₃₀아릴기, C₅-C₃₀아릴옥시기, C₅-C₃₀아틸티오기 및 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹 중 하나일 수 있다.

[0144] 예를 들어, 상기 "치환된 A"란 "상기 A의 하나 이상의 수소 원자가 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 카르복실기, 치환 또는 비치환된 메틸기, 치환 또는 비치환된 에틸기, 치환 또는 비치환된 프로필기, 치환 또는 비치환된 부틸기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기, 치환 또는 비치환된 인테닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐기, 치환 또는 비치환된 헵타레닐기, 치환 또는 비치환된 인다세닐기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스피로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피세닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 펜타페닐기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐기, 치환 또는 비치환된 피롤일기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 피라졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 이소인돌일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 인다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐기, 치환 또는 비치환된 쿠나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 푸라닐, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기, 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환

또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기 및 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기 중 하나로 치환된 A"를 의미할 수 있다.

- [0145] 본 명세서 중 치환된 C₁-C₃₀알킬기는 알칸(alkane)에서 수소 원자 1 개가 결여된 선형 및 분지형 구조의 포화 탄화수소기를 의미한다. 비치환된 C₁-C₃₀알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있다. 치환된 C₁-C₃₀알킬기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0146] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기는 상기 비치환된 C₂-C₃₀알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 말단기를 의미한다. 비치환된 C₂-C₃₀알케닐기의 예로는 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 헥세닐, 헵테닐, 옥테닐, 프로파디에닐(propadienyl), 이소프레닐(isoprenyl), 알릴(allyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C₂-C₃₀알케닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0147] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기는 상기 비치환된 C₂-C₃₀알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 말단기를 의미한다. 비치환된 C₂-C₃₀알키닐기의 예로는 아세틸레닐(acetylenyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C₂-C₃₀알키닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0148] 본 명세서 중 비치환된 C₁-C₃₀알콕시기는 -OY(단, Y는 상기 비치환된 C₁-C₃₀알킬기임)의 화학식을 가지며, 이의 구체적인 예로서 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시, 부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있다. 치환된 C₁-C₃₀알콕시기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0149] 본 명세서 중 비치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기는 고리형 포화 탄화수소기를 가리키는 것으로서, 이의 구체예로는 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로옥틸 등을 들 수 있다. 치환된 C₃-C₃₀시클로알킬기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0150] 본 명세서 중 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기는 하나 이상의 탄소 이중결합을 가지면서 방향족 고리가 아닌 고리형 불포화 탄화수소기를 의미한다. 비치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기의 예로는 시클로프로페닐(cyclopropenyl), 시클로부테닐(cyclobutenyl), 시클로펜테닐, 시클로헥세닐, 시클로헵테닐, 1,3-시클로헥사디에닐기, 1,4-시클로헥사디에닐기, 2,4-시클로헵타디에닐기, 1,5-히클로옥타디에닐기 등을 들 수 있다. 치환된 C₃-C₃₀시클로알케닐기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0151] 본 명세서 중 비치환된 C₅-C₃₀아릴기는 탄소 원자수 5 내지 30개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭(monocyclic) 또는 폴리시클릭(polycyclic) 그룹 동일 수 있다. 폴리시클릭 그룹인 경우, 이에 포함된 2 이상의 고리는 서로 융합될(fused) 수 있다. 비치환된 C₅-C₃₀아릴기의 예로는 페닐(phenyl), 펜타레닐(pentalenyl), 인데닐(indenyl), 나프틸(naphtyl), 아줄레닐(azulenyl), 헵타레닐(heptalenyl), 인다세닐(indacenyl), 아세나프틸(acenaphtyl), 플루오레닐(fluorenyl), 스피로-플루오레닐, 페날레닐(phenalenyl), 페난트레닐(phenanthrenyl), 안트릴(anthryl), 플루오란테닐(fluoranthenyl), 트리페닐레닐(triphenylenyl), 피레닐(pyrenyl), 크리세닐(chrysenyl), 나프타세닐(naphtacenyl), 피세닐(picenyl), 페릴레닐(perylenyl), 펜타페닐(pentaphenyl), 헥사세닐(hexacenyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C₅-C₃₀아릴기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0152] 본 명세서 중 비치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기는 상기 C₅-C₃₀아릴기의 탄소 원자가 산소 연결기(-O-)를 통하여 부착된 1가 그룹을 의미한다. 치환된 C₅-C₃₀아릴옥시기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0153] 본 명세서 중 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기는 상기 C₅-C₃₀아릴기의 탄소 원자가 황 연결기(-S-)를 통하여 부착된 1가 그룹을 의미한다. 비치환된 C₅-C₃₀아릴티오기의 예로는 페닐티오, 나프틸티오, 인다닐티오 및 인데닐티오 등을 들 수 있다. 치환된 C₅-C₃₀아릴티오기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.
- [0154] 본 명세서 중 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹은 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포

함한 고리를 하나 이상 포함하는 모노시클릭(monocyclic) 또는 폴리시클릭(polycyclic) 그룹을 의미한다. 폴리시클릭 그룹일 경우, 이에 포함된 2 이상의 고리는 서로 융합될(fused) 수 있다. 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹의 구체예로는 피롤일(pyrrolyl), 이미다졸일(imidazolyl), 피라졸일(pyrazolyl), 피리디닐(pyridinyl), 피라지닐(pyrazinyl), 피리미디닐(pyrimidinyl), 피리다지닐(pyridazinyl), 이소인돌일(isoindolyl), 인돌일(indolyl), 인다졸일(indazolyl), 푸리닐(purinyl), 퀴놀리닐(quinolinyl), 벤조퀴놀리닐(benzoquinolinyl), 프탈라지닐(phthalazinyl), 나프티리디닐(naphthyridinyl), 퀴녹살리닐(quinoxaliny), 퀴나졸리닐(quinazoliny), 시놀리닐(cinnolinyl), 카바졸일(carbazolyl), 페난트리디닐(phenanthridinyl), 아크리디닐(acridinyl), 페난트롤리닐(phenanthrolinyl), 페나지닐(phenazinyl), 벤조옥사졸일(benzooxazolyl), 벤조이미다졸일(benzoimidazolyl), 푸라닐(furanyl), 벤조푸라닐(benzofuranyl), 티오펜일(thiophenyl), 벤조티오펜일(benzothiophenyl), 티아졸일(thiazolyl), 이소티아졸일(isothiazolyl), 벤조티아졸일(benzothiazolyl), 이소옥사졸일(isoxazolyl), 옥사졸일(oxazolyl), 트리아졸일, 테트라졸, 옥사디아졸일, 트리아지닐, 벤조옥사졸일(benzooxazolyl) 등을 들 수 있다. 치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0155] 본 명세서 중 비치환된 C₁-C₃₀알킬렌기는 알칸에서 수소 원자 2 개가 결여된 선형 및 분지형 구조의 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 비치환된 C₁-C₃₀알킬렌기의 예는 상기 비치환된 C₁-C₃₀알킬기의 예를 참조하여 이해될 수 있다. 치환된 C₁-C₃₀알킬렌기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0156] 본 명세서 중 비치환된 C₅-C₃₀아릴렌기는 탄소 원자수 5 내지 30개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다. 비치환된 C₅-C₃₀아릴렌기의 구체예는 상기 비치환된 C₅-C₃₀아릴기의 예를 참조하여 이해될 수 있다. 치환된 C₅-C₃₀아릴렌기의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0157] 본 명세서 중 비치환된 2가 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹이란 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함한 고리를 하나 이상 포함하는 모노시클릭 또는 폴리시클릭 2가 그룹을 의미하고 이것은 모노시클릭 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다. 비치환된 2가 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹의 구체예는 상기 비치환된 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹의 예를 참조하여 이해될 수 있다. 치환된 2가 C₂-C₃₀헤테로시클릭 그룹의 치환기는 상기 "치환된 A"에 대한 설명을 참조한다.

[0158] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 축합환 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자에게 용이하게 인식될 수 있다.

[0159] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 유기 발광 소자에 사용될 수 있다. 즉, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 적어도 한 층의 유기층을 포함하고, 상기 유기층이 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 유기 발광 소자가 제공된다.

[0160] 상기 유기층은 유기 발광 소자에서 전자 주입층 또는 전자 수송층일 수 있거나, 또는 전자 주입 기능 및 전자 수송 기능을 동시에 가지는 기능층(functional layer)일 수 있다. 예를 들면, 상기 유기 발광 소자는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 유기층이 전자 수송층일 수 있다.

[0161] 한편, 상기 유기층은 유기 발광 소자에서 정공 주입층, 정공 수송층, 또는 정공 주입 기능 및 정공 주입 기능을 동시에 갖는 단일막일 수도 있다.

[0162] 상기 유기층은 유기 발광 소자에서 발광층일 수 있으며 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 발광층에 포함할 수 있다. 상세하게는, 상기 발광층이 상기 화학식1로 표시되는 축합환 화합물만을 포함하거나 또는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 이외에 이종의 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0163] 예를 들면, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물이 발광층의 형광 호스트 또는 인광 호스트로 사용될 수 있다. 이 경우, 상기 발광층은 형광 도펀트 또는 인광 도펀트를 더 포함할 수 있다. 즉, 상기 발광층은 형광 호스트의 역할을 하는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 및 형광 도펀트 역할을 하는 화합물을 포함하거나, 또는 인광 호스트의 역할을 하는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 및 인광 도펀트 역할을 하는 화합물을 포함할 수 있다.

[0164] 또한, 예를 들면, 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물은 발광층의 형광 도펀트로 사용될 수 있다. 이

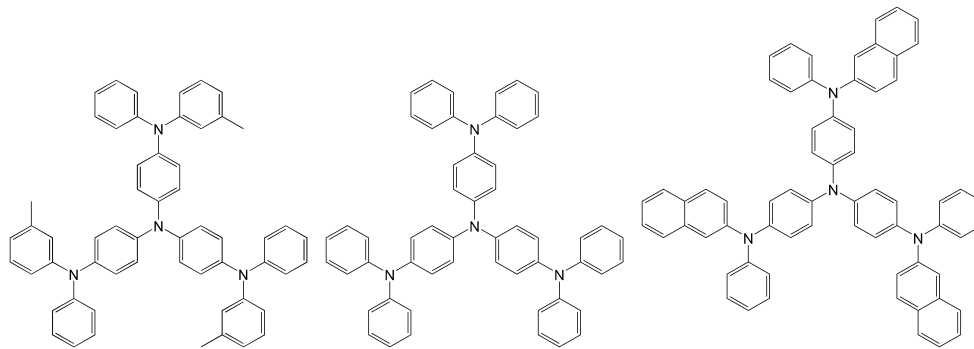
경우, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 외에 형광 호스트 또는 인광 호스트를 더 포함할 수 있다. 즉, 상기 발광층은 형광 도펀트의 역할을 하는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 및 인광 호스트 또는 형광 호스트 역할을 하는 화합물을 포함할 수 있다.

- [0165] 상기 유기 발광 소자는, 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 발광층 이외에 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 하나 이상의 층을 더 포함할 수 있다.
- [0166] 상기 유기 발광 소자의 구조는, 예를 들면, 제1전극/정공 주입층/발광층/전자 수송층/전자 주입층/제2전극, 제1전극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/전자 수송층/전자 주입층/제2전극 또는 제1전극/정공 주입층/정공 수송층/발광층/정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층/제2전극일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0167] 상기 유기 발광 소자의 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 층들 중 하나 이상의 층은 증착법 또는 습식 공정에 의하여 형성될 수 있다. 예를 들면 제1전극 및 제2전극 사이에 포함되는 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 하나 이상의 층이 증착법 또는 습식 공정에 의하여 형성될 수 있다.
- [0168] 본 명세서 중 "습식 공정"이란 소정의 물질을 소정의 용매와 혼합하여 수득한 혼합물을 소정의 기판 상에 제공한 후, 건조 및/또는 열처리하여 상기 소정의 용매의 일부 이상을 제거함으로써, 상기 기판 상에 상기 소정의 물질을 포함한 막을 형성하는 공정을 말한다.
- [0169] 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 유기층은 통상의 진공 증착법에 의하여 형성될 수 있거나 습식 공정에 의하여 형성될 수 있다. 예를 들면 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물 및 용매를 포함한 혼합물을 스핀 코팅법, 스프레이법, 잉크젯 프린팅법, 디핑법, 캐스팅, 그라비아 코팅, 바 코팅, 롤 코팅, 와이어 바 코팅, 스크린 코팅, 플렉소 코팅, 오프셋 코팅 또는 레이저 전사법 등을 이용하여 전자 수송층 형성 영역에 제공한 후, 상기 전자 수송층 형성 영역에 제공된 상기 혼합물을 건조 및/또는 열처리하여 상기 용매의 일부 이상을 제거함으로써 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 전자 수송층을 형성할 수 있다.
- [0170] 한편, 베이스 필름에 상술한 바와 같은 습식 공정을 이용하여 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 층을 형성하고 상기 층을 전자 수송층 형성 영역에 레이저 등을 이용하여 전사시키는 레이저 전사법도 이용할 수 있다.
- [0171] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명한다.
- [0172] 유기 발광 소자(10)는 기판(11), 제1전극(12), 정공 주입층(13), 정공 수송층(14), 발광층(15), 전자 수송층(16), 전자 주입층(17) 및 제2전극(18)을 차례로 구비한다.
- [0173] 상기 기판(11)으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.
- [0174] 상기 제1전극(12)은 기판 상부에 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(12)이 애노드일 경우, 정공 주입이 용이하도록 제1전극용 물질은 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(12)은 반사형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 이용하면, 상기 제1전극(12)을 반사형 전극으로 형성할 수도 있다. 상기 제1전극(12)은 서로 다른 2종의 물질을 포함할 수 있다. 예를 들면, 상기 제1전극(12)을 서로 다른 2종의 물질을 포함한 2층 구조로 형성할 수 있는 등 다양한 변형예가 가능하다.
- [0175] 상기 제1전극(12) 상부로는 정공 주입층(13)이 구비되어 있다.
- [0176] 정공 주입층(13)은 상기 제1전극(12) 상부에 상술한 바와 같은 진공증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0177] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층(13)을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100℃ 내지 500℃, 진공도 약 10⁻⁸ 내지 약 10⁻³ torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으

며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0178] 습식 공정으로서, 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80℃ 내지 200℃의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0179] 정공 주입층 물질로는 상술한 바와 같은 축합환 화합물을 이용할 수 있다. 또는, 상기 축합환 화합물 및 공지된 정공 주입 재료 중 1종 이상을 사용할 수 있는데, 예를 들면, 구리프탈로시아닌 등과 같은 프탈로시아닌 화합물, m-MTDATA(하기 화학식 참조), TDATA(하기 화학식 참조), 2-TNATA(하기 화학식 참조), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid: 폴리아닐린/캄페르술포산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트))등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.

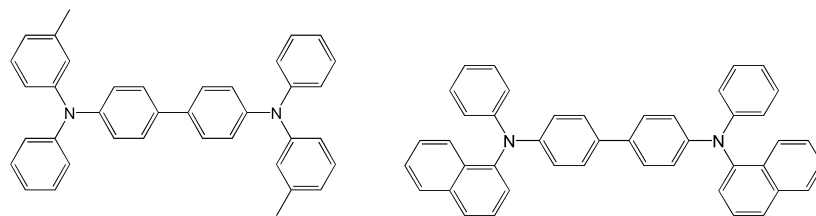


[0180] m-MTDATA TDATA 2-TNATA

[0181] 상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0182] 다음으로 상기 정공 주입층(13) 상부에 진공증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등을 이용하여 정공 수송층(14)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의하여 정공 수송층(14)을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0183] 정공 수송층 물질로는 공지된 정공 수송 재료를 사용할 수 있는데, 정공 수송층은 예를 들면 TPD(하기 화학식 참조), NPB(하기 화학식 참조) 등을 포함할 수 있다.

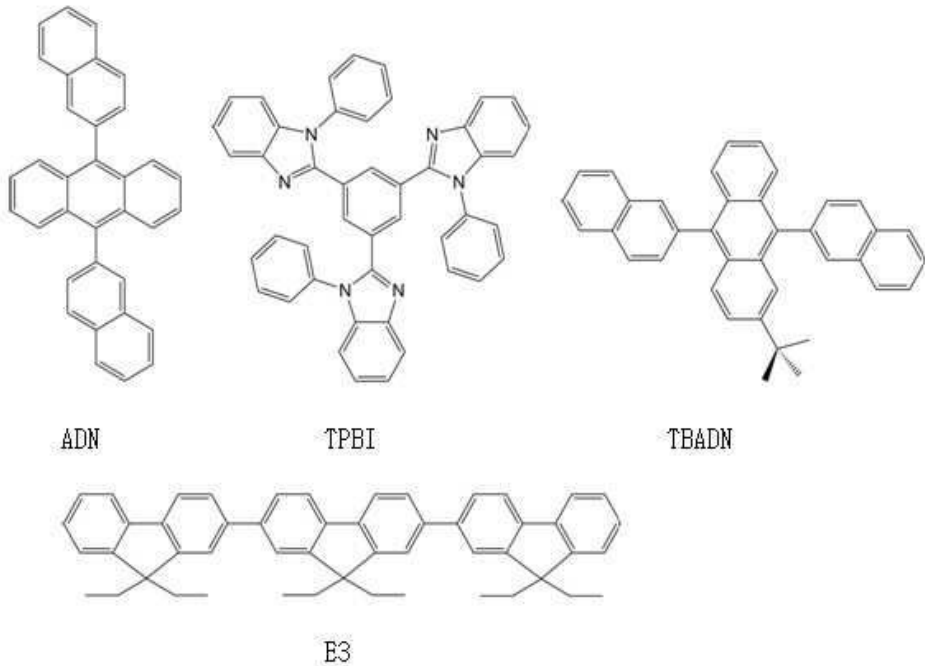


[0184] TPD NPB

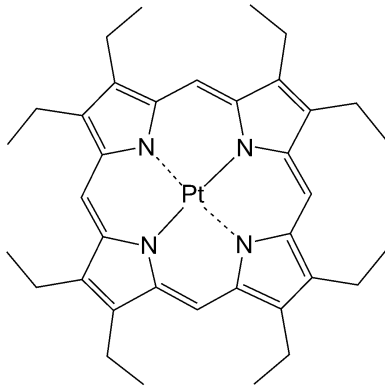
[0185] 상기 정공 수송층(14)의 두께는 약 50Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 800Å일 수 있다. 상기 정공 수송층(14)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0186] 정공 주입층(13)과 정공 수송층(14) 대신, 정공 주입 기능과 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층(미도시)을 형성할 수 있다. 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 물질은 공지된 재료 중에서 선택될 수 있다.

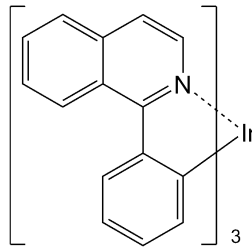
- [0189] 상기 정공주입층(13), 정공수송층(14) 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나는 상술한 바와 같은 화학식 1의 축합환 화합물, 공지된 정공 주입 재료 및 공지된 정공 수송 재료 외에, 막의 도전성 등을 향상시키기 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.
- [0190] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라사이아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라사이아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0191] 상기 정공주입층, 상기 정공수송층 또는 상기 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층이 상기 전하-생성 물질을 더 포함할 경우, 상기 전하-생성 물질은 상기 층들 중에 균일하게(homogeneous) 분산되거나, 또는 불균일하게 분포되어 있을 수 있는 등 다양한 변형이 가능하다.
- [0192] 상기 정공 수송층 또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 상부에 진공증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(15)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 발광층(15)을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.
- [0193] 상기 발광층(15)은 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물, 공지의 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도펀트 및 형광 도펀트 중 1종 이상을 포함할 수 있다. 상기 발광층(15)이 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 경우 상기 축합환 화합물은 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도펀트 또는 형광 도펀트로서의 역할을 할 수 있다.
- [0194] 공지의 호스트로서, CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), ADN(9, 10-디-나프탈렌-2-일-안트라센, 하기 화학식 참조), TPBI(하기 화학식 참조), TBADN(하기 화학식 참조) E3(하기 화학식 참조), 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



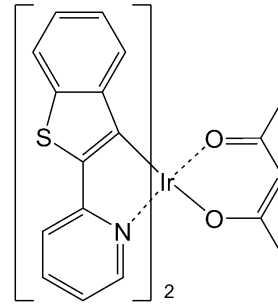
- [0195]
- [0196] 도펀트로는 형광 도펀트 및 인광 도펀트 중 적어도 하나를 사용할 수 있다. 상기 인광 도펀트는, Ir, Pt, Os, Re, Ti, Zr, Hf 또는 이들 중 2 이상의 조합을 포함한 유기 금속 착체일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0197] 한편, 적색 도펀트로서 PtOEP(하기 화학식 참조), Ir(piq)₃(하기 화학식 참조) Btp₂Ir(acac)(하기 화학식 참조) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



PtOEp



Ir(piql)₃

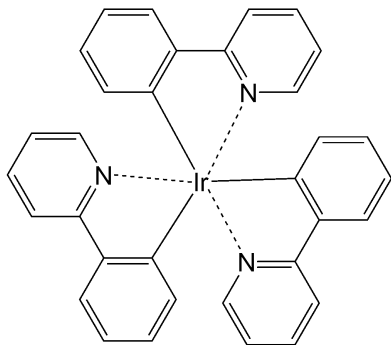


Btp₂Ir(acac)

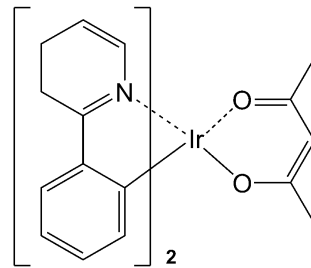
[0198]

[0199]

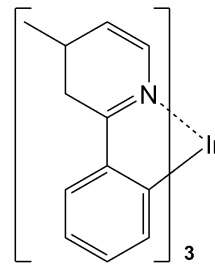
또한, 녹색 도펀트로서, Ir(ppy)₃ (ppy = 페닐피리딘, 하기 화학식 참조), Ir(ppy)₂(acac)(하기 화학식 참조), Ir(mppy)₃(하기 화학식 참조) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



Ir(ppy)₃



Ir(ppy)₂(acac)

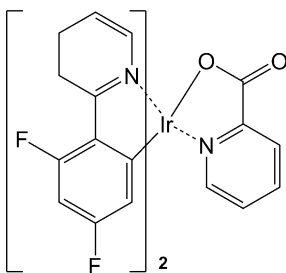


Ir(mppy)₃

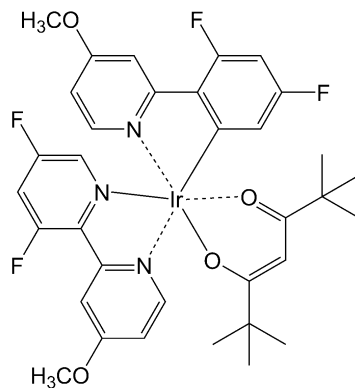
[0200]

[0201]

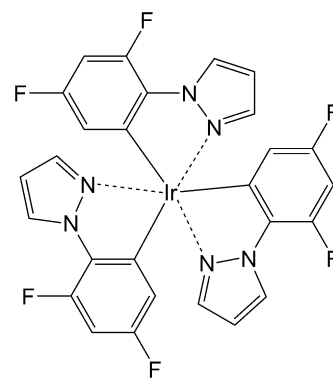
청색 도펀트로서, F₂Irpic(하기 화학식 참조), (F₂ppy)₂Ir(tmd)(하기 화학식 참조), Ir(dfppz)₃(하기 화학식 참조), DPVBi(하기 화학식 참조), DPAVBi(4,4'-비스(4-디페닐아미노스타릴) 비페닐, 하기 화학식 참조), 2,5,8,11-테트라-*tert*-부틸 페틸렌 (TBPe, 하기 화학식 참조) 등을 이용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



F₂Irpic

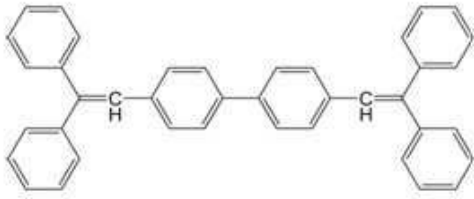


(F₂ppy)₂Ir(tmd)

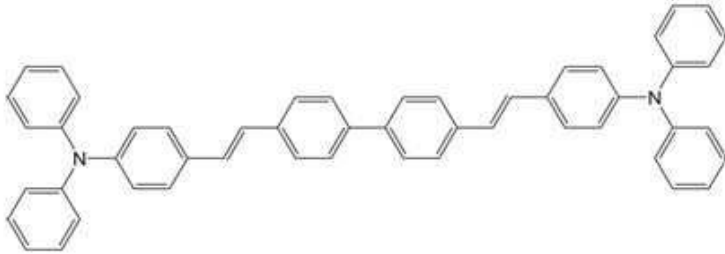


Ir(dfppz)₃

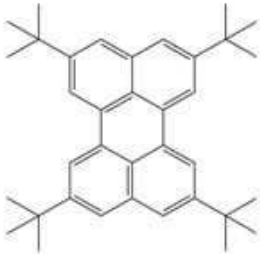
[0202]



DPVBi



DPAVBi



TBPc

[0203]

[0204]

[0205]

[0206]

[0207]

[0208]

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

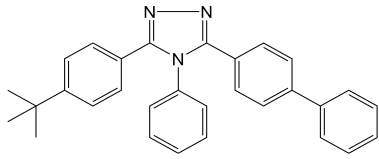
상기 발광층(15)의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층(15)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

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

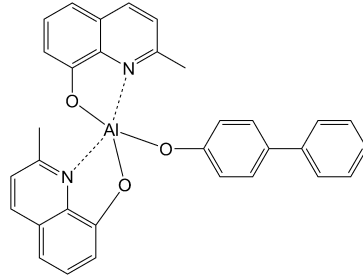
상기 정공 저지층의 두께는 약 50Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

다음으로 전자 수송층(16)을 진공증착법, 습식 공정, 레이저 전사법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공 증착법 및 스�핀 코팅법에 의해 전자 수송층(16)을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 상기 전자 수송층 재료로는 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 사용할 수 있다. 또한, 전자 수송층은 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 공지의 전자 수송 물질을 더 포함할 수 있다. 이의 예로는, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(AlQ_3), TAZ(하기 화학식 참조), BA1q(하기 화학식 참조), 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: $Bebq_2$))등과 같은 공지의

재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



TAZ



BAlq

[0209]

[0210]

[0211]

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

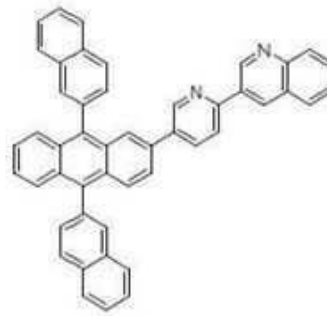
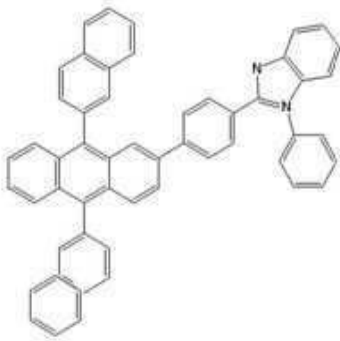
[0212]

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

[0213]

<화합물 301>

<화합물 302>



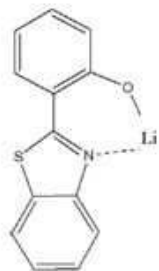
[0214]

[0215]

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

[0216]

<화합물 303>



[0217]

[0218]

또한 전자 수송층(16) 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(17)이 적층될 수 있다. 상기 전자 주입층(17) 형성 재료로는 LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층(17)의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층(13)의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0219]

상기 전자 주입층(17)의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층(17)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0220] 상기 전자 주입층(17) 상부로는 투과형 전극인 제2전극(18)이 구비되어 있다. 상기 제2전극(18)은 전자 주입 전극인 캐소드(Cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극 형성용 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 박막으로 형성하여 투과형 전극을 얻을 수 있다. 한편, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용한 투과형 전극을 형성할 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0221] 상기 유기 발광 소자는 트랜지스터를 포함한 평판 표시 장치에 사용될 수 있다.

[0222] 일 구현예에 따르면, 소스 전극, 드레인 전극, 게이트 및 활성층을 포함하는 트랜지스터 및 상기 화학식 1로 표시되는 축합환 화합물을 포함하는 유기층을 포함한 유기 발광 소자를 구비하고, 상기 유기 발광 소자의 제1전극이 상기 소스 전극 및 드레인 전극 중 하나와 전기적으로 연결된 평판 표시 장치가 제공된다.

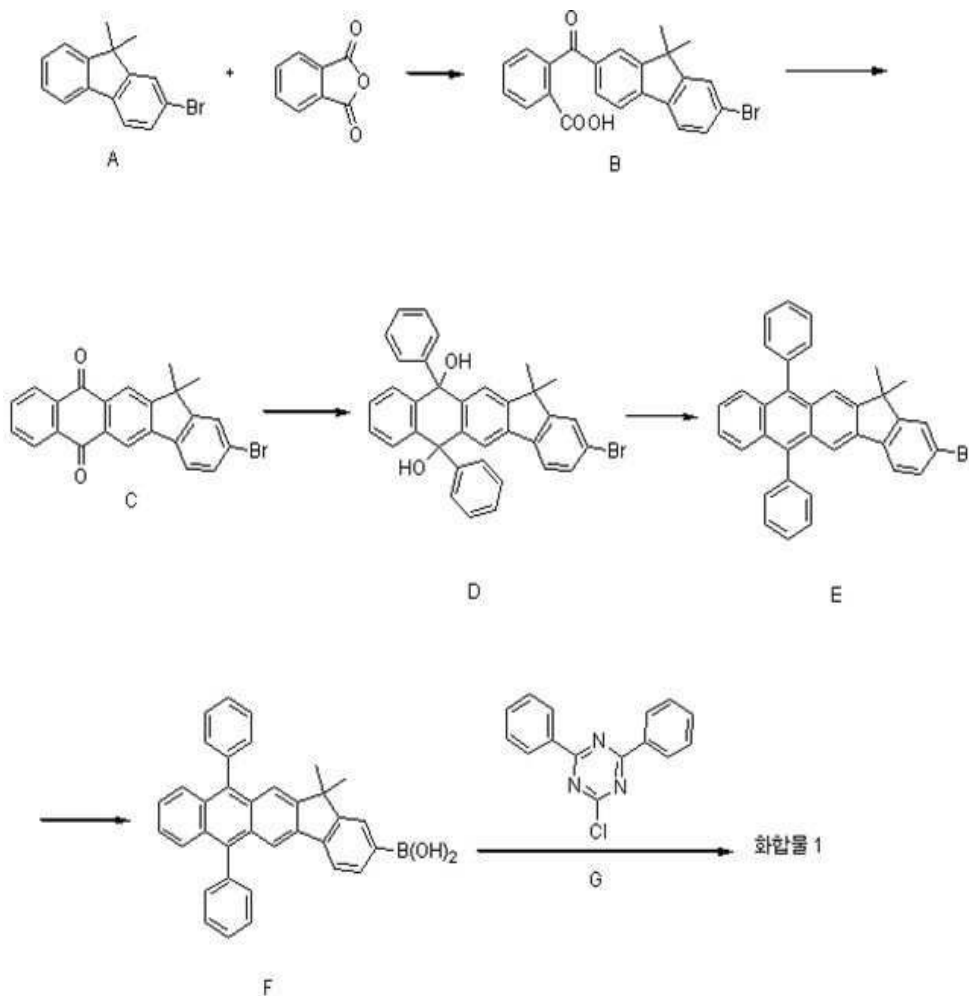
[0223] 상기 트랜지스터의 활성층은 비정질 실리콘층, 결정질 실리콘층, 유기 반도체층, 산화물 반도체층 등으로 다양한 변형이 가능하다.

[0224] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0225] **합성예 1: 화합물 2의 합성**

[0226] 하기 반응식 1에 따라 화합물 1을 합성하였다:

[0227] <반응식 1>



[0228]
[0229] 1) 중간체 B의 합성

[0230] 중간체 A(0.1mol, 27.3g)와 프탈산 무수물(phthalic anhydride)(0.11mol, 16.3g)을 플라스크에 넣고 디클로로메탄을 첨가하였다. 0℃에서 알루미늄 클로라이드(aluminum chloride)(0.15mol, 20g)를 서서히 첨가한 다음 상

온에서 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 반응 혼합물에 증류수를 천천히 첨가한 다음 디클로로메탄으로 추출한 후 용매를 제거하여 고체를 얻었다. 생성된 고체는 헥산으로 세척하고 여과하고 건조하여 중간체 B를 33.7g (80% 수율) 얻었다.

[0231] ¹H-NMR (400MHz, CDC13) 8.23 (1H), 7.99 (1H), 7.93 (2H), 7.83 (1H), 7.75 (3H), 7.66 (1H), 7.53 (1H), 1.67 (6H)

[0232] 2) 중간체 C의 합성

[0233] 중간체 B(80.0mmol, 33.7g)를 플라스크에 넣고 폴리인산(polyphosphoric acid)을 첨가하고 130℃에서 2시간 동안 교반하였다. 상온으로 냉각 시킨 후 증류수를 서서히 첨가하여 생성된 고체를 여과하고 소량의 메탄올로 세척하여 중간체 C를 26.8g (83% 수율) 얻었다.

[0234] ¹H-NMR (400MHz, CDC13) 8.84 (1H), 8.12 (1H), 7.78-7.75 (4H), 7.56 (3H), 1.67 (6H)

[0235] 3) 중간체 E의 합성

[0236] 질소 분위기 하에서 건조된 THF 250ml에 상기 중간체 C(24.8mmol, 10g)를 넣고 -78℃로 온도를 낮춘 후 2-페닐마그네슘브로마이드(0.5M, 50.0mL)를 천천히 첨가하였다. 상온으로 온도를 올리고 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화암모늄 수용액을 첨가한 후 디클로로메탄으로 추출하였다. 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조하고 용매를 제거하였다. 이로부터 얻은 혼합물을 에틸에테르 소량으로 녹인 후, 석유에테르를 첨가하여 수 시간 동안 교반하여, 고체 화합물을 얻었다. 이를 여과한 후 진공 건조하여 고체 생성물을 얻었다. 이어서 질소 분위기 하에서 상기 고체 생성물을 아세트산 200ml에 분산시킨 후 요오드화칼륨(250mmol, 41g), 나트륨 하이포포스파이트 하이드레이트(44g, 500mmol)를 첨가한 다음 3시간 동안 교반 환류하였다. 반응 종료 후 반응 혼합물에 증류수를 과량 넣어 고체를 생성시킨 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 연한 황색의 중간체 E를 11.3g 얻었다(수율 73%).

[0237] ¹H-NMR (400MHz, CDC13) 8.10 (1H), 7.95(1H), 7.91 (2H), 7.70 (2H), 7.73-7.78 (4H), 7.66-7.61 (5H), 7.51 (2H), 7.35 (4H), 7.26 (2H), 1.67 (6H)

[0238] 4) 중간체 F의 합성

[0239] 질소 분위기 하에서 건조된 THF 70ml에 상기 중간체 E(6.3g, 10mmol)를 녹이고, -78℃에서 부틸리튬(4.8ml, 2.5M)을 적가하였다. 동일 온도에서 1시간 동안 교반한 후 트리메틸보레이트(1.7ml, 15mmol)를 첨가하였다. 상온으로 온도를 올리고 1시간 후 2N 염산 수용액을 첨가하고 3시간 동안 교반하였다. 생성된 고체 화합물을 톨루엔으로 씻어 주면서 여과하여 연한 노란색의 중간체 F를 얻었다(4.7g, 81%수율)

[0240] 5) 중간체 G의 합성

[0241] 2,4,6-트리클로로-1,3,5-트리아진(20g, 108.5mmol)을 무수테트라 하이드로퓨란(50mL)에 녹인 후 1M 페닐마그네슘브롬(228mL, 227.8mmol)을 0℃에서 천천히 적가하였다. 상온으로 온도를 올린 후 4시간 동안 교반하였다. 염화암모늄 수용액(200mL)으로 남은 그리냐드 시약(grignard reagent)을 제거한 후, 탄산수소나트륨 수용액(300mL)으로 중화시킨 후 테트라하이드로퓨란(3×50mL)으로 추출하였다. 무수황산마그네슘으로 수분을 제거한 후 여과하고 과량을 용매를 감압증류하여 제거한 후 헥산으로 재결정하여 화학식 G의 화합물(15g, 52 %)을 얻었다(MS: [M+H]=268).

[0242] 6) 최종 화합물 1의 합성

[0243] 상기 중간체 F의 화합물(3.2g, 8.0mmol)과 상기 중간체 G의 화합물(1.7g, 6.3mmol)을 테트라하이드로퓨란(100mL)에 완전히 녹인 후, 2M 탄산칼륨수용액을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐(155mg, 0.013mmol)을 넣은 후 5시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압 농축시키고 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:6으로 걸름하여 상기 화합물 1(1.5g, 36 %)을 제조하였다(MS: [M+H]=677).

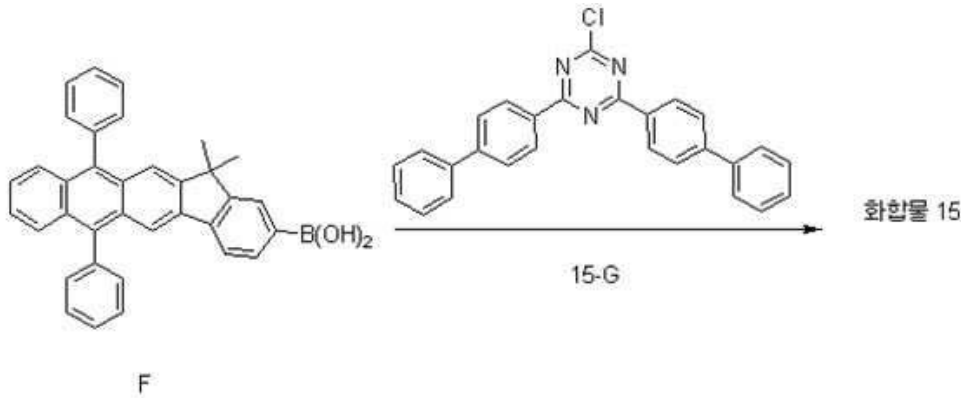
[0244] **합성예 2: 화합물 4의 합성**

[0245] 상기 화합물 1의 합성예 중 중간체 E의 합성에서 2-페닐틸마그네슘브로마이드(0.5M, 50.0mL) 대신 2-페닐마그네슘브로마이드(0.5M, 50.0mL)를 사용한 것을 제외하고는 동일한 과정을 거쳐 화합물 4를 얻었다(MS: [M+H]=778).

[0246] **합성예 3: 화합물 15의 합성**

[0247] 하기 반응식 2에 따라 화합물 15를 합성하였다:

[0248] <반응식 2>



[0249]

[0250] 1) 중간체 15-G의 합성

[0251] 2,4,6-트리클로로-1,3,5-트리아진(20g, 108.5mmol)을 무수테트라 하이드로퓨란(50mL)에 녹인 후 1M 바이페닐마그네슘브롬(228mL, 227.8mmol)을 0°C에서 천천히 적가하였다. 상온으로 온도를 올린 후 4시간 동안 교반하였다. 염화암모늄 수용액(200mL)으로 남은 그리냐드 시약을 제거한 후, 탄산수소나트륨 수용액(300mL)으로 중화시킨 후 테트라하이드로퓨란(3×50mL)으로 추출하였다. 무수황산마그네슘으로 수분을 제거한 후 여과하고 과량을 용매를 감압증류하여 제거한 후 헥산으로 재결정하여 화학식 15-G의 화합물(16.5g, 53%)을 얻었다(MS: [M+H]=420).

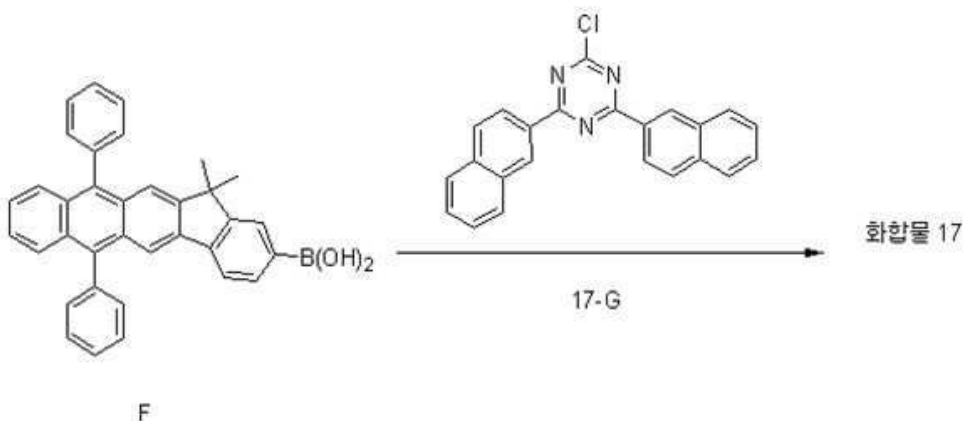
[0252] 2) 최종 화합물 15의 합성

[0253] 상기 중간체 F의 화합물(3.2g, 8.0mmol)과 상기 중간체 15-G의 화합물(1.7g, 6.3mmol)을 테트라하이드로퓨란(100mL)에 완전히 녹인 후, 2M 탄산칼륨수용액을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐(155mg, 0.013mmol)을 넣은 후 5시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압 농축시키고 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:7로 컬럼하여 상기 화합물 15(1.5g, 36 %)를 제조하였다(MS: [M+H]=930).

[0254] **합성예 4: 화합물 17의 합성**

[0255] 하기 반응식 3에 따라 화합물 17를 합성하였다:

[0256] <반응식 3>



[0257]

[0258] 1) 중간체 17-G의 합성

[0259] 2,4,6-트리클로로-1,3,5-트리아진(20g, 108.5mmol)을 무수테트라 하이드로퓨란(50mL)에 녹인 후 1M 2-나프틸마그네슘브롬(233mL, 227.8mmol)을 0°C에서 천천히 적가하였다. 상온으로 온도를 올린 후 5시간 동안 교반하였다. 염화암모늄 수용액(200mL)으로 남은 그리냐드 시약을 제거한 후, 탄산수소나트륨 수용액(300mL)으로 중화시킨 후 테트라하이드로퓨란(3×50mL)으로 추출하였다. 무수황산마그네슘으로 수분을 제거한 후 여과하고 과량을 용

매를 감압증류하여 제거한 후 헥산으로 재결정하여 중간체 17-G의 화합물(15.2g, 49%)을 얻었다(MS: [M+H]=368).

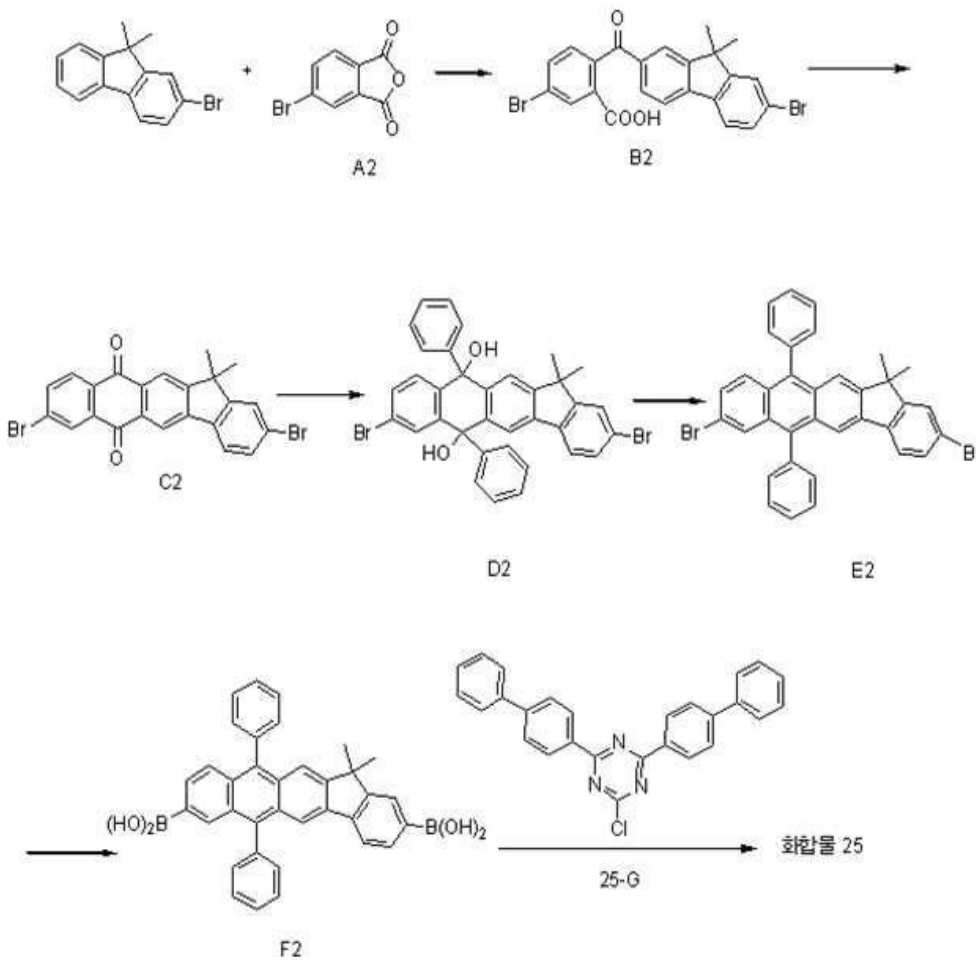
[0260] 2) 최종 화합물 17의 합성

[0261] 상기 중간체 F의 화합물(3.2g, 8.0mmol)과 상기 중간체 17-G의 화합물(1.7g, 6.3mmol)을 테트라하이드로퓨란(100mL)에 완전히 녹인 후, 2M 탄산칼슘수용액을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐(155mg, 0.013mmol)을 넣은 후 5시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압 농축시키고 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:5로 천천히 컬럼하여 상기 화합물 17(1.0g, 31%)을 제조하였다(MS: [M+H]=778).

[0262] **합성예 5: 화합물 25의 합성**

[0263] 하기 반응식 4에 따라 화합물 25를 합성하였다:

[0264] <반응식 4>



[0265]

[0266] 1) 중간체 B2의 합성

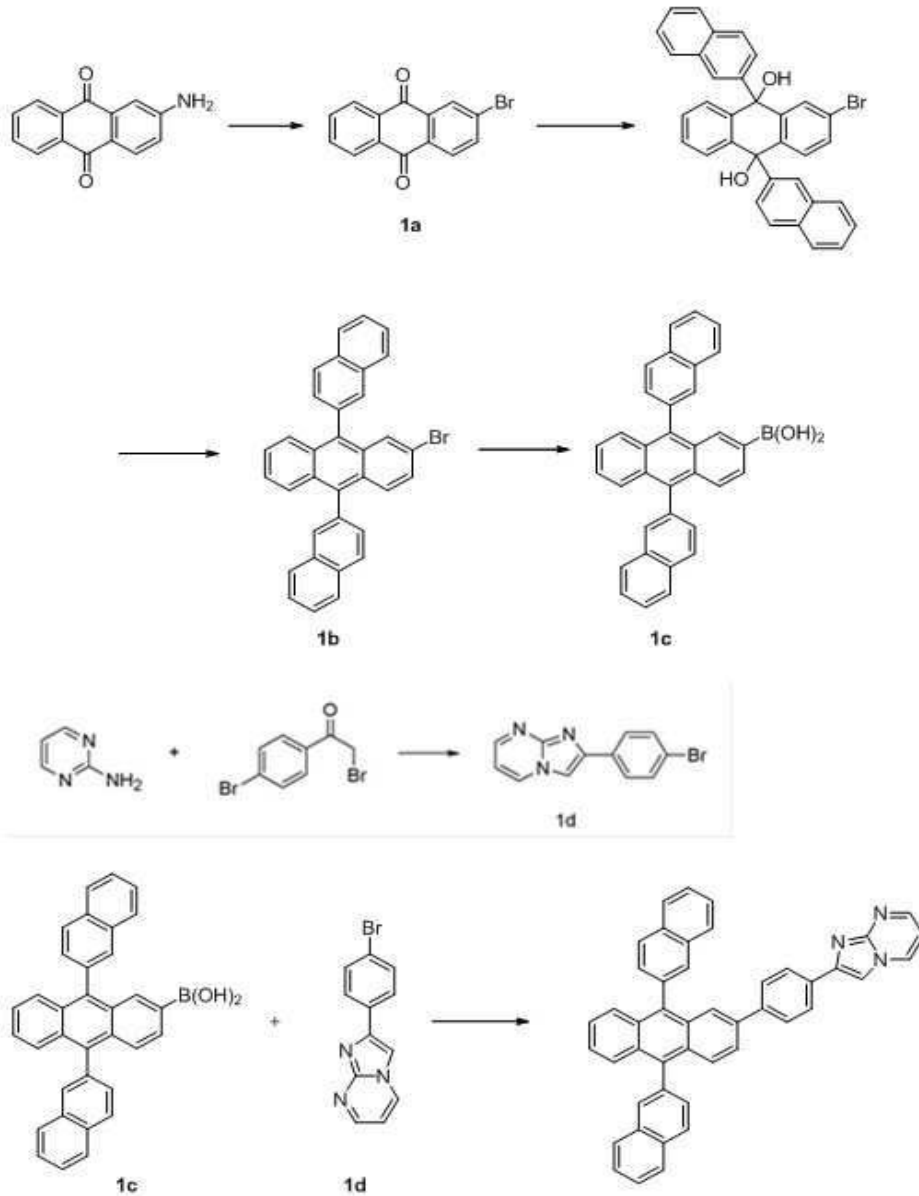
[0267] 2-브로모 디메틸 플루오렌(0.1mol, 27.3g)과 2-브로모 프탈산 무수물(2-bromo-phthalic anhydride)(0.11mol, 16.3g)을 플라스크에 넣고 디클로로메탄을 첨가하였다. 0℃에서 알루미늄 클로라이드(aluminum chloride)(0.15mol, 20g)를 서서히 첨가한 다음 상온에서 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 반응 혼합물에 증류수를 천천히 첨가한 다음 디클로로메탄으로 추출한 후 용매를 제거하여 고체를 얻었다. 생성된 고체를 헥산으로 세척하고 여과하고 건조하여 중간체 B2를 29.6g(77% 수율) 얻었다.

[0268] ¹H-NMR (400MHz, CDC13) 8.23 (1H), 7.99 (1H), 7.93 (2H), 7.83 (1H), 7.75 (3H), 7.66 (1H), 7.53 (1H), 1.67 (6H)

[0269] 2) 중간체 C2의 합성

- [0270] 중간체 B2(80.0mmol, 29.6g)을 플라스크에 넣고 폴리인산을 첨가하고 130℃에서 2시간 동안 교반하였다. 상온으로 냉각시킨 후 증류수를 서서히 첨가하여 생성된 고체를 여과하고 소량의 메탄올로 세척하여 중간체 C2를 25.6g (81% 수율) 얻었다.
- [0271] ¹H-NMR (400MHz, CDC13) 8.84 (1H), 8.12 (1H), 7.78-7.75 (4H), 7.56 (3H), 1.67 (6H)
- [0272] 3) 중간체 E2의 합성
- [0273] 질소 분위기 하에서 건조된 THF 250ml에 상기 중간체 C(24.8mmol, 10g)를 넣고 -78℃로 온도를 낮춘 후 2-페닐마그네슘브로마이드(0.5M, 50.0mL)를 천천히 첨가하였다. 상온으로 온도를 올리고 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화암모늄 수용액을 첨가한 후 디클로로메탄으로 추출하였다. 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조하고 용매를 제거하였다. 이로부터 얻은 혼합물을 에틸에테르 소량으로 녹인 후, 석유에테르를 첨가하여 수 시간 동안 교반하여, 고체화합물을 얻었다. 이를 여과한 후 진공 건조하여 고체 생성물을 얻었다. 이어서 질소 분위기 하에서 상기 고체 생성물을 아세트산 200ml에 분산시킨 후 요오드화칼륨(250mmol, 41g), 나트륨 하이포 포스파이트 하이드레이트(44g, 500mmol)를 첨가한 다음 3시간 동안 교반 환류하였다. 반응 종료 후 반응 혼합물에 증류수를 과량 넣어 고체를 생성시킨 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 연한 황색의 중간체 E를 11.3g 얻었다(수율 73%).
- [0274] ¹H-NMR (400MHz, CDC13) 8.10 (1H), 7.95(1H), 7.91 (2H), 7.70 (2H), 7.73-7.78 (4H), 7.66-7.61 (5H), 7.51 (2H), 7.35 (4H), 7.26 (2H), 1.67 (6H)
- [0275] 4) 중간체 F2의 합성
- [0276] 질소 분위기 하에서 건조된 THF 70ml에 상기 중간체 E2(6.3g, 10mmol)를 녹이고, -78℃에서 부틸리튬(7.2ml, 2.5M)을 적가하였다. 동일 온도에서 1시간 동안 교반한 후 트리메틸보레이트(5.0ml, 15mmol)를 첨가하였다. 상온으로 온도를 올리고 1시간 후 2N 염산 수용액을 첨가하고 3시간 동안 교반하였다. 생성된 고체 화합물을 톨루엔으로 씻어 주면서 여과하여 연한 노란색의 중간체 F를 얻었다(4.7g, 81%수율).
- [0277] 5) 중간체 25-G의 합성
- [0278] 2,4,6-트리클로로-1,3,5-트리아진(20g, 108.5mmol)을 무수테트라 하이드로퓨란(50mL)에 녹인 후 1M 바이페닐마그네슘브롬(228mL, 227.8mmol)을 0℃에서 천천히 적가하였다. 상온으로 온도를 올린 후 4시간 동안 교반하였다. 염화암모늄 수용액(200mL)으로 남은 그리냐드 시약을 제거한 후, 탄산수소나트륨 수용액(300mL)으로 중화시킨 후 테트라하이드로퓨란(3×50mL)으로 추출하였다. 무수황산마그네슘으로 수분을 제거한 후 여과하고 과량을 용매를 감압증류하여 제거한 후 헥산으로 재결정하여 화학식 25-G의 화합물(17g, 52%)을 얻었다(MS: [M+H]=420).
- [0279] 6) 최종 화합물 25의 합성
- [0280] 상기 중간체 F2의 화합물(3.2g, 8.0mmol)과 상기 중간체 25-G의 화합물(5.1g, 18.9mmol)을 테트라하이드로퓨란(100mL)에 완전히 녹인 후, 2M 탄산칼륨수용액을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐(200mg, 0.018mmol)을 넣은 후 15시간 동안 가열 교반하였다. 상온으로 온도를 낮추고 물층을 제거하고 무수황산마그네슘으로 건조한 후 감압 농축시키고 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:6으로 1회 칼럼, 테트라하이드로퓨란:헥산 = 1:3으로 1회 칼럼하여 상기 화합물 25(1.5g, 32 %)를 제조하였다(MS: [M+H]=1214).
- [0281] **비교합성예 1: 화합물 201의 합성**
- [0282] 하기 반응식 5에 따라 화합물 201을 합성하였다:

[0283] <반응식 5>



[0284]

[0285]

[0286] 1) 중간체 1a의 합성

[0287] 브롬산 250ml에 브롬화구리 (10g, 44mmol)과 2-아미노안트라퀴논(8g, 35.8mmol)을 넣고, 65?로 가열하였다. 기체 발생이 끝나면 상온으로 냉각시킨 다음, 반응용액을 20% 염산 수용액(1000ml)에 첨가한 후, 디클로로메탄으로 추출하였다. 유기층의 잔류 수분을 무수 황산마그네슘으로 제거한 후 감압하여 건조시켰다. 칼럼크로마토그래피로 분리(디클로로메탄:노르말헥산= 4:1)하여 중간체 1a를 7.7g 얻었다.

[0288] 2) 중간체 1b의 합성

[0289] 질소 분위기 하에서 건조된 THF 100ml에 상기 중간체 1a(10g, 34.8mmol)를 넣고 -78?로 온도를 낮춘 후 2-나프틸마그네슘브로마이드(0.5M, 10mmol)를 천천히 첨가하였다. 상온으로 온도를 올리고 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물에 염화암모늄수용액을 첨가한 후 메틸렌클로라이드로 추출하였다. 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조하고 용매를 제거하였다. 이로부터 얻은 혼합물을 에틸에테르 소량으로 녹인 후, 석유에테르를 첨가하여 수 시간동안 교반하여, 고체화합물을 얻었다. 이를 여과한 후 진공 건조하여 디나프틸디알콜 17.6g을 얻었다.

[0290] 질소 분위기 하에서 상기 디나프틸디알콜(17.6g, 32.4mmol)을 아세트산 200ml에 분산시킨 후 요오드화칼륨 (53.4g, 330mmol), 나트륨 하이포 포스파이트 하이드레이트(58g, 660mmol)를 첨가한 다음 3시간 동안 교반 환

화합물 201

류하였다. 이를 상온으로 냉각한 후 여과하고 물과 메탄올로 씻은 후 진공 건조하여 연한 황색의 중간체 1b를 11.3g 얻었다.

[0291] 3) 중간체 1c의 합성

[0292] 질소 분위기 하에서 건조된 THF 70ml에 상기 중간체 1b(5g, 9.81mmol)를 녹이고, -78℃에서 부틸리튬(4.7ml, 11.8mmol)을 적가하였다. 동일 온도에서 1시간 동안 교반한 후 트리메틸보레이트 (2.20ml, 29.4mmol)를 첨가하였다. 상온으로 온도를 올리고 1시간 후 2N 염산 수용액을 첨가하고 3시간 동안 교반하였다. 생성된 고체 화합물을 톨루엔으로 씻어 주면서 여과하여 연한 노란색의 중간체 1c를 얻었다(3.27g, 70%수율).

[0293] 4) 중간체 1d의 합성

[0294] 에탄올(150ml)에 2-아미노피리미딘(3.39g, 35.98mmol)과 2,4'-디브로모아세토펜(10g, 35.98mmol)을 녹이고 12시간 동안 환류하였다. 상온으로 냉각하면 흰색 고체가 생성되며 이것을 NaHCO₃ 포화 수용액으로 씻어 주면서 여과하였다. 유기층의 잔류 수분을 무수황산마그네슘으로 제거한 후 감압 건조한 다음, 재결정(디클로로메탄/노르말헥산)하여 관상의 결정 형태를 갖는 중간체 1d를 얻었다(8.02g, 82% 수율).

[0295] 5) 화합물 201의 합성

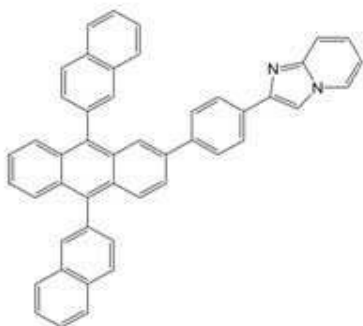
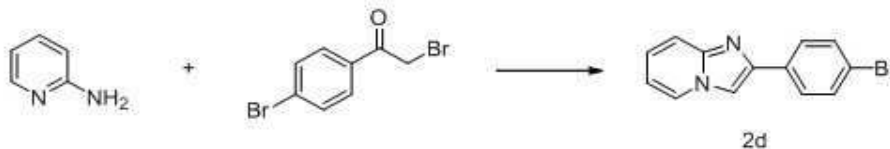
[0296] 상기 중간체1c(1.85g, 3.90mmol)와 중간체 1d(1g, 3.90mmol)를 탄산칼륨(2.7g, 19.5mmol) 수용액과 THF의 혼합 용매에 넣고 교반하면서 Pd(PPh₃)₄ (225mg, 0.196mmol)를 넣고 6시간 동안 환류하였다. 상온으로 냉각한 후 생성된 고체 화합물을 물과 에탄올, 톨루엔으로 씻어 주면서 여과하여 화합물 201을 얻었다(1.73g, 71% 수율).

[0297] ¹H NMR (400MHz, CDC1₃) 8.51(1H), 8.40(1H), 8.12(1H), 8.06-7.99(5H), 7.96(2H), 7.85(1H), 7.78-7.59(15H), 7.32(2H), 6.84(1H)

[0298] **비교합성예 2: 화합물 202의 합성**

[0299] 상기 비교합성예 1의 합성 과정 중, 중간체 1d의 화합물 대신 하기 중간체 2d의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 하기 화합물 202를 얻었다(1.73g, 71% 수율).

[0300] ¹H NMR (400MHz, CDC1₃) 8.13-8.04 (7H), 8.01 (1H), 7.97-7.92 (4H), 7.86-7.82 (2H), 7.75 (2H), 7.71-7.58(10H), 7.32 (2H), 7.15 (1H), 6.75 (1H)



화합물 202

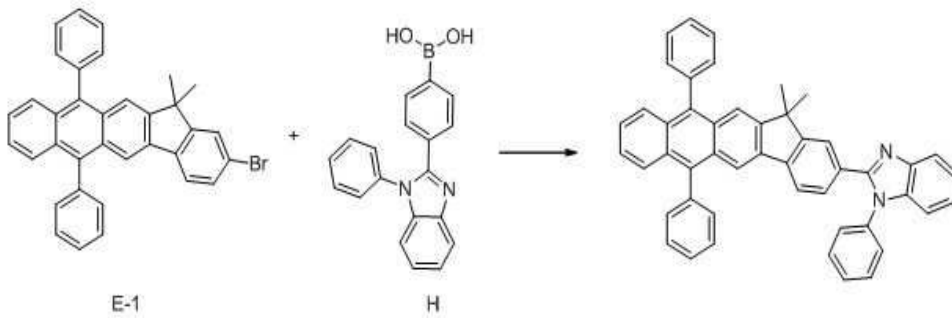
[0301]

[0302] **비교합성예 3: 화합물 203의 합성**

[0303] 상기 합성예 1의 합성 과정 중, 중간체 E의 합성시 나프틸기 대신 페닐기를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 E-1을 합성하였으며, 상기 중간체 E-1 (2.05g, 3.90mmol)과 중간체 H (1.23g, 3.90mmol)를 탄산칼륨 (2.7g, 19.5mmol) 수용액과 톨루엔의 혼합 용매에 넣고 교반하면서 Pd(PPh₃)₄(225mg, 0.196mmol)를 넣고 6시간 동안 환류하였다. 상온으로 냉각한 후 생성된 고체 화합물을 물과 에탄올, 톨루엔으로 씻어 주면서 여과하여 하

기 화합물 203을 얻었다(1.74g, 70% 수율).

[0304] $^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3) 8.52 (1H), 8.27 (1H), 8.10 (1H), 7.83 (2H), 7.74 (1H), 7.68 (4H), 7.59-7.42 (16H), 7.22 (2H), 1.67 (6H)



화합물 203

[0305]

[0306] **실시예 1**

[0307] 애노드로는 코닝사(Corning)의 $15\Omega/\text{cm}^2(1200\text{\AA})$ ITO 유리 기판을 $50\text{mm}\times 50\times 0.7\text{mm}$ 크기로 잘라 이소프로필 알코올과 순수에서 각각 5분간 초음파 세정한 후 15분간 자외선을 조사하고, 오존에 노출시켜 세정한 후, 진공 증착 장치에 상기 ITO 유리 기판을 장착하였다. 상기 ITO 상부에, m-MDATA를 진공 증착하여 600\AA 두께의 정공 주입층을 형성한 다음, 상기 정공 주입층 상부에 NPB를 진공 증착하여 300\AA 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 상기 정공 수송층 상부에 녹색 발광 호스트로서 Alq_3 를 98%, 녹색 도펀트로서 C545T를 2% 사용하여 300\AA 두께의 발광층을 형성하였다. 상기 발광층 상부에 화합물 1을 진공 증착하여 300\AA 두께의 전자 수송층을 형성하였다. 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 진공 증착하여 10\AA 두께의 전자 주입층을 형성한 다음, Al을 진공 증착하여 3000\AA 두께의 캐소드를 형성함으로써, 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0308] **실시예 2**

[0309] 전자 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 4를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0310] **실시예 3**

[0311] 전자 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 15를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0312] **실시예 4**

[0313] 전자 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 17을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0314] **실시예 5**

[0315] 전자 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 25를 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0316] **비교예 1**

[0317] 전자 수송층 형성시 화합물 1 대신 Alq_3 (aluminum tris(8-hydroxyquinoline))을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0318] **비교예 2**

[0319] 전자 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 201을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0320] **비교예 3**

[0321] 전자 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 202을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0322] **비교예 4**

[0323] 전자 수송층 형성시 화합물 1 대신 화합물 203을 이용하였다는 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 완성하였다.

[0324] **평가예**

[0325] 상기 실시예 1 내지 5의 유기 발광 소자 및 비교예 1 내지 4의 유기 발광 소자에 대하여, PR650 (Spectroscan) Source Measurement Unit.(PhotoResearch사 제품)를 이용하여 전류밀도, 구동전압, 발광효율, 색좌표 및 수명 (T_{50%}: 휘도가 50%로 저하되는데 걸리는 시간)을 평가하였고 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

	전자수송층 재료	구동전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	발광효율 (cd/A)	수명 (h)	색좌표
실시예11	화합물 1	6.38	50	15.3	75	(0.309, 0.642)
실시예2	화합물 4	6.44	50	15.8	89	(0.309, 0.641)
실시예3	화합물 15	5.81	50	13.9	63	(0.310, 0.643)
실시예4	화합물 17	5.36	50	12.5	44	(0.309, 0.641)
실시예5	화합물 25	6.74	50	14.9	112	(0.310, 0.642)
비교예1	Alq ₃	7.52	50	11.9	38	(0.309, 0.641)
비교예2	화합물 201	7.23	50	10.8	40	(0.309, 0.639)
비교예3	화합물 202	7.03	50	9.7	45	(0.309, 0.640)
비교예4	화합물 203	7.34	50	10.3	29	(0.309, 0.641)

[0327] 상기 표 1로부터, 실시예 1 내지 5의 유기 발광 소자는 비교예 1 내지 4의 유기 발광 소자보다 구동 전압이 낮고 발광효율이 높으며 보다 긴 수명을 가져 우수한 성능을 가짐을 확인할 수 있다.

[0328] 본 발명에 대하여 상기 합성예 및 실시예를 참조하여 설명하였으나, 이는 예시적인 것에 불과하며, 본 발명에 속하는 기술 분야의 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서, 본 발명의 진정한 기술적 보호 범위는 첨부된 특허청구범위의 기술적 사항에 의하여 정해져야 할 것이다.

부호의 설명

- [0329] 10: 유기 발광 소자
- 11: 기관
- 12: 제1전극
- 13: 정공 주입층
- 14: 정공 수송층
- 15: 발광층
- 16: 전자 수송층
- 17: 전자 주입층
- 18: 제2전극

도면

도면1

