



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2022년05월17일
(11) 등록번호 10-2399010
(24) 등록일자 2022년05월12일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01)
C07D 403/10 (2006.01) C07D 403/12 (2006.01)
H01L 31/0256 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C09K 11/06 (2022.01)
C07D 209/82 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2015-0086663

(22) 출원일자 2015년06월18일

심사청구일자 2020년03월19일

(65) 공개번호 10-2016-0149527

(43) 공개일자 2016년12월28일

(56) 선행기술조사문헌

JP2015027986 A*
KR101493482 B1*
KR1020150006694 A*

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자

덕산네오룩스 주식회사

충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32

(72) 발명자

이범성

경기도 화성시 탄요 1길 98번지 29동 2호

이선희

경기도 화성시 동탄공원로1길 6-60, 112동 403호
(반송동, 우림필유타운하우스아파트)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

특허법인주원

전체 청구항 수 : 총 11 항

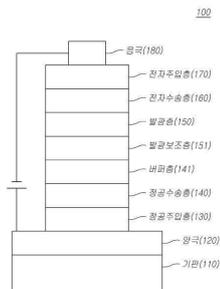
심사관 : 송이화

(54) 발명의 명칭 유기전기소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치

(57) 요약

본 발명은 소자의 발광효율, 안정성 및 수명을 향상시킬 수 있는 신규 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 전자 장치를 제공한다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 403/10 (2013.01)
C07D 403/12 (2013.01)
H01L 51/0062 (2013.01)
H01L 51/5056 (2013.01)
H01L 51/5072 (2013.01)
H01L 2031/0344 (2013.01)
H01L 2251/10 (2013.01)
H01L 2251/50 (2013.01)
Y02E 10/549 (2020.08)

(72) 발명자

문성윤

충청남도 천안시 서북구 성거읍 천홍3길 19-1, 신비텔 11동 204호

소기호

충청남도 천안시 서북구천홍3길 19-1 202호

박형근

강원도 춘천시 후석로228번길 24 석사 2지구 아파트 211동 1501호

박종광

울산광역시 중구 산전2길 19 (동동)

김대성

경기도 용인시 처인구지삼로 590번길 9 용인행정타운 두산위브 2단지 201동 1004호

이문재

충청남도 천안시 동남구 통정3로 68 신방한성필하우스아파트 112동 104호

명세서

청구범위

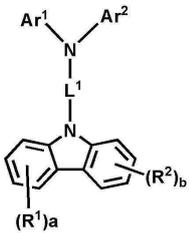
청구항 1

제 1전극, 제 2 전극, 및 상기 제 1전극과 상기 제 2전극 사이에 형성된 유기물층을 포함하는 유기전기소자에 있어서,

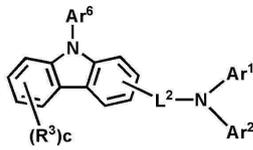
상기 유기물층은, 상기 제 1전극과 발광층 사이에 형성되는 발광보조층과 상기 제 1전극과 발광 보조층 사이에 형성되는 정공수송층 및 전자수송층을 포함하며,

상기 정공수송층 또는 발광보조층은 하기 화학식 (3) 내지 화학식 (5) 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하고, 상기 전자수송층은 하기 화학식 (2)로 나타낸 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

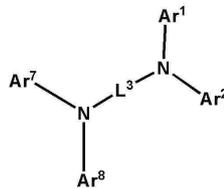
화학식 (3)



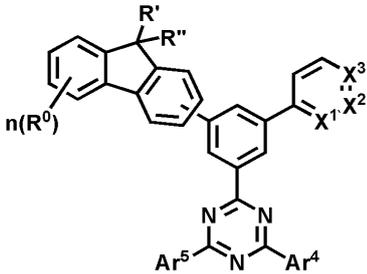
화학식 (4)



화학식 (5)



화학식 (2)



[상기 화학식 (2), (3), (4) 또는 (5)에서,

1) Ar¹, Ar²는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리; 로 이루어진 군에서 선택되며, 또는 Ar¹와 Ar²는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

2) a, b 및 c는 서로 독립적으로 0~4의 정수이며,

R¹, R² 및 R³은 서로 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 중수소; 할로젠; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리; C₁~C₅₀의 알킬기; 및 C₂~C₂₀의 알켄일기;로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 a, b, c가 2 이상인 경우 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R¹끼리 혹은 복수의 R²끼리 혹은 복수의 R³끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

3) L¹ 및 L³은 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리;로 이루어진 군에서 선택되며,

4) L²는 C₆~C₆₀의 단일결합; 아릴렌기; 플루오렌일렌기; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포

합하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되고,

5) Ar⁶, Ar⁷ 및 Ar⁸은 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되고,}

6) Ar⁴ 및 Ar⁵는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기;

7) X¹, X² 및 X³은 서로 독립적으로 CR⁴ 또는 N 이고, 단, 적어도 하나는 N이며,

8) R⁴는 수소이고,

9) n는 0~4의 정수이며, R⁰는 서로 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 중수소; 할로겐; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;C₁~C₅₀의 알킬기; 및 C₂~C₂₀의 알켄일기;로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 n이 2 이상인 경우 복수의 R⁰끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

10) R', R"는 서로 독립적으로 수소, C₁~C₅₀의 알킬기; C₆~C₆₀의 아릴기;플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되고 R'와 R"는 서로 결합하여 스파이로 고리를 형성할 수 있고,

여기서, 상기 아릴기, 헤테로아릴기, 플루오렌닐기, 아릴렌기, 헤테로고리기는 각각 중수소; 할로겐; 시아노기; 니트로기; C₁~C₂₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₆~C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₂~C₂₀의 헤테로고리기; 및 C₃~C₂₀의 시클로알킬기; 로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 수 있다.]

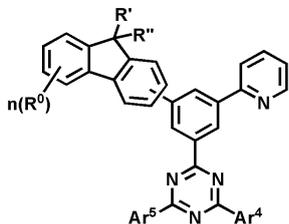
청구항 2

삭제

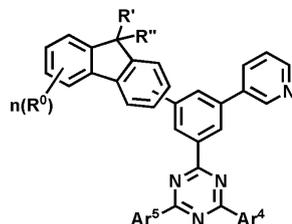
청구항 3

제 1항에 있어서, 상기 화학식 (2)로 표시되는 화합물이 하기 화학식 (6) 내지 (8) 중 어느 하나로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 하는 유기전기소자

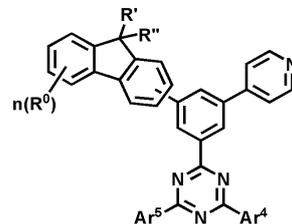
화학식 (6)



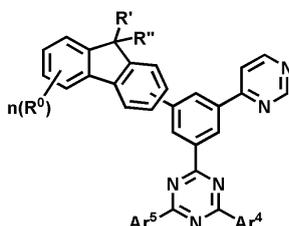
화학식 (7)



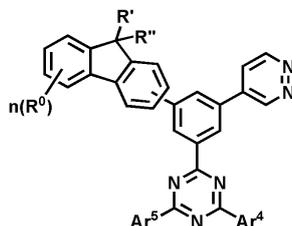
화학식 (8)



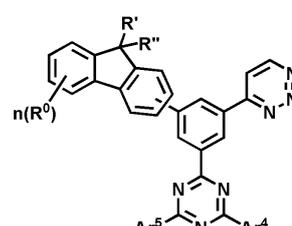
화학식 (9)



화학식 (10)



화학식 (11)

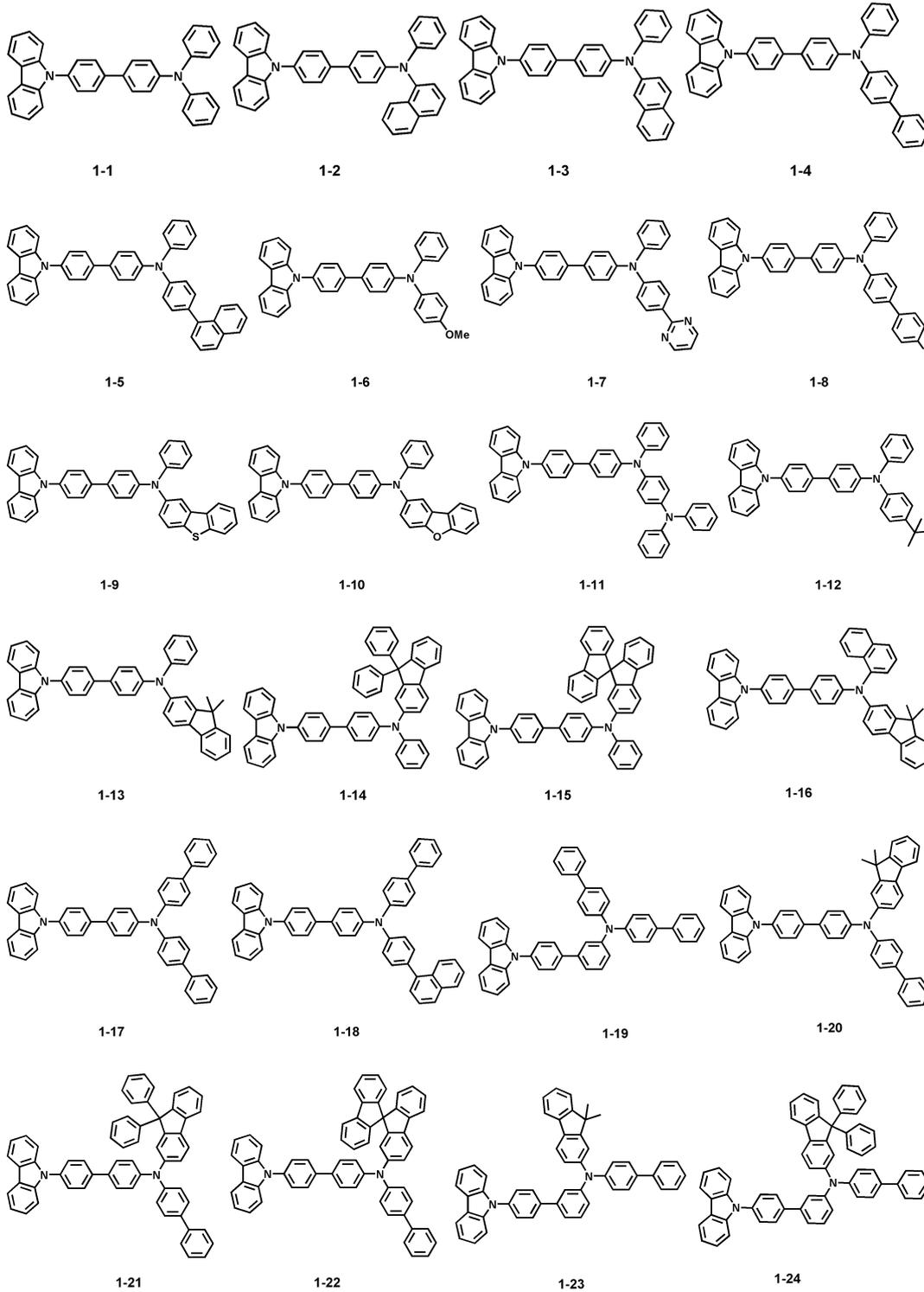


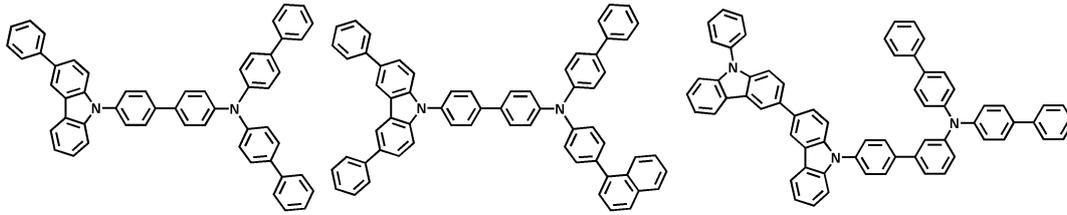
(상기 화학식 (6) 내지 (11)에서,

Ar^4 , Ar^5 , R^0 , n , R' , R'' 은 상기 청구항 1의 화학식 (2)에서 정의된 Ar^4 , Ar^5 , R^0 , n , R' , R'' 와 같다.)

청구항 4

제 1항에 있어서, 상기 화학식 하기 화학식 (3), (4) 또는 화학식 (5)로 나타낸 화합물이 하기와 같이 표시되는 화합물 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

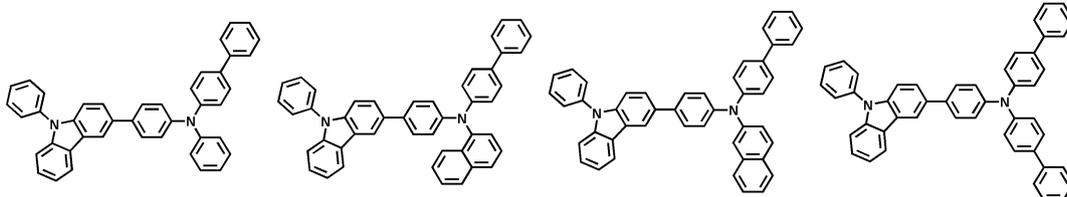




1-25

1-26

1-27

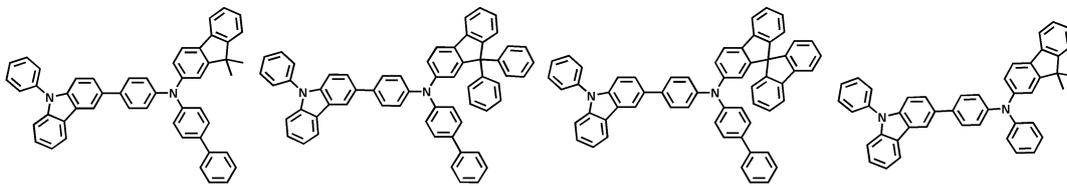


1-28

1-29

1-30

1-31

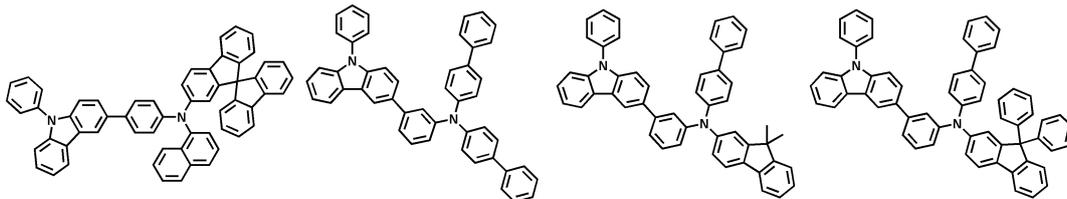


1-32

1-33

1-34

1-35

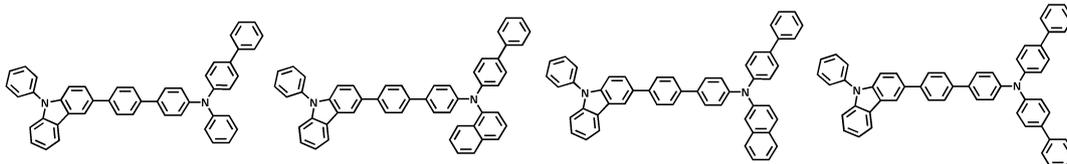


1-36

1-37

1-38

1-39

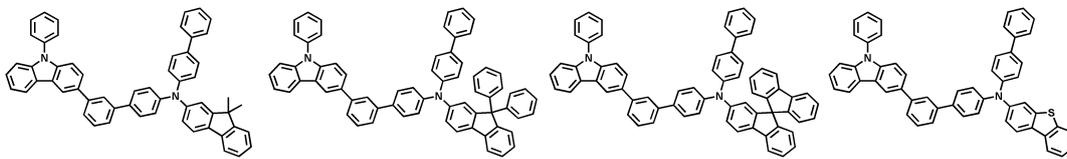


1-40

1-41

1-42

1-43

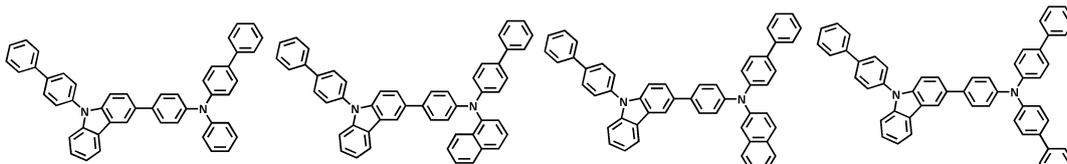


1-44

1-45

1-46

1-47

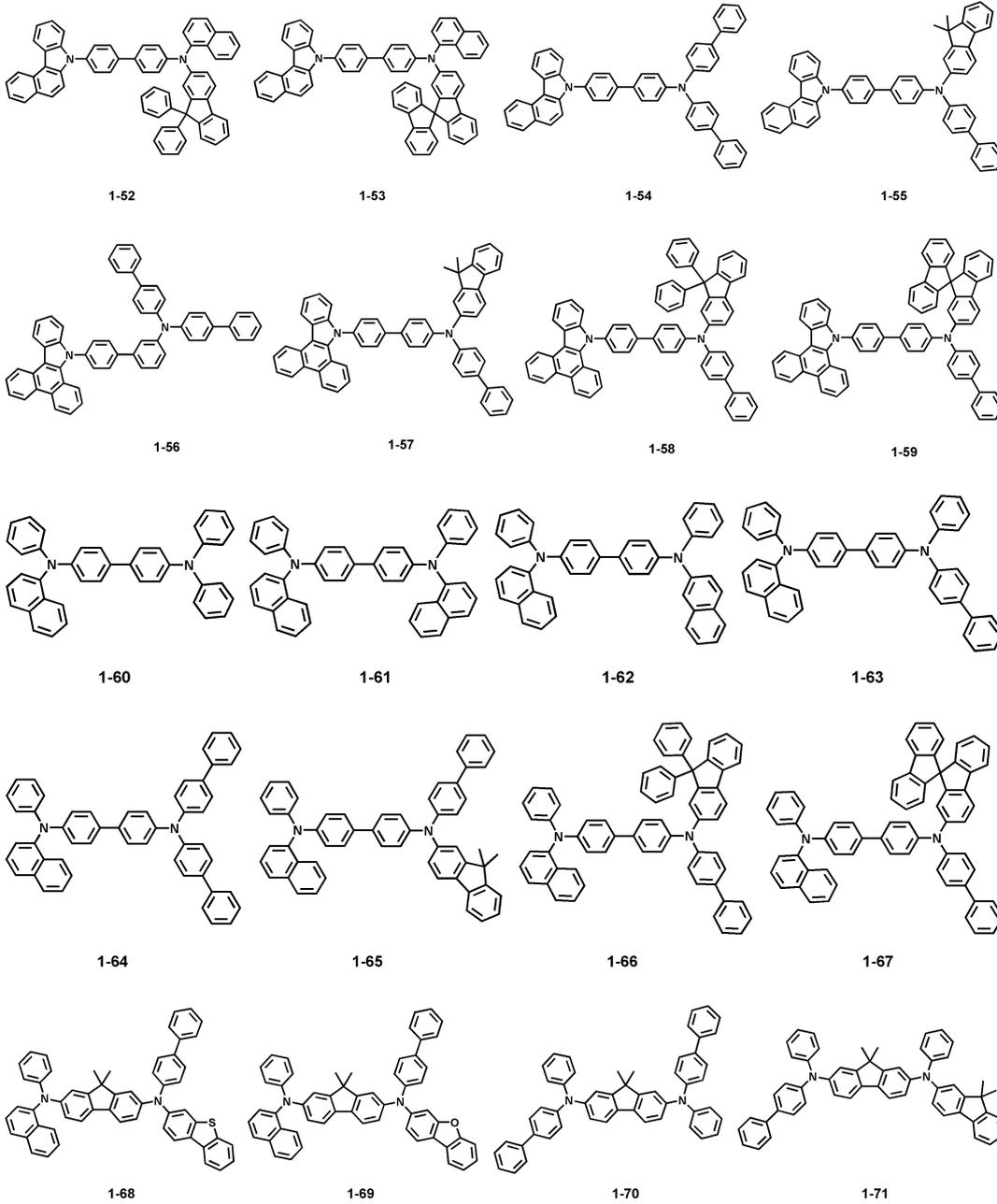


1-48

1-49

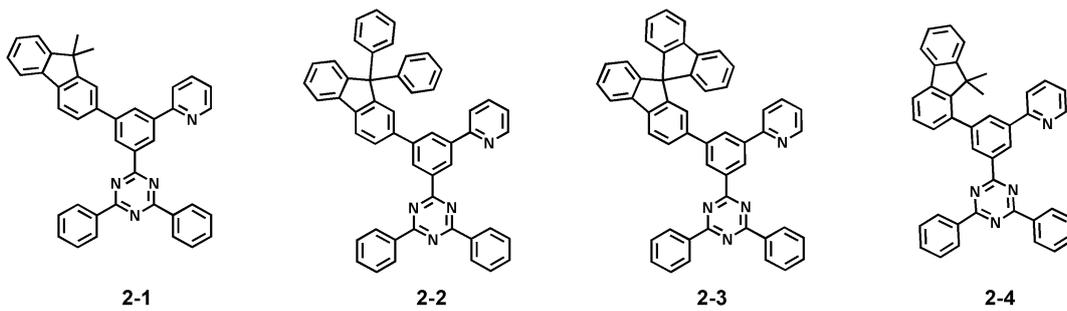
1-50

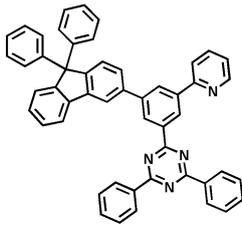
1-51



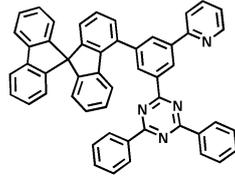
청구항 5

제 1항에 있어서, 상기 화학식 (2)로 나타낸 화합물이 하기와 같이 표시되는 화합물 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

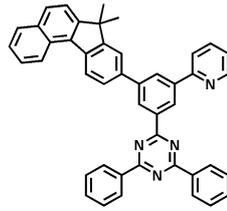




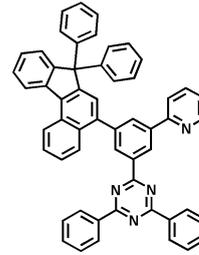
2-5



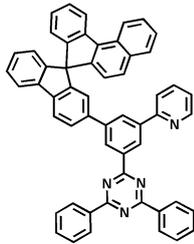
2-6



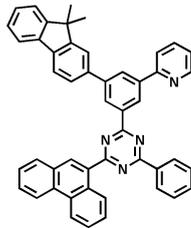
2-7



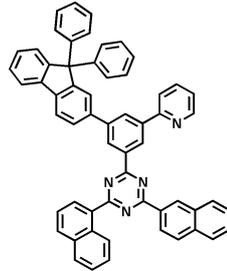
2-8



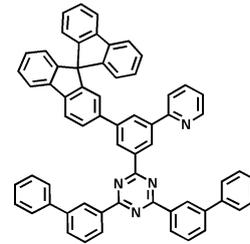
2-9



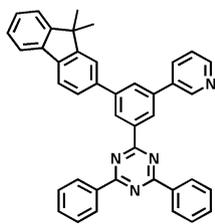
2-10



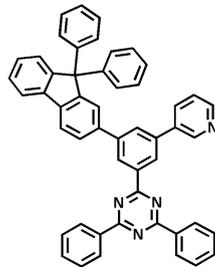
2-11



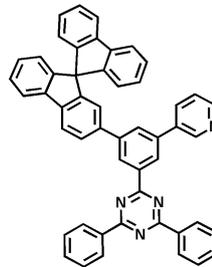
2-12



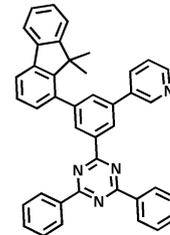
2-13



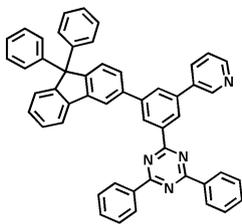
2-14



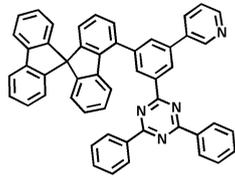
2-15



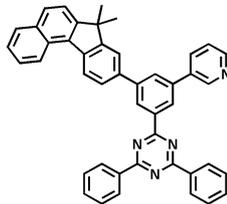
2-16



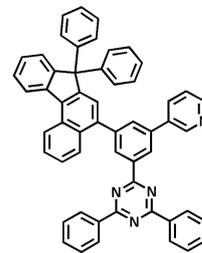
2-17



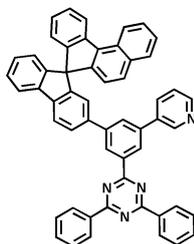
2-18



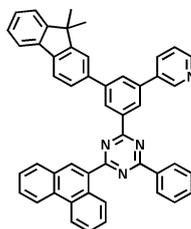
2-19



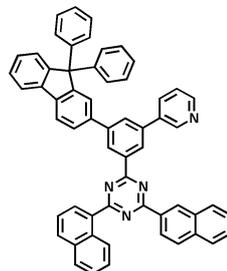
2-20



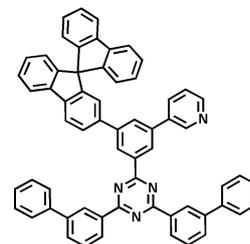
2-21



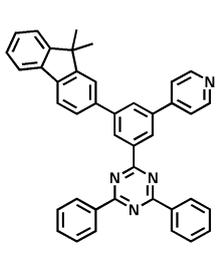
2-22



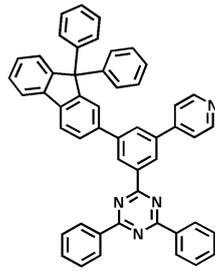
2-23



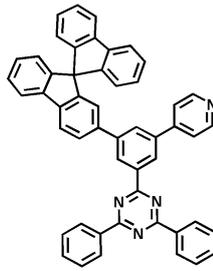
2-24



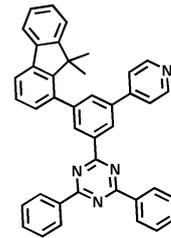
2-25



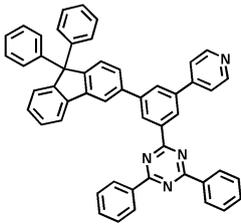
2-26



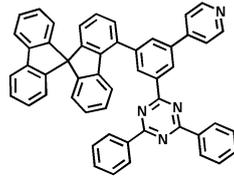
2-27



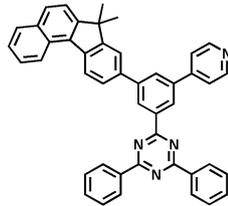
2-28



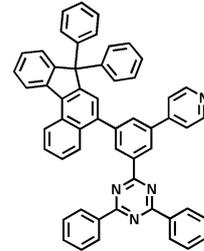
2-29



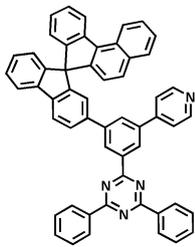
2-30



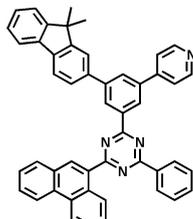
2-31



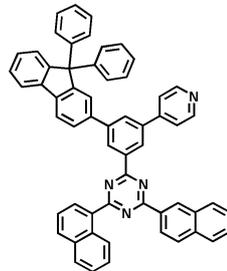
2-32



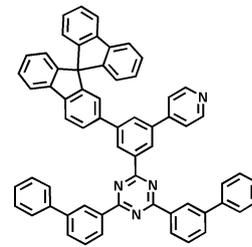
2-33



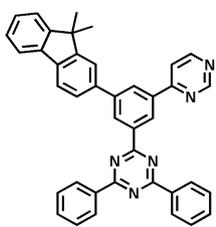
2-34



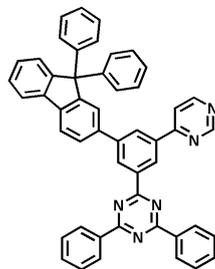
2-35



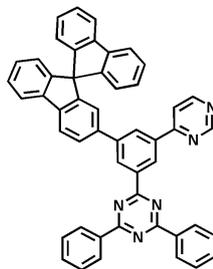
2-36



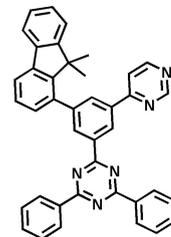
2-37



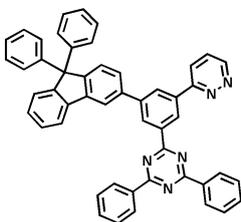
2-38



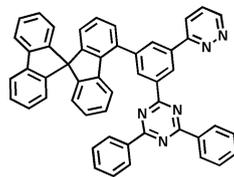
2-39



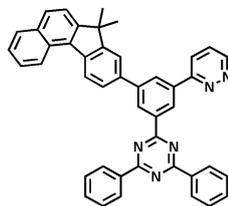
2-40



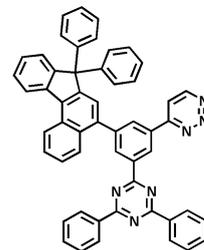
2-41



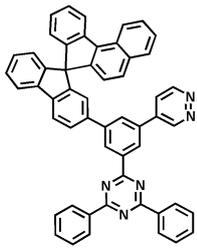
2-42



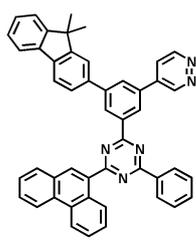
2-43



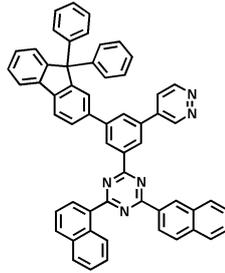
2-44



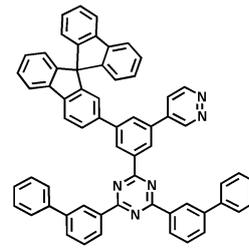
2-45



2-46



2-47

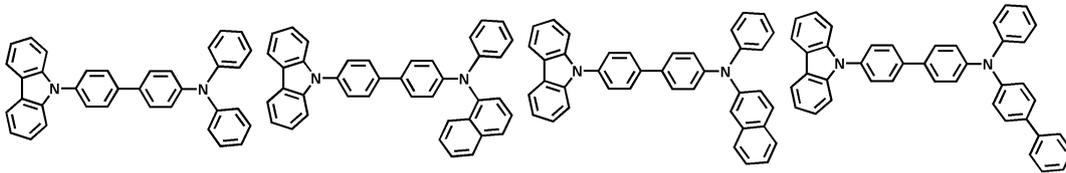


2-48

청구항 6

제 1항에 있어서, 상기 화학식 (3) 내지 (5) 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-71 중 어느 하나로 표시되는 화합물이고,

상기 화학식 (2)로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2-1 내지 2-48 중 어느 하나로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

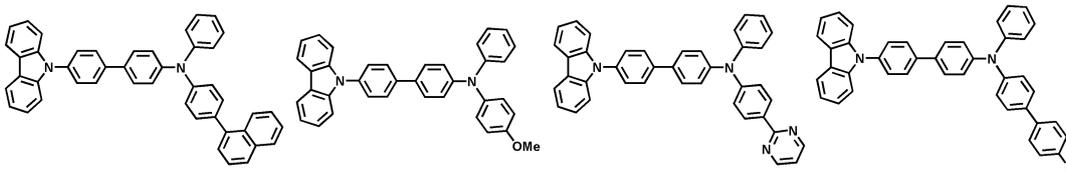


1-1

1-2

1-3

1-4

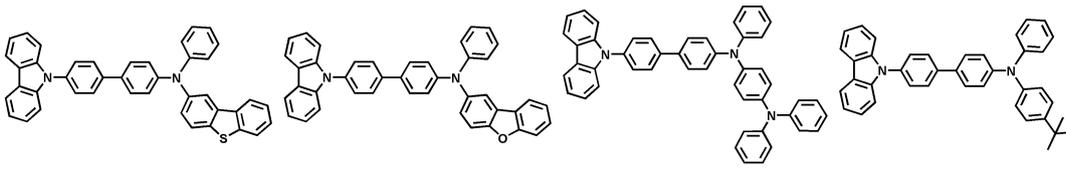


1-5

1-6

1-7

1-8

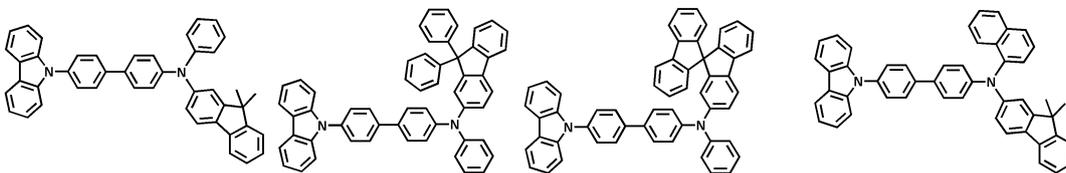


1-9

1-10

1-11

1-12

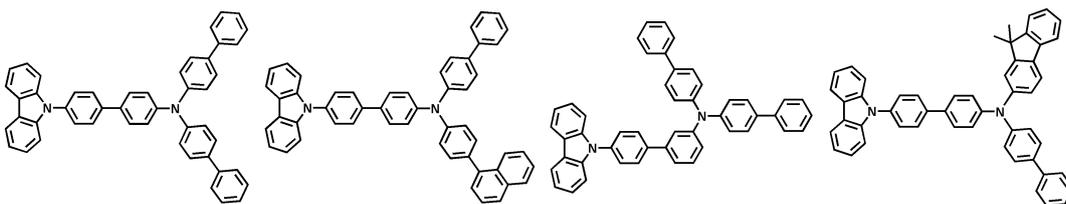


1-13

1-14

1-15

1-16

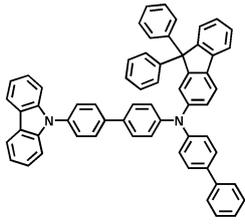


1-17

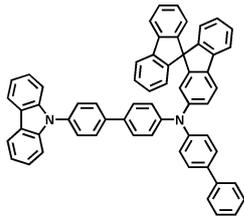
1-18

1-19

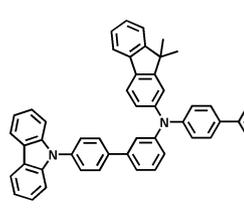
1-20



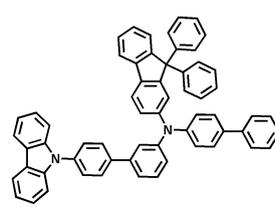
1-21



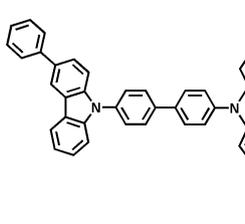
1-22



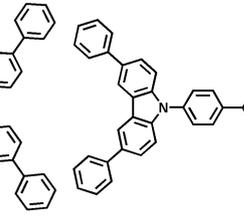
1-23



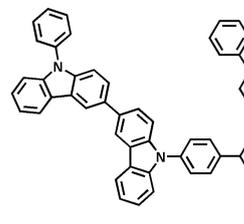
1-24



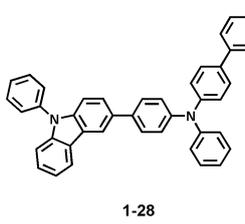
1-25



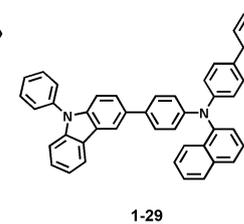
1-26



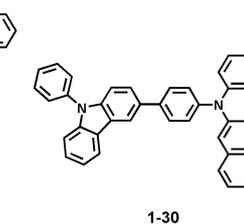
1-27



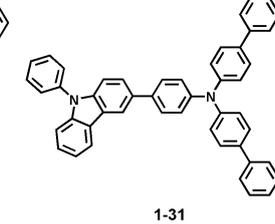
1-28



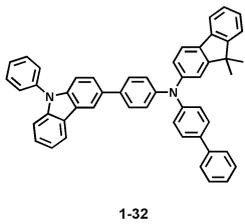
1-29



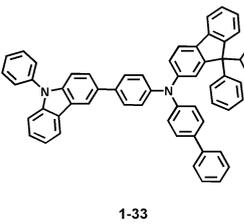
1-30



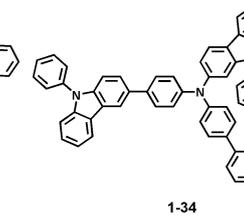
1-31



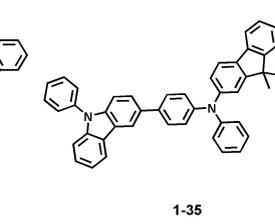
1-32



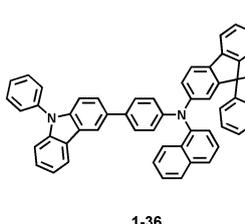
1-33



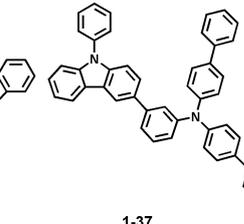
1-34



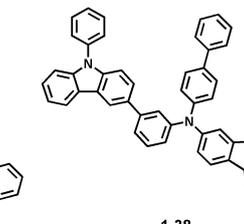
1-35



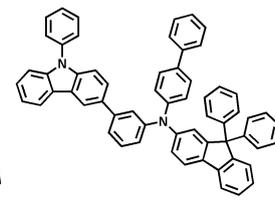
1-36



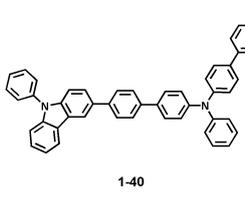
1-37



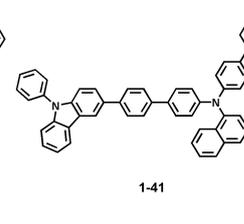
1-38



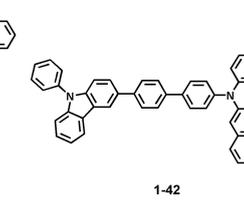
1-39



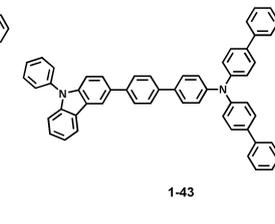
1-40



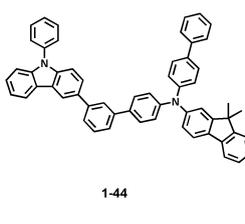
1-41



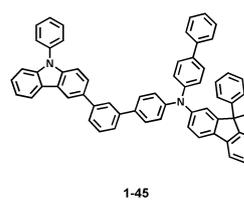
1-42



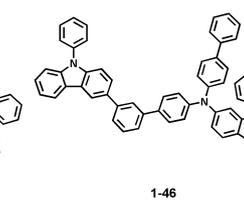
1-43



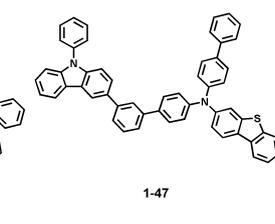
1-44



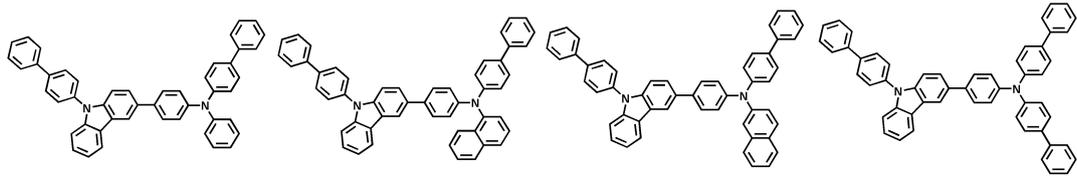
1-45



1-46



1-47

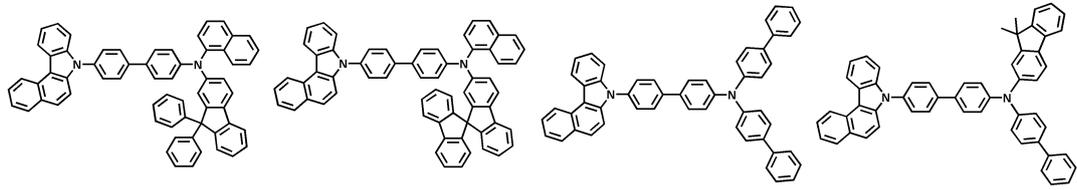


1-48

1-49

1-50

1-51

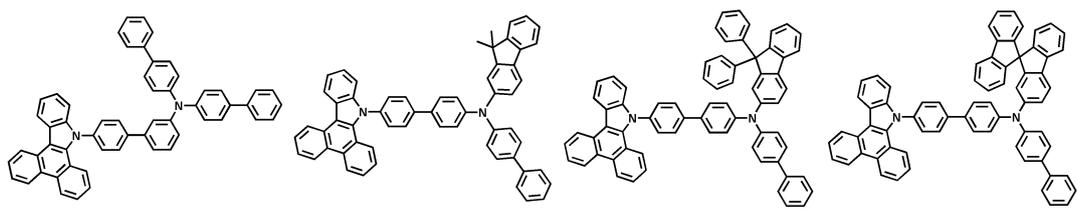


1-52

1-53

1-54

1-55

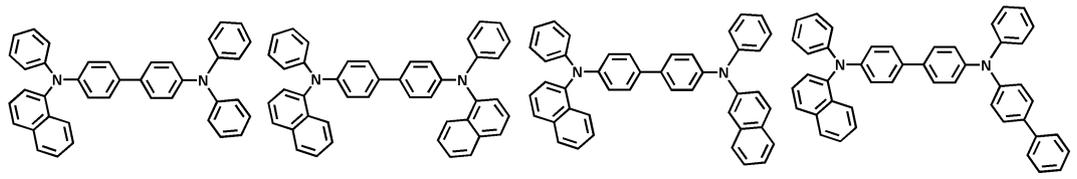


1-56

1-57

1-58

1-59

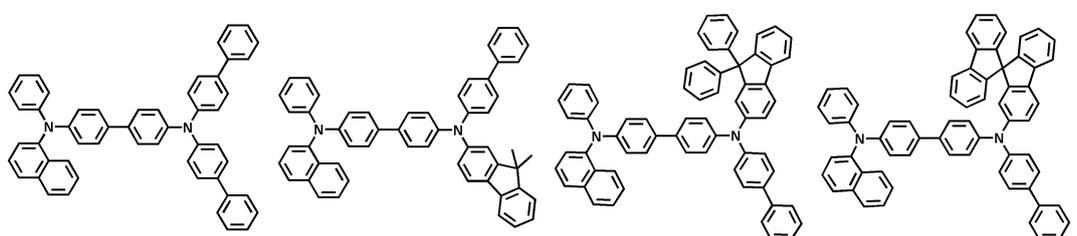


1-60

1-61

1-62

1-63

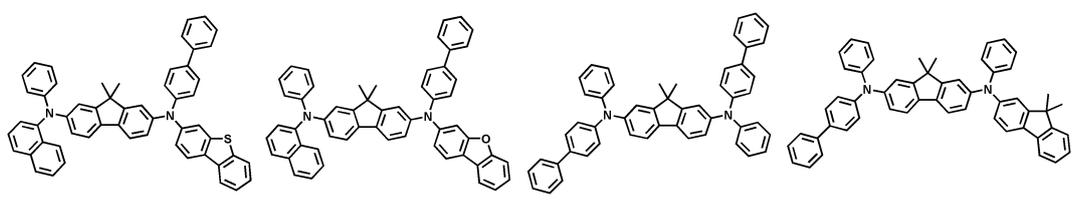


1-64

1-65

1-66

1-67

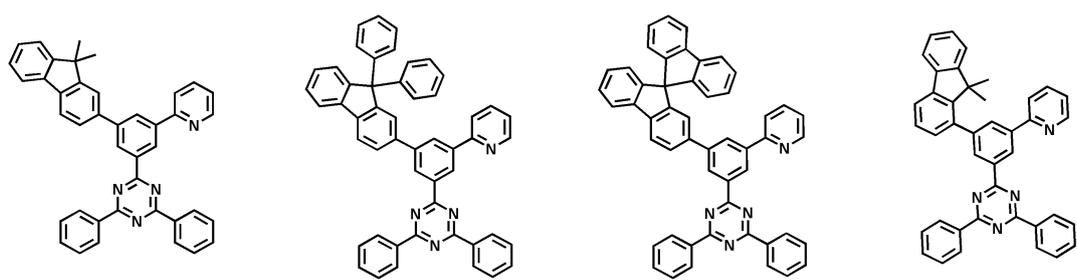


1-68

1-69

1-70

1-71

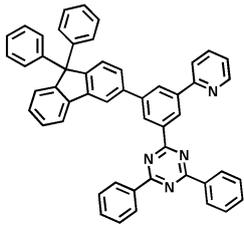


2-1

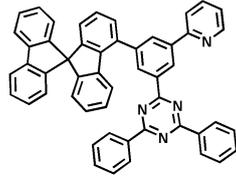
2-2

2-3

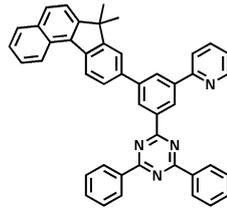
2-4



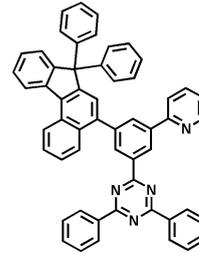
2-5



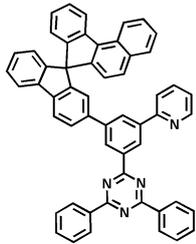
2-6



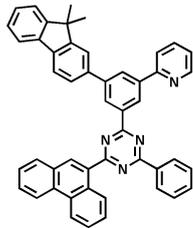
2-7



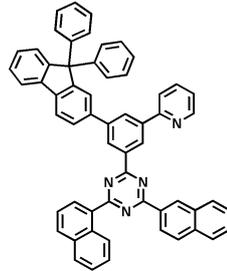
2-8



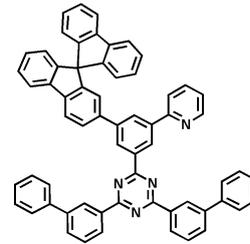
2-9



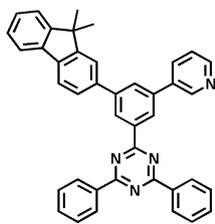
2-10



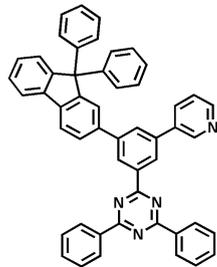
2-11



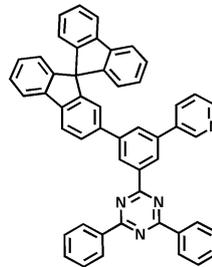
2-12



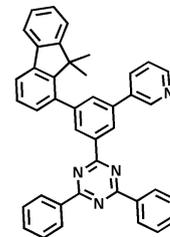
2-13



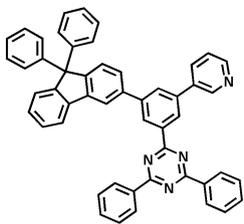
2-14



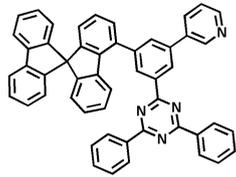
2-15



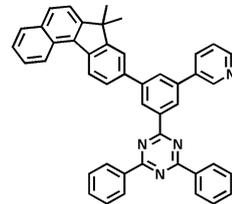
2-16



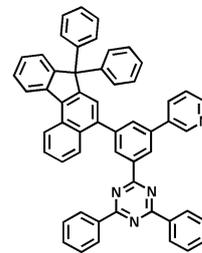
2-17



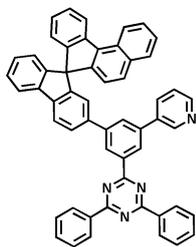
2-18



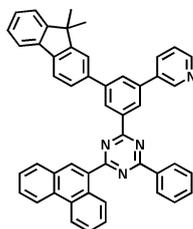
2-19



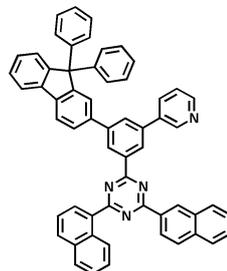
2-20



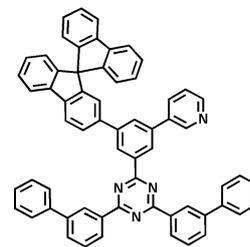
2-21



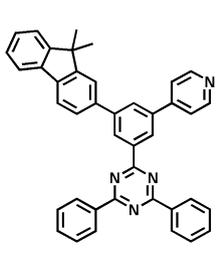
2-22



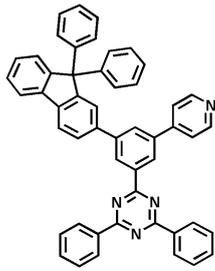
2-23



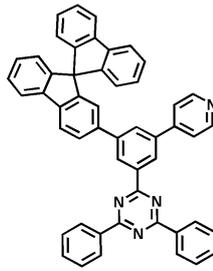
2-24



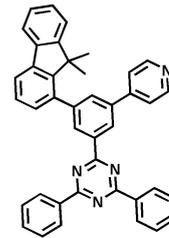
2-25



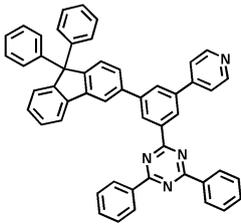
2-26



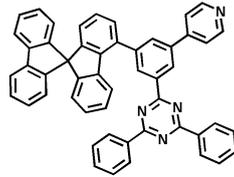
2-27



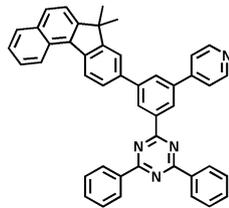
2-28



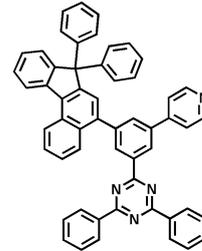
2-29



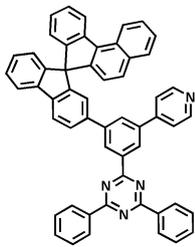
2-30



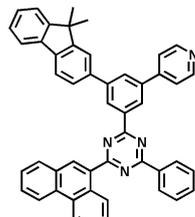
2-31



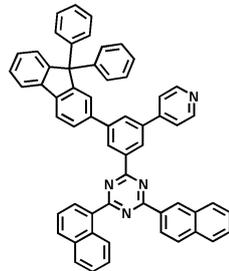
2-32



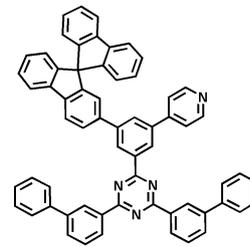
2-33



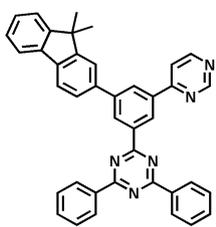
2-34



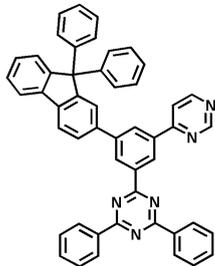
2-35



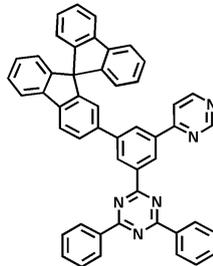
2-36



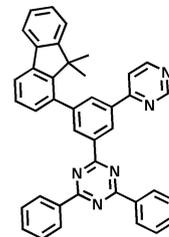
2-37



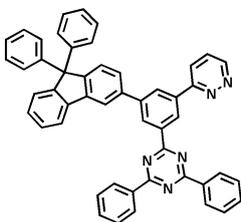
2-38



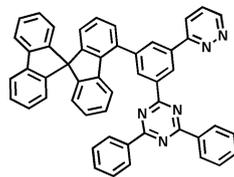
2-39



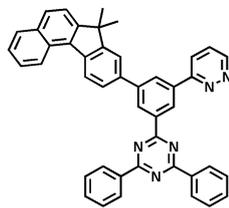
2-40



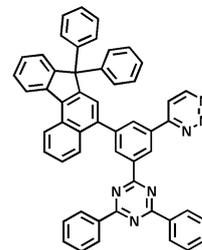
2-41



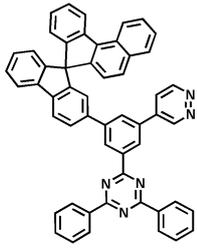
2-42



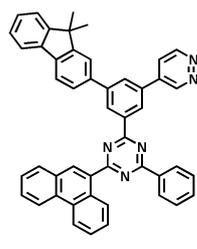
2-43



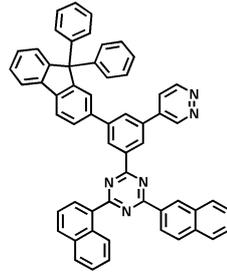
2-44



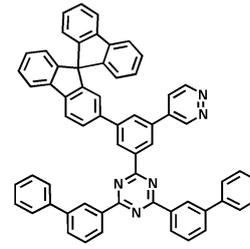
2-45



2-46



2-47

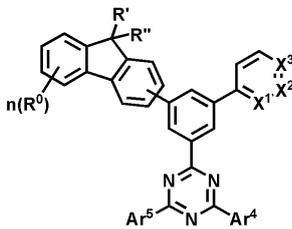


2-48

청구항 7

하기 화학식(2)로 표시되는 화합물

화학식 (2)



{상기 화학식 (2)에서,

- 1) Ar⁴, Ar⁵는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기이고,
- 2) X¹, X² 및 X³은 서로 독립적으로 CR⁴ 또는 N 이고, 단, 적어도 하나는 N이며,
- 3) R⁴는 수소이고,
- 4) R', R''는 서로 독립적으로 수소, C₁~C₅₀의 알킬기; C₆~C₆₀의 아릴기;플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되고 R'와 R''는 서로 결합하여 스파이로 고리를 형성할 수 있고,
- 5) n는 0~4의 정수이며, R⁰는 서로 동일하거나 상이하하며, 서로 독립적으로 중수소; 할로젠; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₁~C₅₀의 알킬기; 및 C₂~C₂₀의 알켄일기;로 이루어진 군에서 선택되고,

또는 상기 n이 2 이상인 경우 복수의 R⁰끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

여기서, 상기 아릴기, 플루오렌닐기, 헤테로고리기는 각각 중수소; 할로젠; 시아노기; 니트로기; C₁~C₂₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₆~C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₂~C₂₀의 헤테로고리기; 및 C₃~C₂₀의 시클로알킬기; 로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 수 있다.}

청구항 8

청구항 7에 따른 화합물을 포함하는 유기전기소자의 전자수송층용 조성물

청구항 9

제 1 항에 있어서,

상기 제 1전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 또는 상기 제 2전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 중 적어도 하나에 형성되는 광효율개선층을 더 포함하는 유기전기소자

청구항 10

제 1 항에 있어서,

상기 유기물층은 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 및 롤투롤 공정 중 어느 하나에 의해 형성되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자

청구항 11

제 1 항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및 상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치

청구항 12

제 11 항에 있어서,

상기 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 전자장치

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기전기소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛 에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기전기소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기전기소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

[0003] 유기전기소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 정공주입 재료, 정공수송재료, 발광재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.

[0004] 유기전기소자에 있어 가장 문제시되는 것은 수명과 효율인데, 디스플레이가 대면적화되면서 이러한 효율과 수명 문제는 반드시 해결해야 하는 상황이다.

[0005] 효율과 수명, 구동전압 등은 서로 연관이 있으며, 효율이 증가되면 상대적으로 구동전압이 떨어지고, 구동전압이 떨어지면서 구동 시 발생하는 주열(Jouleheating)에 의한 유기물질의 결정화가 적어져 결과적으로 수명이 높아지는 경향을 나타낸다. 하지만 상기 유기물층을 단순히 개선한다고 하여 효율 및 수명을 극대화 시킬 수는 없다. 왜냐하면 각 유기물층 간의 에너지 준위(energy level) 및 T₁ 값, 물질의 고유특성(이동도(mobility), 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있기 때문이다.

[0006] 일반적으로 전자수송층에서발광층으로 전자(electron)가 전달되고 정공(hole)이 정공수송층에서발광층으로 전달

되어 재결합(recombination)에 의해 엑시톤(exciton)이 생성된다.

[0007] 하지만 정공이 전자보다 빠르게 이동되어 발광층 내에서 생성된 엑시톤이 전자 수송층으로 넘어가게 되어 결과적으로 발광층 내 전하 불균형(charge unbalance)을 초래하여 전자 수송층 계면에서 발광하게 된다.

[0008] 전자 수송층 계면에서 발광될 경우, 유기전기 발광소자의 색순도 및 효율이 저하되는 문제점이 발생되고 있으며, 특히 유기전기소자 제작 시 고온 안정성이 떨어져 유기전기소자의 수명이 짧아지는 문제점이 발생하게 된다. 따라서 고온 안정성과 높은 전자 이동도를 가지면서 높은 T1 값으로 정공저지능력을 향상시키는 전자수송 물질의 개발이 필요한 시점이다.

[0009] 즉, 유기전기소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하며, 특히 정공 수송 물질 및 전자 수송 물질들의 이상적 조합이 가능한 재료 개발이 절실히 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

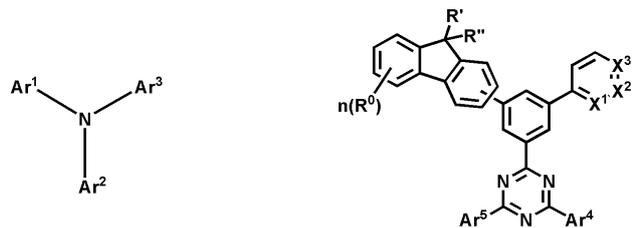
[0010] 본 발명은 정공 수송 물질과 전자 수송 물질들의 이상적 조합에 의해 발광효율, 색순도, 및 수명이 향상되고 구동전압이 낮은 유기전기소자 및 이를 포함하는 전자 장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0011] 본 발명은 정공수송층 또는 발광보조층이 하기 화학식 (1)로 표시되는 화합물을 함유하고, 상기 전자수송층은 하기 화학식 (2)로 나타낸 화합물을 함유하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다.

[0012] 화학식 (1)

화학식 (2)



[0013]

[0014] 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식 (2)로 표시되는 화합물 및 상기 유기전기소자를 포함하는 전자장치를 제공한다.

발명의 효과

[0015] 본 발명에 따른 화합물을 이용함으로써 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 고내열성을 달성할 수 있고, 소자의 색순도 및 수명을 크게 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

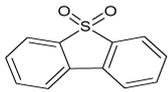
[0016] 도 1은 본 발명에 따른 유기전기발광소자의 예시도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0017] 이하, 본 발명의 실시예를 참조하여 상세하게 설명한다. 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.

[0018] 또한, 본 발명의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제 1, 제 2, A, B, (a), (b) 등의 용어를 사용할 수 있다. 이러한 용어는 그 구성 요소를 다른 구성요소와 구별하기 위한 것일 뿐, 그 용어에 의해 해당 구성 요소의 본질이나 차례 또는 순서 등이 한정되지 않는다. 어떤 구성 요소가 다른 구성 요소에 "연결", "결합" 또는 "접속"된다고 기재된 경우, 그 구성 요소는 그 다른 구성 요소에 직접적으로 연결되거나 또는 접속될 수 있지만, 각 구성 요소 사이에 또 다른 구성 요소가 "연결", "결합" 또는 "접속"될 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.

- [0019] 본 명세서 및 첨부된 청구의 범위에서 사용된 바와 같이, 달리 언급하지 않는 한, 하기 용어의 의미는 하기와 같다:
- [0020] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로겐"은 다른 설명이 없는 한 불소(F), 브롬(Br), 염소(Cl) 또는 요오드(I)이다.
- [0021] 본 발명에 사용된 용어 "알킬" 또는 "알킬기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수의 단일결합을 가지며, 직쇄 알킬기, 분지쇄 알킬기, 사이클로알킬(지환족)기, 알킬-치환된 사이클로알킬기, 사이클로알킬-치환된 알킬기를 비롯한 포화 지방족 작용기의 라디칼을 의미한다.
- [0022] 본 발명에 사용된 용어 "할로알킬기" 또는 "할로겐알킬기"는 다른 설명이 없는 한 할로겐으로 치환된 알킬기를 의미한다.
- [0023] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로알킬기"는 알킬기를 구성하는 탄소원자 중 하나 이상이 헤테로원자로 대체된 것을 의미한다.
- [0024] 본 발명에 사용된 용어 "알켄일기", "알케닐기" 또는 "알킨일기"는 다른 설명이 없는 한 각각 2 내지 60의 탄소수의 이중결합 또는 삼중결합을 가지며, 직쇄형 또는 측쇄형 사슬기를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [0025] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [0026] 본 발명에 사용된 용어 "알콕실기", "알콕시기", 또는 "알킬옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알킬기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [0027] 본 발명에 사용된 용어 "알켄옥실기", "알켄옥시기", "알켄일옥실기", 또는 "알켄일옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알켄일기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [0028] 본 발명에 사용된 용어 "아릴옥실기" 또는 "아릴옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 아릴기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [0029] 본 발명에 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다. 본 발명에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일 고리 또는 다중 고리의 방향족을 의미하며, 이웃한 치환기가 결합 또는 반응에 참여하여 형성된 방향족 고리를 포함한다. 예컨대, 아릴기는 페닐기, 비페닐기, 플루오렌기, 스퀴아로플루오렌기일 수 있다.
- [0030] 접두사 "아릴" 또는 "아르"는 아릴기로 치환된 라디칼을 의미한다. 예를 들어 아릴알킬기는 아릴기로 치환된 알킬기이며, 아릴알켄일기는 아릴기로 치환된 알켄일기이며, 아릴기로 치환된 라디칼은 본 명세서에서 설명한 탄소수를 가진다.
- [0031] 또한 접두사가 연속으로 명명되는 경우 먼저 기재된 순서대로 치환기가 나열되는 것을 의미한다. 예를 들어, 아릴알콕시기의 경우 아릴기로 치환된 알콕시기를 의미하며, 알콕실카르보닐기의 경우 알콕실기로 치환된 카르보닐기를 의미하며, 또한 아릴카르보닐알켄일기의 경우 아릴카르보닐기로 치환된 알켄일기를 의미하며 여기서 아릴카르보닐기는 아릴기로 치환된 카르보닐기이다.
- [0032] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로알킬"은 다른 설명이 없는 한 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 알킬을 의미한다. 본 발명에 사용된 용어 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 2 내지 60의 아릴기 또는 아릴렌기를 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 이웃한 작용기기가 결합하여 형성될 수도 있다.
- [0033] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로고리기"는 다른 설명이 없는 한 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고, 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 헤테로지방족 고리 및 헤테로방향족 고리를 포함한다. 이웃한 작용기가 결합하여 형성될 수도 있다.
- [0034] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 또는 Si를 나타낸다.
- [0035] 또한 "헤테로고리기"는 고리를 형성하는 탄소 대신 SO₂를 포함하는 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, "헤테로고리기"는 다음 화합물을 포함한다.



[0036]

[0037]

[0038]

[0039]

[0040]

[0041]

[0042]

[0043]

[0044]

[0045]

[0046]

[0047]

[0048]

다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "지방족"은 탄소수 1 내지 60의 지방족 탄화수소를 의미하며, "지방족고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족 탄화수소 고리를 의미한다.

다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화고리를 포함한다.

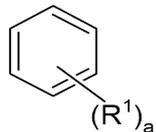
전술한 헤테로화합물 이외의 그 밖의 다른 헤테로화합물 또는 헤테로라디칼은 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "카르보닐"이란 -COR'로 표시되는 것이며, 여기서 R'은 수소, 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.

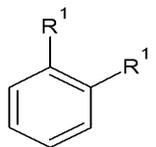
다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "에테르"란 -R-O-R'로 표시되는 것이며, 여기서 R 또는 R'은 각각 서로 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.

또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₁~C₂₀의 알콕실기, C₁~C₂₀의 알킬아민기, C₁~C₂₀의 알킬티오펜기, C₆~C₂₀의 아릴티오펜기, C₂~C₂₀의 알켄일기, C₂~C₂₀의 알킨일기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₈~C₂₀의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.

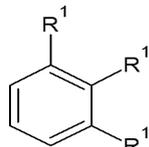
또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용되는 화학식은 하기 화학식의 지수 정의에 의한 치환기 정의와 동일하게 적용된다.



여기서, a가 0의 정수인 경우 치환기 R¹은 부존재하며, a가 1의 정수인 경우 하나의 치환기 R¹은 벤젠 고리를 형성하는 탄소 중 어느 하나의 탄소에 결합하며, a가 2 또는 3의 정수인 경우 각각 다음과 같이 결합하며 이때 R¹은 서로 동일하거나 다를 수 있으며, a가 4 내지 6의 정수인 경우 이와 유사한 방식으로 벤젠 고리의 탄소에 결합하며, 한편 벤젠 고리를 형성하는 탄소에 결합된 수소의 표시는 생략한다.



(a=2)



(a=3)

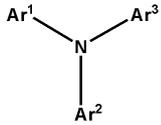
이하, 본 발명의 일 측면에 따른 화합물 및 이를 포함하는 유기전기소자에 대하여 설명한다.

본 발명은 제 1전극, 제 2 전극, 및 상기 제 1전극과 상기 제 2전극 사이에 형성된 유기물층을 포함하는 유기전기소자에 있어서, 상기 유기물층은, 상기 제 1전극과 발광층 사이에 형성되는 발광보조층과 상기 제 1전극과 발광 보조층 사이에 형성되는 정공수송층 및 전자수송층을 포함하며, 상기 정공수송층 또는 발광보조층은 하기 화학식 (1)로 표시되는 화합물을 포함하고, 상기 전자수송층은 하기 화학식 (2)로 나타낸 화합물을 포함하는 유기

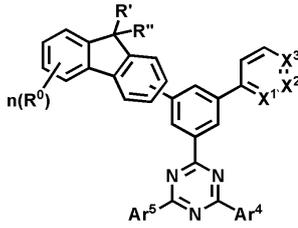
전기소자를 제공한다.

[0049]

화학식 (1)



화학식 (2)



[0050]

[0051]

[상기 화학식 (1) 또는 (2)에서,

[0052]

1) Ar¹, Ar²는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'-N(R_a)(R_b);로 이루어진 군에서 선택되며(여기서 상기 L'은 단일결합; C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; 및 C₂~C₆₀의 헤테로고리;로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R_a 및 R_b는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리;로 이루어진 군에서 선택됨), 또는 Ar¹와 Ar²는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

[0053]

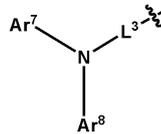
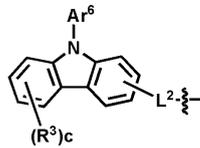
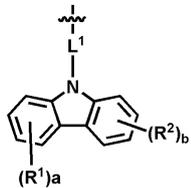
2) Ar³은 하기 화학식 (1-a), (1-b), (1-c) 로 이루어진 군에서 선택되고,

[0054]

화학식 (1-a)

화학식 (1-b)

화학식 (1-c)



[0055]

[0056]

{상기 화학식 (1-a), (1-b), (1-c)에서,

[0057]

2-1) a, b, c는 0~4의 정수이며, R¹⁻³은 서로 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 중수소; 할로젠; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'-N(R_a)(R_b);로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 a, b, c가 2 이상인 경우 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며 복수의 R¹끼리 혹은 복수의 R²끼리 혹은 복수의 R³끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

[0058]

2-2) L¹, L³은 C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리;로 이루어진 군에서 선택되며,

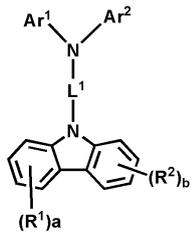
[0059]

2-3) L²는 C₆~C₆₀의 단일결합; 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리;로 이루어진 군에서 선택되고,

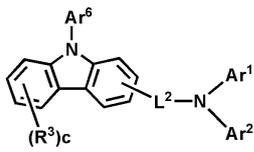
- [0060] 2-4) Ar⁶⁻⁸은 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아틸기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'-N(R_a)(R_b);로 이루어진 군에서 선택되고,}
- [0061] 3) Ar^{4, 5}는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아틸기;
- [0062] 4) X¹⁻³은 CR⁴ 또는 N 이고(단, 적어도 하나는 N이다),
- [0063] 5) R⁴는 독립적으로 수소, 중수소; 할로겐; C₆~C₆₀의 아틸기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'-N(R_a)(R_b);로 이루어진 군에서 선택되고, (여기서 상기 L'은 단일결합; C₆~C₆₀의 아틸렌기; 플루오렌일렌기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; 및 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R_a 및 R_b은 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아틸기; 플루오렌일기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택됨), 또는 이웃한 R⁴끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,
- [0064] 6) n는 0~4의 정수이며, R⁰는 서로 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 중수소; 할로겐; C₆~C₆₀의 아틸기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'-N(R_a)(R_b);로 이루어진 군에서 선택되고, 또는 상기 n이 2 이상인 경우 복수의 R⁰끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,
- [0065] 7) R', R"는 서로 독립적으로 수소, C₁~C₅₀의 알킬기; C₆~C₆₀의 아틸기;플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되고 R'와 R"는 서로 결합하여 스파이로 고리를 형성할 수 있다.
- [0066] (여기서, 상기 아틸기, 헤테로아틸기, 플루오렌닐기, 아틸렌기, 헤테로고리기, 융합고리기는 각각 중수소; 할로겐; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; -L'-N(R_a)(R_b); C₁~C₂₀의 알킬싸이오기; C₁~C₂₀의 알콕실기; C₁~C₂₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₆~C₂₀의 아틸기; 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아틸기; 플루오렌일기; C₂~C₂₀의 헤테로고리기; C₃~C₂₀의 시클로알킬기; C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 수 있으며, 또한 이들 치환기들은 서로 결합하여 고리를 형성할 수도 있으며, 여기서 '고리'란 탄소수 3 내지 60의 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화 고리를 포함한다.)]
- [0067] 본 발명의 보다 구체적인 예로, 상기 화학식 (1)로 표시되는 화합물이 하기 화학식 (3)~(5) 중 어느 하나로 표시되는 화합물인 경우의 유기전기소자를 제공한다.

[0068]

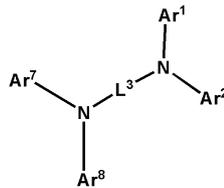
화학식 (3)



화학식 (4)



화학식 (5)



[0069]

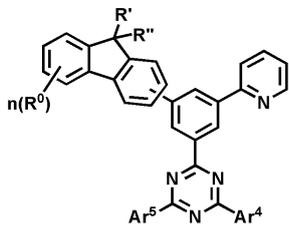
(상기 화학식 (3) 내지 (5)에서, R^{1-3} , L^{1-3} , Ar^{1-2} , Ar^{6-8} , a, b, c는 상기 화학식 (1)에서 정의한 바와 같다.)

[0071]

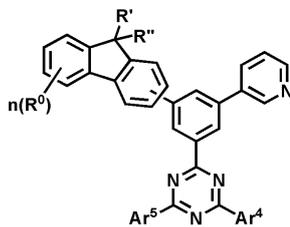
또 다른 구체적인 예로, 상기 화학식 (2)로 표시되는 화합물이 하기 화학식 (6)~(8) 중 어느 하나로 표시되는 화합물이고 이를 전자수송층으로 포함하는 유기전기소자를 제공한다. 더불어 상기 화학식 (2)로 표시되는 화합물 또한 제공한다.

[0072]

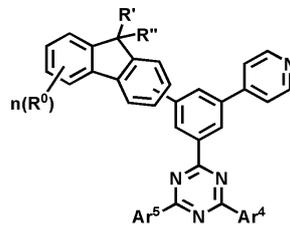
화학식 (6)



화학식 (7)



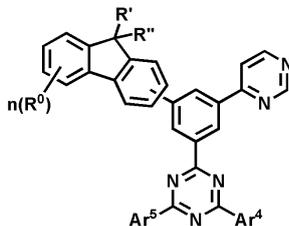
화학식 (8)



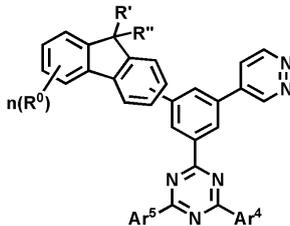
[0073]

[0074]

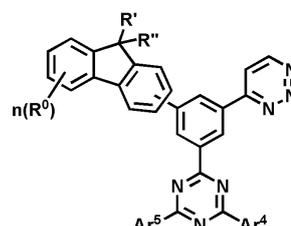
화학식 (9)



화학식 (10)



화학식 (11)



[0075]

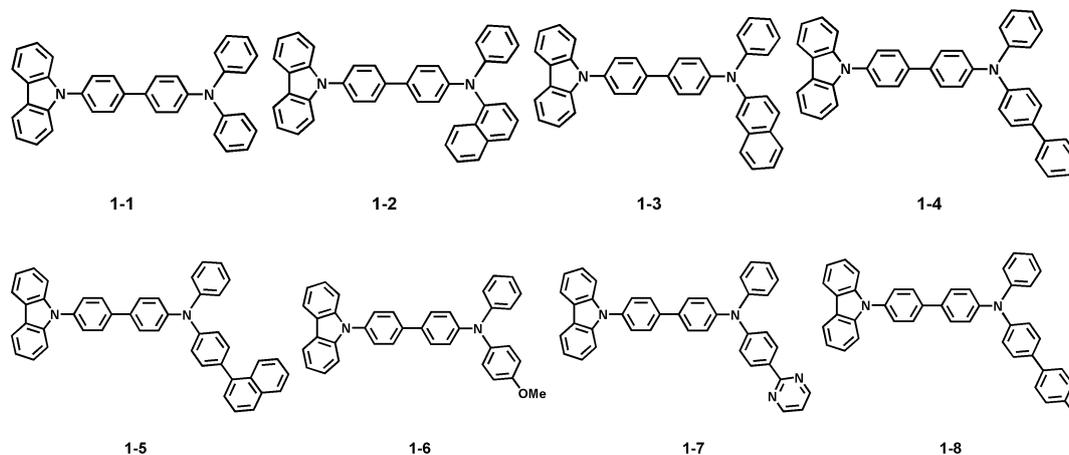
[0076]

(상기 화학식 (3) 내지 (11)에서, $Ar^{4,5}$, R^0 , n, R', R''은 상기 화학식 (2)에서 정의된 바와 같다.)

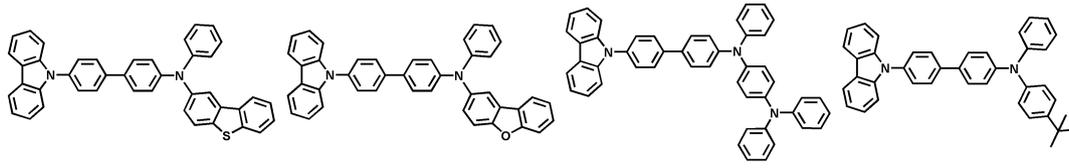
[0077]

보다 구체적인 예를 들면, 상기 화학식 (1)로 나타난 화합물이 하기와 같이 표시되는 화합물 중 어느 하나이고 이를 정공수송층 또는 발광보조층으로 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

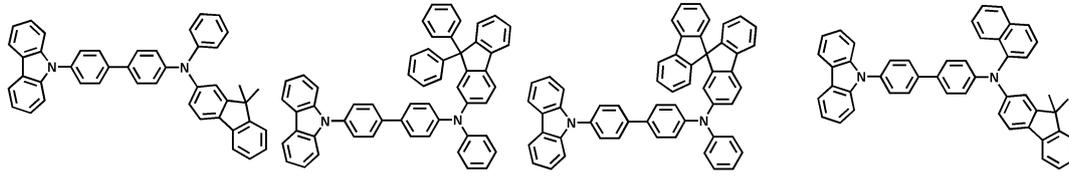
[0078]



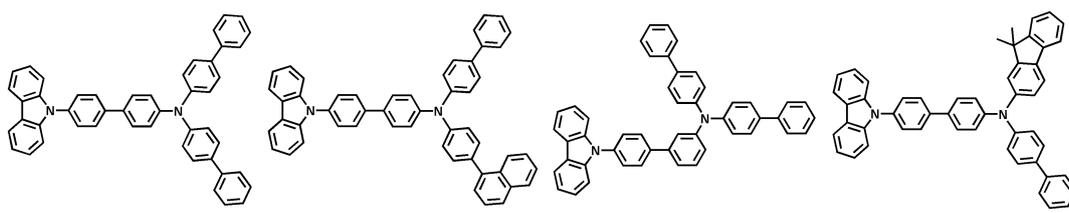
[0079]



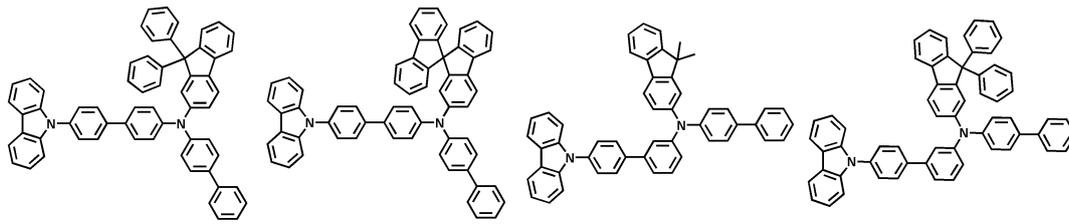
[0080] 1-9 1-10 1-11 1-12



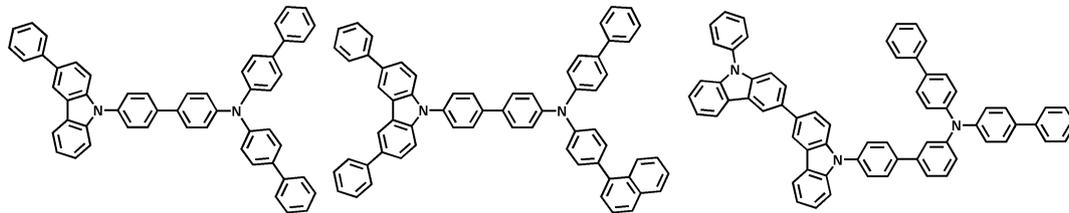
[0081] 1-13 1-14 1-15 1-16



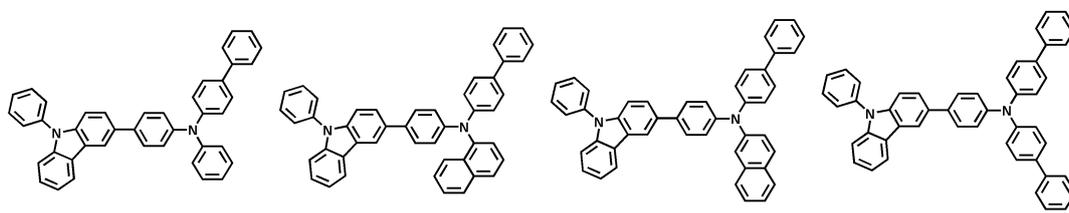
[0082] 1-17 1-18 1-19 1-20



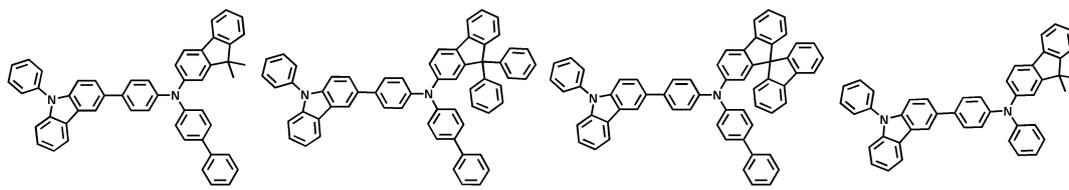
[0083] 1-21 1-22 1-23 1-24



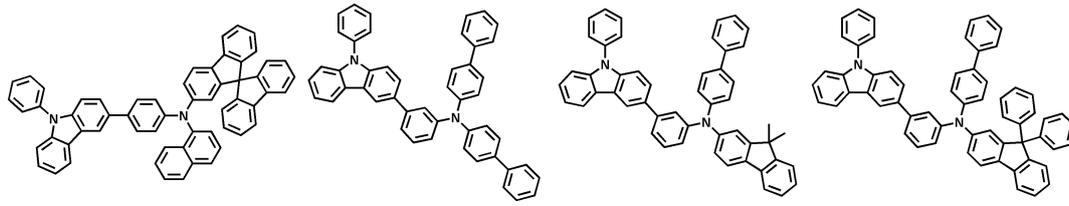
[0084] 1-25 1-26 1-27



[0085] 1-28 1-29 1-30 1-31



[0086] 1-32 1-33 1-34 1-35



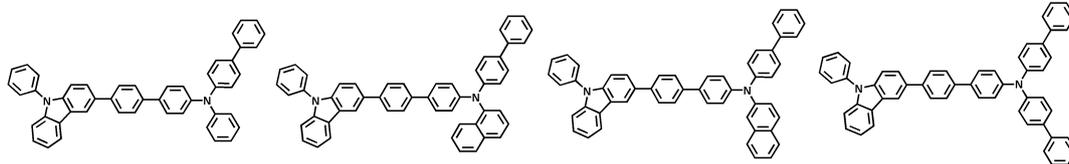
1-36

1-37

1-38

1-39

[0087]



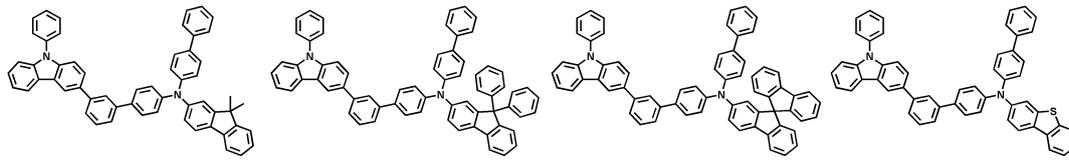
1-40

1-41

1-42

1-43

[0088]



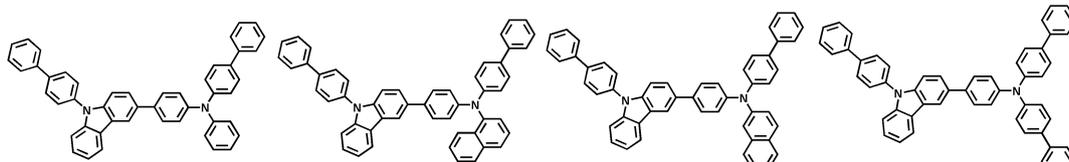
1-44

1-45

1-46

1-47

[0089]



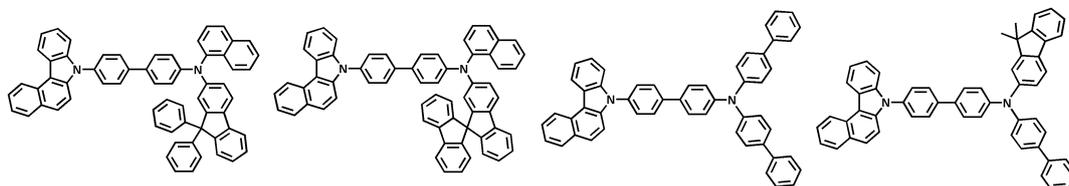
1-48

1-49

1-50

1-51

[0090]



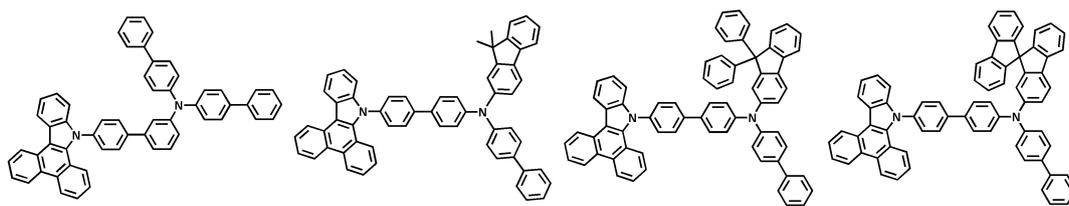
1-52

1-53

1-54

1-55

[0091]



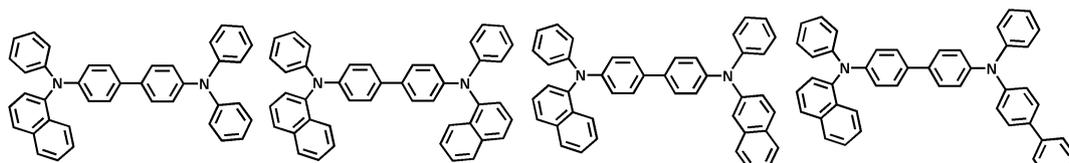
1-56

1-57

1-58

1-59

[0092]



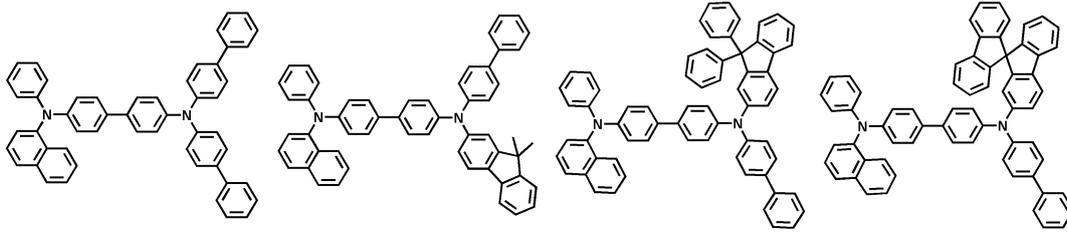
1-60

1-61

1-62

1-63

[0093]



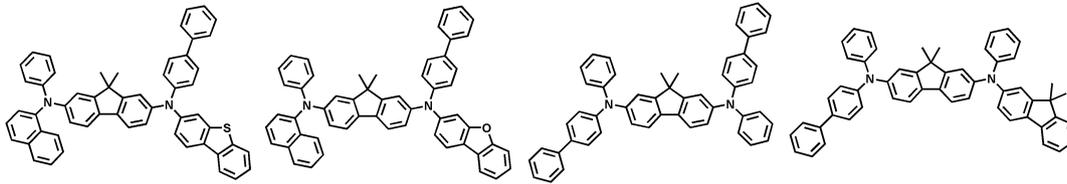
1-64

1-65

1-66

1-67

[0094]



1-68

1-69

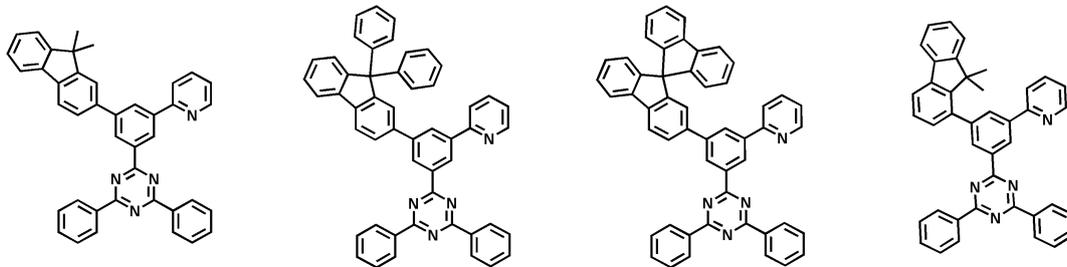
1-70

1-71

[0095]

[0096]

상기 화학식 (1)로 표시되는 화합물을 정공수송층 또는 발광층으로 하면서 상기 화학식 (2)로 나타낸 화합물이 하기의 화학식 2-1 내지 2-48로 표시되는 화합물 중 어느 하나를 전자수송층으로 하는 유기전기소자를 제공한다.



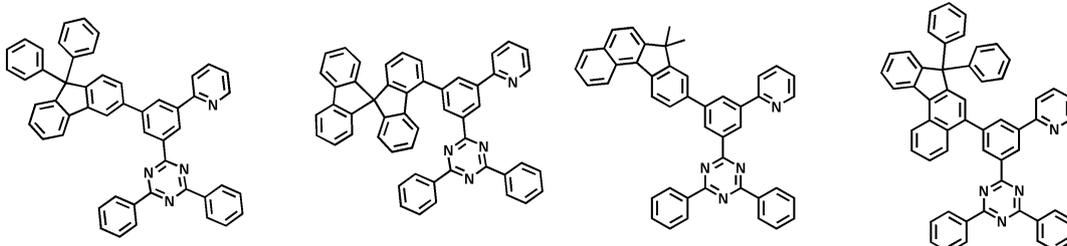
2-1

2-2

2-3

2-4

[0097]



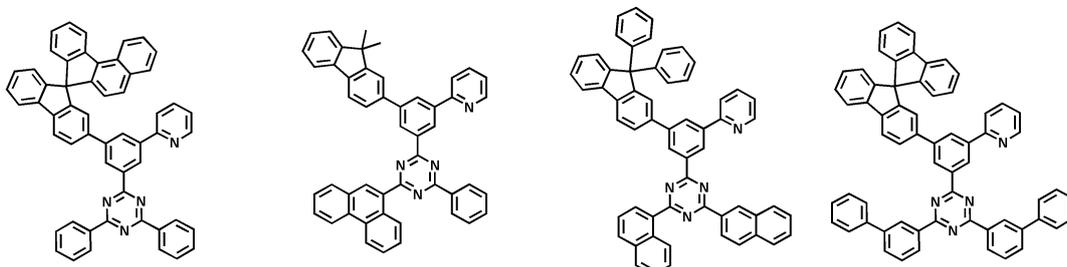
2-5

2-6

2-7

2-8

[0098]



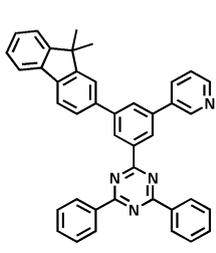
2-9

2-10

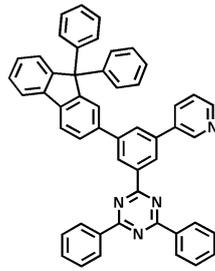
2-11

2-12

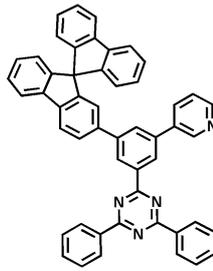
[0099]



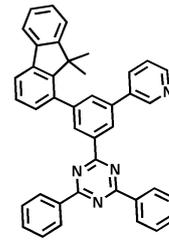
2-13



2-14

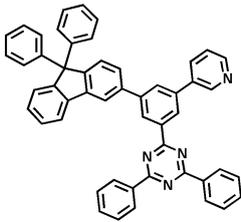


2-15

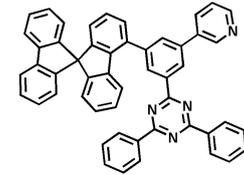


2-16

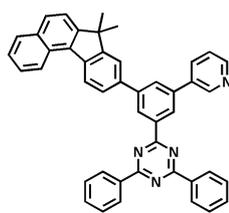
[0100]



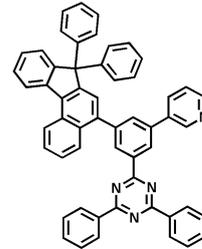
2-17



2-18

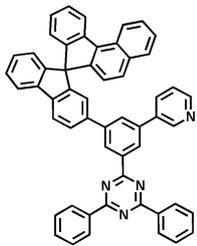


2-19

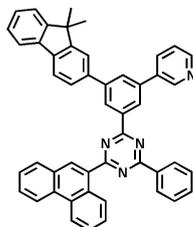


2-20

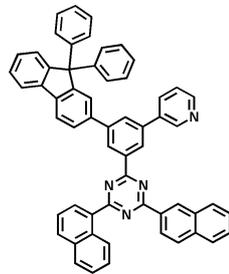
[0101]



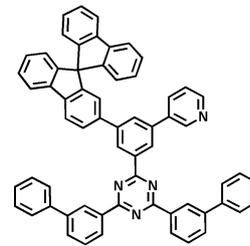
2-21



2-22

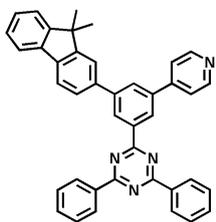


2-23

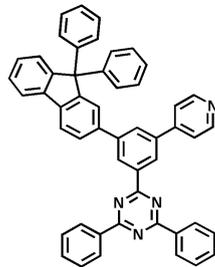


2-24

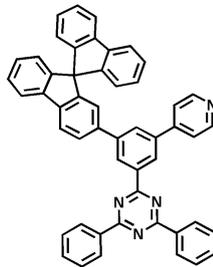
[0102]



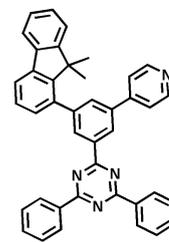
2-25



2-26

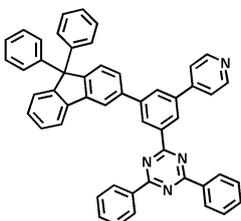


2-27

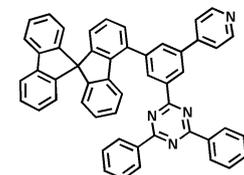


2-28

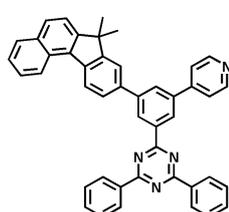
[0103]



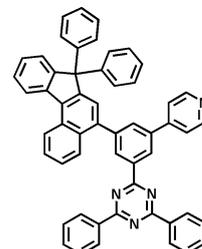
2-29



2-30

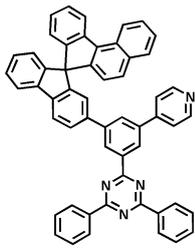


2-31

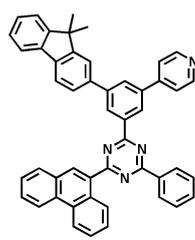


2-32

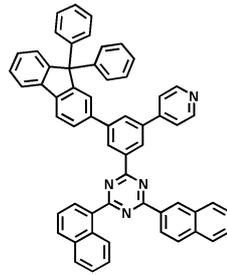
[0104]



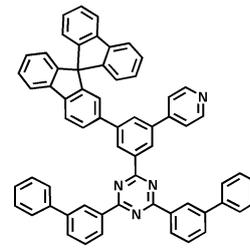
2-33



2-34

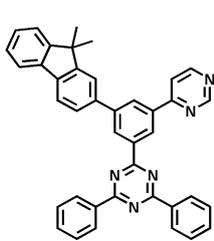


2-35

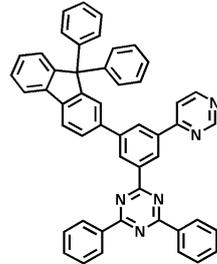


2-36

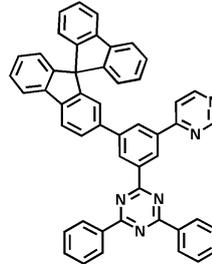
[0105]



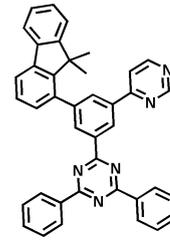
2-37



2-38

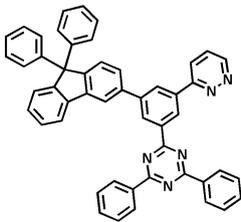


2-39

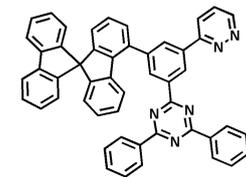


2-40

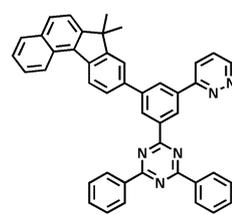
[0106]



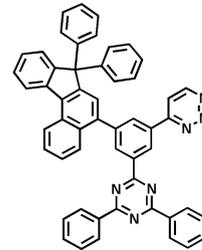
2-41



2-42

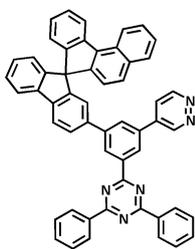


2-43

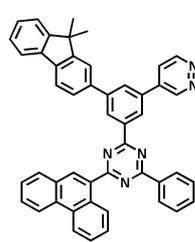


2-44

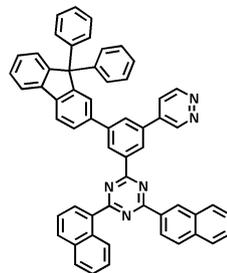
[0107]



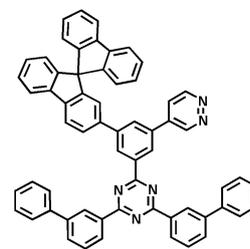
2-45



2-46



2-47



2-48

[0108]

[0109]

도 1을 참조하여 설명하면, 본 발명에 따른 유기전기소자(100)는 기판(110) 상에 형성된 제 1전극(120), 제 2전극(180) 및 제 1전극(120)과 제 2전극(180) 사이에 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층을 구비한다. 이때, 제 1전극(120)은 애노드(양극)이고, 제 2전극(180)은 캐소드(음극)일 수 있으며, 인버트형의 경우에는 제 1전극이 캐소드이고 제 2전극이 애노드일 수 있다.

[0110]

유기물층은 제 1전극(120) 상에 순차적으로 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함할 수 있다. 이때, 발광층(150)을 제외한 나머지 층들이 형성되지 않을 수 있다. 정공저지층, 전자저지층, 발광보조층(151), 버퍼층(141) 등을 더 포함할 수도 있고, 전자수송층(160) 등이 정공저지층의 역할을 할 수도 있을 것이다.

[0111]

또한, 미도시하였지만 본 발명에 따른 유기전기소자는 제 1전극과 제 2전극중 적어도 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 일면에 형성된 보호층을 더 포함할 수 있다.

[0112]

한편, 동일한 코어일지라도 어느 위치에 어느 치환기를 결합시키냐에 따라 밴드갭(band gap), 전기적 특성, 계면 특성 등이 달라질 수 있으므로, 코어의 선택 및 이에 결합된 서브(sub)-치환체의 조합도 아주 중요하며, 특히 각 유기물층 간의 에너지 level 및 T1 값, 물질의 고유특성(mobility, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.

[0113] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기발광소자는 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여 제조될 수 있다. 예컨대, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다.

[0114] 이에 따라, 본 발명은 상기 유기전기소자에서 상기 제 1전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 또는 상기 제 2전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 중 적어도 하나에 형성되는 광효율개선층을 더 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[0115] 또한 본 발명에서 상기 유기물층은 스펀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 및 롤투롤 공정 중 어느 하나에 의해 형성되며, 상기 유기물층은 전자수송재료로 상기 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다.

[0116] 또한 본 발명은 상기한 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치 ; 및 상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치를 제공한다.

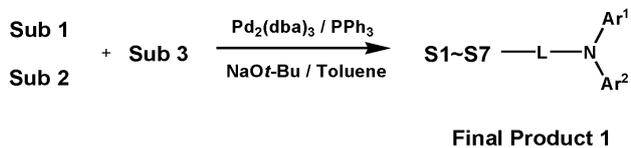
[0117] 또 다른 측면에서 상기 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 전자장치를 본 발명에서 제공한다. 이때, 전자장치는 현재 또는 장래의 유무선 통신단말기일 수 있으며, 휴대폰 등의 이동 통신 단말기, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 전자장치를 포함한다.

[0118] 이하에서, 본 발명의 상기 화학식 (1) 및 (2)로 표시되는 화합물의 합성에 및 본 발명의 유기전기소자의 제조에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명의 하기 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0119] [합성예 1]

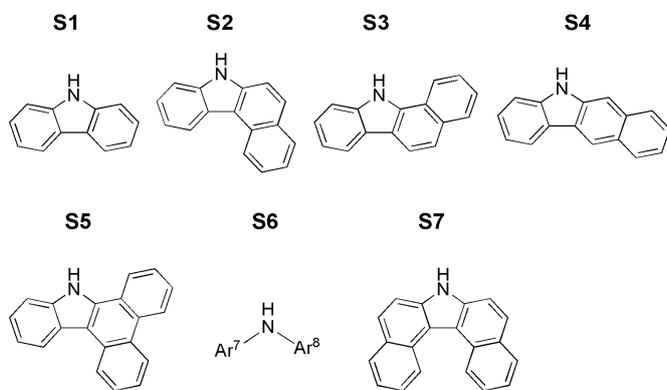
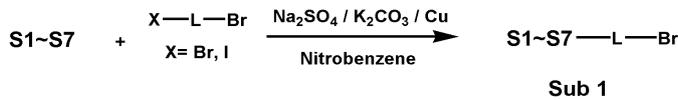
[0120] 본 발명에 따른 화학식 (1)로 표시되는 화합물(final product 1)은 하기 반응식 1과 같이 Sub 1 또는 Sub 2가 Sub3가 반응하여 제조된다.

[0121] <반응식 1>



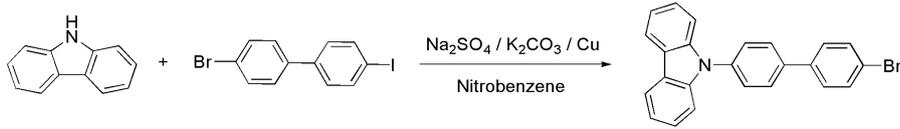
[0122] (L은 화학식 (1-a), 화학식 (1-b), 화학식 (1-c)에서 정의된 L² 또는 L⁴이다.)

[0124] 1. Sub 1의 합성 예시



[0127]

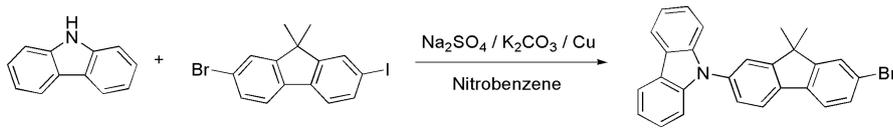
[0128] 1) Sub 1-1-1 합성 예 (L=biphenyl)



[0129]

[0130] 출발물질인 9H-carbazole (50.16 g, 300 mmol)에 4-bromo-4'-iodo-1,1'-biphenyl (129.2 g, 360 mmol), Na₂SO₄ (42.6 g, 300 mmol), K₂CO₃ (41.4 g, 300 mmol), Cu (5.72 g, 90 mmol), nitrobenzene을 상기 합성법을 사용하여 생성물 80.05 g (수율: 67%)를 얻었다

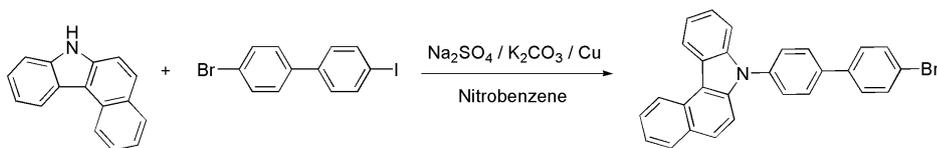
[0131] 2) Sub 1-1-2 합성 예 (L=9,9-dimethyl-9H-fluorene)



[0132]

[0133] 출발물질인 9H-carbazole (50.16 g, 300 mmol)에 2-bromo-7-iodo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (143.7 g, 360 mmol), Na₂SO₄ (42.6 g, 300 mmol), K₂CO₃ (41.4 g, 300 mmol), Cu (5.72 g, 90 mmol), nitrobenzene을 상기 합성법을 사용하여 생성물 88.11 g (수율: 67%)를 얻었다

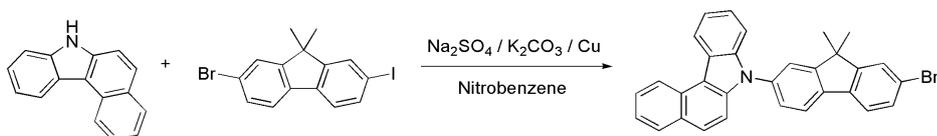
[0134] 3) Sub 1-1-3 합성 예 (L=9,9-dimethyl-9H-fluorene)



[0135]

[0136] 출발물질인 7H-benzo[c]carbazole (65.18 g, 300 mmol)에 4-bromo-4'-iodo-1,1'-biphenyl (129.2 g, 360 mmol), Na₂SO₄ (42.6 g, 300 mmol), K₂CO₃ (41.4 g, 300 mmol), Cu (5.72 g, 90 mmol), nitrobenzene을 상기 합성법을 사용하여 생성물 92.8 g (수율: 69%)를 얻었다

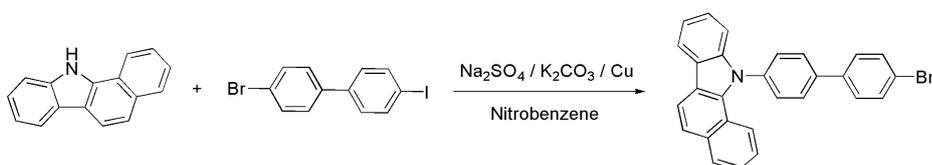
[0137] 4) Sub 1-1-4 합성 예 (L=9,9-dimethyl-9H-fluorene)



[0138]

[0139] 출발물질인 7H-benzo[c]carbazole (65.18 g, 300 mmol)에 2-bromo-7-iodo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (143.7 g, 360 mmol), Na₂SO₄ (42.6 g, 300 mmol), K₂CO₃ (41.4 g, 300 mmol), Cu (5.72 g, 90 mmol), nitrobenzene을 상기 합성법을 사용하여 생성물 95.24 g (수율: 65%)를 얻었다

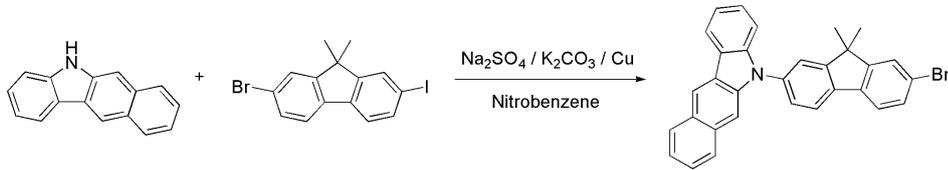
[0140] 5) Sub 1-1-5 합성 예 (L=biphenyl)



[0141]

[0142] 출발물질인 1H-benzo[a]carbazole (65.18 g, 300 mmol)에 4-bromo-4'-iodo-1,1'-biphenyl (129.2 g, 360 mmol), Na₂SO₄ (42.6 g, 300 mmol), K₂CO₃ (41.4 g, 300 mmol), Cu (5.72 g, 90 mmol), nitrobenzene을 상기 합성법을 사용하여 생성물 80.05 g (수율: 62%)를 얻었다

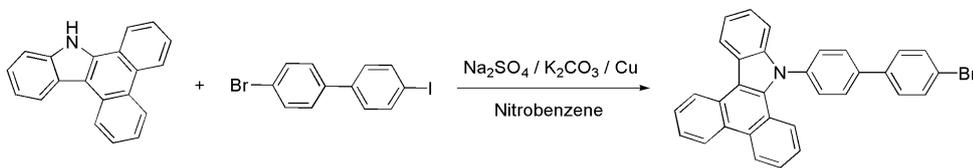
[0143] 6) Sub 1-1-6 합성 예 (L=9,9-dimethyl-9H-fluorene)



Sub 1-1-6

[0144] 출발물질인 5H-benzo[b]carbazole (65.18 g, 300 mmol)에 2-bromo-7-iodo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (143.7 g, 360 mmol), Na₂SO₄ (42.6 g, 300 mmol), K₂CO₃ (41.4 g, 300 mmol), Cu (5.72 g, 90 mmol), nitrobenzene을 상기 합성법을 사용하여 생성물 93.78 g (수율: 64%)를 얻었다

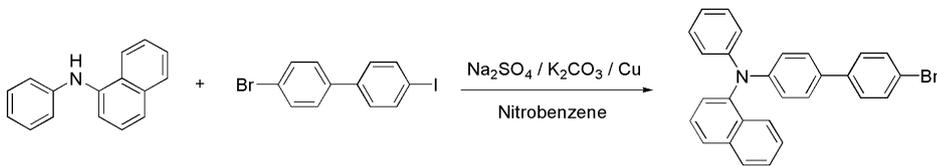
[0146] 7) Sub 1-1-7 합성 예 (L=biphenyl)



Sub 1-1-7

[0147] 출발물질인 9H-dibenzo[a,c]carbazole (80.2 g, 300 mmol)에 4-bromo-4'-iodo-1,1'-biphenyl (129.2 g, 360 mmol), Na₂SO₄ (42.6 g, 300 mmol), K₂CO₃ (41.4 g, 300 mmol), Cu (5.72 g, 90 mmol), nitrobenzene을 상기 합성법을 사용하여 생성물 98.7 g (수율: 66%)를 얻었다

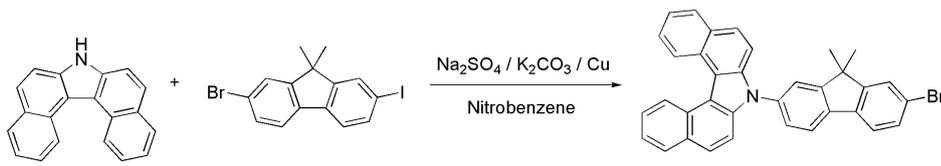
[0149] 8) Sub 1-1-8 합성 예 (L=biphenyl)



Sub 1-1-8

[0150] 출발물질인 N-phenylnaphthalen-1-amine (65.8 g, 300 mmol)에 4-bromo-4'-iodo-1,1'-biphenyl (129.2 g, 360 mmol), Na₂SO₄ (42.6 g, 300 mmol), K₂CO₃ (41.4 g, 300 mmol), Cu (5.72 g, 90 mmol), nitrobenzene을 상기 합성법을 사용하여 생성물 89.2 g (수율: 66%)를 얻었다

[0152] 9) Sub 1-1-9 합성 예 (L=9,9-dimethyl-9H-fluorene)



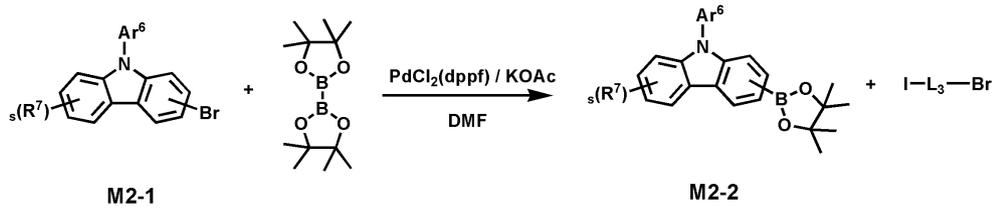
Sub 1-1-9

[0154] 출발물질인 7H-dibenzo[c,g]carbazole (80.2 g, 300 mmol)에 2-bromo-7-iodo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (143.7 g, 360 mmol), Na₂SO₄ (42.6 g, 300 mmol), K₂CO₃ (41.4 g, 300 mmol), Cu (5.72 g, 90 mmol), nitrobenzene을 상기 합성법을 사용하여 생성물 98.5g (수율: 61%)를 얻었다

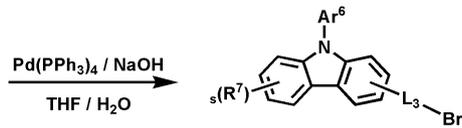
[0155] 2. Sub 2의 합성 예시

[0156] 반응식 1의 Sub 2는 하기 반응식2의 반응경로에 의해 합성될 수 있다.

[0157] <반응식 2>



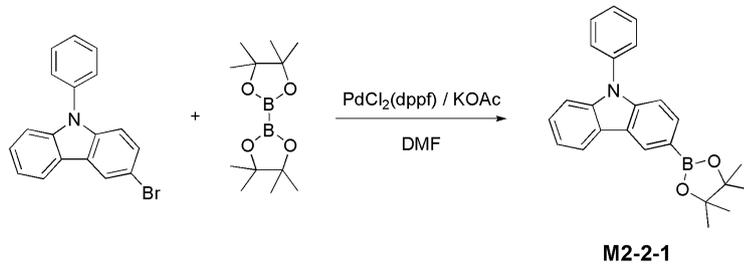
[0158]



[0159]

Sub 2

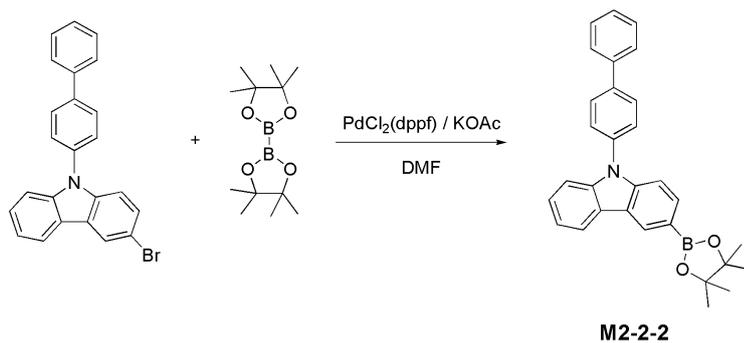
[0160] 1) M2-2-1 합성 예 (g=0, Ar⁹=Phenyl)



[0161]

[0162] 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole (45.1 g, 140 mmol) 을 DMF 980mL 에 녹인 후에, Bispinacolborate (39.1 g, 154 mmol), PdCl₂(dppf) 촉매 (3.43 g, 4.2 mmol), KOAc (41.3 g, 420 mmol)을 순서대로 첨가한 후 24 시간 교반하여 보레이트 화합물을 합성한 후에, 얻어진 화합물을 silicagel column 및 재결정을 걸쳐서 분리한 후 보레이트 화합물을 35.2 g (68 %)얻었다.

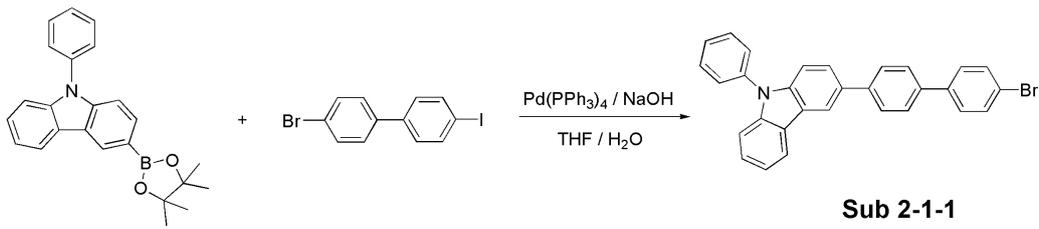
[0163] 2) M2-2-2 합성 예 (g=0, Ar⁹=biphenyl)



[0164]

[0165] 상기 M2-2-1과 동일한 실험방법을 통해서 40 g (64%)을 얻었다.

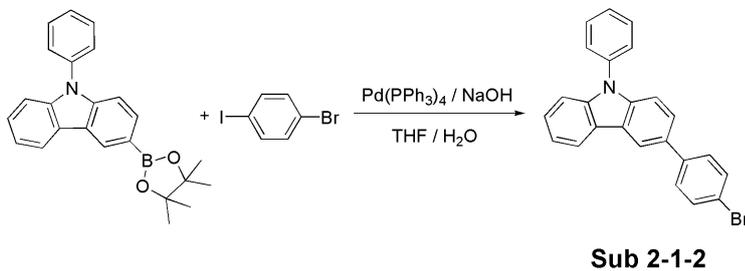
[0166] 3) Sub 2-1-1 합성 예 [$g=0$, $Ar^9=Phenyl$, $L^6= biphenyl (linear)$]



[0167]

[0168] M2-2-1 (29.5 g, 80 mmol) 을 THF 360 mL 에 녹인후에, 4-bromo-4'-iodo-1,1'-biphenyl (30.16 g, 84 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.8 g, 2.4mmol), NaOH (9.6 g, 240mmol), 물 180 mL 을 첨가한 후, 교반환류 시킨다. 반응이 완료 되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물을 26.56 g (70 %) 얻었다

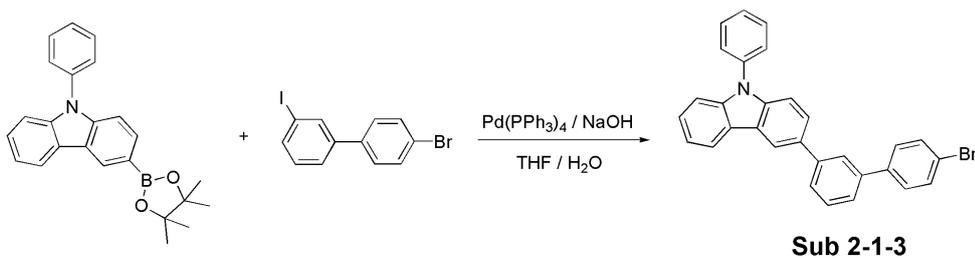
[0169] 4) Sub 2-1-2 합성 예 [$g=0$, $Ar^9=Phenyl$, $L^6= phenyl$]



[0170]

[0171] M2-2-1 (29.5 g, 80 mmol), THF 360 mL, 1-bromo-4-iodobenzene (23.8 g, 84 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.8 g, 2.4mmol), NaOH (9.6 g, 240mmol), 물 180 mL 을 첨가한후, 교반환류 시킨다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물을 22.9 g (72 %) 얻었다

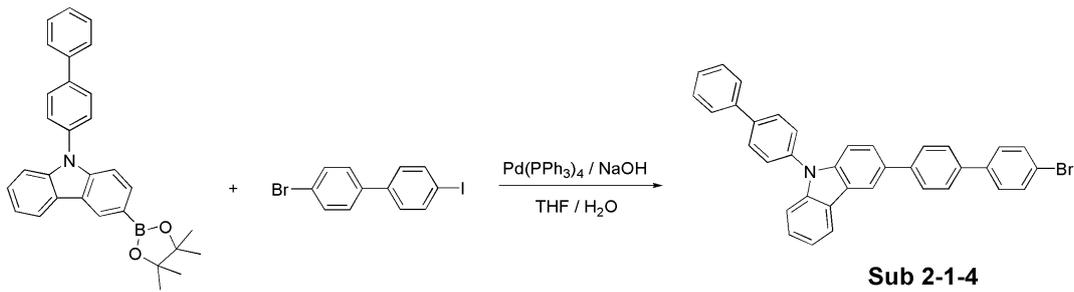
[0172] 5) Sub 2-1-3 합성 예 [$g=0$, $Ar^9=Phenyl$, $L^6= biphenyl (non-linear)$]



[0173]

[0174] M2-2-1 (29.5 g, 80 mmol)을 THF 360 mL 에 녹인 후에, 4'-bromo-3-iodo-1,1'-biphenyl (30.16 g, 84 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.8 g, 2.4mmol), NaOH (9.6 g, 240mmol), 물 180 mL 을 첨가한 후, 교반환류 시킨다. 반응이 완료 되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물을 24.7 g (65 %) 얻었다

[0175] 6) Sub 2-1-4 합성 예 [$g=0$, Ar^9 =biphenyl, L^6 = biphenyl (linear)]



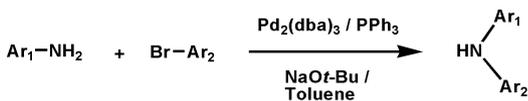
[0176]

[0177] 상기 합성에서 얻어진 M2-2-2 (35.63 g, 80 mmol)을 THF 360 mL 에 녹인 후에, 4-bromo-4'-iodo-1,1'-biphenyl (30.16 g, 84 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.8 g, 2.4mmol), NaOH (9.6 g, 240mmol), 물 180 mL을 첨가한 후, 교반환류 시킨다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물을 29.51 g (67 %) 얻었다

[0178] 3. Sub 3의 합성 예시

[0179] 반응식 1의 Sub 3는 하기 반응식 3의 반응경로에 의해 합성될 수 있다.

[0180] <반응식 3>



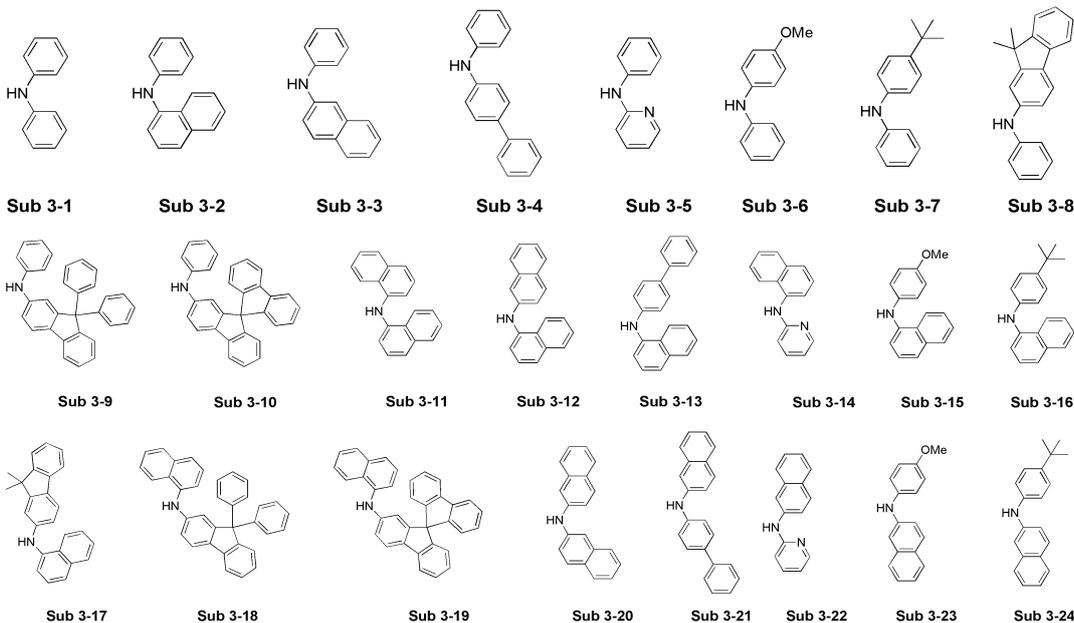
Sub 3

[0181]

[0182] Sub 3의 합성법

[0183] [1,1'-biphenyl]-4-amine(1당량)과 4-bromo-1,1'-biphenyl(1.1당량)를 톨루엔에 넣고 Pd₂(dba)₃ (0.05당량), PPh₃ (0.1당량), NaOt-Bu (3당량)을 각각 첨가한 뒤, 100℃ 에서 24시간 교반환류 시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 di([1,1'-biphenyl]-4-yl)amine을 얻었다.

[0184] Sub 3의 예시는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0185]

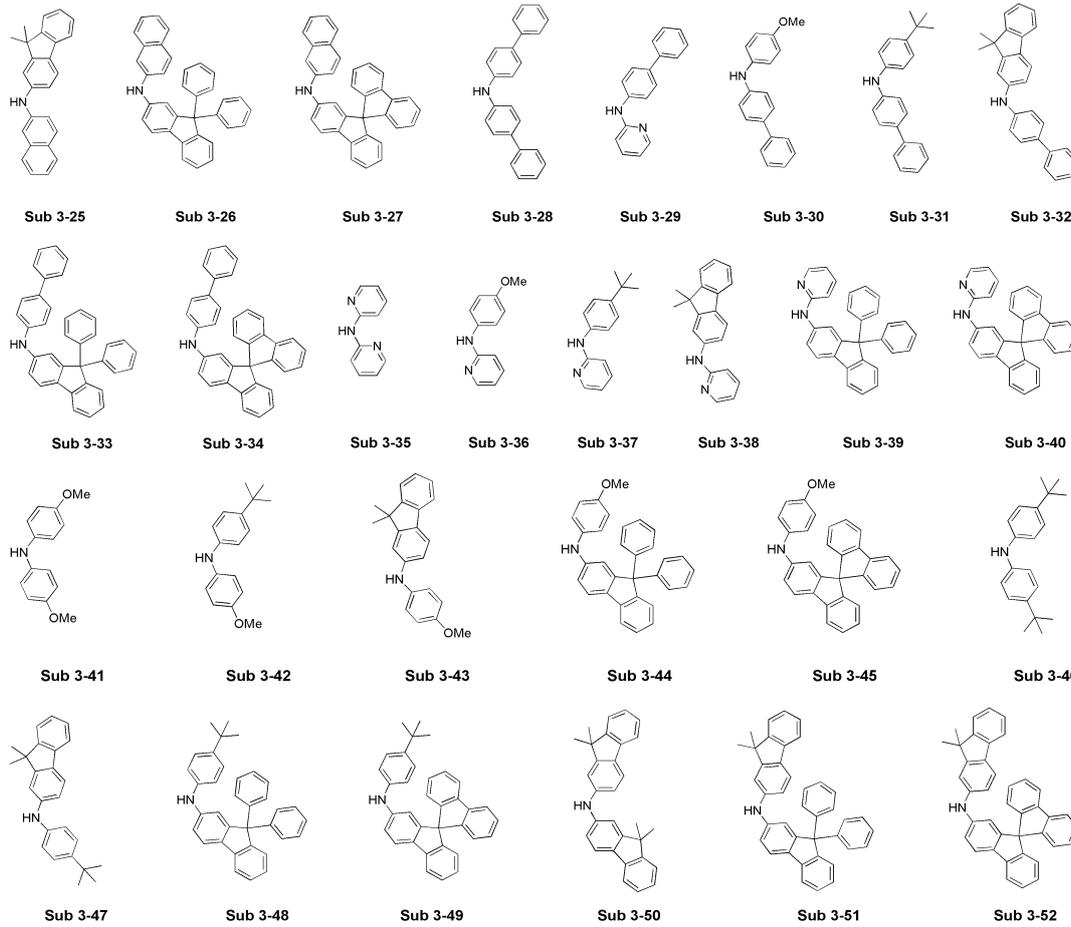


표 1

[0186]

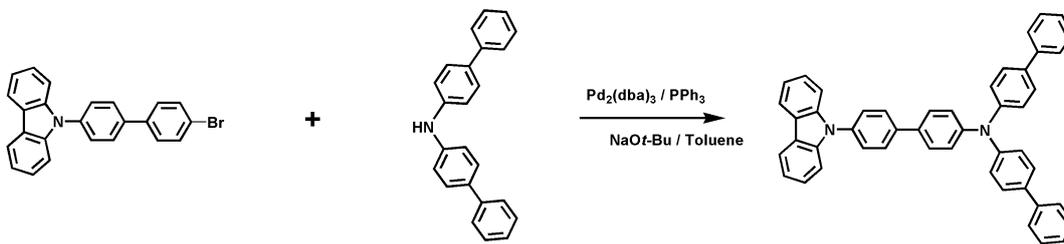
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 3-1	m/z=169.09(C ₁₂ H ₁₁ N=169.22)	Sub 3-2	m/z=219.10(C ₁₆ H ₁₃ N=219.28)
Sub 3-3	m/z=219.10(C ₁₆ H ₁₃ N=219.28)	Sub 3-4	m/z=245.12(C ₁₈ H ₁₅ N=245.32)
Sub 3-5	m/z=170.08(C ₁₁ H ₁₀ N ₂ =170.21)	Sub 3-6	m/z=199.10(C ₁₀ H ₁₃ NO=199.25)
Sub 3-7	m/z=225.15(C ₁₆ H ₁₉ N=225.33)	Sub 3-8	m/z=285.15(C ₂₁ H ₁₉ N=285.38)
Sub 3-9	m/z=409.18(C ₃₁ H ₂₃ N=409.52)	Sub 3-10	m/z=407.17(C ₃₁ H ₂₁ N=407.51)
Sub 3-11	m/z=269.12(C ₂₀ H ₁₅ N=269.34)	Sub 3-12	m/z=269.12(C ₂₀ H ₁₅ N=269.34)
Sub 3-13	m/z=295.14(C ₂₂ H ₁₇ N=295.38)	Sub 3-14	m/z=220.10(C ₁₅ H ₁₂ N ₂ =220.27)
Sub 3-15	m/z=249.12(C ₁₇ H ₁₂ NO=249.31)	Sub 3-16	m/z=275.17(C ₂₀ H ₂₁ N=275.39)
Sub 3-17	m/z=335.17(C ₂₅ H ₂₁ N=335.44)	Sub 3-18	m/z=459.20(C ₃₅ H ₂₅ N=459.58)
Sub 3-19	m/z=457.18(C ₃₅ H ₂₃ N=457.56)	Sub 3-20	m/z=269.12(C ₂₀ H ₁₅ N=269.34)
Sub 3-21	m/z=295.14(C ₂₂ H ₁₇ N=295.38)	Sub 3-22	m/z=220.10(C ₁₅ H ₁₂ N ₂ =220.27)
Sub 3-23	m/z=249.12(C ₁₇ H ₁₅ NO=249.31)	Sub 3-24	m/z=275.17(C ₂₀ H ₂₁ N=275.39)
Sub 3-25	m/z=335.17(C ₂₅ H ₂₁ N=335.44)	Sub 3-26	m/z=459.20(C ₃₅ H ₂₅ N=459.58)
Sub 3-27	m/z=457.18(C ₃₅ H ₂₃ N=457.56)	Sub 3-28	m/z=321.15(C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)
Sub 3-29	m/z=246.12(C ₁₇ H ₁₄ N ₂ =246.31)	Sub 3-30	m/z=275.13(C ₁₉ H ₁₇ NO=275.34)
Sub 3-31	m/z=301.18(C ₂₂ H ₂₃ N=301.42)	Sub 3-32	m/z=361.18(C ₂₇ H ₂₃ N=361.48)
Sub 3-33	m/z=485.21(C ₃₇ H ₂₇ N=485.62)	Sub 3-34	m/z=483.20(C ₃₇ H ₂₅ N=483.60)
Sub 3-35	m/z=171.08(C ₁₀ H ₀₉ N ₃ =171.20)	Sub 3-36	m/z=200.09(C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O=200.24)
Sub 3-37	m/z=226.15(C ₁₅ H ₁₈ N ₂ =226.32)	Sub 3-38	m/z=286.15(C ₂₀ H ₁₈ N ₂ =286.37)
Sub 3-39	m/z=410.18(C ₃₀ H ₂₂ N ₂ =410.51)	Sub 3-40	m/z=408.16(C ₃₀ H ₂₀ N ₂ =408.49)
Sub 3-41	m/z=229.11(C ₁₄ H ₁₅ NO ₂ =229.27)	Sub 3-42	m/z=255.16(C ₁₇ H ₂₁ NO=255.35)

Sub 3-43	m/z=315.16(C ₂₂ H ₂₁ NO=315.41)	Sub 3-44	m/z=439.19(C ₃₂ H ₂₅ NO=439.55)
Sub 3-45	m/z=437.18(C ₃₂ H ₂₃ NO=437.53)	Sub 3-46	m/z=281.21(C ₂₀ H ₂₇ N=281.44)
Sub 3-47	m/z=341.21(C ₂₅ H ₂₇ N=341.49)	Sub 3-48	m/z=465.25(C ₃₅ H ₃₁ N=465.63)
Sub 3-49	m/z=463.23(C ₃₅ H ₂₉ N=463.61)	Sub 3-50	m/z=401.21(C ₃₀ H ₂₇ N=401.54)
Sub 3-51	m/z=525.25(C ₄₀ H ₃₁ N=525.68)	Sub 3-52	m/z=523.23(C ₄₀ H ₂₉ N=523.66)

[0187] **화학식 (1)의 Final Product의 합성**

[0188] Sub 1 (1당량) 또는 Sub 2 (1당량)을 톨루엔에 녹인 후에, Sub 3 (1.1당량), Pd₂(dba)₃ (0.05당량), PPh₃ (0.1당량), NaOt-Bu (3당량)을 각각 첨가한 뒤, 100℃ 에서 24시간 교반환류 시킨다. 반응이 종료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Final Product를 얻었다.

[0189] 1-17의 합성예시

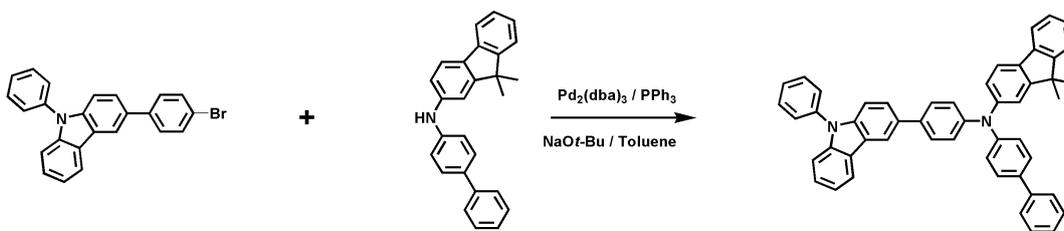


1-17

[0190]

[0191] 9-(4'-bromo-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-9H-carbazole(9.6g, 24mmol)을 톨루엔에 녹인 후에, di([1,1'-biphenyl]-4-yl)amine(6.4g, 20mmol), Pd₂(dba)₃ (0.05당량), PPh₃ (0.1당량), NaOt-Bu (3당량)을 각각 첨가한 뒤, 100℃ 에서 24시간 교반환류 시킨다. 반응이 종료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종화합물을 12.9g (수율: 84%)을 얻었다.

[0192] 1-32의 합성예시

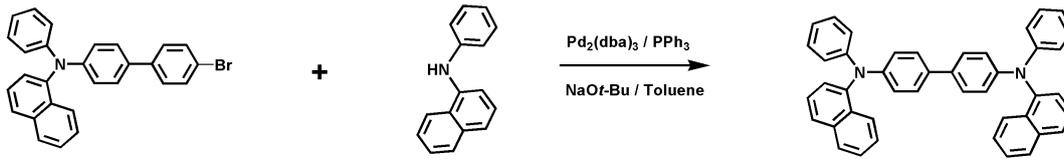


1-32

[0193]

[0194] 3-(4-bromophenyl)-9-phenyl-9H-carbazole(9.6g, 24mmol)을 톨루엔에 녹인 후에, N-(1,1'-biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine(7.2g, 20mmol), Pd₂(dba)₃ (0.05당량), PPh₃ (0.1당량), NaOt-Bu (3당량)을 각각 첨가한 뒤, 100℃ 에서 24시간 교반환류 시킨다. 반응이 종료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종화합물을 13.8g (수율: 85%)을 얻었다.

[0195] 1-61의 합성예시



1-61

[0196]

[0197] N-(4'-bromo-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-N-phenyl-naphthalen-1-amine(10.8g, 24mmol)을 톨루엔에 녹인 후에, N-phenyl-naphthalen-1-amine(4.4g, 20mmol), Pd₂(dba)₃ (0.05당량), PPh₃ (0.1당량), NaOt-Bu (3당량)을 각각 첨가한 뒤, 100℃ 에서 24시간 교반환류 시킨다. 반응이 종료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종화합물을 11.4g (수율: 81%)을 얻었다.

[0198] 상기에서 얻은 Product 중 일부분을 하기와 같이 Mass Data로 확인하였다.

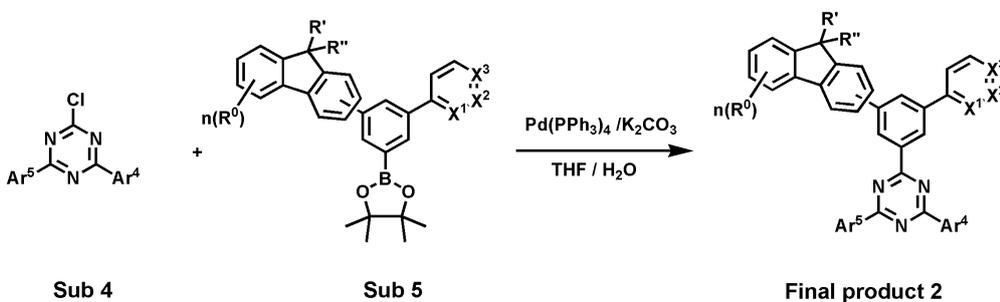
표 2

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
1-17	m/z=638.27 (C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	1-20	m/z=678.30 (C ₅₁ H ₃₈ N ₂ =678.86)
1-21	m/z=802.33 (C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	1-22	m/z=800.32 (C ₆₁ H ₄₀ N ₂ =800.98)
1-32	m/z=678.30 (C ₅₁ H ₃₈ N ₂ =678.86)	1-33	m/z=802.33 (C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)
1-34	m/z=800.32 (C ₆₁ H ₄₀ N ₂ =800.98)	1-43	m/z=714.30 (C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)
1-44	m/z=754.33 (C ₅₇ H ₄₂ N ₂ =754.96)	1-45	m/z=878.37 (C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
1-46	m/z=876.35 (C ₆₇ H ₄₄ N ₂ =877.08)	1-47	m/z=744.26 (C ₅₄ H ₃₆ N ₂ S=744.94)
1-52	m/z=826.33 (C ₆₃ H ₄₂ N ₂ =827.02)	1-53	m/z=824.32 (C ₆₃ H ₄₀ N ₂ =825.01)
1-54	m/z=688.29 (C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)	1-55	m/z=728.32 (C ₅₅ H ₄₀ N ₂ =728.92)
1-57	m/z=778.33 (C ₅₉ H ₄₂ N ₂ =778.98)	1-58	m/z=902.37 (C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
1-59	m/z=900.35 (C ₆₉ H ₄₄ N ₂ =901.10)	1-60	m/z=538.24 (C ₄₀ H ₃₀ N ₂ =538.68)
1-61	m/z=588.26 (C ₄₄ H ₃₂ N ₂ =588.74)	1-62	m/z=588.26 (C ₄₄ H ₃₂ N ₂ =588.74)
1-63	m/z=614.27 (C ₄₆ H ₃₄ N ₂ =614.78)		

[0200] [합성예 2]

[0201] 본 발명에 따른 화학식 (2)로 표시되는 화합물(final product 2)은 하기 반응식 4와 같이 Sub 4 와 Sub 5가 반응하여 제조된다.

[0202] <반응식 4>

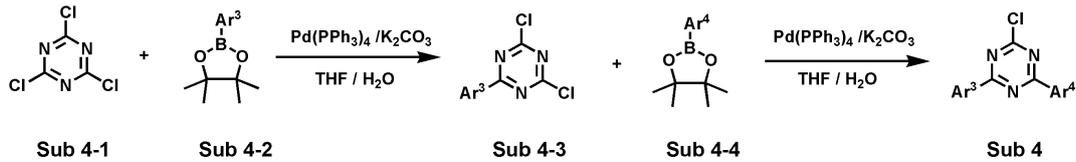


[0203]

[0204] Sub 4합성 예시

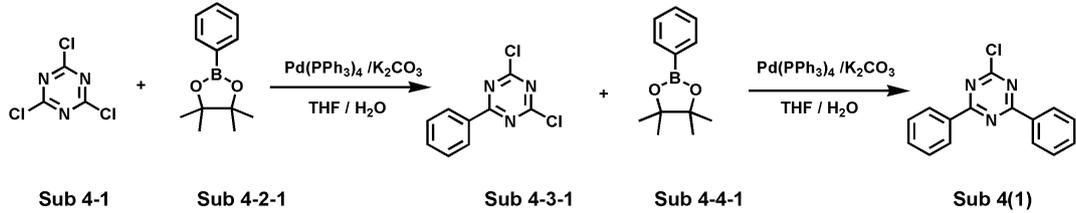
[0205] 반응식 4의 Sub 4은 하기 반응식 5의 반응경로에 의해 합성될 수 있으며 이에 한정된 것은 아니다.

[0206] <반응식 5>



[0207]

[0208] Sub 4(1) 합성 예시



[0209]

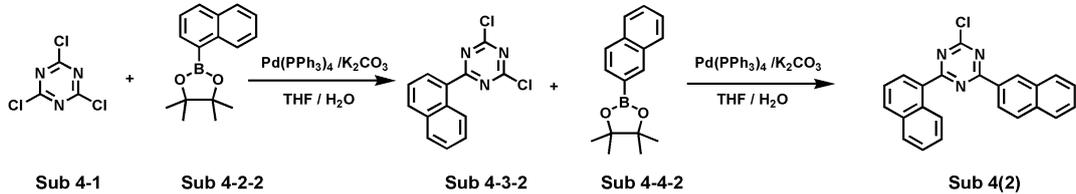
[0210] Sub 4-3-1의 합성

[0211] Sub 4-1 (14.8g, 80 mmol), THF 360 mL, Sub 4-2-1 (16.3g, 80 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.8g, 2.4mmol), NaOH (9.6g, 240mmol), 물 180 mL 을 첨가한 후, 교반환류 시킨다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물을 12.3g (68%) 얻었다

[0212] Sub 4(1)의 합성

[0213] Sub 4-3-1 (12.2g, 54 mmol), Sub 4-4-1 (11.0g, 54 mmol)을 상기 Sub 1-3-1과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 생성물을 9.5g (66%) 얻었다

[0214] Sub 4(2) 합성 예시



[0215]

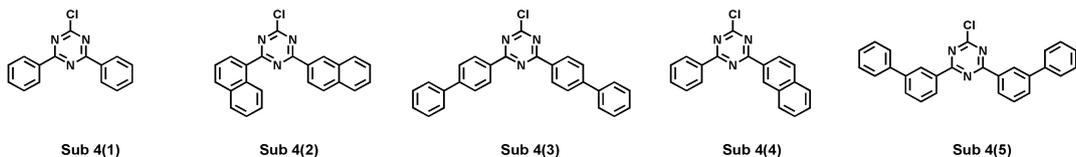
[0216] Sub 4-3-2의 합성

[0217] Sub 4-1 (14.8g, 80 mmol), Sub 4-2-2 (20.3g, 80 mmol)을 상기 Sub 4-3-1과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 생성물을 15.2g (69%) 얻었다

[0218] Sub 4(2)의 합성

[0219] Sub 4-3-2 (15.2g, 54 mmol), Sub 4-4-2 (14.0g, 54 mmol)을 상기 Sub 4-3-1과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 생성물을 13.1g (65%) 얻었다

[0220] Sub 4 의 예시는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0221]

표 3

[0222]

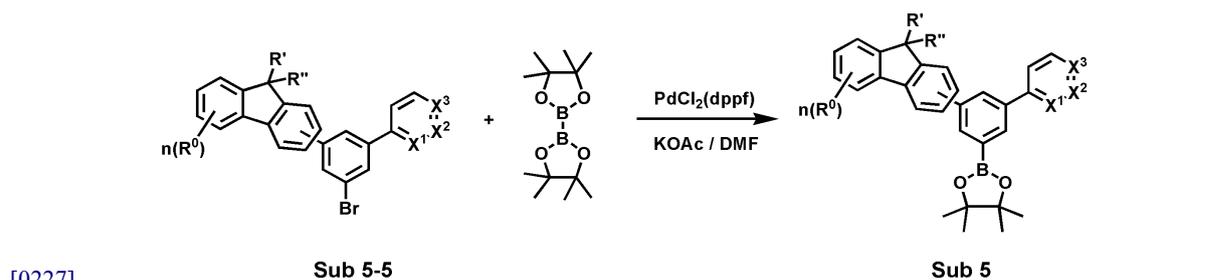
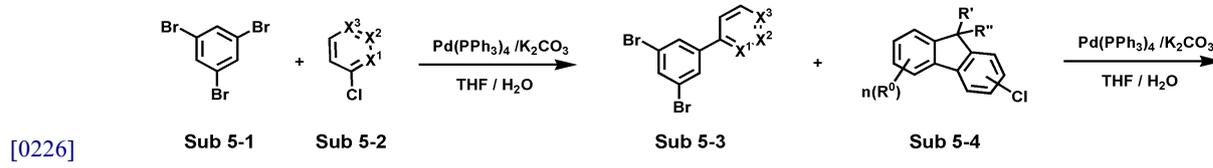
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 4(1)	m/z=267.06(C ₁₅ H ₁₀ ClN ₃ =267.71)	Sub 4(2)	m/z=367.09(C ₂₃ H ₁₄ ClN ₃ =367.83)
Sub 4(3)	m/z=419.12(C ₂₇ H ₁₈ ClN ₃ =419.90)	Sub 4(4)	m/z=317.07(C ₁₉ H ₁₂ ClN ₃ =317.77)

Sub 4(5)	m/z=419.12(C ₂₇ H ₁₈ ClN ₃ =419.90)		
----------	--	--	--

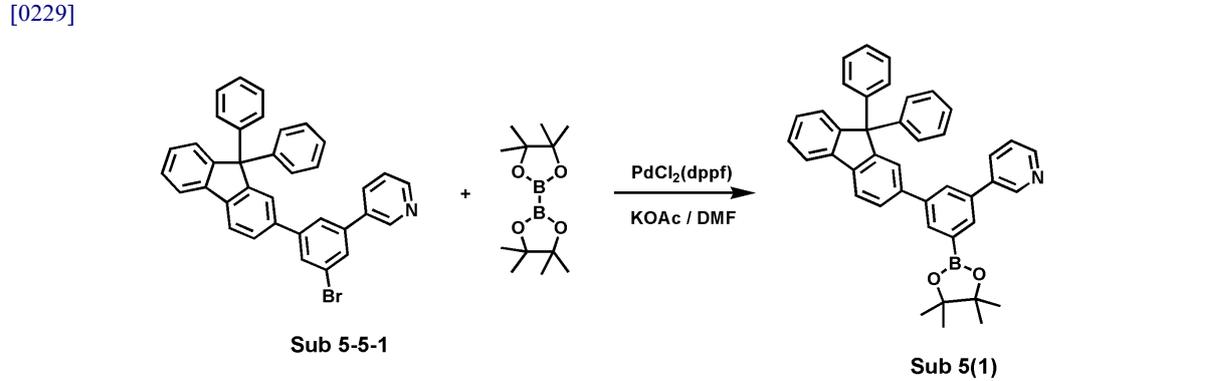
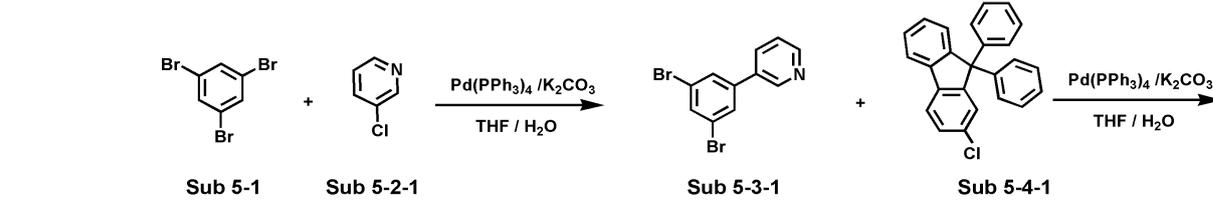
[0223] Sub 5합성 예시

[0224] 반응식 4의 Sub 5는 하기 반응식 6의 반응경로에 의해 합성될 수 있으며 이에 한정된 것은 아니다.

[0225] <반응식 6>



[0228] Sub 5(1) 합성 예시



[0230] Sub 5-3-1의 합성

[0231] Sub 5-1 (25.2g, 80 mmol), THF 360 mL, Sub 5-2-1 (9.1g, 80 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.8g, 2.4mmol), NaOH (9.6g, 240mmol), 물 180 mL 을 첨가한 후, 교반환류 시킨다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄ 로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물을 17.3g (69%) 얻었다

[0232] Sub 5-5-1의 합성

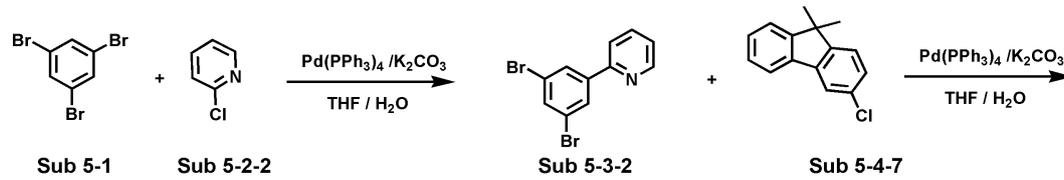
[0233] Sub 5-3-1 (17.2g, 55 mmol), Sub 5-4-1 (19.4g, 55 mmol)을 상기 Sub 5-3-1과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 생성물을 20.0g (66%) 얻었다

[0234] Sub 5(1)의 합성

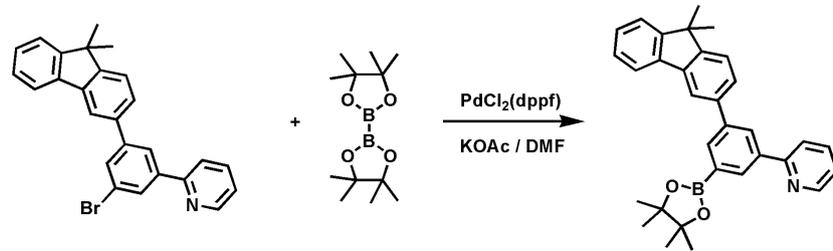
[0235] Sub 5-5-1 (19.8g, 36mmol) 을 DMF 300mL 에 녹인 후에, Bispinacolborate (10.2g, 40 mmol), PdCl₂(dppf) 촉매 (0.7g, 1 mmol), KOAc (30.5g, 108mmol)을 순서대로 첨가한 후 24 시간 교반 후에, 얻어진 화합물을

silicagel column 및 재결정을 걸쳐서 분리한 후 보레이트 화합물 Sub 5(1)을 14.8g (69%) 얻었다.

[0236] Sub 5(7) 합성 예시



[0237]



[0238]

Sub 5-5-7

Sub 5(7)

[0239]

Sub 5-3-2의 합성

[0240]

Sub 5-1 (25.2g, 80 mmol), Sub5-2-2 (9.1g, 80 mmol)을 상기 Sub 5-3-1과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 생성물을 16.8g (67%) 얻었다.

[0241]

Sub 5-5-7의 합성

[0242]

Sub 5-3-2 (16.6g, 53 mmol), Sub 5-4-2 (12.1g, 53 mmol)을 상기 Sub 5-3-1과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 생성물을 14.5g (64%) 얻었다

[0243]

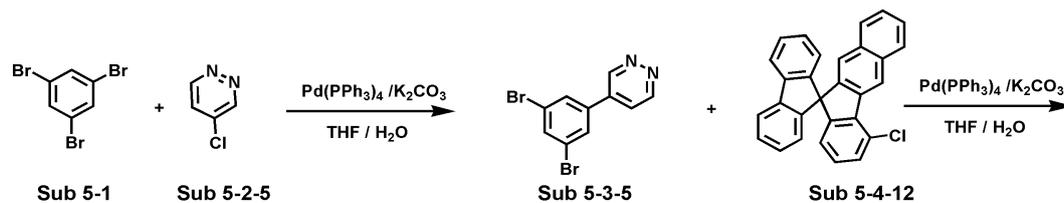
Sub 5(7)의 합성

[0244]

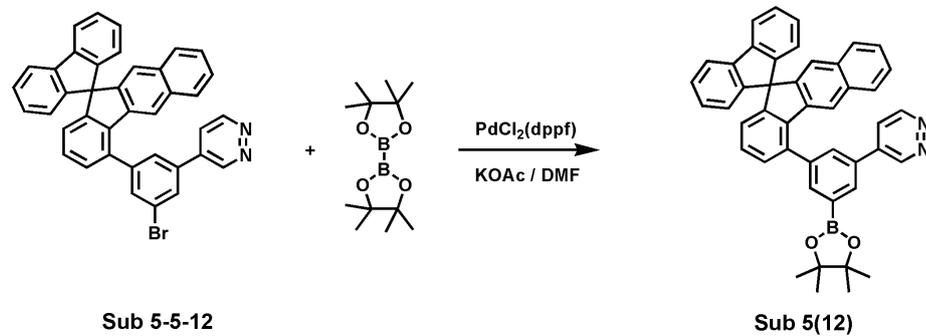
Sub 5-5-7 (14.5g, 34mmol)과 Bispinacolborate (8.6g, 35 mmol)을 상기 Sub 5(1)과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 Sub 5(7)을 15.3g (71%) 얻었다.

[0245]

Sub 5(12) 합성 예시



[0246]



[0247]

[0248]

Sub 5-3-5의 합성

[0249]

Sub 5-1 (25.2g, 80 mmol), Sub 5-2-5 (9.2g, 80 mmol)을 상기 Sub 5-3-1과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 생성물을 16.3g (65%) 얻었다.

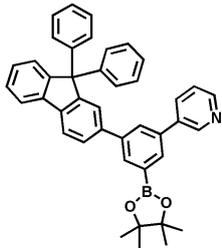
[0250] Sub 5-5-12의 합성

[0251] Sub 5-3-5 (16.3g, 52 mmol), Sub 5-4-12 (20.8g, 52 mmol)을 상기 Sub 5-3-1과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 생성물을 18.4g (59%) 얻었다

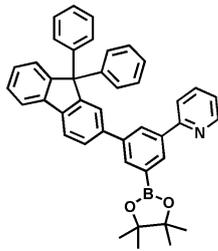
[0252] Sub 5(12)의 합성

[0253] Sub 5-5-12 (18.0g, 30mmol)과 Bispinacolborate (7.6g, 30mmol)을 상기 Sub 5(1)과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 Sub 5(12)를 12.0g (62%) 얻었다.

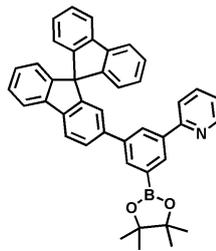
[0254] Sub 5의 예시는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



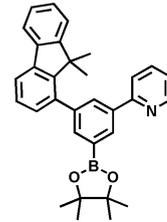
Sub 5(1)



Sub 5(2)

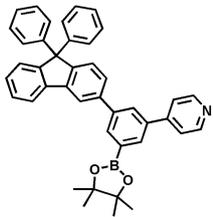


Sub 5(3)

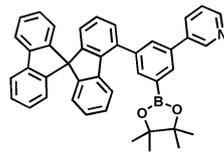


Sub 5(4)

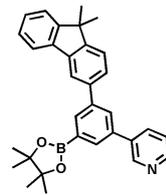
[0255]



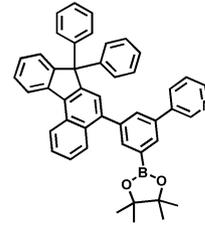
Sub 5(5)



Sub 5(6)

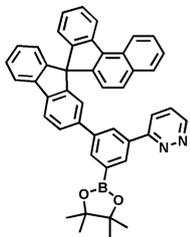


Sub 5(7)

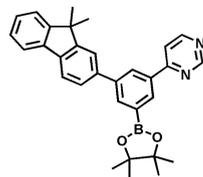


Sub 5(8)

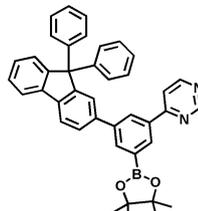
[0256]



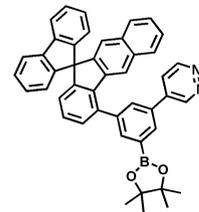
Sub 5(9)



Sub 5(10)



Sub 5(11)



Sub 5(12)

[0257]

표 4

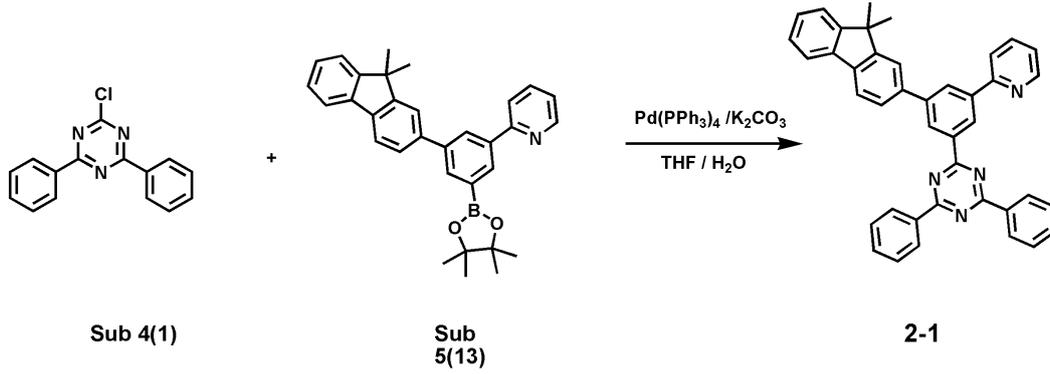
[0258]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 5(1)	m/z=597.28(C ₄₂ H ₃₆ BN ₂ O ₂ =597.55)	Sub 5(2)	m/z=597.28(C ₄₂ H ₃₆ BN ₂ O ₂ =597.55)
Sub 5(3)	m/z=595.27(C ₄₂ H ₃₄ BN ₂ O ₂ =595.54)	Sub 5(4)	m/z=473.25(C ₃₂ H ₃₂ BN ₂ O ₂ =473.41)
Sub 5(5)	m/z=597.28(C ₄₂ H ₃₆ BN ₂ O ₂ =597.55)	Sub 5(6)	m/z=595.27(C ₄₂ H ₃₄ BN ₂ O ₂ =595.54)
Sub 5(7)	m/z=473.25(C ₃₂ H ₃₂ BN ₂ O ₂ =473.41)	Sub 5(8)	m/z=647.30(C ₄₆ H ₃₈ BN ₂ O ₂ =647.61)
Sub 5(9)	m/z=646.28(C ₄₅ H ₃₅ BN ₂ O ₂ =646.58)	Sub 5(10)	m/z=474.25(C ₃₁ H ₃₁ BN ₂ O ₂ =474.40)
Sub 5(11)	m/z=598.28(C ₄₁ H ₃₅ BN ₂ O ₂ =598.54)	Sub 5(12)	m/z=646.28(C ₄₅ H ₃₅ BN ₂ O ₂ =646.58)

[0259]

Final Products 합성 예시

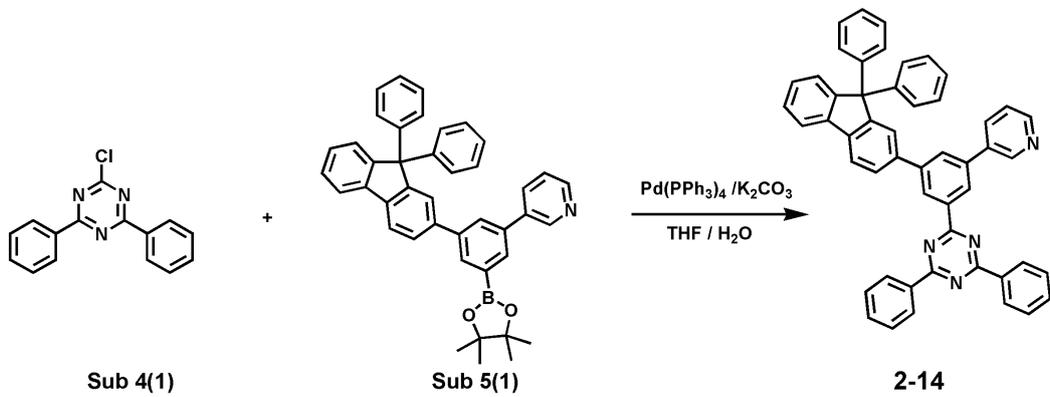
[0260] 2-1의 합성예시



[0261]

[0262] Sub 1(1) (21.4g, 80 mmol), THF 360 mL, Sub 2(13) (37.9g, 80 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.8g, 2.4mmol), NaOH (9.6g, 240mmol), 물 180 mL 을 첨가한 후, 교반환류 시킨다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물을 31.9g (69%) 얻었다

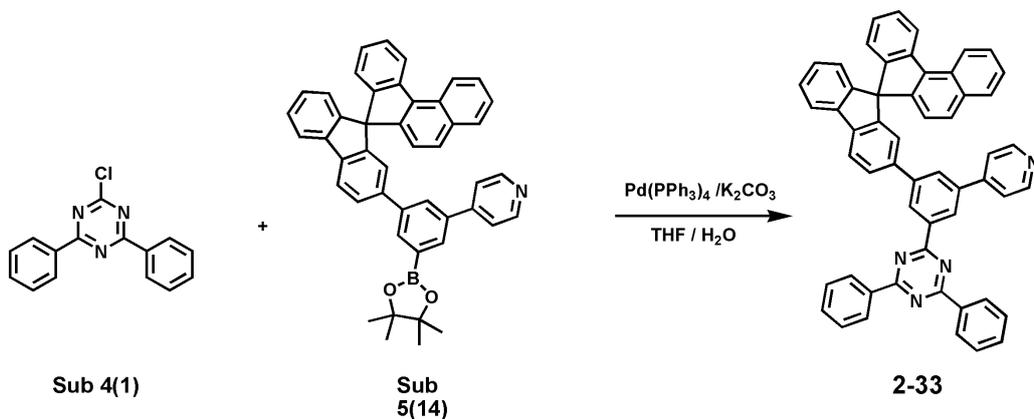
[0263] 2-14의 합성예시



[0264]

[0265] Sub 4(1) (21.4g, 80 mmol), Sub 5(1) (47.8g, 80 mmol)을 상기 2-1과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 생성물을 39.4g (65%) 얻었다.

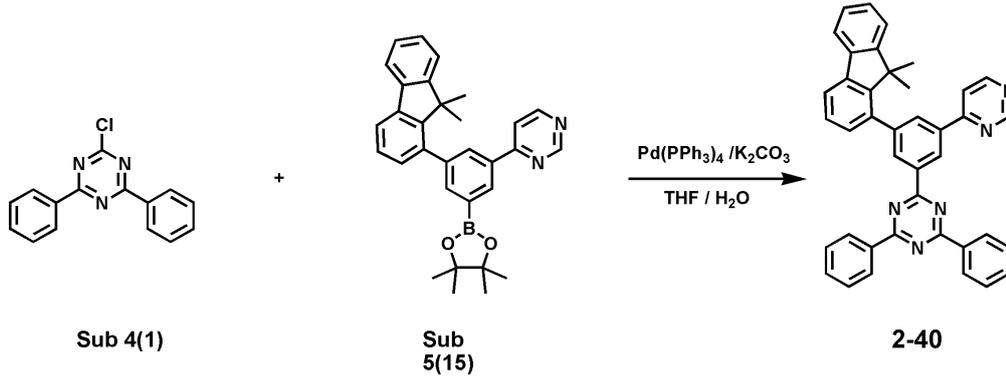
[0266] 2-33의 합성예시



[0267]

[0268] Sub 4(1) (21.4g, 80 mmol), Sub 5(14) (51.6g, 80 mmol)을 상기 2-1과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 생성물을 38.4g (64%) 얻었다.

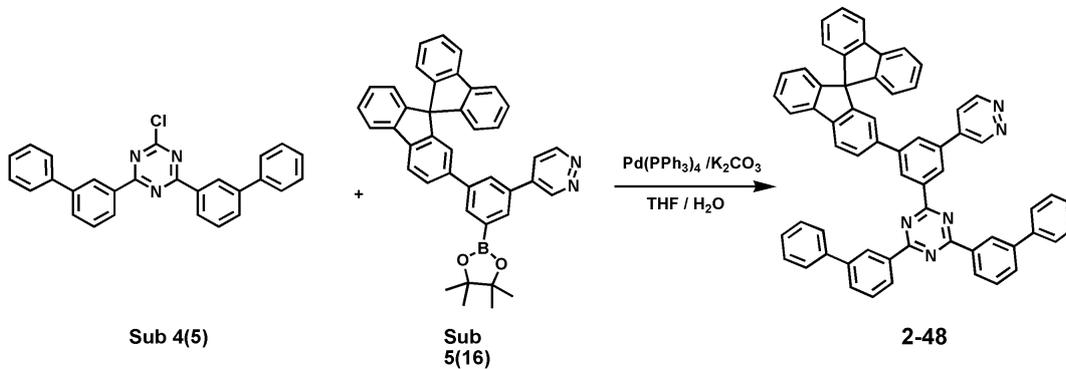
[0269] 2-40의 합성예시



[0270]

[0271] Sub 4(1) (21.4g, 80 mmol), Sub 5(15) (38.0g, 80 mmol)을 상기 2-1과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 생성물을 30.1g (65%) 얻었다.

[0272] 2-48의 합성예시



[0273]

[0274] Sub 4(1) (33.6g, 80 mmol), Sub 5(16) (47.7g, 80 mmol)을 상기 2-1과 동일한 방법으로 합성 및 재결정하여 생성물을 28.5g (61%) 얻었다.

표 5

[0275]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
2-1	m/z=578.25(C ₄₁ H ₃₀ N ₄ =578.70)	2-2	m/z=702.28(C ₅₁ H ₃₄ N ₄ =702.84)
2-3	m/z=700.26(C ₅₁ H ₃₂ N ₄ =700.83)	2-4	m/z=578.25(C ₄₁ H ₃₀ N ₄ =578.70)
2-5	m/z=702.28(C ₅₁ H ₃₄ N ₄ =702.84)	2-6	m/z=700.26(C ₅₁ H ₃₂ N ₄ =700.83)
2-7	m/z=628.26(C ₄₅ H ₃₂ N ₄ =628.76)	2-8	m/z=752.29(C ₅₅ H ₃₆ N ₄ =752.90)
2-9	m/z=750.28(C ₅₅ H ₃₄ N ₄ =750.89)	2-10	m/z=678.28(C ₄₉ H ₃₄ N ₄ =678.82)
2-11	m/z=802.31(C ₅₉ H ₃₈ N ₄ =802.96)	2-12	m/z=852.33(C ₆₃ H ₄₀ N ₄ =853.02)
2-13	m/z=578.25(C ₄₁ H ₃₀ N ₄ =578.70)	2-14	m/z=702.28(C ₅₁ H ₃₄ N ₄ =702.84)
2-15	m/z=700.26(C ₅₁ H ₃₂ N ₄ =700.83)	2-16	m/z=578.25(C ₄₁ H ₃₀ N ₄ =578.70)
2-17	m/z=702.28(C ₅₁ H ₃₄ N ₄ =702.84)	2-18	m/z=700.26(C ₅₁ H ₃₂ N ₄ =700.83)
2-19	m/z=628.26(C ₄₅ H ₃₂ N ₄ =628.76)	2-20	m/z=752.29(C ₅₅ H ₃₆ N ₄ =752.90)
2-21	m/z=750.28(C ₅₅ H ₃₄ N ₄ =750.89)	2-22	m/z=678.28(C ₄₉ H ₃₄ N ₄ =678.82)
2-23	m/z=802.31(C ₅₉ H ₃₈ N ₄ =802.96)	2-24	m/z=852.33(C ₆₃ H ₄₀ N ₄ =853.02)
2-25	m/z=578.25(C ₄₁ H ₃₀ N ₄ =578.70)	2-26	m/z=702.28(C ₅₁ H ₃₄ N ₄ =702.84)
2-27	m/z=700.26(C ₅₁ H ₃₂ N ₄ =700.83)	2-28	m/z=578.25(C ₄₁ H ₃₀ N ₄ =578.70)
2-29	m/z=702.28(C ₅₁ H ₃₄ N ₄ =702.84)	2-30	m/z=700.26(C ₅₁ H ₃₂ N ₄ =700.83)
2-31	m/z=628.26(C ₄₅ H ₃₂ N ₄ =628.76)	2-32	m/z=752.29(C ₅₅ H ₃₆ N ₄ =752.90)
2-33	m/z=750.28(C ₅₅ H ₃₄ N ₄ =750.89)	2-34	m/z=678.28(C ₄₉ H ₃₄ N ₄ =678.82)
2-35	m/z=802.31(C ₅₉ H ₃₈ N ₄ =802.96)	2-36	m/z=852.33(C ₆₃ H ₄₀ N ₄ =853.02)

2-37	m/z=579.24(C ₄₀ H ₂₉ N ₅ =579.69)	2-38	m/z=703.27(C ₅₀ H ₃₃ N ₅ =703.83)
2-39	m/z=701.26(C ₅₀ H ₃₁ N ₅ =701.81)	2-40	m/z=579.24(C ₄₀ H ₂₉ N ₅ =579.69)
2-41	m/z=703.27(C ₅₀ H ₃₃ N ₅ =703.83)	2-42	m/z=701.26(C ₅₀ H ₃₁ N ₅ =701.81)
2-43	m/z=629.26(C ₄₄ H ₃₁ N ₅ =629.75)	2-44	m/z=754.28(C ₅₃ H ₃₄ N ₆ =754.88)
2-45	m/z=751.27(C ₅₄ H ₃₃ N ₅ =751.87)	2-46	m/z=679.27(C ₄₈ H ₃₃ N ₅ =679.81)
2-47	m/z=803.30(C ₅₈ H ₃₇ N ₅ =803.95)	2-48	m/z=853.32(C ₆₂ H ₃₉ N ₅ =854.01)

[0276] **유기전기소자의 제조평가**

[0277] **[실시예 I] 그린유기전기발광소자(전자수송층)**

[0278] 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 4,4',4''-Tris[2-naphthyl(phenyl)amino]triphenylamine (이하 2-TNATA로 약기함)을 60 nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 정공주입층 위에 화학식 (1)로 표시되는 상기 발명 화합물 중 1-61을 60 nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 다음으로, 정공수송층 상에 호스트 물질로 CBP [4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl]를, 도판트 물질로 Ir(ppy)₃ [tris(2-phenylpyridine)-iridium]를 95:5 중량비로 도핑하여 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 (1,1'-비스페닐)-4-올레이토)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이토)알루미늄 (이하 BA1q로 약기함)을 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공 저지층 상에 본 발명의 화합물 중 하나를 40 nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 성막하였다. 이후, 전자수송층 상에 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0279] 이와 같이 제조된 실시예 및 비교예 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여포토리서치 (photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정결과 500cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 하기표는 소자제작 및 평가한 결과를 나타낸다.

[0280] **[비교예 1]**

[0281] 전자수송층 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 <비교화합물 1>을 사용한 점을 제외하고는 실시예 I과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

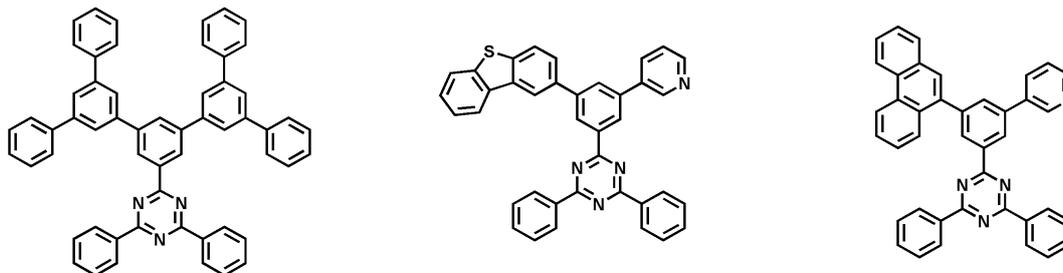
[0282] **[비교예 2]**

[0283] 전자수송층 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 <비교화합물 2>를 사용한 점을 제외하고는 실시예 I과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0284] **[비교예 3]**

[0285] 전자수송층 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 <비교화합물 3>를 사용한 점을 제외하고는 실시예 I과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0286] <비교화합물 1> <비교화합물 2> <비교화합물 3>



[0287]

표 6

	화합물	Voltage	Current Density	Brightness (cd/m ²)	Efficiency	Lifetime T(95)	CIE (x, y)
비교예(1)	비교화합물 1	5.4	18.9	5000.0	26.4	92.8	(0.33, 0.61)
비교예(2)	비교화합물 2	5.0	17.9	5000.0	27.9	94.3	(0.32, 0.60)
비교예(3)	비교화합물 3	5.1	16.4	5000.0	30.5	97.5	(0.31, 0.61)
실시예(1)	화합물(2-1)	4.5	13.0	5000.0	38.4	115.3	(0.31, 0.61)
실시예(2)	화합물(2-2)	4.5	12.7	5000.0	39.3	119.3	(0.31, 0.60)
실시예(3)	화합물(2-3)	4.5	12.7	5000.0	39.4	118.5	(0.33, 0.61)
실시예(4)	화합물(2-4)	4.5	12.7	5000.0	39.3	119.7	(0.32, 0.60)
실시예(5)	화합물(2-5)	4.5	13.5	5000.0	37.1	111.1	(0.32, 0.61)
실시예(6)	화합물(2-6)	4.5	13.3	5000.0	37.7	113.7	(0.33, 0.60)
실시예(7)	화합물(2-7)	4.5	13.2	5000.0	37.8	111.0	(0.30, 0.60)
실시예(8)	화합물(2-8)	4.4	12.9	5000.0	38.8	117.2	(0.30, 0.61)
실시예(9)	화합물(2-9)	4.4	12.6	5000.0	39.7	118.0	(0.32, 0.61)
실시예(10)	화합물(2-10)	4.4	12.9	5000.0	38.8	119.5	(0.31, 0.61)
실시예(11)	화합물(2-11)	4.4	12.9	5000.0	38.7	114.3	(0.31, 0.60)
실시예(12)	화합물(2-12)	4.4	13.1	5000.0	38.1	110.6	(0.31, 0.60)
실시예(13)	화합물(2-13)	4.1	11.6	5000.0	43.0	113.4	(0.32, 0.61)
실시예(14)	화합물(2-14)	4.1	11.8	5000.0	42.5	119.6	(0.31, 0.61)
실시예(15)	화합물(2-15)	4.0	12.3	5000.0	40.7	110.9	(0.33, 0.60)
실시예(16)	화합물(2-16)	4.1	11.5	5000.0	43.5	116.9	(0.31, 0.60)
실시예(17)	화합물(2-17)	4.1	11.6	5000.0	43.1	119.5	(0.32, 0.61)
실시예(18)	화합물(2-18)	4.1	11.5	5000.0	43.5	119.3	(0.32, 0.61)
실시예(19)	화합물(2-19)	4.0	11.5	5000.0	43.5	118.2	(0.33, 0.60)
실시예(20)	화합물(2-20)	4.1	11.3	5000.0	44.4	115.6	(0.30, 0.61)
실시예(21)	화합물(2-21)	4.1	11.4	5000.0	43.9	117.9	(0.31, 0.61)
실시예(22)	화합물(2-22)	4.0	12.4	5000.0	40.2	111.4	(0.31, 0.60)
실시예(23)	화합물(2-23)	4.0	11.6	5000.0	43.1	114.3	(0.33, 0.61)
실시예(24)	화합물(2-24)	4.1	13.1	5000.0	38.1	111.7	(0.32, 0.61)
실시예(25)	화합물(2-25)	4.4	13.1	5000.0	38.0	115.1	(0.33, 0.60)
실시예(26)	화합물(2-26)	4.4	12.7	5000.0	39.3	116.3	(0.30, 0.61)
실시예(27)	화합물(2-27)	4.3	13.4	5000.0	37.4	116.6	(0.31, 0.61)
실시예(28)	화합물(2-28)	4.4	13.0	5000.0	38.6	117.4	(0.31, 0.60)
실시예(29)	화합물(2-29)	4.4	12.6	5000.0	39.5	112.4	(0.33, 0.61)
실시예(30)	화합물(2-30)	4.3	12.5	5000.0	40.0	112.3	(0.32, 0.60)
실시예(31)	화합물(2-31)	4.4	13.2	5000.0	37.9	116.3	(0.32, 0.61)
실시예(32)	화합물(2-32)	4.4	13.5	5000.0	37.0	119.4	(0.33, 0.60)
실시예(33)	화합물(2-33)	4.4	12.9	5000.0	38.7	115.9	(0.30, 0.60)
실시예(34)	화합물(2-34)	4.4	12.6	5000.0	39.8	112.5	(0.30, 0.61)
실시예(35)	화합물(2-35)	4.3	12.6	5000.0	39.8	115.0	(0.32, 0.61)
실시예(36)	화합물(2-36)	4.4	13.3	5000.0	37.6	118.9	(0.31, 0.61)
실시예(37)	화합물(2-37)	4.6	13.7	5000.0	36.6	120.0	(0.31, 0.60)
실시예(38)	화합물(2-38)	4.7	13.6	5000.0	36.9	115.9	(0.31, 0.60)
실시예(39)	화합물(2-39)	4.5	13.8	5000.0	36.3	118.5	(0.32, 0.61)
실시예(40)	화합물(2-40)	4.7	14.1	5000.0	35.5	113.1	(0.31, 0.61)
실시예(41)	화합물(2-41)	4.6	14.3	5000.0	35.0	114.2	(0.33, 0.60)
실시예(42)	화합물(2-42)	4.7	13.7	5000.0	36.6	119.1	(0.31, 0.60)
실시예(43)	화합물(2-43)	4.6	13.7	5000.0	36.4	119.7	(0.32, 0.61)
실시예(44)	화합물(2-44)	4.7	13.7	5000.0	36.5	112.9	(0.32, 0.61)
실시예(45)	화합물(2-45)	4.7	14.2	5000.0	35.3	116.4	(0.33, 0.60)
실시예(46)	화합물(2-46)	4.7	14.0	5000.0	35.6	117.7	(0.30, 0.61)
실시예(47)	화합물(2-47)	4.5	13.8	5000.0	36.1	113.7	(0.31, 0.61)
실시예(48)	화합물(2-48)	4.5	14.2	5000.0	35.3	115.4	(0.31, 0.60)

[0289] 상기 표 6의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 유기전기발광소자용 재료를 전자수송층으로 사용할 경우 구동

전압, 효율 및 수명을 현저히 개선시키는 것을 확인 할 수 있었다.

[0290] 다시 말해, 트리아진에 페닐이 치환된 영역을 코어로 볼 경우, 양쪽에 아릴기가 치환되어 있는 비교화합물 1 보다는 한 쪽에 피리딘이 치환되어 있는 비교화합물 2,3이 우수한 소자 결과를 나타내었고, 피리딘이 치환되지 않은 다른 한쪽에 헥테로환기가 치환되어있는 비교화합물 2 보다는 아릴기가 치환된 비교화합물 3이 더 우수한 결과를 나타내었다. 그러나, 일반 아릴기 보다는 치환 또는 비치환 될 수 있는 fluorene기라는 특정 치환기가 치환되어 있는 자사 발명화합물이 가장 우수한 결과를 나타내었다.

[0291] 이는 치환기에 의해 에너지 레벨 값을 조절할 수 있으며 발명 화합물과 같은 치환기 (치환 또는 비치환 될 수 있는 fluorine)가 적절한 에너지 레벨을 가져 발광층 내 charge balance가 증대되고, 특히 높은 T₁값을 가지게 되어 정공 저지 능력(hole blocking ability)이 향상될 뿐만 아니라, 발광층 내에서 여기자(exciton)가 잘 머무를 수 있는 확률을 상대적으로 높이기 때문인 것으로 판단된다.

[0292] 이는 동일한 코어라도 치환기의 종류가 달라짐에 따라 LUMO와 같은 에너지 레벨이 달라져 특성이 현저히 달라짐을 시사하고 있기 때문에 코어와 치환기의 조합에 의해 나타나는 소자의 특징을 쉽게 유추하는 것은 통상의 기술자라 하더라도 매우 어려울 것이다.

[0293] [실시예 2] 그린 유기 발광 소자의 제작 및 시험

[0294] 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 우선 홀 주입층으로서 N¹-(naphthalen-2-yl)-N⁴,N⁴-bis(4-(naphthalen-2-yl(phenyl)amino)phenyl)-N¹-phenylbenzene-1,4-diamine (2-TNATA로 약기함) 막을 진공증착하여 60 nm 두께로 형성하였다. 이어서, 이 막 상에 정공수송 화합물로서 화학식 (1)로 표시되는 상기 발명 화합물 중 1-61을 60 nm 두께로 진공증착하여 홀 수송층을 형성하였다. 이어서, 발광 보조층 재료로서 화학식 (1)로 표시되는 상기 발명 화합물을 20nm의 두께로 진공증착하여 발광 보조층을 형성하였다. 발광 보조층을 형성한 후, 발광 보조층 상부에 호스트로서는 CBP[4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl]를 사용하였으며, 도판트로서는 Ir(ppy)₃ [tris(2-phenylpyridine)-iridium]를 95:5 중량으로 도핑함으로써 상기 발광 보조층 위에 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 홀 저지층으로 (1,1'비스페닐)-4-올레이트)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이트)알루미늄(이하 BALq로 약기함)을 10 nm 두께로 진공증착하고, 상기 정공 저지층 상에 화학식 (2)로 표시되는 본 발명의 화합물 중 하나를 40 nm 두께로 성막하였다. 이후, 전자주입층으로 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극으로 사용함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0295] 이와 같이 제조된 실시예 및 비교예 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치 (photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정결과 5000cd/m² 기준 휘도에서 맥 사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 하기표는 소자제작 및 평가한 결과를 나타낸다.

[0296] [비교예 4,5,6]

[0297] 발광보조층을 사용하지 않고, 전자수송층 화합물로 비교예 1~3 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 2와 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다. (전체 소자의 두께를 동일하게 비교하기 위해 정공 수송층 화합물을 보조층 두께만큼 적층하였다)

[0298] [비교예 7,8,9]

[0299] 전자수송층 화합물로 비교예 1~3 화합물을 사용한 것을 제외하고는 기 실시예 2와 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

표 7

[0300]	발광보조층화합물	전자수송층 화합물	Voltage	Current Density	Brightness (cd/m ²)	Efficiency	Lifetime T(95)
비교예(4)	화합물(1-61)	비교화합물 1	5.5	16.2	5000.0	30.8	82.4
비교예(5)	화합물(1-61)	비교화합물 2	5.2	14.9	5000.0	33.6	89.7
비교예(6)	화합물(1-61)	비교화합물 3	5.3	14.0	5000.0	35.7	89.6
비교예(7)	화합물(1-32)	비교화합물 1	5.4	13.9	5000.0	35.9	101.0
비교예(8)	화합물(1-32)	비교화합물 2	5.1	13.6	5000.0	36.8	104.3
비교예(9)	화합물(1-32)	비교화합물 3	5.0	12.5	5000.0	40.1	107.5

실시예(49)	화합물(1-32)	화합물(2-1)	4.3	10.0	5000.0	49.8	123.5
실시예(50)	화합물(1-32)	화합물(2-2)	4.4	10.8	5000.0	46.1	129.9
실시예(51)	화합물(1-32)	화합물(2-3)	4.3	10.1	5000.0	49.4	129.6
실시예(52)	화합물(1-32)	화합물(2-4)	4.4	10.2	5000.0	49.2	126.8
실시예(53)	화합물(1-32)	화합물(2-5)	4.4	11.0	5000.0	45.4	124.9
실시예(54)	화합물(1-32)	화합물(2-6)	4.3	10.8	5000.0	46.5	121.8
실시예(55)	화합물(1-32)	화합물(2-7)	4.5	11.0	5000.0	45.4	125.5
실시예(56)	화합물(1-32)	화합물(2-8)	4.5	10.5	5000.0	47.7	127.3
실시예(57)	화합물(1-32)	화합물(2-9)	4.4	10.1	5000.0	49.3	121.2
실시예(58)	화합물(1-32)	화합물(2-10)	4.5	10.9	5000.0	45.7	127.1
실시예(59)	화합물(1-32)	화합물(2-11)	4.4	10.1	5000.0	49.7	122.1
실시예(60)	화합물(1-32)	화합물(2-12)	4.3	10.3	5000.0	48.7	123.4
실시예(61)	화합물(1-32)	화합물(2-13)	4.2	9.6	5000.0	52.0	121.0
실시예(62)	화합물(1-32)	화합물(2-14)	4.1	10.0	5000.0	50.0	125.8
실시예(63)	화합물(1-32)	화합물(2-15)	4.2	9.6	5000.0	52.3	120.4
실시예(64)	화합물(1-32)	화합물(2-16)	4.1	9.8	5000.0	51.2	126.3
실시예(65)	화합물(1-32)	화합물(2-17)	4.0	9.7	5000.0	51.7	128.4
실시예(66)	화합물(1-32)	화합물(2-18)	4.0	9.6	5000.0	52.3	126.1
실시예(67)	화합물(1-32)	화합물(2-19)	4.1	9.7	5000.0	51.7	122.7
실시예(68)	화합물(1-32)	화합물(2-20)	4.1	9.6	5000.0	52.2	120.1
실시예(69)	화합물(1-32)	화합물(2-21)	4.2	9.7	5000.0	51.7	121.7
실시예(70)	화합물(1-32)	화합물(2-22)	4.1	9.5	5000.0	52.6	123.4
실시예(71)	화합물(1-32)	화합물(2-23)	4.0	9.8	5000.0	50.9	128.3
실시예(72)	화합물(1-32)	화합물(2-24)	4.0	9.6	5000.0	52.3	123.5
실시예(73)	화합물(1-32)	화합물(2-25)	4.3	10.3	5000.0	48.5	128.7
실시예(74)	화합물(1-32)	화합물(2-26)	4.5	10.4	5000.0	48.2	120.4
실시예(75)	화합물(1-32)	화합물(2-27)	4.4	10.5	5000.0	47.5	120.0
실시예(76)	화합물(1-32)	화합물(2-28)	4.5	10.1	5000.0	49.4	121.6
실시예(77)	화합물(1-32)	화합물(2-29)	4.4	10.1	5000.0	49.7	122.9
실시예(78)	화합물(1-32)	화합물(2-30)	4.4	10.9	5000.0	45.7	124.1
실시예(79)	화합물(1-32)	화합물(2-31)	4.5	10.6	5000.0	47.1	127.5
실시예(80)	화합물(1-32)	화합물(2-32)	4.4	10.6	5000.0	47.2	121.1
실시예(81)	화합물(1-32)	화합물(2-33)	4.4	10.3	5000.0	48.4	127.2
실시예(82)	화합물(1-32)	화합물(2-34)	4.4	10.5	5000.0	47.8	125.7
실시예(83)	화합물(1-32)	화합물(2-35)	4.4	10.2	5000.0	49.0	127.6
실시예(84)	화합물(1-32)	화합물(2-36)	4.4	10.2	5000.0	48.9	125.0

[0301] 상기 표 7의 결과로부터 알 수 있듯이, 화학식 (1)로 나타내지는 화합물을 발광보조층으로 사용하고 화학식 (2)로 나타내지는 화합물을 전자수송층으로 사용할 경우 효율 및 수명을 극대화시킴을 확인할 수 있었다.

[0302] 다시 말해, 발광보조층을 사용하지 않고 비교화합물 1~3을 전자수송층으로 사용한 비교예 4~6보다는 화학식 (1)로 나타내지는 화합물을 발광보조층으로 사용하고 비교화합물 1~3을 전자수송층으로 사용한 비교예 7~9가 효율 및 수명이 향상되는 것을 확인할 수 있었는데, 이는 발광보조층을 사용하면서 정공과 전자가 전하균형 (charge balance)을 이루고 정공 수송층 계면이 아닌 발광층 내부에서 발광이 이루어져 더 효율 및 수명을 극대화시켜 주기 때문인 것으로 판단된다.

[0303] 따라서 화학식 (1)로 나타내지는 화합물을 발광보조층을 사용하고 비교화합물 1~3대신 본 발명화합물을 사용한 실시예 49~84는 효율 및 수명을 대폭 상승시킴을 확인하였다.

[0304] 이는 역시, 표 6에서 설명한 것과 같이 동일한 코어라도 치환기의 종류가 달라짐에 따라 LUMO와 같은 에너지 레벨이 달라져 물리 화학적 특성이 현저히 달라짐을 시사하고 있기 때문에 코어와 치환기의 조합에 의해 나타나는 소자의 특징을 쉽게 유추하는 것은 통상의 기술자라 하더라도 매우 어려운 것이다.

[0305] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본 명세서에 개시된 실시 예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명 하기 위한 것이고, 이러한 실시 예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다.

[0306] 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다.

부호의 설명

- | | | |
|--------|-----------------|-------------|
| [0307] | 100 : 유기전기소자 | 110 : 기판 |
| | 120 : 제 1전극(양극) | 130 : 정공주입층 |
| | 140 : 정공수송층 | 141 : 버퍼층 |
| | 150 : 발광층 | 151 : 발광보조층 |
| | 160 : 전자수송층 | 170 : 전자주입층 |
| | 180 : 제 2전극(음극) | |

도면

도면1

