2021년05월03일





(19) 대한민국특허청(KR)(12) 공개특허공보(A)

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

(52) CPC특허분류 *H01L 51/0074* (2013.01) *C07D 307/91* (2013.01)

(21) 출원번호 **10-2019-0130480**

(22) 출원일자 **2019년10월21일** 심사청구일자 **없음** (11) 공개번호 10-2021-0047984

 (43) 공개일자

 (71) 출원인

삼성디스플레이 주식회사

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(72) 발명자

우노, 타쿠야

일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와쵸 2-7 주식회사 삼성 일본 연구소내

(74) 대리인

특허법인 고려

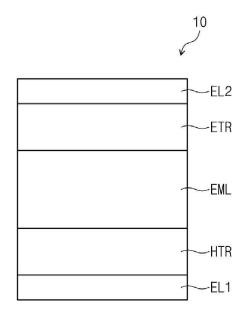
전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 발광 소자 및 발광 소자용 아민 화합물

(57) 요 약

본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 아민 화합물을 정공 수송 영역에 포함하여 저구동 전압, 고효율, 및 장수명 (뒷면에 계속)

대 표 도 - 도1



을 달성할 수 있는 유기 전계 발광 소자, 및 하기 화학식 1로 표시되는 아민 화합물에 관한 것이다. [화학식 1]

$$R_3$$
 R_4
 R_5
 R_6
 R_6
 R_7
 R_8
 R_8

(52) CPC특허분류

CO7D 333/76 (2013.01)

CO7D 409/12 (2013.01)

CO7F 7/0812 (2013.01)

CO9K 11/06 (2021.01)

H01L 51/0071 (2013.01)

H01L 51/0073 (2013.01)

H01L 51/0094 (2013.01)

H01L 51/5056 (2013.01)

CO9K 2211/1025 (2021.01)

명 세 서

청구범위

청구항 1

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 배치된 정공 수송 영역;

상기 정공 수송 영역 상에 배치된 발광층;

상기 발광층 상에 배치된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 배치된 제2 전극을 포함하고,

상기 정공 수송 영역은 하기 화학식 1로 표시되는 아민 화합물을 포함하는 발광 소자:

[화학식 1]

$$R_3$$
 R_4
 R_5
 R_6
 R_6
 R_7
 R_8
 R_8

상기 화학식 1에서,

X는 0 또는 S이고,

 R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기이고,

R₆은 수소 원자, 또는 중수소 원자이고,

 L_1 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴렌기이고,

 Ar_1 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기이고,

X가 0이며 Ar₁이 치환 또는 비치환된 아릴기인 경우, Ar₁의 고리형성 탄소수는 16 이상 40 이하이고,

a는 0 이상 8 이하의 정수이고,

b는 0 이상 4 이하의 정수이고,

n은 1 이상 3 이하의 정수이다.

청구항 2

제1 항에 있어서,

상기 정공 수송 영역은 상기 제1 전극 상에 배치된 정공 주입층, 및 상기 정공 주입층 상에 배치된 정공 수송층을 포함하고,

상기 정공 수송층은 상기 표시되는 아민 화합물을 포함하는 발광 소자.

청구항 3

제1 항에 있어서,

상기 발광층은 하기 화학식 A로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 발광 소자:

[화학식 A]

$$(R_j)_d$$
 R_d
 R_c
 R_b
 R_a
 R_f
 R_g
 R_h
 R_h
 R_g

상기 화학식 A에서,

 R_a 내지 R_j 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성하고,

c 및 d는 각각 독립적으로 0 이상 5 이하의 정수이다.

청구항 4

제1 항에 있어서,

Ar₁은 하기 화학식 2로 표시되는 발광 소자:

[화학식 2]

상기 화학식 2에서,

 Ar_{11} 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴렌기이고,

 Ar_{12} 는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기이고,

p는 0 또는 1이다.

청구항 5

제1 항에 있어서,

Ar₁은 하기 1-1 내지 1-10으로 표시되는 발광 소자:

$$(R_{11})_{r1} \qquad (R_{12})_{r2} \qquad (R_{13})_{r3} \qquad (R_{14})_{r4} \qquad (R_{15})_{r5} \qquad (R_{16})_{r6} \qquad (R_{18})_{r8} \qquad (R_{19})_{r9} \qquad (R_{22})_{r12} \qquad (R_{21})_{r11} \qquad (R_{22})_{r12} \qquad (R_{22})_{r12} \qquad (R_{22})_{r13} \qquad (R_{23})_{r13} \qquad (R_{23})_{r13} \qquad (R_{23})_{r13} \qquad (R_{27})_{r17} \qquad (R_{27})_{r17} \qquad (R_{29})_{r20} \qquad (R_{29})_{r15} \qquad (R_{29})_{r1$$

상기 1-1 내지 1-10에서,

 R_{11} 내지 R_{30} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기이고,

 Ar_2 는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기이고,

q1, 및 q2는 각각 독립적으로 0 또는 1이고,

r1, r7, r11, 및 r13 내지 r17은 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

r2, r3, 및 r6은 각각 독립적으로 0 이상 5 이하의 정수이고,

r4, r8, r10, 및 r18 내지 r20은 각각 독립적으로 0 이상 7 이하의 정수이고,

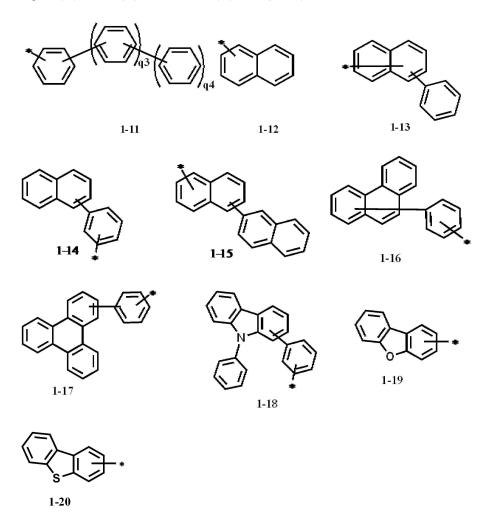
r5, 및 r9는 각각 독립적으로 0 이상 6 이하의 정수이고,

r12는 0 이상 9 이하의 정수이다.

청구항 6

제1 항에 있어서,

Ar₁은 하기 1-11 내지 1-20으로 표시되는 발광 소자:



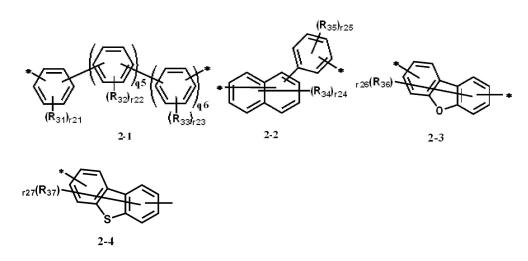
상기 1-11에서,

q3, 및 q4는 각각 독립적으로 0 또는 1이다.

청구항 7

제1 항에 있어서,

L₁은 하기 2-1 내지 2-4로 표시되는 발광 소자:



상기 2-1 내지 2-4에서,

 R_{31} 내지 R_{37} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기이고,

q5, 및 q6은 각각 독립적으로 0 또는 1이고,

r21 내지 r23, 및 r25는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

r24, r26, 및 r27은 0 이상 6 이하의 정수이다.

청구항 8

제1 항에 있어서,

L-1은 하기 2-11 내지 2-14로 표시되는 발광 소자:

상기 2-11에서,

q5, 및 q6은 각각 독립적으로 0 또는 1이다.

청구항 9

제1 항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시되는 발광 소자:

[화학식 1-1]

$$R_{43}$$
 R_{44}
 R_{45}
 R_{46}
 R_{46}
 R_{46}
 R_{46}

상기 화학식 1-1에서,

 R_{41} , 및 R_{42} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는

비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기이고,

 R_{43} 내지 R_{46} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 중수소 원자이고,

 L_{11} 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴렌기이고,

Ar₂₁은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기이고,

X₁이 0이며 Ar₂₁이 치환 또는 비치환된 아릴기인 경우, Ar₂₁의 고리형성 탄소수는 16 이상 40 이하이고,

al은 0 이상 2 이하의 정수이고, nl은 1 이상 3 이하의 정수이다.

청구항 10

제1 항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-2로 표시되는 발광 소자:

[화학식 1-2]

$$R_{53}$$
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{56}
 R_{56}

상기 화학식 1-2에서,

 R_{51} , 및 R_{52} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기이고,

 R_{53} 내지 R_{56} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 중수소 원자이고,

 L_{21} 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴렌기이고.

 Ar_{31} 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기이고,

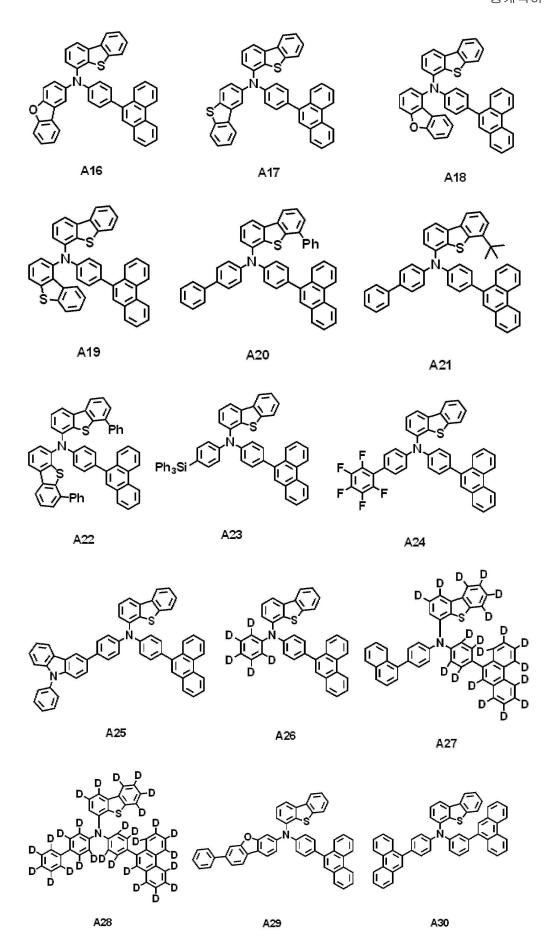
 X_2 이 0이며 Ar_{31} 이 치환 또는 비치환된 아릴기인 경우, Ar_{31} 의 고리형성 탄소수는 16 이상 40 이하이고,

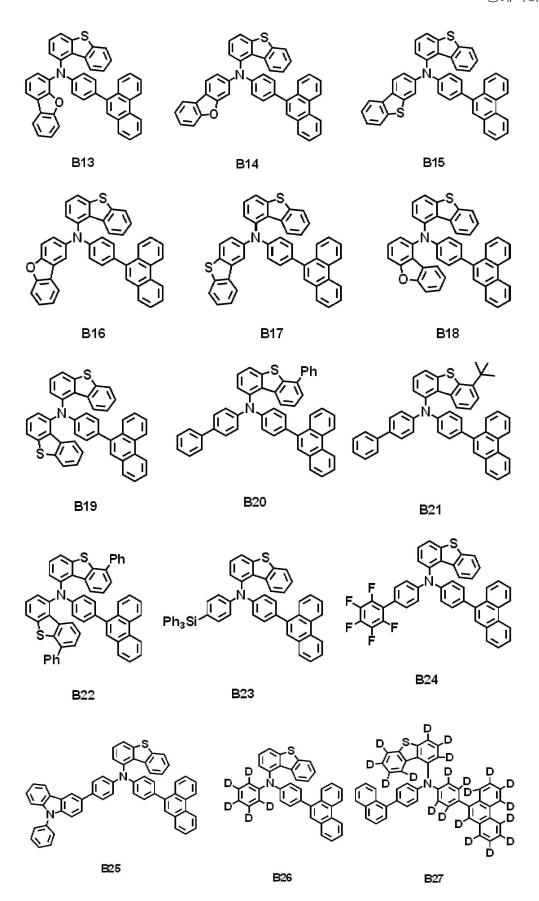
a2는 0 이상 2 이하의 정수이고, n2는 1 이상 3 이하의 정수이다.

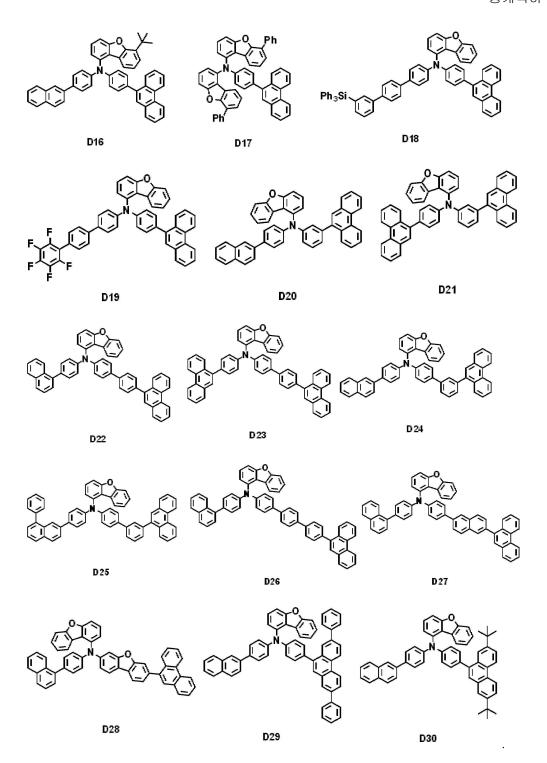
청구항 11

제1 항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화합물군 A 내지 화합물군 D에 표시된 화합물들 중 적어도 하나를 포함하는 발광 소자: [화합물군 A]







청구항 12

하기 화학식 1로 표시되는 아민 화합물:

[화학식 1]

$$R_3$$
 R_4
 R_5
 R_6
 R_6
 R_7
 R_8
 R_8

상기 화학식 1에서,

X는 0 또는 S이고,

 R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기이고,

R₆은 수소 원자, 또는 중수소 원자이고,

 L_1 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴렌기이고,

 Ar_1 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기이고,

X가 0이며 Ar₁이 치환 또는 비치환된 아릴기인 경우, Ar₁의 고리형성 탄소수는 16 이상 40 이하이고,

a는 0 이상 8 이하의 정수이고,

b는 0 이상 4 이하의 정수이고,

n은 1 이상 3 이하의 정수이다.

청구항 13

제12 항에 있어서,

Ar₁은 하기 화학식 2로 표시되는 아민 화합물:

[화학식 2]

상기 화학식 2에서,

 Ar_{11} 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴렌기이고,

 Ar_{12} 는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기이고,

p는 0 또는 1이다.

청구항 14

제12 항에 있어서,

Ar₁은 하기 1-1 내지 1-10으로 표시되는 아민 화합물:

$$(R_{12})_{r1}$$

$$(R_{12})_{r2}$$

$$(R_{13})_{r3}$$

$$(R_{19})_{r9}$$

$$(R_{20})_{r10}$$

$$(R_{21})_{r11}$$

$$(R_{22})_{r12}$$

$$(R_{21})_{r11}$$

$$(R_{22})_{r13}$$

$$(R_{23})_{r13}$$

$$(R_{23})_{r13}$$

$$(R_{23})_{r13}$$

$$(R_{23})_{r13}$$

$$(R_{23})_{r13}$$

$$(R_{27})_{r17}$$

$$(R_{27})_{r17}$$

$$(R_{29})_{r17}$$

$$(R_{29})_{r17}$$

$$(R_{21})_{r11}$$

$$(R_{21})_{r11}$$

상기 1-1 내지 1-10에서,

 R_{11} 내지 R_{30} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기이고,

 Ar_2 는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기이고,

q1, 및 q2는 각각 독립적으로 0 또는 1이고,

r1, r7, r11, 및 r13 내지 r17은 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

r2, r3, 및 r6은 각각 독립적으로 0 이상 5 이하의 정수이고,

r4, r8, r10, 및 r18 내지 r20은 각각 독립적으로 0 이상 7 이하의 정수이고,

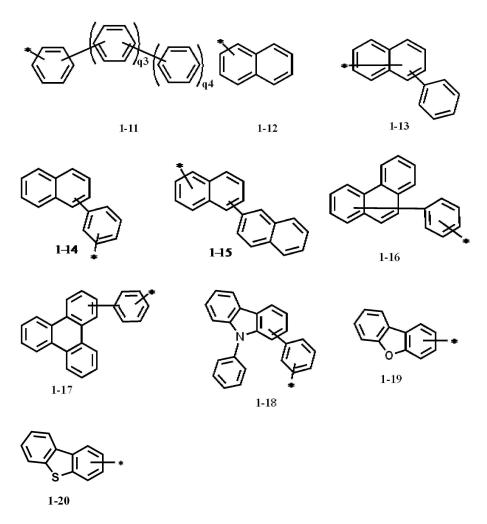
r5, 및 r9는 각각 독립적으로 0 이상 6 이하의 정수이고,

r12는 0 이상 9 이하의 정수이다.

청구항 15

제12 항에 있어서,

Ar₁은 하기 1-11 내지 1-20으로 표시되는 아민 화합물:



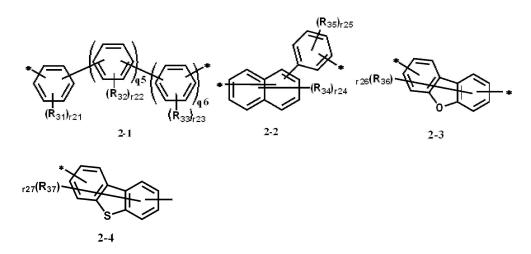
상기 1-11에서,

q3, 및 q4는 각각 독립적으로 0 또는 1이다.

청구항 16

제12 항에 있어서,

L₁은 하기 2-1 내지 2-4로 표시되는 아민 화합물:



상기 2-1 내지 2-4에서,

 R_{31} 내지 R_{37} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기이고,

q5, 및 q6은 각각 독립적으로 0 또는 1이고,

r21 내지 r23, 및 r25는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

r24, r26, 및 r27은 0 이상 6 이하의 정수이다.

청구항 17

제12 항에 있어서,

L₁은 하기 2-11 내지 2-14로 표시되는 아민 화합물:

상기 2-11에서,

q5, 및 q6은 각각 독립적으로 0 또는 1이다.

청구항 18

제12 항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시되는 아민 화합물:

[화학식 1-1]

상기 화학식 1-1에서,

 R_{41} , 및 R_{42} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기이고,

 R_{43} 내지 R_{46} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 중수소 원자이고,

 L_{11} 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴렌기이고,

Ar₂₁은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기이고,

X₁이 0이며 Ar₂₁이 치환 또는 비치환된 아릴기인 경우, Ar₂₁의 고리형성 탄소수는 16 이상 40 이하이고,

al은 0 이상 2 이하의 정수이고, nl은 1 이상 3 이하의 정수이다.

청구항 19

제12 항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-2로 표시되는 아민 화합물:

[화학식 1-2]

$$R_{53}$$
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{56}
 R_{56}

상기 화학식 1-2에서,

 R_{51} , 및 R_{52} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기이고,

 R_{53} 내지 R_{56} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 중수소 원자이고,

 L_{21} 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴렌기이고,

Ar₃₁은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기이고,

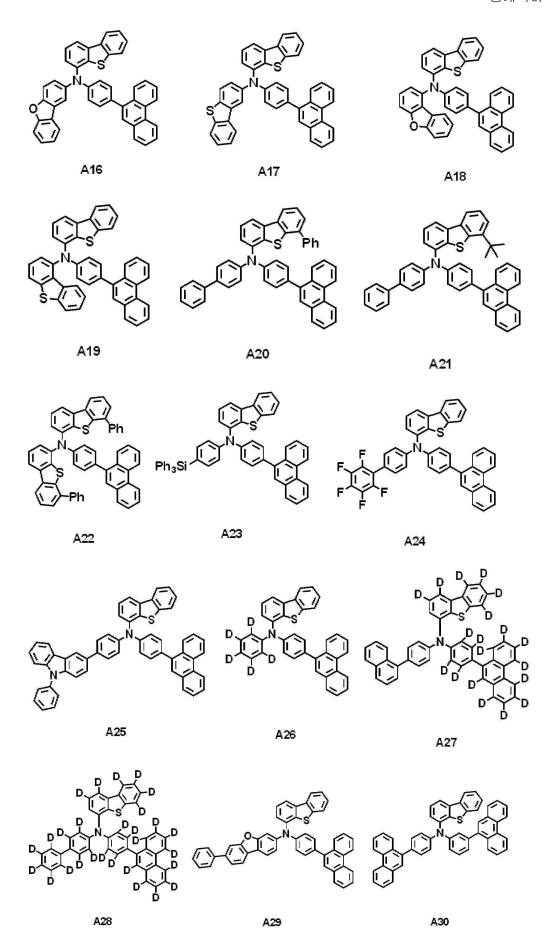
 X_2 이 0이며 Ar_{31} 이 치환 또는 비치환된 아릴기인 경우, Ar_{31} 의 고리형성 탄소수는 16 이상 40 이하이고,

a2는 0 이상 2 이하의 정수이고, n2는 1 이상 3 이하의 정수이다.

청구항 20

제12 항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화합물군 A 내지 화합물군 D에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나인 아민 화합물: [화합물군 A]



[화합물군 B]

발명의 설명

기 술 분 야

[0001]

[0002]

본 발명은 발광 소자 및 이에 사용되는 아민 화합물에 관한 것이다.

배경기술

영상 표시 장치로서, 전계 발광 표시 장치(Electroluminescence Display)의 개발이 활발히 이루어지고 있다. 전계 발광 표시 장치는 예를 들어 유기 전계 발광 표시 장치를 예시로 들 수 있다. 유기 전계 발광 표시 장치 (Organic Electroluminescence Display)는 액정 표시 장치 등과는 다르고, 제1 전극 및 제2 전극으로부터 주입된 정공 및 전자를 발광층에서 재결합시킴으로써, 발광층에 포함되는 발광 재료를 발광시켜서 표시를 실현하는 소위 자발광형의 표시 장치이다.

[0003] 발광 소자를 표시 장치에 응용함에 있어서는, 발광 소자의 고효율화, 및 장수명화가 요구되고 있으며, 이를 안 정적으로 구현할 수 있는 발광 소자용 재료 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0004] 본 발명은 고효율 및 장수명의 발광 소자를 제공하는 것을 일 목적으로 한다.

[0005] 본 발명은 발광 소자에 적용되어 고효율 및 장수명을 달성할 수 있는 아민 화합물을 제공하는 것을 일 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0006] 일 실시예에 따른 발광 소자는 제1 전극, 상기 제1 전극 상에 배치된 정공 수송 영역, 상기 정공 수송 영역 상에 배치된 발광층, 상기 발광층 상에 배치된 전자 수송 영역, 및 상기 전자 수송 영역 상에 배치된 제2 전극을 포함할 수 있다. 상기 정공 수송 영역은 하기 화학식 1로 표시되는 아민 화합물을 포함할 수 있다.

[0007] [화학식 1]

$$R_3$$
 R_4
 X
 Ar_1
 $(R_2)_b$
 Ar_1
 $(R_1)_n$
 R_6

[0008] [0009]

상기 화학식 1에서, X는 0 또는 S일 수 있다. R₁ 내지 R₅는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. R₆은 수소 원자, 또는 중수소 원자일 수 있다. L₁은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. X가 0이며 Ar₁이 치환 또는 비치환된 아릴기인 경우, 치환 또는 비치환된 아릴기의 고리형성 탄소수는 16 이상 40 이하일 수 있다. a는 0 이상 8 이하의 정수일 수 있다. b는 0 이상 4 이하의 정수일 수 있다. n은 1 이상 3 이하의 정수일 수 있다. 상기 정공 수송 영역은 상기 제1 전극 상에 배치된 정공 주입층, 및 상기 정공 주입층 상에 배치된 정공 수송층을 포함할 수 있다. 상기 정공 수송층은 상기 아민 화합물을 포함할 수 있다.

[0010] 상기 발광층은 하기 화학식 A로 표시되는 다환 화합물을 포함할 수 있다.

[0011] [화학식 A]

$$(R_j)_d$$
 R_d
 R_c
 R_b
 R_a
 R_b
 R_b

[0012] [0013]

상기 화학식 A에서, R_a 내지 R_j 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있다. c 및 d는 각각 독립적으로 0 이상 5 이하의 정수일 수 있다.

[0014] Ar₁은 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[0015] [화학식 2]

*---p(Ar₁₁)----Ar₁₂

[0017] 상기 화학식 2에서, Ar₁₁은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴렌기일 수 있다. Ar₁₂는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. p는 0 또는 1일 수 있다.Ar₁은 하기 1-1 내지 1-10으로 표시될 수 있다.

$$(R_{11})_{r1}$$

$$(R_{12})_{r2}$$

$$(R_{13})_{r3}$$

$$(R_{16})_{r6}$$

$$(R_{19})_{r9}$$

$$(R_{22})_{r12}$$

$$(R_{21})_{r11}$$

$$(R_{21})_{r11}$$

[0019]

[0018]

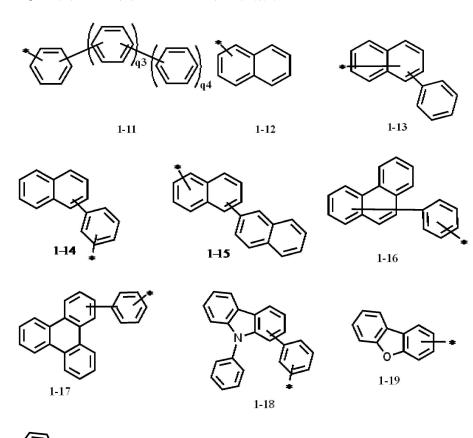
$$(R_{24})_{r14} = (R_{25})_{r15} = (R_{27})_{r17} = (R_{$$

[0020]

[0021] [0022]

상기 1-1 내지 1-10에서, R_{11} 내지 R_{30} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. Ar_2 는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. q_1 , 및 q_2 는 각각 독립적으로 0 또는 1일 수 있다. q_1 , q_2 는 각각 독립적으로 0 또는 1일 수 있다. q_1 , q_2 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수일 수 있다. q_1 , q_2 는 각각 독립적으로 0 이상 7 이하의 정수일 수 있다. q_1 , q_2 는 각각 독립적으로 0 이상 7 이하의 정수일 수 있다. q_1 0 이상 9 이하의 정수일 수 있다. q_2 0 이상 6 이하의 정수일 수 있다. q_2 0 이상 9 이하의 정수일 수 있다. q_2 0 이상 6 이하의 정수일 수 있다. q_2 0 이상 9 이하의 정수일 수 있다. q_2 0 이상 9 이하의 정수일 수 있다.

[0023] Ar₁은 하기 1-11 내지 1-20으로 표시될 수 있다.



[0027] [0028] 1-20

[0026]

[0024]

[0025]

상기 1-11에서 q3, 및 q4는 각각 독립적으로 0 또는 1일 수 있다.

[0029] L-1은 하기 2-1 내지 2-4로 표시될 수 있다.

$$(R_{33})_{r25}$$

$$(R_{32})_{r22}$$

$$(R_{33})_{r23}$$

$$(R_{34})_{r24}$$

$$(R_{34})_{r24}$$

$$(R_{34})_{r24}$$

$$2-1$$

$$2-2$$

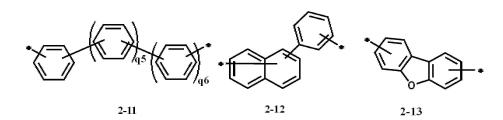
$$2-3$$

[0030]

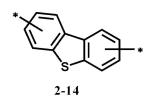
[0031] [0032]

상기 2-1 내지 2-4에서, R_{31} 내지 R_{37} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. q5, 및 q6은 각각 독립적으로 0 또는 1일 수 있다. r21 내지 r23, 및 r25는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수일 수 있다. r24, r26, 및 r27은 0 이상 6 이하의 정수일 수 있다.

[0033] L₁은 하기 2-11 내지 2-14로 표시될 수 있다.



[0034]



[0035]

[0036]

상기 2-11에서, q5 및 q6은 각각 독립적으로 0 또는 1일 수 있다.

[0037] 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시될 수 있다.

[0038] [화학식 1-1]

[0039] [0040]

상기 화학식 1-1에서, R_{41} , 및 R_{42} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환 된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. R_{43} , 내지 R_{46} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 중수소 원자일 수 있다. L_{11} 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴렌기일 수 있다. Ar_{21} 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. 12 이상 13 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. 13 이 14 이상 15 이하의 정수일 수 있다. 상기 화학식 15 하기 화학식 15 표시될 수 있다.

[0041] [화학식 1-2]

$$R_{53}$$
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{56}
 R_{56}

[0042] [0043]

상기 화학식 1-2에서, R_{51} , 및 R_{52} 는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환 된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. R_{53} , 내지 R_{56} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 중수소 원자일 수 있다. L_{21} 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴렌기일 수 있다. Ar_{31} 은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. 12 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. 12 이하의 레테로아릴기일 수 있다. 12 이하의 지수일 수 있다. 12 이하의 고리형성 탄소수는 16 이상 12 이하의 수 있다. 12 이하의 정수일 수 있다.

n2는 1 이상 3 이하의 정수일 수 있다.

[0044] 일 실시예에서, 상술한 화학식 1로 표시되는 아민 화합물을 제공할 수 있다.

발명의 효과

- [0045] 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 소자는 고효율 및 장수명을 달성할 수 있다.
- [0046] 본 발명의 일 실시예에 따른 아민 화합물은 발광 소자에 적용되어 고효율 및 장수명을 달성할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0047] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

도 4는 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0048] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 본문에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범
- [0049] 위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.
- [0050] 각 도면을 설명하면서 유사한 참조부호를 유사한 구성요소에 대해 사용하였다. 첨부된 도면에 있어서, 구조물들의 치수는 본 발명의 명확성을 위하여 실제보다 확대하여 도시한 것이다. 제1, 제2 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.
- [0051] 본 출원에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해 되어야 한다.
- [0052] 본 출원에서, 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "상에" 또는 "상부에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다. 반대로 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "하에" 또는 "하부에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 아래에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다. 또한, 본 출원에서 "상에" 배치된다고 하는 것은 상부뿐 아니라 하부에 배치되는 경우도 포함하는 것일 수 있다.
- [0053] "및/또는"은 연관된 구성들이 정의할 수 있는 하나 이상의 조합을 모두 포함한다.
- [0054] 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 실릴기, 옥시기, 티오기, 설피닐기, 설포닐기, 카보닐기, 붕소기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 탄화수소 고리기, 아릴기 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미할 수 있다. 또한, 상기 예시된 치환기 각각은 치환 또는 비치환된 것일 수 있다. 예를 들어, 비페닐기는 아릴기로 해석될 수도 있고, 페닐기로 치환된 페닐기로 해석될 수도 있다.
- [0055] 본 명세서에서, "인접하는 기"는 해당 치환기가 치환된 원자와 직접 연결된 원자에 치환된 치환기, 해당 치환기가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기 또는 해당 치환기와 입체구조적으로 가장 인접한 치환기를 의미할 수 있다. 예컨대, 1,2-디메틸벤젠(1,2-dimethylbenzene)에서 2개의 메틸기는 서로 "인접하는 기"로 해석될 수 있고, 1,1-디에틸시클로펜테인(1,1-diethylcyclopentane)에서 2개의 에틸기는 서로 "인접하는 기"로 해석될 수 있다.
- [0056] 본 명세서에서, 할로겐 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.

- [0057] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 50 이하, 1 이상 30 이하, 1 이상 20 이하, 1 이상 10 이하 또는 1 이상 6 이하이다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, i-부틸기, 2- 에틸부틸기, 3, 3-디메틸부틸기, n-펜틸기, i-펜틸기, 네오펜틸기, t-펜틸기, 사클로펜틸기, 1-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-에틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, n-헥실기, 1-메틸헬실기, 2-에틸렉실기, 2-부틸헬실기, 시클로렉실기, 4-메틸시클로헥실기, 4-다-부틸시클로헥실기, n-헵틸기, 1-메틸헬틸기, 2,2-디메틸헬틸기, 2-에틸헬틸기, 2-부틸헬틸기, n-노닐기, n-데실기, 아다만틸기, 2-부틸옥틸기, 2-헥실옥틸기, 3,7-디메틸옥틸기, 시클로옥틸기, n-노닐기, n-데실기, 아다만틸기, 2-에틸데실기, 2-부틸데실기, 2-렉실데실기, 2-목틸데실기, n-린리실기, n-토데실기, 2-에틸도데실기, 2-부틸도데실기, 2-렉트데실기, 2-렉트디실기, 2-렉트디실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-렉타데실기, n-렉나데실기, n-노나데실기, n-이코실기, 2-에틸이코실기, 2-부틸이코실기, 2-렉트이코실기, n-펜타코실기, n-আ타코실기, n-펜타코실기, n-펜타코실기, n-펜타코실기, n-펜타코실기, n-펜타코실기, n-펜타코실기, n-펜타코실기, n-펜타코실기, n-텍타코실기, n-텍타코실기, n-벡타코실기, n-트리아콘틸기 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.
- [0058] 본 명세서에서, 탄화수소 고리기는 지방족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기를 의미한다. 탄화수소 고리기는 고리 형성 탄소수 5 이상 20 이하의 포화 탄화수소 고리기일 수 있다.
- [0059] 본 명세서에서, 아릴기는 방향족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기를 의미한다. 아릴기는 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 아릴기의 고리 형성 탄소수는 6 이상 40 이하, 6 이상 30 이하, 6 이상 20 이하, 6 이상 15 이하, 16 이상 40 이하, 16 이상 30이하, 또는 15 이상 20 이하 일 수 있다. 아릴 기의 예로는 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 비페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 퀸크페닐기, 섹시 페닐기, 트리페닐에닐기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다. 본 명세서에서, SP³ 혼성화 탄소를 고리형성 탄소로 포함하는 플루오레닐기는 아릴기로 정의되지 않는다. 본 명세서에서, Ph는 페닐기를 의미한다.
- [0060] 본 명세서에서, 헤테로고리기는 헤테로 원자로 B, O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 것일 수 있다. 헤테로고리기가 헤테로 원자를 2개 이상 포함할 경우, 2개 이상의 헤테로 원자는 서로 동일할 수도 있고, 상이할 수도 있다. 헤테로고리기는 단환식 헤테로고리기 또는 다환식 헤테로고리기일 수 있으며, 헤테로아릴기를 포함하는 개념이다. 헤테로고리기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하, 2 이상 12 이하, 또는 2 이상 10 이하일 수 있다.
- [0061] 본 명세서에서, 지방족 헤테로 고리기는 헤테로 원자로 B, O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 것일 수 있다. 지방족 헤테로 고리기는 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하, 2 이상 15이하, 2 이상 12 이하, 또는 2 이상 10 이하일 수 있다. 지방족 헤테로 고리기의 예로는 옥시란기, 티이란기, 피롤리딘기, 피페리딘기, 테트라하이드로퓨란기, 테트라하이드로티오펜기, 티안기, 테트라하이드로피란기, 1,4-디옥산기, 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.
- [0062] 본 명세서에서, 헤테로아릴기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하, 2 이상 15이하, 2 이상 12 이하, 또는 2 이상 10 이하일 수 있다. 헤테로아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딜기, 피리 다진기, 피라지닐기, 퀴놀린기, 퀴나졸린기, 퀴녹살린기, 페녹사진기, 프탈라진기, 피리도 피리미딘기, 피리도 피라진기, 피라지노 피라진기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, N-아릴카바졸기, N-헤테로아릴카바졸기, N-알 킬카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 티에노티오펜기, 벤조류란기, 페난트롤린기, 이소옥사졸기, 티아디아졸기, 페노티아진기, 디벤조실롤기 및 디벤조류란기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0063] 본 명세서에서, 아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 헤테로아릴 렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [0064] 본 명세서에서, 실릴기는 알킬 실릴기 및 아릴 실릴기를 포함한다. 실릴기의 예로는 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0065] 본 명세서에서, 아미노기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 이상 30 이하일 수 있다. 아미노기는 알킬 아미노기, 아릴 아미노기, 또는 헤테로아릴 아미노기를 포함할 수 있다. 아미노기의 예로는 메틸아미노기, 디메틸

아미노기, 페닐아미노기, 디페닐아미노기, 나프틸아미노기, 9-메틸-안트라세닐아미노기, 트리페닐아미노기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

- [0066] 본 명세서에서, 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하 또는 2 이상 10 이하이다. 알케닐기의 예로는 비닐기, 1-부테닐기, 1-펜테닐기, 1,3-부타디에닐 아릴기, 스티레닐기, 스티릴비닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0067] 본 명세서에서, 아민기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 이상 30 이하일 수 있다. 아민기는 알킬 아민기 및 아릴 아민기를 포함할 수 있다. 아민기의 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 페닐아민기, 디페닐아민기, 나 프틸아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 트리페닐아민기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0068] 본 명세서에서, 알킬티오기, 알킬설폭시기, 알킬아릴기, 알킬아미노기, 알킬 붕소기, 알킬 실릴기, 알킬 아민기 중 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다.
- [0069] 본 명세서에서, 아릴옥시기, 아릴티오기, 아릴설폭시기, 아릴아미노기, 아릴 붕소기, 아릴 실릴기, 아릴 아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다
- [0070] 본 명세서에서, 직접 결합(direct linkage)은 단일 결합을 의미하는 것일 수 있다.
- [0071] 한편, 본 명세서에서 "* " 는 연결되는 위치를 의미한다.
- [0072] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다. 일 실시예에 따른 발광 소자 (10)는 순차적으로 적충된 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광충(EML), 전자 수송 영역(ETR), 및 제2 전 극(EL2)을 포함할 수 있다.
- [0073] 도 1 내지 도 4는 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다. 도 1 내지 도 4를 참조하면, 일 실시예의 발광 소자(10)에서 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)은 서로 마주하고 배치되며, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에는 발광층(EML)이 배치될 수 있다.
- [0074] 또한, 일 실시예의 발광 소자(10)는 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에 발광충(EML) 이외에 복수의 기능충들은 더 포함한다. 복수의 기능충들은 정공 수송 영역(HTR) 및 전자 수송 영역(ETR)을 포함할 수 있다. 즉, 일 실시예에 따른 발광 소자(10)는 순차적으로 적충된 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광충(EML), 전자 수송 영역(ETR), 및 제2 전극(EL2)을 포함할 수 있다. 또한 일 실시예의 발광 소자(10)는 제2 전극(EL2) 상에 배치된 캠핑층(CPL)을 포함할 수 있다.
- [0075] 일 실시예의 발광 소자(10)는 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에 배치된 정공 수송 영역(HTR)에 후술할 일 실시예의 아민 화합물을 포함할 수 있다. 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니며 일 실시예의 발광 소자 (10)는 정공 수송 영역(HTR) 이외에 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에 배치된 복수의 기능층들인 발광층 (EML) 또는 전자 수송 영역(ETR)에 일 실시예에 따른 아민 화합물을 포함하거나, 또는 제2 전극(EL2) 상에 배치된 캠핑층(CPL)에 일 실시예에 따른 아민 화합물을 포함할 수 있다. 발광층(EML)은 유기 발광 물질을 포함하는 유기 전계 발광 소자인 것을 예시적으로 설명한다.
- [0076] 한편, 도 2는 도 1과 비교하여, 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL) 및 전자 수송층(ETL)을 포함하는 일 실시예의 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다. 또한, 도 3은 도 1과 비교하여 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 및 전자 저지층(EBL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL), 전자 수송층(ETL), 및 정공 저지층 (HBL)을 포함하는 일 실시예의 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다. 도 4는 도 2와 비교하여 제2 전극 (EL2) 상에 배치된 캠핑층(CPL)을 포함하는 일 실시예의 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다.
- [0077] 제1 전극(EL1)은 도전성을 갖는다. 제1 전극(EL1)은 금속 합금 또는 도전성 화합물로 형성될 수 있다. 제1 전극(EL1)은 애노드(anode)일 수 있다. 또한, 제1 전극(EL1)은 화소 전극일 수 있다. 제1 전극(EL1)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제1 전극(EL1)이 투과형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등을 포함할 수 있다. 제1 전극(EL1)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들의 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및

ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형 성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다. 예를 들어, 제1 전극(EL1)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 제1 전극(EL1)의 두께는 약 1000Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 3000Å일 수 있다.

- [0078] 정공 수송 영역(HTR)은 제1 전극(EL1) 상에 배치된다. 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL), 정공 수송층 (HTL), 정공 버퍼층(미도시), 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0079] 정공 수송 영역(HTR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0080] 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 또는 정공 수송층(HTL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 정공 주입 물질 및 정공 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 정공 수송 영역 (HTR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1 전극(EL1)로부터 차례로 적충된 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL), 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층(미도시), 정공 주입층(HIL)/정공 버퍼층 또는 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/전자 저지층(EBL)의 구조를 가질 수 있으나, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0081] 정공 수송 영역(HTR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0082] 정공 수송 영역(HTR)은 화학식 1로 표시되는 아민 화합물을 포함할 수 있다.
- [0083] [화학식 1]

$$R_3$$
 R_4
 X
 Ar_1
 $(R_2)_b$
 $(R_1)_a$
 $(R_1)_a$
 $(R_1)_a$

- [0084]
- [0085] 상기 화학식 1에서, X는 0 또는 S일 수 있다.
- [0086] R₁ 내지 R₃는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 실릴기, 알킬기, 아릴기, 또는 헤테로아릴 기일 수 있다. 할로겐 원자는 불소 원자 또는 염소 원자일 수 있다. 실릴기는 치환 또는 비치환된 실릴기일 수 있다. 치환된 실릴기는 알킬 실릴기 또는 아릴 실릴기일 수 있다. 알킬기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기일 수 있다. 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기일 수 있다. 헤테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.
- [0087] 예를 들어, R₁ 내지 R₅는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, iso-프로필기, n-부틸기, iso-부틸기, tert-부틸기, 불소 원자, 트리페닐실릴기, 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다.
- [0088] R₄ 및 R₅는 수소 원자, 또는 중수소 원자일 수 있다.
- [0089] R₆은 수소 원자, 또는 중수소 원자일 수 있다.
- [0090] L₁은 아릴렌기, 또는 헤테로아릴렌기일 수 있다. 아릴렌기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기일 수 있다. 헤테로아릴렌기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴

렌기일 수 있다.

[0091] Ar₁은 아릴기, 또는 헤테로아릴기일 수 있다. 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기일 수 있다. 헤테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0092] X가 0이며 Ar₁이 치환 또는 비치환된 아릴기인 경우, Ar₁의 고리형성 탄소수는 16 이상 40 이하일 수 있다.

[0093] a는 0 이상 8 이하의 정수일 수 있다. b는 0 이상 4 이하의 정수일 수 있다. n은 1 이상 3 이하의 정수일 수 있다. 예를 들어, a는 0, 1, 또는 2일 수 있다. b는 1일 수 있다. n은 1일 수 있다. 예를 들어, a는 0 이상 2 이하의 정수일 수 있다. b는 0 또는 1일 수 있다. a가 2 이상의 정수인 경우 복수 개의 R₁-은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. a가 2인 경우, R₁은 페난트릴 골격의 2번 및 7번 탄소에 치환될 수 있다. b가 2 이상의 정수인 경우 복수 개의 R₂는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. n이 2 이상의 정수인 경우 복수 개의 L₁은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0094] Ar₁은 화학식 2로 표시될 수 있다.

[0095] [화학식 2]

*—p(Ar₁₁)—Ar₁₂

[0097] 상기 화학식 2에서, Ar₁₁은 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기일 수 있다. 아릴렌기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기 헤테로아릴렌기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴렌기일 수 있다.

[0098] Ar₁₂는 아릴기 또는 헤테로아릴기일 수 있다. 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 16 이상 40 이하의 아릴기일 수 있다. X가 0이며 Ar₁₂가 치환 또는 비치환된 아릴기인 경우, Ar₁₂의 고리형성 탄소수는 16 이상 40 이하일 수 있다.

헤테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. p는 0 또는 1일 수 있다.

[0100] Ar₁은 1-1 내지 1-10으로 표시될 수 있다.

 $(R_{12})_{r2}$ $(R_{13})_{r3}$ $(R_{14})_{r4}$ $(R_{15})_{r5}$ $(R_{16})_{r6}$ $(R_{18})_{r8}$ $(R_{19})_{r9}$ $(R_{22})_{r12}$ $(R_{21})_{r11}$

[0102]

[0101]

[0099]

$$(R_{23})_{r13} = (R_{28})_{r13} = (R_{27})_{r17} = (R_{29})_{r18} = (R_{27})_{r17} = (R_{29})_{r20} = (R_{30})_{r18} = (R_{27})_{r17} = (R_{29})_{r19} = (R_{$$

[0104] [0105]

[0107]

[0103]

상기 1-1 내지 1-10에서, R_{11} 내지 R_{30} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 실릴기, 알킬기, 아릴기, 또는 헤테로아릴기일 수 있다. 할로겐 원자는 불소 원자 또는 염소 원자일 수 있다. 실릴기는 치환 또는 비치환된 실릴기일 수 있다. 치환된 실릴기는 알킬 실릴기 또는 아릴 실릴기일 수 있다. 알킬기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기일 수 있다. 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기일 수 있다. 헤테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

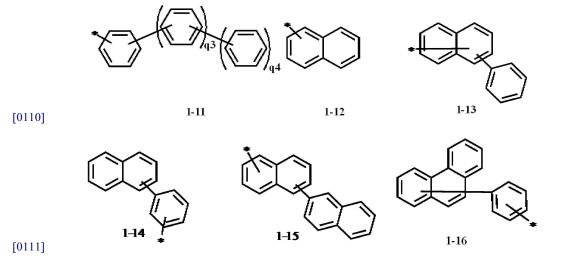
[0106] Ar₂는 알킬기, 아릴기, 또는 헤테로아릴기일 수 있다. 알킬기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기일 수 있다. 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기일 수 있다. 헤테로 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

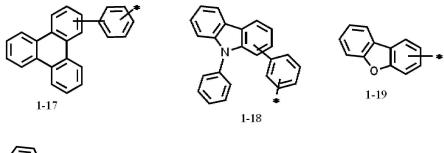
q1, 및 q2는 각각 독립적으로 0 또는 1일 수 있다.

[0108] r1, r7, r11, 및 r13 내지 r17은 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수일 수 있다. r2, r3, 및 r6은 각각 독립적으로 0 이상 5 이하의 정수일 수 있다. r4, r8, r10, 및 r18 내지 r20은 각각 독립적으로 0 이상 7 이하의 정수일 수 있다. r5, 및 r9는 각각 독립적으로 0 이상 6 이하의 정수일 수 있다. r12는 0 이상 9 이하의 정수일 수 있다. r1이 2 이상의 정수인 경우 복수 개의 R11은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. r12 내지 r20에도 r1에서 설명한 것과 동일한 설명이 적용될 수 있다.

[0109] Ar₁은 1-11 내지 1-20으로 표시될 수 있다.

1-10





1-20

[0112]

[0113]

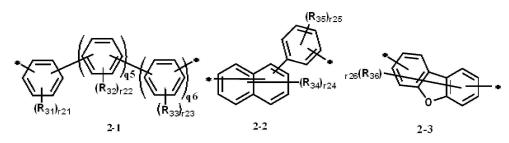
[0116]

[0117]

[0121]

[0114] 1-11 내지 1-20은 1-1 내지 1-10을 구체화한 화학식이다. 1-11에서 q3, 및 q4는 각각 독립적으로 0 또는 1이다.

[0115] L₁은 하기 2-1 내지 2-4로 표시될 수 있다.

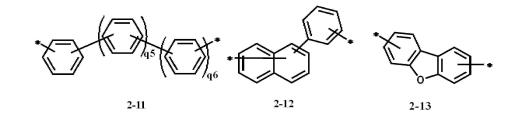


r₂₇(R₃₇)

[0118] 2-1 내지 2-4에서, R_{31} 내지 R_{37} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 실릴기, 알킬기, 아릴기, 또는 헤테로아릴기일 수 있다. 실릴기는 치환 또는 비치환된 실릴기일 수 있다. 실릴기는 알킬 실릴기 또는 아릴 실릴기일 수 있다. 알킬기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기일 수 있다. 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기일 수 있다. 헤테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0119] q5, 및 q6은 각각 독립적으로 0 또는 1일 수 있다. r21 내지 r23, 및 r25는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수일 수 있다. r24, r26 및 r27은 0 이상 6 이하의 정수일 수 있다. r21이 2 이상의 정수인 경우, 복수 개의 R_{31} 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. r22 내지 r27에도 r1에서 설명한 것과 동일한 설명이 적용될 수 있다.

[0120] L₁은 하기 2-11 내지 2-14로 표시될 수 있다.



[0122]

[0123] 2-11에서, q5, 및 q6은 각각 독립적으로 0 또는 1일 수 있다.

화학식 1은 화학식 1-1로 표시될 수 있다.

[0125] [화학식 1-1]

[0126]

[0124]

[0127] 화학식 1-1에서, X₁은 0 또는 S일 수 있다.

[0128] R₄₁, 및 R₄₂는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 실릴기, 알킬기, 아릴기, 또는 헤테로아릴 기일 수 있다. 실릴기는 치환 또는 비치환된 실릴기일 수 있다. 알킬기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기일 수 있다. 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기일 수 있다. 헤테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0129] R_{43} 내지 R_{46} 은 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 중수소 원자일 수 있다.

[0130] L₁₁은 아릴렌기, 또는 헤테로아릴렌기일 수 있다. 아릴렌기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기일 수 있다. 헤테로아릴렌기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴 렌기일 수 있다.

[0131] Ar₂₁은 아릴기, 또는 헤테로아릴기일 수 있다. 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기일 수 있다. 헤테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0132] X₁이 0이며 Ar₂₁이 치환 또는 비치환된 아릴기인 경우, Ar₂₁의 고리형성 탄소수는 16 이상 40 이하일 수 있다.

[0133] al은 0 이상 2 이하의 정수일 수 있다. nl은 1 이상 3 이하의 정수일 수 있다.

[0134] [화학식 1-2]

$$R_{53}$$
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{54}
 R_{56}
 R_{56}
 R_{56}

[0135] [0136]

화학식 1은 화학식 1-3으로 표시될 수 있다.

[0137] 화학식 1-1에서, X₂는 0 또는 S일 수 있다.

[0138] R₅₁, 및 R₅₂는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 실릴기, 알킬기, 아릴기, 또는 헤테로아릴기일 수 있다. 실릴기는 치환 또는 비치환된 실릴기일 수 있다. 알킬기는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기일 수 있다. 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기일 수 있다. 해테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0139] R₅₃ 내지 R₅₆은 각각 독립적으로 수소 원자, 또는 중수소 원자일 수 있다.

[0140] L₂₁은 아릴렌기, 또는 헤테로아릴렌기일 수 있다. 아릴렌기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴렌기일 수 있다. 헤테로아릴렌기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 40 이하의 헤테로아릴 렌기일 수 있다.

[0141] Ar₃₁은 아릴기, 또는 헤테로아릴기일 수 있다. 아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 40 이하의 아릴기일 수 있다. 헤테로아릴기는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 12 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

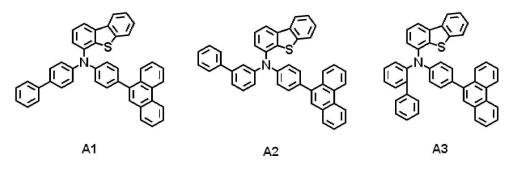
[0142] X₂가 0이며 Ar₃₁이 치환 또는 비치환된 아릴기인 경우, Ar₃₁의 고리형성 탄소수는 16 이상 40 이하일 수 있다.

[0143] a2는 0 이상 2 이하의 정수일 수 있다. n2는 1 이상 3 이하의 정수일 수 있다.

[0144] 전술한 일 실시예의 아민 화합물은 모노아민 화합물일 수 있다. 일 실시예의 아민 화합물은 고리형 아민을 더 포함할 수 있다. 일 실시예의 아민 화합물이 디아민 화합물인 경우 하나의 비고리형 아민과 하나의 고리형 아민을 포함할 수 있다. 예를 들어, 일 실시예의 아민 화합물이 디아민 화합물인 경우, 치환 또는 비치환된 카바졸기를 포함할 수 있다.

[0145] 화학식 1은 하기 화합물군 A 내지 화합물군 D에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0146] [화합물군 A]



[0147]

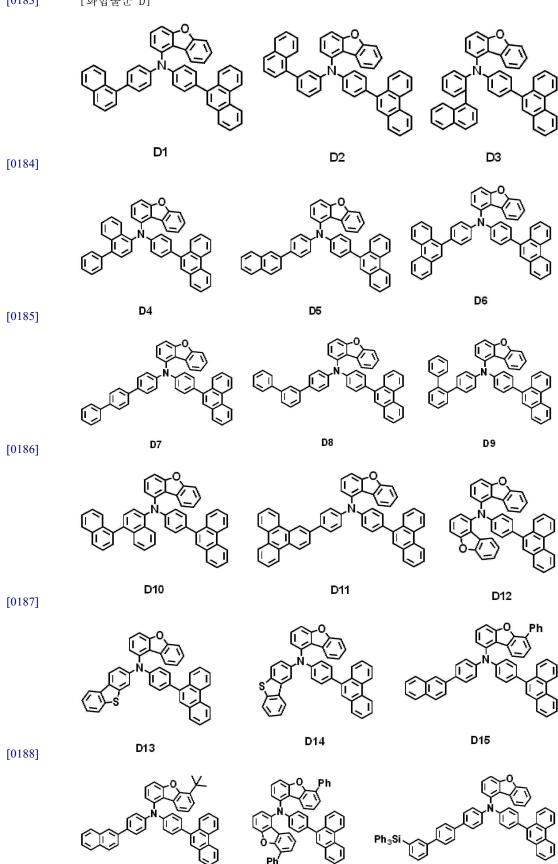
[0152]

[0164]

- 46 -

[0176]

[0183] [화합물군 D]



D17

D16

[0189]

D18

[0193]

D28

[0190]

[0191]

[0192]

정공 주입층(HIL)은 예를 들어, 구리프탈로시아닌(copper phthalocyanine) 등의 프탈로시아닌 화합물; [0194] DNTPD(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phen phthalocyanine yl]-biphenyl-4,4'-diamine), m-MTDATA(4,4',4"-tris(3-methylphenylphenylamino) triphenylamine), TDATA(4,4'4"-Tris(N,N-2-TNATA(4,4',4"-tris{N,-(2-naphthyl)-N-phenylamino}-triphenylamine), diphenylamino)triphenylamine), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate)), PANI/DBSA(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid), PANI/CSA(Polyaniline/Camphor PANI/PSS((Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate)), NPB(N,N'-di(naphthalene-l-yl)-N,N'-diphenyl-트리페닐아민을 포함하는 폴리에테르케톤(TPAPEK), 4-Isopropyl-4'-methyldiphenyliodonium benzidine), Tetrakis(pentafluorophenyl)borate], HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11hexacarbonitrile) 등을 포함할 수도 있다.

D30

D29

정공 수송층(HTL)은 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸계 유도체, 플루오렌(fluorene)계 유도체, TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4"-Tris(carbazol-9-yl)triphenylamine) 등과 같은 트리페닐아민계 유도체, NPB(N,N'-di(naphthalene-l-yl)-N,N'-diphenyl-benzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl), mCP(1,3-Bis(N-carbazolyl)benzene), CzSi(9-(4-tert-Butylphenyl)-3,6-bis(triphenylsilyl)-9H-carbazole) 등을 더 포함할 수도 있다.

[0196] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 5000Å일 수 있다. 정 공 주입층(HIL)의 두께는, 예를 들어, 약 30Å 내지 약 1000Å이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 30Å 내지

약 1000Å 일 수 있다. 예를 들어, 전자 저지층(EBL)의 두께는 약 10Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR), 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL) 및 전자 저지층(EBL)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

- [0197] 정공 수송 영역(HTR)은 앞서 언급한 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 정공 수송 영역(HTR) 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 전하 생성 물질은 예를 들어, p-도펀트(dopant)일 수 있다. p-도펀트는 퀴논(quinone) 유도체, 금속 산화물 및 시아노(cyano)기 함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, p-도펀트의 비제한적인 예로는, TCNQ(Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0198] 전술한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL) 외에, 정공 버퍼층(미도시) 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 정공 버퍼층(미도시)은 발광층(EML)에서 방출되는 광의 파장에 따른 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시킬 수 있다. 정공 버퍼층(미도시)에 포함되는 물질로는 정공 수송 영역(HTR)에 포함될 수 있는 물질을 사용할 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.
- [0199] 발광충(EML)은 정공 수송 영역(HTR) 상에 배치된다. 발광충(EML)은 예를 들어 약 100 Å 내지 약 1000 Å 또는, 약 100 Å 내지 약 300 Å의 두께를 갖는 것일 수 있다. 발광충(EML)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질수 있다.
- [0200] 일 실시예의 발광 소자(10)에서 발광충(EML)은 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 플루오란텐 유도체, 크리센 유도체, 디하이드로벤즈안트라센 유도체, 또는 트리페닐렌 유도체를 포함하는 것일 수 있다. 구체적으로, 발광충(EML)은 안트라센 유도체 또는 피렌 유도체를 포함하는 것일 수 있다.
- [0201] 발광층(EML)은 하기 화학식 A로 표시되는 안트라센 유도체를 포함하는 것일 수 있다.
- [0202] [화학식 A]

[0203]

$$R_{g}$$
 R_{g}
 R_{h}
 R_{g}
 R_{h}
 R_{g}

[0204] 화학식 A에서, Ra 내지 Rj는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성하는 것일 수 있다. 한편, Ra 내지 Ri는 인접하는 기와 서로 결합하여 포화탄화수소 고리

또는 불포화탄화수소 고리를 형성할 수 있다.

- [0205] 화학식 A에서 c 및 d는 각각 독립적으로 0 이상 5 이하의 정수일 수 있다.
- [0206] c가 2 이상의 정수인 경우, 복수 개의 R-39는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. d가 2 이상의 정수인 경우, 복수 개의 R-40은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0207] 화학식 A는 하기 화합물 3-1 내지 화합물 3-16 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

[0213] 3-16 [0214] 도 1 내지 도 4에 도시된 일 실시예의 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 호스트

3-16

도 1 내지 도 4에 도시된 일 실시예의 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있고, 발광층(EML)은 상술한 화학식으로 표시되는 화합물을 호스트 재료로 포함할 수 있다.

- 발광충(EML)은 호스트 물질로 당 기술분야에 알려진 일반적인 재료를 더 포함할 수 있다. 예를 들어, 발광충 (EML)은 호스트 물질로 DPEPO(Bis[2-(diphenylphosphino)phenyl] ether oxide), CBP(4,4'-Bis(carbazol-9-yl)biphenyl), mCP(1,3-Bis(carbazol-9-yl)benzene), PPF (2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzo[b,d]furan), (4,4',4"- Tris (carbazol-9-yl) triphenylamine) 및 TPBi(1,3,5-tris(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzene) 중 적어도 하나를 포함하는 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 예를 들어, Alq₃(tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), TBADN(3-tert-butyl-9,10-di(naphth-2-yl)anthracene), DSA(distyrylarylene), CDBP(4,4'-bis(9-carbazolyl)-2,2'-dimethyl-biphenyl), MADN(2-Methyl-9,10-di)
 - DSA(distyrylarylene), CDBP(4,4'-bis(9-carbazolyl)-2,2'-dimethyl-biphenyl), MADN(2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), CP1(Hexaphenyl cyclotriphosphazene), UGH2 (1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene), DPSiO₃ loxane), DPSiO₄ (Octaphenylcyclotetra siloxane), CzSi(9-(4-tert-Butylphenyl)-3,6-bis(triphenylsilyl)-9H-carbazole) 등을 호스트 재료로 사용할 수 있다.
- [0216] 일 실시예에서 발광층(EML)은 공지의 도펀트 재료로, 스티릴 유도체(예를 들어, 1, 4-bis[2-(3-N-ethylcarbazoryl)vinyl]benzene(BCzVB), 4-(di-p-tolylamino)-4'-[(di-p-tolylamino)styryl]stilbene(DPAVB), N-(4-((E)-2-(6-((E)-4-(diphenylamino)styryl)naphthalen-2-yl)vinyl)phenyl)-N-phenylbenzenamine(N-BDAVBi), 페릴렌 및 그 유도체(예를 들어, 2, 5, 8, 11-Tetra-t-butylperylene(TBP)), 피렌 및 그 유도체(예를 들어, 1, 1-dipyrene, 1, 4-dipyrenylbenzene, 1, 4-Bis(N, N-Diphenylamino)pyrene) 등을 포함할 수 있다.
- [0217] 일 실시예에서, 발광충(EML)은 청색광 또는 녹색광을 발광할 수 있다. 발광충(EML)은 390nm 이상 500nm 미만의 중심 파장을 갖는 청색광, 또는 500nm 이상 600nm 이하의 중심 파장을 갖는 녹색광을 방출할 수 있다. 그러나, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니며, 발광충(EML)은 청색광, 녹색광 외의 광을 방출할 수도 있다. 발광충(EML)은 형광 발광, 지연 형광 발광, 또는 인광 발광하는 것일 수 있다.
- [0218] 도 1 내지 도 4에 도시된 일 실시예의 발광 소자(10)에서, 전자 수송 영역(ETR)은 발광충(EML) 상에 배치된다. 전자 수송 영역(ETR)은, 정공 저지층(HBL), 전자 수송충(ETL) 및 전자 주입충(EIL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0219] 전자 수송 영역(ETR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0220] 예를 들어, 전자 수송 영역(ETR)은 전자 주입층(EIL) 또는 전자 수송층(ETL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 전자 주입 물질과 전자 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 전자 수송 영역(ETR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 발광층(EML)으로부터 차례로 적충된 전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL), 정공 저지층(HBL)/전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL) 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송 영역(ETR)의 두께는 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 1500Å인 것일 수있다.
- [0221] 전자 수송 영역(ETR)은, 진공 중착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0222] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 안트라센계 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니며, 전자 수송 영역(ETR)은 예를 들어, Alq₃(Tris(8hydroxyquinolinato)aluminum), 1,3,5-tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene, 2,4,6-tris(3'-(pyridin-3yl)biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine, 2-(4-(N-phenylbenzoimidazolyl-1-ylphenyl)-9,10-dinaphthylanthracene, TPBi(1,3,5-tris(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzene), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), TAZ(3-(4-Biphenylyl)-4-phenyl-5-tertbutylphenyl-1,2,4-triazole), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole), tBu-PBD(2-(4-Biphenylyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole), BAlq(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,08)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), Bebq₂(berylliumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2yl)anthracene), BmPyPhB(1,3-Bis[3,5-di(pyridin-3-yl)phenyl]benzene) 및 이들의 혼합물을 포함하는 것일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들어 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

- [0223] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 LiF, NaCl, CsF, RbCl, RbI, CuI와 같은 할로겐화 금속, Yb와 같은 란타넘족 금속, Li20, BaO 와 같은 금속 산화물, 또는 LiQ(Lithium quinolate) 등이 사용될 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 주입층(EIL)은 또한 전자 수송 물질과 절 연성의 유기 금속염(organo metal salt)이 혼합된 물질로 이루어질 수 있다. 유기 금속염은 에너지 밴드 갭 (energy band gap)이 대략 4eV 이상의 물질이 될 수 있다. 구체적으로 예를 들어, 유기 금속염은 금속 아세테이트(metal acetate), 금속 벤조에이트(metal benzoate), 금속 아세토아세테이트(metal acetoacetate), 금속 아세틸아세토네이트(metal acetylacetonate) 또는 금속 스테아레이트(stearate)를 포함할 수 있다. 전자 주입층 (EIL)들의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0224] 전자 수송 영역(ETR)은 앞서 언급한 바와 같이, 정공 저지층(HBL)을 포함할 수 있다. 정공 저지층(HBL)은 예를 들어, BCP(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 및 Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0225] 제2 전극(EL2)은 전자 수송 영역(ETR) 상에 배치된다. 제2 전극(EL2)은 공통 전극 또는 캐소드일 수 있다. 제2 전극(EL2)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제2 전극(EL2)가 투과형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 이루어질 수 있다.
- [0226] 제2 전극(EL2)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들을 포함하는 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다.
- [0227] 도시하지는 않았으나, 제2 전극(EL2)은 보조 전극과 연결될 수 있다. 제2 전극(EL2)가 보조 전극과 연결되면, 제2 전극(EL2)의 저항을 감소 시킬 수 있다.
- [0228] 한편, 일 실시예의 발광 소자(10)의 제2 전극(EL2) 상에는 캠핑층(CPL)이 더 배치될 수 있다. 한편, 도면에 도시되지는 않았으나, 일 실시예의 발광 소자(10)의 제2 전극(EL2) 상에는 캠핑층(CPL)이 더 배치될 수 있다. 캠핑층(CPL)은 예를 들어, α-NPD, NPB, TPD, m-MTDATA, Alq3, CuPc, TPD15(N4,N4,N4',N4'-tetra (biphenyl-4-yl) biphenyl-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4"-Tris(carbazol-9-yl)triphenylamine), N, N'-bis (naphthalen-1-yl) 등을 포함하는 것일 수 있다.
- [0229] 상술한 일 실시예의 화합물은 정공 수송 영역(HTR) 이외의 유기층에서 발광 소자(10)용 재료로 포함될 수 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 발광 소자(10)는 상술한 화합물을 제1 전극(EL1) 및 제2 전극(EL2) 사이에 배치된 적어도 하나의 유기층 또는 제2 전극(EL2) 상에 배치된 캡핑층(CPL)에 포함할 수도 있다.
- [0230] 발광 소자(10)에서, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)에 각각 전압이 인가됨에 따라 제1 전극(EL1)으로부터 주입된 정공(hole)은 정공 수송 영역(HTR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동되고, 제2 전극(EL2)로부터 주입된 전자가전자 수송 영역(ETR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동된다. 전자와 정공은 발광층(EML)에서 재결합하여 여기자(exciton)를 생성하며, 여기자가 여기 상태에서 바닥 상태로 떨어지면서 발광하게 된다.
- [0231] 이하에서는, 실시예 및 비교예를 참조하면서, 본 발명의 일 실시 형태에 따른 화합물 및 일 실시예의 아민 화합물을 포함하는 발광 소자에 대해서 구체적으로 설명한다. 또한, 이하에 나타내는 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 일 예시이며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0232] 1. 합성예
- [0233] 일 실시예의 아민 화합물은 예를 들어, 하기와 같이 합성할 수 있다. 다만, 일 실시예의 아민 화합물의 합성 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0234] 1-1. 화합물 A1의 합성
- [0235] 일 실시예의 화합물을 A1은 예를 들어, 하기 반응식 1에 의해 합성할 수 있다.

[0236] (반응식 1)

[0237]

- [0238] (중간체 IM-1의 합성)
- [0239] 아르곤 분위기 하에서, 1000 mL 3구 플라스크에, 9-bromophenanthrene 20.00 g (77.8 mmol), 4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)aniline 20.45 g (1.2 equiv, 93.4 mmol), K₂CO₃ 32.25 g (3.0 equiv, 233.3 mmol), Pd(PPh₃)₄ 4.49 g (0.05 eq, 3.9 mmol), 및 Toluene/Ethanol/H₂O (4/2/1 비율)의 혼합 용액 545 mL를 순차적으로 추가하여, 80℃로 가열 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출했다. 물층을 제거하여, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별(straining)하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 중간체 IM-1 (15.92 g, 수율 76%)을 얻었다.
- [0240] 중간체 IM-1을 동정하기 위해, JEOL 사의 JMS-700V를 이용하여 FAB-MS를 측정했다. FAB-MS(Fast atom bombardment mass spectrometry) 측정 결과, 질량수 m/z = 269를 분자 이온 피크로 관측하여 중간체 IM-1을 동정했다.
- [0241] (중간체 IM-2의 합성)
- [0242] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, 중간체 IM-1 10.00 g (37.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.64 g (0.03 equiv, 1.1 mmol), Na0^tBu 3.57 g (1.0 equiv, 37.1 mmol), Toluene 185 mL, 4-bromodibenzothiophene 10.75 g (1.1 equiv, 40.8 mmol) 및 ^tBu₃P 0.75 g (0.1 equiv, 3.7 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교 반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 중간체 IM-2 (13.58 g, 수율 81%)를 얻었다.
- [0243] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 451을 분자 이온 피크로 관측하여 중간체 IM-2를 동정했다.
- [0244] (화합물A1의 합성)
- [0245] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, 중간체 IM-2 10.00 g (22.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.38 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), Na0^tBu 4.26 g (2.0 equiv, 44.3 mmol), Toluene 110 mL, 4-bromobiphenyl 5.68 g (1.1 equiv, 24.4 mmol) 및 ^tBu₃P 0.45 g (0.1 equiv, 2.2 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 A1 (11.36 g, 수율 85%)을 얻었다.

[0246] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 603을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 A1을 동정했다.

[0247] 1-2. 화합물 A7의 합성

[0248] (반응식 2)

[0249]

[0252]

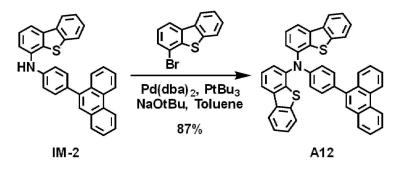
[0250] (화합물 A7의 합성)

[0251] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-2 10.00 g (22.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.38 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), NaO Bu 4.26 g (2.0 equiv, 44.3 mmol), Toluene 110 mL, 4-bromo-terphenyl 7.53 g (1.1 equiv, 24.4 mmol) 및 Bu₃P 0.45 g (0.1 equiv, 2.2 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 A7 (11.89 g, 수율 79%)을 얻었다.

FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 679를 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 A7을 동정했다.

[0253] 1-3. 화합물 A12의 합성

[0254] (반응식 3)



[0255] [0256]

(화합물 A12의 합성)

[0257] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-2 10.00 g (22.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.38 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), Na0 Bu 4.26 g (2.0 equiv, 44.3 mmol), Toluene 110 mL, 4-bromodibenzothiophene 6.41 g (1.1 equiv, 24.4 mmol) 및 Bu₃P 0.45 g (0.1 equiv, 2.2 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 A12 (12.21 g, 수율 87%)를 얻었다.

[0258] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 633을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 A12를 동정했다.

[0259] 1-4. 화합물 A18의 합성

[0260] (반응식 4)

[0261]

[0262] (화합물 A18의 합성)

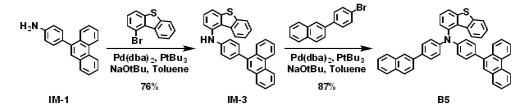
[0263] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, 중간체 IM-2 10.00 g (22.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.38 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), Na0^tBu 4.26 g (2.0 equiv, 44.3 mmol), Toluene 110 mL, 1-bromodibenzofuran 6.02 g (1.1 equiv, 24.4 mmol) 및 ^tBu₃P 0.45 g (0.1 equiv, 2.2 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과

Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물A18(10.12 g, 수율 74%)을 얻었다.

[0264] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 617을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물A18을 동정했다.

[0265] 1-5. 화합물 B5의 합성

[0266] (반응식 5)



[0267]

[0268] (중간체 IM-3의 합성)

[0269] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, 중간체 IM-1 10.00 g (37.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.64 g (0.03 equiv, 1.1 mmol), Na0 Bu 3.57 g (1.0 equiv, 37.1 mmol), Toluene 185 mL, 1-bromodibenzothiophene 10.75 g (1.1 equiv, 40.8 mmol) 및 Bu₃P 0.75 g (0.1 equiv, 3.7 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교 반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 중간체 IM-3 (12.74 g, 수율 76%)을 얻었다.

[0270] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 451을 분자 이온 피크로 관측하여 중간체 IM-3을 동정했다.

[0271] (화합물 B5의 합성)

[0272] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, 중간체 IM-3 10.00 g (22.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.38 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), Na0^tBu 4.26 g (2.0 equiv, 44.3 mmol), Toluene 110 mL, 2-(4-bromophenyl)naphthalene 6.90 g (1.1 equiv, 24.4 mmol) 및 tBu₃P 0.45 g (0.1 equiv, 2.2 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마

그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane 과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 B5 (12.60 g, 수율 87%)를 얻었다.

[0273] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 653을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 B5를 동정했다.

[0274] 1-6. 화합물 B9의 합성

[0275] (반응식 6)

[0276]

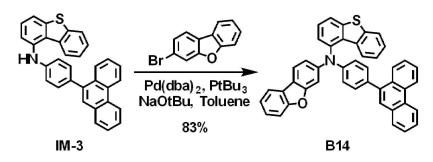
[0277] (화합물 B9의 합성)

[0278] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-3 10.00 g (22.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.38 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), NaO Bu 4.26 g (2.0 equiv, 44.3 mmol), Toluene 110 mL, 4-bromo-1,1':2',1''-terphenyl 7.53 g (1.1 equiv, 24.4 mmol) 및 Bu₃P 0.45 g (0.1 equiv, 2.2 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 B9 (11.59 g, 수율 77%)를 얻었다.

[0279] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 679를 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 B9를 동정했다.

[0280] 1-7. 화합물 B14의 합성

[0281] (반응식 7)



[0282]

[0283] (화합물 B14의 합성)

[0284] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-3 10.00 g (22.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.38 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), Na0 Bu 4.26 g (2.0 equiv, 44.3 mmol), Toluene 110 mL, 3-bromodibenzofuran 6.02 g (1.1 equiv, 24.4 mmol) 및 Bu₃P 0.45 g (0.1 equiv, 2.2 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카젤 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 B14 (11.35 g, 수율 83%)를 얻었다.

[0285] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 617을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 B14를 동정했다.

[0286] 1-8. 화합물 B23의 합성

[0287] (반응식 8)

[0288] [0289]

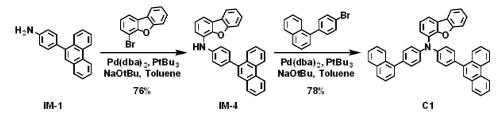
(화합물 B23의 합성)

[0290] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-3 10.00 g (22.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.38 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), Na0 Bu 4.26 g (2.0 equiv, 44.3 mmol), Toluene 110 mL, (4-bromophenyl)triphenylsilane 10.12 g (1.1 equiv, 24.4 mmol) 및 Bu₃P 0.45 g (0.1 equiv, 2.2 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 B23 (12.88 g, 수율 74%)을 얻었다.

FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 786을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 B23을 동정했다.

1-9. 화합물 C1의 합성

[0293] (반응식 9)



[0294]

[0291]

[0292]

[0295] (중간체IM-4의 합성)

[0296] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-1 10.00 g (37.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.64 g (0.03 equiv, 1.1 mmol), Na0 Bu 3.57 g (1.0 equiv, 37.1 mmol), Toluene 185 mL, 4-bromodibenzofuran 10.09 g (1.1 equiv, 40.8 mmol) 및 Bu₃P 0.75 g (0.1 equiv, 3.7 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합용매를 사용)로 정제하여, 중간체 IM-4 (12.29 g, 수율 76%)를 얻었다.

[0297] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 435가 분자 이온 피크로 관측하여 중간체 IM-4를 동정했다.

[0298] (화합물 C1의 합성)

[0299] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-4 10.00 g (23.0 mmol), Pd(dba)₂ 0.40 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), Na0^tBu 4.41 g (2.0 equiv, 45.9 mmol), Toluene 115 mL, 1-(4-bromophenyl)naphthalene 7.15 g (1.1 equiv, 25.3 mmol) 및 ^tBu₃P 0.46 g (0.1 equiv, 2.3 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의

혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 C1 (11.42 g, 수율 78%)을 얻었다.

[0300] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 637을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 C1을 동정했다.

[0301] 1-10. 화합물 C12의 합성

[0302] (반응식 10)

[0303]

[0304] (화합물 C12의 합성)

[0305] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-4 10.00 g (23.0 mmol), Pd(dba)₂ 0.40 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), NaO Bu 4.41 g (2.0 equiv, 45.9 mmol), Toluene 115 mL, 4-bromodibenzofuran 6.24 g (1.1 equiv, 25.3 mmol) 및 ₁Bu₃P 0.46 g (0.1 equiv, 2.3 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합

[0306] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 601을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 C12를 동정했다.

용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 C12 (11.60 g, 수율 84%)를 얻었다.

[0307] 1-11. 화합물 C15의 합성

[0308] (반응식 11)

[0309] [0310]

(중간체IM-5의 합성)

[0311] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-1 10.00 g (37.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.64 g (0.03 equiv, 1.1 mmol), Na0 Bu 3.57 g (1.0 equiv, 37.1 mmol), Toluene 185 mL, 6-phenyl-4-bromodibenzofuran 13.20 g (1.1 equiv, 40.8 mmol) 및 Bu₃P 0.75 g (0.1 equiv, 3.7 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 중간체 IM-5 (14.06 g, 수율 74%)를 얻었다.

[0312] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 511을 분자 이온 피크로 관측하여 중간체 IM-5를 동정했다.

[0313] (화합물 C15의 합성)

[0314] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-5 10.00 g (19.5 mmol), Pd(dba)₂ 0.34 g (0.03 equiv, 0.6 mmol), NaO^tBu 3.76 g (2.0 equiv, 39.1 mmol), Toluene 98 mL, 2-(4-bromophenyl)naphthalene 6.09 g (1.1

equiv, 21.5 mmol) 및 'Bu₃P 0.40 g (0.1 equiv, 2.0 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 C15 (12.00 g, 수율 86%)를 얻었다.

- [0315] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 713을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 C15를 동정했다.
- [0316] 1-12. 화합물 C21의 합성
- [0317] (반응식 12)

[0318]

- [0319] (중간체IM-6의 합성)
- [0320] 아르곤 분위기 하에서, 1000 mL 3구 플라스크에, 9-bromophenanthrene 20.00 g (77.8 mmol), 3-bromophenylboronic acid 18.75 g (1.2 equiv, 93.4 mmol), K₂CO₃ 32.25 g (3.0 equiv, 233.3 mmol), Pd(PPh₃)₄ 4.49 g (0.05 eq, 3.9 mmol), 및 Toluene/Ethanol/H2O (4/2/1)의 혼합 용액 545 mL를 순차적으로 추가하여, 80℃로 가열 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출했다. 물층을 제거하여, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카젤 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용대를 사용)로 정제하여, 중간체IM-6 (20.48 g, 수율 79%)을 얻었다.
- [0321] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 333을 분자 이온 피크로 관측하여 중간체IM-6을 동정했다.
- [0322] (화합물 C21의 합성)
- [0323] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-5 10.00 g (19.5 mmol), Pd(dba)₂ 0.34 g (0.03 equiv, 0.6 mmol), Na0 Bu 3.76 g (2.0 equiv, 39.1 mmol), Toluene 98 mL, IM-6 7.16 g (1.1 equiv, 21.5 mmol) 및 Bu₃P 0.40 g (0.1 equiv, 2.0 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 C21 (10.08 g, 수율 75%)을 얻었다.
- [0324] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 687을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 C21을 동정했다.
- [0325] 1-13. 화합물 D5의 합성
- [0326] (반응식 13)

[0327]

- [0328] (중간체IM-7의 합성)
- [0329] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-1 10.00 g (37.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.64 g (0.03 equiv, 1.1 mmol), Na0 Bu 3.57 g (1.0 equiv, 37.1 mmol), Toluene 185 mL, 1-bromodibenzofuran 10.09 g (1.1 equiv, 40.8 mmol) 및 Bu₃P 0.75 g (0.1 equiv, 3.7 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합용매를 사용)로 정제하여, 중간체 IM-7 (12.77 g, 수율 79%)을 얻었다.
- [0330] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 435를 분자 이온 피크로 관측하여 중간체 IM-7을 동정했다.
- [0331] (화합물 D5의 합성)
- [0332] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-7 10.00 g (23.0 mmol), Pd(dba)₂ 0.40 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), Na0 Bu 4.41 g (2.0 equiv, 45.9 mmol), Toluene 115 mL, 2-(4-bromophenyl)naphthalene 7.15 g (1.1 equiv, 25.3 mmol) 및 Bu₃P 0.46 g (0.1 equiv, 2.3 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 D5 (12.30 g, 수율 84%)를 얻었다.
- [0333] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 637을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 D5를 동정했다.
- [0334] 1-14. 화합물 D6의 합성
- [0335] (반응식 14)

[0337] (화합물 D6의 합성)

[0336]

- [0338] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-7 10.00 g (23.0 mmol), Pd(dba)₂ 0.40 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), NaO Bu 4.41 g (2.0 equiv, 45.9 mmol), Toluene 115 mL, 9-(4-bromophenyl)phenanthrene 8.42 g (1.1 equiv, 25.3 mmol) 및 Bu₃P 0.46 g (0.1 equiv, 2.3 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 D6 (11.84 g, 수율 75%)을 얻었다.
- [0339] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 687을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 D6을 동정했다.
- [0340] 1-15. 화합물 D13의 합성

[0341] (반응식 15)

[0342] [0343]

(화합물 D13의 합성)

[0344] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-7 10.00 g (23.0 mmol), Pd(dba)₂ 0.40 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), Na0 Bu 4.41 g (2.0 equiv, 45.9 mmol), Toluene 115 mL, 3-bromodibenzothiophene 6.65 g (1.1 equiv, 25.3 mmol) 및 Bu₃P 0.46 g (0.1 equiv, 2.3 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의

[0345] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 617을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 D13을 동정했다.

혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 D13 (11.21 g, 수율 79%)을 얻었다.

[0346] 1-16. 화합물 D24의 합성

[0347] (반응식 16)

[0348]

[0349] (중간체IM-8의 합성)

[0350] 아르곤 분위기 하에서, 1000 mL 3구 플라스크에, IM-6 20.00 g (60.0 mmol), 4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)aniline 15.78 g (1.2 equiv, 72.0 mmol), K₂CO₃ 24.89 g (3.0 equiv, 180.0 mmol), Pd(PPh₃)₄ 3.47 g (0.05 eq, 3.0 mmol), 및 Toluene/Ethanol/H2O (4/2/1)의 혼합 용액 420 mL를 순차적으로 추가하여, 80℃로 가열 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출했다. 물층을 제거하여, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별 하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용 매를 사용)로 정제하여, 중간체IM-6 (15.34 g, 수율 74%)을 얻었다.

[0351] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 345를 분자 이온 피크로 관측하여 중간체IM-8을 동정했다.

[0352] (중간체IM-9의 합성)

[0353] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-8 10.00 g (28.9 mmol), Pd(dba)₂ 0.50 g (0.03 equiv, 0.9

mmol), Na0 Bu 2.78 g (1.0 equiv, 28.9 mmol), Toluene 145 mL, 1-bromodibenzofuran 7.87 g (1.1 equiv, 11.55 mmol) 및 Bu3P 0.59 g (0.1 equiv, 2.9 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합용매를 사용)로 정제하여, 중간체 IM-9 (11.55 g, 수율 78%)를 얻었다.

- [0354] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 511을 분자 이온 피크로 관측하여 중간체 IM-9를 동정했다.
- [0355] (화합물 D24의 합성)
- [0356] 아르곤 분위기 하에서, 300 mL 3구 플라스크에, IM-9 10.00 g (19.5 mmol), Pd(dba)₂ 0.34 g (0.03 equiv, 0.6 mmol), Na0^tBu 3.76 g (2.0 equiv, 39.1 mmol), Toluene 98 mL, 2-(4-bromophenyl)naphthalene 6.09 g (1.1 equiv, 21.5 mmol) 및 ^tBu₃P 0.40 g (0.1 equiv, 2.0 mmol)을 순차적으로 추가하여, 가열, 환류, 및 교반했다. 실온까지 공기중에서 냉각 후, 반응 용매에 물을 추가해 유기층을 분취했다. 물층에 Toluene을 추가해 유기층을 더 추출한 후, 유기층을 합하여 식염수로 세정한 후, 황산마그네슘 무수물로 건조시켰다. 황산마그네슘 무수물을 여별하고 유기층을 농축하여 얻은 조생성물을 실리카겔 컬럼크로마토그래피(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제하여, 고체의 화합물 D24 (9.66 g, 수율 80%)를 얻었다.
- [0357] FAB-MS 측정 결과, 질량수 m/z = 713을 분자 이온 피크로 관측하여 화합물 D24를 동정했다.
- [0358] 2. 아민 화합물을 포함하는 발광 소자의 제작 및 평가
- [0359] 2-1. 아민 화합물을 포함하는 발광 소자의 실시예
- [0360] 실시예 화합물 A1, A7, A12, A18, B5, B9, B14, B23, C1, C12, C15, C21, D5, D6, D13, 및 D24과 비교예 화합물 R1 내지 R9를 정공 수송층 재료로 이용하여 실시예 1 내지 16과, 비교예 1 내지 9의 발광 소자를 제작하였다.
- [0361] (실시예 화합물)

[0362]

[0363]

[0364]

C12 C15 C21 [0365]

D13 D5 D6 [0366]

D24 [0367]

(비교예 화합물) [0368]

[0369]

R4 R6 R5 [0370]

[0372] [0373]

[0371]

(발광 소자의 제작)

[0374] 실시예 1 내지 16 및 비교예 1 내지 10의 발광 소자는 ITO로 150nm 두께의 제1 전극(EL1)을 형성하였다. 1-TNATA로 60nm 두께의 정공 주입층(HIL)을 형성하고, 실시예 화합물 또는 비교예 화합물로 30nm 두께의 정공 수송층(HTL)을 형성하였다. ADN에 TBP를 3%를 도핑한 25nm 두께의 발광층(EML)을 형성하였다. Alq3로 25nm 두께의 전자 수송층(ETL)을 형성하고, LiF로 1nm 두께의 전자 주입층(EIL)을 형성였다. Al로 100nm 두께의 제2 전극(EL2)을 형성하였다. 각 층은 모두 진공 증착법으로 형성하였다. 1-TNATA, TBP, ADN, 및 Alq3은 시판품을 승화 및 정제하여 사용하였다.

[0375] (발광 소자의 특성 평가)

[0376] 실시예 및 비교예에 따른 발광 소자(10)의 특성을 평가하기 위하여 구동 전압, 전류 효율, 및 휘도 반감 수명 (LT50)을 측정하였다. 전류 효율은 10 mA/cm의 전류 밀도에 대한 값이다. 휘도 반감 수명의 전류 밀도는 1.0 mA/cm에서 연속 구동하여 측정 하였다. 제작한 발광 소자(10)의 발광 특성 평가에는, Keithley Instruments사 2400 Series의 Source Meter, Konica Minolta사 제품인 색채 휘도계 CS-200, 및 일본 national Instruments사 제품인 측정용 PC Program LabVIEW8.2를 사용하여 전류 밀도, 구동 전압, 및 발광 효율을 측정하였다.

¥ 1

[0377]

		<u> </u>		<u>.</u>
소자 작성예	정공 수송층 재료	구동 전압	전류 효율	휘도 반감 수명
		(V)	(cd/A)	(hour)
실시예 1	실시예 화합물 A1	5.4	7.5	1950
실시예 2	실시예 화합물 A7	5.5	7.5	2000
실시예 3	실시예 화합물 A12	5.4	7.8	1900
실시예 4	실시예 화합물 A18	5.4	7.9	1800
실시예 5	실시예 화합물 B5	5.6	7.6	1900
실시예 6	실시예 화합물 B9	5.6	7.6	1900
실시예 7	실시예 화합물 B14	5.6	7.6	1850
실시예 8	실시예 화합물 B23	5.6	7.7	1800
실시예 9	실시예 화합물 C1	5.6	7.6	1950
실시예 10	실시예 화합물 C12	5.4	7.8	2050
실시예 11	실시예 화합물 C15	5.5	7.6	2000
실시예 12	실시예 화합물 C21	5.6	7.7	1900
실시예 13	실시예 화합물 D5	5.7	7.7	1900
실시예 14	실시예 화합물 D6	5.6	7.8	1850
실시예 15	실시예 화합물 D13	5.6	7.6	1900

실시예 16	실시예 화합물 D24	5.5	7.8	1850
비교예 1	비교예 화합물 R1	6.3	6.0	1700
비교예 2	비교예 화합물 R2	6.0	6.5	1600
비교예 3	비교예 화합물 R3	6.3	6.3	1550
비교예 4	비교예 화합물 R4	6.3	6.4	1750
비교예 5	비교예 화합물 R5	6.4	6.5	1650
비교예 6	비교예 화합물 R6	6.3	6.7	1700
비교예 7	비교예 화합물 R7	5.9	7.2	1750
비교예 8	비교예 화합물 R8	6.4	7.3	1600
비교예 9	비교예 화합물 R9	6.5	7.4	1600
비교예 10	비교예 화합물 R10	6.5	7.3	1650

- [0378] 상기 표 1의 결과를 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 아민 화합물을 정공 수송층 재료로 발광 소자에 적용한 경우, 저구동 전압, 고효율, 및 장수명을 달성할 수 있음을 알 수 있다. 구체적으로, 실시예 1 내지 실시예 16은 비교예 1 내지 비교예 10 대비 저구동 전압, 고효율, 및 장수명을 달성하는 것이 확인 된다.일 실시예의 아민 화합물은 페난트렌 골격 및 디벤조혜테로(구체적으로, 디벤조퓨란 또는 디벤조티오펜) 골격을 포함함으로써 저구동 전압, 장수명, 및 고효율을 달성한 것으로 판단된다. 특히, 일 실시예의 아민 화합물은 디벤조혜테로고리기의 1번 위치(또는 8번 위치, 이하 1번 위치로 작성)의 탄소, 또는 4번 위치(또는 5번 위치, 이하 4번 위치로 작성)의 탄소와 질소 원자와 결합시킴으로써, HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital)의 에너지 준위가 깊어졌기 때문인 것으로 판단된다. 이에 따라, 정공 수송층(HTL)의 정공 수송성이 향상되고, 이에 따라 발광층(EML) 내에서 정공과 전자의 재결합 확률이 향상되어 발광 효율이 향상된 것으로 판단된다. 나아가, 일 실시예의 아민 디벤조혜테로고리기의 1번 위치(또는 8번 위치)의 탄소, 또는 4번 위치(또는 5번 위치)의 탄소와 질소 원자가 결합함에 따라 분자의 부피가 커지고, 결정성이 억제되어 정공 수송층의 성막성이 향상된 것으로 판단된다.
- [0379] 디벤조헤테로고리기의 1번 위치가 질소 원자와 결합한 실시예 1 내지 4, 및 9 내지 12와, 디벤조헤테로고리기의 4번 위치가 질소 원자와 결합한 실시예 5 내지 8, 및 13 내지 16을 비교하면, 실시예 1 내지 4, 및 9 내지 12가 유의미한 정도의 높은 수명을 나타냈다. 이는, 디벤조헤테로고리기의 1번 위치가 질소 원자와 결합되는 경우 디벤조헤테로고리기의 4번 위치가 질소 원자와 결합되는 경우 보다 HOMO 준위가 보다 깊어지기 때문인 것으로 판단된다. 디벤조헤테로고리기의 4번 위치가 질소 원자와 결합되는 경우 HOMO 준위는 다소 얕아지지만, 질소 원자주변의 부피가 커지므로 정공 수송층(HTL)의 성막성이 향상되어, 발광 효율 및 소자 수명이 모두 우수한 결과를 보인 것으로 판단된다.
- [0380] 비교예 1의 아민 화합물은 디벤조헤테로 골격을 포함하지 않으므로 정공 수송 특성이 저하되어 저구동 전압, 고효율, 및 장수명을 달성하지 못한 것으로 판단된다.
- [0381] 비교예 2는, 페난트렌 골격의 10번 위치 탄소에 페닐기를 포함하므로 질소 원자 주변의 부피가 지나치게 커져, 원자간 결합이 불안정하여 쉽게 열화되므로 저구동 전압, 고효율, 및 장수명을 달성하지 못한 것으로 판단된다.
- [0382] 비교예3 및 4는, 디벤조해테로고리기의 2번 위치의 탄소 또는 3번 위치의 탄소가 질소 원자와 결합함으로써, HOMO 에너지 준위가 얕아지고 질소 원자 주변의 부피가 작아져 정공 수송 특성 및 성막성이 저하되어 저구동 전압, 고효율, 및 장수명을 달성하지 못한 것으로 판단된다.
- [0383] 비교예5는, 페난트렌 골격의 2번 위치의 탄소가 질소 원자와 결합된다. 따라서, 반응성이 높은 9번 위치, 또는 10 위치 탄소가 보호되지 않아 화합물이 쉽게 열화되어 저구동 전압, 고효율, 및 장수명을 달성하지 못한 것으로 판단된다.
- [0384] 비교예6은 SP² 혼성화 탄소에 비하여 불안정한 SP³ 혼성화 탄소를 갖는 플루오레닐기를 포함하기 때문에, 화합물이 쉽게 열화되어 저구동 전압, 고효율, 및 장수명을 달성하지 못한 것으로 판단된다.
- [0385] 비교예7은, 본원 화학식 1의 Ar₁에 대응되는 기의 탄소수가 15 이하이다. 따라서, 화합물의 작은 분자량에 의해 소자의 연속 구동 과정에서 재료의 분해가 일어난다. 따라서 저구동 전압, 고효율, 및 장수명을 달성하지 못한 것으로 판단된다.
- [0386] 비교예 8은 페난트렌기가 링커 없이 질소 원자에 직접 결합되므로 일 실시예의 화합물과 입체 구조가 상이하므

로 저구동 전압, 고효율, 및 장수명을 달성하지 못한 것으로 판단된다.

[0387] 비교예 9는 디벤조헤테로기가 페닐기로 치환되며, 2번 위치 탄소가 질소 원자와 결합된다. 이에 따라, 일 실시 예의 화합물과 비교할 때 HOMO 에너지 준위가 얕아지고, 입체 구조가 상이하므로 저구동 전압, 고효율, 및 장수 명을 달성하지 못한 것으로 판단된다.

[0388] 비교예 10은 디벤조헤테로 골격에 벤젠고리가 추가적으로 축합된 벤조나 구조를 갖는다. 따라서, 분자의 평면성이 커지므로 분자 간의 스태킹(stacking)이 잘 일어난다. 이에 따라, 성막성이 저하되고, 증착 온도가 상승하여 저구동전압, 고효율, 및 장수명을 달성하지 못한 것으로 판단된다.

[0389] 일 실시예의 발광 소자는 화학식 1로 표시되는 아민 화합물을 포함한다. 따라서, 일 실시예의 발광 소자는 저구 동 전압, 고효율 및 장수명을 달성할 수 있다. 상술한 일 실시예의 아민 화합물은 발광 소자에 적용되어 소자의 저구동 전압, 고효율, 및 장수명을 달성할 수 있다.

[0390] 실시 예를 참조하여 설명하였지만, 해당 기술 분야의 숙련된 당업자는 하기의 특허 청구의 범위에 기재된 본 발명의 사상 및 영역으로부터 벗어나지 않는 범위 내에서 본 발명을 다양하게 수정 및 변경시킬 수 있음을 이해할수 있을 것이다. 또한 본 발명에 개시된 실시 예는 본 발명의 기술 사상을 한정하기 위한 것이 아니고, 하기의특허 청구의 범위 및 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술 사상은 본 발명의 권리범위에 포함되는 것으로 해석되어야 할 것이다.

부호의 설명

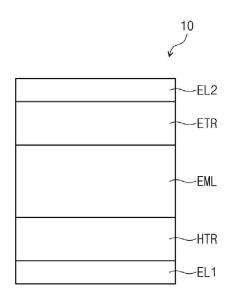
[0391] 10 : 발광 소자 EL1 : 제1 전극

EL2 : 제2 전극 HTR : 정공 수송 영역

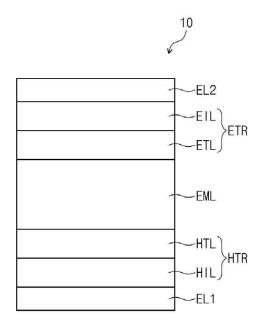
EML : 발광층 ETR : 전자 수송 영역

도면

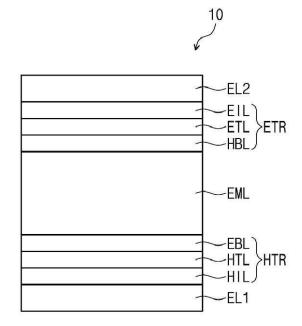
도면1



도면2



도면3



도면4

