



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2021년03월10일
(11) 등록번호 10-2226070
(24) 등록일자 2021년03월04일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 495/04 (2006.01) C07D 491/048 (2006.01)
H01L 27/32 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07D 495/04 (2013.01)
C07D 491/048 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2017-0124370
(22) 출원일자 2017년09월26일
심사청구일자 2018년11월21일
(65) 공개번호 10-2019-0035308
(43) 공개일자 2019년04월03일
(56) 선행기술조사문헌
W02017109637 A1*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
삼성에스디아이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20 (공세동)
삼성전자주식회사
경기도 수원시 영통구 삼성로 129 (매탄동)
(72) 발명자
김병구
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)
강기욱
경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
팬코리아특허법인

전체 청구항 수 : 총 15 항

심사관 : 김상인

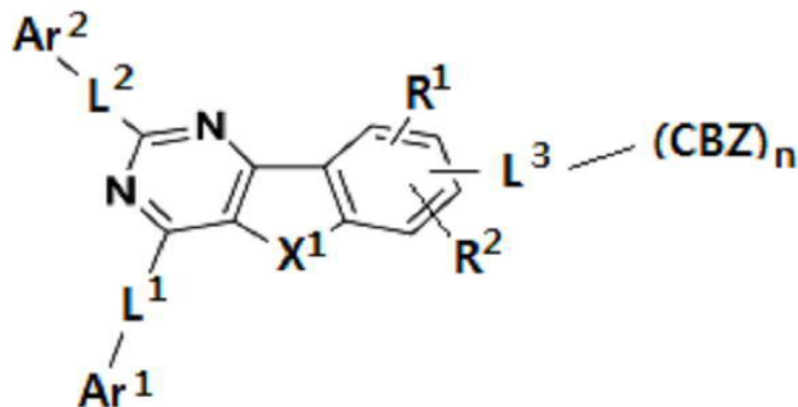
(54) 발명의 명칭 유기 화합물, 조성물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치

(57) 요약

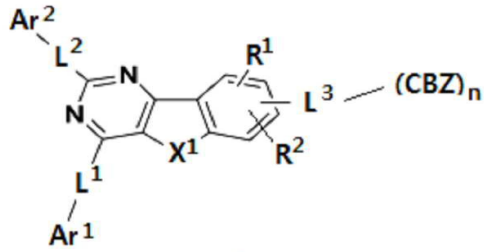
하기 화학식 1로 표현되는 유기 화합물, 이를 포함하는 조성물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치에 관한 것이다.

(뒷면에 계속)

대표도



[화학식 1]



상기 화학식 1에서, X¹, Ar¹, Ar², L¹ 내지 L³, R¹, R², CBZ 및 n은 명세서에 기재한 바와 같다.

(52) CPC특허분류

H01L 27/32 (2013.01)

H01L 51/0071 (2013.01)

H01L 51/0072 (2013.01)

H01L 51/5024 (2013.01)

H01L 51/5072 (2013.01)

(72) 발명자

이한일

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

장기포

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

정성현

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

서민석

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

신지훈

경기도 수원시 영통구 삼성로 130(매탄동)

이현규

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

장진석

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

정호국

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

허달호

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

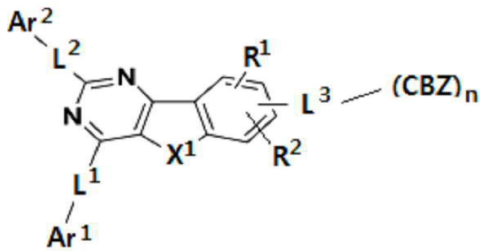
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표현되는 유기 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X¹은 O 또는 S이고,

L¹ 및 L²는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

L³는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

R¹ 및 R²는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 시아노기 또는 이들의 조합이고,

CBZ는 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이고,

n은 0 내지 3의 정수이고,

n이 1 내지 3일 때, Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 이들의 조합이고,

n이 0일 때, Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 또는 이들의 조합이고, 단 Ar¹ 및 Ar² 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이며,

여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C6 내지 C30 아릴기 또는 시아노기로 치환된 것이다.

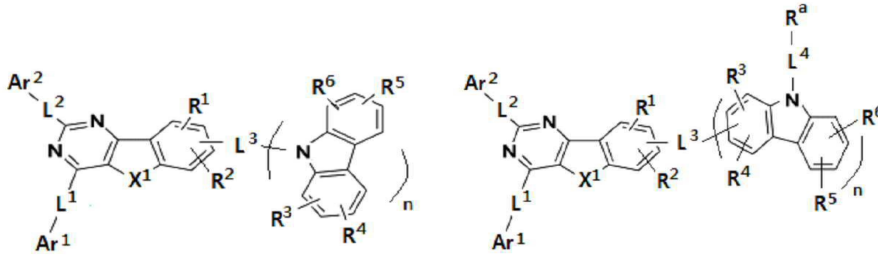
청구항 2

제1항에서,

하기 화학식 2 또는 3으로 표현되는 유기 화합물:

[화학식 2]

[화학식 3]



상기 화학식 2 또는 3에서,

X^1 은 0 또는 S이고,

L^1 및 L^2 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

L^3 는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

L^4 는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 2개의 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리(단, 카바졸릴렌기는 제외한다) 또는 이들의 조합이고,

R^1 내지 R^6 및 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리(단, 카바졸릴기는 제외한다), 시아노기 또는 이들의 조합이고,

n 은 0 내지 3의 정수이고,

n 이 1 내지 3일 때, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 이들의 조합이고,

n 이 0일 때, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 또는 이들의 조합이고, 단 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이며,

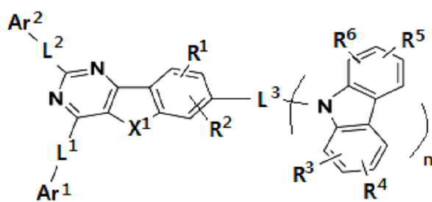
여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C6 내지 C30 아릴기 또는 시아노기로 치환된 것이다.

청구항 3

제2항에서,

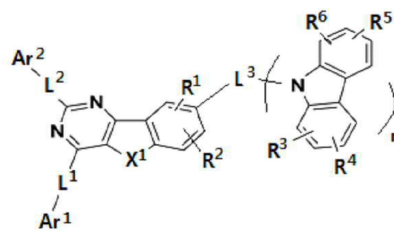
상기 화학식 2로 표현되는 유기 화합물은 하기 화학식 2a 내지 2d 중 어느 하나로 표현되는 유기 화합물:

[화학식 2a]

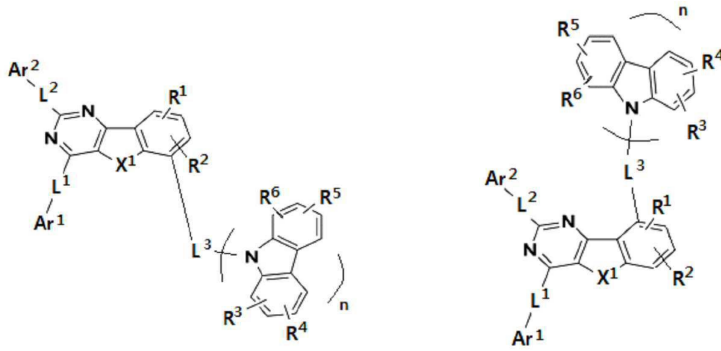


[화학식 2c]

[화학식 2b]



[화학식 2d]



상기 화학식 2a 내지 2d에서,

X^1 은 O 또는 S이고,

L^1 및 L^2 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

L^3 는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

R^1 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기(단, 카바졸릴기는 제외한다), 시아노기 또는 이들의 조합이고,

n 은 0 내지 3의 정수이고,

n 이 1 내지 3일 때, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 이들의 조합이고,

n 이 0일 때, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 또는 이들의 조합이고, 단 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이며,

여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C6 내지 C30 아릴기 또는 시아노기로 치환된 것이다.

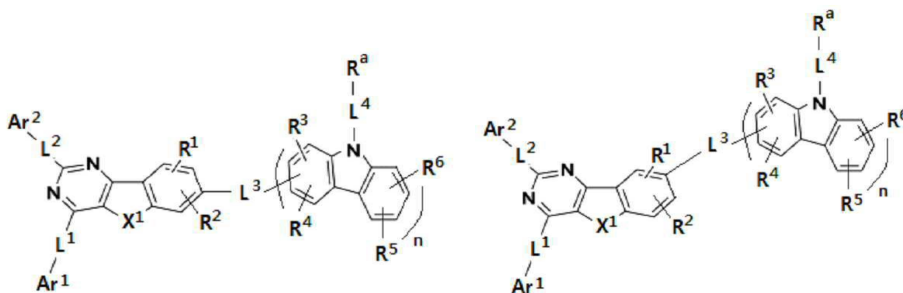
청구항 4

제2항에서,

상기 화학식 3으로 표현되는 유기 화합물은 하기 화학식 3a 내지 3d 중 어느 하나로 표현되는 유기 화합물:

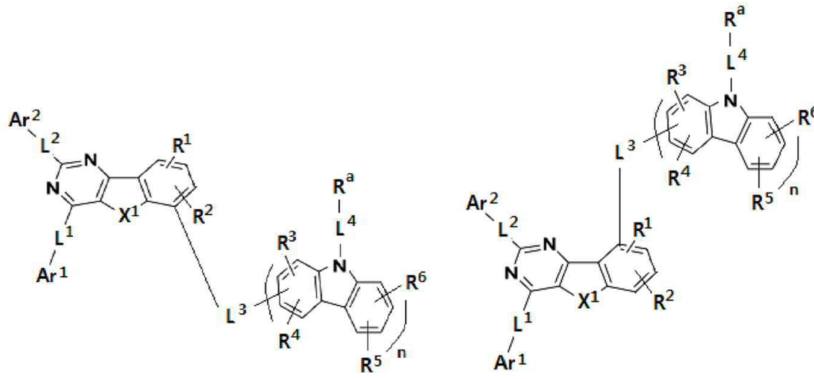
[화학식 3a]

[화학식 3b]



[화학식 3c]

[화학식 3d]



상기 화학식 3a 내지 3d에서,

X^1 은 O 또는 S이고,

L^1 및 L^2 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

L^3 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

L^4 는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 2가의 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기(단, 카바졸릴기는 제외한다) 또는 이들의 조합이고,

R^1 내지 R^6 및 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기(단, 카바졸릴기는 제외한다), 시아노기 또는 이들의 조합이고,

n 은 0 내지 3의 정수이고,

n 이 1 내지 3일 때, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 이들의 조합이고,

n 이 0일 때, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 또는 이들의 조합이고, 단 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이며,

여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C6 내지 C30 아릴기 또는 시아노기로 치환된 것이다.

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에서,

상기 Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 테페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기 또는 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기이고, 여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C12 아릴기 또는 시아노기로 치환된 것인 유기 화합물

청구항 6

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에서,

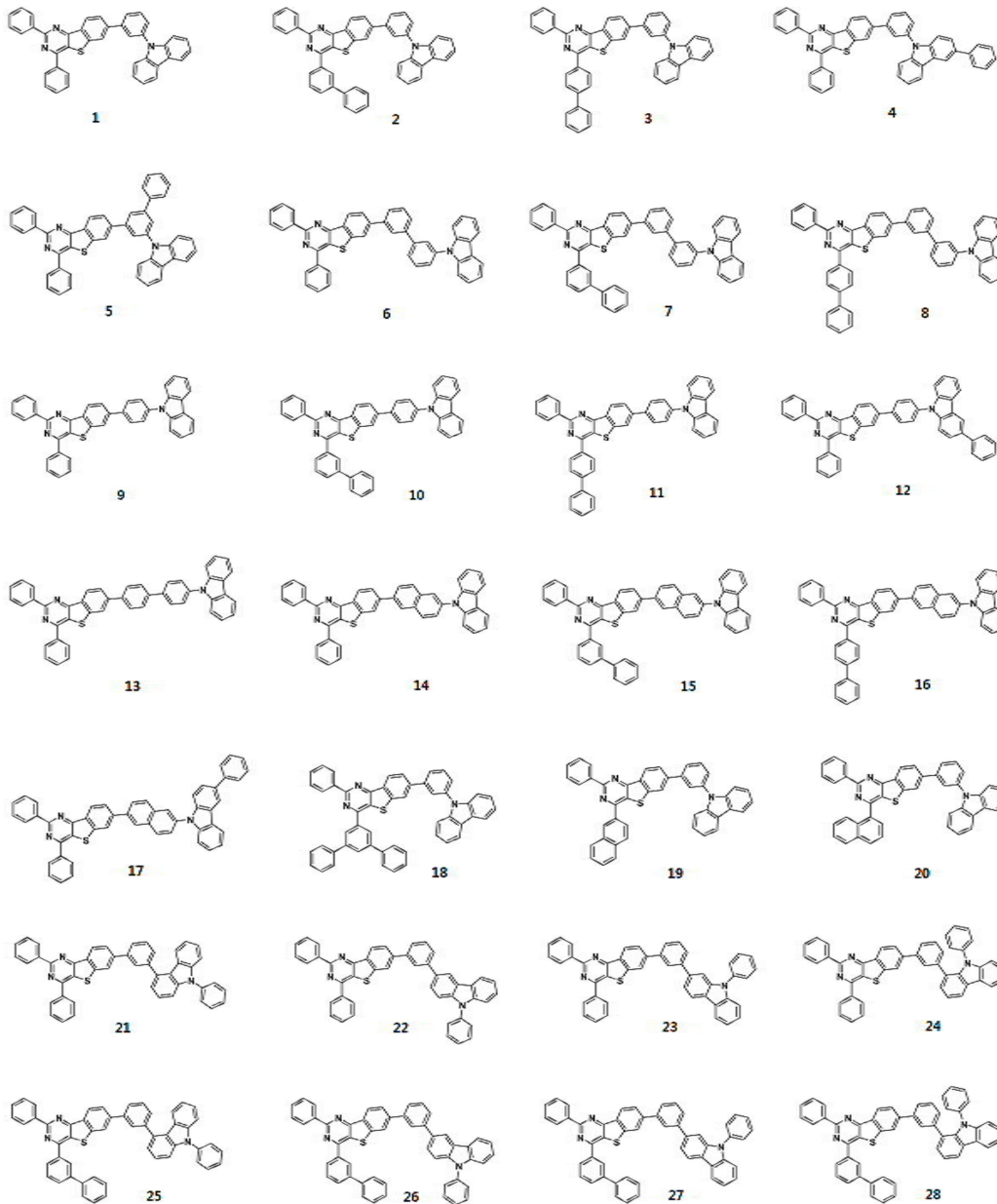
R^1 내지 R^6 및 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기 또는 이들의 조합인 유기 화합물.

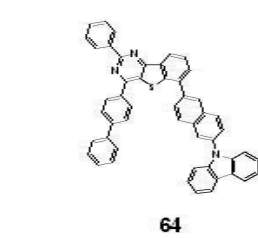
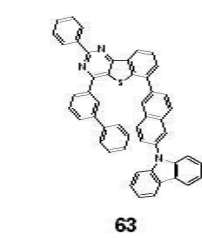
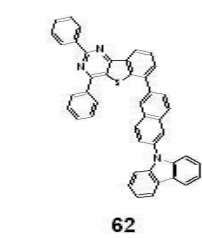
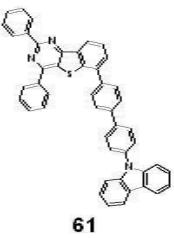
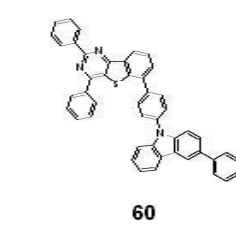
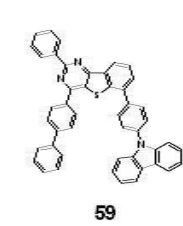
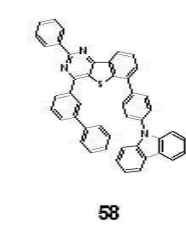
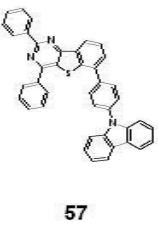
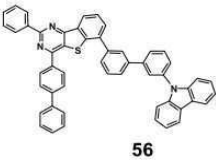
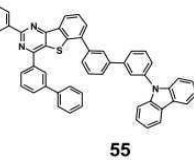
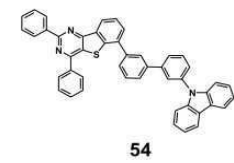
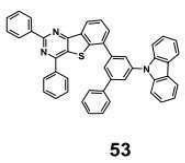
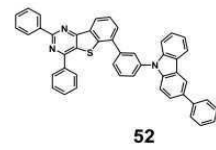
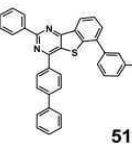
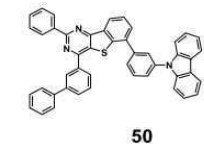
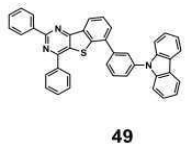
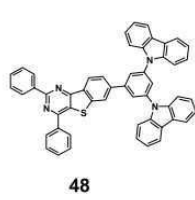
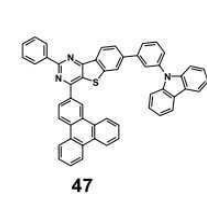
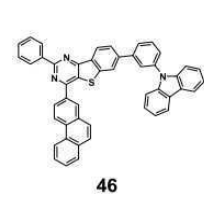
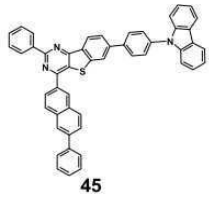
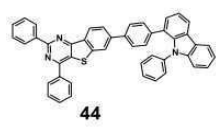
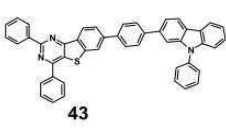
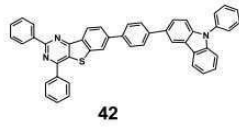
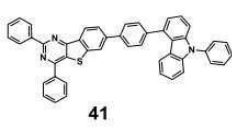
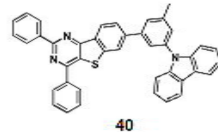
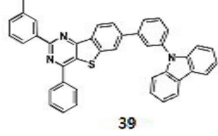
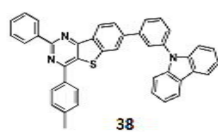
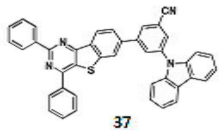
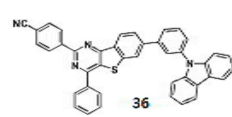
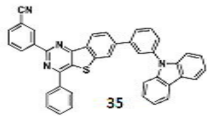
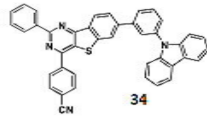
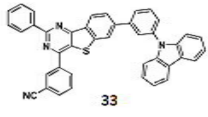
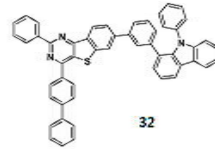
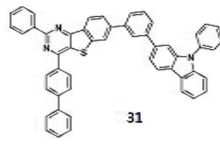
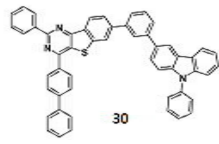
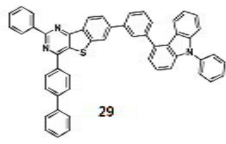
청구항 7

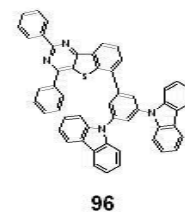
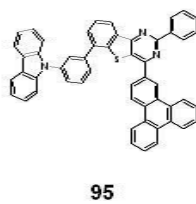
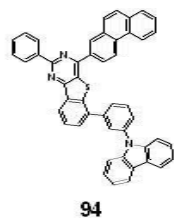
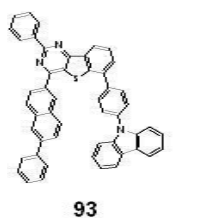
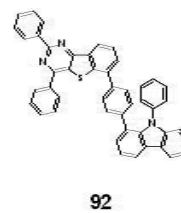
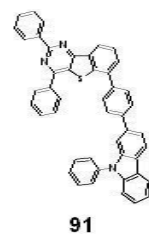
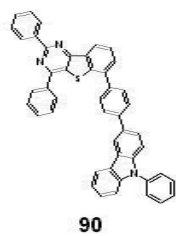
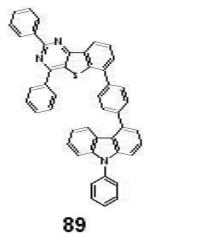
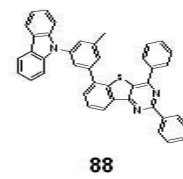
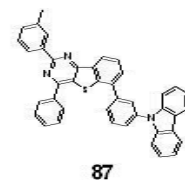
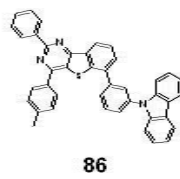
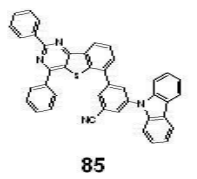
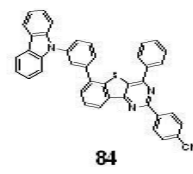
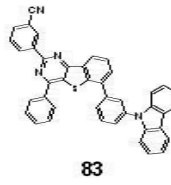
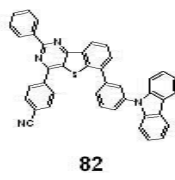
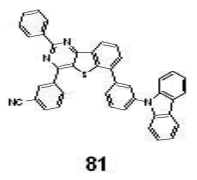
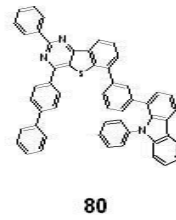
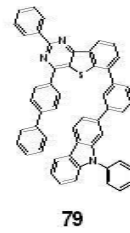
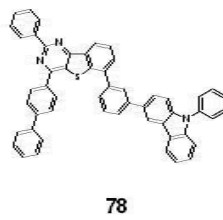
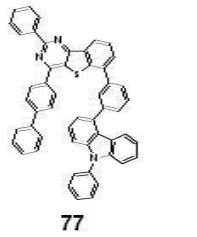
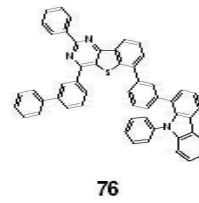
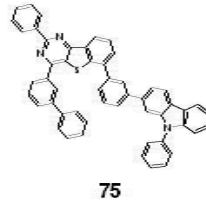
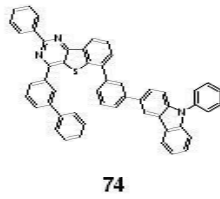
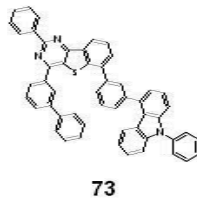
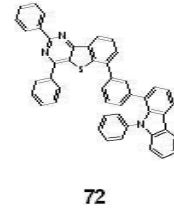
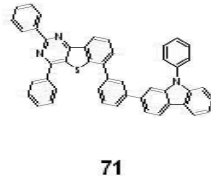
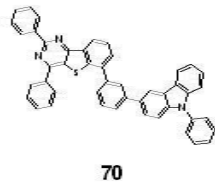
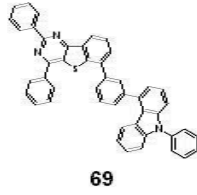
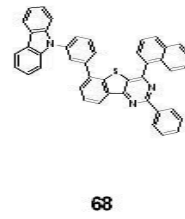
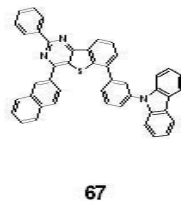
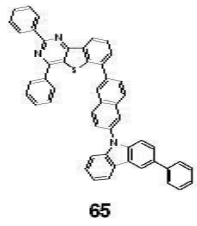
제1항에서,

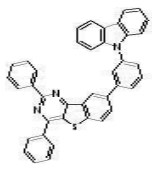
하기 그룹 1에 나열된 화합물에서 선택된 하나인 유기 화합물.

[그룹 1]

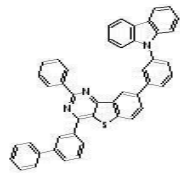




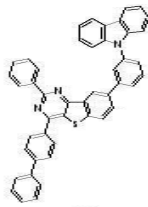




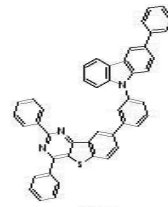
97



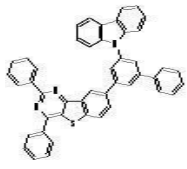
98



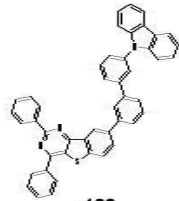
99



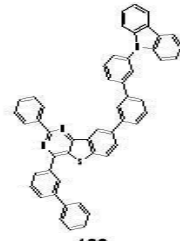
100



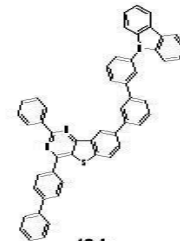
101



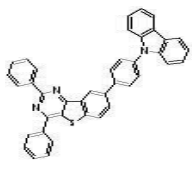
102



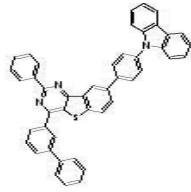
103



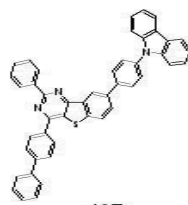
104



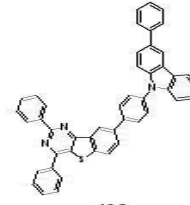
105



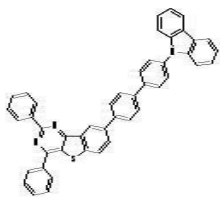
106



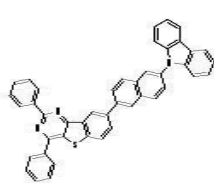
107



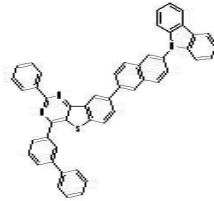
108



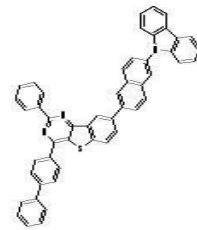
109



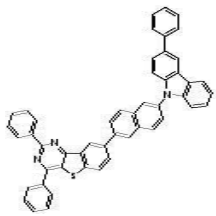
110



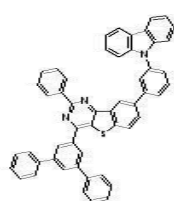
111



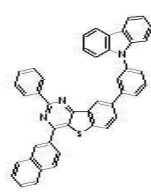
112



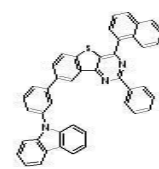
113



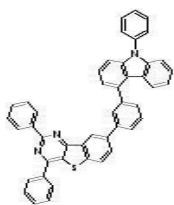
114



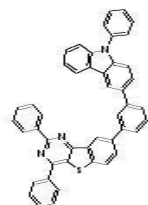
115



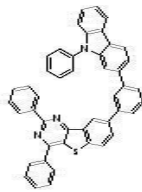
116



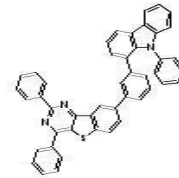
117



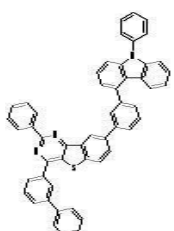
118



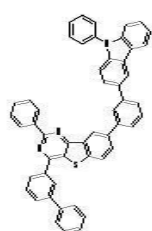
119



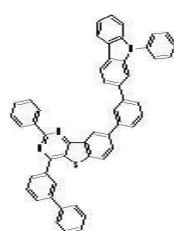
120



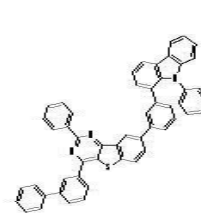
121



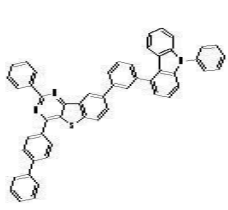
122



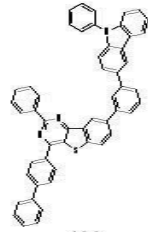
123



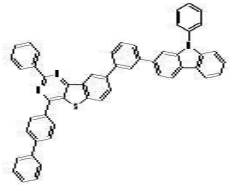
124



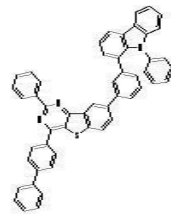
125



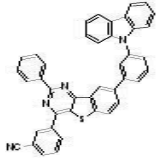
126



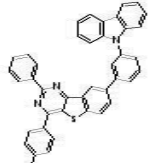
127



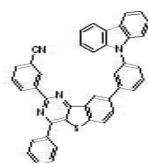
128



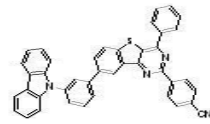
129



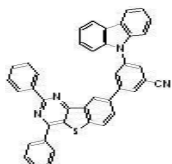
130



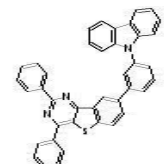
131



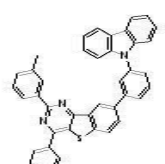
132



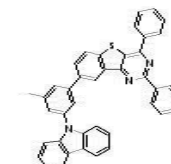
133



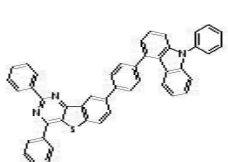
134



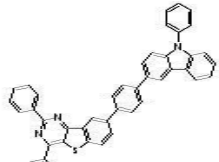
135



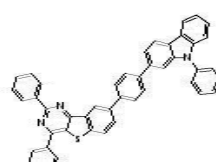
136



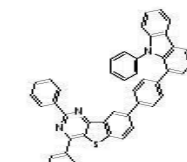
137



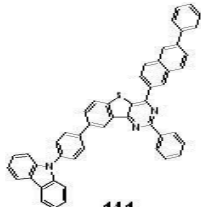
138



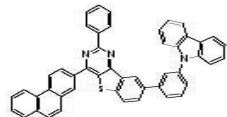
139



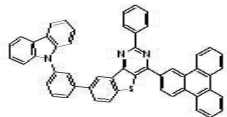
140



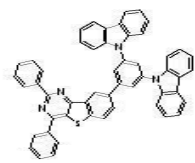
141



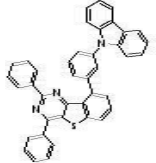
142



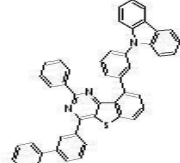
143



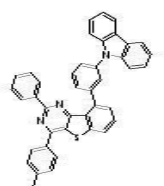
144



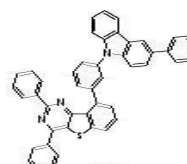
145



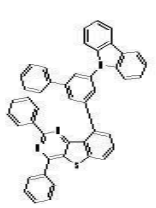
146



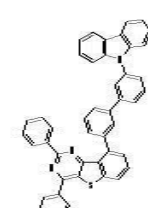
147



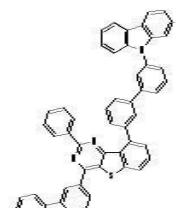
148



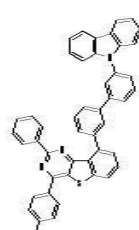
149



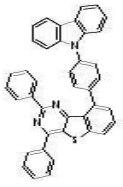
150



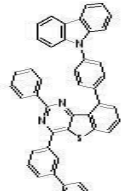
151



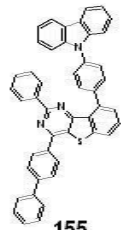
152



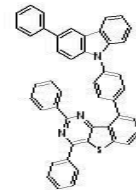
153



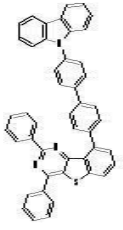
154



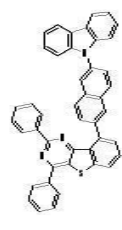
155



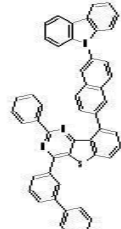
156



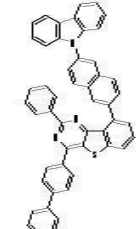
157



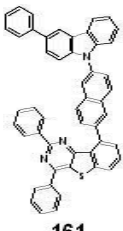
158



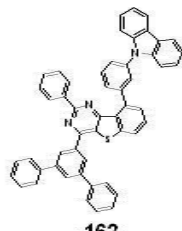
159



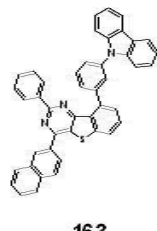
160



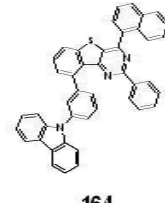
161



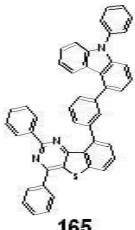
162



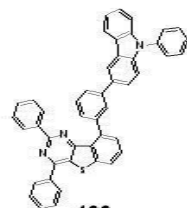
163



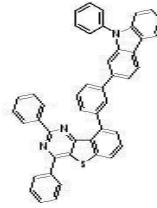
164



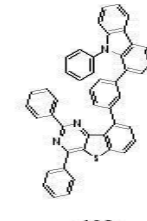
165



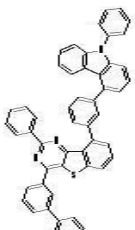
166



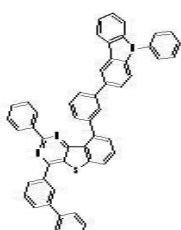
167



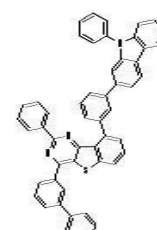
168



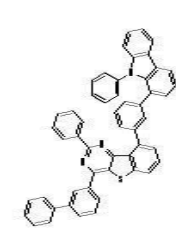
169



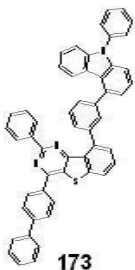
170



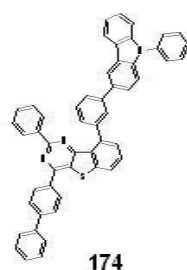
171



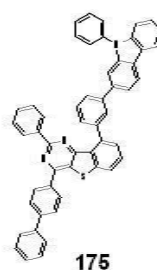
172



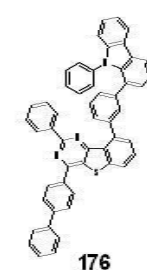
173



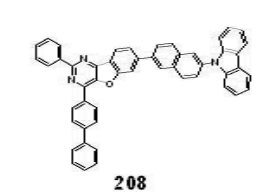
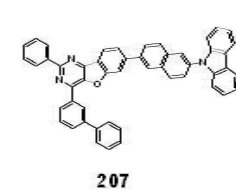
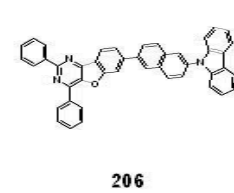
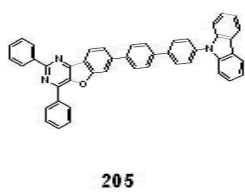
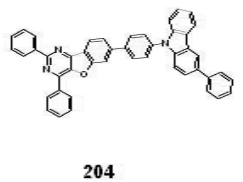
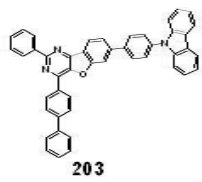
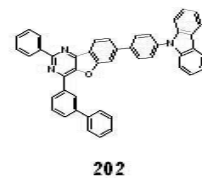
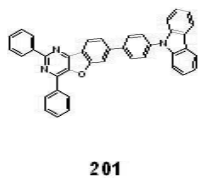
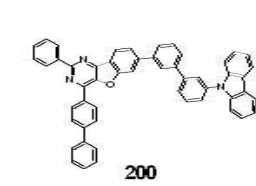
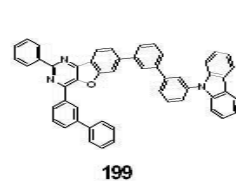
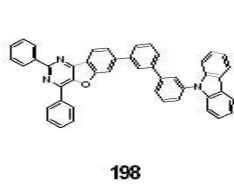
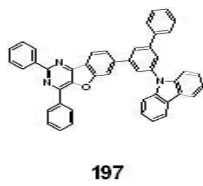
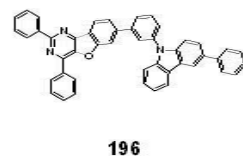
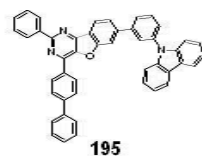
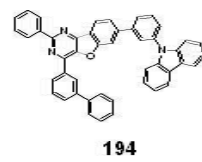
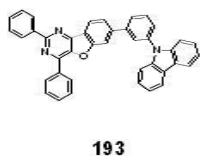
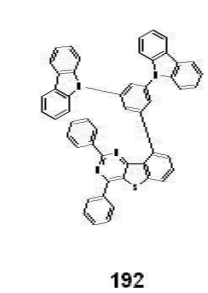
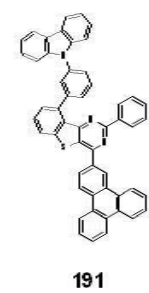
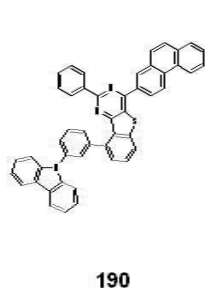
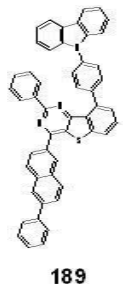
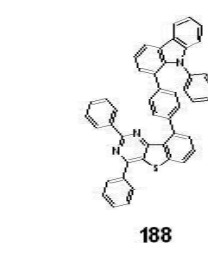
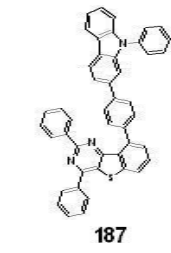
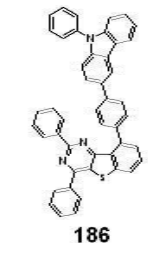
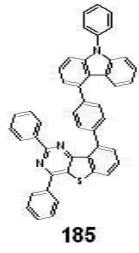
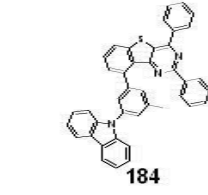
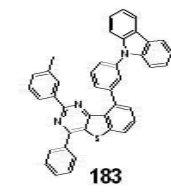
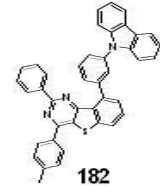
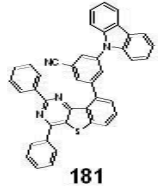
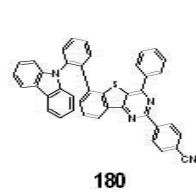
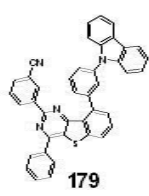
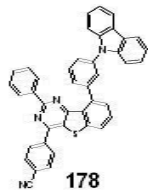
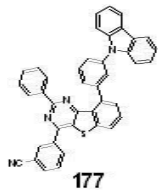
174

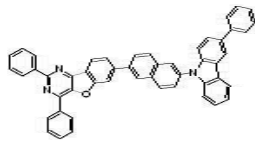


175

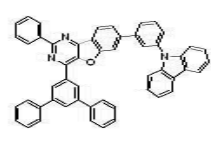


176

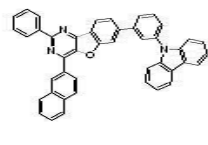




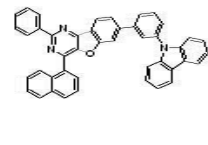
209



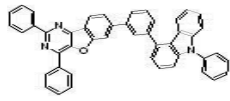
210



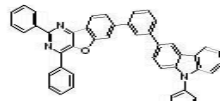
211



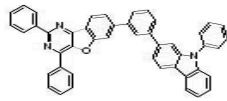
212



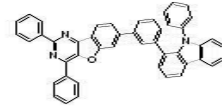
213



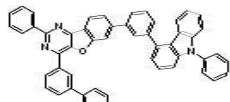
214



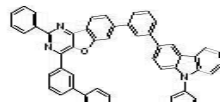
215



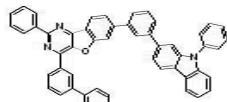
216



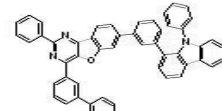
217



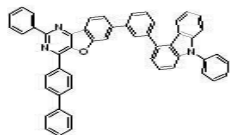
218



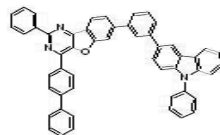
219



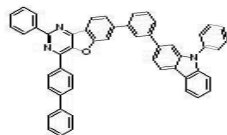
220



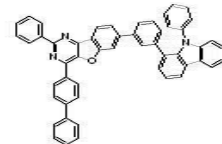
221



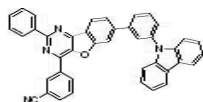
222



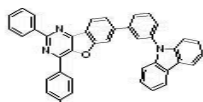
223



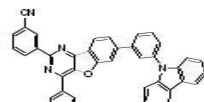
224



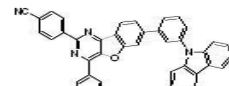
225



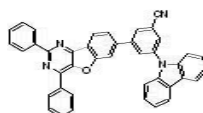
226



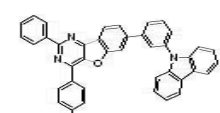
227



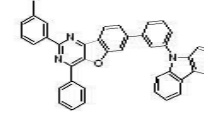
228



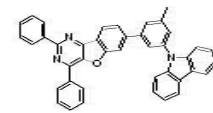
229



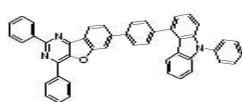
230



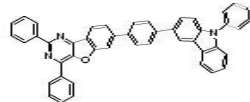
231



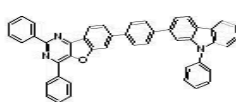
232



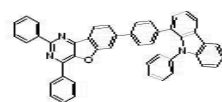
233



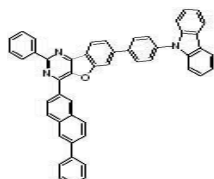
234



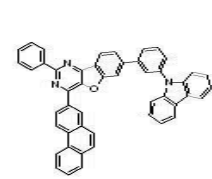
235



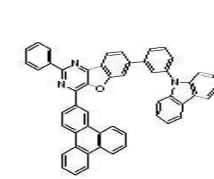
236



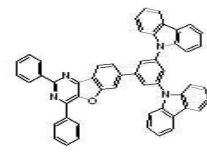
237



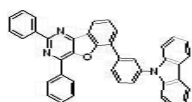
238



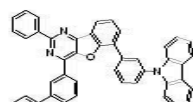
239



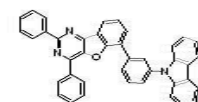
240



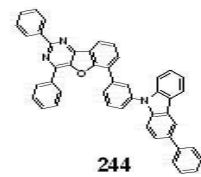
241



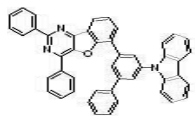
242



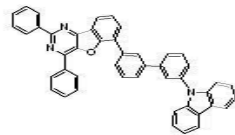
243



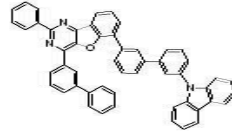
244



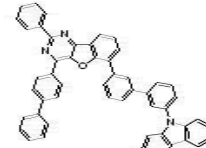
245



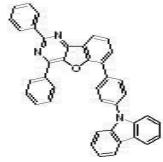
246



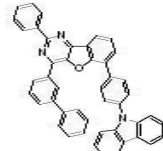
247



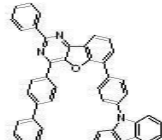
248



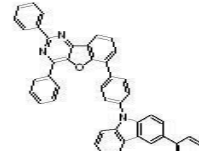
249



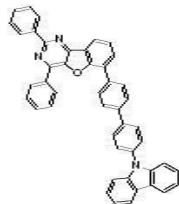
250



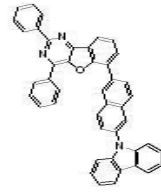
251



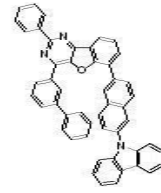
252



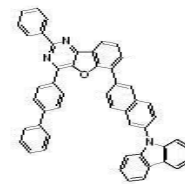
253



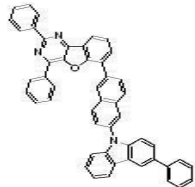
254



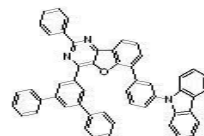
255



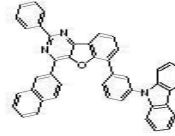
256



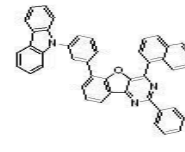
257



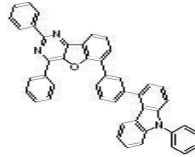
258



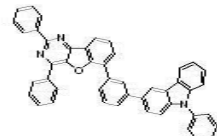
259



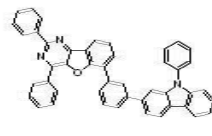
260



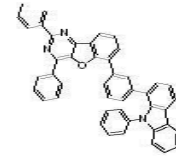
261



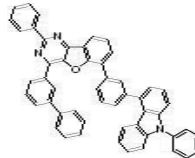
262



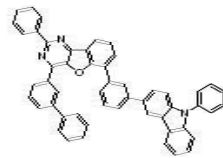
263



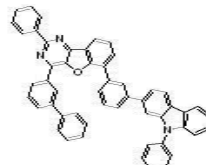
264



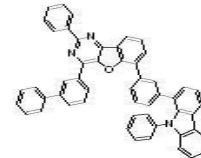
265



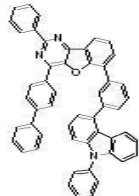
266



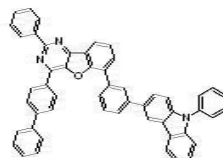
267



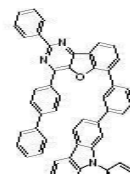
268



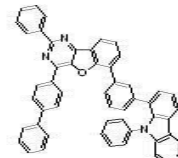
269



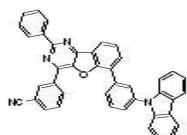
270



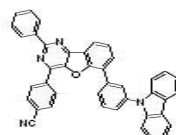
271



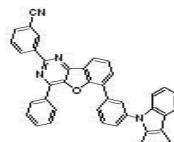
272



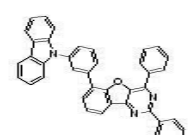
273



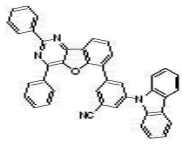
274



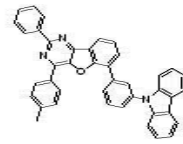
275



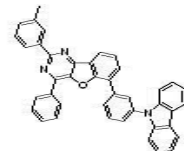
276



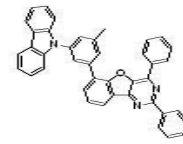
277



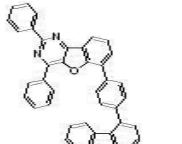
278



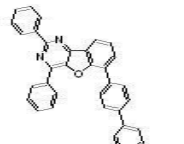
279



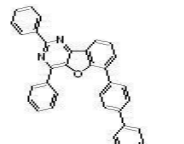
280



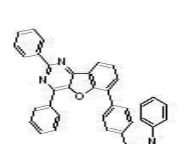
281



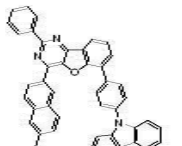
282



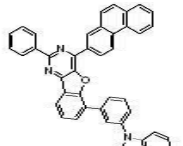
283



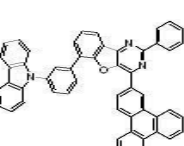
284



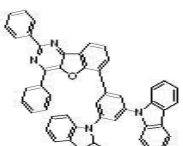
285



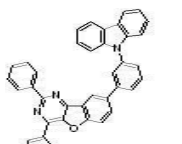
286



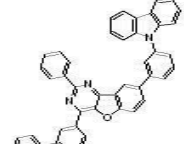
287



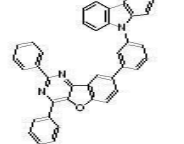
288



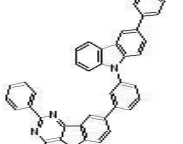
289



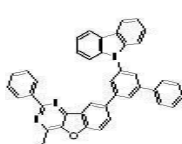
290



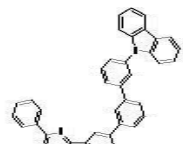
291



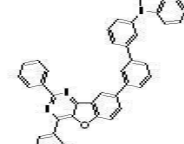
292



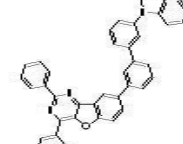
293



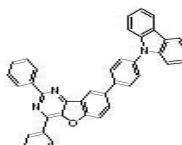
294



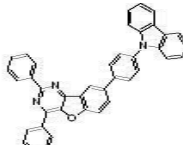
295



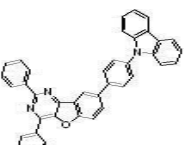
296



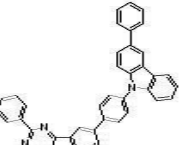
297



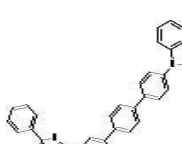
298



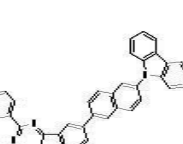
299



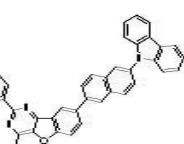
300



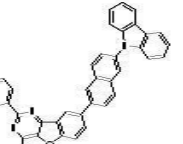
301



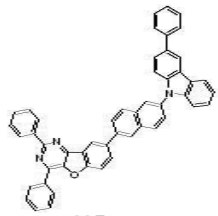
302



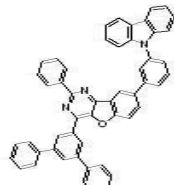
303



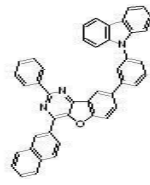
304



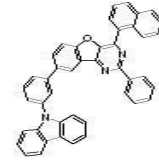
305



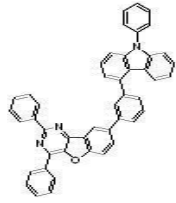
306



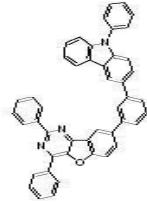
307



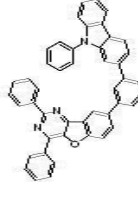
308



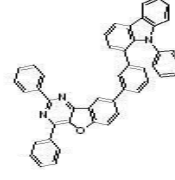
309



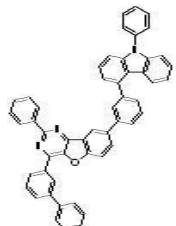
310



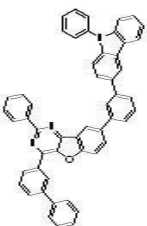
311



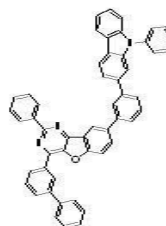
312



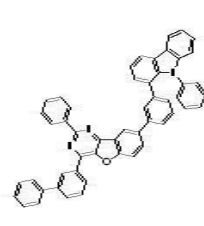
313



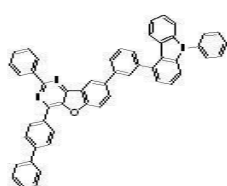
314



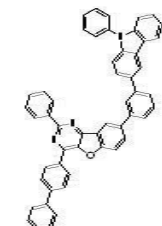
315



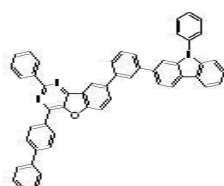
316



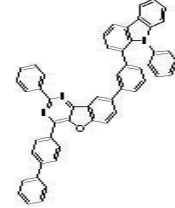
317



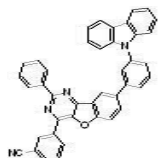
318



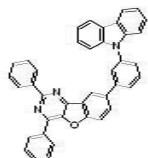
319



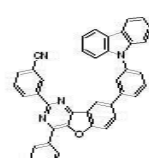
320



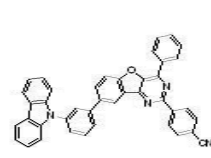
321



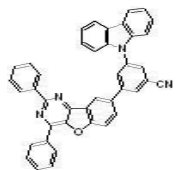
322



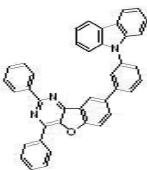
323



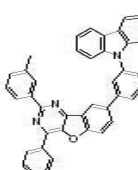
324



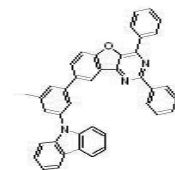
325



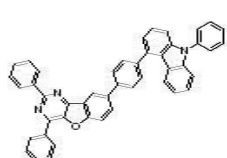
326



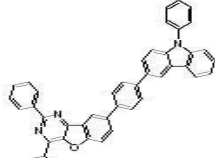
327



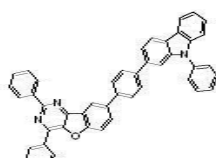
328



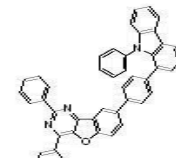
329



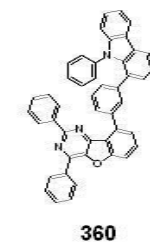
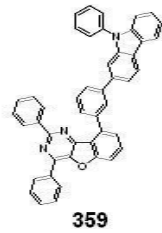
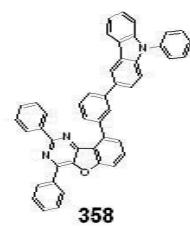
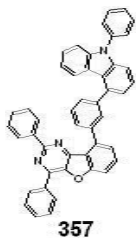
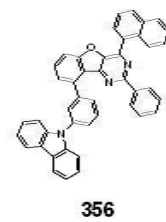
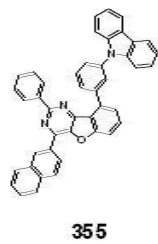
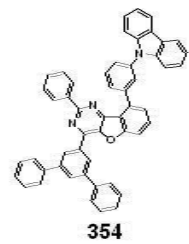
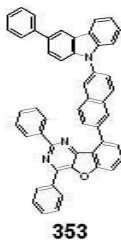
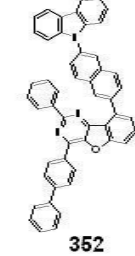
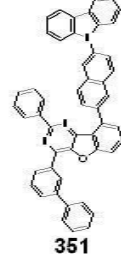
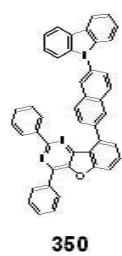
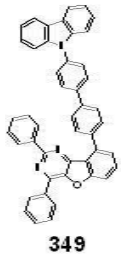
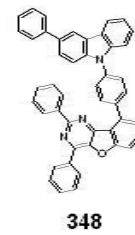
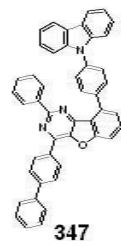
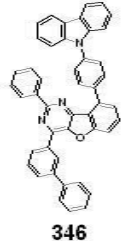
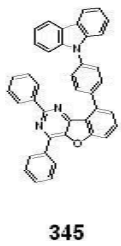
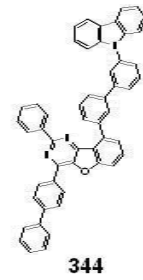
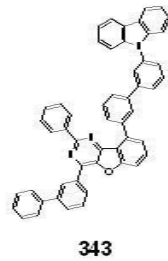
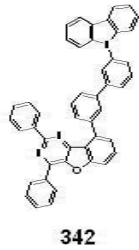
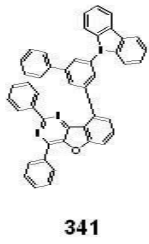
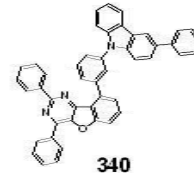
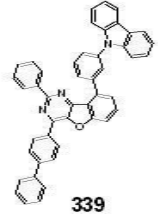
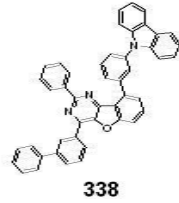
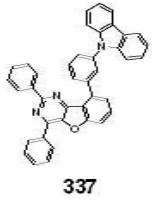
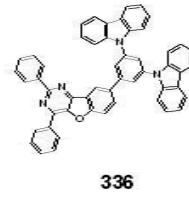
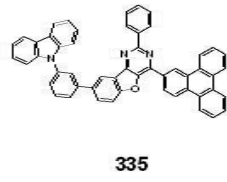
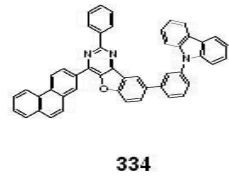
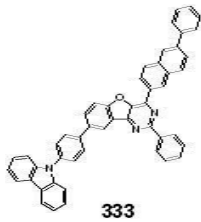
330

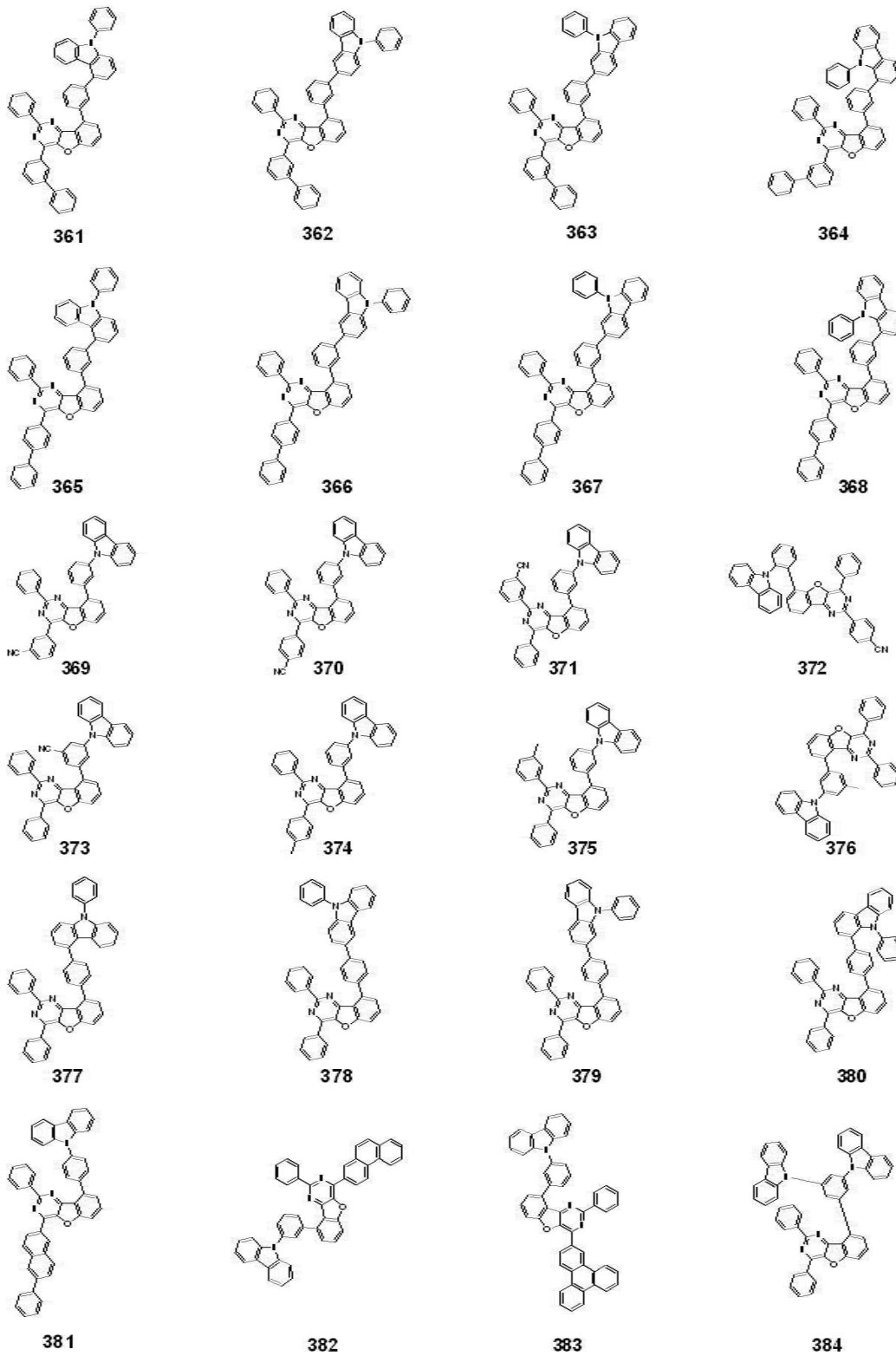


331



332

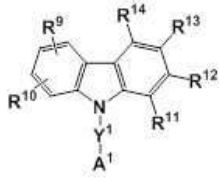




청구항 8

제1항에 따른 제1 유기 화합물, 그리고
 하기 화학식 4로 표현되는 카바졸 모이어티를 포함하는 제2 유기 화합물
 을 포함하는 조성물:

[화학식 4]



상기 화학식 4에서,

Y^1 은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 2가의 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

A^1 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

R^9 내지 R^{14} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

R^{11} 내지 R^{14} 는 각각 독립적으로 존재하거나 R^{11} 내지 R^{14} 중 인접한 기끼리 연결되어 고리를 형성한다.

청구항 9

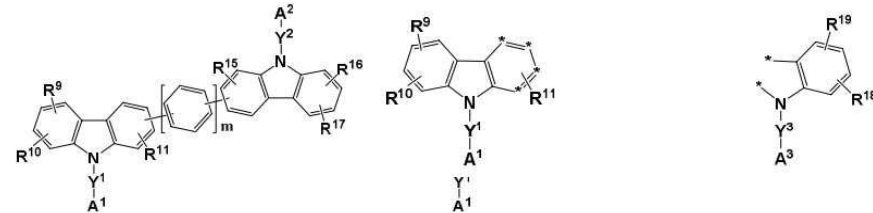
제8항에서,

상기 제2 유기 화합물은 하기 화학식 4A로 표현되거나 하기 화학식 4B-1과 4B-2의 조합으로 표현되는 조성물:

[화학식 4A]

[화학식 4B-1]

[화학식 4B-2]



상기 화학식 4A, 화학식 4B-1 또는 화학식 4B-2에서,

Y^1 내지 Y^3 은 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 2가의 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

A^1 내지 A^3 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

화학식 4B-1의 인접한 두 개의 *는 화학식 4B-2의 두 개의 *와 결합하고,

화학식 4B-1의 나머지 두 개의 *는 각각 독립적으로 CR^{11} 이고, 여기서 R^{11} 은 서로 같거나 다르고,

R^9 내지 R^{11} 및 R^{15} 내지 R^{19} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

m 은 0 내지 2의 정수이다.

청구항 10

제9항에서,

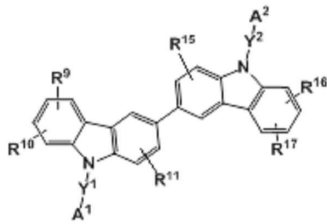
상기 화학식 4A, 화학식 4B-1 및 화학식 4B-2의 A^1 내지 A^3 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 또는 이들의 조합인 조성물.

청구항 11

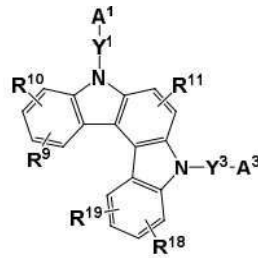
제9항에서,

상기 제2 유기 화합물은 하기 화학식 4A-1 또는 4B-c로 표현되는 조성물:

[화학식 4A-1]



[화학식 4B-c]



상기 화학식 4A-1 및 화학식 4B-c에서,

Y^1 내지 Y^3 은 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 2가의 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

A^1 내지 A^3 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 또는 이들의 조합이고,

R^9 내지 R^{11} 및 R^{15} 내지 R^{19} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합이다.

청구항 12

서로 마주하는 애노드와 캐소드, 그리고

상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 위치하는 유기층

을 포함하고,

상기 유기층은 제1항에 따른 유기 화합물 또는 제8항에 따른 조성물을 포함하는 유기 광전자 소자.

청구항 13

제12항에서,

상기 유기층은 발광층을 포함하고,

상기 유기 화합물 또는 상기 조성물은 상기 발광층의 호스트로 포함되는 유기 광전자 소자.

청구항 14

제12항에서,
 상기 유기층은
 발광층, 그리고
 상기 캐소드와 상기 발광층 사이에 위치하는 전자보조층
 을 포함하고,
 상기 전자보조층은 제1항에 따른 유기 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자.

청구항 15

제12항에 따른 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 유기 화합물, 조성물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0003] 유기 광전자 소자(organic optoelectronic diode)는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이다.

[0004] 유기 광전자 소자는 동작 원리에 따라 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 하나는 광 에너지에 의해 형성된 엑시톤(exciton)이 전자와 정공으로 분리되고 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되면서 전기 에너지를 발생하는 광전 소자이고, 다른 하나는 전극에 전압 또는 전류를 공급하여 전기 에너지로부터 광 에너지를 발생하는 발광 소자이다.

[0005] 유기 광전자 소자의 예로는 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 및 유기 감광체 드럼(organic photo conductor drum) 등을 들 수 있다.

[0006] 이 중, 유기 발광 소자(organic light emitting diode, OLED)는 근래 평판 표시 장치(flat panel display device)의 수요 증가에 따라 크게 주목받고 있다. 유기 발광 소자는 전기 에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서, 유기 발광 소자의 성능은 전극 사이에 위치하는 유기 재료에 의해 많은 영향을 받는다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0008] 일 구현예는 고효율 및 장수명 유기 광전자 소자를 구현할 수 있는 유기 화합물을 제공한다.

[0009] 다른 구현예는 고효율 및 장수명 유기 광전자 소자를 구현할 수 있는 조성물을 제공한다.

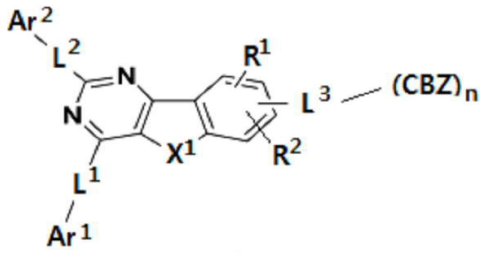
[0010] 또 다른 구현예는 상기 유기 화합물 또는 조성물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

[0011] 또 다른 구현예는 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를 제공한다.

과제의 해결 수단

[0013] 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표현되는 유기 화합물을 제공한다.

[0014] [화학식 1]



[0015]

[0016] 상기 화학식 1에서,

[0017] X^1 은 O 또는 S이고,

[0018] Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 또는 이들의 조합이고,

[0019] L^1 및 L^2 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기 또는 이들의 조합이고,

[0020] L^3 는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기 또는 이들의 조합이고,

[0021] R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 시아노기 또는 이들의 조합이고,

[0022] CBZ는 치환 또는 비치환된 카바졸릴기(단, 카바졸릴기로 치환된 카바졸릴기는 제외한다)이고,

[0023] n은 0 내지 3의 정수이고, 단 n이 0일 때 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이다.

[0024] 다른 구현예에 따르면, 상기 제1 유기 화합물 및 하기 화학식 4로 표현되는 카바졸 모이어티를 포함하는 제2 유기 화합물을 포함하는 조성물을 제공한다.

[0025] [화학식 4]



[0026]

[0027] 상기 화학식 4에서,

[0028] Y^1 은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기 또는 2가의 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

[0029] A^1 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

[0030] R^9 내지 R^{14} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

[0031] R^9 및 R^{10} 은 각각 독립적으로 존재하거나 서로 융합하여 고리를 형성하고,

[0032] R^{11} 내지 R^{14} 는 각각 독립적으로 존재하거나 R^{11} 내지 R^{14} 중 인접한 기끼리 연결되어 고리를 형성한다.

[0033] 다른 구현예에 따르면, 서로 마주하는 애노드와 캐소드, 그리고 상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 위치하는 유

기층을 포함하고, 상기 유기층은 상기 유기 화합물 또는 상기 조성물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

[0034] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를 제공한다.

발명의 효과

[0036] 저구동전압, 고효율 및 장수명의 유기 광전자 소자를 구현할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0038] 도 1 및 도 2는 각각 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 도시한 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0039] 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

[0040] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C6 내지 C30 아릴실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C3 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 시아노기, 또는 이들의 조합으로 치환된 것을 의미한다.

[0041] 본 발명의 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C6 내지 C30 아릴실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C3 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C30 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C5 알킬기, C6 내지 C18 아릴기, 피리디닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 디벤조퓨란일기, 디벤조티오펜일기 또는 카바졸일기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C5 알킬기, C6 내지 C18 아릴기, 디벤조퓨란일기 또는 디벤조티오펜일기로 치환된 것을 의미한다. 또한, 본 발명의 구체적인 일 예에서, "치환"은 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 메틸기, 에틸기, 프로판일기, 부틸기, 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 트리페닐기, 디벤조퓨란일기 또는 디벤조티오펜일기로 치환된 것을 의미한다.

[0042] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

[0043] 본 명세서에서 "아릴(aryl)기"는 탄화수소 방향족 모이어티를 하나 이상 갖는 그룹을 총괄하는 개념으로서, 탄화수소 방향족 모이어티의 모든 원소가 p-오비탈을 가지면서, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 형태, 예컨대 페닐기, 나프틸기 등을 포함하고, 2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 시그마 결합을 통하여 연결된 형태, 예컨대 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기 등을 포함하며, 2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 직접 또는 간접적으로 융합된 비방향족 융합 고리, 예컨대 플루오레닐기 등을 포함할 수 있다.

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

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

[0046] 일 예로 "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개를 함유하는 것을 의미한다. 2 이상의 헤테로아릴기는 시그마 결합을 통하여 직접 연결되거나, 상기 헤테로아릴기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.

[0047] 상기 헤테로고리기는 구체적인 예를 들어, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 포함할 수 있다.

[0048] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및/또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기는, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 o-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 페틸레닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기, 치환 또는 비치환된 페녹사진일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

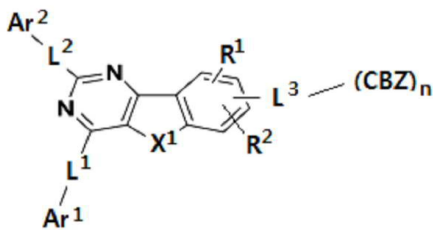
[0049] 본 명세서에서, 정공 특성이란, 전기장(electric field)을 가했을 때 전자를 공여하여 정공을 형성할 수 있는 특성을 말하는 것으로, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입, 발광층에서 형성된 정공의 양극으로의 이동 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

[0050] 또한, 전자 특성이란, 전기장을 가했을 때 전자를 받을 수 있는 특성을 말하는 것으로, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입, 발광층에서 형성된 전자의 음극으로의 이동 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

[0051] 이하 일 구현예에 따른 유기 화합물을 설명한다.

[0052] 일 구현예에 따른 유기 화합물은 하기 화학식 1로 표현된다.

[0053] [화학식 1]



[0054]

[0055] 상기 화학식 1에서,

[0056] X¹은 0 또는 S이고,

[0057] Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 또는 이들의 조합이고,

[0058] L¹ 및 L²는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

[0059] L³는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

[0060] R¹ 및 R²는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내

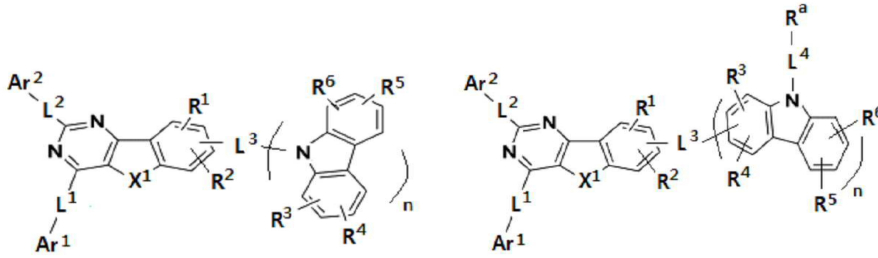
지 C30 아틸기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 시아노기 또는 이들의 조합이고,

- [0061] CBZ는 치환 또는 비치환된 카바졸릴기(단, 카바졸릴기로 치환된 카바졸릴기는 제외한다)이고,
- [0062] n은 0 내지 3의 정수이고, 단 n이 0일 때 Ar^1 및 Ar^2 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이다.
- [0063] 본 발명의 일예에서, 치환은 적어도 하나의 수소가 C1 내지 C5 알킬기, C6 내지 C18 아틸기 또는 시아노기로 치환된 것일 수 있다.
- [0064] 화학식 1로 표현되는 유기 화합물은 치환된 피리미딘 고리와 벤조퓨란 또는 벤조티오펜이 결합된 융합 고리를 포함함으로써 빠른 전자 수송 특성을 나타낼 수 있고 상기 융합고리의 벤조퓨란 또는 벤조티오펜 측으로 치환 또는 비치환된 카바졸릴기가 결합됨으로써 더욱 빠른 전자 수송 특성을 나타낼 수 있다. 그에 따라 유기 화합물을 소자에 적용하는 경우 낮은 구동 전압 및 높은 효율의 소자를 구현할 수 있다.
- [0065] 또한, 화학식 1로 표현되는 유기 화합물은 비교적 높은 유리전이온도를 가짐으로써 유기 화합물을 소자에 적용하는 경우 공정 또는 구동 중 유기 화합물의 열화를 줄이거나 방지하여 열적 안정성을 높이고 소자의 수명을 개선할 수 있다. 일 예로, 유기 화합물은 약 50 내지 300°C의 유리전이온도를 가질 수 있다.
- [0066] 일 예로, 화학식 1의 Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸기일 수 있고, 예컨대 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기 또는 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기일 수 있다. 여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C12 아틸기 또는 시아노기로 치환된 것일 수 있다.
- [0067] 일 예로, 화학식 1의 L^1 및 L^2 는 각각 독립적으로 단일 결합 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기일 수 있다. 예컨대 L^1 및 L^2 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기일 수 있다. 예컨대 L^1 및 L^2 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 m-페닐렌기, 치환 또는 비치환된 p-페닐렌기, 치환 또는 비치환된 m-바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 p-바이페닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 나프틸렌기일 수 있다. 여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C12 아틸기 또는 시아노기로 치환된 것일 수 있다.
- [0068] 일 예로, 화학식 1의 L^3 는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기일 수 있다. 예컨대 L^1 은 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기일 수 있다. 예컨대 L^3 는 치환 또는 비치환된 m-페닐렌기, 치환 또는 비치환된 p-페닐렌기, 치환 또는 비치환된 m-바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 p-바이페닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 나프틸렌기일 수 있다. 여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C12 아틸기 또는 시아노기로 치환된 것일 수 있다.
- [0069] 일 예로, 화학식 1의 R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 시아노기 또는 이들의 조합일 수 있다.
- [0070] 일 예로, 화학식 1의 CBZ는 카바졸릴기 또는 아틸기로 치환된 카바졸릴기일 수 있고, 예컨대 카바졸릴기 또는 페닐 치환된 카바졸릴기일 수 있다.
- [0071] 일 예로, 화학식 1의 n은 1, 2 또는 3일 수 있다.
- [0072] 일 예로, 화학식 1의 n은 1 또는 2일 수 있다.
- [0073] 일 예로, 화학식 1의 n은 0일 수 있고, Ar^1 및 Ar^2 중 어느 하나는 치환 또는 비치환된 카바졸릴기일 수 있다.
- [0074] 일 예로, 화학식 1의 n은 1 또는 2일 수 있고, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 C6 내지 C30 아틸기일 수 있다.

[0075] 유기 화합물은 예컨대 하기 화학식 2 또는 3으로 표현될 수 있다.

[0076] [화학식 2]

[화학식 3]



[0077]

[0078] 상기 화학식 2 또는 3에서,

[0079] X¹은 0 또는 S이고,

[0080] Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 또는 이들의 조합이고,

[0081] L¹ 및 L²는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

[0082] L³는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

[0083] L⁴는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 2가의 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기(단, 카바졸릴렌기는 제외한다) 또는 이들의 조합이고,

[0084] R¹ 내지 R⁶ 및 R^a는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기(단, 카바졸릴기는 제외한다), 시아노기 또는 이들의 조합이고,

[0085] n은 0 내지 3의 정수이고, 단 n이 0일 때 Ar¹ 및 Ar² 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이다.

[0086] 일 예로, 화학식 2 또는 3의 Ar¹ 및 Ar²는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기일 수 있고, 예컨대 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기 또는 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기일 수 있다. 여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C12 아릴기 또는 시아노기로 치환된 것일 수 있다.

[0087] 일 예로, 화학식 2 또는 3의 L¹, L² 및 L⁴는 각각 독립적으로 단일 결합 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기일 수 있다. 예컨대 L¹, L² 및 L⁴는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기일 수 있다. 예컨대 L¹, L² 및 L⁴는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 m-페닐렌기, 치환 또는 비치환된 p-페닐렌기, 치환 또는 비치환된 m-바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 p-바이페닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 나프틸렌기일 수 있다. 여기서 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C12 아릴기 또는 시아노기로 치환된 것일 수 있다.

[0088] 일 예로, 화학식 2 또는 3의 L³는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기일 수 있다. 예컨대 화학식 2 또는 3의 L³는 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기 또는 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기일 수 있다. 예컨대 화학식 2 또는 3의 L³는 치환 또는 비치환된 m-페닐렌기, 치환 또는 비치환된 p-페닐렌기, 치환 또는 비치환된 m-바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 p-바이페닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 나프틸렌기일 수 있다. 여기서 치환은 적어도 하나의

수소가 중수소, C1 내지 C20 알킬기, C6 내지 C12 아릴기 또는 시아노기로 치환된 것일 수 있다.

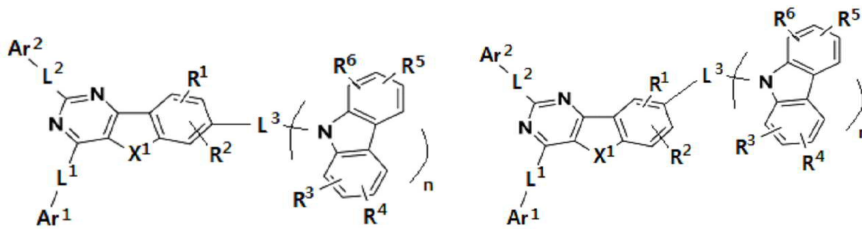
[0089] 일 예로, 화학식 2 또는 3의 R¹ 내지 R⁶는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 시아노기 또는 이들의 조합일 수 있다.

[0090] 일 예로, 화학식 3의 R^a는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 시아노기 또는 이들의 조합일 수 있다. 예컨대 R^a는 수소 또는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다.

[0091] 일 예로, 화학식 2로 표현되는 유기 화합물은 결합 위치에 따라 예컨대 하기 화학식 2a 내지 2d로 표현될 수 있다.

[0092] [화학식 2a]

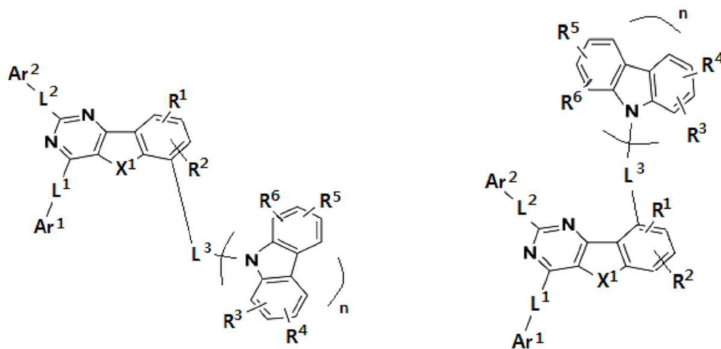
[화학식 2b]



[0093]

[0094] [화학식 2c]

[화학식 2d]



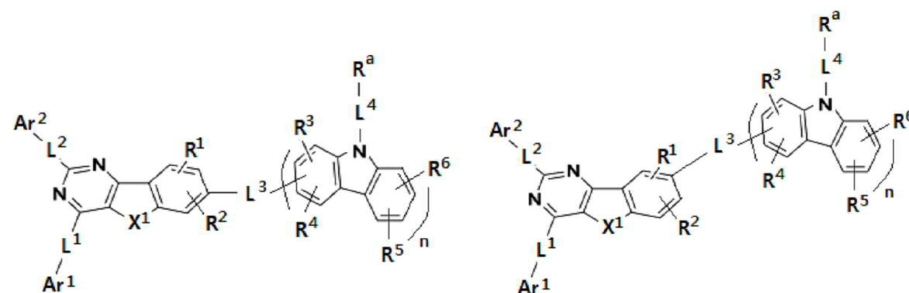
[0095]

[0096] 상기 화학식 2a 내지 2d에서, X¹, Ar¹, Ar², L¹ 내지 L³, R¹ 내지 R⁶ 및 n은 전술한 바와 같다.

[0097] 일 예로, 화학식 3으로 표현되는 유기 화합물은 결합 위치에 따라 예컨대 하기 화학식 3a 내지 3d로 표현될 수 있다.

[0098] [화학식 3a]

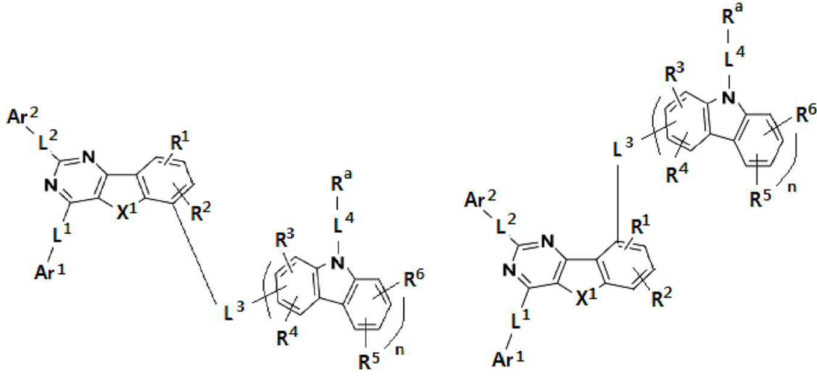
[화학식 3b]



[0099]

[0100] [화학식 3c]

[화학식 3d]



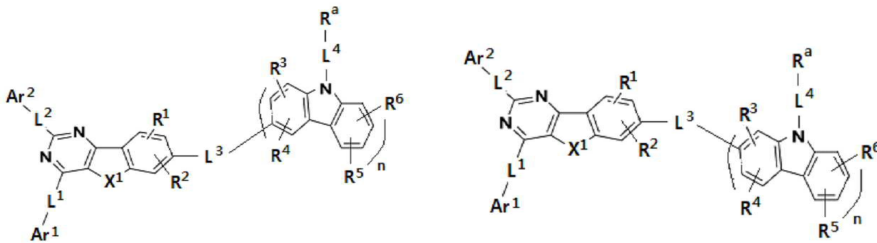
[0101]

[0102] 상기 화학식 3a 내지 3d에서, X^1 , Ar^1 , Ar^2 , L^1 내지 L^4 , R^1 내지 R^6 및 R^a 는 전술한 바와 같다.

[0103] 일 예로, 화학식 3a로 표현되는 유기 화합물은 결합 위치에 따라 예컨대 하기 화학식 3a-I 내지 3a-IV로 표현될 수 있다.

[0104] [화학식 3a-I]

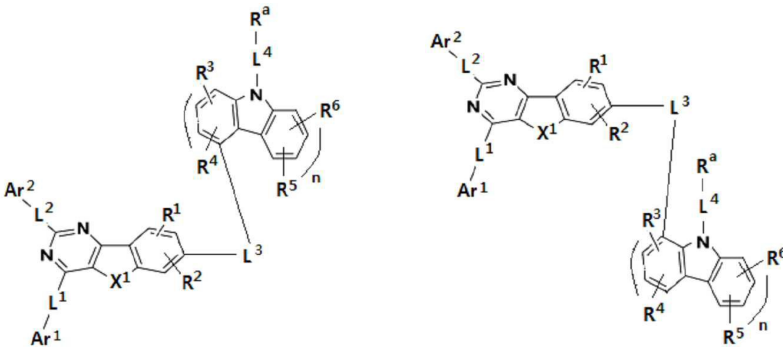
[화학식 3a-II]



[0105]

[0106] [화학식 3a-III]

[화학식 3a-IV]

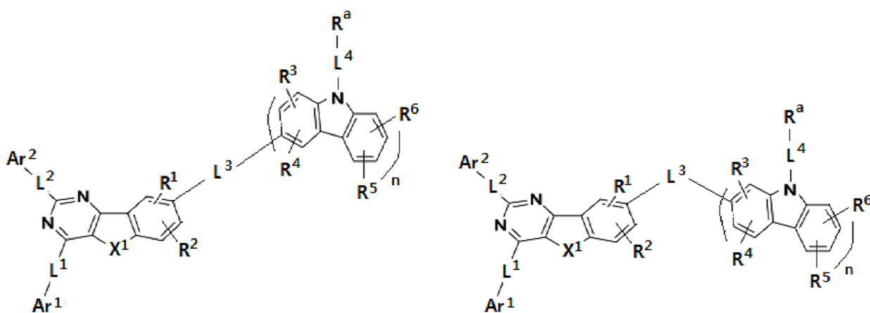


[0107]

[0108] 일 예로, 화학식 3b로 표현되는 유기 화합물은 결합 위치에 따라 예컨대 하기 화학식 3b-I 내지 3b-IV로 표현될 수 있다.

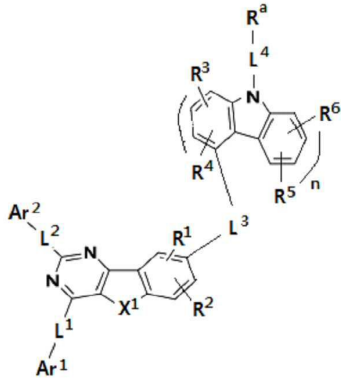
[0109] [화학식 3b-I]

[화학식 3b-II]

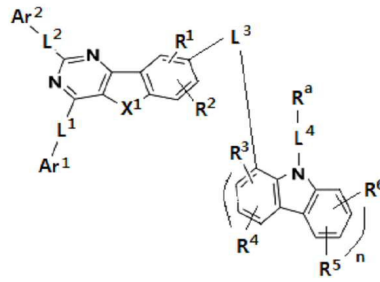


[0110]

[0111] [화학식 3b-III]



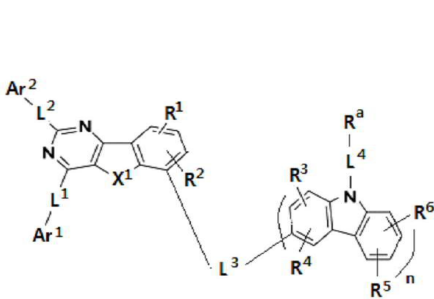
[화학식 3b-IV]



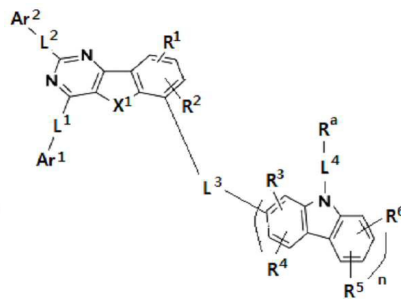
[0112]

[0113] 일 예로, 화학식 3c로 표현되는 유기 화합물은 결합 위치에 따라 예컨대 하기 화학식 3c-I 내지 3c-IV로 표현될 수 있다.

[0114] [화학식 3c-I]

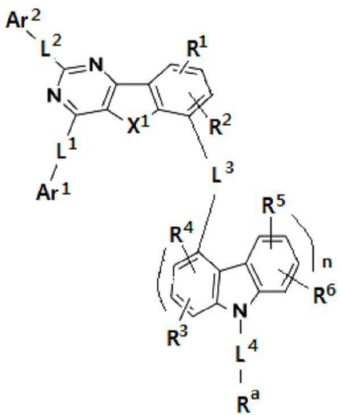


[화학식 3c-II]

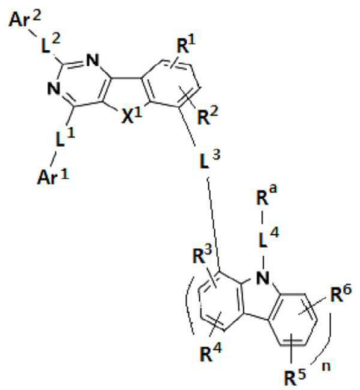


[0115]

[0116] [화학식 3c-III]



[화학식 3c-IV]

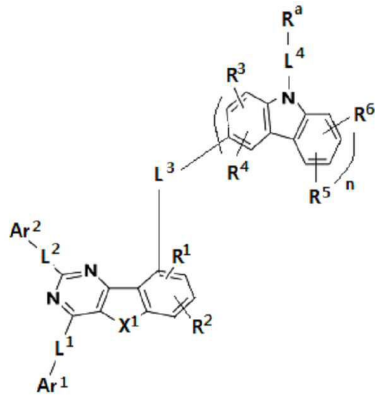


[0117]

[0118] 일 예로, 화학식 3d로 표현되는 유기 화합물은 결합 위치에 따라 예컨대 하기 화학식 3d-I 내지 3d-IV로 표현될 수 있다.

[0119] [화학식 3d-I]

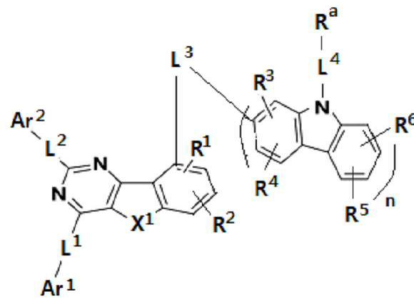
[화학식 3d-II]



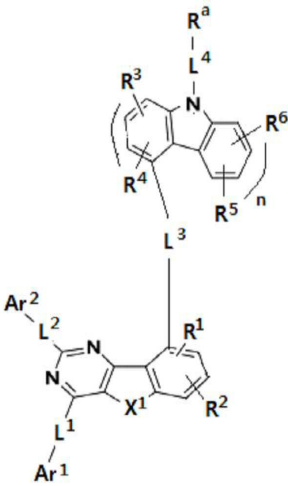
[0120]

[0121]

[화학식 3d-III]



[화학식 3d-IV]



[0122]

[0123]

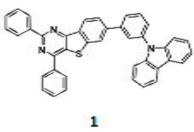
상기 화학식 3a-I 내지 3a-IV, 3b-I 내지 3b-IV, 3c-I 내지 3c-IV 및 3d-I 내지 3d-IV에서, X¹, Ar¹, Ar², L¹ 내지 L⁴, R¹ 내지 R⁶ 및 R^a는 전술한 바와 같다.

[0124]

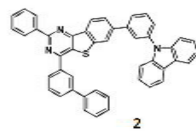
유기 화합물은 예컨대 하기 그룹 1에 나열된 화합물에서 선택된 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0125]

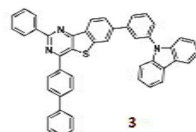
[그룹 1]



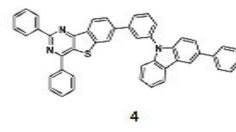
1



2

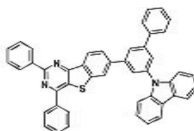


3

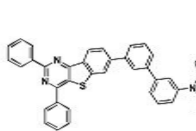


4

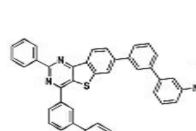
[0126]



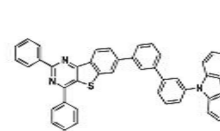
5



6

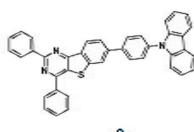


7

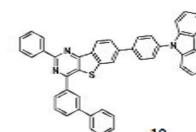


8

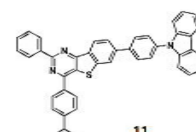
[0127]



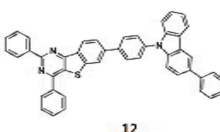
9



10

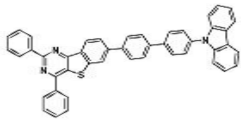


11

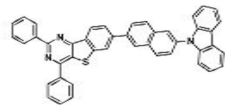


12

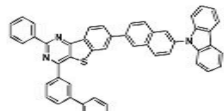
[0128]



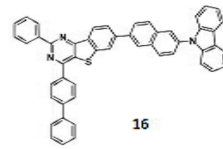
13



14

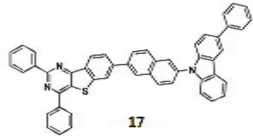


15

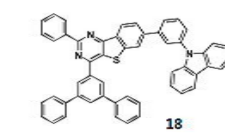


16

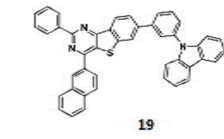
[0129]



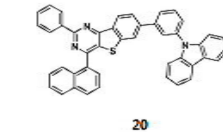
17



18

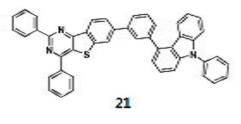


19

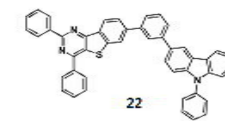


20

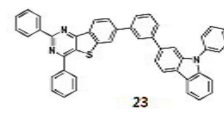
[0130]



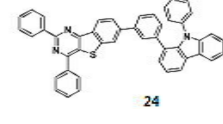
21



22

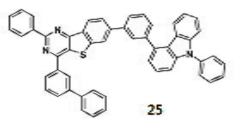


23

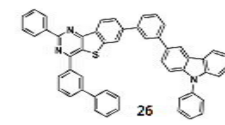


24

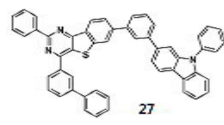
[0131]



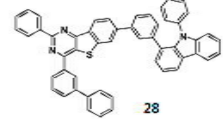
25



26

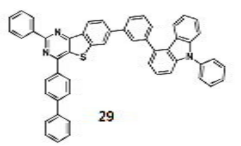


27

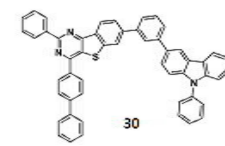


28

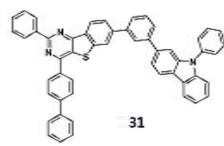
[0132]



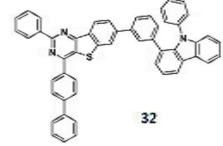
29



30

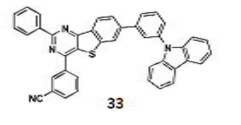


31

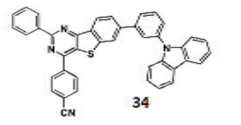


32

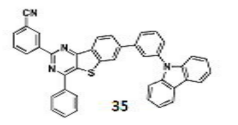
[0133]



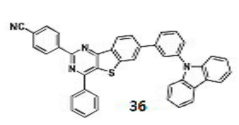
33



34

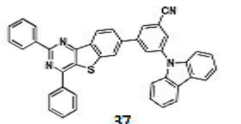


35

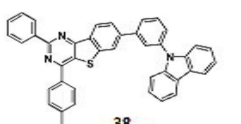


36

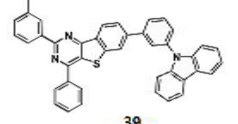
[0134]



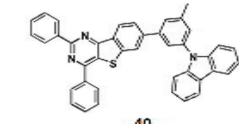
37



38

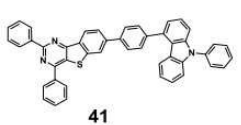


39

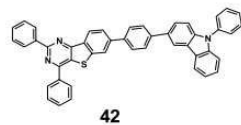


40

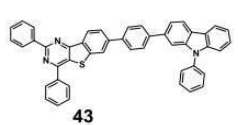
[0135]



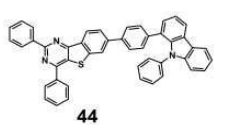
41



42

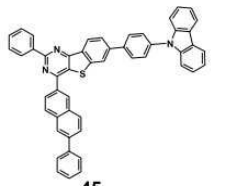


43

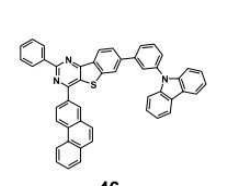


44

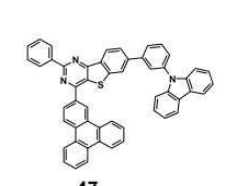
[0136]



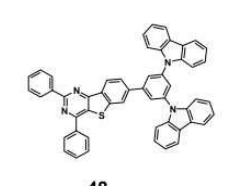
45



46

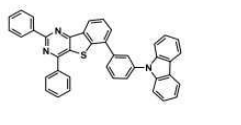


47

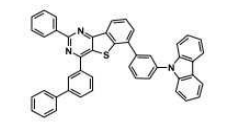


48

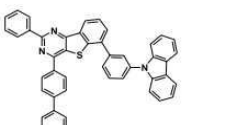
[0137]



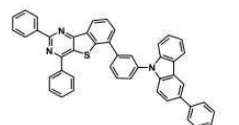
49



50



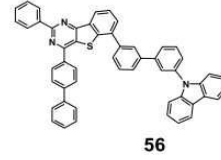
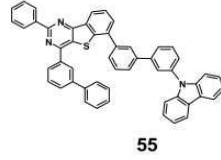
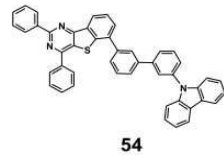
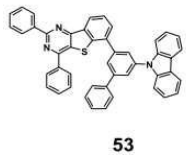
51



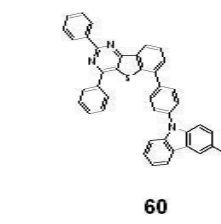
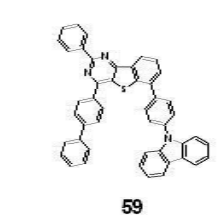
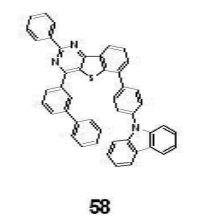
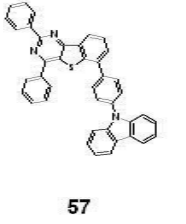
52

[0138]

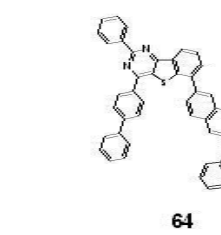
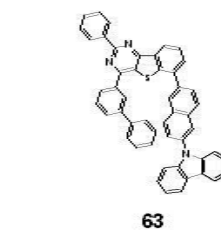
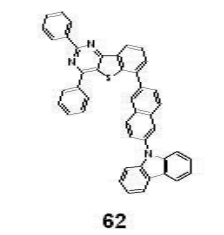
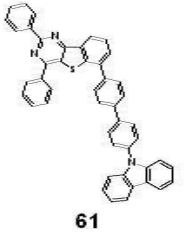
[0139]



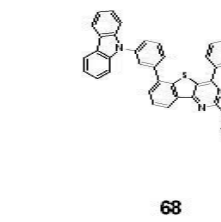
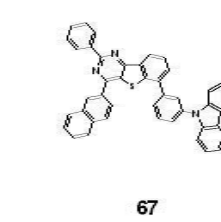
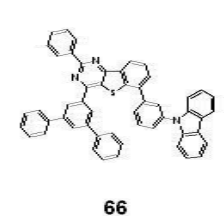
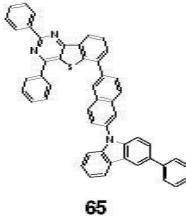
[0140]



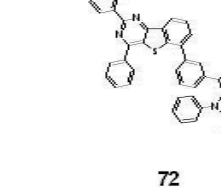
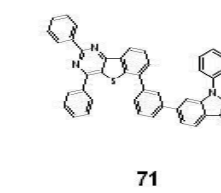
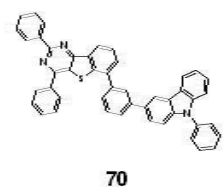
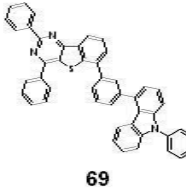
[0141]



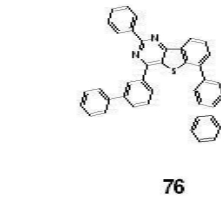
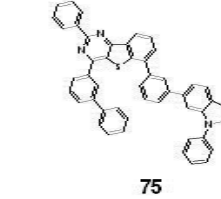
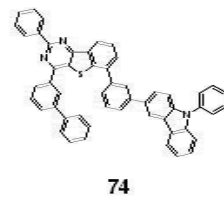
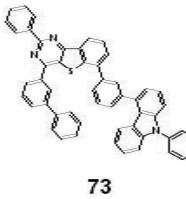
[0142]



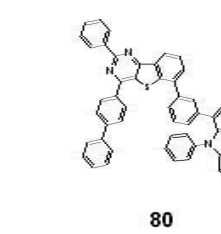
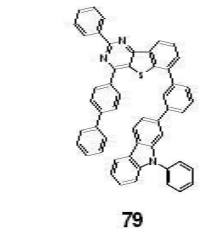
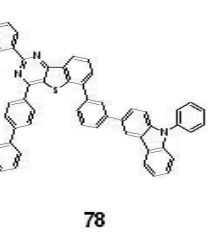
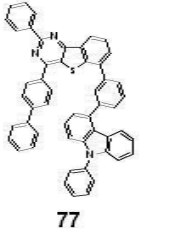
[0143]



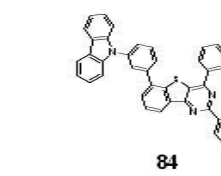
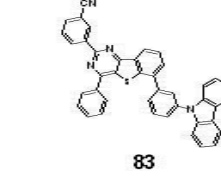
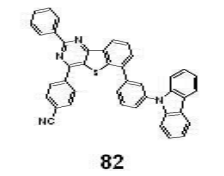
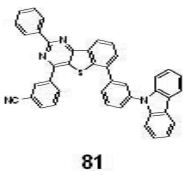
[0144]



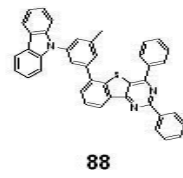
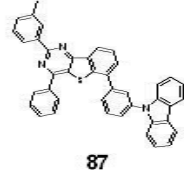
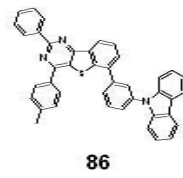
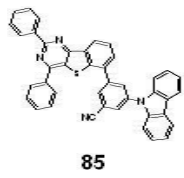
[0145]



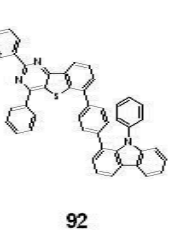
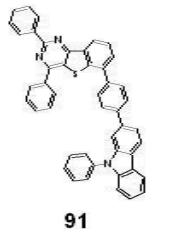
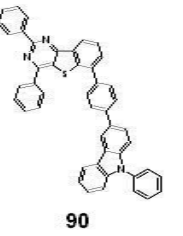
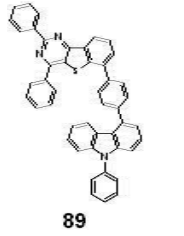
[0146]



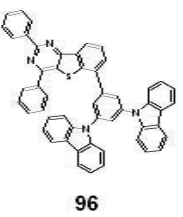
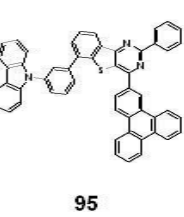
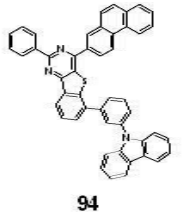
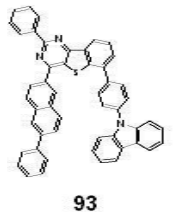
[0147]



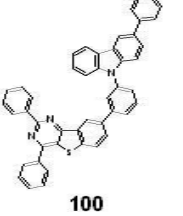
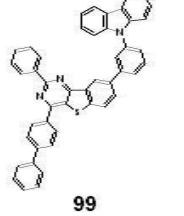
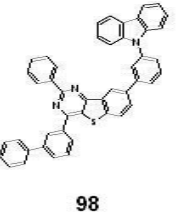
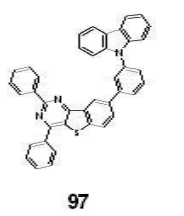
[0148]



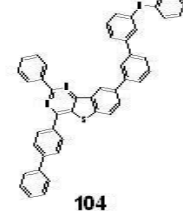
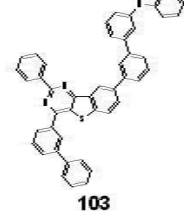
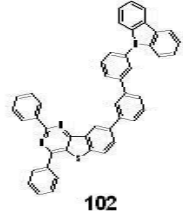
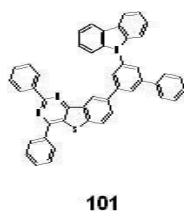
[0149]



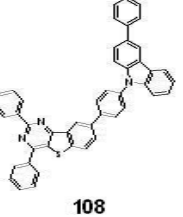
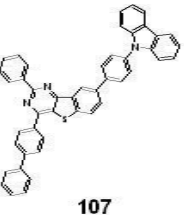
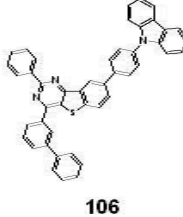
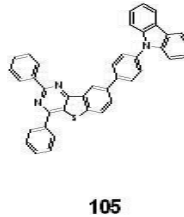
[0150]



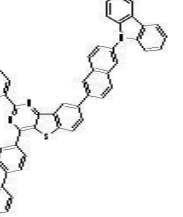
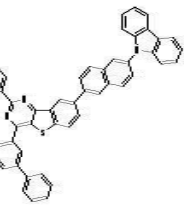
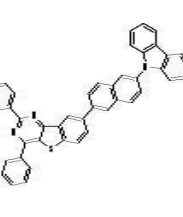
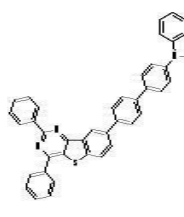
[0151]



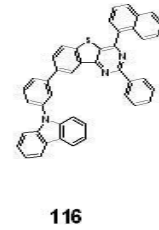
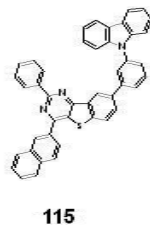
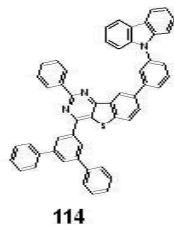
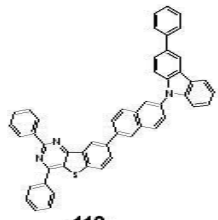
[0152]



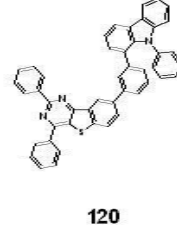
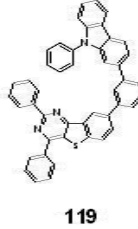
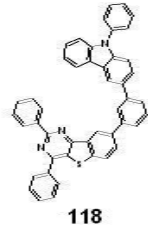
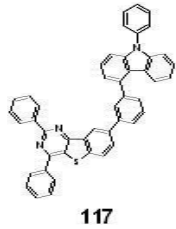
[0153]



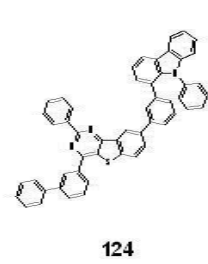
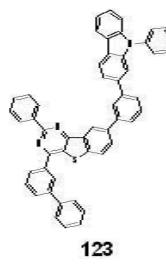
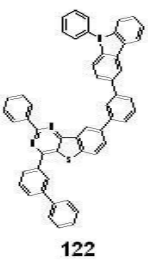
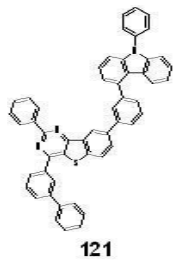
[0154]



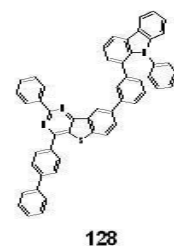
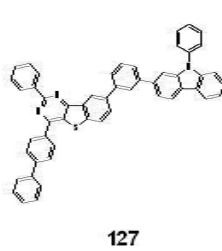
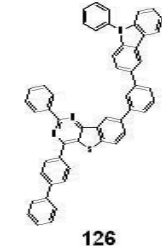
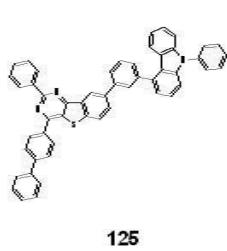
[0155]



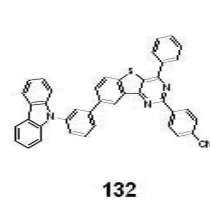
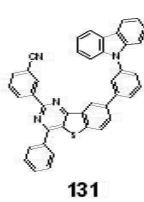
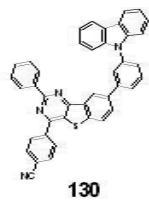
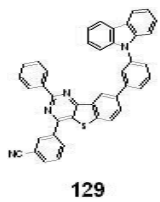
[0156]



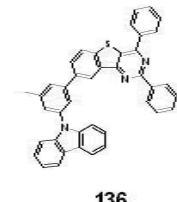
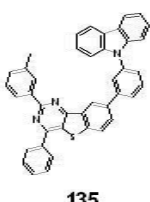
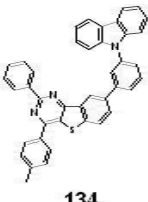
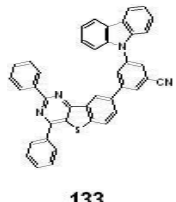
[0157]



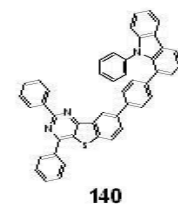
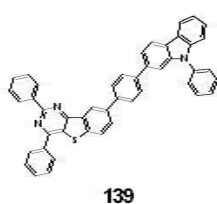
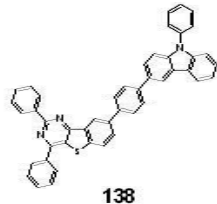
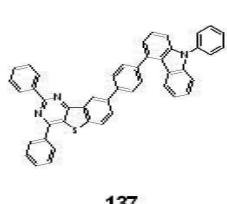
[0158]



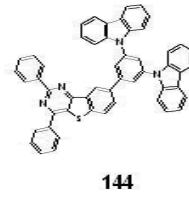
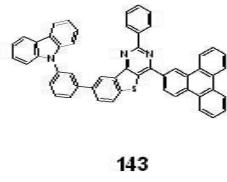
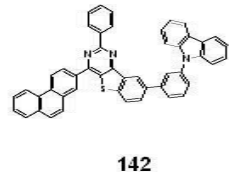
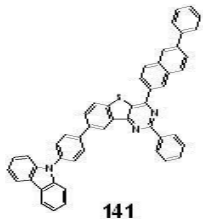
[0159]



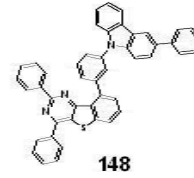
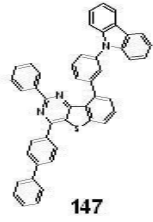
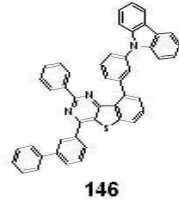
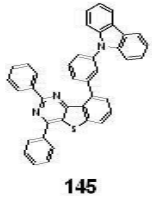
[0160]



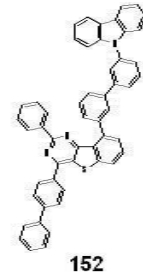
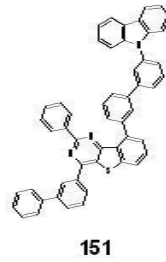
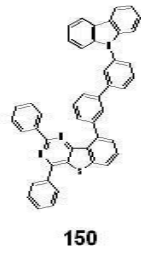
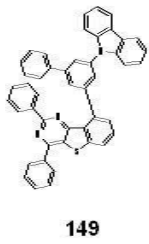
[0161]



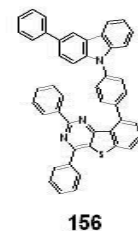
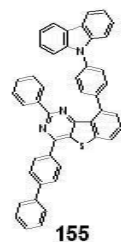
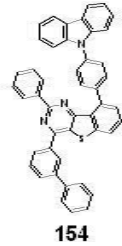
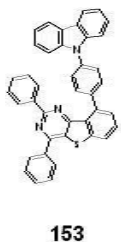
[0162]



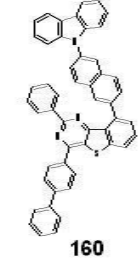
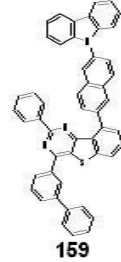
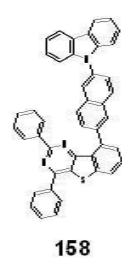
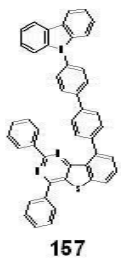
[0163]



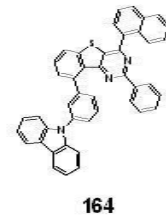
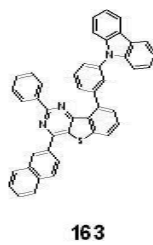
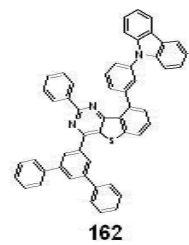
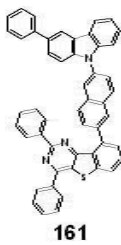
[0164]



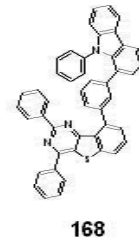
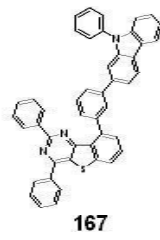
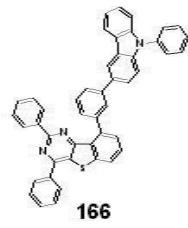
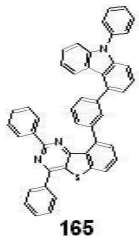
[0165]



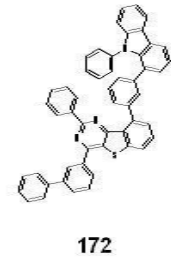
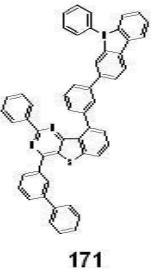
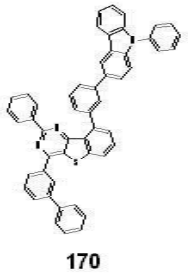
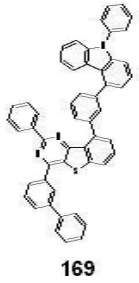
[0166]



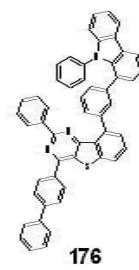
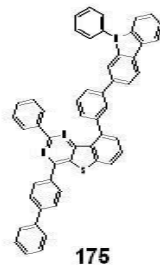
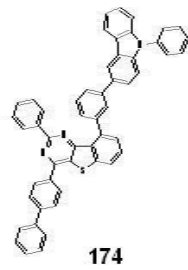
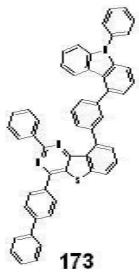
[0167]



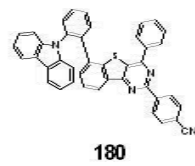
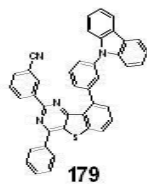
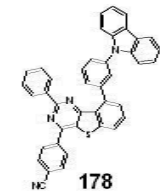
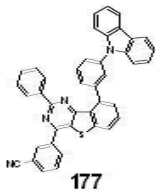
[0168]



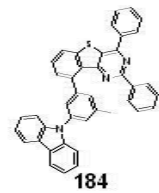
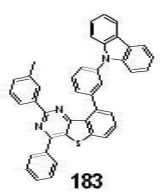
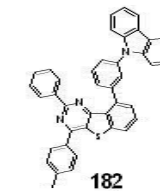
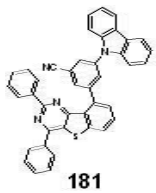
[0169]



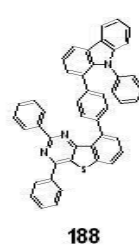
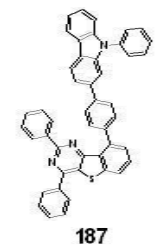
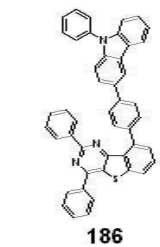
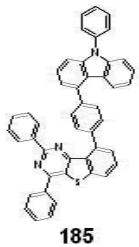
[0170]

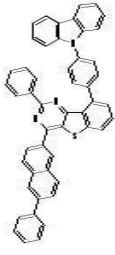


[0171]

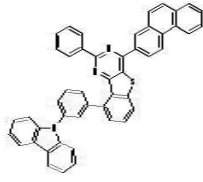


[0172]

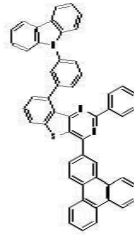




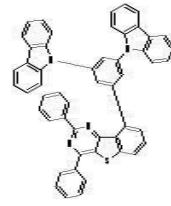
189



190

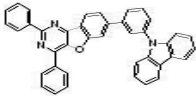


191

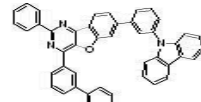


192

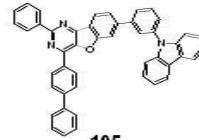
[0173]



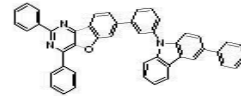
193



194

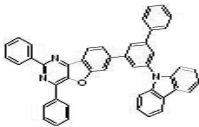


195

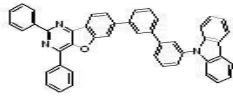


196

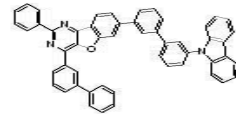
[0174]



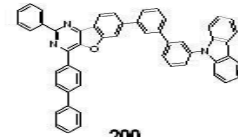
197



198

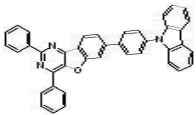


199

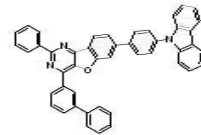


200

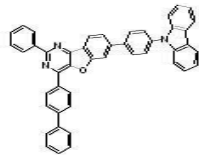
[0175]



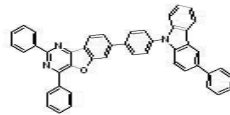
201



202

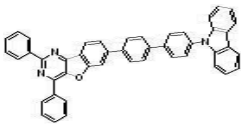


203

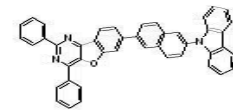


204

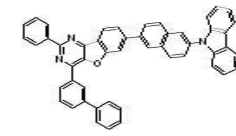
[0176]



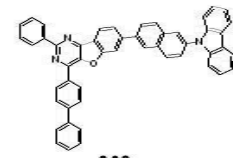
205



206

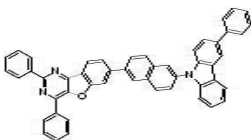


207

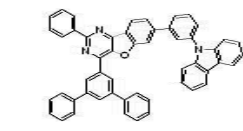


208

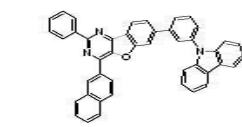
[0177]



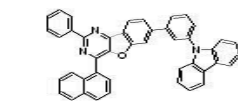
209



210

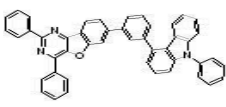


211

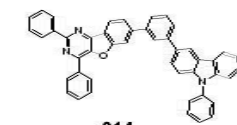


212

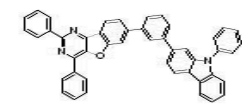
[0178]



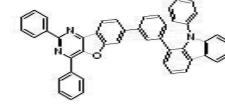
213



214

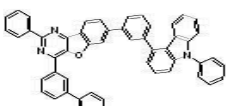


215

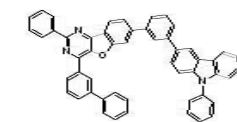


216

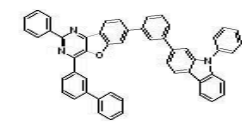
[0179]



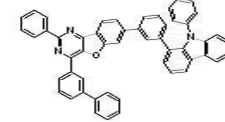
217



218

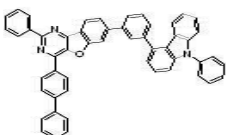


219

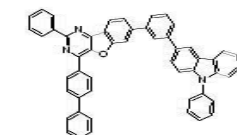


220

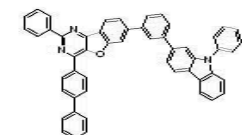
[0180]



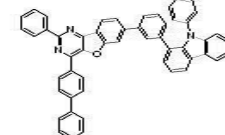
221



222

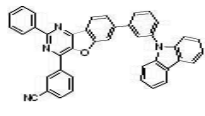


223

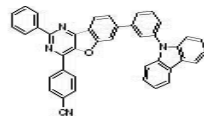


224

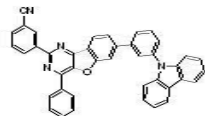
[0181]



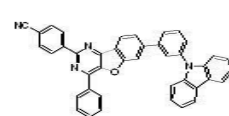
225



226

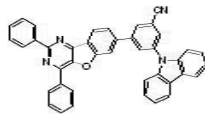


227

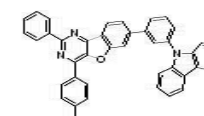


228

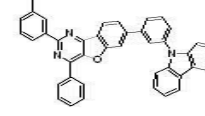
[0182]



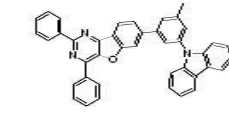
229



230

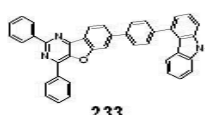


231

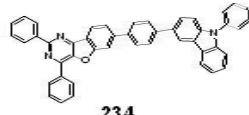


232

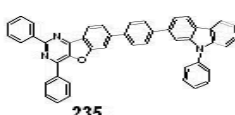
[0183]



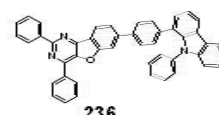
233



234

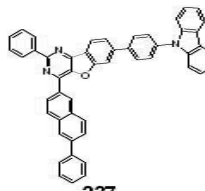


235

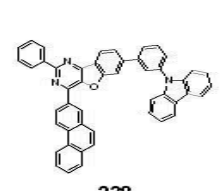


236

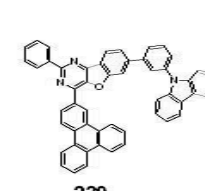
[0184]



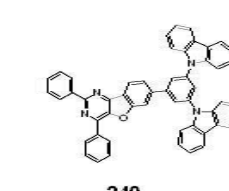
237



238

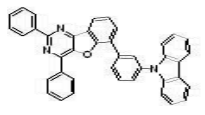


239

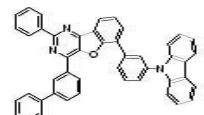


240

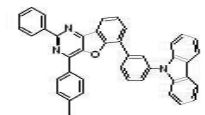
[0185]



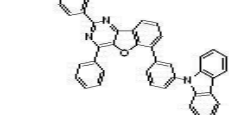
241



242

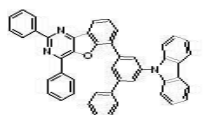


243

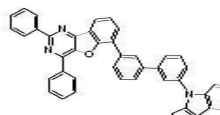


244

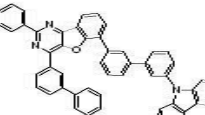
[0186]



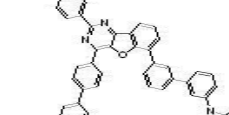
245



246

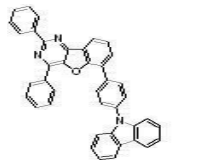


247

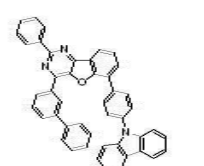


248

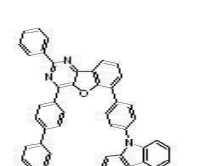
[0187]



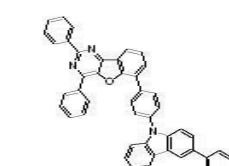
249



250

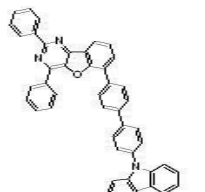


251

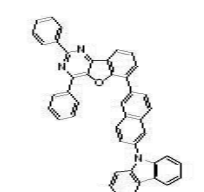


252

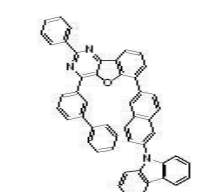
[0188]



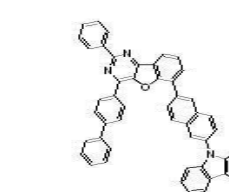
253



254

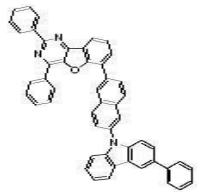


255

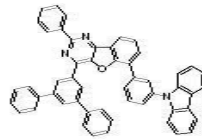


256

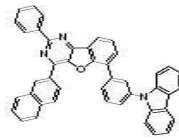
[0189]



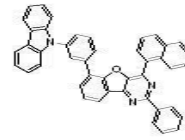
257



258

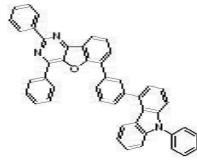


259

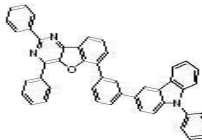


260

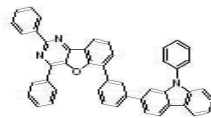
[0190]



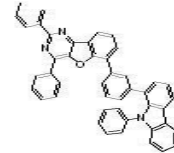
261



262

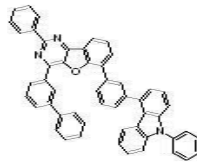


263

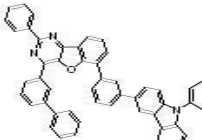


264

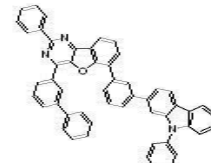
[0191]



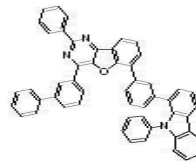
265



266

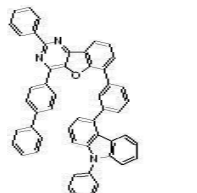


267

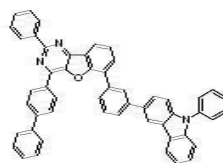


268

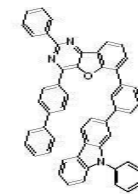
[0192]



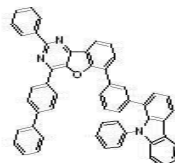
269



270

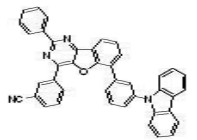


271

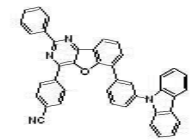


272

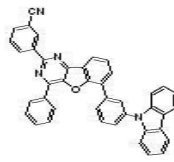
[0193]



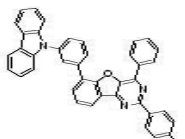
273



274

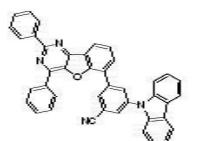


275

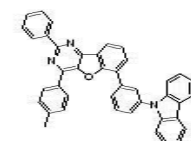


276

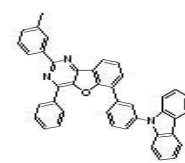
[0194]



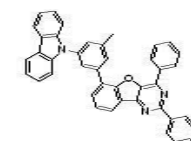
277



278

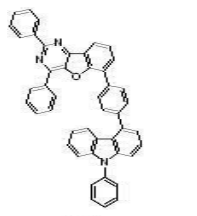


279

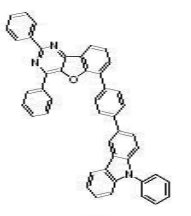


280

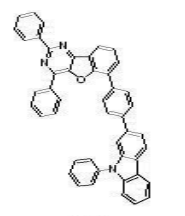
[0195]



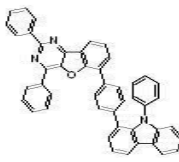
281



282

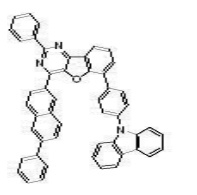


283

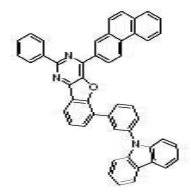


284

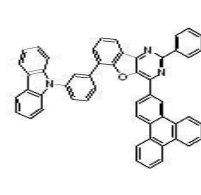
[0196]



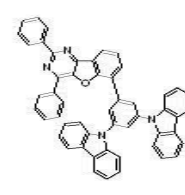
285



286

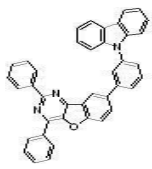


287

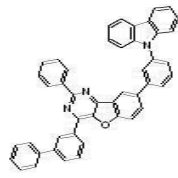


288

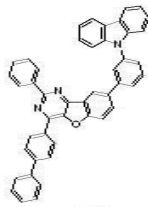
[0197]



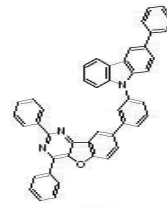
289



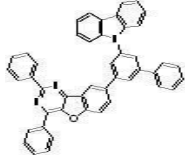
290



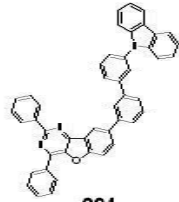
291



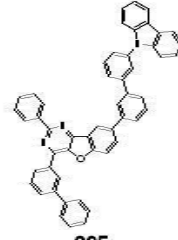
292



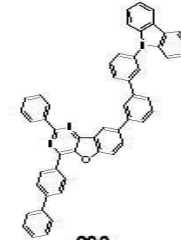
293



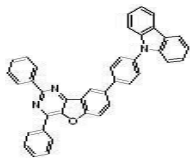
294



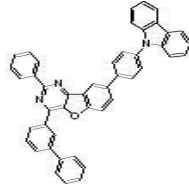
295



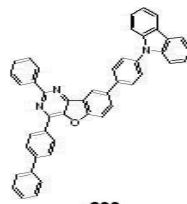
296



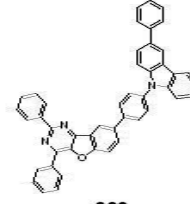
297



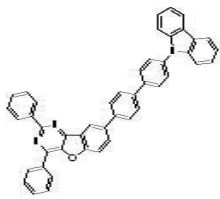
298



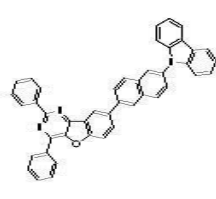
299



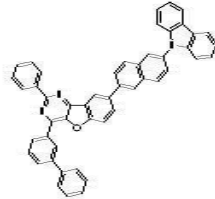
300



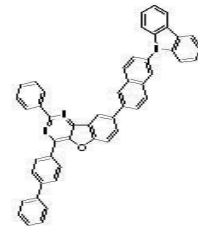
301



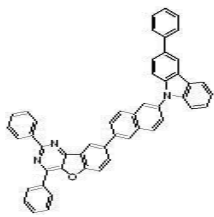
302



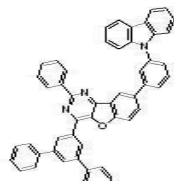
303



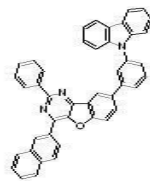
304



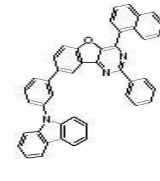
305



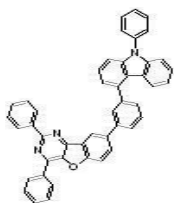
306



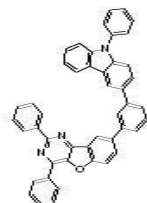
307



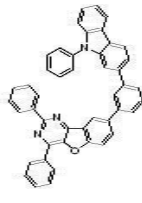
308



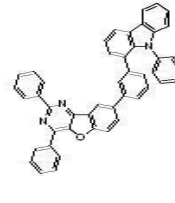
309



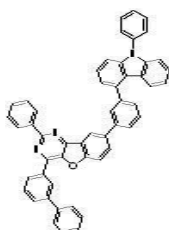
310



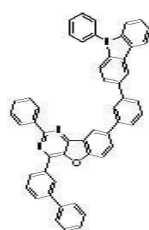
311



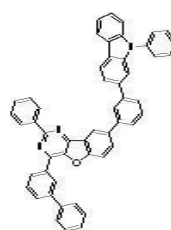
312



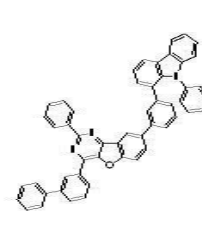
313



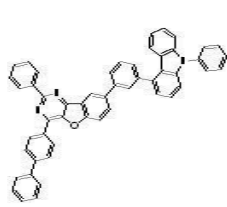
314



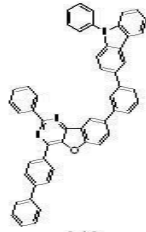
315



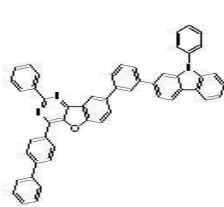
316



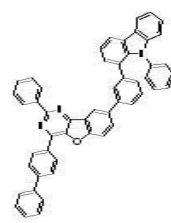
317



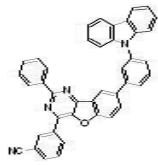
318



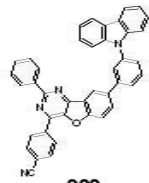
319



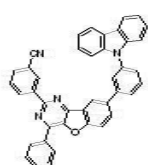
320



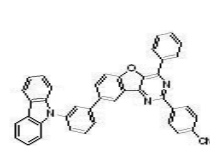
321



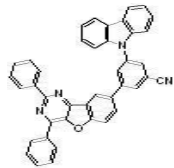
322



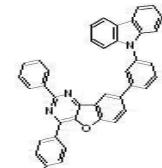
323



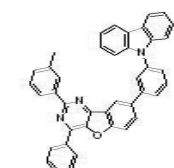
324



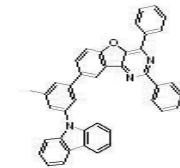
325



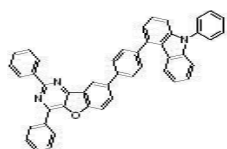
326



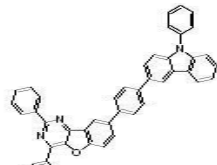
327



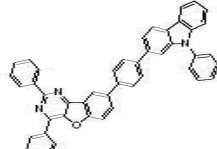
328



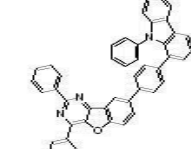
329



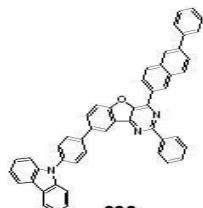
330



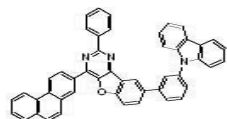
331



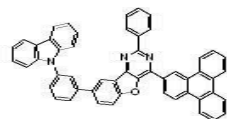
332



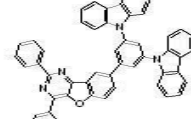
333



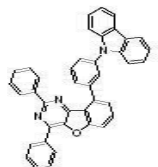
334



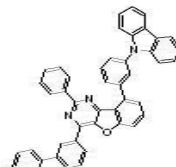
335



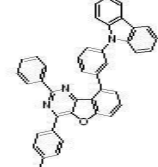
336



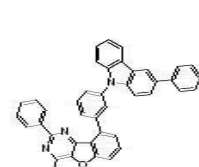
337



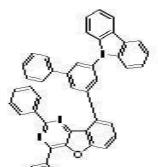
338



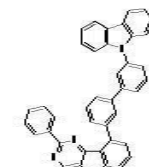
339



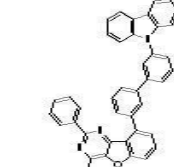
340



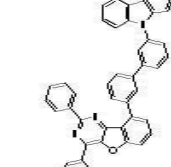
341



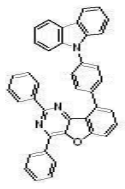
342



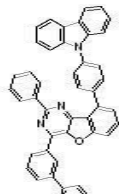
343



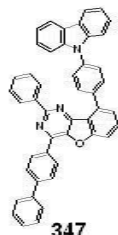
344



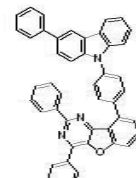
345



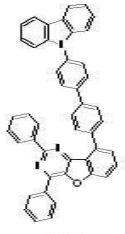
346



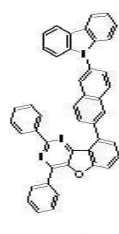
347



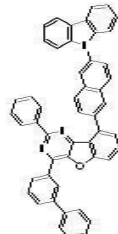
348



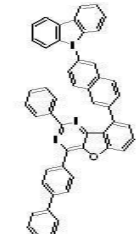
349



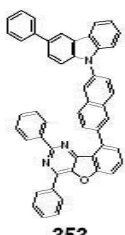
350



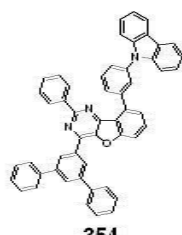
351



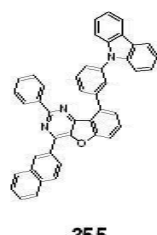
352



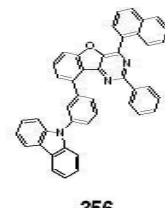
353



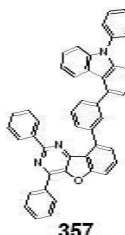
354



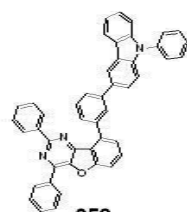
355



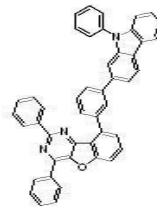
356



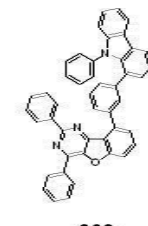
357



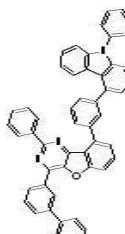
358



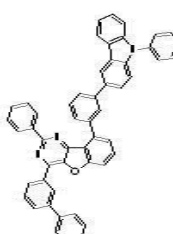
359



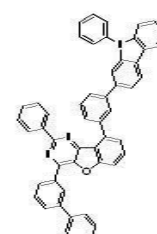
360



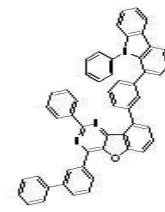
361



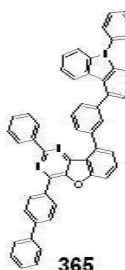
362



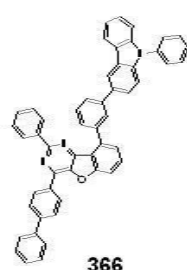
363



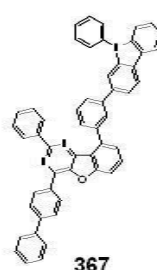
364



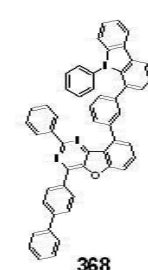
365



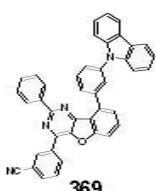
366



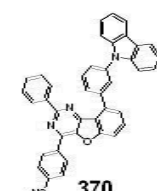
367



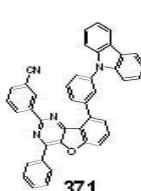
368



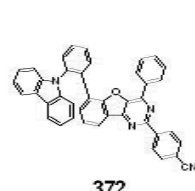
369



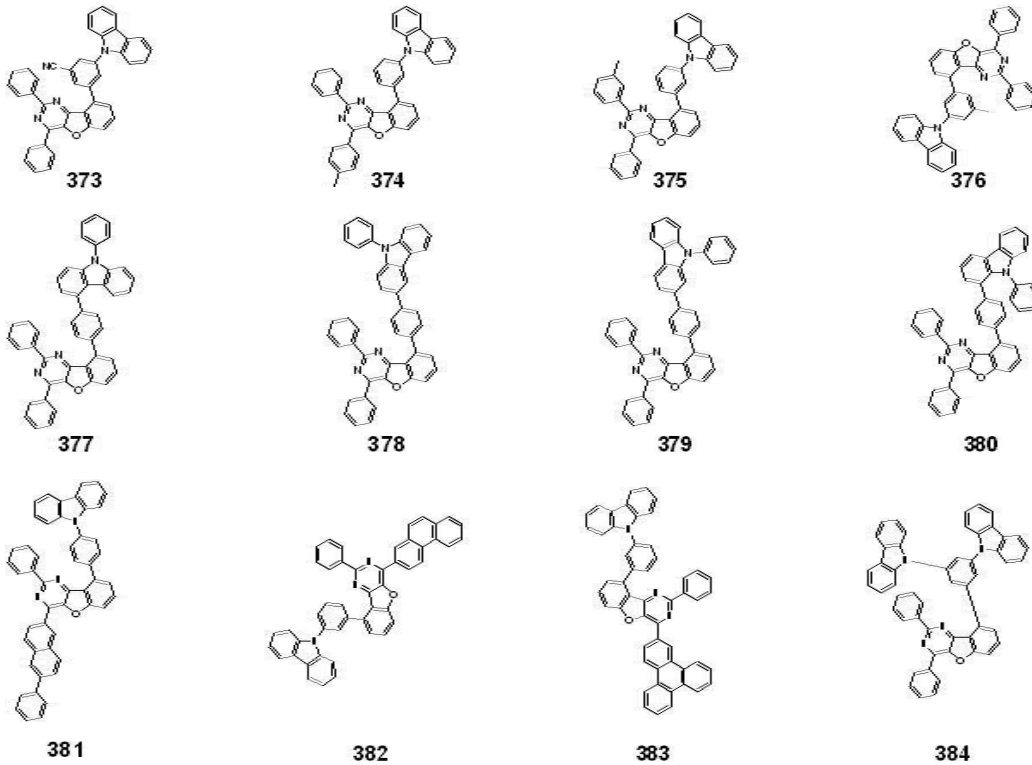
370



371



372



[0198] 전술한 유기 화합물은 단독으로 또는 다른 유기 화합물과 함께 유기 광전자 소자에 적용될 수 있다. 전술한 유기 화합물이 다른 유기 화합물과 함께 사용되는 경우, 조성물의 형태로 적용될 수 있다.

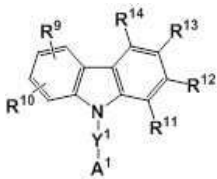
[0199] 이하 일 구현예에 따른 조성물을 설명한다.

[0200] 일 구현예에 따른 조성물은 전술한 유기 화합물(이하 "제1 유기 화합물"이라 한다)와 정공 특성을 가지는 유기 화합물(이하 "제2 유기 화합물"이라 한다)을 포함할 수 있다.

[0201] 제2 유기 화합물은 예컨대 카바졸 모이어티를 포함할 수 있고 예컨대 치환 또는 비치환된 카바졸 화합물, 치환 또는 비치환된 비스카바졸 화합물 또는 치환 또는 비치환된 인돌로카바졸 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0202] 일 예로, 제2 유기 화합물은 예컨대 하기 화학식 4로 표현되는 카바졸 모이어티를 포함할 수 있다.

[0203] [화학식 4]



[0204]

[0205] 상기 화학식 4에서,

[0206] Y¹은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 2가의 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

[0207] A¹은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

[0208] R⁹ 내지 R¹⁴는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

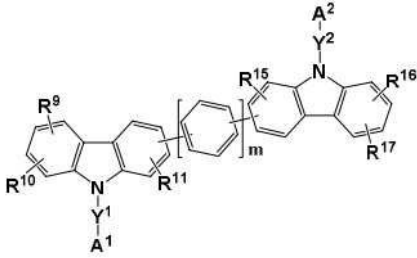
[0209] R⁹ 및 R¹⁰은 각각 독립적으로 존재하거나 서로 융합하여 고리를 형성하고,

[0210] R^{11} 내지 R^{14} 는 각각 독립적으로 존재하거나 R^{11} 내지 R^{14} 중 인접한 기끼리 연결되어 고리를 형성한다.

[0211] 일 예로 화학식 4의 정의에서, 치환은 적어도 하나의 수소가 중수소, C1 내지 C10 알킬기, C6 내지 C12 아릴기 또는 C2 내지 C10 헤테로아릴기로 치환된 것일 수 있고, 예컨대 적어도 하나의 수소가 중수소, 페닐기, ortho-바이페닐기, meta-바이페닐기, para-바이페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 디벤조퓨란일기 또는 디벤조티오펜일기로 치환된 것일 수 있다.

[0212] 일 예로, 제2 유기 화합물은 하기 화학식 4A로 표현되는 화합물일 수 있다.

[0213] [화학식 4A]



[0214]

[0215] 상기 화학식 4A에서,

[0216] Y^1 및 Y^2 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 2가의 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합일 수 있고,

[0217] A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합일 수 있고,

[0218] R^9 내지 R^{11} 및 R^{15} 내지 R^{17} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합일 수 있고,

[0219] m은 0 내지 2의 정수일 수 있다.

[0220] 일 예로, 화학식 4A의 Y^1 및 Y^2 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기일 수 있고, 예컨대 단일 결합, meta-페닐렌기, para-페닐렌기, meta-바이페닐렌기 또는 para-바이페닐렌기일 수 있다.

[0221] 일 예로, 화학식 4A의 A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 또는 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 또는 이들의 조합일 수 있다. 예컨대 화학식 4A의 A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기 또는 치환 또는 비치환된 카바졸일기일 수 있다.

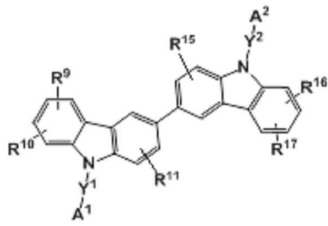
[0222] 일 예로, 화학식 4A의 R^9 내지 R^{11} 및 R^{15} 내지 R^{17} 은 수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기일 수 있고, 예컨대 모두 수소일 수 있다.

[0223] 일 예로, 화학식 4A의 m은 0 또는 1일 수 있고, 예컨대 m은 0일 수 있다.

[0224] 일 예로, 화학식 4A에서 두 개의 카바졸기의 결합 위치는 2,3-결합, 3,3-결합 또는 2,2-결합일 수 있으며, 예컨대 3,3-결합일 수 있다.

[0225] 일 예로, 화학식 4A로 표현되는 화합물은 하기 화학식 4A-1로 표현될 수 있다.

[0226] [화학식 4A-1]

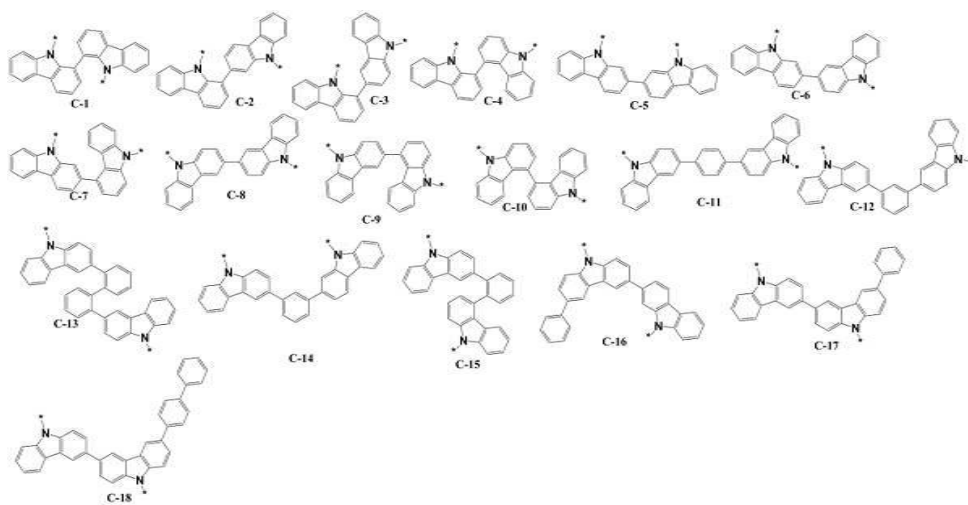


[0227]

[0228] 상기 화학식 4A-1에서, Y¹, Y², A¹, A², R⁹ 내지 R¹¹ 및 R¹⁵ 내지 R¹⁷은 전술한 바와 같다.

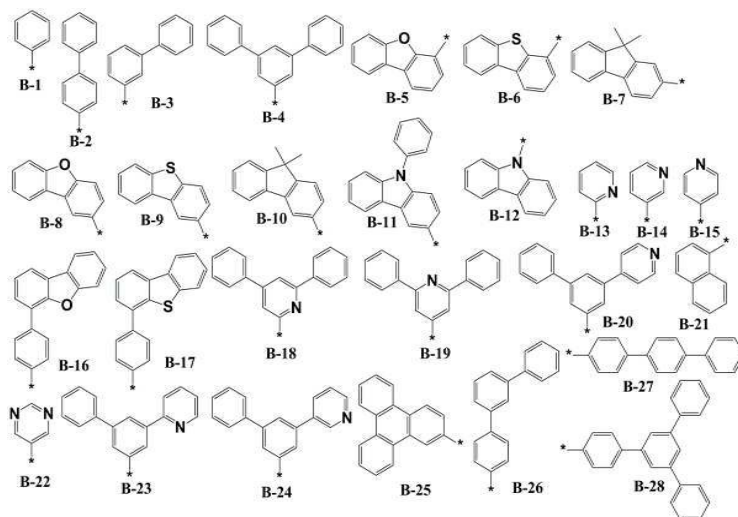
[0229] 일 예로, 화학식 4A로 표현되는 화합물은 하기 그룹 2에 나열된 카바졸 코어 중 하나와 하기 그룹 3에 나열된 치환기(*-Y¹-A¹ 및 *-Y²-A²)를 조합한 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0230] [그룹 2]



[0231]

[0232] [그룹 3]



[0233]

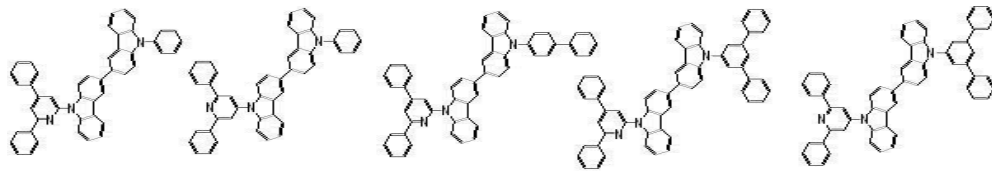
[0234] 그룹 2 및 3에서, *는 연결 지점이다.

[0235] 일 예로, 화학식 4A로 표현되는 화합물은 예컨대 하기 그룹 4에 나열된 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0236] [그룹 4]

[0237] [E-1] [E-2] [E-3] [E-4] [E-5]

[0238]

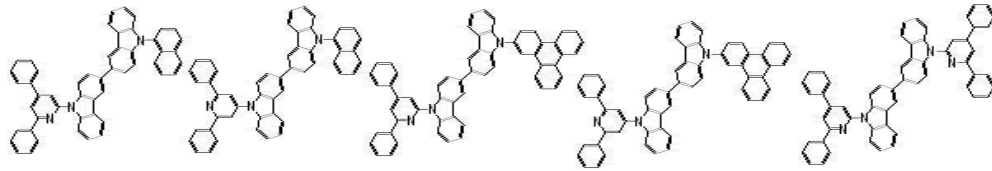


[E-8] [E-9] [E-10]

[E-6]

[E-7]

[0239]

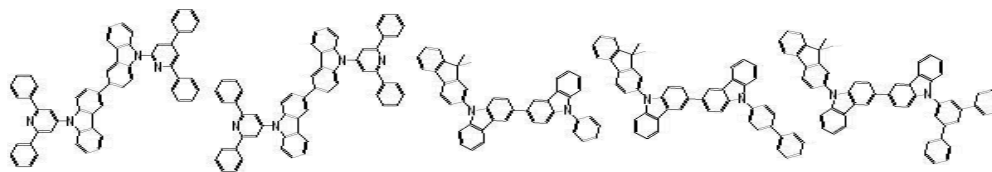


12 [E-13] [E-14] [E-15]

[E-11]

[E-

[0240]

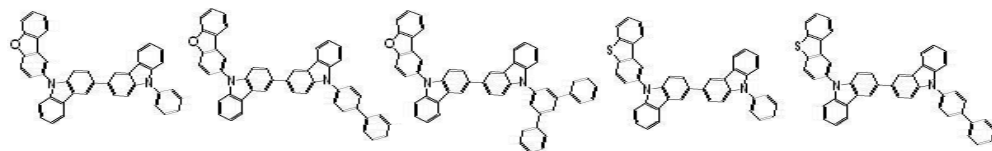


17 [E-18] [E-19] [E-20]

[E-16]

[E-

[0241]

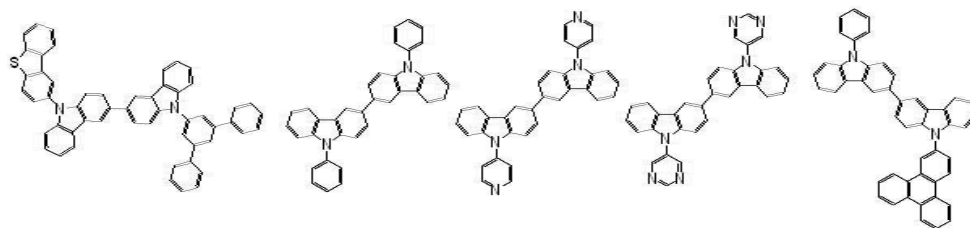


22 [E-23] [E-24] [E-25]

[E-21]

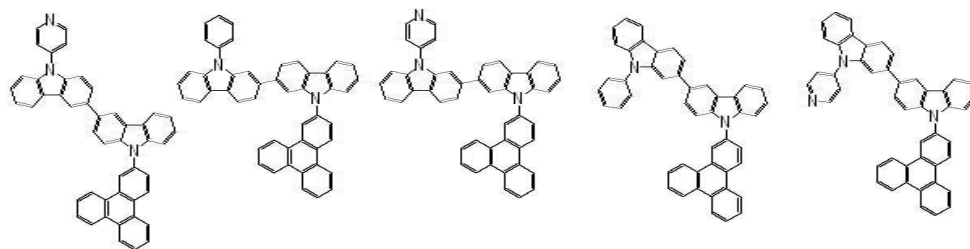
[E-

[0242]



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

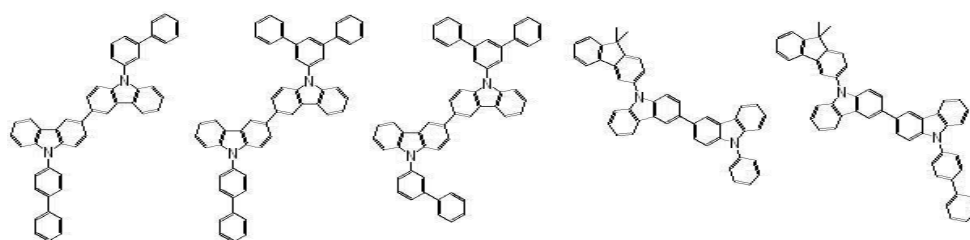
[0243]



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

[0244]

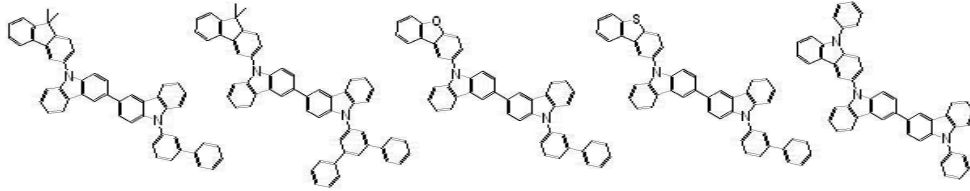
[0245]



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

[0246]

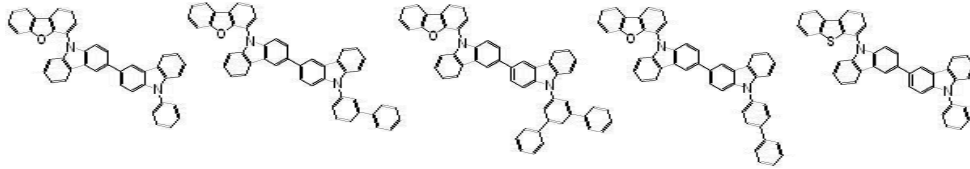
[0247]



[0248]

[0249]

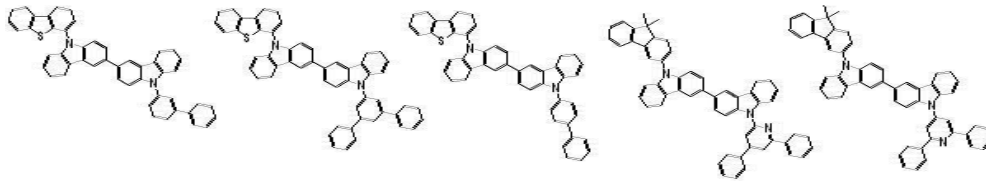
[E-41] [E-42] [E-43] [E-44] [E-45]



[0250]

[0251]

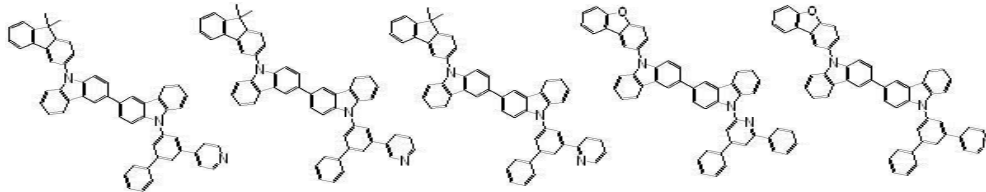
[E-46] [E-47] [E-48] [E-49] [E-50]



[0252]

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

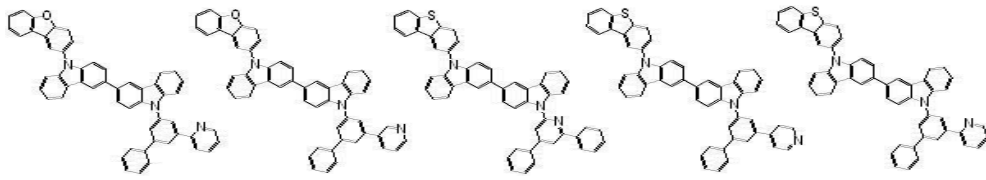
[E-51] [E-



[0253]

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

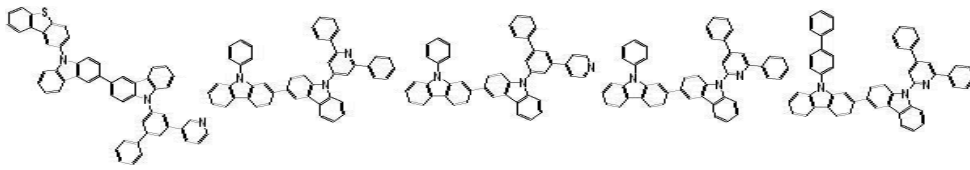
[E-56] [E-



[0254]

62] [E-63] [E-64] [E-65]

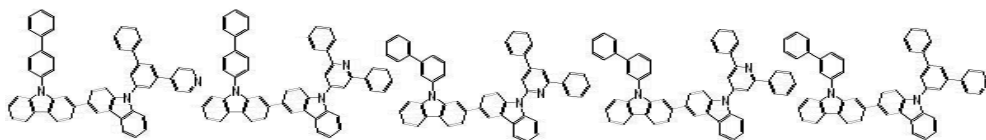
[E-61] [E-



[0255]

[0256]

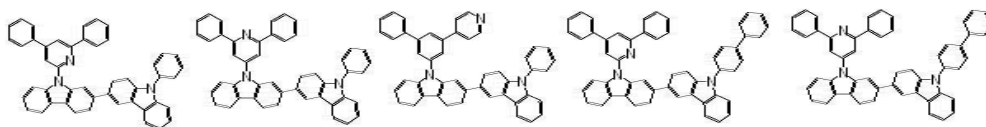
[E-66] [E-67] [E-68] [E-69] [E-70]



[0257]

[E-72] [E-73] [E-74] [E-75]

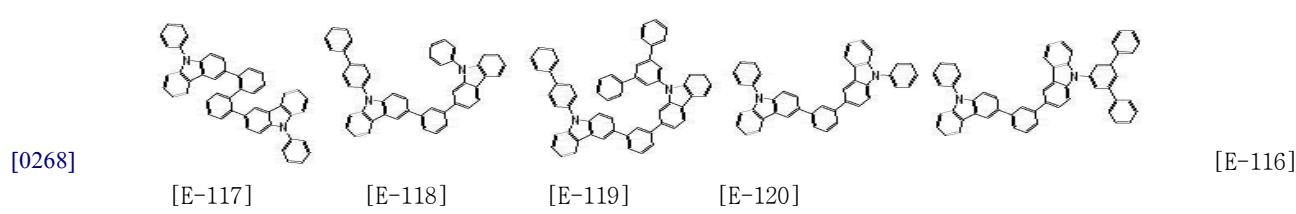
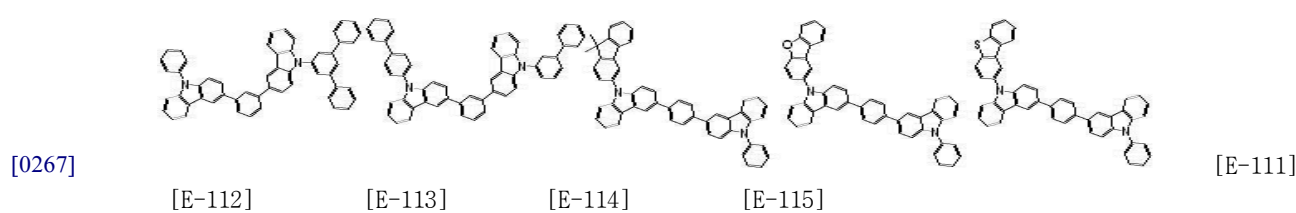
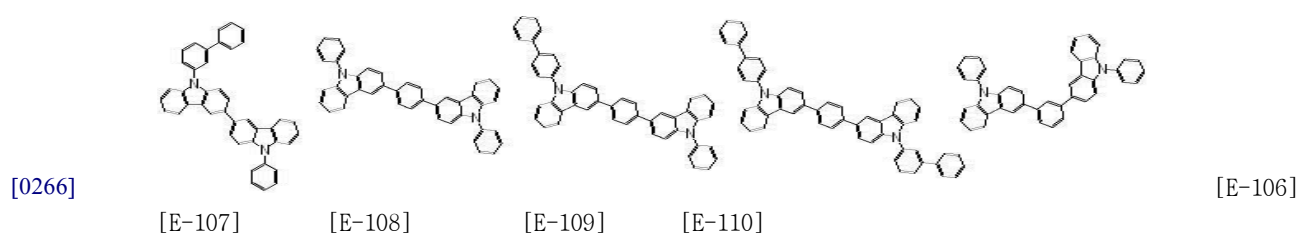
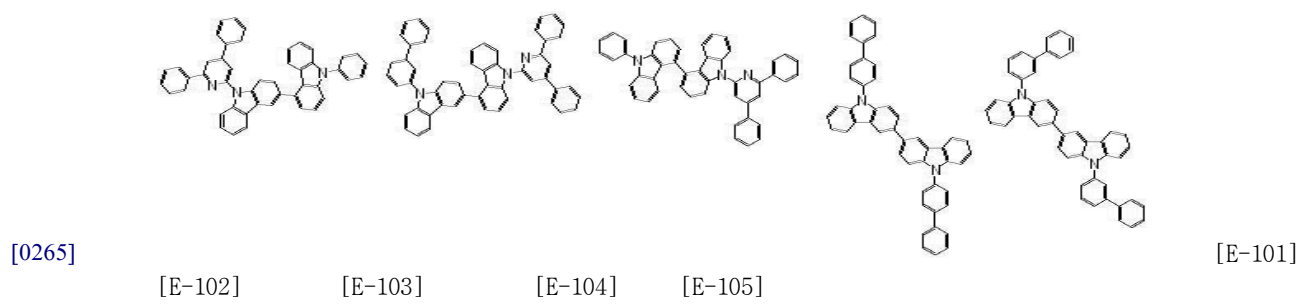
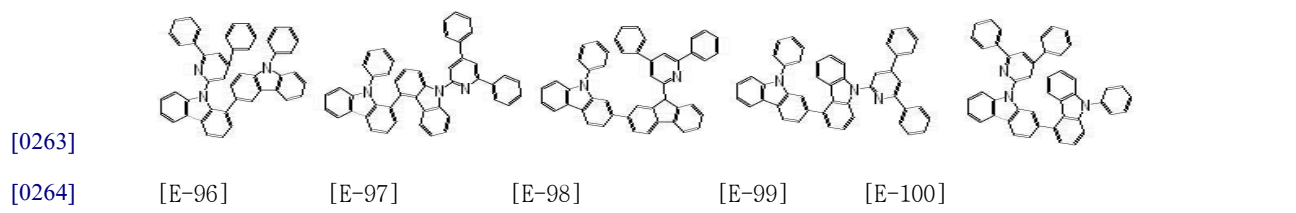
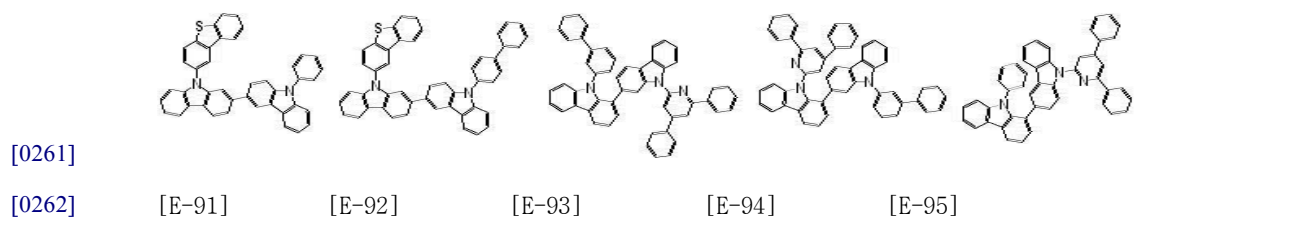
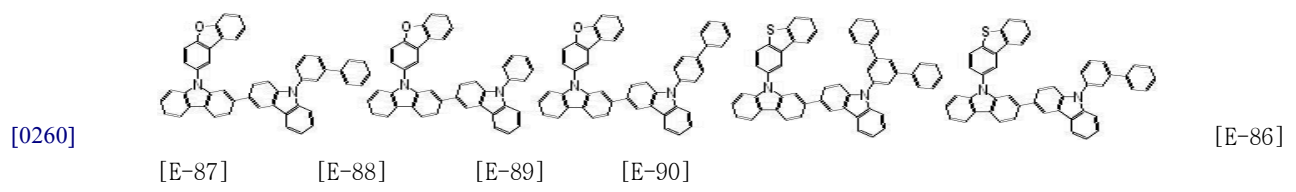
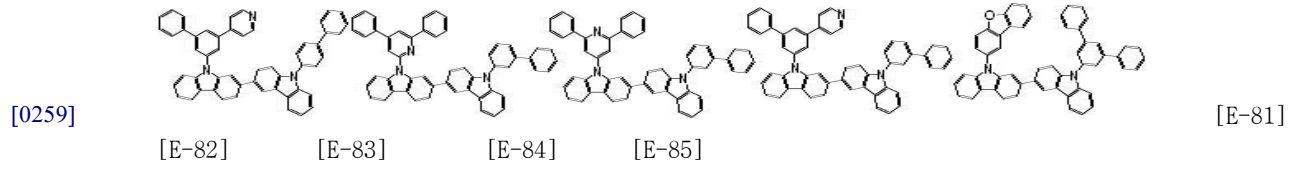
[E-71]

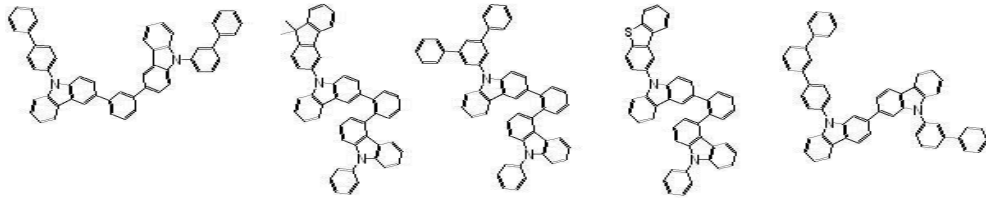


[0258]

[E-77] [E-78] [E-79] [E-80]

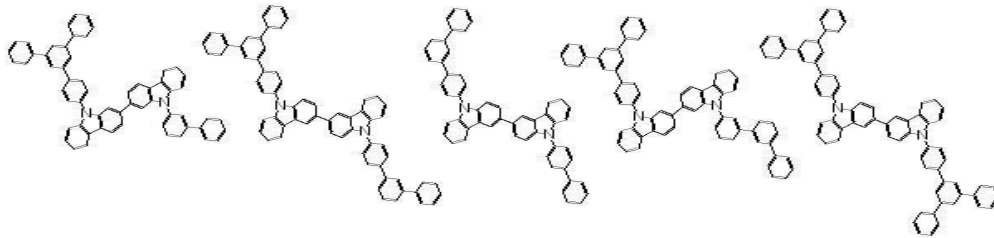
[E-76]





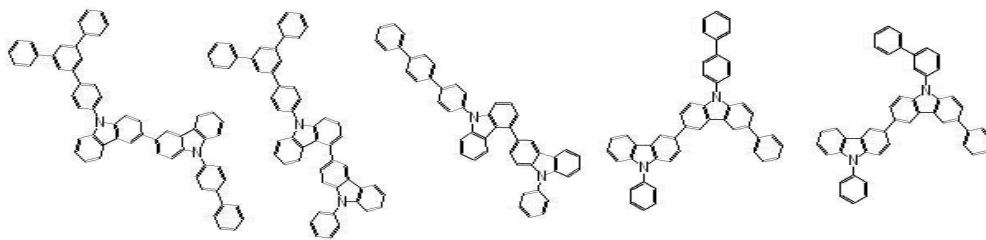
[0269]

[E-121]



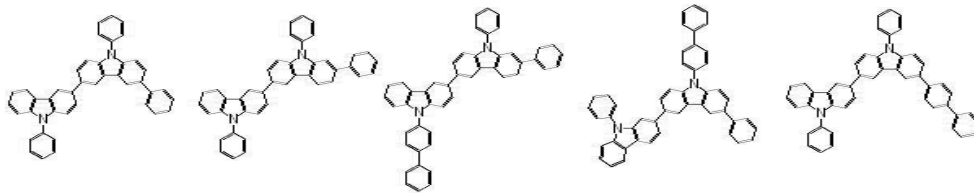
[0270]

[E-126]



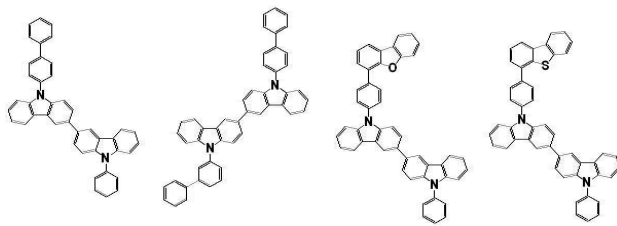
[0271]

[E-131]



[0272]

[0273]



[0274]

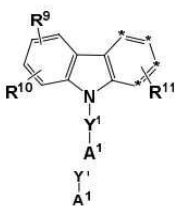
[0275]

[0276]

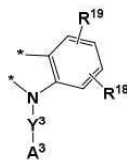
일 예로, 제2 유기 화합물은 하기 화학식 4B-1과 4B-2의 조합으로 표현되는 인돌로카바졸 화합물일 수 있다.

[화학식 4B-1]

[화학식 4B-2]



[0277]



[0278]

[0279]

상기 화학식 4B-1 및 4B-2에서,

Y^1 및 Y^3 은 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 2가의 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합일 수 있고,

[0280] A^1 및 A^3 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합일 수 있고,

[0281] 화학식 4B-1의 인접한 두 개의 *는 화학식 4B-2의 두 개의 *와 결합하고,

[0282] 화학식 4B-1의 나머지 두 개의 *는 각각 독립적으로 CR^{11} 이고, 여기서 R^{11} 은 서로 같거나 다르고,

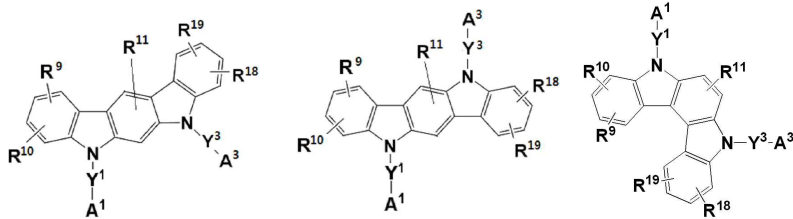
[0283] R^9 내지 R^{11} , R^{18} 및 R^{19} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합일 수 있다.

[0284] 일 예로, 화학식 4B-1 및 4B-2의 Y^1 및 Y^3 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기일 수 있다.

[0285] 일 예로, 화학식 4B-1 및 4B-2의 A^1 및 A^3 는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30의 아릴기일 수 있으며, 예컨대 아릴기는 페닐기, 바이페닐기, 나프틸기, 터페닐기, 안트라센일기 또는 페난트레닐기일 수 있으며, 보다 바람직하게는 바이페닐기, 나프틸기, 터페닐기 또는 페닐기일 수 있다. 일 예로, 화학식 4B-1 및 4B-2의 A^1 및 A^3 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 또는 이들의 조합일 수 있다.

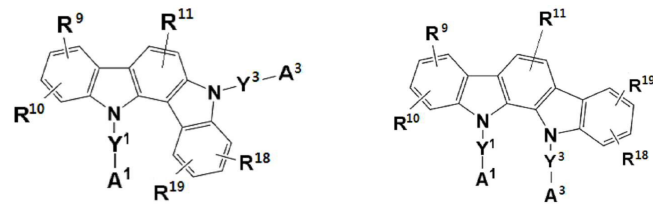
[0286] 일 예로, 화학식 4B-1 및 4B-2의 조합으로 표현되는 인돌로카바졸 화합물은 하기 화학식 4B-a 내지 4B-e 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

[0287] [화학식 4B-a] [화학식 4B-b] [화학식 4B-c]



[0288]

[0289] [화학식 4B-d] [화학식 4B-e]



[0290]

[0291] 상기 화학식 4B-a 내지 4B-e 에서, Y^1 , Y^3 , A^1 , A^3 , R^9 내지 R^{11} , R^{18} 및 R^{19} 는 전술한 바와 같다.

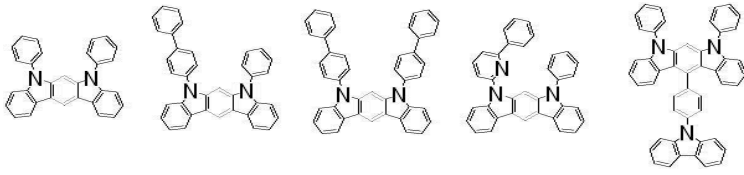
[0292] 일 예로, 화학식 4B-1 및 4B-2의 조합으로 표현되는 인돌로카바졸 화합물은 하기 화학식 4B-c 또는 4B-d 일 수 있다.

[0293] 일 예로, 화학식 4B-1 및 4B-2의 조합으로 표현되는 인돌로카바졸 화합물은 하기 화학식 4B-c 일 수 있다.

[0294] 일 예로, 화학식 4B-1과 4B-2의 조합으로 표현되는 화합물은 예컨대 하기 그룹 5에 나열된 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

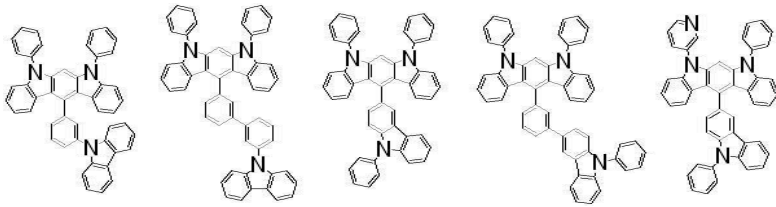
[0295] [그룹 5]

[0296] [F-1] [F-2] [F-3] [F-4] [F-5]



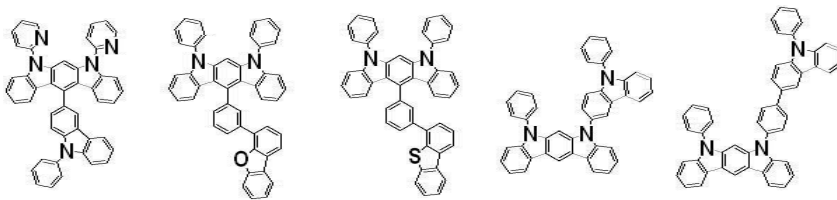
[0297]

[0298] [F-6] [F-7] [F-8] [F-9] [F-10]



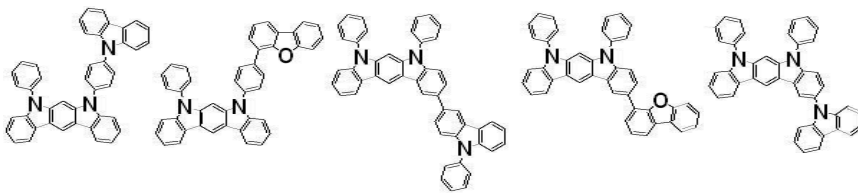
[0299]

[0300] [F-11] [F-12] [F-13] [F-14] [F-15]



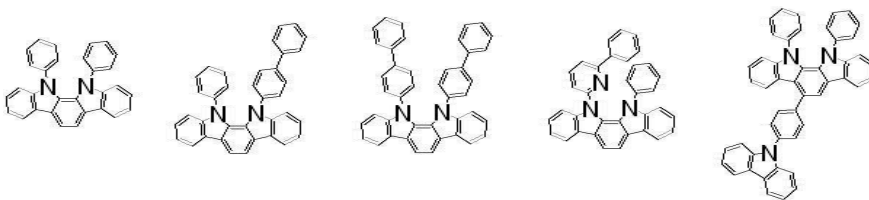
[0301]

[0302] [F-16] [F-17] [F-18] [F-19] [F-20]



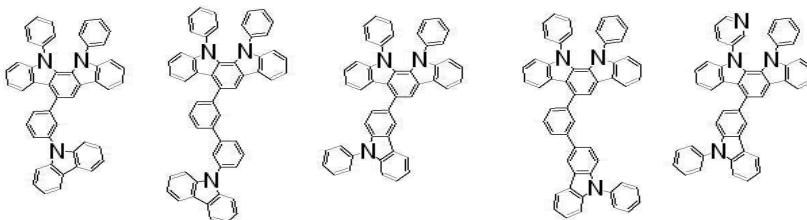
[0303]

[0304] [F-21] [F-22] [F-23] [F-24] [F-25]

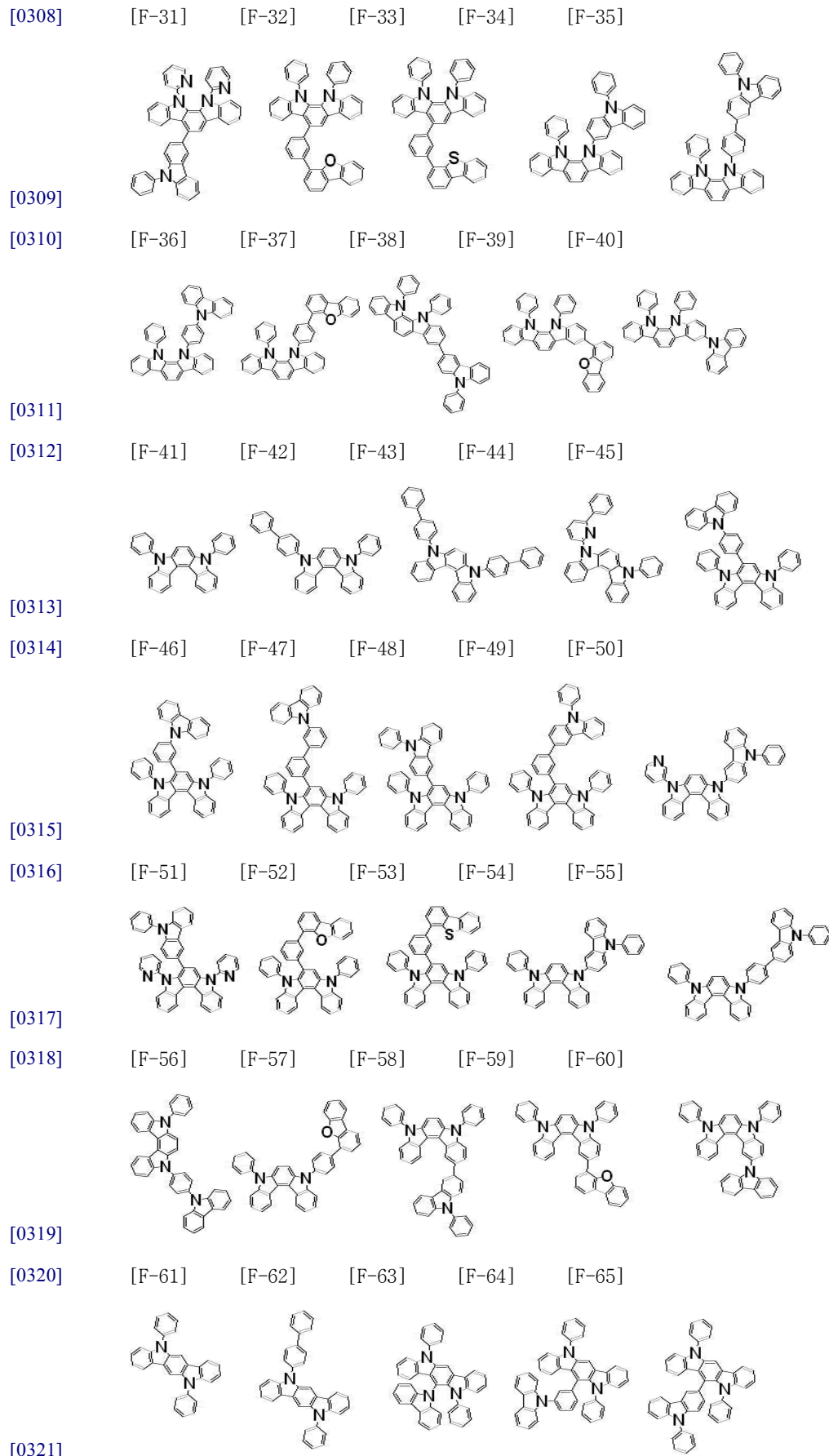


[0305]

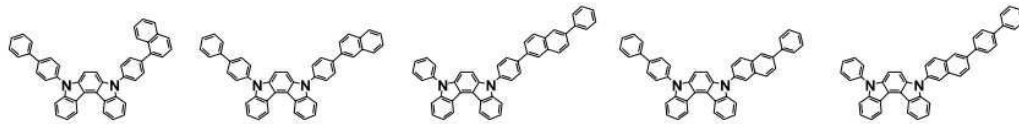
[0306] [F-26] [F-27] [F-28] [F-29] [F-30]



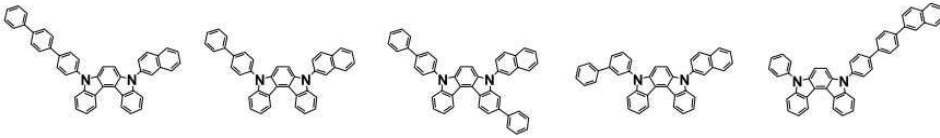
[0307]



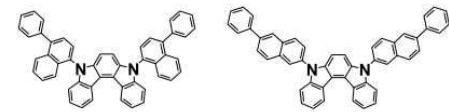
[0335] [F-101] [F-102] [F-103] [F-104] [F-105]



[0336] [F-106] [F-107] [F-108] [F-109] [F-110]



[0338] [F-111] [F-112]



[0340] 제1 유기 화합물과 제2 유기 화합물은 다양한 조합에 의해 다양한 조성물을 포함할 수 있다. 조성물은 제1 유기 화합물과 제2 유기 화합물을 약 1:99 내지 99:1의 중량비로 포함할 수 있으며, 예컨대 약 10:90 내지 90:10, 약 20:80 내지 80:20, 약 30:70 내지 70:30, 약 40:60 내지 60:40 또는 약 50:50의 중량비로 포함할 수 있다.

[0341] 조성물은 제1 유기 화합물과 제2 유기 화합물 외에 1종 이상의 유기 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0342] 조성물은 도펀트를 더 포함할 수 있다. 도펀트는 적색, 녹색 또는 청색 도펀트일 수 있다. 도펀트는 미량 혼합되어 발광을 일으키는 물질로, 일반적으로 삼중항 상태 이상으로 여기시키는 다중항 여기(multiple excitation)에 의해 발광하는 금속 착체(metal complex)와 같은 물질이 사용될 수 있다. 상기 도펀트는 예컨대 무기, 유기, 유기금속 화합물일 수 있으며, 1종 또는 2종 이상 포함될 수 있다. 도펀트는 조성물의 총 함량에 대하여 약 0.1 내지 20중량%로 포함될 수 있다.

[0343] 도펀트의 일 예로 인광 도펀트를 들 수 있으며, 인광 도펀트의 예로는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합을 포함하는 유기 금속화합물을 들 수 있다. 인광 도펀트는 예컨대 하기 화학식 Z로 표현되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0344] [화학식 Z]

[0345] L_2MX

[0346] 상기 화학식 Z에서, M은 금속이고, L 및 X는 서로 같거나 다르며 M과 착화합물을 형성하는 리간드이다.

[0347] 상기 M은 예컨대 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합일 수 있고, 상기 L 및 X는 예컨대 바이덴테이트 리간드일 수 있다.

[0348] 이하 기술한 유기 화합물 또는 조성물을 적용한 유기 광전자 소자를 설명한다.

[0349] 유기 광전자 소자는 예컨대 유기 발광 소자, 유기 광전 소자 또는 유기 태양 전지 등일 수 있다. 유기 광전자 소자는 일 예로 유기 발광 소자일 수 있다.

[0350] 유기 광전자 소자는 서로 마주하는 애노드와 캐소드, 그리고 애노드와 캐소드 사이에 위치하는 유기층을 포함할 수 있고, 유기층은 전술한 유기 화합물 또는 전술한 조성물을 포함할 수 있다.

[0351] 유기층은 발광층 또는 흡광층과 같은 활성층을 포함할 수 있고, 전술한 유기 화합물 또는 전술한 조성물은 활성층에 포함될 수 있다.

[0352] 유기층은 애노드와 활성층 사이 및/또는 캐소드와 활성층 사이에 위치하는 보조층을 포함할 수 있고, 전술한 유기 화합물 또는 전술한 조성물은 보조층에 포함될 수 있다.

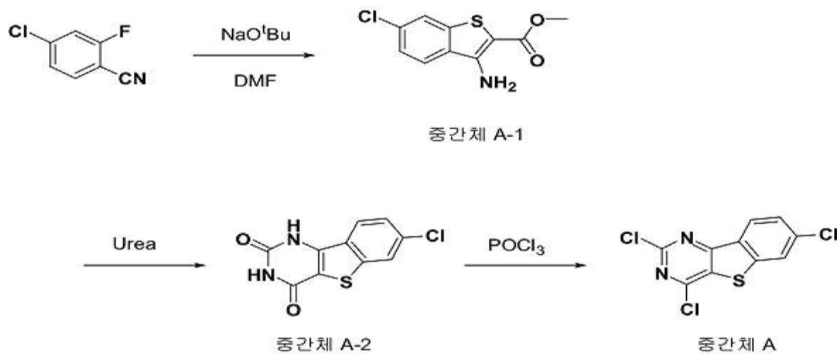
[0353] 도 1은 유기 광전자 소자의 일 예인 유기 발광 소자의 일 예를 보여주는 단면도이다.

- [0356] 도 1을 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자(100)는 서로 마주하는 애노드(110)와 캐소드(120), 그리고 애노드(110)와 캐소드(120) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.
- [0357] 애노드(110)는 예컨대 정공 주입이 원활하도록 일 함수가 높은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 애노드(110)는 예컨대 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO와 Al 또는 SnO₂와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리(3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜)(polyethylenedioxythiophene: PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 도전성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0358] 캐소드(120)는 예컨대 전자 주입이 원활하도록 일 함수가 낮은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 캐소드(120)은 예컨대 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al, LiO₂/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF₂/Ca과 같은 다층 구조 물질을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0359] 유기층(105)은 전술한 유기 화합물 또는 전술한 조성물을 포함할 수 있다.
- [0360] 유기층(105)은 발광층(130)을 포함할 수 있다.
- [0361] 발광층(130)은 호스트(host)로서 전술한 유기 화합물 또는 전술한 조성물을 포함할 수 있다. 발광층(130)은 호스트로서 또 다른 유기 화합물을 더 포함할 수 있다. 발광층(130)은 도펀트를 더 포함할 수 있고 도펀트는 예컨대 인광 도펀트일 수 있다.
- [0362] 유기층(105)은 애노드(110)와 발광층(130) 사이 및/또는 캐소드(120)와 발광층(130) 사이에 위치하는 보조층(도시하지 않음)을 더 포함할 수 있다. 보조층은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 차단층, 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 차단층 또는 이들의 조합일 수 있다. 보조층은 전술한 유기 화합물 또는 전술한 조성물을 포함할 수 있다.
- [0363] 도 2는 다른 구현예에 따른 유기 발광 소자의 단면도이다.
- [0364] 도 2를 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자(200)는 서로 마주하는 애노드(110)와 캐소드(120), 그리고 애노드(110)와 캐소드(120) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.
- [0365] 유기층(105)은 발광층(230)과 캐소드(120) 사이에 위치하는 전자 보조층(140)을 포함한다. 전자 보조층(140)은 예컨대 전자 주입층, 전자 수송층 및/또는 정공 차단층일 수 있으며, 캐소드(120)와 발광층(230) 사이의 전자의 주입 및 이동을 용이하게 할 수 있다.
- [0366] 일 예로, 전술한 유기 화합물 또는 전술한 조성물은 발광층(230)에 포함될 수 있다. 발광층(230)은 호스트로서 또 다른 유기 화합물을 더 포함할 수 있다. 발광층(230)은 도펀트를 더 포함할 수 있고 도펀트는 예컨대 인광 도펀트일 수 있다.
- [0367] 일 예로, 전술한 유기 화합물은 전자 보조층(140)에 포함될 수 있다. 전자 보조층(140)은 전술한 유기 화합물을 단독으로 포함할 수도 있고 전술한 유기 화합물 중 적어도 두 종류를 혼합하여 포함할 수도 있고 전술한 유기 화합물과 다른 유기 화합물을 혼합하여 포함할 수도 있다.
- [0368] 도 2에서 유기층(105)으로서 추가로 애노드(110)와 발광층(230) 사이에 위치하는 적어도 1층의 정공 보조층(도시하지 않음)을 더 포함할 수 있다.
- [0369] 상술한 유기 발광 소자는 유기 발광 표시 장치에 적용될 수 있다.
- [0371] 이하 실시예를 통하여 상술한 구현예를 보다 상세하게 설명한다. 다만, 하기의 실시예는 단지 설명의 목적을 위한 것이며 권리범위를 제한하는 것은 아니다.
- [0372] 이하, 실시예 및 합성예에서 사용된 출발물질 및 반응물질은 특별한 언급이 없는 한, Sigma-Aldrich 社 또는 TCI 社에서 구입하였거나, 공지된 방법을 통해 합성하였다.
- [0373] **(유기 광전자 소자용 화합물의 제조)**
- [0374] 본 발명의 화합물의 보다 구체적인 예로서 제시된 화합물을 하기 단계를 통해 합성하였다.

[0375] (제1 유기 광전자 소자용 화합물)

[0376] 합성예 1: 중간체 A의 합성

[0377] [반응식 1]



[0378]

[0379] 중간체 A-1의 합성

[0380] 3L 둥근 플라스크에 4-클로로-2-플로로벤조나이트릴 (100g, 0.64mol) 및 메틸 싸이오글리코레이트 (70.0ml, 0.77mol), N,N-다이메틸포름아마이드 1.2L를 넣고 내부온도 -5℃로 온도를 낮춘다. 소듐tert-부톡사이드 (93.67g, 0.96mol)을 서서히 첨가하고 이때 내부온도가 0℃가 넘지 않도록 한다. 상온에서 2시간 교반 후, 차가운 물에 반응물을 서서히 적가한다. 생성된 고체를 상온에서 교반 후, 여과, 건조하여 중간체 A-1을 수득하였다. (142.9g, 92%).

[0381] 중간체 A-2의 합성

[0382] 2L 둥근 플라스크에 중간체 A-1 (140.0g, 0.58mol) 및 우레아 (173.9g, 2.90mol)의 혼합물을 200℃에서 2시간 동안 교반 하였다. 고온의 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후, 수산화나트륨 용액에 붓고, 불순물을 여과하여 제거한 다음, 반응물을 산성화하여 (HCl, 2N), 수득한 침전물을 건조시켜 중간체 A-2를 수득하였다 (114.17g, 78%).

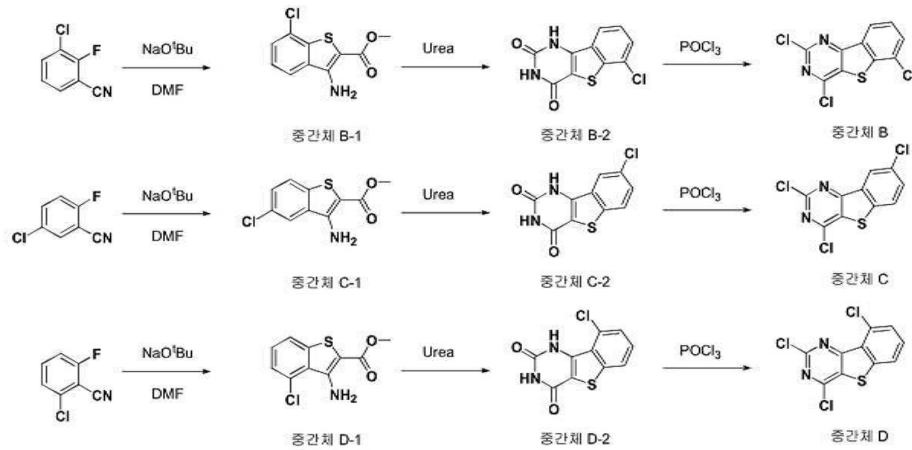
[0383] 중간체 A의 합성

[0384] 2000 mL 둥근 플라스크에 중간체 A-2 (114 g, 0.45mol) 및 옥시염화인 (1000 mL)의 혼합물을 환류하에 8시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 냉각시키고, 서서히 교반하면서 얼음/물에 부어, 침전물을 생성하였다. 이로부터 수득한 반응물을 여과하여, 중간체 A (122.8g, 94%, 백색 고체)를 수득하였다. 생성된 중간체 A의 원소 분석 결과는 하기와 같다.

[0385] calcd. C₁₀H₃C₁₃N₂S: C, 41.48; H, 1.04; Cl, 36.73; N, 9.67; S, 11.07; found: C, 41.48; H, 1.04; Cl, 36.73; N, 9.67; S, 11.07

[0387] 합성예 2: 중간체 B, C, D의 합성

[0388] [반응식 2]



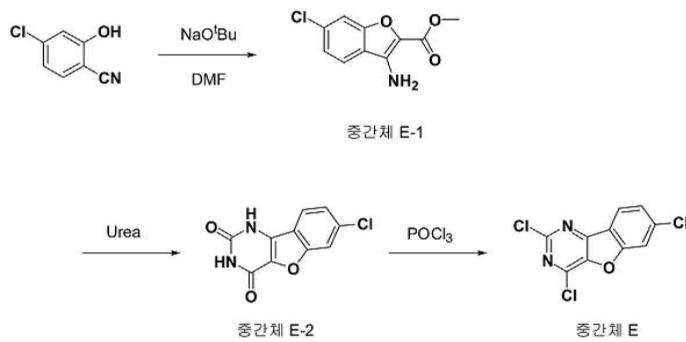
[0389]

[0390] 중간체 B, C, D의 합성

[0391] 출발 물질을 반응식 2와 같이 변경한 것을 제외하고 합성예 1과 동일한 방식으로 중간체 B, C, D를 합성하였다.

[0393] **합성예 3: 중간체 E의 합성**

[0394] [반응식 3]



[0395]

[0396] 중간체 E-1의 합성

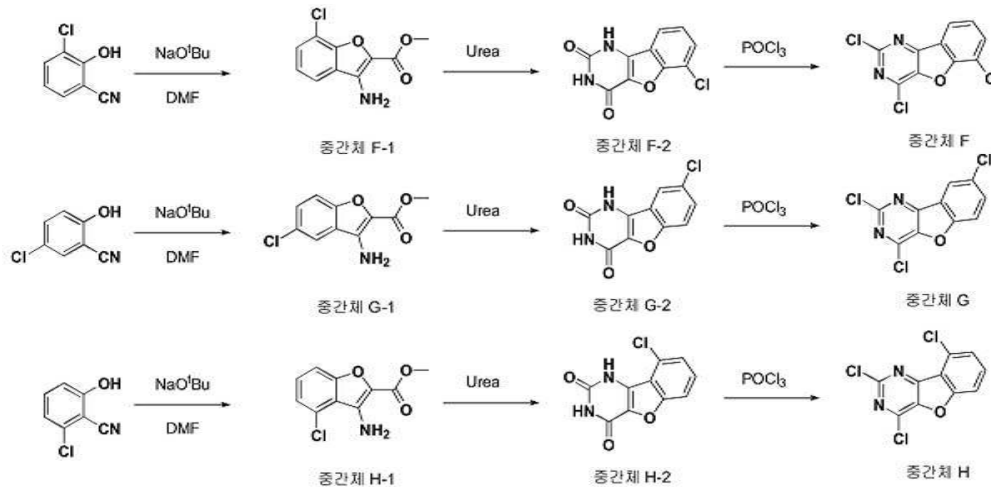
[0397] 3L 둥근 플라스크에 4-클로로-2-하이드록시벤조나이트릴 (100g, 0.65mol) 및 에틸브로모아세테이트(130.5g, 0.78mol), N,N-다이메틸포름아마이드 1.3L를 넣고 내부온도 -5℃로 온도를 낮춘다. 소듐tert-부톡사이드 (93.88g, 0.98mol)을 서서히 첨가하고 이때 내부온도가 0℃가 넘지 않도록 한다. 상온에서 2시간 교반후, 차가운 물에 반응물을 서서히 적가한다. 생성된 고체를 상온에서 교반 후, 여과, 건조하여 중간체 E-1을 수득하였다. (132.2g, 90%).

[0398] 중간체 E-2, 중간체 E의 합성

[0399] 합성예 1의 중간체 A-2 및 중간체 A와 동일한 방식으로 중간체 E를 합성하였다.

[0401] **합성예 4: 중간체 F, G, H의 합성**

[0402] [반응식 4]



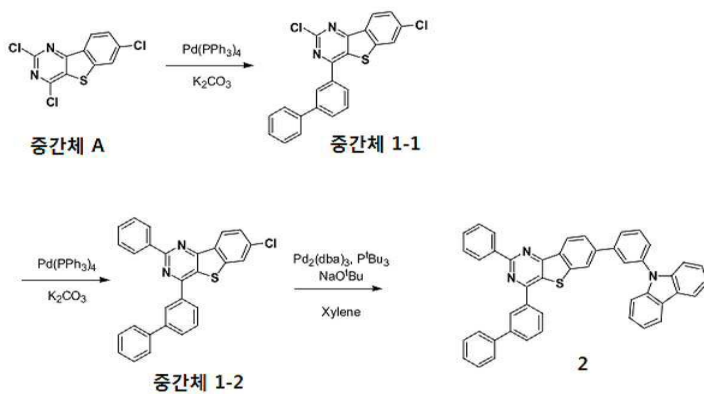
[0403]

[0404] 중간체 F, 중간체 G, 중간체 H의 합성

[0405] 출발 물질을 반응식 4와 같이 변경한 것을 제외하고 합성에 3과 동일한 방식으로 중간체 F, G 및 H를 합성하였다.

[0407] 합성예 5: 화합물 2의 합성

[0408] [반응식 5]



[0409]

[0410] 중간체 1-1의 합성

[0411] 250 mL 플라스크에 중간체 A (10.0g, 34.1 mmol), 3-바이페닐 보로닉에시드 (7.83g, 34.53 mmol), 탄산칼륨 (11.93g, 86.33 mmol) 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 (0) (1.2g, 1.04 mmol)을 1,4-다이옥산 80 mL, 물 40 mL 에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 12시간 동안 65°C로 가열하였다. 유기층을 분리하여 메탄올 240 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 모노클로로벤젠으로 재결정하여 중간체 1-1 (10.83 g, 77%의 수율)를 수득하였다.

[0412] 중간체 1-2의 합성

[0413] 250 mL 플라스크에 중간체 1-1 (10.5g, 25.78 mmol), 페닐보로닉에시드 (3.14g, 25.78 mmol), 탄산칼륨(8.91g, 64.45 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 (0) (0.89g, 0.77 mmol)을 1,4-다이옥산 70 mL, 물 35 mL 에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 12시간 동안 70°C로 가열하였다. 유기층을 분리하여 메탄올 210 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 모노클로로벤젠으로 재결정하여 중간체 1-2 (8.44 g, 79%의 수율)를 수득하였다.

[0414] 화합물 2의 합성

[0415] 250 mL 둥근 플라스크에서 중간체 1-2 8.00 g (17.83 mmol), 9-(3-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-다이옥사보란-2-일)페닐)-9H-카바졸 6.58 g (17.83 mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.43 g (35.65 mmol), 트리스(다이벤질리튬아세

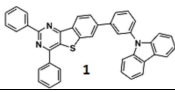
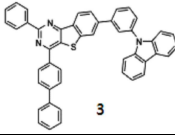
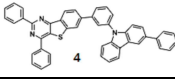
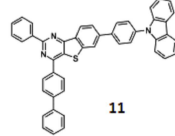
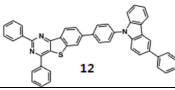
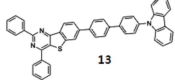
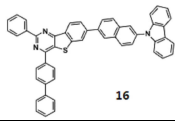
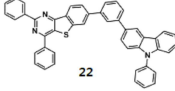
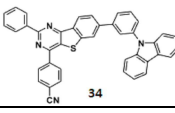
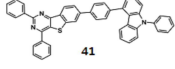
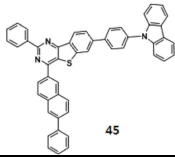
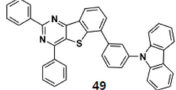
톤) 다이팔라디움 1.03 g (1.78 mmol) 및 트리 t-부틸포스핀 3.57 mL (50% in 톨루엔)를 자일렌 120 mL과 혼합하고 질소 기류 하에서 12시간 동안 가열하여 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 500 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 다이클로로벤젠에 녹여 실리카겔/ 셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 화합물 2 (8.5 g, 73%의 수율)를 수득하였다.

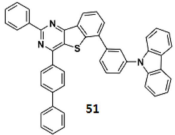
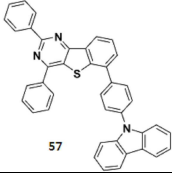
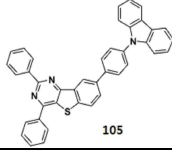
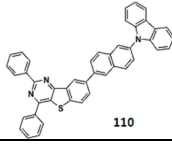
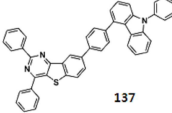
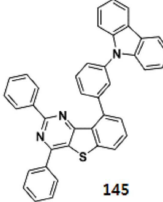
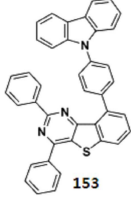
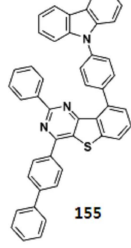
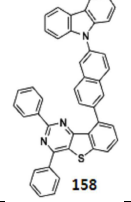
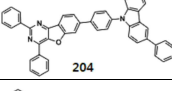
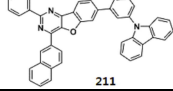
[0416] calcd. C₄₆H₂₉N₃S: C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89; found: C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89

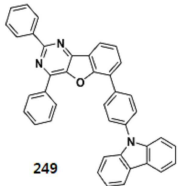
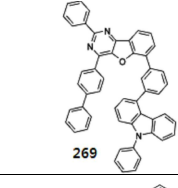
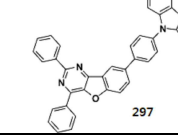
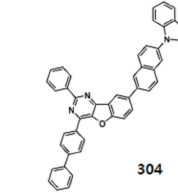
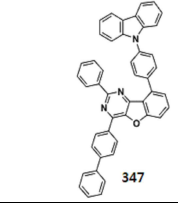
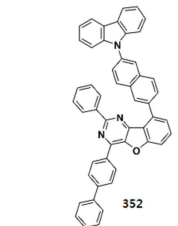
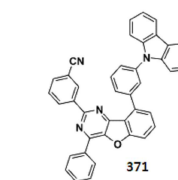
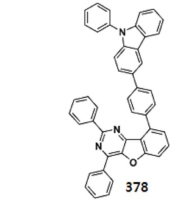
[0418] **합성예 6 내지 36의 합성**

[0419] 출발물질로서 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용한 것을 제외하고 합성예 5와 동일한 방법으로 하기 각 최종화합물들을 합성하였다.

표 1

[0420]	합성예	출발물질	최종생성물	수득량 (수율)	최종생성물의 물성 데이터
	합성예 6	중간체 A		5.32g, (75%)	calcd. C ₄₀ H ₂₅ N ₃ S : C, 82.87; H, 4.35; N, 7.25; S, 5.53; found : C, 82.87; H, 4.36; N, 7.25; S, 5.53
	합성예 7	중간체 A		4.33g, (79%)	calcd. C ₄₆ H ₂₉ N ₃ S : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89; found : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89
	합성예 8	중간체 A		5.98g, (75%)	calcd. C ₄₆ H ₂₉ N ₃ S : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.40; S, 4.89; found : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89
	합성예 9	중간체 A		4.25g, (70%)	calcd. C ₄₆ H ₂₉ N ₃ S : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.40; S, 4.89; found : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89
	합성예 10	중간체 A		5.92g, (72%)	calcd. C ₄₆ H ₂₉ N ₃ S : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.40; S, 4.89; found : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89
	합성예 11	중간체 A		5.49g, (70%)	calcd. C ₄₆ H ₂₉ N ₃ S : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.40; S, 4.89; found : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89
	합성예 12	중간체 A		5.91g, (77%)	calcd. C ₅₀ H ₃₁ N ₃ S : C, 85.08; H, 4.43; N, 5.95; S, 4.54; found : C, 85.08; H, 4.43; N, 5.95; S, 4.54
	합성예 13	중간체 A		4.16g, (75%)	calcd. C ₄₆ H ₂₉ N ₃ S : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.40; S, 4.89; found : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89
	합성예 14	중간체 A		5.45g, (70%)	calcd. C ₄₁ H ₂₄ N ₄ S : C, 81.43; H, 4.00; N, 9.26; S, 5.30; found : C, 81.43; H, 4.00; N, 9.26; S, 5.30
	합성예 15	중간체 A		4.41g, (78%)	calcd. C ₄₆ H ₂₉ N ₃ S : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.40; S, 4.89; found : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89
	합성예 16	중간체 A		6.50g, (69%)	calcd. C ₅₀ H ₃₁ N ₃ S : C, 85.08; H, 4.43; N, 5.95; S, 4.54; found : C, 85.08; H, 4.43; N, 5.95; S, 4.54
	합성예 17	중간체 B		9.30g, (78%)	calcd. C ₄₀ H ₂₅ N ₃ S : C, 82.87; H, 4.35; N, 7.25; S, 5.53; found : C, 82.87; H, 4.36; N, 7.25; S, 5.53

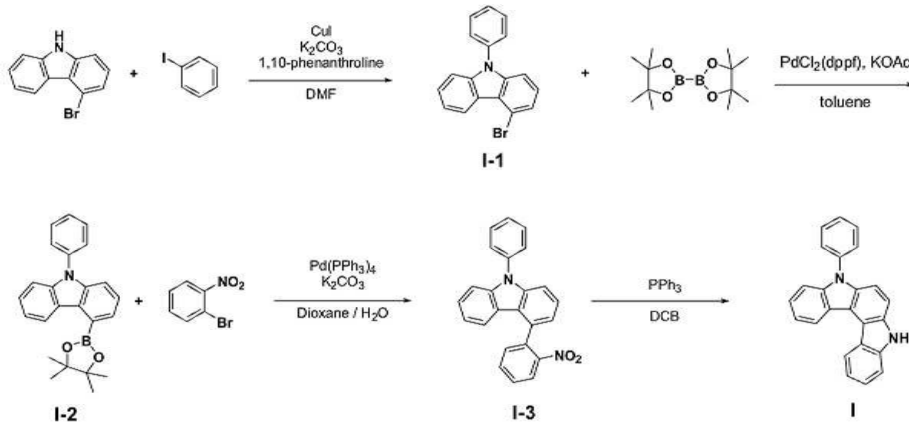
합성예 18	중간체 B	 51	7.55g, (74%)	calcd. C ₄₆ H ₂₉ N ₃ S : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89; found : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89
합성예 19	중간체 B	 57	5.59g, (76%)	calcd. C ₄₀ H ₂₅ N ₃ S : C, 82.87; H, 4.35; N, 7.25; S, 5.53; found : C, 82.87; H, 4.36; N, 7.25; S, 5.53
합성예 20	중간체 C	 105	6.60g, (79%)	calcd. C ₄₀ H ₂₅ N ₃ S : C, 82.87; H, 4.35; N, 7.25; S, 5.53; found : C, 82.87; H, 4.36; N, 7.25; S, 5.53
합성예 21	중간체 C	 110	4.25g, (74%)	calcd. C ₄₄ H ₂₇ N ₃ S : C, 83.91; H, 4.32; N, 6.67; S, 5.09; found : C, 83.91; H, 4.32; N, 6.67; S, 5.09
합성예 22	중간체 C	 137	5.88g, (77%)	calcd. C ₄₆ H ₂₉ N ₃ S : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89; found : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89
합성예 23	중간체 D	 145	6.47g, (76%)	calcd. C ₄₀ H ₂₅ N ₃ S : C, 82.87; H, 4.35; N, 7.25; S, 5.53; found : C, 82.87; H, 4.36; N, 7.25; S, 5.53
합성예 24	중간체 D	 153	6.05g, (68%)	calcd. C ₄₀ H ₂₅ N ₃ S : C, 82.87; H, 4.35; N, 7.25; S, 5.53; found : C, 82.87; H, 4.36; N, 7.25; S, 5.53
합성예 25	중간체 D	 155	5.31g, (75%)	calcd. C ₄₆ H ₂₉ N ₃ S : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89; found : C, 84.25; H, 4.46; N, 6.41; S, 4.89
합성예 26	중간체 D	 158	7.11g, (75%)	calcd. C ₄₄ H ₂₇ N ₃ S : C, 83.91; H, 4.32; N, 6.67; S, 5.09; found : C, 83.91; H, 4.32; N, 6.67; S, 5.09
합성예 27	중간체 E	 204	6.73g, (73%)	calcd. C ₄₆ H ₂₉ N ₃ O : C, 86.36; H, 4.57; N, 6.57; O, 2.50; found : C, 86.36; H, 4.57; N, 6.57; O, 2.49
합성예 28	중간체 E	 211	5.19g, (72%)	calcd. C ₄₄ H ₂₇ N ₃ O : C, 86.11; H, 4.43; N, 6.85; O, 2.61; found : C, 86.11; H, 4.43; N, 6.85; O, 2.61

합성예 29	중간체 F	 249	5.60g, (76%)	calcd. C ₄₀ H ₂₅ N ₃ O : C, 85.24; H, 4.47; N, 7.46; O, 2.84; found : C, 85.24; H, 4.47; N, 7.46; O, 2.84
합성예 30	중간체 F	 269	7.24g, (73%)	calcd. C ₅₂ H ₃₃ N ₃ O : C, 87.25; H, 4.65; N, 5.87; O, 2.24; found : C, 87.25; H, 4.65; N, 5.87; O, 2.24
합성예 31	중간체 G	 297	5.76g, (77%)	calcd. C ₄₀ H ₂₅ N ₃ O : C, 85.24; H, 4.47; N, 7.46; O, 2.84; found : C, 85.24; H, 4.47; N, 7.46; O, 2.84
합성예 32	중간체 G	 304	8.35g, (74%)	calcd. C ₅₀ H ₃₁ N ₃ O : C, 87.06; H, 4.53; N, 6.09; O, 2.32; found : C, 87.05; H, 4.53; N, 6.09; O, 2.32
합성예 33	중간체 H	 347	5.02g, (75%)	calcd. C ₄₆ H ₂₉ N ₃ O : C, 86.36; H, 4.57; N, 6.57; O, 2.50; found : C, 86.36; H, 4.57; N, 6.57; O, 2.49
합성예 34	중간체 H	 352	4.66g, (74%)	calcd. C ₅₀ H ₃₁ N ₃ O : C, 87.06; H, 4.53; N, 6.09; O, 2.32; found : C, 87.05; H, 4.53; N, 6.09; O, 2.32
합성예 35	중간체 H	 371	6.60g, (71%)	calcd. C ₄₁ H ₂₄ N ₄ O : C, 83.65; H, 4.11; N, 9.52; O, 2.72; found : C, 83.65; H, 4.11; N, 9.52; O, 2.72
합성예 36	중간체 H	 378	5.53g, (78%)	calcd. C ₄₆ H ₂₉ N ₃ O : C, 86.36; H, 4.57; N, 6.57; O, 2.50; found : C, 86.36; H, 4.57; N, 6.57; O, 2.49

[0422] (제2 유기 광전자 소자용 화합물)

[0423] 합성예 37: 중간체 I의 합성

[0424] [반응식 6]



[0425]

[0426] 중간체 I-1의 합성

[0427] 5L 플라스크에 중간체 4-브로모-9H-카바졸 200.0 g (0.8 mol), 아이오도 벤젠 248.7 g (1.2 mol), 탄산칼륨 168.5 g (1.2 mol), 요오드화 구리(I) 31.0 g (0.2 mol), 1,10-페난트롤린 29.3 g (0.2 mol)을 N,N-다이메틸포름아마이드 2.5 L에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 24시간 동안 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 증류수 4 L에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 물과 메탄올, 헥산 씻어주었다. 얻어진 고체를 물과 디클로로메탄으로 추출하여 수득한 유기층으로부터 황산마그네슘을 사용하여 수분을 제거하고 농축하여, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 중간체 I-1을 흰색의 고체 (216.2 g, 83%의 수율)로 얻었다.

[0428] calcd. C₂₇H₁₈C₁N₃: C, 67.10; H, 3.75; Br, 24.80; N, 4.35; found: C, 67.12; H, 3.77; Br, 24.78; N, 4.33

[0429] 중간체 I-2의 합성

[0430] 5 L 플라스크에 중간체 I-1 (216.0 g, 0.7 mol), 4,4,4',4', 5,5,5',5'-옥타메틸-2,2'-바이(1,3,2-다이옥사보로란 (212.8 g, 0.8 mol), 아세트산칼륨 (KOAc, 197.4 g, 2.0 mol) 및 1,1'-비스(다이페닐포스피노) 페로센-팔라듐(II)다이클로라이드 (21.9 g, 0.03 mol), 트리사이클로헥실포스핀 (45.1 g, 0.2 mol)을 N,N-다이메틸포름아마이드 3 L에 넣은 후, 130℃에서 12시간 교반하였다. 반응 완료 후, 반응 용액을 물과 EA로 추출하여 수득한 유기층으로부터 황산마그네슘을 사용하여 수분을 제거하고 농축하여, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 중간체 I-2를 흰색의 고체 (205.5 g, 83%의 수율)로 얻었다.

[0431] calcd. C₂₆H₂₅B₂N₂O₂: C, 78.06; H, 6.55; B, 2.93; N, 3.79; O, 8.67; found : C, 78.08; H, 6.57; B, 2.91; N, 3.77; O, 8.67

[0432] 중간체 I-3의 합성

[0433] 5 L 플라스크에 중간체 I-2 150.0 g (0.4 mol), 중간체 1-브로모-2-니트로 벤젠 164.1 g (0.8 mol), 탄산칼륨 278.1 g (2.01 mol) 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 (0) 23.5 g (0.02 mol)을 1,4-다이옥산 2 L, 물 1 L에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 16시간 동안 90℃로 가열하였다. 반응 용매를 제거한 후, 디클로로메탄에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 중간체 I-3를 노란색의 고체(86.3 g, 58%의 수율)로 얻었다.

[0434] calcd. C₁₈H₁₂N₂O₂: C, 79.11; H, 4.43; N, 7.69; O, 8.78; found: C, 79.13; H, 4.45; N, 7.67; O, 8.76

[0435] 중간체 I의 합성

[0436] 1000ml 플라스크에 중간체 I-3 (86.0 g, 0.23 mol), 트리페닐 포스핀 (309.5 g, 1.18 mol)을 디클로로 벤젠 600 mL에 넣고 질소치환을 하고 12시간 동안 160℃에서 교반하였다. 반응 종료 후, 용매 제거하여 컬럼 크로마토그래피로 정제(Hexane) 하여 중간체 I를 노란색의 고체(57.3 g, 73%의 수율)로 얻었다.

[0437] Calcd. C₁₈H₁₂N₂: C, 86.72; H, 4.85; N, 8.43; found: C, 86.70; H, 4.83; N, 8.47

[0439] 합성예 38 내지 50의 합성

[0440] 출발물질로서 하기 표 2에 기재된 화합물을 사용한 것을 제외하고 합성예 37과 동일한 방법으로 하기 각 최종화합물들을 합성하였다.

표 2

합성예	출발물질	최종생성물	수득량 (수율)	최종생성물의 물성 데이터
합성예 38			10.23g, (45%)	calcd. C ₄₂ H ₂₈ N ₂ : C, 89.97; H, 5.03; N, 5.00; found : C, 89.97; H, 5.03; N, 5.00
합성예 39			7.31g, (77%)	calcd. C ₃₀ H ₂₀ N ₂ : C, 88.21; H, 4.93; N, 6.86; found : C, 88.21; H, 4.93; N, 6.86
합성예 40			6.33g, (76%)	calcd. C ₄₂ H ₂₈ N ₂ : C, 89.97; H, 5.03; N, 5.00; found : C, 89.97; H, 5.03; N, 5.00
합성예 41			8.33g, (74%)	calcd. C ₄₂ H ₂₈ N ₂ : C, 89.97; H, 5.03; N, 5.00; found : C, 89.97; H, 5.03; N, 5.00
합성예 42			5.53g, (79%)	calcd. C ₄₂ H ₂₈ N ₂ : C, 89.97; H, 5.03; N, 5.00; found : C, 89.97; H, 5.03; N, 5.00
합성예 43			7.41g, (73%)	calcd. C ₄₂ H ₂₈ N ₂ : C, 89.97; H, 5.03; N, 5.00; found : C, 89.97; H, 5.03; N, 5.00
합성예 44			5.94g, (76%)	calcd. C ₄₆ H ₃₀ N ₂ : C, 90.46; H, 4.95; N, 4.59; found : C, 90.46; H, 4.95; N, 4.59
합성예 45			6.37g, (76%)	calcd. C ₄₆ H ₃₀ N ₂ : C, 90.46; H, 4.95; N, 4.59; found : C, 90.46; H, 4.95; N, 4.59
합성예 46			10.39g, (79%)	calcd. C ₄₆ H ₃₀ N ₂ : C, 90.46; H, 4.95; N, 4.59; found : C, 90.46; H, 4.95; N, 4.59

합성예 47			5.33g, (69%)	calcd. C ₄₆ H ₃₀ N ₂ : C, 90.46; H, 4.95; N, 4.59; found : C, 90.46; H, 4.95; N, 4.59
합성예 48			6.96g, (77%)	calcd. C ₄₆ H ₃₀ N ₂ : C, 90.46; H, 4.95; N, 4.59; found : C, 90.46; H, 4.95; N, 4.59
합성예 49			6.11g, (77%)	calcd. C ₄₀ H ₂₆ N ₂ : C, 89.86; H, 4.90; N, 5.24; found : C, 89.86; H, 4.90; N, 5.24
합성예 50			9.44g, (75%)	calcd. C ₄₆ H ₃₀ N ₂ : C, 90.46; H, 4.95; N, 4.59; found : C, 90.46; H, 4.95; N, 4.59

[0443] **유기 발광 소자의 제작 I**

[0444] **실시예 1**

[0445] ITO 전극이 형성된 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.5mm 크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하였다.

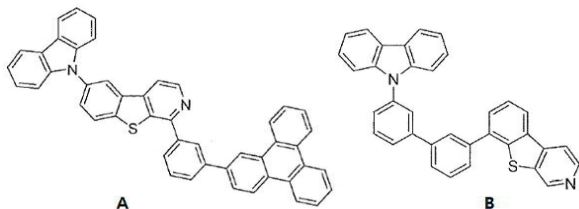
[0446] 상기 ITO 전극 상에 m-MTDATA를 증착 속도 1Å/sec로 진공 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상에 상기 α-NPB를 증착 속도 1Å/sec로 진공 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공 수송층 상에 Ir(ppy)₃ (도펀트 1)와 화합물 2를 각각 증착 속도 0.1Å/sec와 1Å/sec로 공증착하여 400Å의 두께의 발광층을 형성하였다. 상기 발광층 상에 BA1q를 증착 속도 1Å/sec로 진공 증착하여 50Å의 두께의 정공 저지층을 형성한 후, 상기 정공 저지층 상에 Alq₃를 진공 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성하였다. 상기 전자 수송층 상에 LiF 10Å(전자 주입층)과 Al 2000Å(캐소드)을 순차적으로 진공증착하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0447] **실시예 2 내지 25**

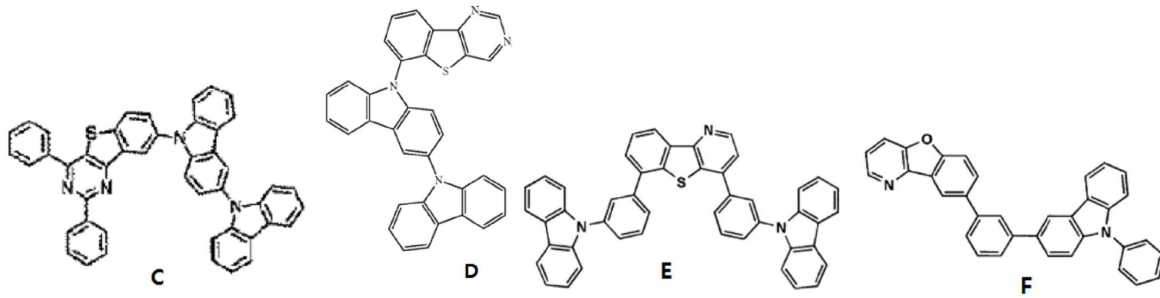
[0448] 발광층 형성시 호스트로서 화합물 2 대신 표 1에 기재된 화합물들을 사용한 것을 제외하고 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0449] **비교예 1 내지 6**

[0450] 발광층 호스트로서 화합물 2 대신 비교화합물 A 내지 F를 사용한 것을 제외하고 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.



[0451]



[0452]

[0454] **평가예 I**

[0455] 실시예 1 내지 25와 비교예 1 내지 6에 따른 유기 발광 소자의 구동 전압, 효율, 및 휘도를 전류 전압계 (Keithley SMU 236)에서 전원을 공급하여, 휘도계 PR650 Spectroscan Source Measurement Unit.(PhotoResearch 사 제품임)을 이용하여 평가하였다.

[0456] 그 결과는 표 3과 같다.

[0457] 구체적인 측정방법은 하기와 같다.

[0458] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[0459] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[0460] (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

[0461] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

[0462] (3) 발광효율 측정

[0463] 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm²)의 전류 효율(cd/A) 을 계산하였다.

[0464] (4) 수명 측정

[0465] T₉₅ 수명은 초기 휘도 100% 대비 95%의 휘도가 되는데 걸리는 시간(hr)을 평가한 것이다.

표 3

[0466]

예	호스트	도펀트	구동 전압 (V)	전류 효율 (cd/A)	휘도 (cd/m ²)	T ₉₅ 수명 (hr)
실시예1	화합물 2	도펀트 1	4.4	43	6000	77
실시예2	화합물 1	도펀트 1	4.3	44	6000	79
실시예3	화합물 3	도펀트 1	4.2	46	6000	80
실시예4	화합물 4	도펀트 1	4.4	43	6000	77
실시예5	화합물 11	도펀트 1	4.2	46	6000	80
실시예6	화합물 12	도펀트 1	4.4	44	6000	76
실시예7	화합물 13	도펀트 1	4.3	44	6000	77
실시예8	화합물 22	도펀트 1	4.6	43	6000	75
실시예9	화합물 34	도펀트 1	4.4	46	6000	83
실시예10	화합물 41	도펀트 1	4.6	44	6000	74
실시예11	화합물 49	도펀트 1	4.6	44	6000	76
실시예12	화합물 51	도펀트 1	4.2	47	6000	79
실시예13	화합물 57	도펀트 1	4.3	46	6000	78
실시예14	화합물 105	도펀트 1	4.3	46	6000	79
실시예15	화합물 137	도펀트 1	4.7	43	6000	72
실시예16	화합물 145	도펀트 1	4.3	46	6000	78
실시예17	화합물 153	도펀트 1	4.7	44	6000	72

실시예18	화합물 155	도펀트 1	4.2	46	6000	80
실시예19	화합물 204	도펀트 1	4.4	45	6000	69
실시예20	화합물 249	도펀트 1	4.3	47	6000	75
실시예21	화합물 269	도펀트 1	4.4	44	6000	70
실시예22	화합물 297	도펀트 1	4.2	48	6000	74
실시예23	화합물 347	도펀트 1	4.2	48	6000	75
실시예24	화합물 371	도펀트 1	4.3	46	6000	71
실시예25	화합물 378	도펀트 1	4.4	45	6000	70
비교예 1	비교화합물 A	도펀트 1	5.7	37	6000	34
비교예 2	비교화합물 B	도펀트 1	6.3	39	6000	30
비교예 3	비교화합물 C	도펀트 1	4.4	42	6000	52
비교예 4	비교화합물 D	도펀트 1	4.3	41	6000	39
비교예 5	비교화합물 E	도펀트 1	6.0	40	6000	31
비교예 6	비교화합물 F	도펀트 1	6.7	43	6000	25

[0467] 표 3으로부터, 실시예 1 내지 25에 따른 유기 발광 소자는 비교예 1 내지 6의 유기 발광 소자와 비교하여 저구동 전압, 고효율 및/또는 장수명을 가짐을 확인할 수 있다. 이에 따라, 실시예 1 내지 25에 따른 유기 발광 소자의 발광층에서 사용된 호스트는 인광 호스트 물질로 우수한 전하수송 특성을 가지는 동시에 도펀트의 흡수 스펙트럼과 발광 파장 영역이 중복되며, 이로부터 효율 증가와 동등 또는 우수한 구동 전압의 감소와 같은 성능의 개선 및 OLED 재료로서의 능력이 극대화됨을 알 수 있다. 무엇보다 구동 전압 및 수명이 월등히 향상됨을 확인할 수 있다.

[0468] 이에 반해 비교예 1 내지 6에 따른 유기 발광 소자에서 호스트로 사용된 비교화합물들은 전자 수송 능력이 지나치게 약하여 정공 수송과 전자 수송의 균형을 달성하기 어렵거나 융합 고리 중의 피리딘, 피리미딘, 퀴놀살린의 N에 이웃한 탄소가 비치환된 구조, 즉 CH를 가지는 구조로서, 이 경우 이를 적용한 유기 발광 소자의 발광층의 열안정성 및 전기적 안정성이 약할 수 있으며, 이에 따라 이를 발광층의 호스트로서 사용한 비교예에 따른 유기 발광 소자의 구동 전압 및 수명 특성이 크게 낮은 것을 확인할 수 있다.

[0470] **유기 발광 소자의 제작 II**

[0471] **실시예 26 내지 52와 비교예 7 내지 10**

[0472] 발광층의 호스트로서 표 4에 기재된 제1 호스트와 제2 호스트를 사용한 것을 제외하고 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다. 이때, 도펀트:제1 호스트:제2 호스트는 10:45:45의 중량비로 공증착하였다.

[0474] **평가예 II**

[0475] 실시예 26 내지 51 및 비교예 7 내지 10에 따른 유기 발광 소자의 구동 전압, 효율, 휘도 및 수명을 전류 전압 계(Kethley SMU 236)에서 전원을 공급하여, 휘도계 PR650 Spectroscan Source Measurement Unit.(PhotoResearch사 제품임)을 이용하여 평가하였다.

[0476] 그 결과는 표 4와 같다.

표 4

[0477]

실시예	제1호스트	제2호스트	도펀트	구동 전압 (V)	전류 효율 (cd/A)	휘도 (cd/m ²)	T ₉₅ 수명 (hr)
26	화합물 3	E-31	도펀트1	4.0	50	6000	87
27	화합물 34	E-31	도펀트1	4.3	47	6000	89
28	화합물 51	E-31	도펀트1	4.0	49	6000	87
29	화합물 57	E-31	도펀트1	4.2	48	6000	84
30	화합물 105	E-31	도펀트1	4.2	48	6000	85
31	화합물 145	E-31	도펀트1	4.2	47	6000	85
32	화합물 155	E-31	도펀트1	4.0	49	6000	87
33	화합물 249	E-31	도펀트1	4.0	48	6000	83
34	화합물 297	E-31	도펀트1	3.9	49	6000	84
35	화합물 347	E-31	도펀트1	4.1	49	6000	82

36	화합물 3	E-99	도펀트1	4.0	50	6000	86
37	화합물 34	E-99	도펀트1	4.2	48	6000	88
38	화합물 51	E-99	도펀트1	3.9	50	6000	88
39	화합물 57	E-99	도펀트1	4.1	48	6000	86
40	화합물 155	E-99	도펀트1	3.9	50	6000	88
41	화합물 347	E-99	도펀트1	3.9	49	6000	84
42	화합물 3	F-43	도펀트1	3.7	49	6000	87
43	화합물 34	F-43	도펀트1	4.0	48	6000	87
44	화합물 155	F-43	도펀트1	3.9	49	6000	87
45	화합물 347	F-43	도펀트1	3.8	49	6000	85
46	화합물 3	F-99	도펀트1	3.8	51	6000	90
47	화합물 34	F-99	도펀트1	3.9	49	6000	88
48	화합물 155	F-99	도펀트1	3.8	50	6000	91
49	화합물 347	F-99	도펀트1	3.7	49	6000	87
50	화합물 3	F-73	도펀트1	4.2	49	6000	84
51	화합물 155	F-73	도펀트1	4.2	48	6000	84
비교예 7	비교화합물 C	E-31	도펀트1	4.3	44	6000	61
비교예 8	비교화합물 D	E-31	도펀트1	4.2	43	6000	49
비교예 9	비교화합물 C	E-99	도펀트1	4.2	45	6000	57
비교예 10	비교화합물 D	E-99	도펀트1	4.1	44	6000	47

[0479] 표 4로부터, 실시예 26 내지 51에 따른 유기 발광 소자는 비교예 7 내지 10에 따른 유기 발광 소자와 비교하여 동등 또는 저구동 전압에서 향상된 효율 및 월등한 장수명을 가짐을 확인할 수 있다.

[0481] **유기 발광 소자의 제작 III**

[0482] **실시예 52**

[0483] 합성예 9 에서 얻은 화합물 11을 호스트로 사용하고, (piq)₂Ir(acac)(도펀트 2)을 도펀트로 사용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0484] 양극으로는 ITO를 1000 Å의 두께로 사용하였고, 음극으로는 알루미늄(Al)을 1000 Å의 두께로 사용하였다. 구체 적으로, 유기발광소자의 제조방법을 설명하면, 양극은 15Ω/cm²의 면저항값을 가진 ITO 유리기판을 50mm x 50mm x 0.7mm의 크기로 잘라서 아세톤과 이소프로필알코올과 순수물 속에서 각 15 분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다.

[0485] 상기 기판 상부의 진공도 650 x 10⁻⁷Pa, 증착속도 0.1 내지 0.3 nm/s의 조건으로 N4,N4'-디(나프탈렌-1-일)-N4,N4'-디페닐비페닐-4,4'-디아민(N4,N4'-di(naphthalene-1-yl)-N4,N4'-diphenylbiphenyl-4,4'-diamine:NPB) (80nm)를 증착하여 800 Å의 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 동일한 진공 증착조건에서 합성예 9 에서 얻은 화합물 11을 이용하여 막 두께 300 Å의 발광층을 형성하였고, 이때 인광 도펀트인 (piq)₂Ir(acac)(도펀트 2)을 동시에 증착하였다. 이때, 인광 도펀트의 증착속도를 조절하여, 발광층의 전체량을 100 중량%로 하였을 때, 인 광 도펀트의 배합량이 3 중량%가 되도록 증착하였다.

[0486] 상기 발광층 상부에 동일한 진공 증착조건을 이용하여 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)-4-(페닐페놀레이트)알루 미늄 (bis(2-methyl-8-quinolinolate)-4-(phenylphenolato)aluminium: BALq)를 증착하여 막 두께 50Å의 정공 저지층을 형성하였다. 이어서, 동일한 진공 증착조건에서 Alq3를 증착하여, 막 두께 200Å의 전자수송층을 형성 하였다. 상기 전자수송층 상부에 음극으로서 LiF와 Al을 순차적으로 증착하여 유기 광전자 소자를 제작하였다.

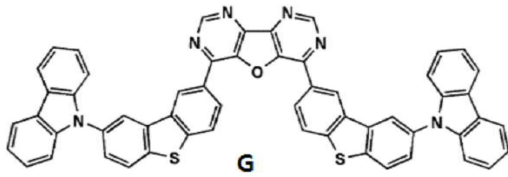
[0487] 상기 유기 광전자 소자의 구조는 ITO/ NPB (80 nm)/ EML (화합물 11 (97중량%) + (piq)₂Ir(acac) (3 중량%), 30nm)/ Balq (5nm)/ Alq3 (20nm)/ LiF (1nm) / Al (100nm) 의 구조로 제작하였다.

[0488] **실시예 53 내지 실시예 57**

[0489] 발광층 형성시 호스트로서 화합물 11 대신 화합물 16, 45, 110, 204 및 304를 각각 사용한 것을 제외하고 실시 예 52와 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0490] **비교예 11 및 12**

[0491] 발광층 형성시 호스트로서 화합물 11 대신 비교화합물 G 및 C를 각각 사용한 것을 제외하고 실시예 52와 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.



[0492]

[0494] **평가예 III**

[0495] 실시예 52 내지 57과 비교예 11, 12에 따른 유기발광소자의 발광효율 및 수명특성을 평가하였다.

[0496] 구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 표 5와 같다.

[0497] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[0498] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[0499] (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

[0500] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

[0501] (3) 발광효율 측정

[0502] 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm²)의 전류 효율(cd/A) 을 계산하였다.

[0503] (4) 수명 측정

[0504] 휘도(cd/m²)를 5000 cd/m² 로 유지하고 전류 효율(cd/A)이 90%로 감소하는 시간을 측정하여 결과를 얻었다.

[0505] (5) Roll-off

[0506] 상기 (3)의 특성수치 중 (Max 수치 - 5000cd/m²일때의 수치 / Max 수치)로 계산하여 효율의 하락폭을 %로 계산 하였다.

표 5

[0507]

	제1 호스트	구동 전압 (V)	발광 효율 (cd/A)	Roll-off (%)	수명T90 (h)
실시예 52	화합물 11	4.37	15.4	14.0	140
실시예 53	화합물 16	4.30	15.6	13.8	143
실시예 54	화합물 45	4.29	15.8	14.1	140
실시예 55	화합물 110	4.41	14.8	14.9	136
실시예 56	화합물 204	4.45	15.0	14.4	132
실시예 57	화합물 304	4.38	16.0	14.6	135
비교예 11	비교화합물 15	5.71	12.4	12.0	73
비교예 12	비교화합물 164	4.61	13.9	10.5	110

[0509] 표 5를 참고하면, 실시예 52 내지 57에 따른 유기발광소자는 비교예 11, 12에 따른 유기발광소자와 비교하여 동등 또는 저구동 전압, 동등 또는 고효율 및 장수명을 가짐을 확인할 수 있다.

[0510] 이에 따라, 실시예 52 내지 57에 따른 유기 발광 소자의 발광층에서 사용된 호스트는 인광 호스트 물질로 우수한 전하수송 특성을 가지는 동시에 도펀트의 흡수 스펙트럼과 발광 파장 영역이 중복되며, 이로부터 효율 증가, 구동 전압의 감소 및 특히 장수명과 같은 성능의 개선 및 OLED 재료로서의 능력이 극대화됨을 알 수 있다.

[0512] **유기 발광 소자의 제작 IV**

[0513] 실시예 58 내지 73과 비교예 13 내지 16

[0514] 발광층의 호스트로서 표 7에 기재된 제1 호스트와 제2 호스트를 사용한 것을 제외하고 실시예 52와 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다. 이때, 도펀트:제1 호스트:제2 호스트는 3:48.5:48.5의 중량비로 공증착하였다.

[0516] **평가예 IV**

[0517] 실시예 58 내지 72 및 비교예 13 내지 16에 따른 유기 발광 소자의 구동 전압, 효율, 휘도 및 수명을 전류 전압계(Kethley SMU 236)에서 전원을 공급하여, 휘도계 PR650 Spectroscan Source Measurement Unit.(PhotoResearch사 제품임)을 이용하여 평가하였다.

[0518] 그 결과는 표 6과 같다.

표 6

[0519]	제1 호스트	제2호스트	구동 전압 (V)	발광 효율 (cd/A)	Roll-off (%)	수명T90 (h)	
	실시예 58	화합물 11	E-31	4.26	17.8	10.4	166
	실시예 59	화합물 11	E-99	4.23	18.2	10.2	162
	실시예 60	화합물 11	F-104	3.95	19.3	10.0	185
	실시예 61	화합물 11	F-106	3.89	19.5	10.1	187
	실시예 62	화합물 11	F-107	3.99	18.9	10.0	179
	실시예 63	화합물 11	F-110	4.03	18.7	10.2	175
	실시예 64	화합물 16	F-104	3.93	19.6	10.3	189
	실시예 65	화합물 45	F-104	3.85	19.8	10.1	190
	실시예 66	화합물 110	F-104	3.97	18.9	10.2	182
	실시예 67	화합물 204	F-104	3.99	18.8	10.0	180
	실시예 68	화합물 304	F-104	3.85	19.5	10.4	180
	실시예 69	화합물 16	F-106	3.91	19.7	10.0	191
	실시예 70	화합물 45	F-106	3.84	19.8	10.0	194
	실시예 71	화합물 110	F-106	3.94	19.2	9.9	186
	실시예 72	화합물 204	F-106	3.96	19.1	10.1	185
	실시예 73	화합물 304	F-106	3.83	19.7	10.6	183
	비교예 13	비교화합물 15	F-104	4.51	16.7	12.0	105
	실시예 14	비교화합물 164	F-104	4.21	17.6	10.5	139
	실시예 15	비교화합물 15	F-106	4.46	17.2	11.2	120
	실시예 16	비교화합물 164	F-106	4.16	17.8	10.2	145

[0520] 표 6으로부터, 실시예 58 내지 72에 따른 유기 발광 소자는 비교예 13 내지 16에 따른 유기 발광 소자와 비교하여 동등 또는 저구동 전압, 동등 또는고효율을 가지면서 장수명을 가짐을 확인할 수 있다.

[0522] 이상에서 본 발명의 바람직한 실시예들에 대하여 상세하게 설명하였지만 본 발명의 권리범위는 이에 한정되는 것은 아니고 다음의 청구 범위에서 정의하고 있는 본 발명의 기본 개념을 이용한 당업자의 여러 변형 및 개량 형태 또한 본 발명의 권리범위에 속하는 것이다.

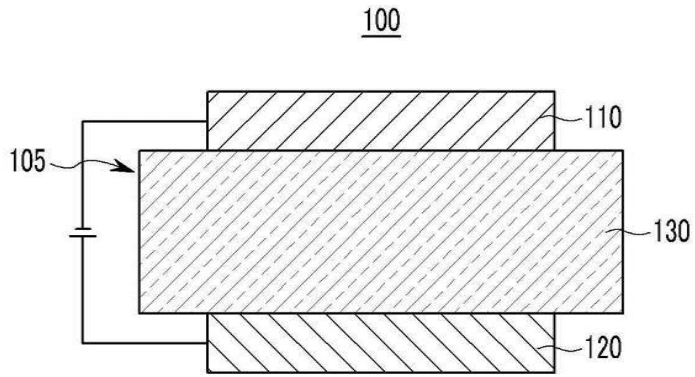
부호의 설명

- [0529] 100, 200: 유기 발광 소자
- 105: 유기층
- 110: 애노드
- 120: 캐소드
- 130, 230: 발광층

140: 전자 보조층

도면

도면1



도면2

