



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0113664  
(43) 공개일자 2019년10월08일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
  - C07D 491/20 (2006.01) C07D 307/91 (2006.01)
  - C07D 333/76 (2006.01) C07D 487/04 (2006.01)
  - C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
  - H01L 51/50 (2006.01)
- (52) CPC특허분류  
  - C07D 491/20 (2013.01)
  - C07D 307/91 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2019-0035729
- (22) 출원일자 2019년03월28일  
  - 심사청구일자 2019년03월28일
- (30) 우선권주장  
  - 1020180036077 2018년03월28일 대한민국(KR)
- (71) 출원인  
  - 주식회사 엘지화학
  - 서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)
- (72) 발명자  
  - 장분재
  - 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원
  - 차용범
  - 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원
  - (뒷면에 계속)
- (74) 대리인  
  - 정순성

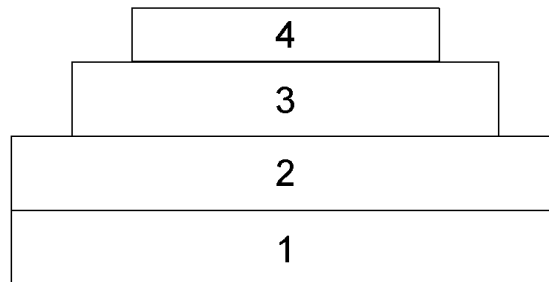
전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 발명의 명칭 **헤테로고리 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자**

**(57) 요약**

본 명세서에는 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다

**대표도** - 도1



(52) CPC특허분류

*C07D 333/76* (2013.01)  
*C07D 487/04* (2013.01)  
*C09K 11/06* (2013.01)  
*H01L 51/0067* (2013.01)  
*H01L 51/0071* (2013.01)  
*H01L 51/5012* (2013.01)  
*C09K 2211/1033* (2013.01)

(72) 발명자

**이동훈**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**정민우**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**이정하**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**한수진**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

**박슬찬**

대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원

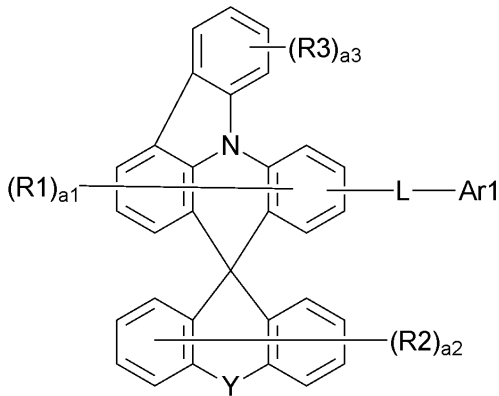
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

Y는 O 또는 S이고,

R1 내지 R3는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 하이드록시기; 니트릴기; 니트로기; 에스테르기; 치환 또는 비치환된 알킬카보닐기; 치환 또는 비치환된 아릴카보닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬싸이오기; 치환 또는 비치환된 아릴싸이오기; 치환 또는 비치환된 알킬설폭시기; 치환 또는 비치환된 아릴설폭시기; 치환 또는 비치환된 알킬포스핀기; 치환 또는 비치환된 아릴포스핀기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성하고,

L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 아릴렌기이고,

Ar1은 시아노기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,

a1은 0 내지 6의 정수이고, a1이 2 이상인 경우 R1은 서로 동일하거나 상이하며,

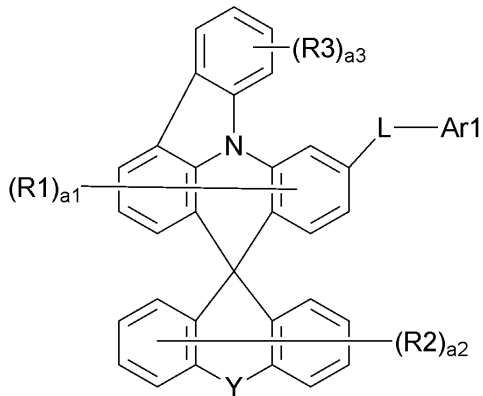
a2는 0 내지 8의 정수이고, a2가 2 이상인 경우 R2는 서로 동일하거나 상이하며,

a3는 0 내지 4의 정수이고, a3가 2 이상인 경우 R3는 서로 동일하거나 상이하다.

청구항 2

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

[화학식 2]



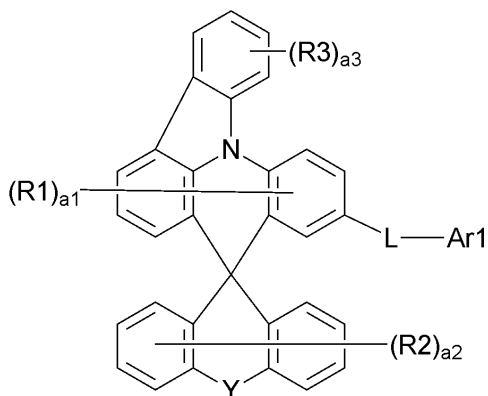
상기 화학식 2에 있어서,

Y, R1 내지 R3, L, Ar1 및 a1 내지 a3의 정의는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

### 청구항 3

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시되는 것인 헤테로고리 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에 있어서,

Y, R1 내지 R3, L, Ar1 및 a1 내지 a3의 정의는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

### 청구항 4

청구항 1에 있어서, L은 직접결합; 또는 중수소, 시아노기, 알킬기 및 아릴기 중 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴렌기인 것인 헤테로고리 화합물.

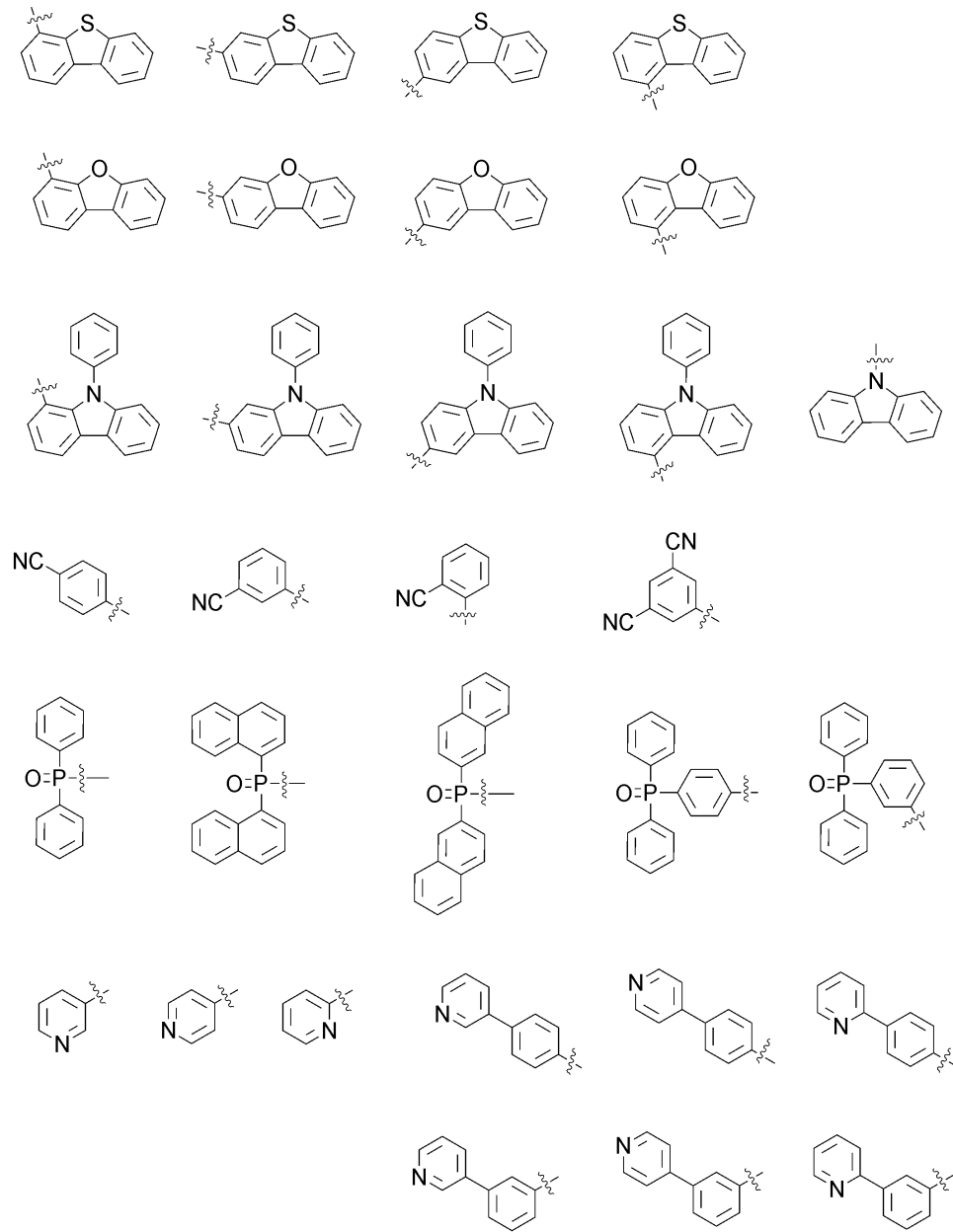
### 청구항 5

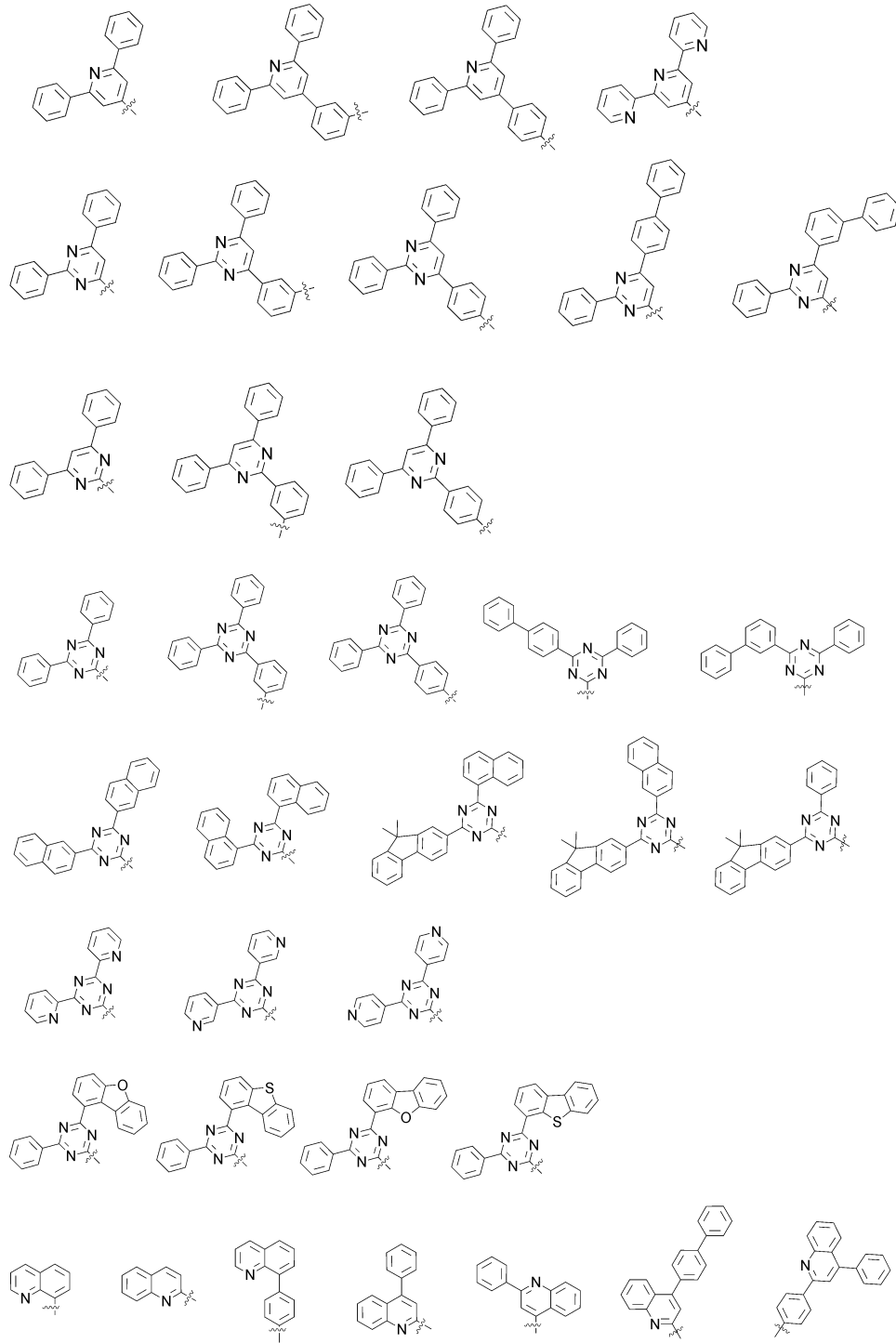
청구항 1에 있어서, Ar1은 시아노기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 또는 피롤, 퓨란, 티오펜, 이미다졸, 옥사졸, 티아졸, 피리딘, 피리미딘, 다이아진 또는 트리아진을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기인 것인 헤테로고리 화합물.

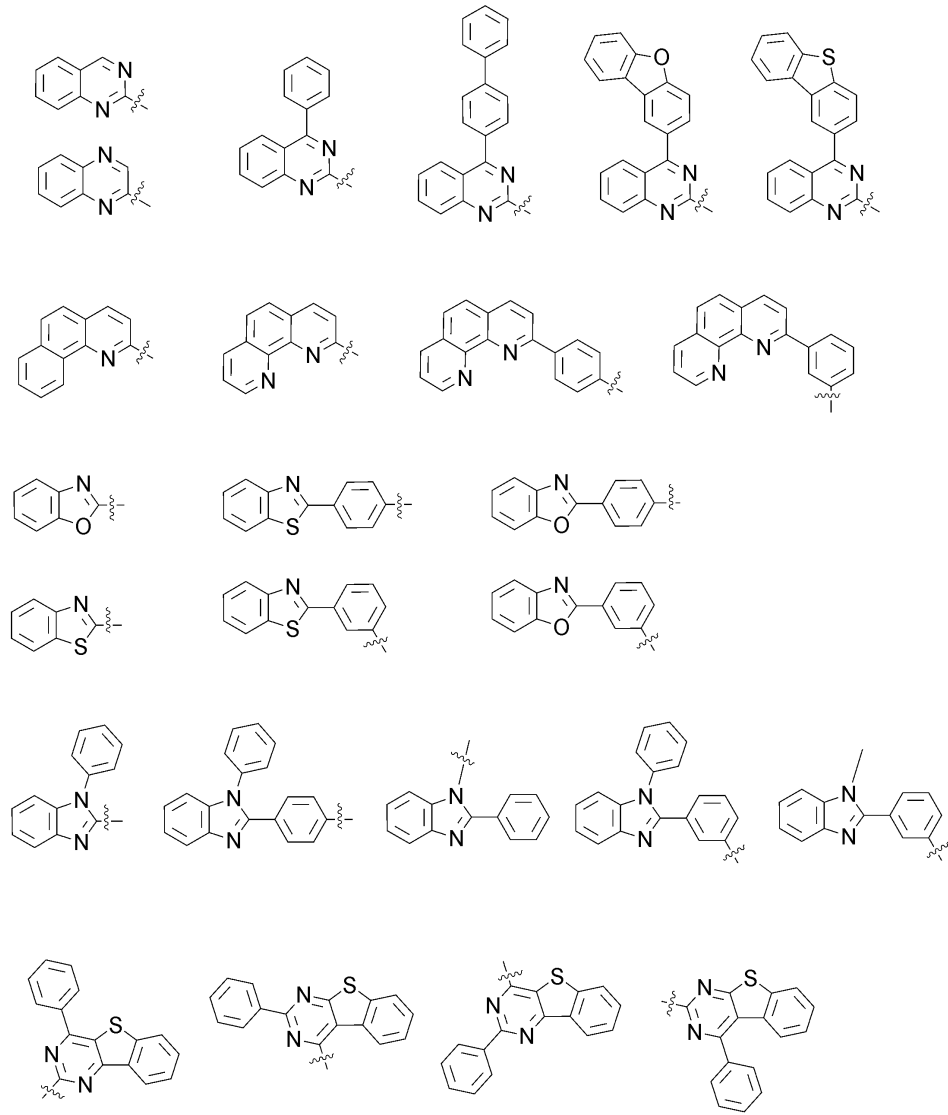


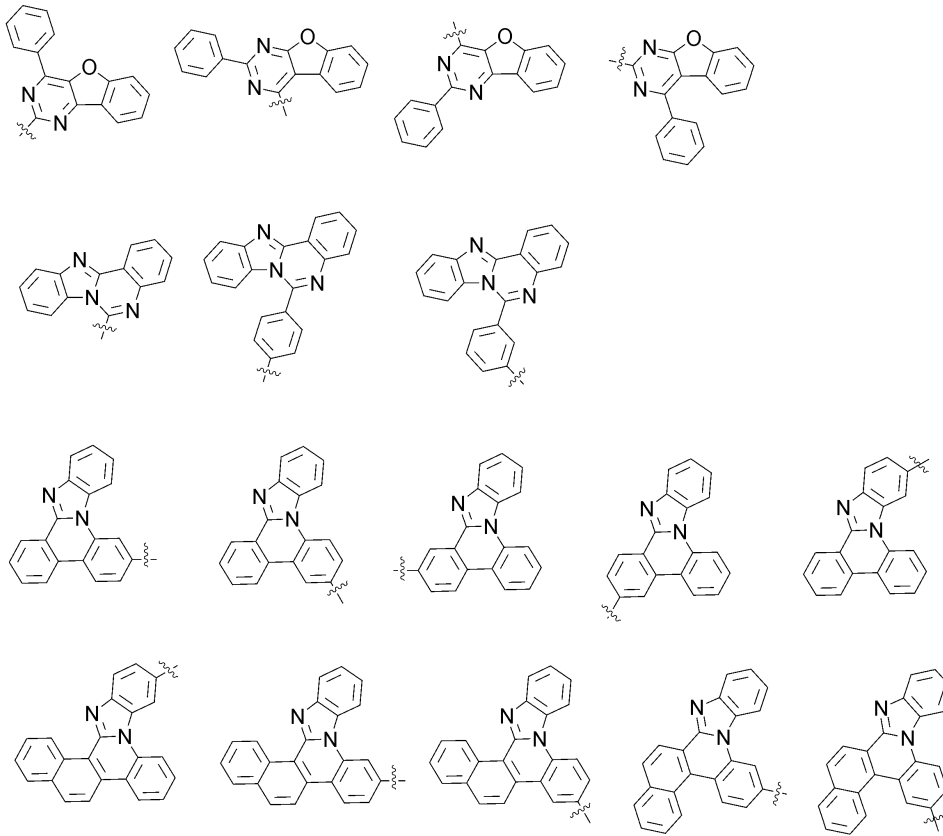
청구항 6

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 -L-Ar1은 하기의 기 중에서 선택된 어느 하나인 것인 헤테로고리 화합물:



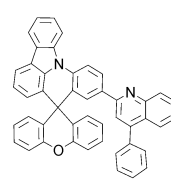
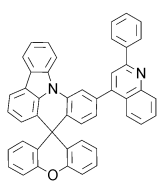
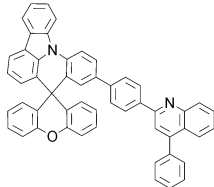
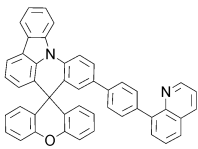
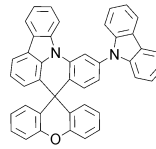
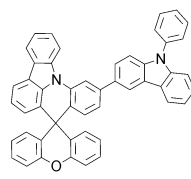
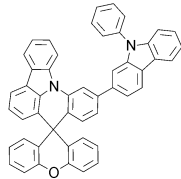
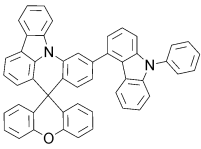
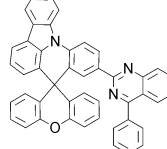
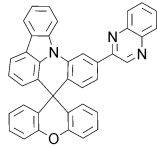
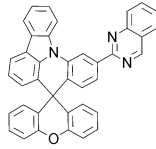
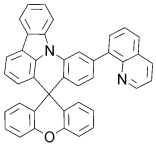
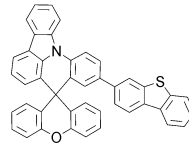
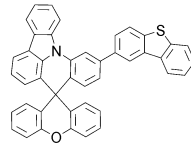
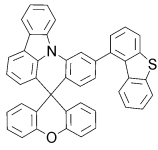
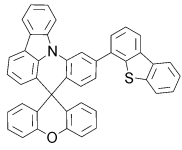
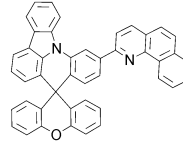
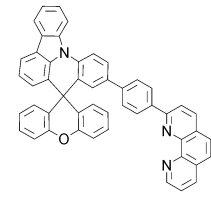
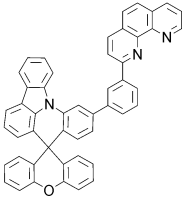
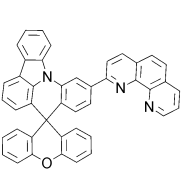
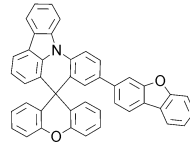
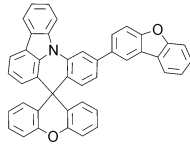
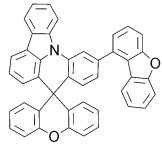
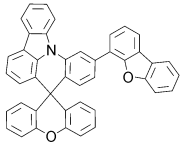


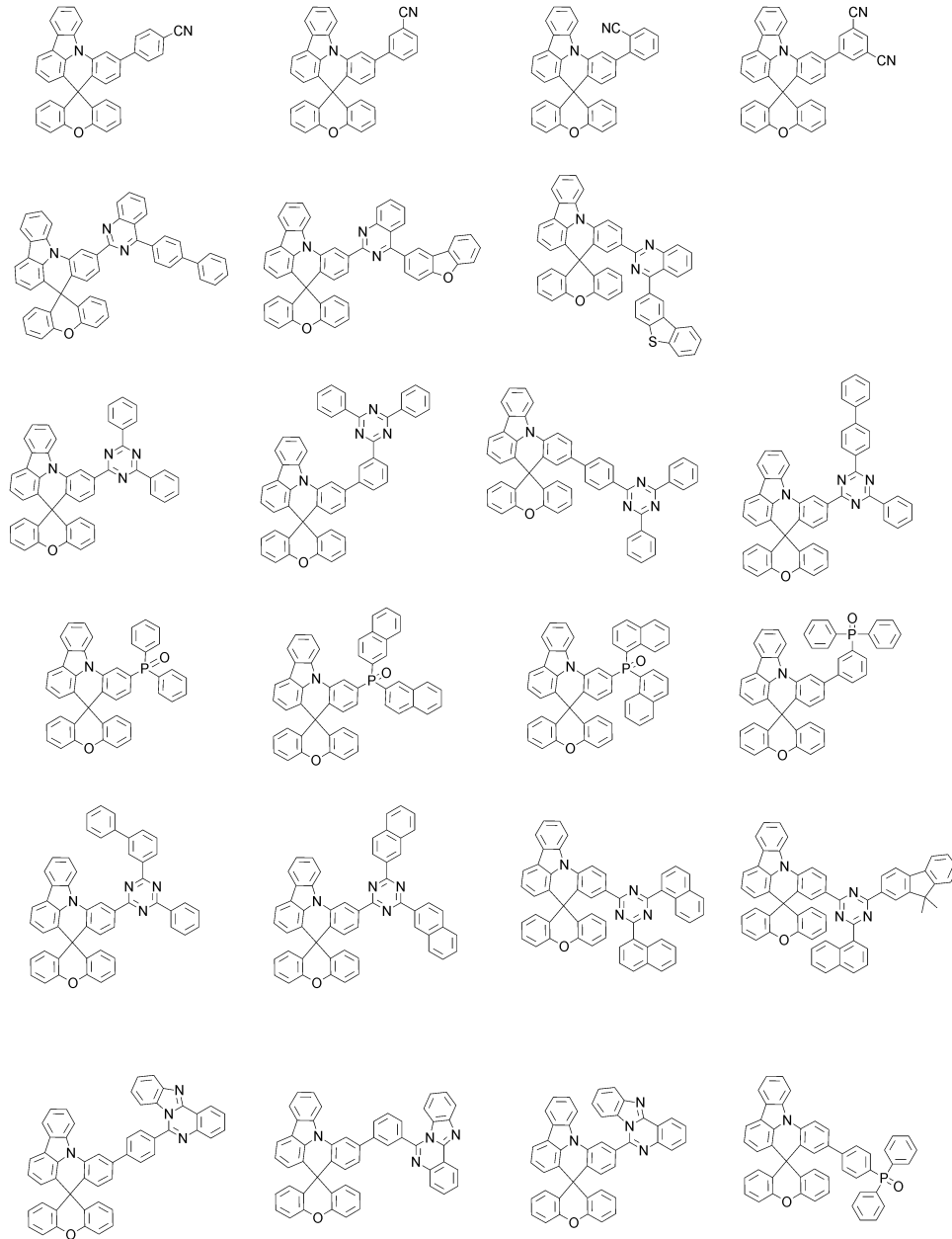


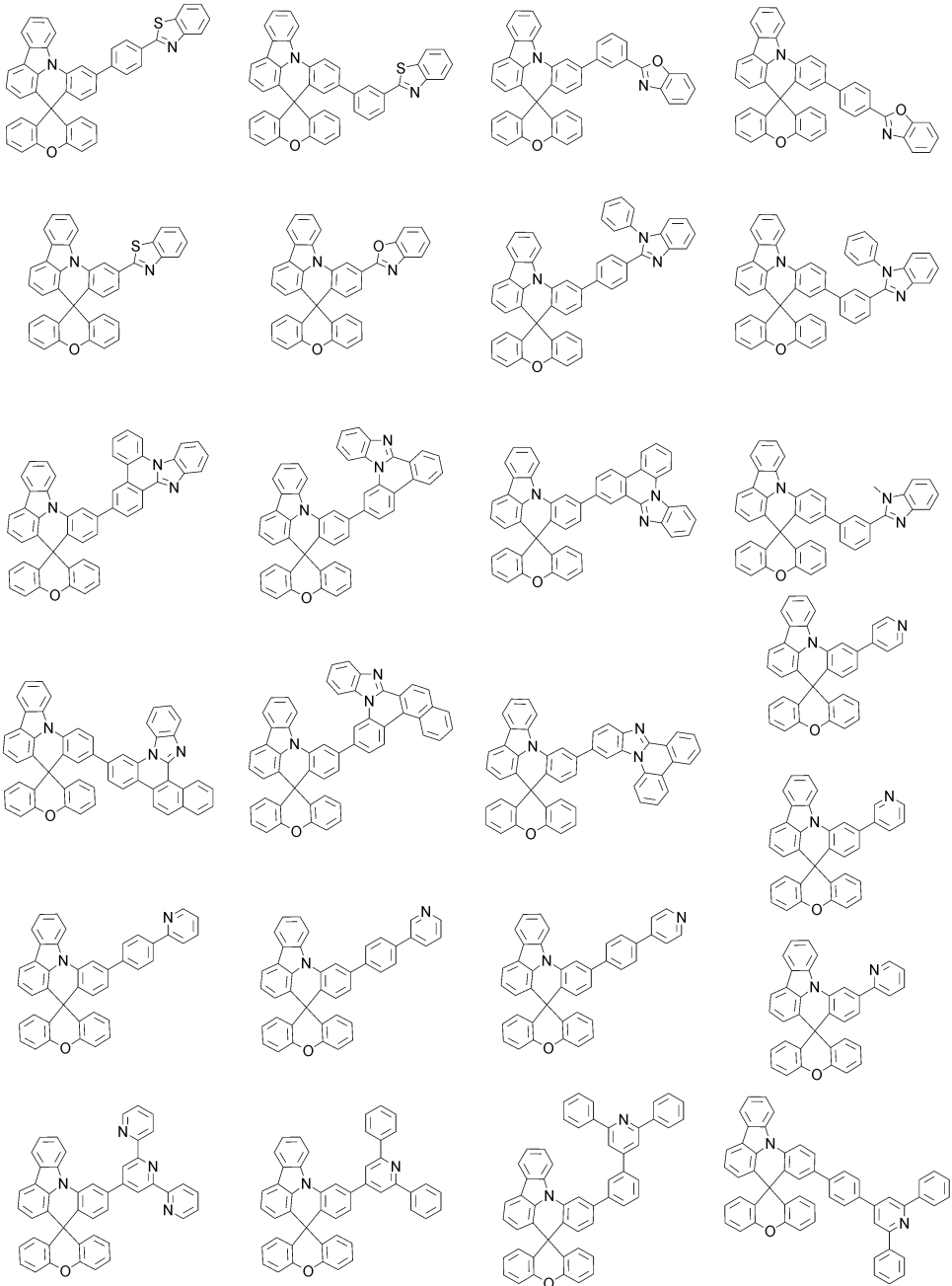


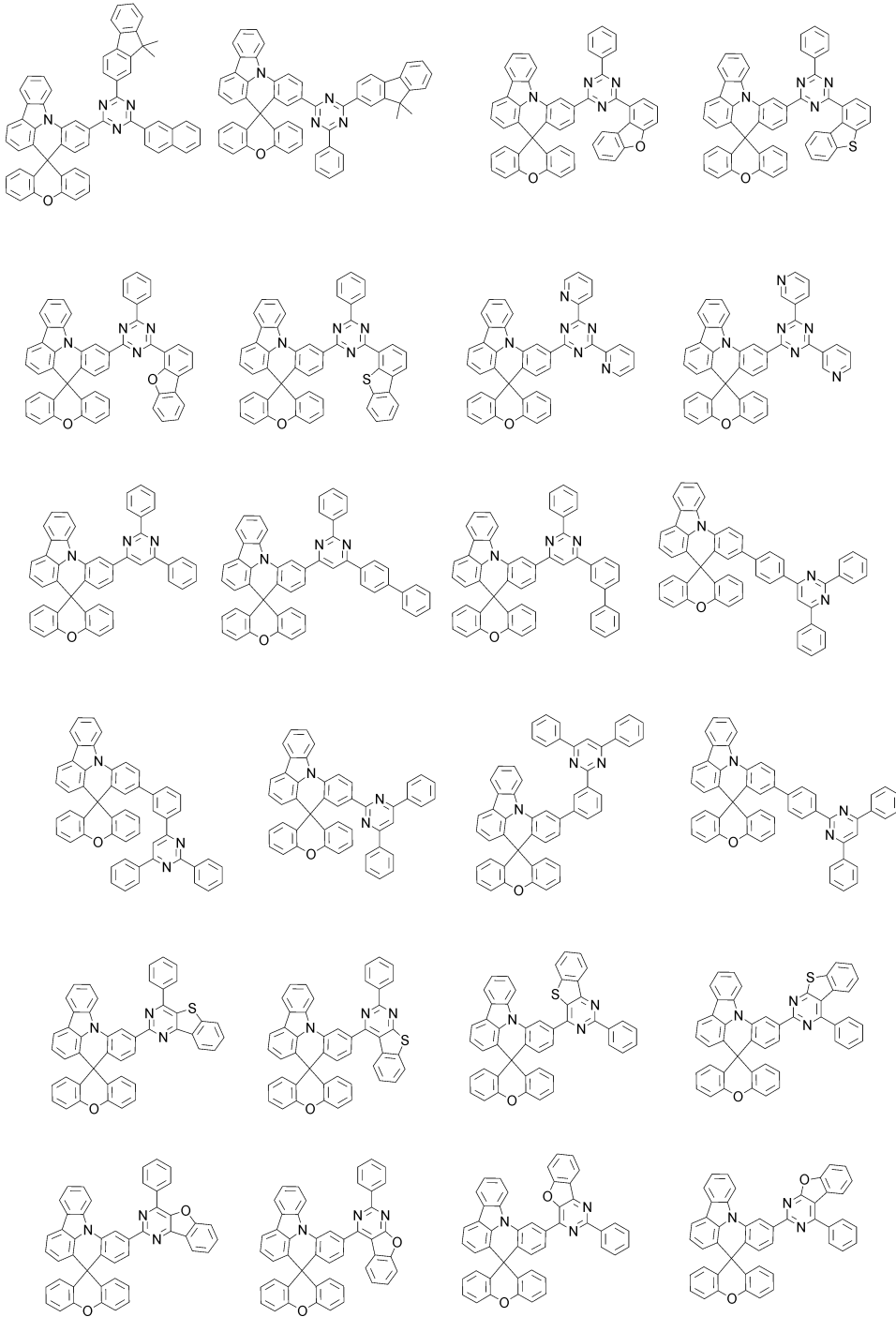
**청구항 7**

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 하기의 헤테로고리 화합물 중에서 선택된 어느 하나인 것인 헤테로고리 화합물:

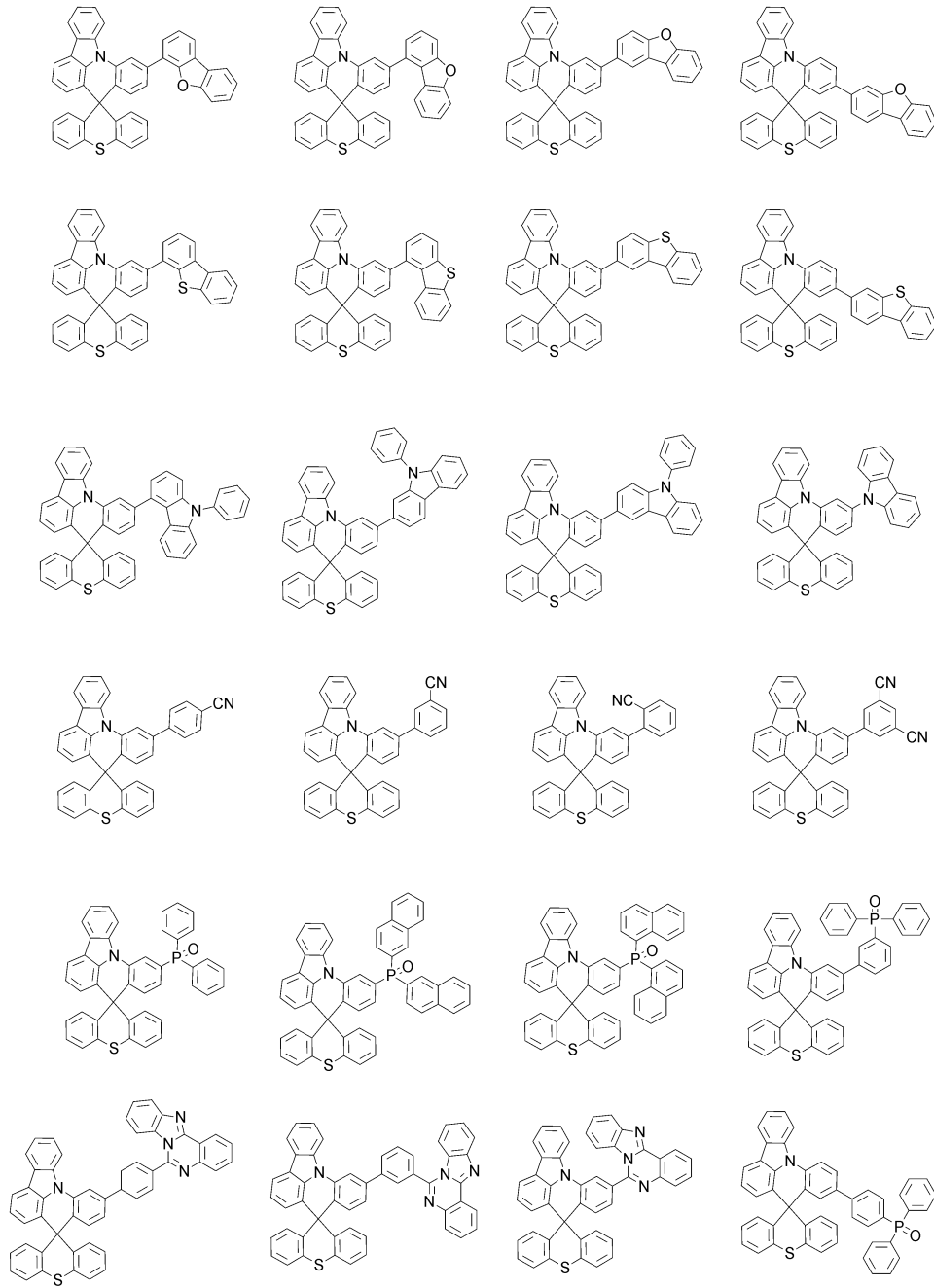


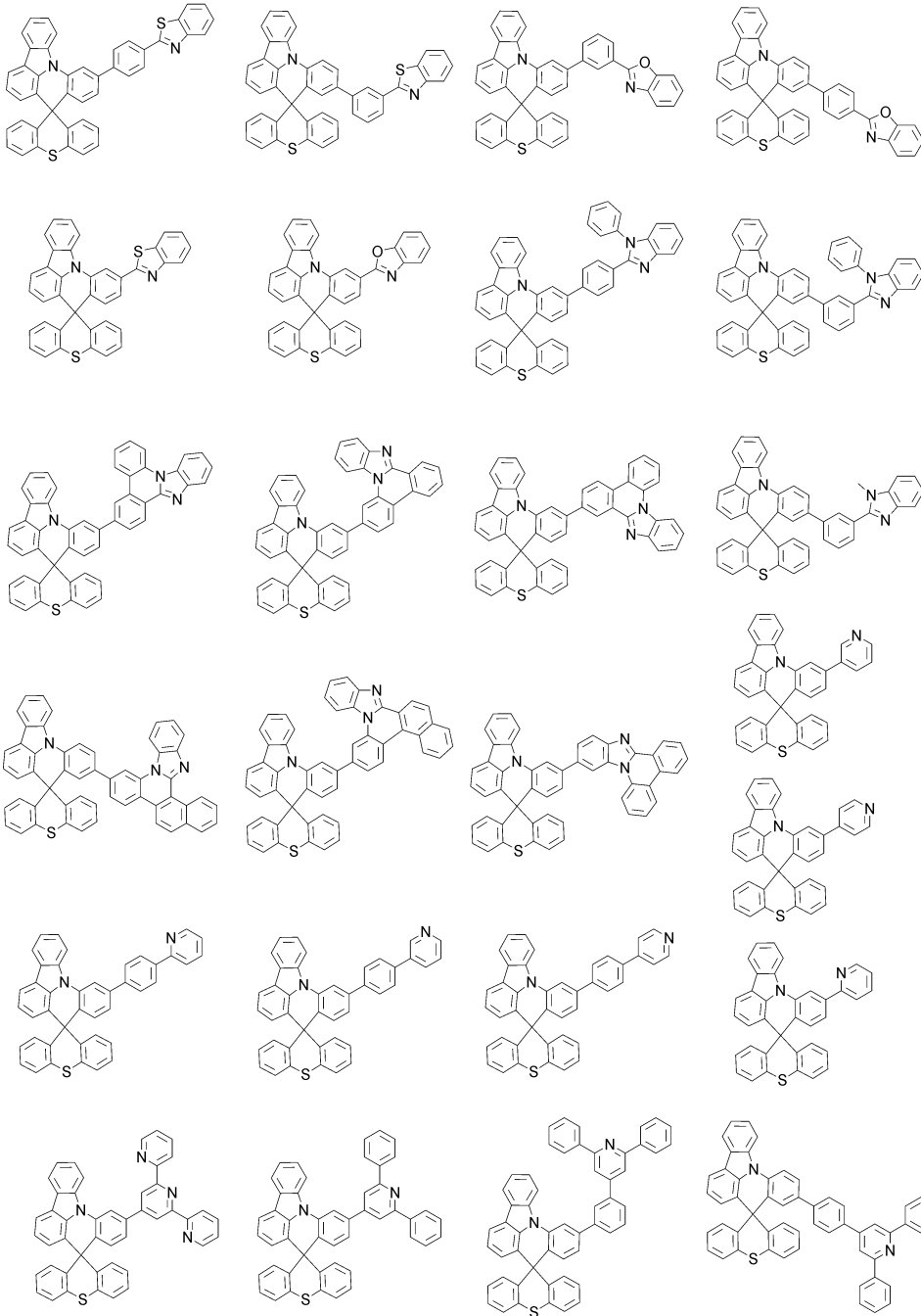


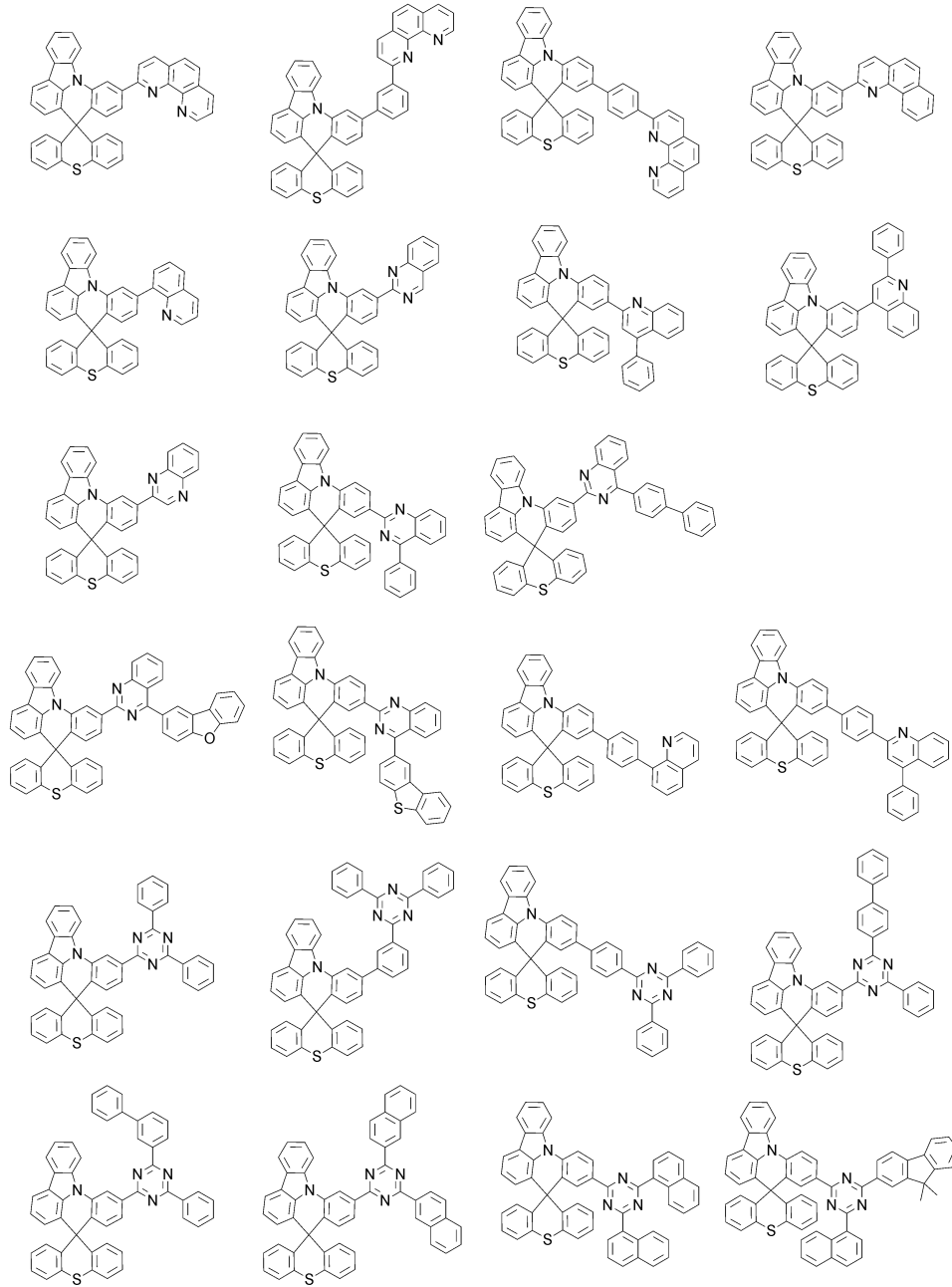


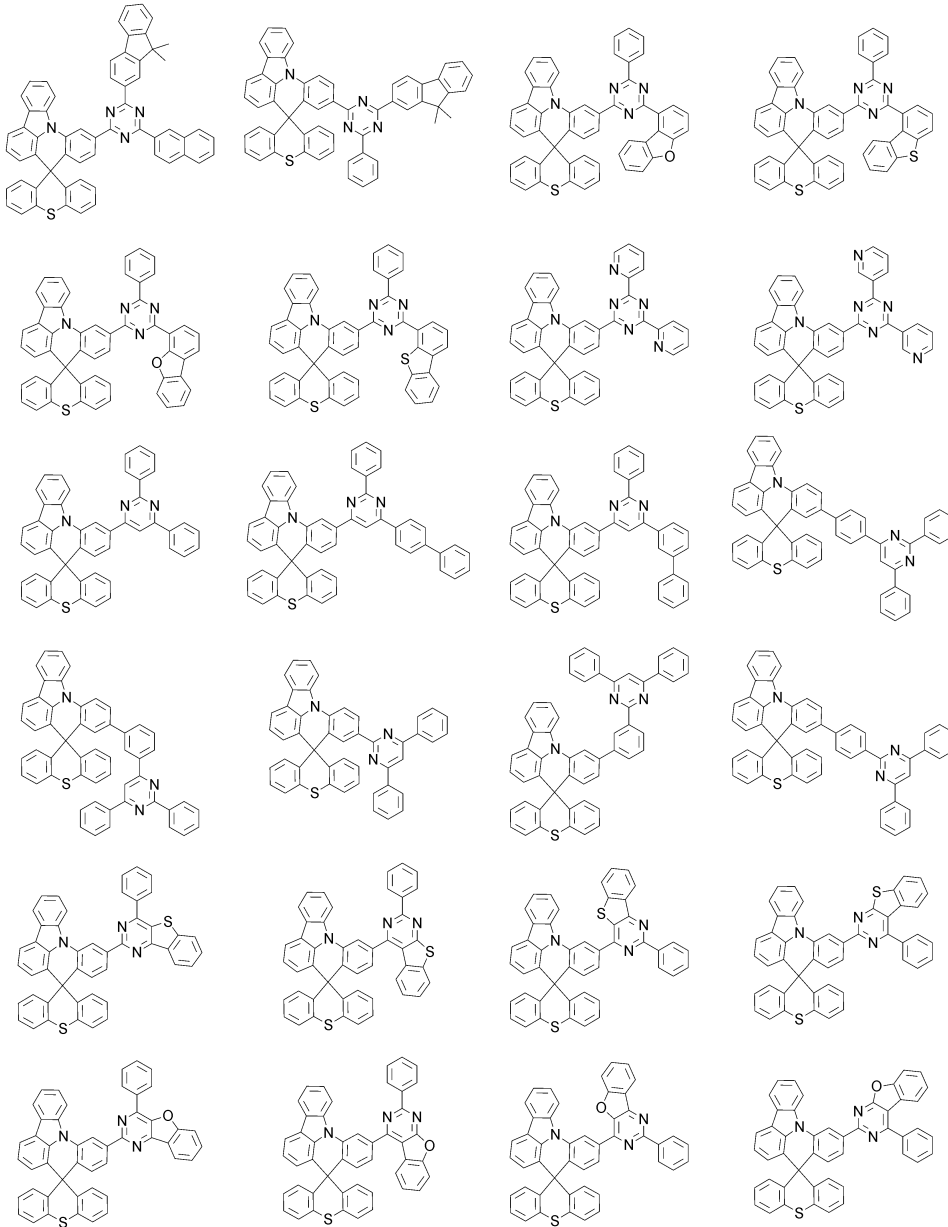












**청구항 8**

캐소드, 애노드 및 상기 캐소드와 상기 애노드 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 청구항 1 내지 7 중 어느 하나의 항에 따른 헤테로고리 화합물은 상기 1층 이상의 유기물층 중 1층 이상에 포함되는 것인 유기 발광 소자.

**청구항 9**

청구항 8에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물은 전자 주입층, 전자 수송층, 전자 주입 및 수송을 동시에 하는 층 및 전자 조절층 중 적어도 한 층에 포함되는 것인 유기 발광 소자.

**청구항 10**

청구항 8에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물은 발광층에 포함되는 것인 유기 발광 소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

본 발명은 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

[0001]

[0002] 본 출원은 2018년 3월 28일 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제10-2018-0036077호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.

**배경 기술**

[0003] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 통상 애노드와 캐소드 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어지며, 예컨대 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 애노드에서는 정공이, 캐소드에서는 전자가 유기물층에 주입되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 난다.

[0004] 상기와 같은 유기 발광 소자를 위한 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0005] (특허문헌 0001) 한국 공개특허공보 제10-2011-0027635호

**발명의 내용**

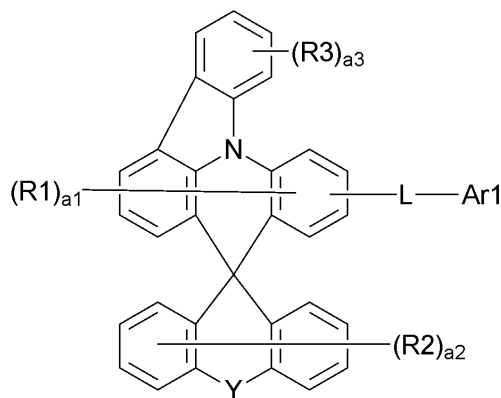
**해결하려는 과제**

[0006] 본 출원은 유기 발광 소자의 유기물층, 특히 발광층, 전자 주입층 또는 전자 수송층에 사용하였을 때, 구동 전압, 효율 및/또는 수명 특성이 우수한 헤테로고리 화합물을 제공하고자 한다.

**과제의 해결 수단**

[0007] 본 명세서의 일 실시상태는 하기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 제공한다.

[0008] [화학식 1]



[0009] 상기 화학식 1에 있어서,  
 [0010] Y는 0 또는 S이고,

[0011] R1 내지 R3는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 하이드록시기; 니트릴기; 니트로기; 에스테르기; 치환 또는 비치환된 알킬카보닐기; 치환 또는 비치환된 아릴카보닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬싸이오기; 치환 또는 비치환된 아릴싸이오기; 치환 또는 비치환된 알킬설폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴설폰시기; 치환 또는 비치환된 알킬포스핀기; 치환 또는 비치환된 아릴포스핀기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 아틸기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테

로아틸기이거나, 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성하고,

- [0013] L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 아틸렌기이고,
- [0014] Ar1은 시아노기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아틸기이고,
- [0015] a1은 0 내지 6의 정수이고, a1이 2 이상인 경우 R1은 서로 동일하거나 상이하며,
- [0016] a2는 0 내지 8의 정수이고, a2가 2 이상인 경우 R2는 서로 동일하거나 상이하며,
- [0017] a3는 0 내지 4의 정수이고, a3가 2 이상인 경우 R3는 서로 동일하거나 상이하다.
- [0018] 또한, 본 명세서의 다른 실시상태는 캐소드, 애노드 및 상기 캐소드와 상기 애노드 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 전술한 헤테로고리 화합물은 상기 1층 이상의 유기물층 중 1층 이상에 포함되는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

**발명의 효과**

- [0019] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료, 특히 발광; 전자 주입; 전자 수송; 또는 전자 주입 및 전자 수송 재료로 사용된다.
- [0020] 몇몇 실시상태에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 효율이 향상될 수 있다.
- [0021] 몇몇 실시상태에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 구동전압이 낮아질 수 있다.
- [0022] 몇몇 실시상태에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 수명 특성이 향상될 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

- [0023] 도 1은 기관(1), 애노드(2), 발광층(3) 및 캐소드(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.  
 도 2는 기관(1), 애노드(2), 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7), 전자 수송층(8) 및 캐소드(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.  
 도 3은 기관(1), 애노드(2), 정공 주입층(5), 제1 정공 수송층(6a), 제2 정공 수송층(6b), 발광층(3), 전자 주입 및 수송층(9) 및 캐소드(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

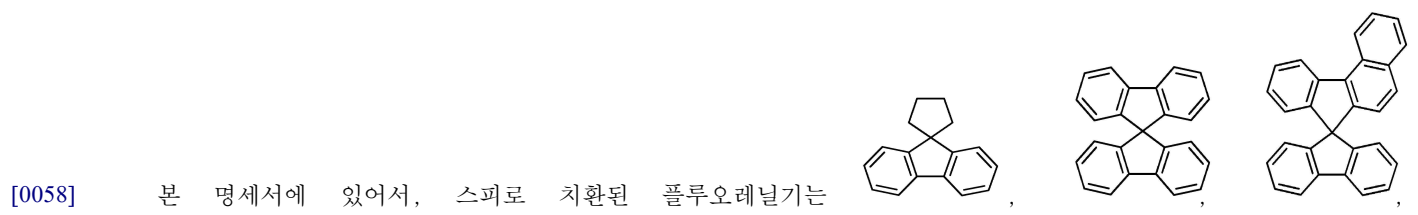
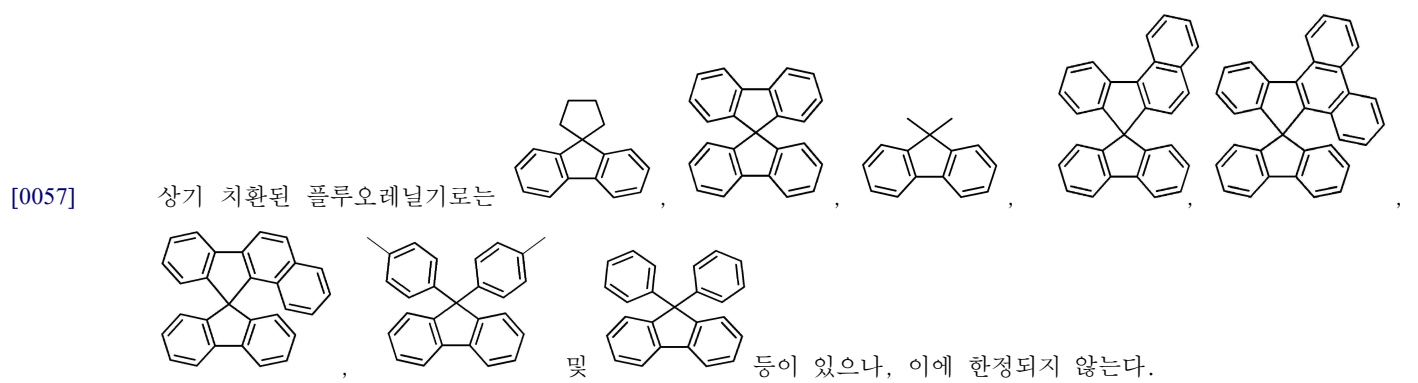
- [0024] 이하 본 출원에 대하여 더욱 상세히 설명한다.
- [0025] 본 명세서의 일 실시상태는 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 제공한다.
- [0026] 본 명세서에 있어서,  $\text{-}\overset{\text{R}}{\text{C}}\text{-}$ 는 다른 치환기 또는 결합부에 결합되는 부위를 의미한다.
- [0027] 상기 치환기들의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0028] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 알킬기; 알케닐기; 알카이닐기; 할로젠기; 이미드기; 하이드록시기(-OH); 알콕시기; 아릴옥시기; 폼일기(-CHO); 카르복시기(-COOH); 에스테르기; 할로폼일기; 알킬카보닐기; 아릴카보닐기; 실릴기; 붕소기; 알킬포스핀기; 아릴포스핀기; 아릴포스핀옥사이드기; 포스포네이트기(-PO<sub>3</sub>H); 설페닐기(-SH); 알킬싸이오기; 아릴싸이오기; 알킬설폭시기; 아릴설폭시기; 아틸기; 헤테로아틸기; 니트릴기(-CN); 및 니트로기(-NO<sub>2</sub>)로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 기 또는 상기 군에서 선택된 기 중 2개 이상의 기가 연결된 기로 치환 또는 비치환된 것을 의미한다.
- [0029] 본 명세서에 있어서, 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄의 포화 탄화수소를 의미한다. 상기 알킬기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 6이다. 상기 알킬기는 사슬형 또는 고리형일 수 있다.
- [0030] 상기 사슬형 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, n-프로필, 이소프로필, 부틸, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, sec-부틸, 1-메틸부틸, 1-에틸부틸, 펜틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, 헥실, n-헥실,

1-메틸펜틸, 2-메틸펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸프로필, 1,1-디메틸프로필, 이소헥실, 4-메틸헥실, 5-메틸헥실 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

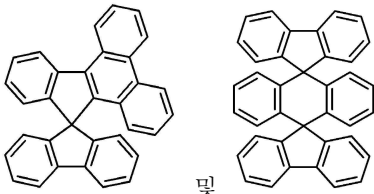
- [0031] 상기 고리형 알킬기(시클로알킬기)의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 3 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 24이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 14이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 8이다. 상기 시클로알킬기의 구체적인 예로는 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 3-메틸시클로펜틸, 2,3-디메틸시클로펜틸, 시클로헥실, 3-메틸시클로헥실, 4-메틸시클로헥실, 2,3-디메틸시클로헥실, 3,4,5-트리메틸시클로헥실, 4-tert-부틸시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0032] 본 명세서에 있어서, 알케닐기는 탄소-탄소 이중결합을 가지는 탄화수소기를 나타내며, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 2 내지 30인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 20이다. 알케닐기의 구체적인 예로는 에테닐, 비닐, 프로페닐, 알릴, 이소프로페닐, 부테닐, 이소부테닐, n-펜테닐 및 n-헥세닐이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0033] 본 명세서에 있어서, 알카이닐기는 탄소-탄소 삼중결합을 가지는 탄화수소기를 나타내며, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 2 내지 30인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알카이닐기의 탄소수는 2 내지 20이다. 상기 알카이닐기의 구체적인 예로는 메타이닐, 에타이닐, 2-프로파이닐, 2-부타이닐, 1-메틸-2-부타이닐, 2 펜타이닐 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0034] 본 명세서에 있어서, 할로젠기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.
- [0035] 본 명세서에 있어서, 알콕시기는 산소원자에 알킬기가 결합된 기를 의미하며, 탄소수는 특별히 한정되지는 않으나 1 내지 30인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알콕시기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알콕시기의 탄소수는 1 내지 10이다. 상기 알콕시기의 구체적인 예로는 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 이소부틸옥시기, sec-부틸옥시기, 펜틸옥시기, iso-아밀옥시기, 헥실옥시기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0036] 본 명세서에 있어서, 아릴옥시기는 산소원자에 아릴기가 결합된 기를 의미한다. 상기 아릴옥시기의 구체적인 예로는 페녹시, 1-나프틸옥시, 3-메틸페녹시, 4-메톡시페녹시 등이 있으나 이에 한정되지 않는다. 상기 아릴옥시기의 아릴기에는 후술하는 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [0037] 본 명세서에 있어서, 에스테르기는  $-COOR_{10}$ 이며,  $R_{10}$ 은 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이다. 일 실시상태에 있어서, 상기  $R_{10}$ 은 치환 또는 비치환된 C1-C10의 알킬기; 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 C2-C30의 아릴기이다.
- [0038] 본 명세서에 있어서, 할로폼일기는  $-COX$ 로, X는 할로젠기를 의미한다.
- [0039] 본 명세서에 있어서, 알킬카보닐기는 알킬기가 결합된 카보닐기( $-CO-$ )를 의미한다.
- [0040] 본 명세서에 있어서, 아릴카보닐기는 카보닐기( $-CO-$ )에 아릴기가 결합된 기를 의미한다.
- [0041] 본 명세서에 있어서, 실릴기는  $-SiR_xR_yR_z$ 의 화학식으로 표시될 수 있고, 상기  $R_x$ ,  $R_y$  및  $R_z$ 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다. 상기 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0042] 본 명세서에 있어서, 붕소기는  $-BR_mR_n$ 의 화학식으로 표시될 수 있고, 상기  $R_m$  및  $R_n$ 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기일 수 있다. 상기 붕소기는 구체적으로 디메틸붕소기, 디에틸붕소기, t-부틸에틸붕소기, 디페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0043] 본 명세서에 있어서, 알킬포스핀기는 포스핀기( $-PH_3$ )에 적어도 1개의 알킬기가 치환된 기를 의미한다.
- [0044] 본 명세서에 있어서, 아릴포스핀기는 포스핀기( $-PH_3$ )에 적어도 1개의 아릴기가 치환된 기를 의미한다.
- [0045] 본 명세서에 있어서, 아릴포스핀옥사이드기는 포스핀옥사이드기( $-PO_2H_2$ )에 적어도 1개의 아릴기가 치환된 기를

의미한다.

- [0046] 본 명세서에 있어서, 알킬싸이오기는 싸이오기(-SH)에 알킬기가 치환된 기를 의미한다.
- [0047] 본 명세서에 있어서, 아릴싸이오기는 싸이오기(-SH)에 아릴기가 치환된 기를 의미한다.
- [0048] 본 명세서에 있어서, 설폭시기는 -S=O기를 포함하는 기를 의미한다. 상기 설폭시기의 예로는 설포닐(sulfonyl)기, 설포네이트(sulfonate)기, 설페이트(sulfate)기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0049] 본 명세서에 있어서, 알킬설폭시기는 -S(=O)가 적어도 1개의 알킬기로 치환된 기를 의미한다.
- [0050] 본 명세서에 있어서, 아릴설폭시기는 -S(=O)H<sub>2</sub>가 적어도 1개의 아릴기로 치환된 기를 의미한다.
- [0051] 본 명세서에 있어서, 이미드기는 -CONR<sub>11</sub>을 의미하며, R<sub>11</sub>은 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이다. 일 실시상태에 있어서, 상기 R<sub>11</sub>은 치환 또는 비치환된 C1-C10의 알킬기; 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 C2-C30의 아릴기이다.
- [0052] 본 명세서에 있어서, 알콕시기; 알킬카보닐기; 알킬포스핀기; 알킬싸이오기; 및 알킬설포닐기의 알킬기에는 전술한 알킬기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [0053] 본 명세서에 있어서, 아릴옥시기; 아릴카보닐기; 아릴포스핀기; 아릴포스핀옥사이드기; 아릴싸이오기; 및 아릴설폭시기의 아릴기에는 후술하는 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [0054] 본 명세서에 있어서, 할로폼일기의 할로젠기에는 전술한 할로젠기에 관한 설명이 적용될 수 있다.
- [0055] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 전체적으로 또는 부분적으로 불포화된 치환 또는 비치환된 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭을 의미한다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 60인 것이 바람직하며, 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 40이다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 상기 아릴기는 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 상기 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 페릴레닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 페날레닐기, 파이레닐기, 테트라세닐기, 크라이세닐기, 펜타세닐기, 플루오레닐기, 인데닐기, 아세나프틸레닐기, 벤조플루오레닐기, 스피로바이플루오레닐기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0056] 본 명세서에 있어서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수 있다. 본 명세서에 있어서, 치환된 플루오레닐기는 플루오레닐기의 오각 고리에 치환된 2개의 치환기가 서로 스피로로 결합하여 고리를 형성한 구조도 모두 포함한다.







및 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0059] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴기는 이종원자로 N, O 및 S 중 1개 이상을 포함하는 고리로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 2 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 헤테로아릴기의 탄소수는 2 내지 30이다. 다른 실시상태에 따르면, 상기 헤테로아릴기의 탄소수는 2 내지 20이다. 헤테로아릴기의 예로는 티오펜일기, 퓨라닐기, 피롤릴기, 이미다졸릴기, 티아졸릴기, 옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 트리아졸릴기, 피리디닐기, 바이피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 트리아졸릴기, 아크리디닐기, 카르볼리닐기, 아세나프토퀴놀살리닐기, 인데노퀴나졸리닐기, 인데노이소퀴놀리닐기, 인데노퀴놀리닐기, 피리도인돌릴기, 피리다지닐기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴놀살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도피리미디닐기, 피리도피라지닐기, 피라지노피라지닐기, 이소퀴놀리닐기, 인돌릴기, 카바졸릴기, 벤즈옥사졸릴기, 벤즈이미다졸릴기, 벤조티아졸릴기, 벤조카바졸릴기, 벤조티오펜일기, 디벤조티오펜일기, 벤조퓨라닐기, 디벤조퓨라닐기, 페난쓰롤리닐(phenanthrolinyl)기, 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페녹사지닐기 및 페노티아지닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 상기 헤테로아릴기는 지방족 헤테로아릴기와 방향족 헤테로아릴기를 포함한다.

[0060] 본 명세서에 있어서, "인접한" 기는 해당 치환기가 치환된 원자와 직접 연결된 원자에 치환된 치환기, 해당 치환기와 입체구조적으로 가장 가깝게 위치한 치환기, 또는 해당 치환기가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기를 의미할 수 있다. 예컨대, 벤젠고리에서 오쏘(ortho) 위치로 치환된 2개의 치환기 및 지방족 고리에서 동일 탄소에 치환된 2개의 치환기는 서로 "인접한" 기로 해석될 수 있다.



[0061] 본 명세서에 있어서, 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성한다는 의미는 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 지방족 탄화수소고리; 치환 또는 비치환된 방향족 탄화수소고리; 치환 또는 비치환된 지방족 헤테로고리, 치환 또는 비치환된 방향족 헤테로고리; 또는 이들의 축합고리를 형성하는 것을 의미한다. 상기 탄화수소고리는 탄소와 수소 원자로만 이루어진 고리를 의미하며, 상기 탄화수소고리는 지방족 탄화수소고리이거나 방향족 탄화수소고리일 수 있다. 상기 헤테로고리란 헤테로원자 중 1개 이상을 포함하는 고리를 의미하며, 상기 헤테로고리는 지방족 헤테로고리이거나 방향족 헤테로고리일 수 있다. 본 명세서에 있어서, 상기 지방족 탄화수소고리, 방향족 탄화수소고리, 지방족 헤테로고리 및 방향족 헤테로고리는 단환 또는 다환일 수 있다.

[0062] 상기 지방족 탄화수소고리란 방향족이 아닌 고리로서 탄소와 수소 원자로만 이루어진 고리를 의미한다. 지방족 탄화수소고리의 예로는 시클로프로판, 시클로부탄, 시클로부텐, 시클로펜탄, 시클로펜텐, 시클로헥산, 시클로헥센, 1,4-시클로헥사디엔, 시클로헥탄, 시클로헥텐, 시클로옥탄, 시클로옥텐 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0063] 상기 방향족 탄화수소고리란 탄소와 수소 원자로만 이루어진 방향족의 고리를 의미한다. 방향족 탄화수소고리의 예로는 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 페릴렌, 플루오란텐, 트리페닐렌, 페날렌, 파이렌, 테트라센, 크라이센, 펜타센, 플루오렌, 인덴, 아세타프틸렌, 벤조플루오렌, 스피로플루오렌 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0064] 상기 지방족 헤테로고리란 헤테로원자 중 1개 이상을 포함하는 지방족 고리를 의미한다. 지방족 헤테로고리의 예로는, 옥시레인(oxirane), 테트라하이드로퓨란, 1,4-디옥세인(1,4-dioxane), 피롤리딘, 피페리딘, 모르폴린(morpholine), 옥세판, 아조케인, 티오케인 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0065] 상기 방향족 헤테로고리란 헤테로원자 중 1개 이상을 포함하는 방향족 고리를 의미한다. 방향족 헤테로고리의 예로는, 피리딘, 피롤, 피리미딘, 피리다진, 퓨란, 티오펜, 이미다졸, 파라졸, 옥사졸, 이소옥사졸, 티아졸, 이소티아졸, 트리아졸, 옥사디아졸, 티아디아졸, 디티아졸, 테트라졸, 파이란, 티오피란, 디아진, 옥사진, 티아진, 다이옥신, 트리아진, 테트라진, 이소퀴놀린, 퀴놀린, 퀴놀, 퀴나졸린, 퀴놀살린, 나프티리딘, 아크리딘, 페난트리딘, 디아자나프탈렌, 트리아자인텐, 인돌, 인돌리진, 벤조티아졸, 벤조옥사졸, 벤즈이미다졸, 벤조티오펜, 벤조퓨란, 디벤조티오펜, 디벤조퓨란, 카바졸, 벤조카바졸, 디벤조카바졸, 페나진, 이미다조피리딘, 페녹사진, 페난트리딘, 인돌로카바졸, 인데노카바졸 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

- [0066] 본 명세서는 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 제공한다.
- [0067] 상기 화학식 1에 있어서, 본 발명의 모핵 구조인 스피로[인돌로[3,2,1-디]아크리딘-8,9'-잔텐 (spiro[indolo[3,2,1-de]acridine-8,9'-xanthene)] 또는 스피로[인돌로[3,2,1-디]아크리딘-8,9'-싸이오잔텐 (spiro[indolo[3,2,1-de]acridine-8,9'-thioxanthene)]은 정공 수송 특성을 가지는 구조이다.
- [0068] 상기 화학식 1에 있어서, -L-Ar1이 N을 포함하지 않는 헤테로고리기를 포함하는 경우, -L-Ar1 치환기가 정공 수송 특성을 가지므로, 상기 치환기를 포함하는 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료, 특히 발광 호스트 재료로 사용할 수 있다.
- [0069] 상기 화학식 1에 있어서, -L-Ar1이 전자 당김(electron withdrawing) 특성이 있는 치환기를 포함하는 경우, -L-Ar1 치환기가 전자 수송 특성을 가지므로, 상기 치환기를 포함하는 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료, 특히 전자 수송 재료 또는 발광 호스트 재료로 사용할 수 있다.
- [0070] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1 내지 R3는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로겐기; 하이드록시기; 니트릴기; 니트로기; 에스테르기; 치환 또는 비치환된 알킬카보닐기; 치환 또는 비치환된 아릴카보닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬싸이오기; 치환 또는 비치환된 아릴싸이오기; 치환 또는 비치환된 알킬설폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴설폰시기; 치환 또는 비치환된 포스핀옥사이드기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.
- [0071] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1 내지 R3는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 알킬기 또는 아릴기이다.
- [0072] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1 내지 R3는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이다.
- [0073] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1 내지 R3는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소이다.
- [0074] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 직접결합; 또는 중수소, 시아노기, 알킬기 및 아릴기 중 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 아릴렌기이다.
- [0075] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 24의 아릴렌기이다.
- [0076] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 18의 아릴렌기이다.
- [0077] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 12의 아릴렌기이다.
- [0078] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 직접결합; 또는 치환 또는 비치환된 페닐렌기이다.
- [0079] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 직접결합; 또는 시아노기로 치환 또는 비치환된 페닐렌기이다.
- [0080] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L은 직접결합; 시아노기로 치환 또는 비치환된 m-페닐렌(); 또는 시아노기로 치환 또는 비치환된 p-페닐렌()이다.
- [0081] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1은 시아노기; -P(=O)(R<sub>20</sub>)(R<sub>21</sub>); 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기이고, R<sub>20</sub> 및 R<sub>21</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 24의 아릴기이다.
- [0082] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1은 시아노기; -P(=O)(R<sub>20</sub>)(R<sub>21</sub>); 또는 알킬기, 아릴기 및 헤테로아릴기 중 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며, R<sub>20</sub> 및 R<sub>21</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각

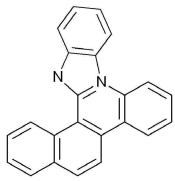
독립적으로 아릴기이다.

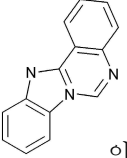
[0083] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1은 시아노기; -P(=O)(R<sub>20</sub>)(R<sub>21</sub>); 또는 탄소수 1 내지 6의 알킬기, 탄소수 6 내지 13의 아릴기 및 탄소수 2 내지 12의 헤테로아릴기 중 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기이며, R<sub>20</sub> 및 R<sub>21</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 탄소수 6 내지 12의 아릴기이다.

[0084] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1은 시아노기; -P(=O)(R<sub>20</sub>)(R<sub>21</sub>); O 또는 S를 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; 또는 N을 1 이상 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며, R<sub>20</sub> 및 R<sub>21</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기이다.

[0085] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1은 시아노기; -P(=O)(R<sub>20</sub>)(R<sub>21</sub>); 또는 피롤, 피란, 티오펜, 이미다졸, 옥사졸, 티아졸, 피리딘, 피리미딘, 다이아진 또는 트리아진을 포함하는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며, R<sub>20</sub> 및 R<sub>21</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기이다.

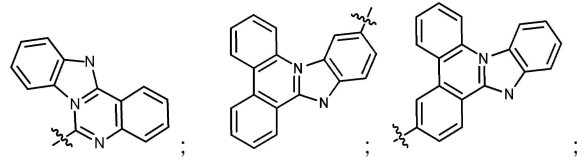
[0086] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1은 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐기; 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜닐기; 치환 또는 비치환된 벤즈옥사졸릴기; 치환 또는 비치환된 벤조티아졸릴기; 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸릴기; 치환 또는 비치환된 벤즈이미다조페난쓰리디닐기; 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기; 치환 또는 비치환된 페난쓰롤리닐기; 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기; 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기; 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기; 치환 또는 비치환된 피리디닐기; 치환 또는 비치환된 피리미디닐기; 치환 또는 비치환된 트리아지닐기; 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리미디닐기; 치환 또는 비치환된 벤조퓨로피리미디닐기; 치환 또는 비치환된 카바졸릴기; 치환 또는 비치환되고 크라이센이 축합된 벤즈이미다졸릴기; 또는 치환 또는 비치환되고 퀴놀린이 축합된 벤즈이미다졸릴기이다.

[0087] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 크라이센이 축합된 벤즈이미다졸릴기는  이다.

[0088] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 퀴놀린이 축합된 벤즈이미다졸릴기는  이다.

[0089] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar1은 시아노기; 디벤조퓨란-1-일기; 디벤조퓨란-2-일기; 디벤조퓨란-3-일기; 디벤조퓨란-4-일기; 디벤조티오펜-1-일기; 디벤조티오펜-2-일기; 디벤조티오펜-3-일기; 디벤조티오펜-4-일기; 9-페닐-9H-카바졸-2-일기; 9-페닐-9H-카바졸-4-일기; 9H-카바졸-9-일기; 페난쓰롤린-2-일기; 벤조[h]퀴놀린-2-일기; 퀴놀린-8-일기; 4-페닐-퀴놀린-2-일기; 2-페닐-퀴놀린-4-일기; 퀴나졸린-2-일기; 4-페닐-퀴나졸린-2-일기; 4-([1,1'-바이페닐]-4-일)퀴나졸린-2-일기; 4-(디벤조퓨란-2-일)퀴나졸린-2-일기; 4-(디벤조티오펜-2-일)퀴나졸린-2-일기; 퀴녹살린-2-일기; 4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진-2-일기; 4-([1,1'-바이페닐]-4-일)-6-일-1,3,5-트리아진-2-일기; 4-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-4-페닐-1,3,5-트리아진-2-일기; 4-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-1-일)-4-(나프탈렌-1-일)-1,3,5-트리아진-2-일기; 4-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-4-(나프탈렌-2-일)-1,3,5-트리아진-2-일기; 4-(디벤조퓨란-1-일)-6-페닐-1,3,5-트리아진-2-일기; 4-(디벤조퓨란-4-일)-6-페닐-1,3,5-트리아진-2-일기; 4-(디벤조티오펜-1-일)-6-페닐-1,3,5-트리아진-2-일기; 4-(디벤조티오펜-4-일)-6-페닐-1,3,5-트리아진-2-일기; 4-([1,1'-바이페닐]-3-일)-6-페닐-1,3,5-트리아진-2-일기; 4,6-디(피리딘-2-일)-1,3,5-트리아진-2-일기; 4,6-디(피리딘-3-일)-1,3,5-트리아진-2-일기; 2,4-디페닐-피리미딘-6-일기; 4-([1,1'-바이페닐]-4-일)-2-페닐-1,3,5-트리아진-6-일기; 4-([1,1'-바이페닐]-3-일)-2-페닐-1,3,5-트리아진-6-일기; 2,4-디페닐-피리미딘-6-일기; 4,6-디페닐-피리미딘-2-일기; 디페닐포스핀옥사이드기(-P(=O)(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>); 디(나프탈렌-2-

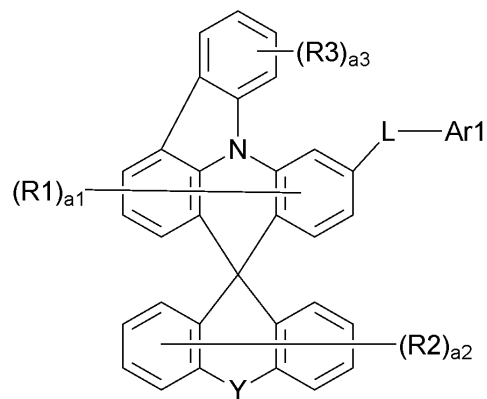
일)포스핀옥사이드기; 디(나프탈렌-1-일)포스핀옥사이드기;



벤조[d]사이아졸-2-일기; 벤조[d]옥사졸-2-일기; 1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일기; 1-메틸-1H-벤조[d]이미다졸-2-일기; 피리딘-2-일기; 피리딘-3-일기; 피리딘-4-일기; 2,6-디(피리딘-2-일)피리딘-4-일기; 2,6-디페닐피리딘-4-일기; 4-페닐벤조[4,5]싸이에노[3,2-d]피리미딘-2-일기; 2-페닐벤조[4,5]싸이에노[3,2-d]피리미딘-4-일기; 4-페닐벤조[4,5]싸이에노[2,3-d]피리미딘-2-일기; 2-페닐벤조[4,5]싸이에노[2,3-d]피리미딘-4-일기; 4-페닐벤조[4,5]퓨로[3,2-d]피리미딘-2-일기; 2-페닐벤조[4,5]퓨로[3,2-d]피리미딘-4-일기; 4-페닐벤조[4,5]퓨로[2,3-d]피리미딘-2-일기; 또는 2-페닐벤조[4,5]퓨로[2,3-d]피리미딘-4-일기이다.

[0090] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2로 표시된다.

[0091] [화학식 2]



[0092]

상기 화학식 2에 있어서,

[0093]

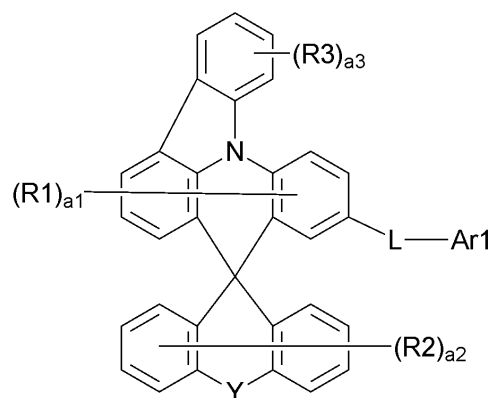
Y, R1 내지 R3, L, Ar1 및 a1 내지 a3의 정의는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0094]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시된다.

[0095]

[0096] [화학식 3]



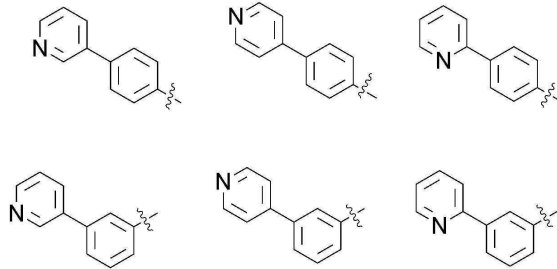
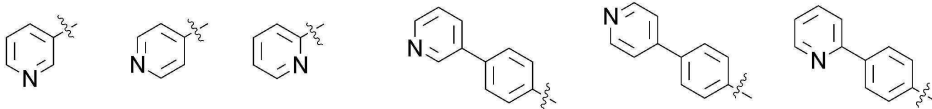
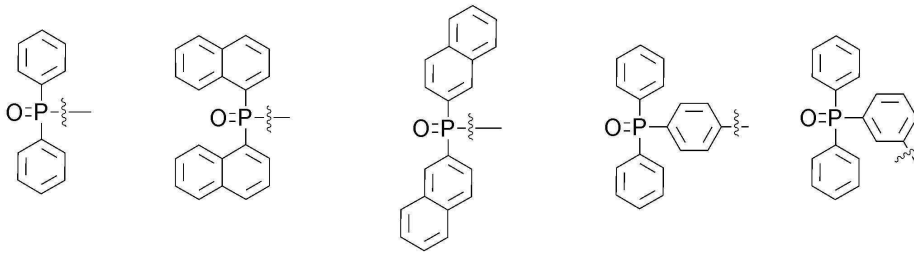
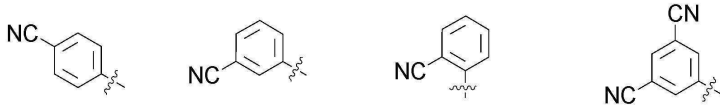
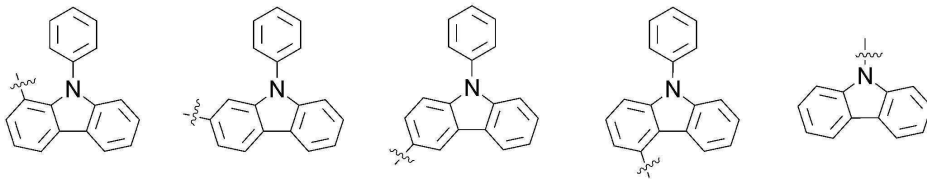
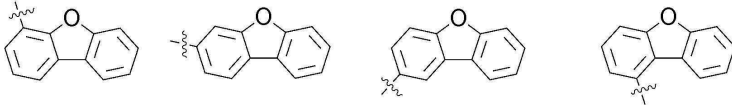
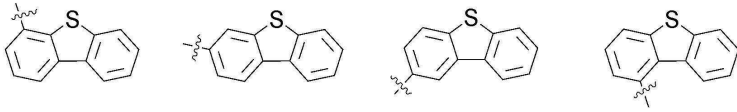
[0097]

상기 화학식 3에 있어서,

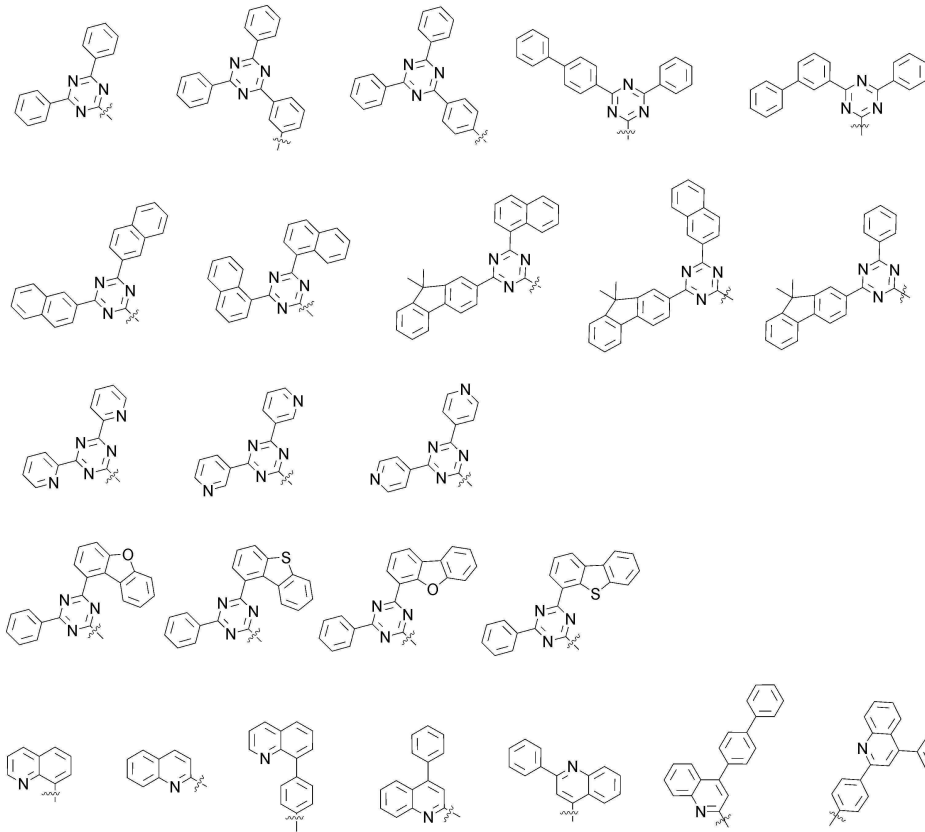
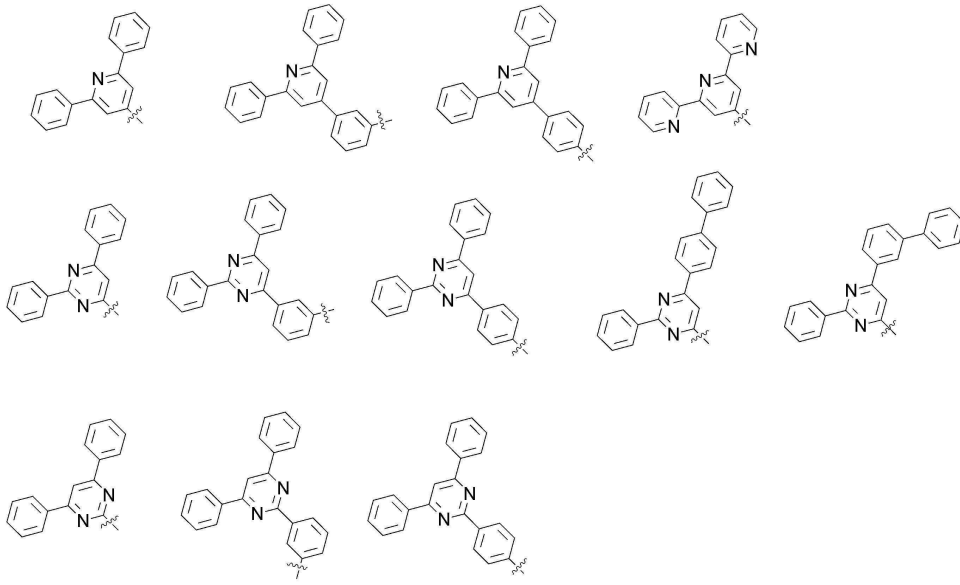
[0098]

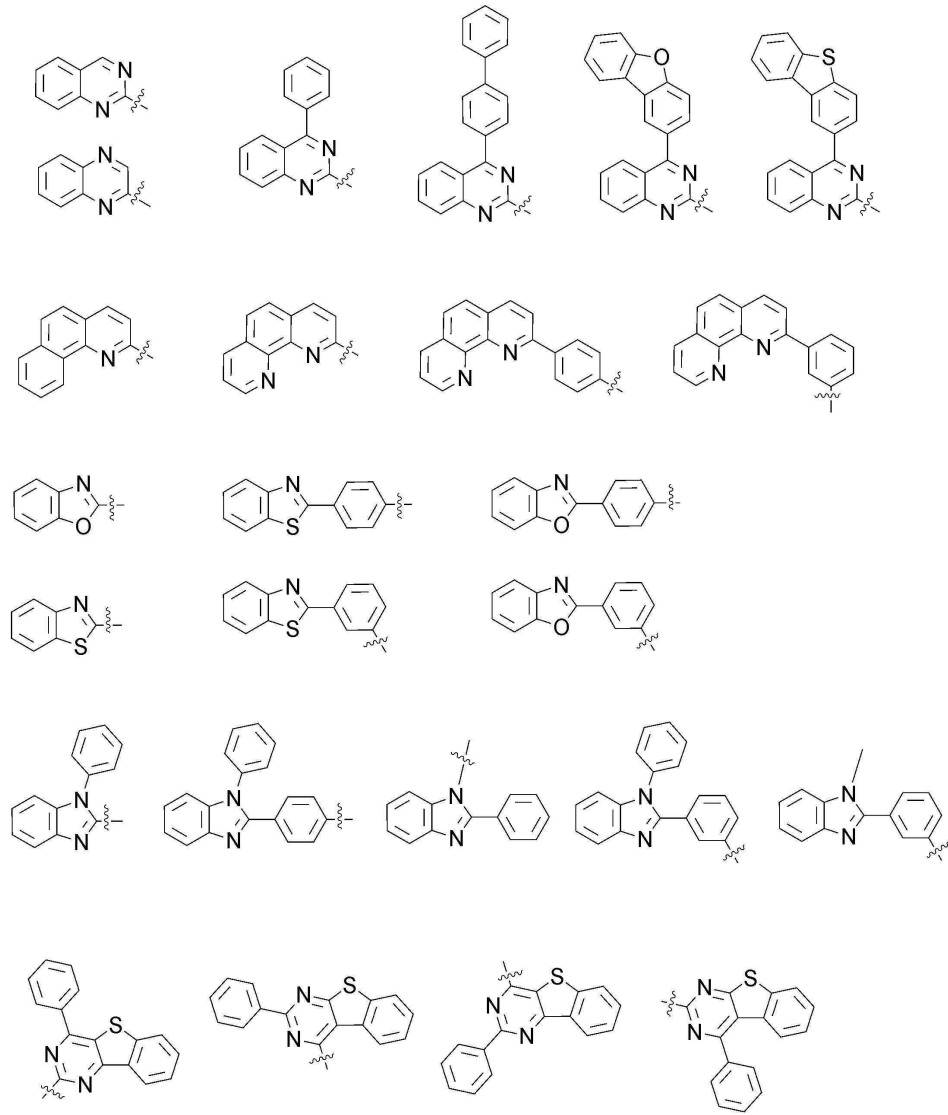
[0099] Y, R1 내지 R3, L, Ar1 및 a1 내지 a3의 정의는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0100] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 -L-Ar1은 하기의 기 중에서 선택된 어느 하나이다.

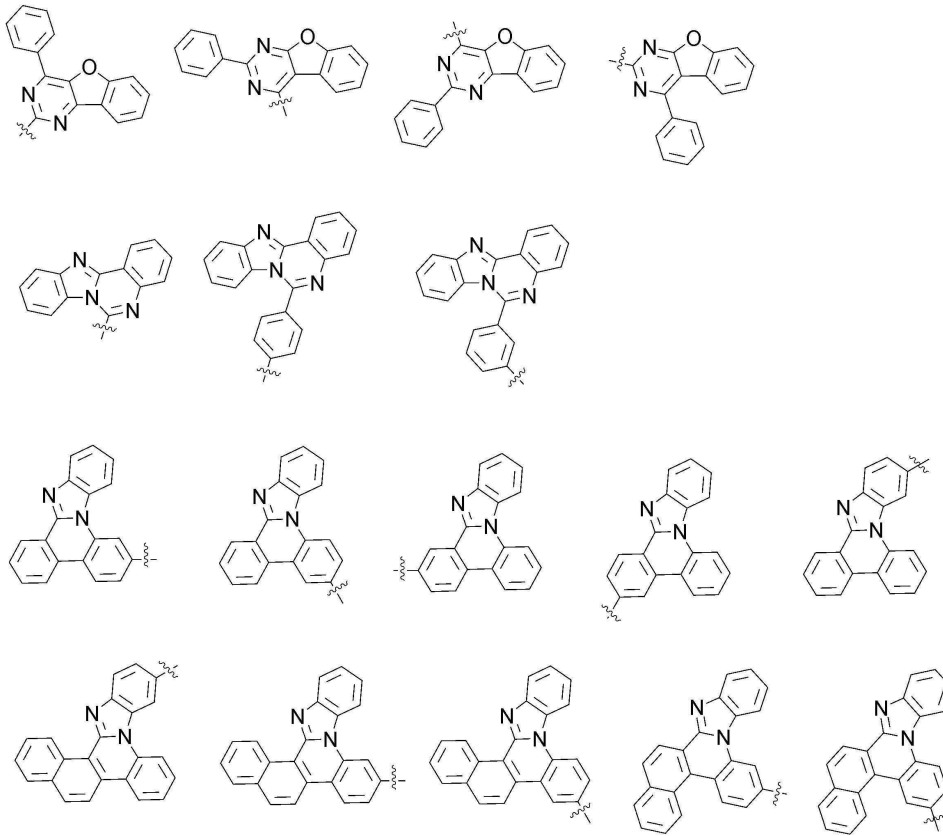


[0102]





[0105]

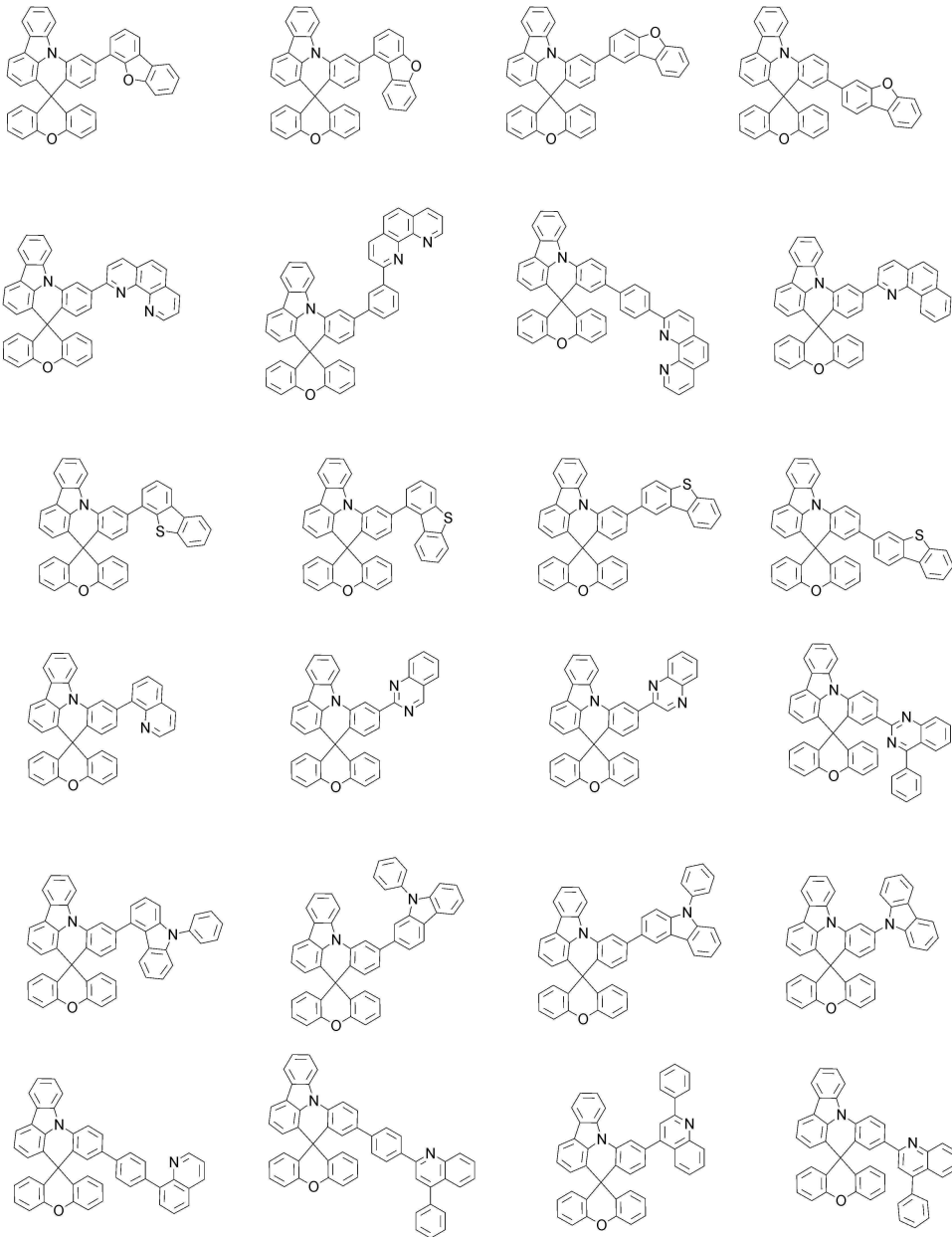


[0106]

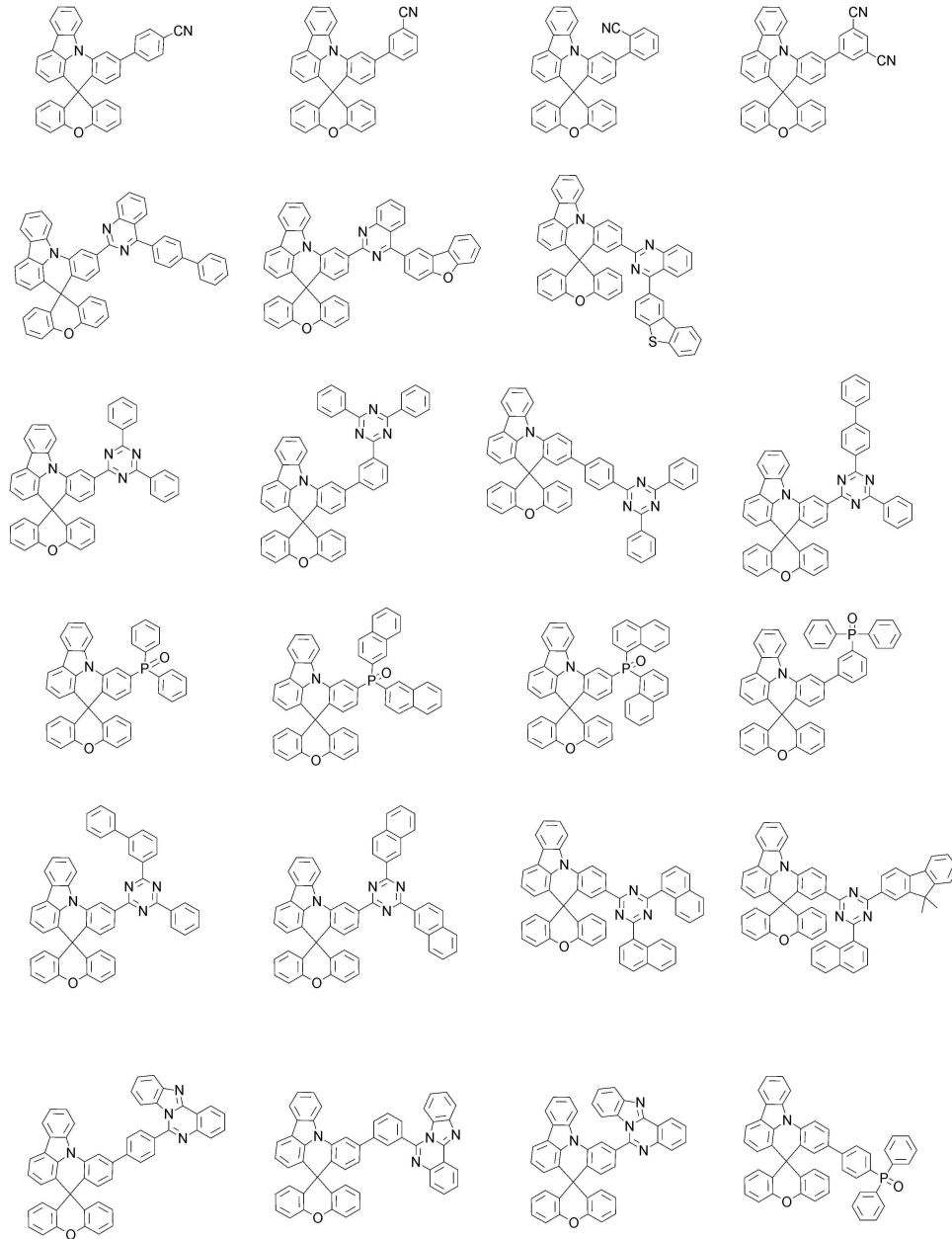
[0107]

본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 하기의 헤테로고리 화합물 중에서 선택된 어느 하나이다.

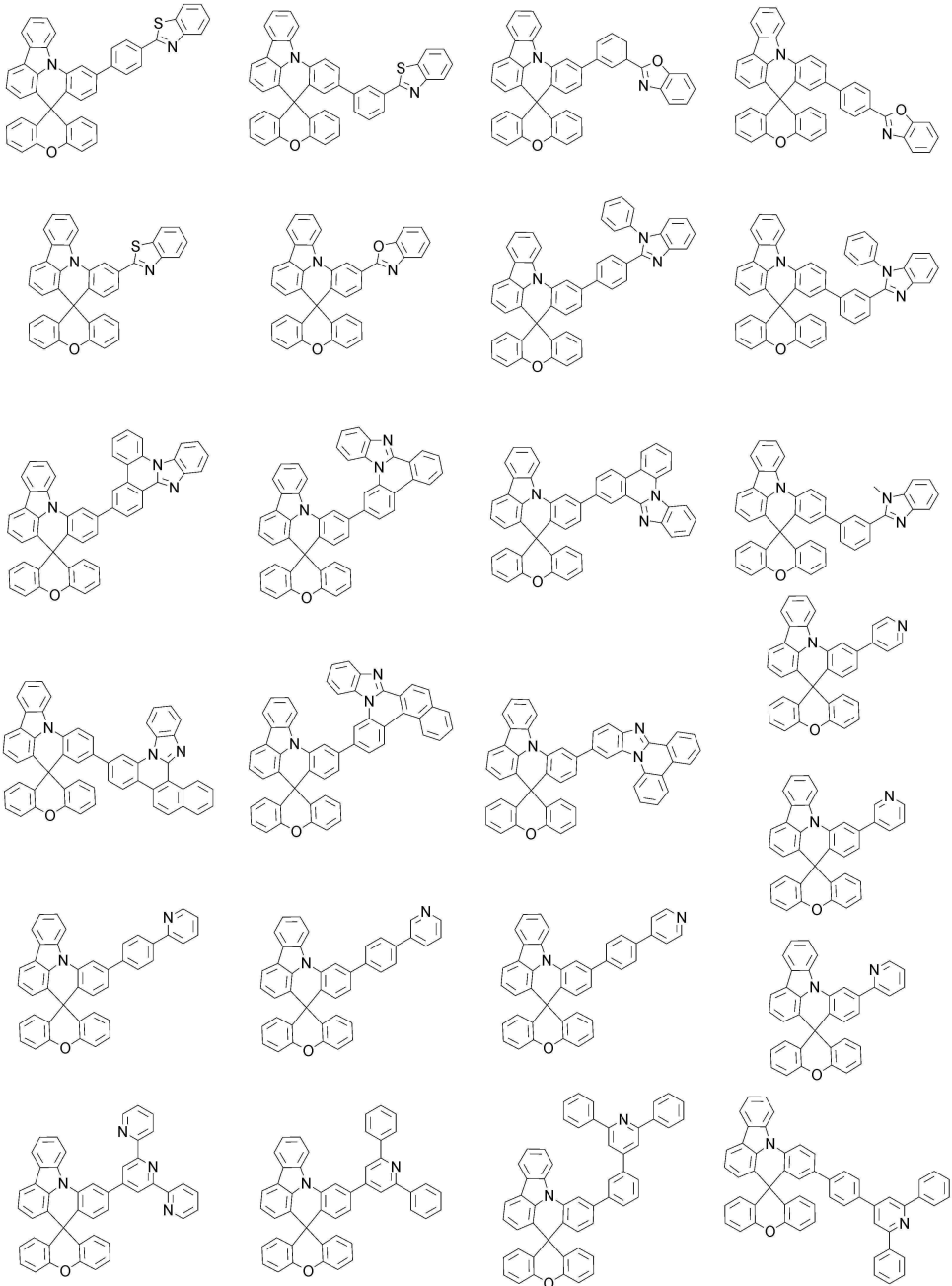




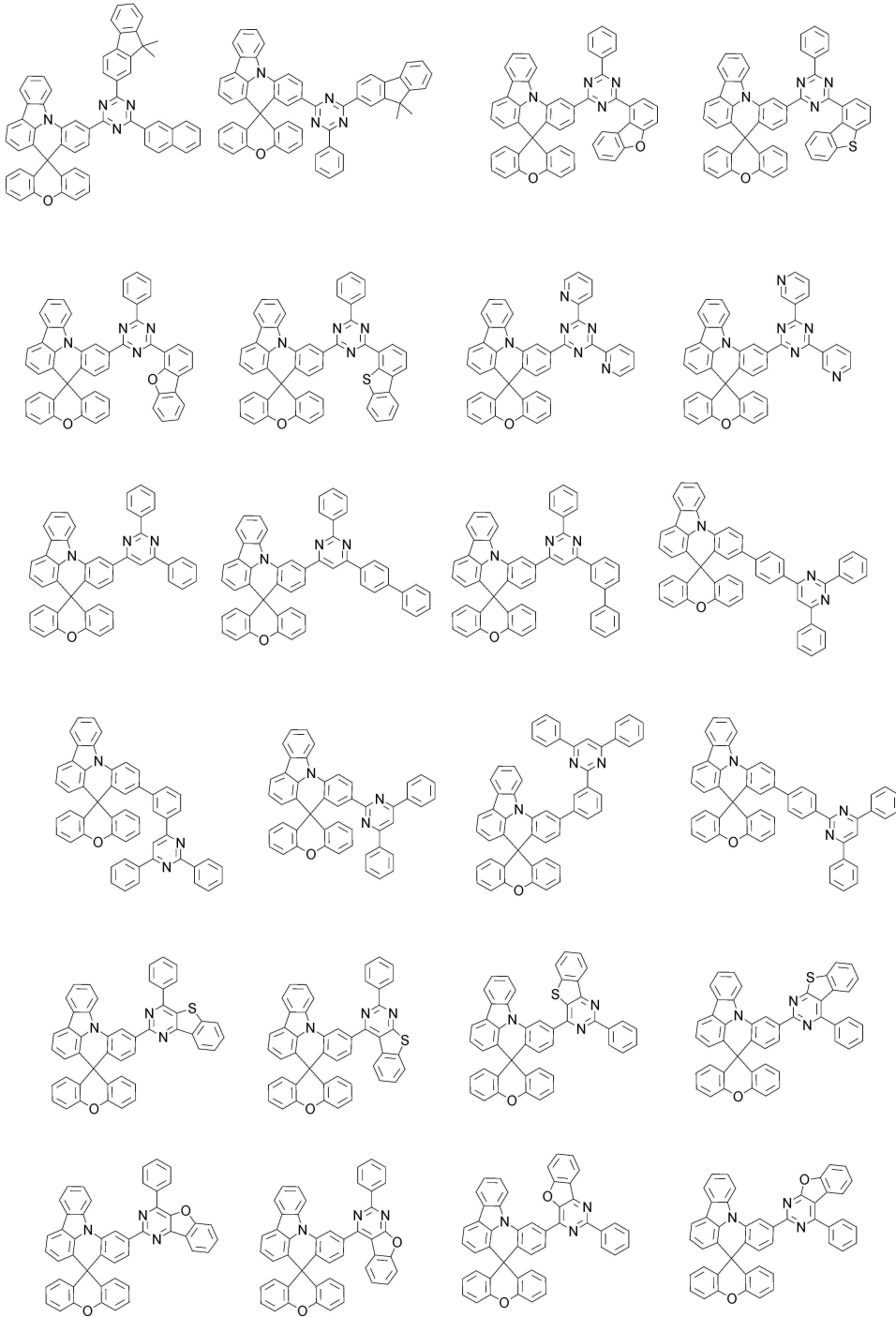
[0108]



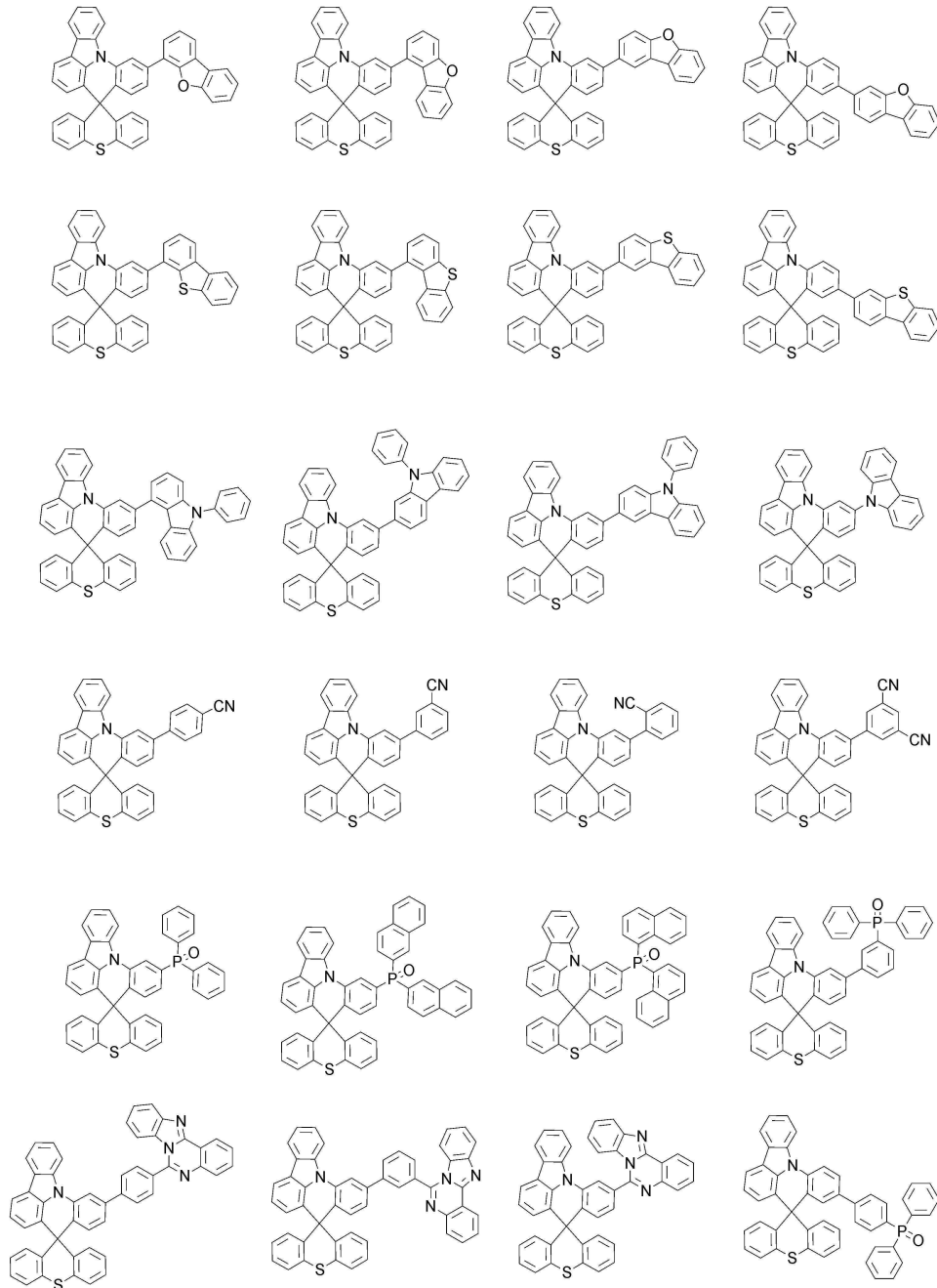
[0109]



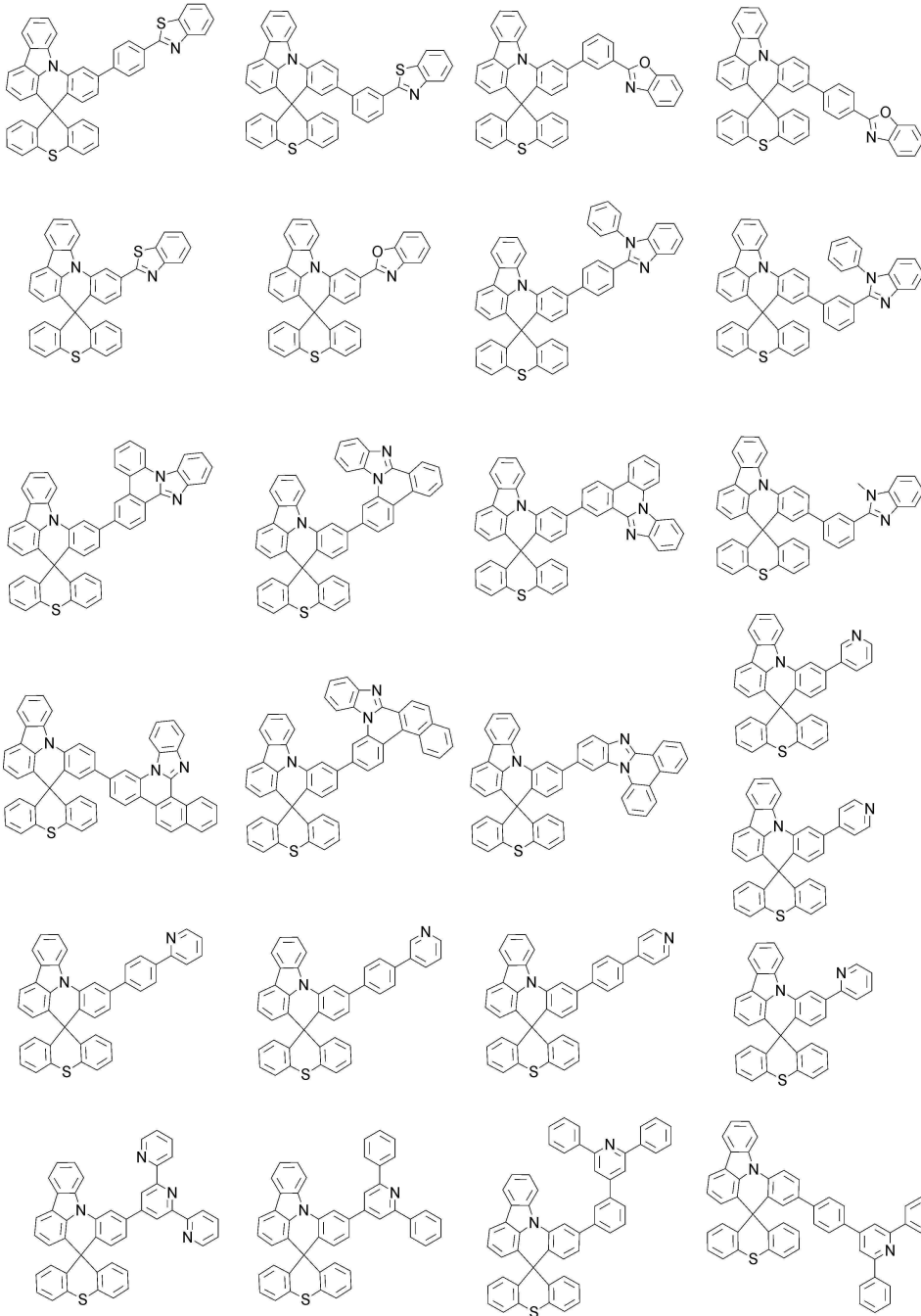
[0110]



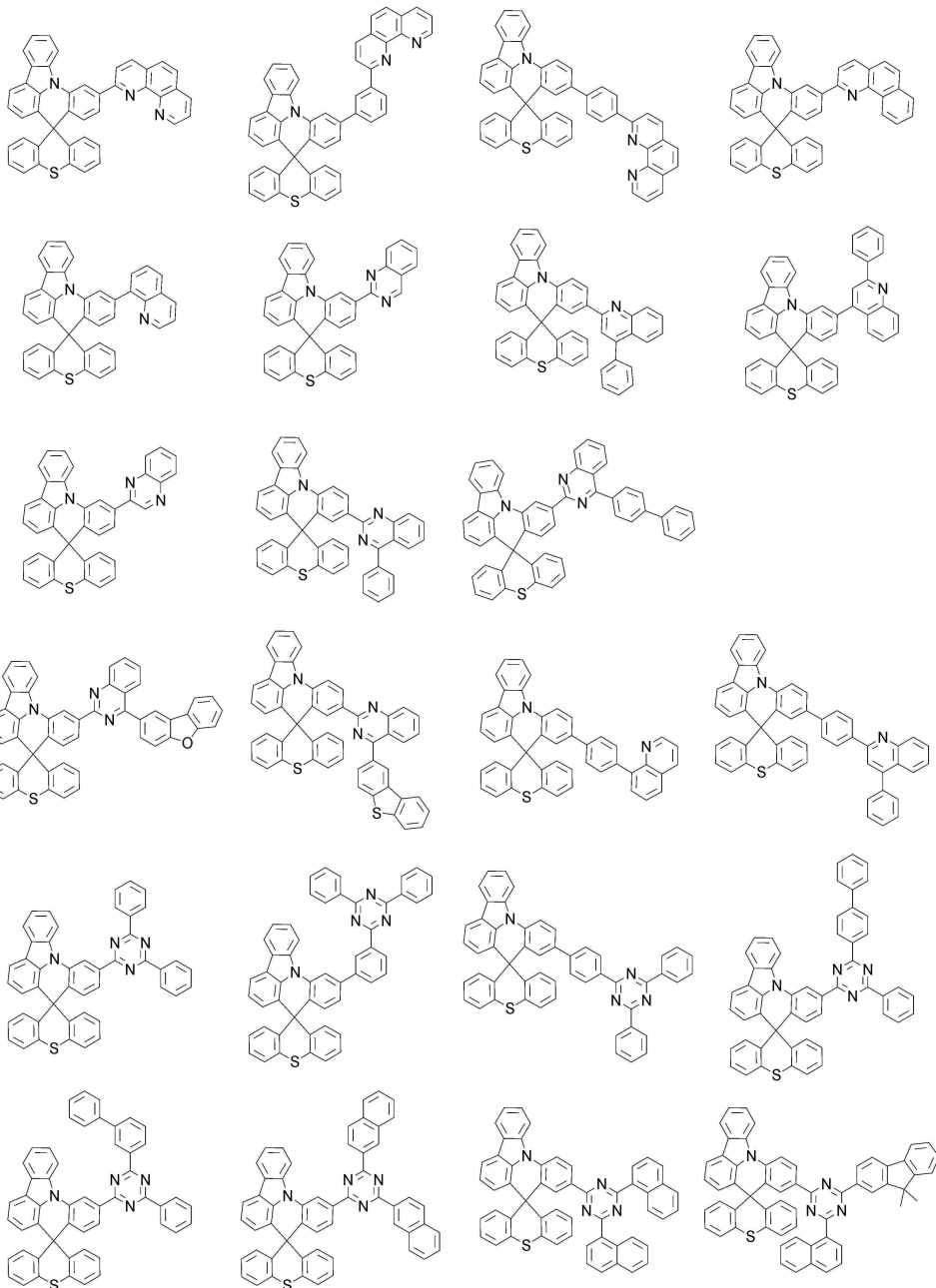
[0111]



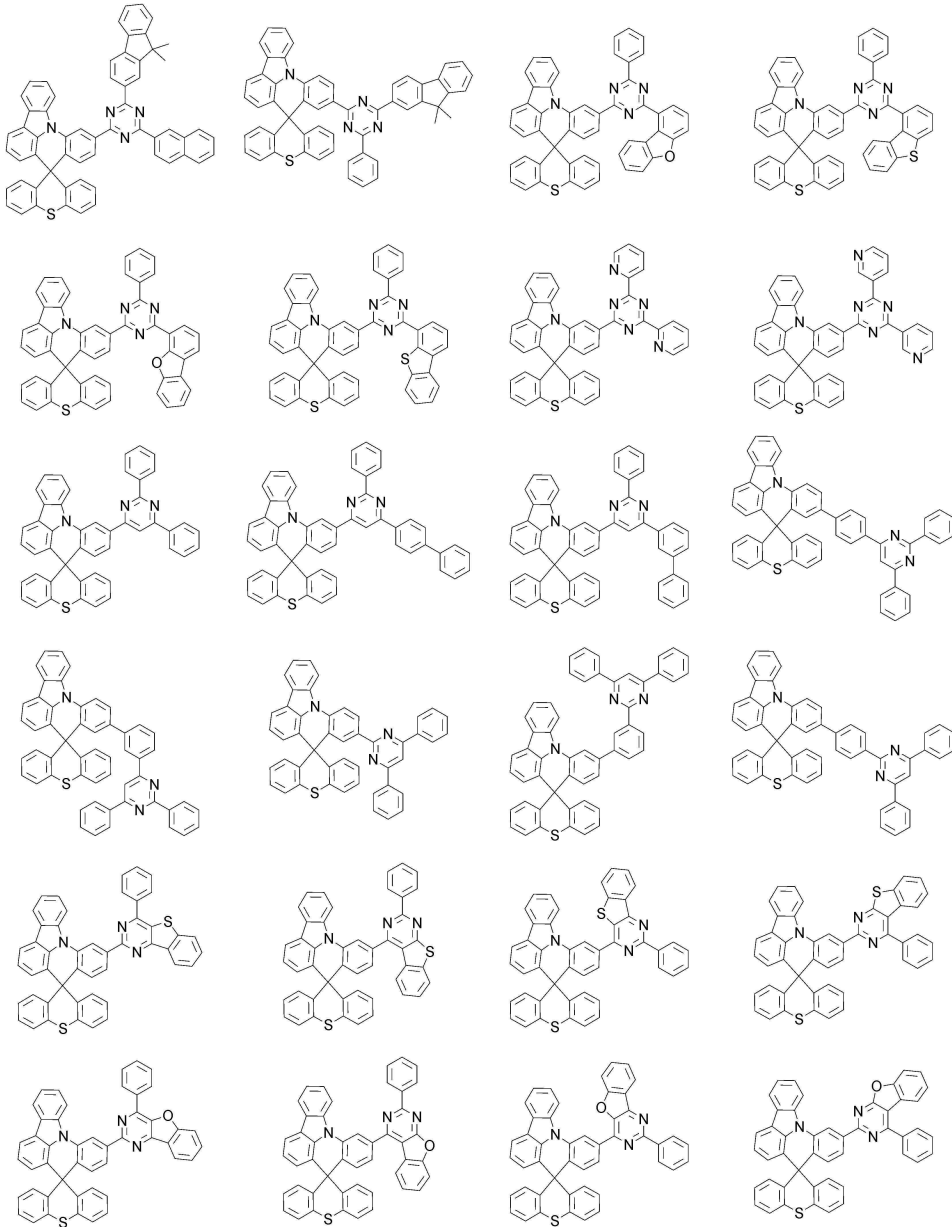
[0112]



[0113]



[0114]



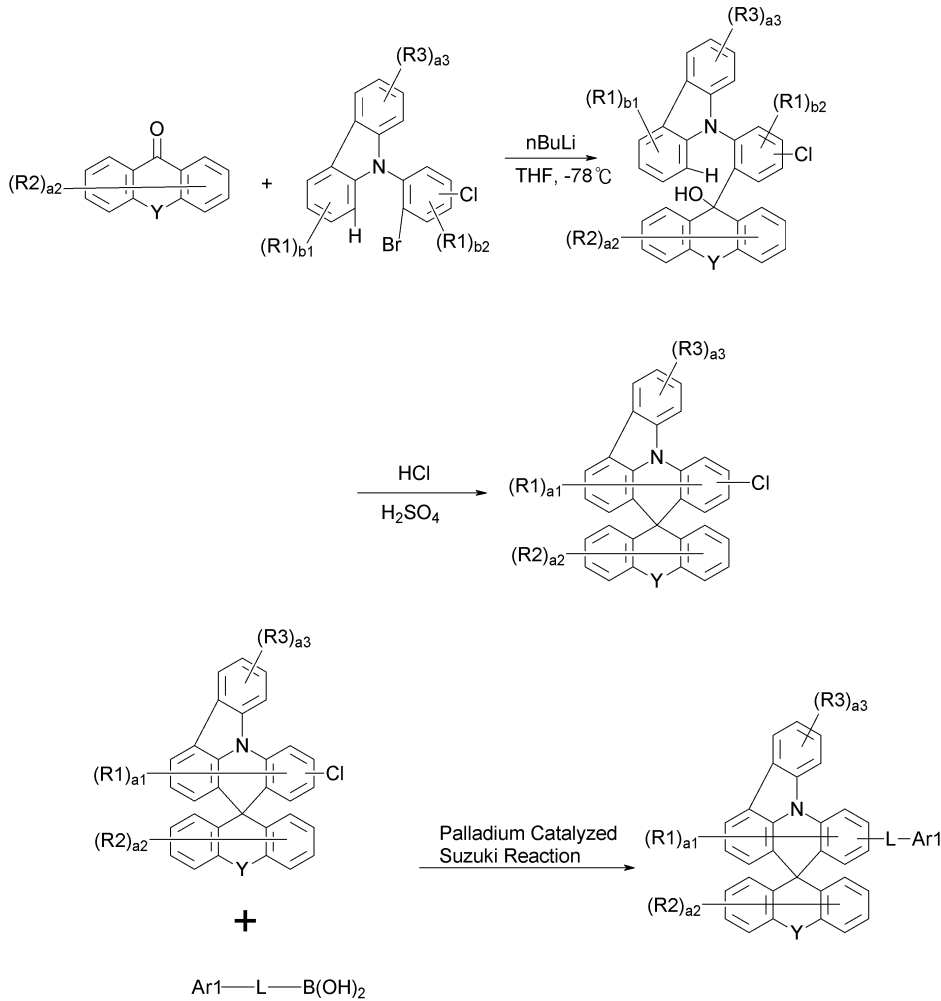
[0115]

[0116]

본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 전술한 화학식 1의 헤테로고리 화합물은 하기 일반식 1에 따라 제조될 수 있다. 그러나 화학식 1의 합성 방법은 하기 일반식 1에 한정되지 않으며, 당 기술분야에 알려져 있는 방법에 의해 화학식 1이 합성될 수도 있다. 일 실시상태에 있어서, 하기 일반식 1의 일부 합성 방법은 공지된 다른 합성 방법으로 교체 가능하다.



[0117] [일반식 1]



[0118]

[0119] 상기 일반식 1에 있어서,

[0120] Y, L, Ar1, R1 내지 R3 및 a1 내지 a3는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고,

[0121] b1은 0 내지 3의 정수이고, b1이 2 이상인 경우 2 이상의 R1은 서로 동일하거나 상이하하며,

[0122] b2는 0 내지 3의 정수이고, b2가 2 이상인 경우 2 이상의 R1은 서로 동일하거나 상이하하다.

[0123] 또한, 본 명세서는 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

[0124] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 캐소드, 애노드 및 상기 캐소드와 상기 애노드 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 전술한 헤테로고리 화합물은 상기 1층 이상의 유기물층 중 1층 이상에 포함되는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

[0125] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 캐소드, 애노드, 상기 캐소드와 상기 애노드 사이에 구비된 발광층 및 상기 캐소드와 상기 발광층 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 전술한 헤테로고리 화합물은 상기 발광층 및 상기 캐소드와 상기 발광층 사이에 구비된 유기물층에 포함되는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

[0126] 본 명세서의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기층을 포함할 수 있다.

[0127] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물은 전자 주입층, 전자 수송층, 전자 주입 및 수송을 동시에 하는 층 및 전자 조절층 중 적어도 한 층에 포함된다.

- [0128] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물은 1층 이상의 전자 수송층 중 1층 이상에 포함된다. 상기 헤테로고리 화합물이 1층 이상의 전자 수송층 중 1층 이상에 포함된다는 의미는, 1층 이상의 전자 수송층 중 1층에만 상기 헤테로고리 화합물이 포함되는 것과, 2층 이상에 상기 헤테로고리 화합물이 각각 포함되는 경우를 포함한다.
- [0129] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물은 상기 캐소드와 상기 발광층 사이에 구비된 유기물층에 포함되고, 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함하는 유기물층은 상기 발광층에 접하여 구비된다.
- [0130] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물은 발광층에 포함된다.
- [0131] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물은 발광층에 호스트 재료로서 포함된다.
- [0132] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 발광층은 도판트를 더 포함한다. 일 실시상태에 있어서, 상기 도판트는 발광층의 총 호스트 100 중량부 대비 1 내지 30 중량부로 발광층에 포함된다. 본 명세서에 있어서, 발광층 총 호스트라는 표현의 의미는, 발광층에 1종의 호스트가 포함되는 경우는 1종 호스트의 중량부를 의미하며, 발광층에 2종 이상의 호스트가 포함되는 경우는 2종 이상의 호스트의 중량부의 합을 의미하는 것이다.
- [0133] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 캐소드와 상기 애노드 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층은 발광층 및 전자 수송층을 포함하고, 상기 헤테로고리 화합물은 상기 전자 수송층에 포함된다.
- [0134] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 기관 상에 애노드, 1층 이상의 유기물층 및 캐소드가 순차적으로 적층된 노말 구조(normal type)의 유기 발광 소자일 수 있다.
- [0135] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 기관 상에 캐소드, 1층 이상의 유기물층 및 애노드가 순차적으로 적층된 역방향 구조(inverted type)의 유기 발광 소자일 수 있다.
- [0136] 예컨대, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 구조는 도 1 내지 3에 예시되어 있다.
- [0137] 도 1은 기관(1), 애노드(2), 발광층(3) 및 캐소드(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물은 상기 발광층(3)에 포함된다.
- [0138] 도 2는 기관 (1), 애노드(2), 정공 주입층(5), 정공 수송층(6), 발광층(7), 전자 수송층(8) 및 캐소드(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물은 상기 발광층(7) 또는 전자 수송층(8)에 포함된다.
- [0139] 도 3은 기관(1), 애노드(2), 정공 주입층(5), 제1 정공 수송층(6a), 제2 정공 수송층(6b), 발광층(3), 전자 주입 및 수송층(9) 및 캐소드(4)로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 헤테로고리 화합물은 상기 발광층(3) 또는 전자 주입 및 수송층(9)에 포함된다.
- [0140] 본 명세서의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 본 명세서의 헤테로고리 화합물, 즉 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.
- [0141] 예컨대, 본 명세서의 유기 발광 소자는 기관 상에 애노드, 유기물층 및 캐소드를 순차적으로 적층시킴으로써 형성할 수 있다. 이 때 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 물리적 증착 방법(PVD, physical Vapor Deposition)을 이용하여, 기관 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 애노드를 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층 등을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 캐소드로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기관 상에 캐소드 물질부터 유기물층, 애노드 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수 있다. 다만, 소자의 제조 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0142] 또한, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.
- [0143] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물이 상기 캐소드와 상기 애노드 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층에 포함된다고 할 때, 상기 1층 이상의 유기물층에 포함되는 재료들 중 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물을 제외한 다른 재료들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

- [0144] 이하, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물 이외의, 본 명세서의 유기물층에 사용될 수 있는 재료에 대하여 설명한다.
- [0145] 상기 애노드 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 애노드 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO<sub>2</sub>:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0146] 상기 캐소드 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 캐소드 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0147] 상기 정공 주입층은 전극으로부터 수취받은 정공을 발광층 또는 발광층 쪽으로 구비된 인접한 층에 주입하는 층이다. 상기 정공 주입 물질로는 정공을 수송하는 능력을 가져 양극에서의 정공 주입효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 정공 주입 효과를 갖고, 발광층에서 생성된 엑시톤의 전자 주입층 또는 전자 주입 재료에의 이동을 방지하며, 또한, 박막 형성 능력이 우수한 화합물을 사용하는 것이 바람직하다. 상기 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)는 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 상기 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrin), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사나트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone)계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0148] 상기 정공 수송층은 정공 주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층이다. 상기 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 상기 정공 수송 물질의 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0149] 상기 발광층은 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 내는 층으로, 상기 발광 물질로는 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 상기 발광 물질의 구체적인 예로는 8-하이드록시퀴놀린-알루미늄 착물(Alq<sub>3</sub>); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BA1q; 10-하이드록시벤조퀴놀린-금속 화합물; 벤즈옥사졸, 벤조티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌; 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0150] 상기 발광층은 호스트 재료 및 도판트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 파이렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0151] 상기 발광층의 도판트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스티릴아민 화합물, 붕소 착체, 플루오란텐 화합물, 금속 착체 등이 있다. 상기 방향족 아민 유도체로는 치환 또는 비치환된 아릴아민기를 갖는 축합 방향족환 유도체로서, 아릴아민기를 갖는 파이렌, 안트라센, 크라이센, 페리플란텐 등을 사용할 수 있다. 상기 스티릴아민 화합물로는 치환 또는 비치환된 아릴아민에 적어도 1개의 아릴비닐기가 치환된 화합물을 사용할 수 있다. 상기 스티릴아민 화합물의 예로는 스티릴아민, 스티릴디아민, 스티릴트리아민, 스티릴테트라아민 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 상기 금속 착체로는 이리듐 착체, 백금 착체 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0152] 상기 전자 조절층은 발광층으로부터 정공이 캐소드로 유입되는 것을 차단하고 발광층으로 유입되는 전자를 조절하여 소자 전체의 성능을 조절하는 층이다. 전자 조절 물질로는 발광층으로부터 캐소드로의 정공의 유입을 방지하고, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 주입되는 전자를 조절하는 능력을 갖는 화합물이 바람직하다. 전자 조절 물질로는 소자 내 사용되는 유기물층의 구성에 따라 적절한 물질을 사용할 수 있다. 상기 전자 조절층은 발광층과 캐소드 사이에 위치하며, 바람직하게는 발광층에 직접 접하여 구비된다.
- [0153] 상기 전자 수송층은 전자 주입층으로부터 전자를 수취하여 발광층까지 전자를 수송하는 층이다. 상기 전자 수송

물질로는 캐소드으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 상기 전자 수송 물질의 예로는 8-하이드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq<sub>3</sub>를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 하이드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 상기 전자 수송층은 종래기술에 따라 사용된 바와 같이 임의의 원하는 캐소드 물질과 함께 사용할 수 있다. 일 실시상태에 있어서, 상기 캐소드 물질로는 낮은 일함수를 가지는 물질; 및 알루미늄층 또는 실버층을 사용할 수 있다. 상기 낮은 일함수를 가지는 물질의 예로는 세슘, 바륨, 칼슘, 이테르븀 및 사마륨 등이 있으며, 상기 물질로 층을 형성한 후 알루미늄층 또는 실버층을 상기 층 위에 형성할 수 있다.

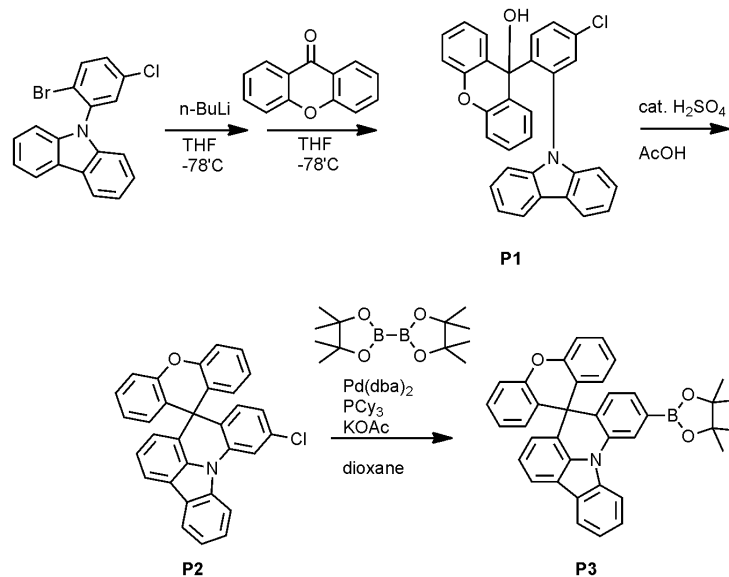
[0154] 상기 전자 주입층은 전극으로부터 수취받은 전자를 발광층에 주입하는 층이다. 상기 전자 주입 물질로는 전자를 수송하는 능력을 갖고, 캐소드으로부터의 전자 주입 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 전자 주입 효과를 가지며, 발광층에서 생성된 여기자의 정공 주입층 또는 정공 주입 재료에의 이동을 방지하고, 또한, 박막형성능력이 우수한 화합물을 사용하는 것이 바람직하다. 구체적으로는 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀸, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사디아아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 합질소 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0155] 상기 금속 착체 화합물로서는 8-하이드록시퀴놀리나토 리튬, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)아연, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)구리, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)망간, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(2-메틸-8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)갈륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)아연, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)클로로갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(o-크레졸라토)갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(1-나프톨라토)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(2-나프톨라토)갈륨 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0156] 본 명세서에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0158] <제조예>

[0159] <제조예 1> 화합물 1의 제조



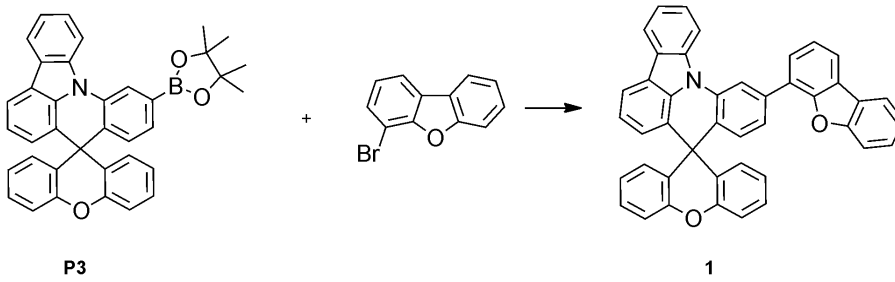
[0160]

[0161] 9-(2-브로모-5-클로로페닐)-9H-카바졸(30g, 84.1mmol)을 무수 테트라하이드로퓨란(THF) 용액 300mL에 녹인 후 -78℃ 질소분위기 하에서 교반하였다. 반응 용액에 2.5M n-부틸리튬(n-BuLi)(37mL, 93mmol)을 천천히 적가하였다. 1시간 후 9H-잔텐-9-온(18.2g 93mmol)을 무수 테트라하이드로퓨란(THF) 100mL에 녹여 천천히 적가하였다. 1시간 후 반응 용액을 상온으로 승온한 후, 물 200mL를 넣어 교반하였다. THF층을 증류하여 화합물 P1을 제조하였다(32.3g, 수율 81%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 474).

[0162] 화합물 P1(32.3g, 68mmol) 및 황산 0.1mL를 아세트산 500mL에 투입 후, 2시간 동안 교반 환류 하였다. 상온으로

식힌 후 생성된 고체를 여과하여, 물로 세척하여 건조 후 화합물 P2를 제조하였다(27.3g, 수율 88%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 456).

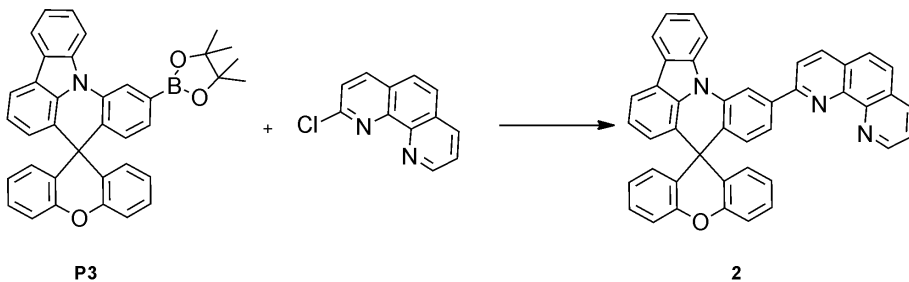
[0163] 화합물 P2(15g, 32mmol) 및 비스(피나콜라토)다이보론(8.7g, 34mmol) 및 포타슘아세테이트(KOAc)(9.1g, 93mmol)를 다이옥세인(dioxane) 200mL에 투입 후 교반 환류하였다. 비스(디벤질리덴아세톤)팔라듐(Pd(dba)<sub>2</sub>)(0.5g, 0.93mmol) 및 트리사이클로헥실포스핀(PCy<sub>3</sub>)(0.5g, 1.8mmol)을 투입한 후 3시간 동안 교반 환류 하였다. 상온으로 식힌 후 반응 용액을 여과하여 증류하였다. 증류된 샘플을 클로로포름(CHCl<sub>3</sub>)에 녹여 워크업(work-up)을 실시하였다. 유기층을 에탄올로 재결정하여 화합물 P3를 제조하였다(14.2g, 81%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 548).



[0164]

[0165] 화합물 P3(10g, 18mmol) 및 4-브로모디벤조[b,d]퓨란(4.4g, 18mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 150mL에 투입 하였다. 2M 탄산칼륨(K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) 75mL 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>) 0.4g을 투입한 후, 7시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 식힌 후 여과하여 생성된 고체를 클로로포름과 에탄올로 재결정하여 화합물 1을 제조하였다(7.7g, 수율 73%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 588).

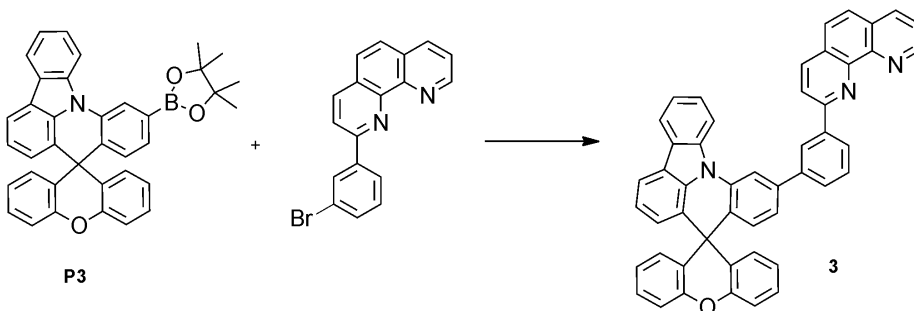
[0166] <제조예 2> 화합물 2의 제조



[0167]

[0168] 화합물 P3(10g, 18mmol) 및 2-클로로-1,10-페난트롤린(2-chloro-1,10-phenanthroline)(3.9g, 18mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 150mL에 투입하였다. 2M 탄산칼륨(K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) 75mL 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>) 0.4g을 투입한 후, 7시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 식힌 후 여과하여 생성된 고체를 클로로포름과 에탄올로 재결정하여 화합물 2를 제조하였다(8.4g, 수율 77%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 600).

[0169] <제조예 3> 화합물 3의 제조

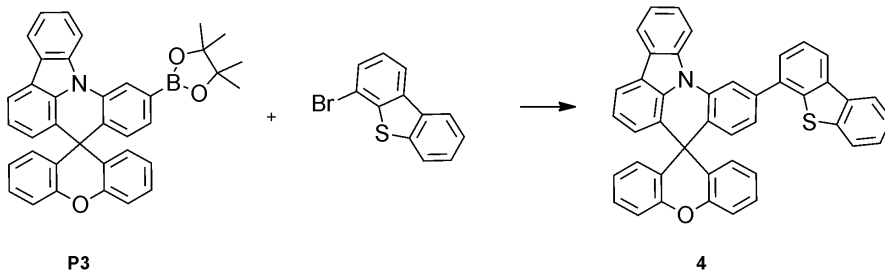


[0170]

[0171] 화합물 P3(10g, 18mmol) 및 2-(3-브로모페닐)-1,10-페난트롤린(6.1g, 18mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF)

150mL에 투입하였다. 2M 탄산칼륨(K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) 75mL 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>) 0.4g을 투입한 후, 7시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 식힌 후 여과하여 생성된 고체를 클로로포름과 에탄올로 재결정하여 화합물 3을 제조하였다(9.3g, 수율 75%, MS:[M+H]<sup>+</sup> = 676).

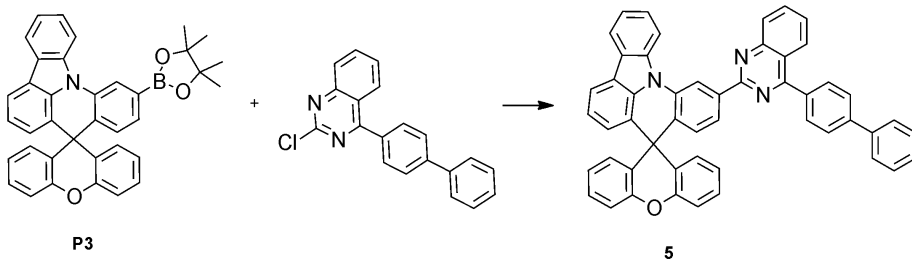
[0172] <제조예 4> 화합물 4의 제조



[0173]

[0174] 제조예 1에서 4-브로모디벤조[b,d]퓨란 대신 4-브로모디벤조[b,d]싸이오펜(4.8g, 18mmol)을 사용하여, 동일한 방법으로 화합물 4를 제조하였다(7.3g, 수율 66%, MS:[M+H]<sup>+</sup> = 604).

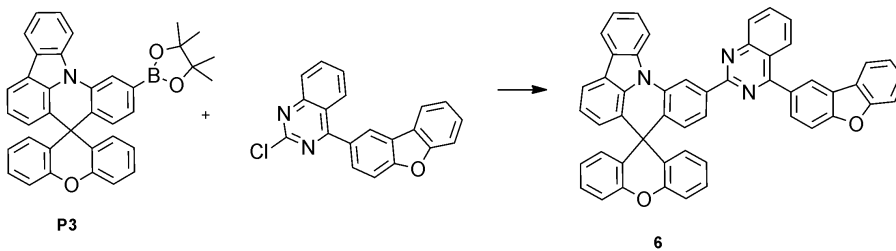
[0175] <제조예 5> 화합물 5의 제조



[0176]

[0177] 제조예 1에서 4-브로모디벤조[b,d]퓨란 대신 4-([1,1'-바이페닐]-4-일)-2-클로로퀴나졸린(5.8g, 18mmol)을 사용하여, 동일한 방법으로 화합물 5를 제조하였다(9g, 수율 70%, MS:[M+H]<sup>+</sup> = 702).

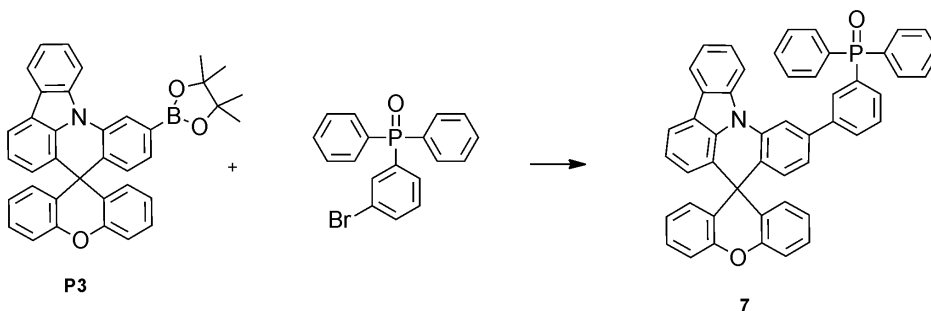
[0178] <제조예 6> 화합물 6의 제조



[0179]

[0180] 제조예 1에서 4-브로모디벤조[b,d]퓨란 대신 2-클로로-4-(디벤조[b,d]퓨란-2-일)퀴나졸린(6g, 18mmol)을 사용하여, 동일한 방법으로 화합물 6을 제조하였다(8.2g, 수율 63%, MS:[M+H]<sup>+</sup> = 716).

[0181] <제조예 7> 화합물 7의 제조

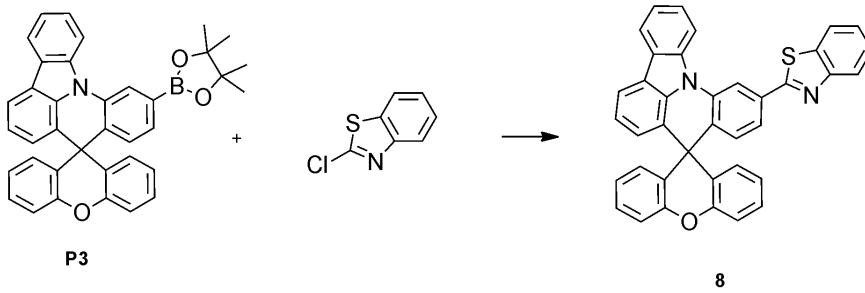


[0182]



[0183] 제조예 1에서 4-브로모디벤조[b,d]퓨란 대신 (3-브로모페닐)디페닐포스핀 옥사이드(6.5g, 18mmol)를 사용하여, 동일한 방법으로 화합물 7을 제조하였다(9.6g, 수율 75%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 698).

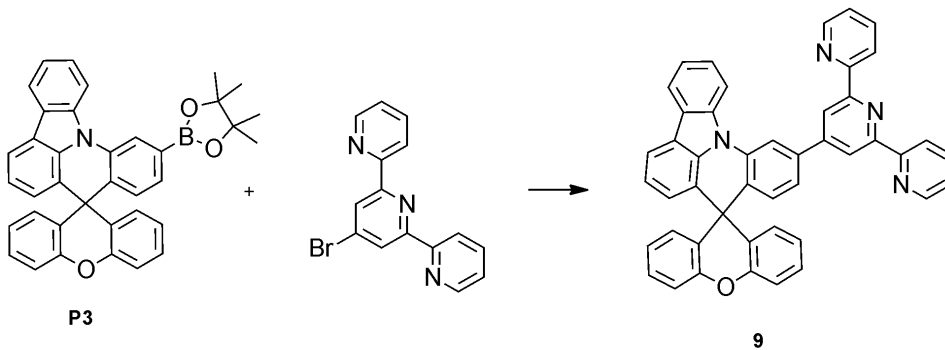
[0184] <제조예 8> 화합물 8의 제조



[0185]

[0186] 제조예 1에서 4-브로모디벤조[b,d]퓨란 대신 2-클로로벤조[d]싸이아졸(3.1g, 18mmol)을 사용하여, 동일한 방법으로 화합물 8을 제조하였다(6.2g, 수율 61%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 555).

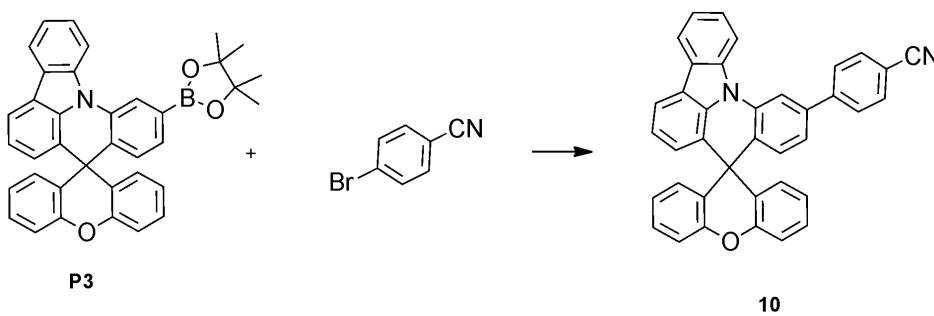
[0187] <제조예 9> 화합물 9의 제조



[0188]

[0189] 제조예 1에서 4-브로모디벤조[b,d]퓨란 대신 4'-브로모-2,2':6',2''-터피리딘(5.7g, 18mmol)을 사용하여, 동일한 방법으로 화합물 9를 제조하였다(7.3g, 수율 67%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 653).

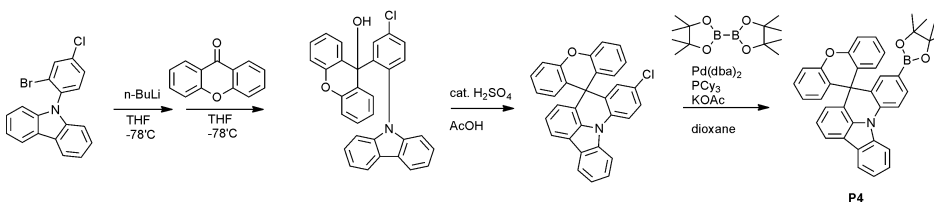
[0190] <제조예 10> 화합물 10의 제조



[0191]

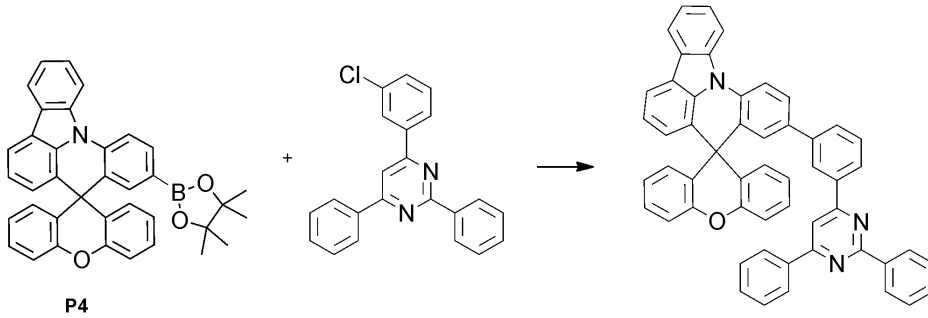
[0192] 제조예 1에서 4-브로모디벤조[b,d]퓨란 대신 4-브로모벤조나이트릴(3.3g, 18mmol)을 사용하여, 동일한 방법으로 화합물 10을 제조하였다(7.4g, 수율 78%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 523).

[0193] <제조예 11> 화합물 11의 제조



[0194]

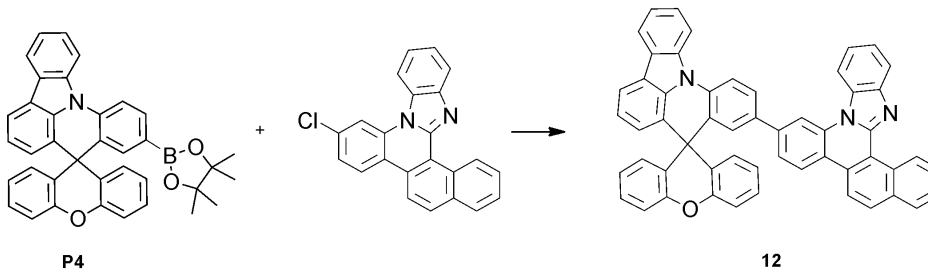
[0195] 제조예 1에서 9-(2-브로모-5-클로로페닐)-9H-카바졸 대신 9-(2-브로모-4-클로로페닐)-9H-카바졸(30g, 84.1mmol)을 사용하여 동일한 방법으로 화합물 P4를 제조하였다(11g, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 548).



[0196]

[0197] 화합물 P4(10g, 18mmol) 및 4-(3-클로로페닐)-2,6-디페닐피리미딘(6.3g, 18mmol)을 사용하여 제조예 1과 동일한 방법으로 화합물 11을 제조하였다(9.6g, 수율 72%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 728).

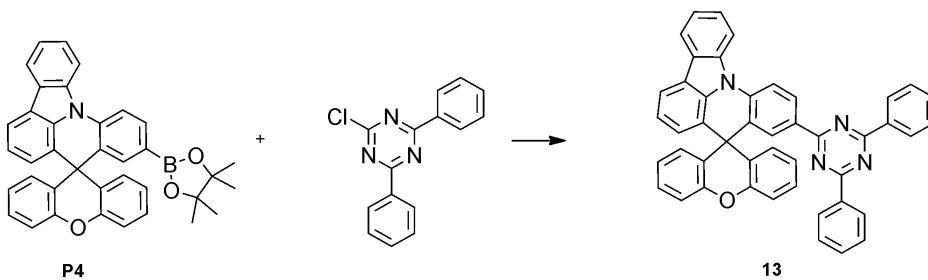
[0198] <제조예 12> 화합물 12의 제조



[0199]

[0200] 제조예 11에서 4-(3-클로로페닐)-2,6-디페닐피리미딘 대신 9-클로로벤젠 [i]벤조[4,5]이미다조[1,2-f]페난트린(6.4g, 18mmol)을 사용하여, 동일한 방법으로 화합물 12를 제조하였다(10.5g, 수율 78%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 738).

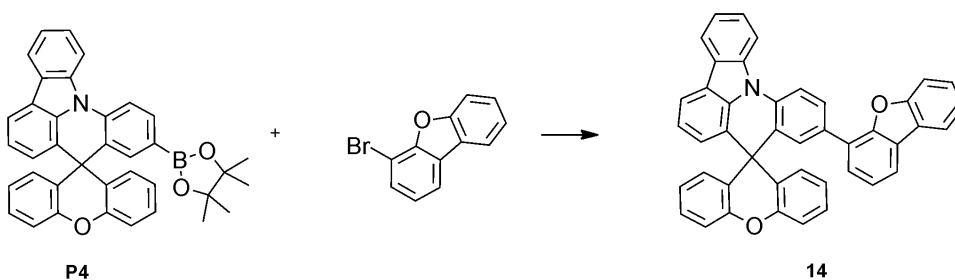
[0201] <제조예 13> 화합물 13의 제조



[0202]

[0203] 제조예 11에서 4-(3-클로로페닐)-2,6-디페닐피리미딘 대신 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진(4.9g, 18mmol)을 사용하여, 동일한 방법으로 화합물 13을 제조하였다(8.8g, 수율 74%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 653).

[0204] <제조예 14> 화합물 14의 제조



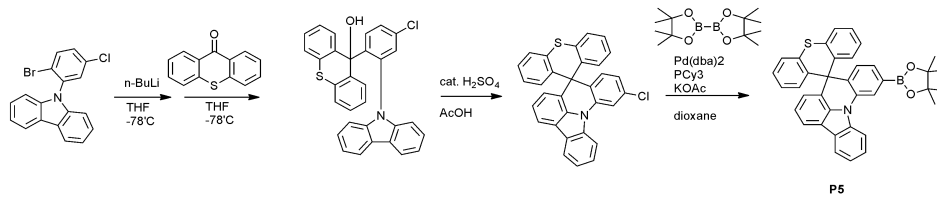
[0205]

[0206] 제조예 11에서 4-(3-클로로페닐)-2,6-디페닐피리미딘 대신 4-브로모벤조[b,d]퓨란(4.5g, 18mmol)을 사용하여,



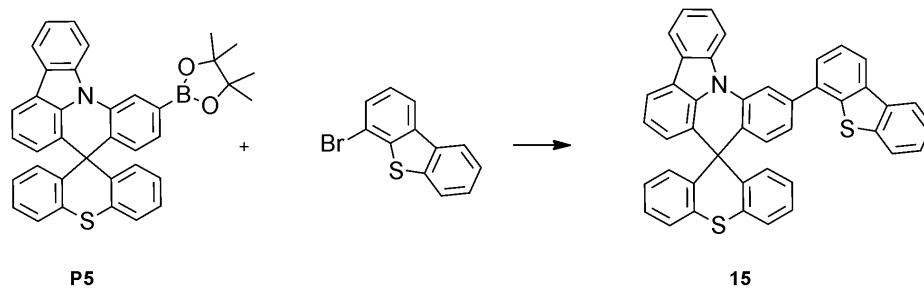
동일한 방법으로 화합물 14를 제조하였다(8.2g, 수율 76%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 588).

[0207] <제조예 15> 화합물 15의 제조



[0208]

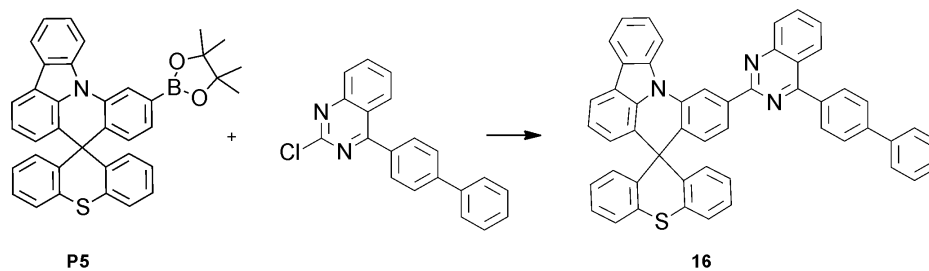
[0209] 제조예 1에서 9H-잔텐-9-온 대신 9H-싸이오잔텐-9-온(19.7g 93mmol)을 사용하여 동일한 방법으로 화합물 P5를 제조하였다(11.6g, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 564).



[0210]

[0211] 화합물 P5(10g, 18mmol) 및 4-브로모디벤조[b,d]싸이오펜(4.7g, 18mmol)을 사용하여 제조예 1과 동일한 방법으로 화합물 15를 제조하였다(8.6g, 수율 76%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 620).

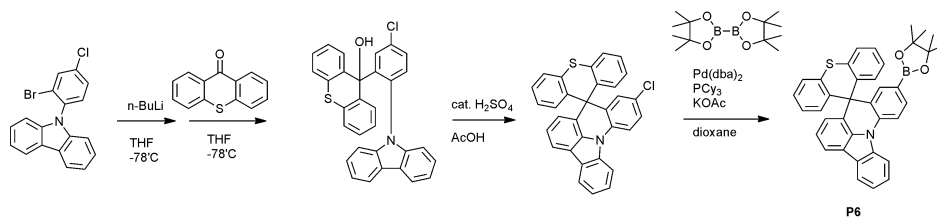
[0212] <제조예 16> 화합물 16의 제조



[0213]

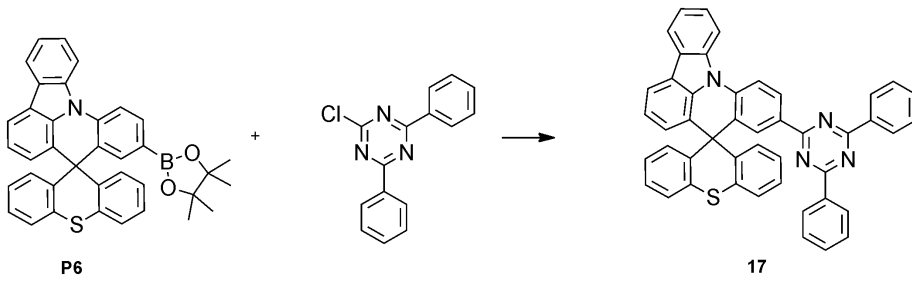
[0214] 제조예 15에서 4-브로모디벤조[b,d]싸이오펜 대신 4-([1,1'-바이페닐]-4-일)-2-클로로퀴나졸린(5.8g, 18mmol)을 사용하여, 동일한 방법으로 화합물 16을 제조하였다(8.9g, 수율 68%, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 718).

[0215] <제조예 17> 화합물 17의 제조



[0216]

[0217] 제조예 15에서 9-(2-브로모-5-클로로페닐)-9H-카바졸 대신 9-(2-브로모-4-클로로페닐)-9H-카바졸(30g, 84.1mmol)을 사용하여 동일한 방법으로 화합물 P6를 제조하였다(10.3g, MS: [M+H]<sup>+</sup> = 564).

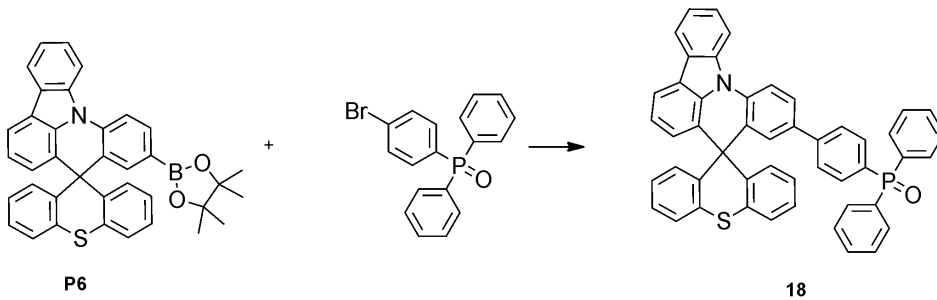


[0218]

[0219] 화합물 P6(10g, 18mmol) 및 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진(4.9g, 18mmol)을 사용하여, 제조예 1과 동일한 방법으로 화합물 17을 제조하였다(9.2g, 수율 77%, MS:[M+H]<sup>+</sup> = 653).

[0220]

<제조예 18> 화합물 18의 제조

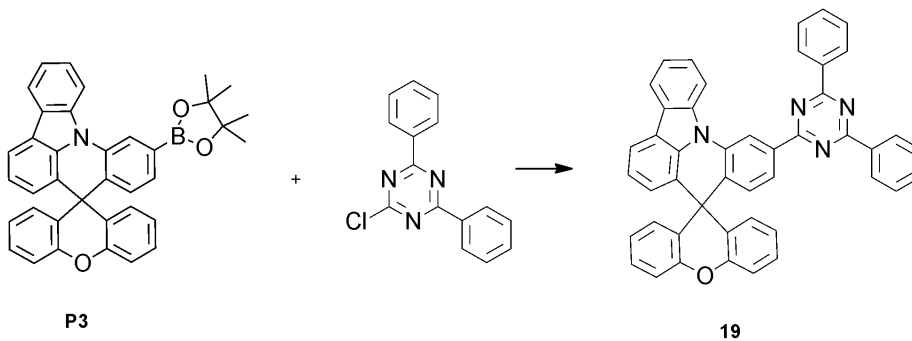


[0221]

[0222] 제조예 17에서 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 대신 (4-브로모페닐)디페닐포스핀 옥사이드(6.5g, 18mmol)를 사용하여, 동일한 방법으로 화합물 18을 제조하였다(9.6g, 수율 74%, MS:[M+H]<sup>+</sup> = 714).

[0223]

<제조예 19> 화합물 19의 제조



[0224]

[0225] 제조예 1에서 4-브로모디벤조[b,d]퓨란 대신 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진(4.9g, 18mmol)을 사용하여, 동일한 방법으로 화합물 19를 제조하였다(9.7g, 수율 81%, MS:[M+H]<sup>+</sup> = 653).

[0227]

<실시예 1>

[0228]

ITO(indium tin oxide)가 130 nm의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이 때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀리포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

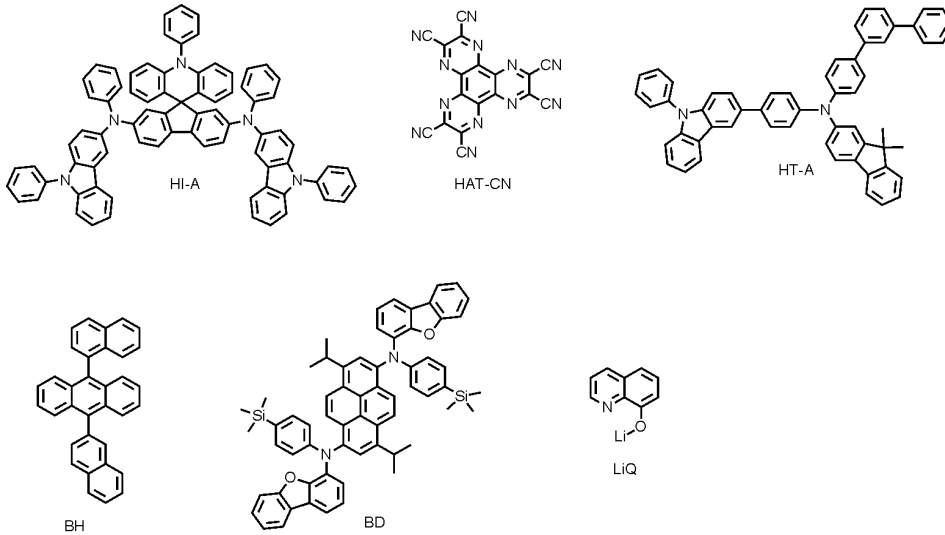
[0229]

상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 화합물 HI-A를 60 nm의 두께로 열 진공증착하여 정공 주입층을 형성하였다. 상기 정공 주입층 위에 하기 화합물 HAT-CN 및 하기 화합물 HT-A를 순차적으로 진공 증착하여 제1(두께 5 nm) 정공 수송층 및 제2 정공 수송층(두께 60 nm)을 형성하였다.

[0230] 이어서, 상기 정공 수송층 위에 막 두께 20 nm로 하기 화합물 BH와 BD를 25:1의 중량비로 진공증착하여 발광층을 형성하였다.

[0231] 상기 발광층 위에 상기 화합물 1과 LiQ 화합물을 1:1 중량비로 35 nm의 두께로 전자 주입 및 수송층을 형성하였다. 상기 전자 주입 및 수송층 위에 순차적으로 1 nm 두께로 리튬 플루라이드(LiF)와 100 nm 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

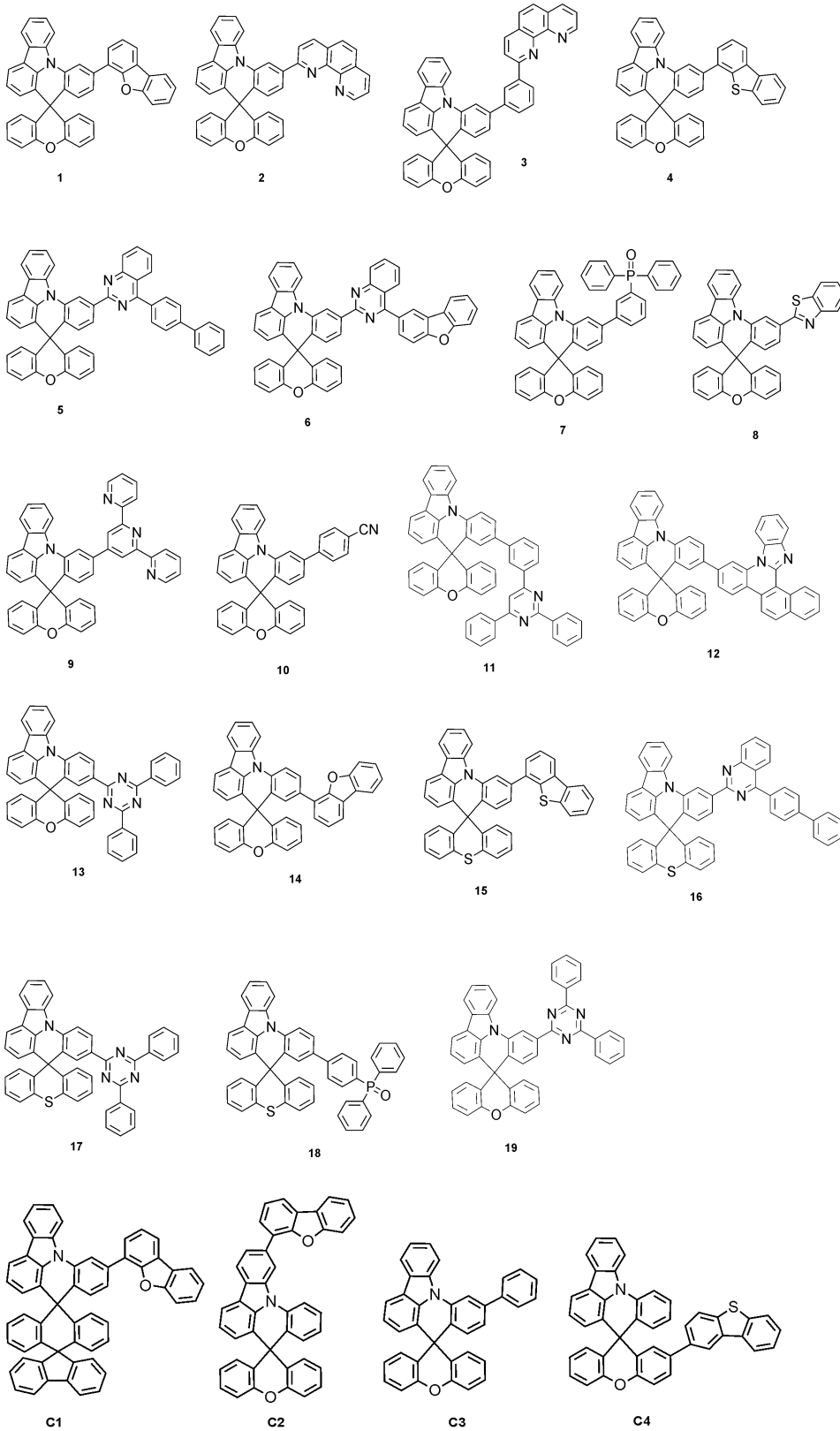
[0232] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.04 nm/sec 내지 0.09 nm/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플루오라이드는 0.03 nm/sec, 알루미늄은 0.2 nm/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는  $1 \times 10^{-7}$  torr 내지  $5 \times 10^{-6}$  torr를 유지하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.



[0233]

[0234] <실시예 2 내지 19 및 비교예 1 내지 4>

[0235] 상기 실시예 1에서 화합물 1 대신 하기 표 1의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.



[0236]

[0237]

[0238]

10 mA/cm<sup>2</sup>의 전류 밀도에서 제조한 유기 발광 소자의 구동 전압과 발광 효율을 측정하였고, 20 mA/cm<sup>2</sup>의 전류 밀도에서 소자의 휘도가 초기 휘도 대비 90%가 되는 시간(LT90)을 측정하였다. 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0239]

	화합물	전압(V)	효율(Cd/A)	색좌표 (x,y)	LT90(h)
실시예 1	1	4.50	5.76	(0.131, 0.132)	165

실시예 2	2	4.21	6.22	(0.131, 0.131)	145
실시예 3	3	4.21	6.33	(0.131, 0.130)	141
실시예 4	4	4.52	5.65	(0.131, 0.133)	172
실시예 5	5	4.32	5.96	(0.131, 0.131)	165
실시예 6	6	4.29	5.88	(0.131, 0.130)	169
실시예 7	7	4.66	6.01	(0.131, 0.131)	193
실시예 8	8	4.36	5.89	(0.131, 0.132)	153
실시예 9	9	4.26	5.95	(0.131, 0.130)	149
실시예 10	10	4.23	6.13	(0.131, 0.131)	153
실시예 11	11	4.27	6.01	(0.131, 0.130)	146
실시예 12	12	4.25	6.10	(0.131, 0.131)	153
실시예 13	13	4.26	6.21	(0.131, 0.131)	168
실시예 14	14	4.62	5.81	(0.131, 0.132)	182
실시예 15	15	4.69	5.72	(0.131, 0.131)	176
실시예 16	16	4.63	5.68	(0.131, 0.130)	170
실시예 17	17	4.26	6.17	(0.131, 0.131)	153
실시예 18	18	4.55	5.86	(0.131, 0.133)	169
실시예 19	19	4.32	6.01	(0.131, 0.131)	172
비교예 1	C1	5.02	5.41	(0.131, 0.131)	98
비교예 2	C2	5.12	5.65	(0.131, 0.130)	89
비교예 3	C3	5.21	4.11	(0.131, 0.132)	76
비교예 4	C4	5.06	5.77	(0.131, 0.130)	99

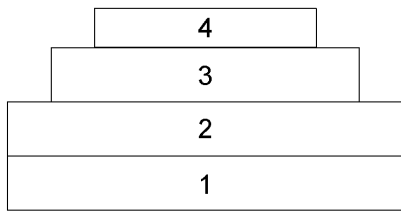
[0240] 상기 표 1의 결과로부터, 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 전자 주입 및 수송 역할을 하는 유기물층에 사용될 수 있음을 확인하였다. 본 발명 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용한 유기 발광 소자는 낮은 구동전압 및/또는 높은 효율을 가지며, 화합물의 정공 안정성에 의하여 소자의 안정성(수명 특성)이 특히 향상된다.

**부호의 설명**

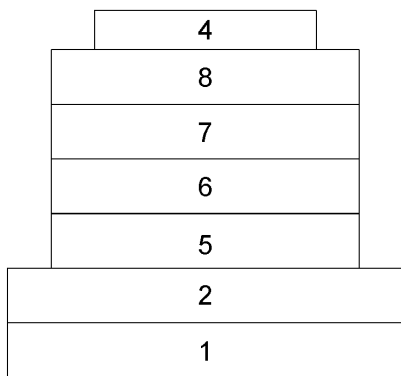
- [0241]
- 1: 기관
  - 2: 애노드
  - 3: 발광층
  - 4: 캐소드
  - 5: 정공 주입층
  - 6: 정공 수송층
  - 6a: 제1 정공 수송층
  - 6b: 제2 정공 수송층
  - 7: 발광층
  - 8: 전자 수송층
  - 9: 전자 주입 및 수송층

도면

도면1



도면2



도면3

