



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0053792  
(43) 공개일자 2019년05월20일

- |  |  |
|--|--|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)<br/>C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)<br/>H01L 51/50 (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류<br/>C09K 11/06 (2013.01)<br/>H01L 51/0067 (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2018-0135786</p> <p>(22) 출원일자 2018년11월07일<br/>심사청구일자 없음</p> <p>(30) 우선권주장<br/>1020170149498 2017년11월10일 대한민국(KR)</p> | <p>(71) 출원인<br/>룸엔드하스전자재료코리아유한회사<br/>충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)</p> <p>(72) 발명자<br/>이효정<br/>경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20<br/>라프웰 도미니아<br/>대한민국 경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20<br/>(뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인<br/>장훈</p> |
|--|--|

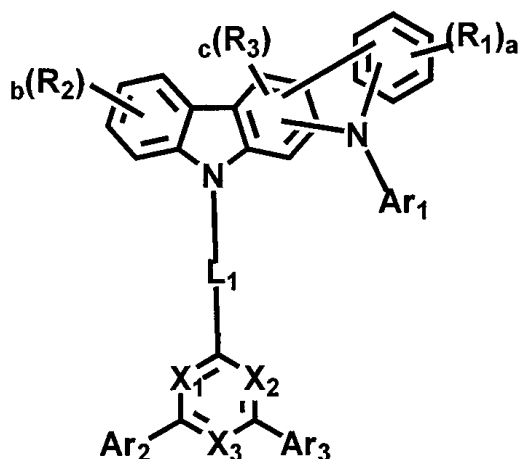
전체 청구항 수 : 총 8 항

(54) 발명의 명칭 유기 전계 발광 화합물, 이를 포함하는 유기 전계 발광 재료, 및 유기 전계 발광 소자

(57) 요약

본원은 유기 전계 발광 화합물, 이를 포함하는 유기 전계 발광 재료, 및 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물은 종래의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 비하여 수명 특성이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

*H01L 51/0071* (2013.01)

*H01L 51/0072* (2013.01)

*H01L 51/50* (2013.01)

*C09K 2211/1044* (2013.01)

*C09K 2211/1059* (2013.01)

(72) 발명자

**조상희**

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

---

**강현주**

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

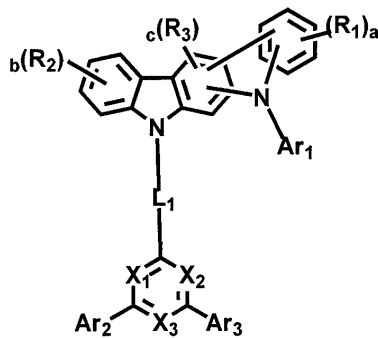
## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

$X_1$  내지  $X_3$ 은 각각 독립적으로  $CR_{12}$  또는 N 이고;

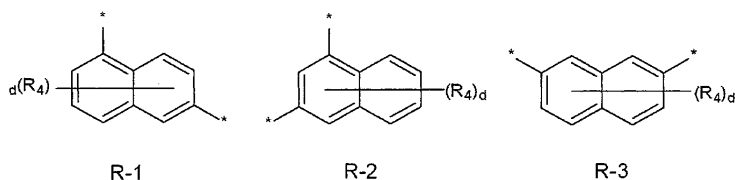
$X_1$  내지  $X_3$  중 적어도 하나는 N이며;

$Ar_1$  내지  $Ar_3$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이며;

$R_1$  내지  $R_3$ , 및  $R_{12}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나;  $R_1$ 과  $R_3$ 은 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며;

$a$  및  $b$ 는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수,  $c$ 는 0 내지 2의 정수고,  $a$  및  $b$ 가 2 이상의 정수이거나  $c$ 가 2인 경우, 각각의  $R_1$ , 각각의  $R_2$ , 및 각각의  $R_3$ 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

$L_1$ 은 하기 화학식 R-1 내지 R-3 중 어느 하나로 표시되고:



화학식 R-1 내지 R-3에서,

$R_4$ 는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이며;

$d$ 는 0 내지 6의 정수이고,  $d$ 가 2 이상의 정수인 경우 각각의  $R_4$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

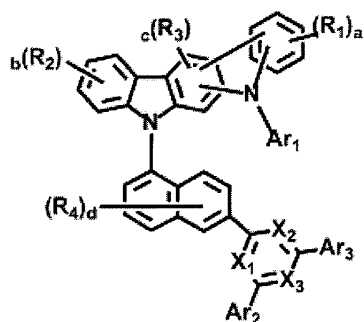
\*는 상기 화학식 1에서 인접한 고리와의 연결 위치를 나타낸다.

## 청구항 2

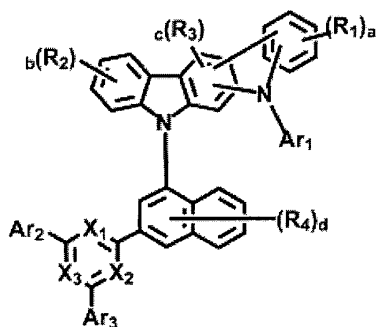
제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 1-5 중 어느 하나로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물:

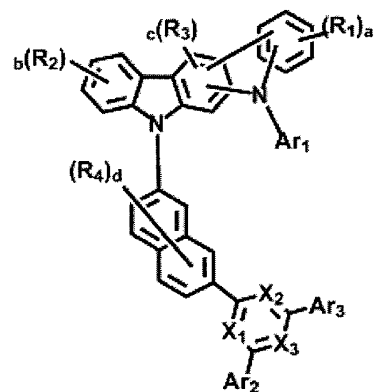
[화학식 1-1]



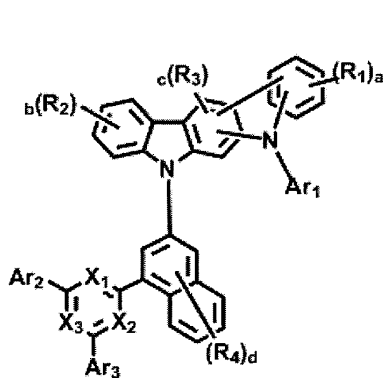
[화학식 1-2]



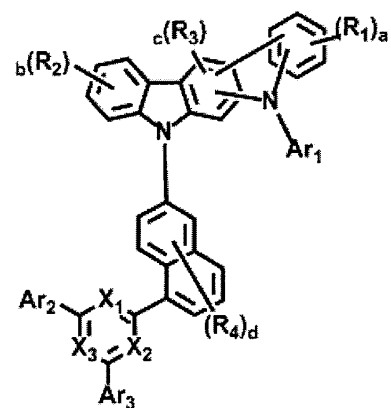
[화학식 1-3]



[화학식 1-4]



[화학식 1-5]



상기 화학식 1-1 내지 1-5에서,

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>, Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, 및 a 내지 d는 제1항에서의 정의와 같다.

## 청구항 3

제1항에 있어서,

상기 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, 및 R<sub>12</sub>에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환된 (C3-

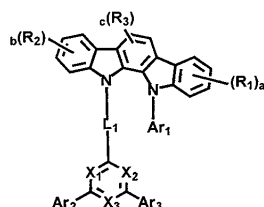
(C30)시클로알케닐, 치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환된 (C6-C30)아릴, 치환된 (3-30원)헤테로아릴, 및 치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알킬닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30 원)헤테로아릴, (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인, 유기 전계 발광 화합물.

#### 청구항 4

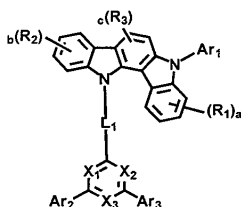
제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 7 중 어느 하나로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물:

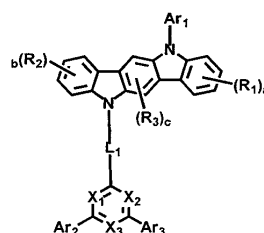
[화학식 2]



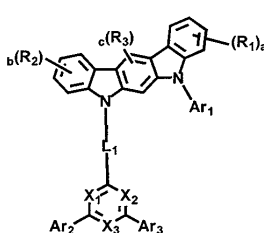
[화학식 3]



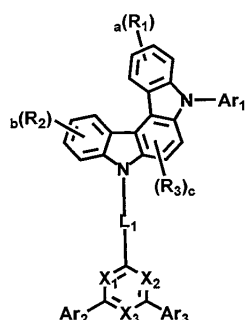
[화학식 4]



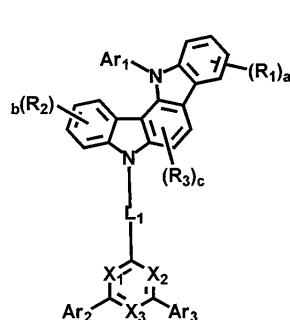
[화학식 5]



[화학식 6]



[화학식 7]



상기 화학식 2 내지 7에서,

L1, X1 내지 X3, Ar1 내지 Ar3, R1 내지 R3, 및 a 내지 c는 제1항에서의 정의와 같다.

#### 청구항 5

제1항에 있어서,

상기 X1 내지 X3 중 적어도 둘은 N이고;

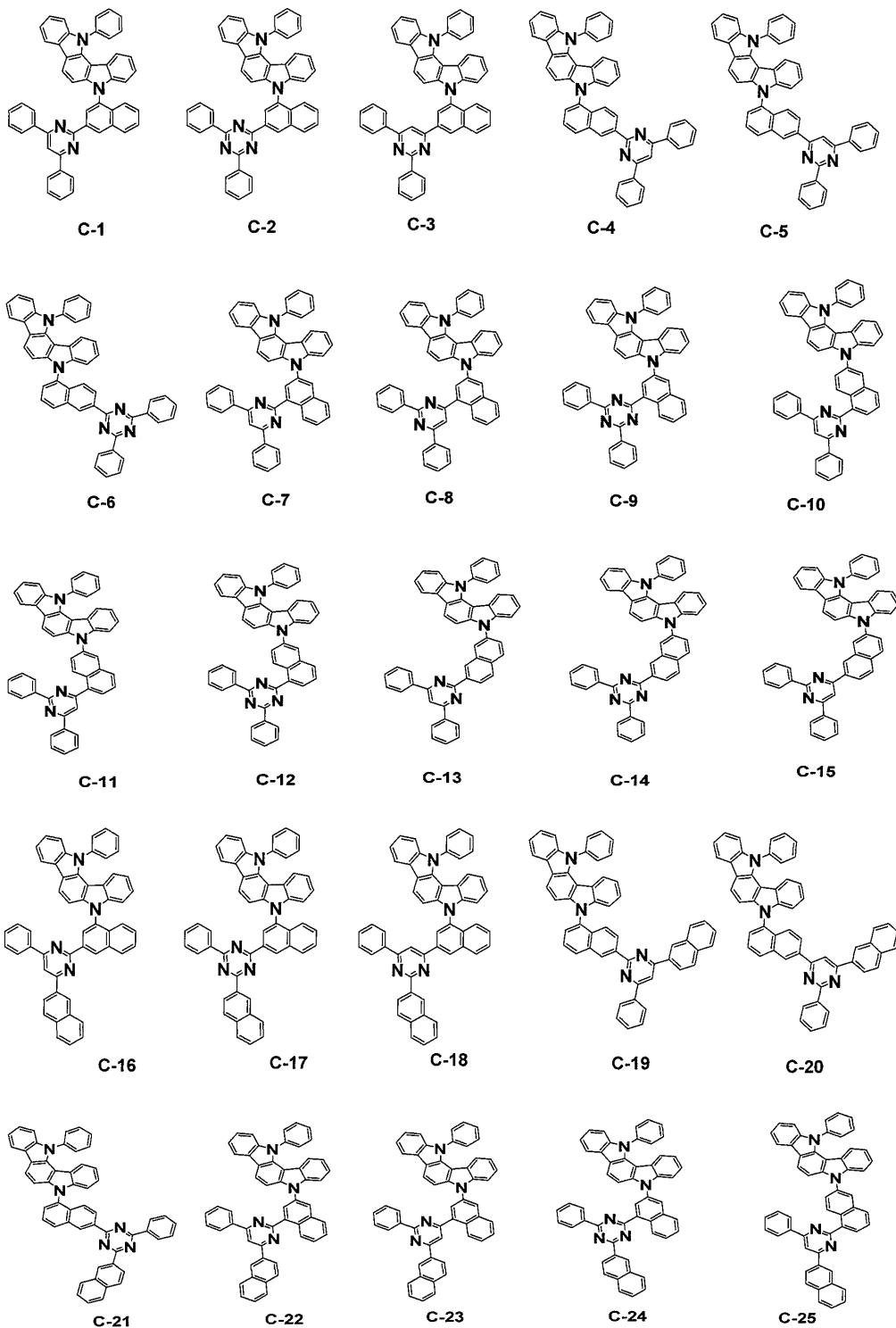
상기 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴이며;

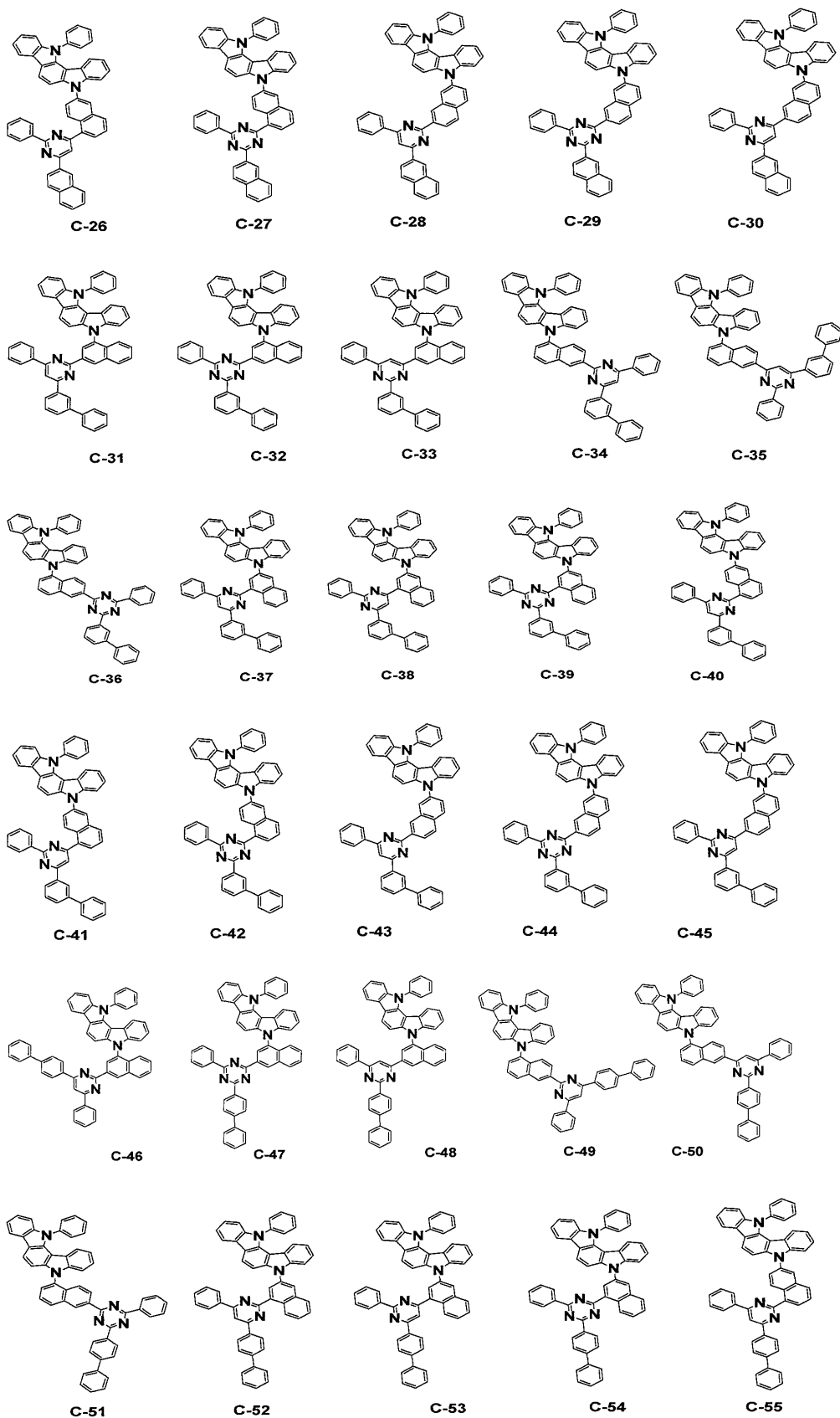
상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로 수소 또는 중수소인, 유기 전계 발광 화합물.

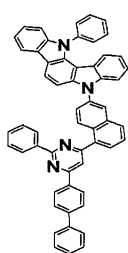
## 청구항 6

제1항에 있어서,

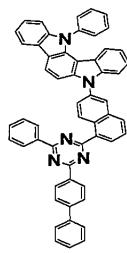
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물로부터 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.



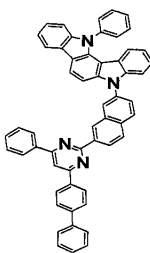




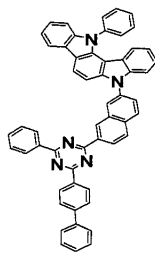
C-56



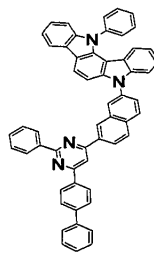
C-57



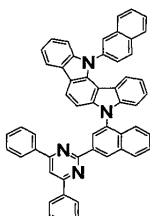
C-58



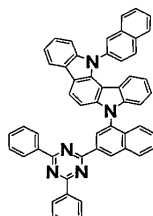
C-59



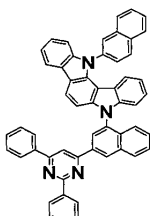
C-60



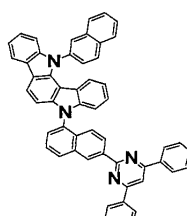
C-61



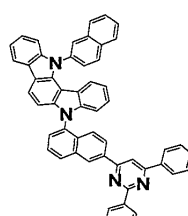
C-62



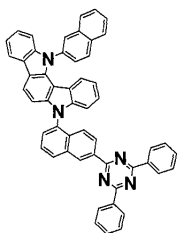
C-63



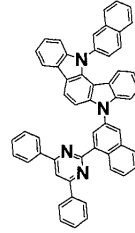
C-64



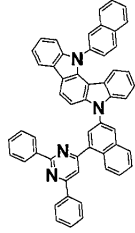
C-65



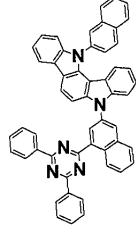
C-66



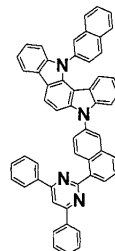
C-67



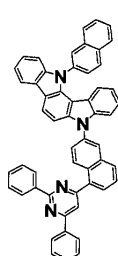
C-68



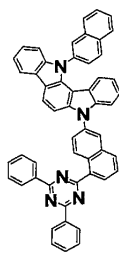
C-69



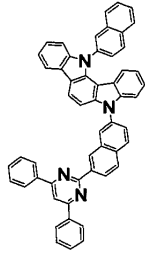
C-70



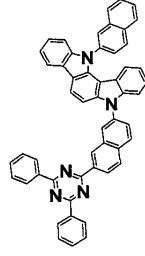
C-71



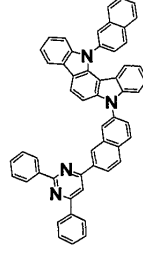
C-72



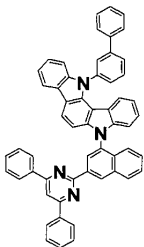
C-73



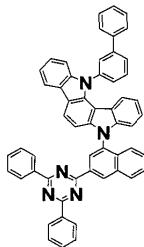
C-74



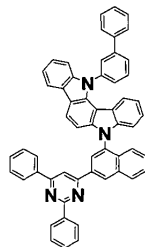
C-75



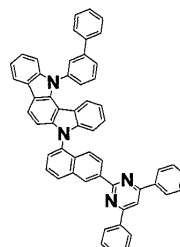
C-76



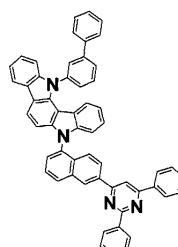
C-77



C-78

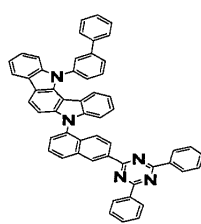


C-79

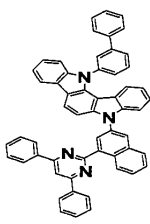


C-80

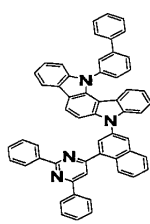




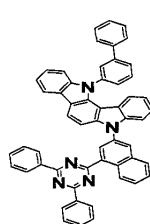
C-81



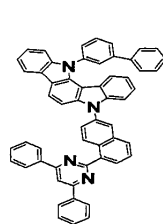
C-82



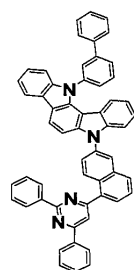
C-83



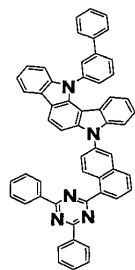
C-84



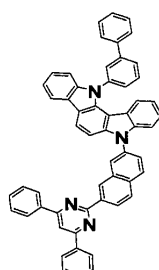
C-85



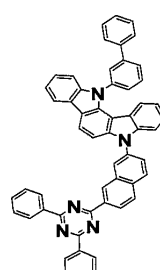
C-86



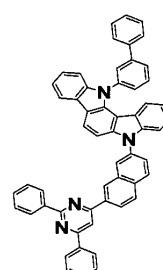
C-87



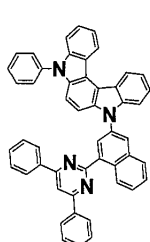
C-88



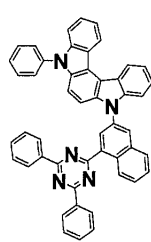
C-89



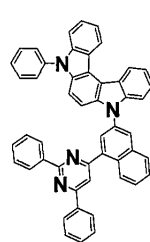
C-90



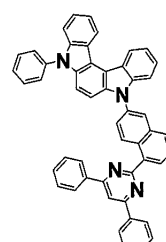
C-91



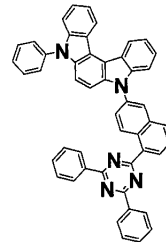
C-92



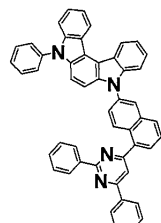
C-93



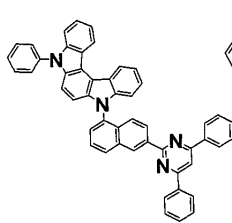
C-94



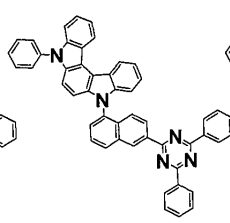
C-95



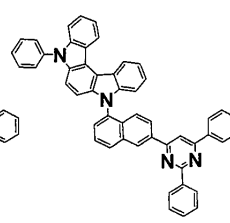
C-96



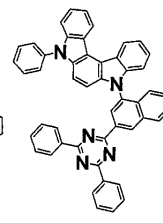
C-97



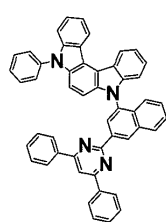
C-98



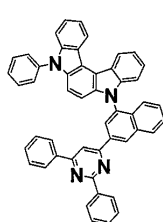
C-99



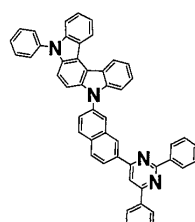
C-100



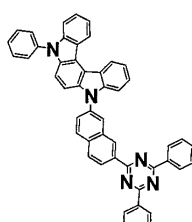
C-101



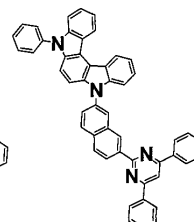
C-102



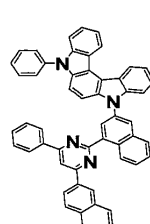
C-103



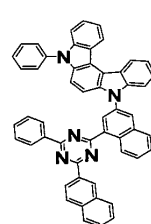
C-104



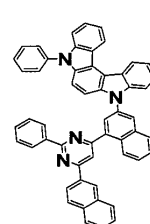
C-105



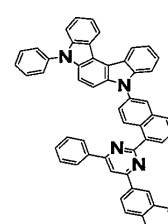
C-106



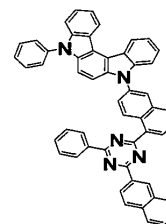
C-107



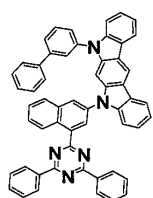
C-108



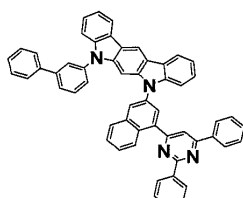
C-109



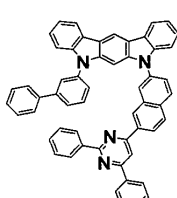
C-110



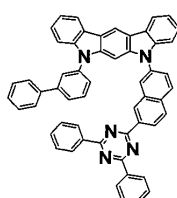
C-111



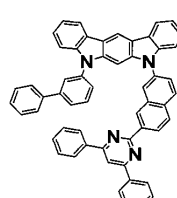
C-112



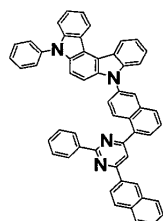
C-113



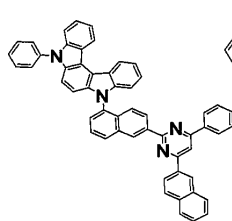
C-114



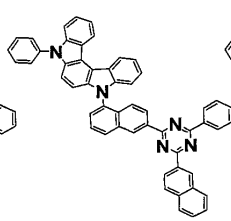
C-115



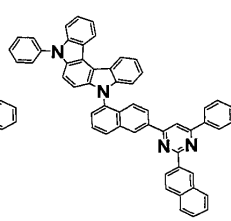
C-116



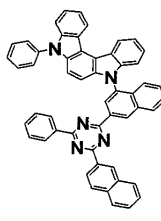
C-117



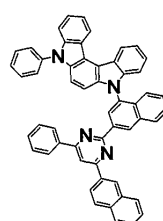
C-118



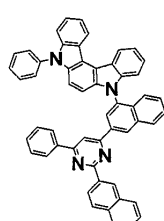
C-119



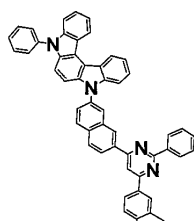
C-120



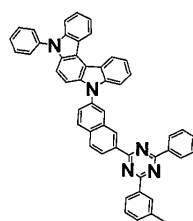
C-121



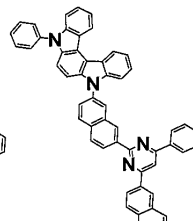
C-122



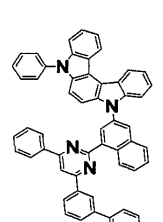
C-123



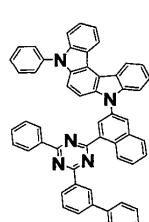
C-124



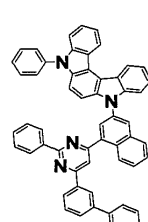
C-125



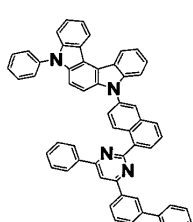
C-126



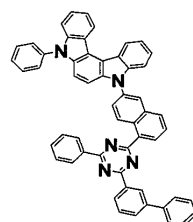
C-127



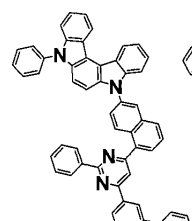
C-128



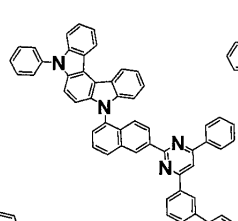
C-129



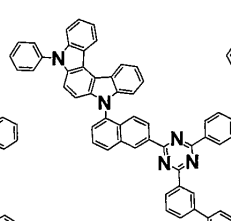
C-130



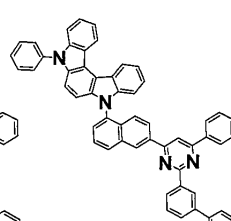
C-131



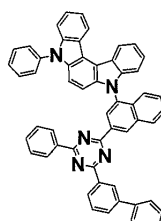
C-132



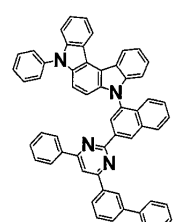
C-133



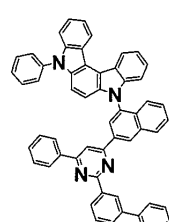
C-134



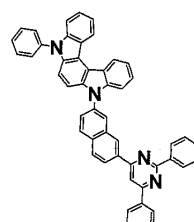
C-135



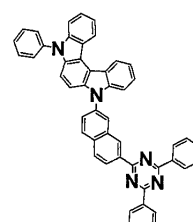
C-136



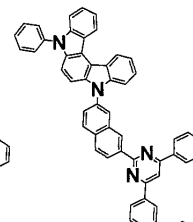
C-137



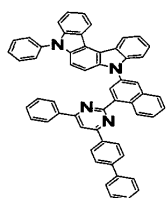
C-138



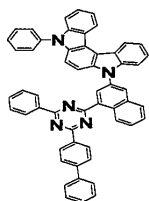
C-139



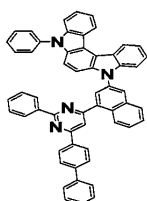
C-140



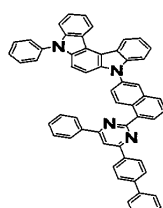
C-141



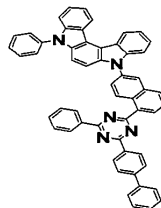
C-142



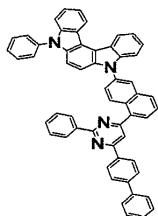
C-143



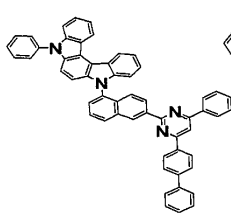
C-144



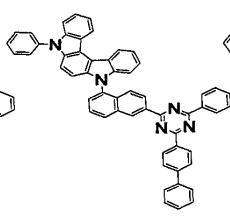
C-145



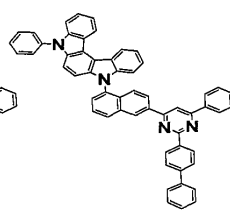
C-146



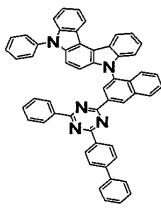
C-147



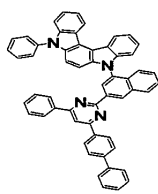
C-148



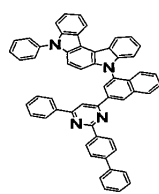
C-149



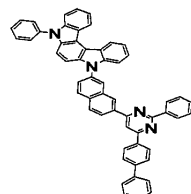
C-150



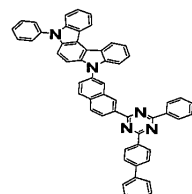
C-151



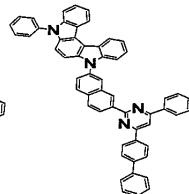
C-152



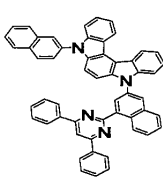
C-153



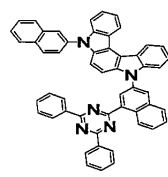
C-154



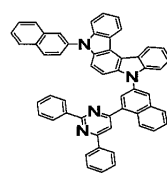
C-155



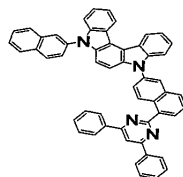
C-156



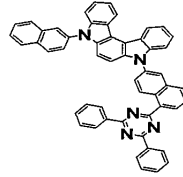
C-157



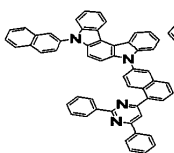
C-158



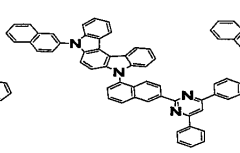
C-159



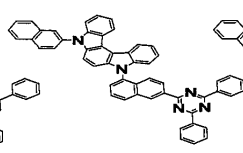
C-160



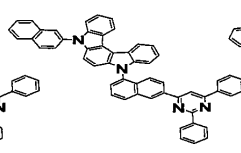
C-161



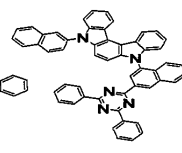
C-162



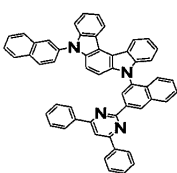
C-163



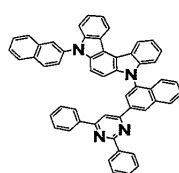
C-164



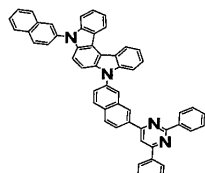
C-165



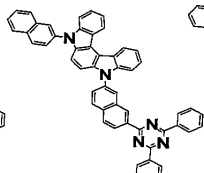
C-166



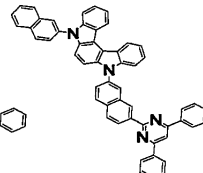
C-167



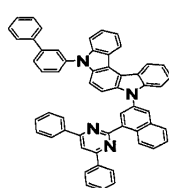
C-168



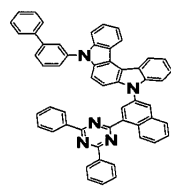
C-169



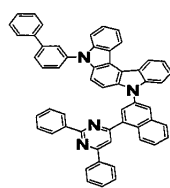
C-170



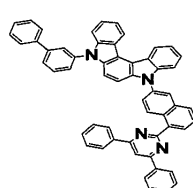
C-171



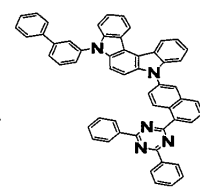
C-172



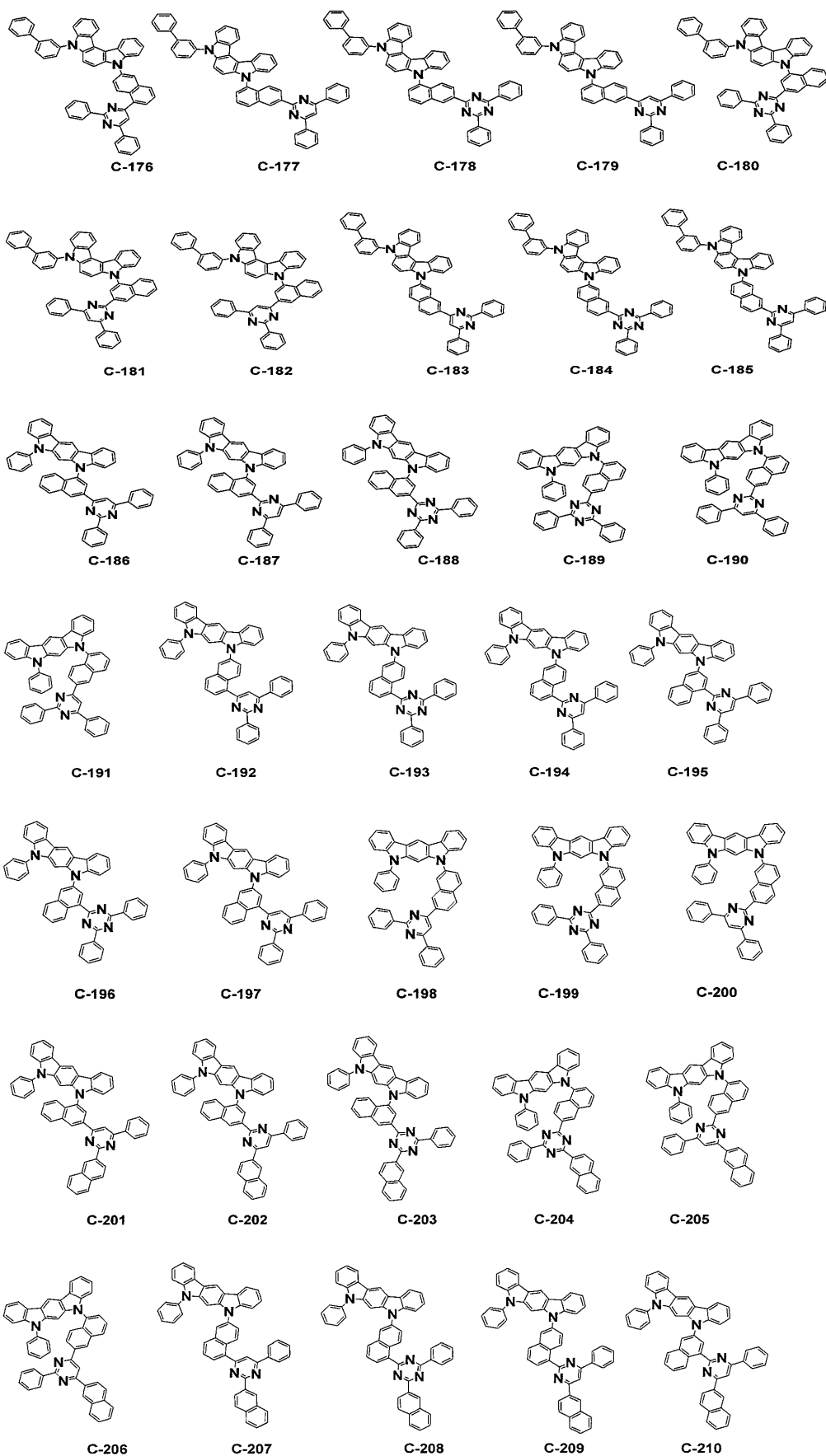
C-173

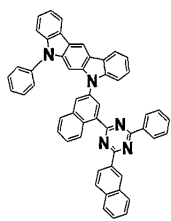


C-174

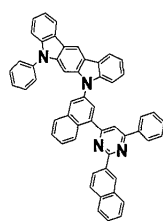


C-175

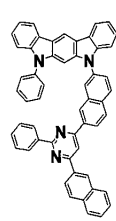




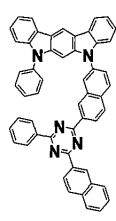
C-211



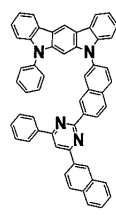
C-212



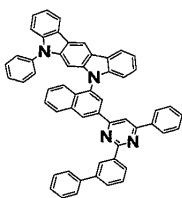
C-213



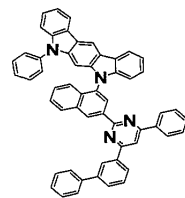
C-214



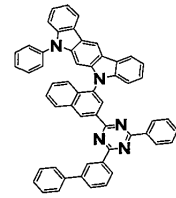
C-215



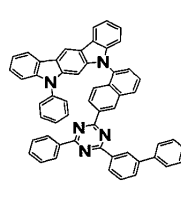
C-216



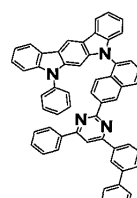
C-217



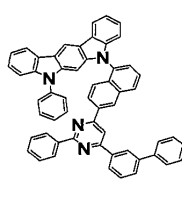
C-218



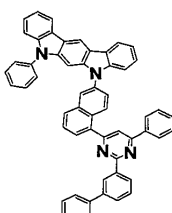
C-219



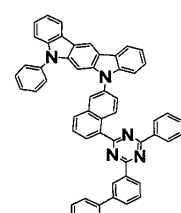
C-220



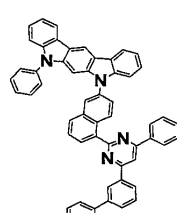
C-221



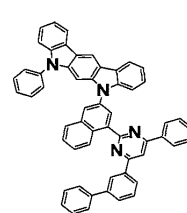
C-222



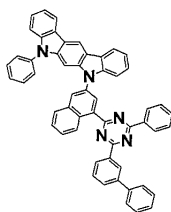
C-223



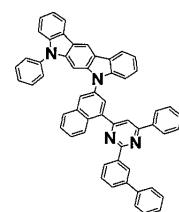
C-224



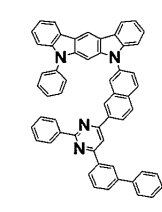
C-225



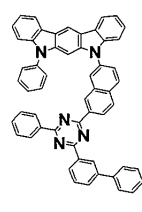
C-226



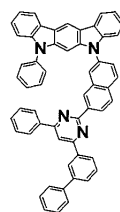
C-227



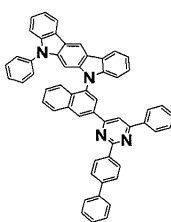
C-228



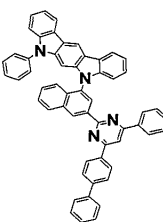
C-229



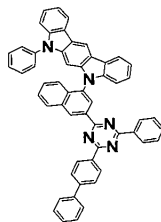
C-230



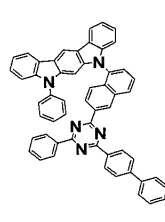
C-231



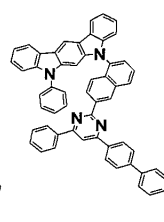
C-232



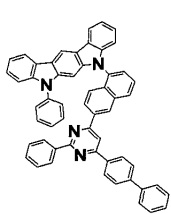
C-233



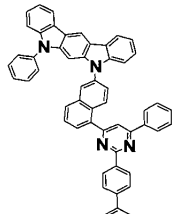
C-234



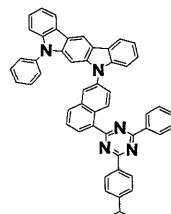
C-235



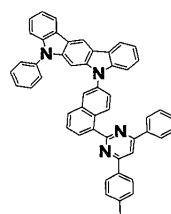
C-236



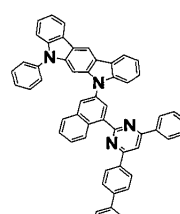
C-237



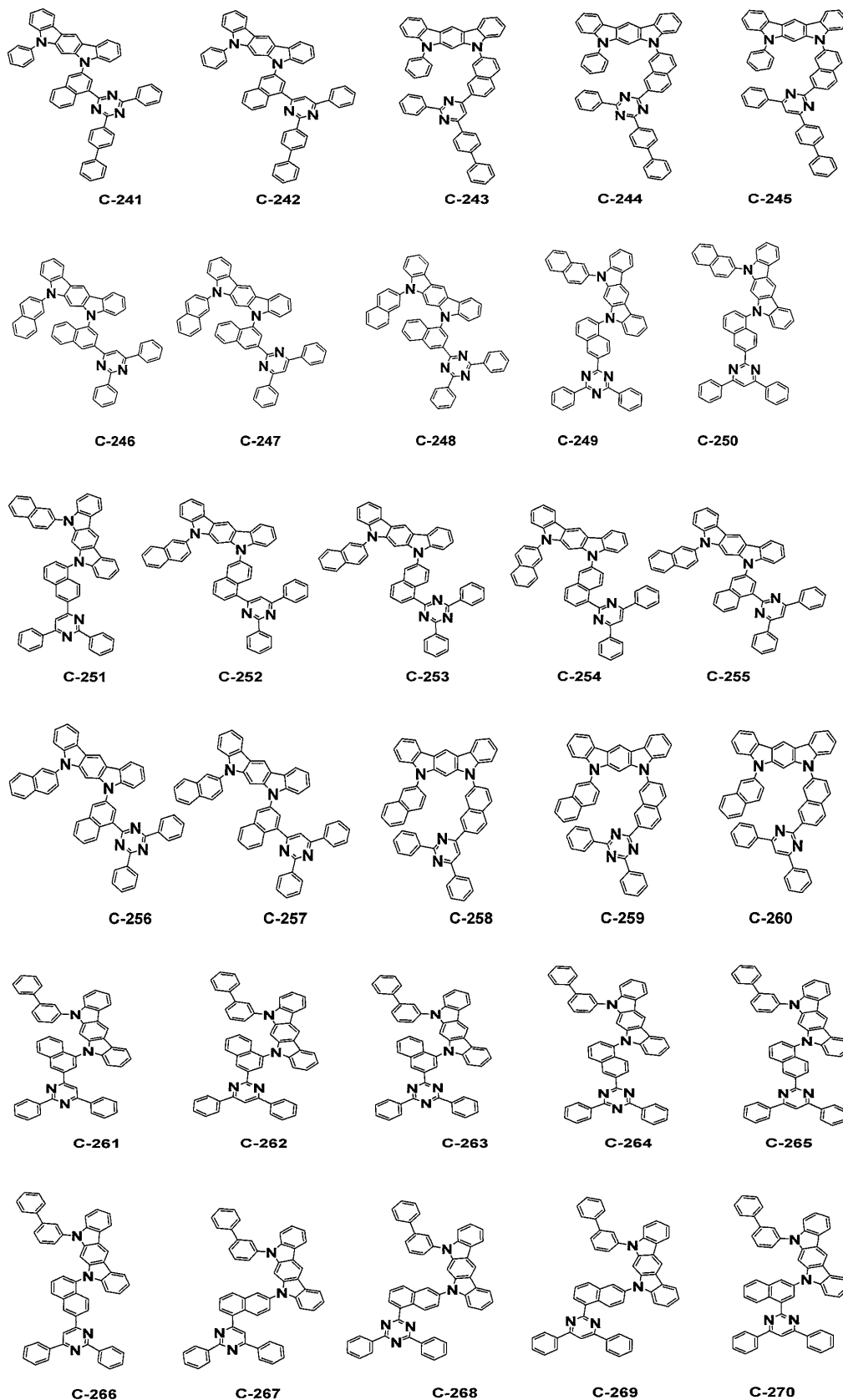
C-238



C-239



C-240



#### 청구항 7

제1항의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 재료.

#### 청구항 8

제1항의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001] 본 발명은 유기 전계 발광 화합물, 이를 포함하는 유기 전계 발광 재료, 및 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0002] 표시 소자 중, 전기 발광 소자(electroluminescent device: EL device)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 전계 발광 소자에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재까지 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 전계 발광의 메커니즘상 형광 발광 재료에 비해 인광 발광 재료가 이론적으로 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있다는 점에서 인광 발광 재료의 개발 연구가 널리 수행되고 있다. 현재까지 이리듐(III)착물 계열이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 각 RGB 별로 비스(2-(2'-벤조티에닐)-피리디네이트-N,C-3')이리듐(아세틸아세토네이트) [(acac)Ir(btp)<sub>2</sub>], 트리스(2-페닐피리딘)이리듐 [Ir(ppy)<sub>3</sub>], 비스(4,6-디플루오로페닐피리디네이트-N,C2)피콜리네이트이리듐 (Firpic) 등의 재료가 알려져 있다.

[0004] 종래 기술에서, 인광용 호스트 재료로는 4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐(CBP)이 가장 널리 알려져 있었다. 최근에는, 일본의 파이오니아 등이 정공 차단층의 재료로 사용되던 바토크프로인(Bathocuproine, BCP), 알루미늄(II)비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)(4-페닐페놀레이트)(Balq) 등을 호스트 재료로 이용해 고성능의 유기 전계 발광 소자를 개발한 바 있다.

[0005] 그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 다음과 같은 단점이 있다: (1) 유리 전이 온도가 낮고 열적 안정성이 낮아서, 진공 하에서 고온 증착 공정시 열화되며, 소자의 수명이 저하된다. (2) 유기 전계 발광 소자에서 전력효율 = [( $\eta$ /전압) X 전류효율]의 관계에 있으므로 전력 효율은 전압에 반비례하는데, 인광용 호스트 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자는 형광 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자에 비해 전류효율(cd/A)은 높으나, 구동 전압 역시 상당히 높기 때문에 전력 효율(lm/w) 면에서 큰 이점이 없다. (3) 또한, 유기 전계 발광 소자에 사용할 경우, 작동 수명 측면에서도 만족스럽지 못하며, 발광 효율도 여전히 개선이 요구된다. 따라서, 유기 EL 소자의 우수한 특성을 구현하기 위해서는 소자 내 유기물층을 구성하는 재료들, 특히 발광 재료를 구성하는 호스트 또는 도판트를 적절히 선택해야 한다.

[0006] 한국 등록특허공보 제10-1477613호는 치환된 인돌로카바졸 화합물을 호스트 재료로 사용한 유기 전계 발광 소자를 개시하고 있으나, 나프탈렌을 연결기로 갖는 화합물에 대해서는 개시하고 있지 않다.

[0007] 한국 등록특허공보 제10-1313730호는 치환된 인돌로카바졸 화합물을 코어로 나프탈렌기를 연결기로 갖는 화합물을 호스트 재료로 개시하고 있으나, 비대칭 나프탈렌 연결기를 갖는 화합물에 대해서는 개시하고 있지 않다.

### 선행기술문헌

#### 특허문헌

[0008] (특허문헌 0001) 한국 등록특허공보 제10-1477613호 (2014. 12. 23 등록)  
(특허문헌 0002) 한국 등록특허공보 제10-1313730호 (2013. 9. 25. 등록)

### 발명의 내용

#### 해결하려는 과제

[0009] 본 발명의 목적은, 첫째로 유기 전계 발광 소자의 수명 특성을 개선시킬 수 있는 유기 전계 발광 화합물을 제공

하는 것이며, 둘째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료를 제공하는 것이며, 셋째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 수명 특성이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

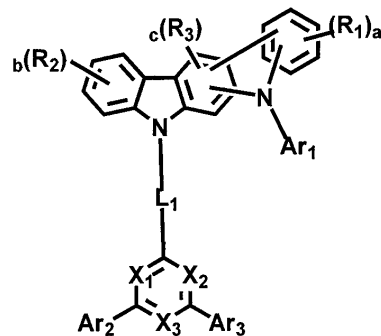
### 과제의 해결 수단

[0010] 상기의 기술적 과제를 해결하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자들은 정공 수송성 기와 전자 수송성 기가 나프탈렌을 연결기로 비대칭적으로 연결된 구조를 형성함으로써 낮은 구동 전압 및/또는 높은 발광 효율 및/또는 긴 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있음을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0011] 구체적으로 일 예에 따른 유기 전계 발광 화합물은, 정공을 받기 쉬운 인돌로카바졸 부분과 전자를 받기 쉬운 질소 함유 방향족 육각고리기가 나프탈렌 연결기에 1, 3- 또는 1, 6- 위치(meta-type regiochemical position)로 연결됨으로써, 두 모듈사이의 전자 공액(electron conjugation)이 끊기고 여기 상태에서 화합물의 도너-억셉터(donor-acceptor) 전자 결합이 약화되어 높은 HOMO 에너지 준위를 갖게된다. 이 에너지 준위로 정공전류특성이 향상되어 전하 균형(charge balance)이 개선되며 인광 소자의 특성을 높이는 역할을 한다. 따라서 일 예에 따른 비대칭 나프탈렌으로 연결된 화합물은 종래의 화합물과 비교하여 유기 전계 발광 소자의 효율을 개선할 수 있다.

[0012] 보다 구체적으로 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물로 상술한 목적을 달성할 수 있다.

[0013] [화학식 1]



[0014]

상기 화학식 1에서,

[0015]

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 CR<sub>12</sub> 또는 N 이고;

[0016]

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub> 중 적어도 하나는 N이며;

[0017]

Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이며;

[0018]

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>, 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; R<sub>1</sub>과 R<sub>3</sub>은 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며;

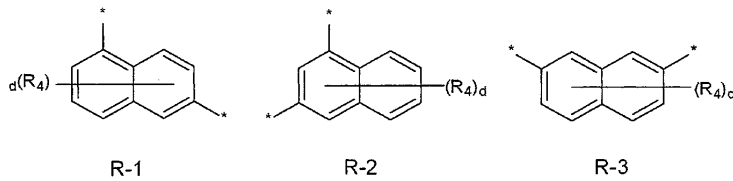
[0019]

a 및 b는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수, c는 0 내지 2의 정수이고, a 및 b가 2 이상의 정수이거나 c가 2인 경우, 각각의 R<sub>1</sub>, 각각의 R<sub>2</sub>, 또는 각각의 R<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

[0020]



[0021] L<sub>1</sub>은 하기 화학식 R-1 내지 R-3 중 어느 하나로 표시되고:



[0022]

[0023] 화학식 R-1 내지 R-3에서,

[0024] R<sub>i</sub>는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이며;

[0025] d는 0 내지 6의 정수이고, d가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>i</sub>는 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

[0026] \*는 상기 화학식 1에서 인접한 고리와의 연결 위치를 나타낸다.

### 발명의 효과

[0027] 일 구현예에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써, 구동 수명이 긴 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

[0028] 도 1은 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물의 대표적인 화학식이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0029] 이하에서 본 발명의 구현예를 더욱 상세히 설명한다. 다만, 이는 설명을 위한 것으로, 이에 의해 본 발명의 범위가 제한되지 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

[0030] 본원에서 "유기 전계 발광 화합물"은 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 화합물을 의미하며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 재료층에 포함될 수 있다.

[0031] 본원에서 "유기 전계 발광 재료"는 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 재료를 의미하고, 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있으며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다. 예를 들면, 상기 유기 전계 발광 재료는 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료, 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료 등이 될 수 있다.

[0032] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은쇄를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 1 내지 20개, 더 바람직하게는 1 내지 10개이다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알케닐"은쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알킬닐"은쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬닐의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 상기 탄소수는 바람직하게는 3 내지 20개, 더 바람직하게는 3 내지 7개이다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(3-7원) 헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 3 내지 7개, 바람직하게는 5 내지 7개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군, 바람직하게는 O, S 및 N로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라히드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 상기 탄소수는 바람직하게는 6 내지 20개, 더 바람직하게는 6 내지

15개이다. 상기 아릴은 스피로 구조를 가진 것을 포함한다. 상기 아릴의 예로서 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오안테닐, 스피로비플루오레닐 등이 있다. 본원에서 "(3-30원) 헤테로아릴"은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함하며, 스피로 구조를 가진 것도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 벤조카바졸릴, 페녹사진일, 페노티아진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로젠"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

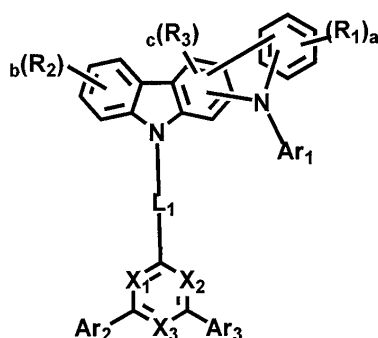
[0033] 본원에서 "인접한 치환기와 연결되어 형성된 고리"는 인접한 두 개 이상의 치환체가 연결 또는 융합되어 형성된 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 의미하고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C3-C26)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리일 수 있다. 또한, 형성된 고리에서 적어도 하나의 탄소원자는 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 치환될 수 있다.

[0034] 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환기(체))로 대체되는 것을 뜻한다. 본원에서 특별한 정의가 없는 한, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, Ar<sub>3</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, 및 R<sub>12</sub>에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환된 (C6-C30)아릴, 치환된 (3-30원)헤테로아릴, 및 치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족, 또는 이들 조합의 고리의 치환체는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30 원)헤테로아릴, (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있다.

[0035] 이하, 일 구현예에 따른 유기 전계 발광 화합물을 설명한다.

[0036] 일 구현예에 따른 유기 전계 발광 화합물 하기 화학식 1로 표시된다.

[0037] [화학식 1]



[0038]

[0039] 상기 화학식 1에서,

[0040]  $X_1$  내지  $X_3$ 은 각각 독립적으로  $CR_{12}$  또는 N 이고;

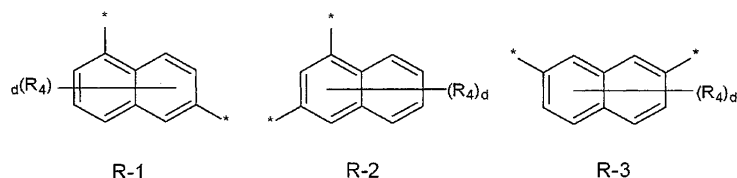
[0041]  $X_1$  내지  $X_3$  중 적어도 하나는 N이며;

[0042]  $Ar_1$  내지  $Ar_3$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이며;

[0043]  $R_1$  내지  $R_3$ , 및  $R_{12}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나;  $R_1$ 과  $R_3$ 은 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며;

[0044] a 및 b는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수, c는 0 내지 2의 정수이고, a 및 b가 2 이상의 정수이거나 c가 2인 경우, 각각의  $R_1$ , 각각의  $R_2$ , 및 각각의  $R_3$ 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

[0045]  $L_1$ 은 하기 화학식 R-1 내지 R-3 중 어느 하나로 표시되고:



[0046]

[0047] 화학식 R-1 내지 R-3에서,

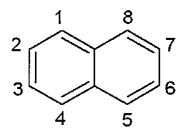
[0048]  $R_4$ 는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이며;

[0049] d는 0 내지 6의 정수이고, d가 2 이상의 정수인 경우 각각의  $R_4$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

[0050] \*는 상기 화학식 1에서 인접한 고리와 연결 위치를 나타낸다.

[0051] 일 예로, 화학식 1에서,  $L_1$ 은 치환 또는 비치환된 나프틸렌기로 하기 화학식 a로 표시될 수 있으며, 나프틸렌의 1번 및 3번 탄소, 1번 및 6번 탄소, 3번 및 6번 탄소, 3번 및 8번 탄소, 또는 6번 및 8번 탄소가 각각 인접한 고리와 연결될 수 있다. 또는 예컨대, 나프틸렌의 2번 및 4번 탄소, 2번 및 5번 탄소, 2번 및 7번 탄소, 4번 및 7번 탄소, 또는 2번 및 7번 탄소가 각각 인접한 고리와 연결될 수 있다.

[0052] [화학식 a]



[0053]

[0054] 상기  $L_1$ 은 구체적으로 상기 화학식 R-1 내지 R-3 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 즉, 상기  $L_1$ 은, 인접한 치환 기인 인돌로카바졸과 질소 함유 방향족 육각고리기에 비대칭적으로 연결된다.

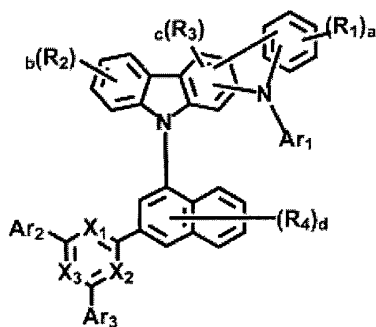
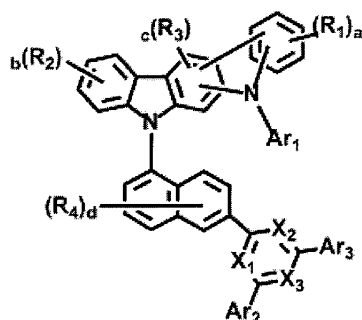
[0055] 일 예에 따른 유기 전계 발광 소자는, 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써 낮은 구동 전압 및/또는 높은 발광 효율 및/또는 긴 수명 특성을 갖는다. 이러한 효과는 정공 수송 기인 인돌로카바졸 부분과 전자 수송 기인 질소 함유 방향족 육각고리기가 나프탈렌의 상기 특정 위치로 연결됨에 따라, 두 정공 수송기 및 전자 수송기 사이의 전자 공액(electron conjugation)이 끊기면서 달성된다.

[0056] 일 예에 따른 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 1-5 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0057]

[화학식 1-1]

[화학식 1-2]

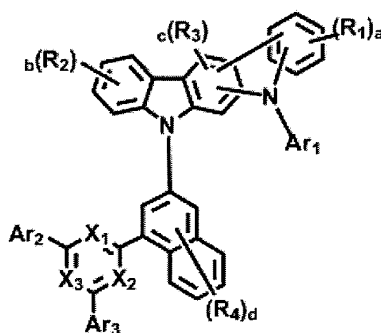
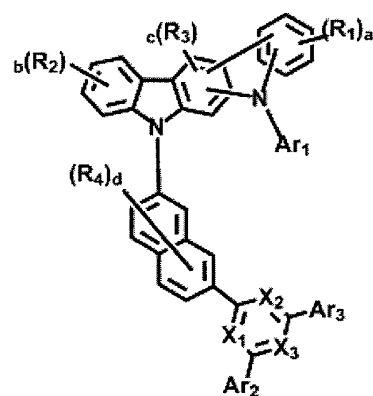


[0058]

[0059]

[화학식 1-3]

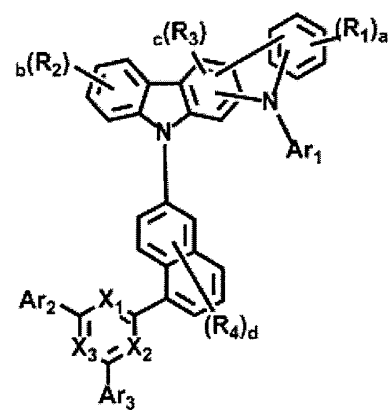
[화학식 1-4]



[0060]

[0061]

[화학식 1-5]



[0062]

[0063]

상기 화학식 1-1 내지 1-5에서,

[0064]

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>, Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, 및 a 내지 d는 상기 화학식 1에서의 정의와 같다.

[0065]

일 예로, 상기 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴이고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴일 수 있다. 예컨대, 상기 Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 비페닐, 또는 치환 또는 비치환된 나프틸일 수 있다.

[0066]

일 예로, 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬일 수 있고, 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬일 수 있다. 예컨대, 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, 및 R<sub>12</sub>는 모두 수소일 수 있다.

[0067]

일 예로, 상기 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub> 중 적어도 둘은 N 일 수 있다. 예를 들어, 상기 X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 N이고, X<sub>3</sub>은 CR<sub>12</sub> 일 수

있고, 예를 들어, 상기  $X_1$  및  $X_3$ 은 N이고  $X_2$ 는 CR<sub>12</sub>일 수 있으며, 예를 들어, 상기  $X_2$  및  $X_3$ 은 N이고,  $X_1$ 은 CR<sub>12</sub>일 수 있다.

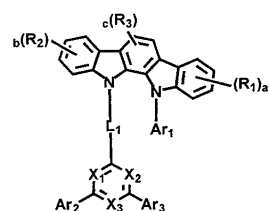
[0068] 일 예로, 상기  $X_1$  내지  $X_3$ 은 모두 N일 수 있다.

[0069] 상기 화학식 1에서, 상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si, 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고, 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고, 더욱 바람직하게는 하나 이상의 N을 포함할 수 있다.

[0070] 상기 화학식 1에서, a, b, c, 및 d는 바람직하게는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수일 수 있다. 예를 들어, a, b, c, 및 d는 모두 0일 수 있다.

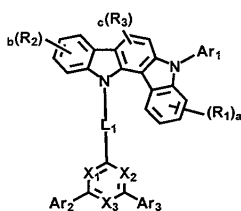
[0071] 본원의 일 예에 따르면, 상기 유기 전계 발광 화합물은 예컨대, 하기 화학식 2 내지 화학식 7 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0072] [화학식 2]

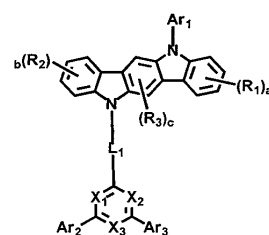


[0073]

[화학식 3]

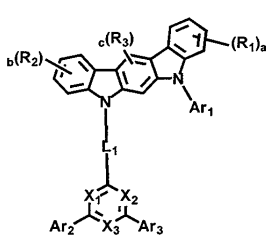


[0074] [화학식 4]

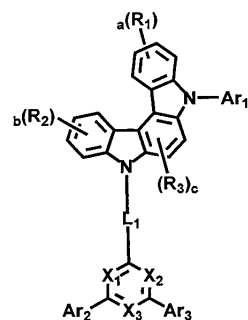


[0075]

[화학식 5]

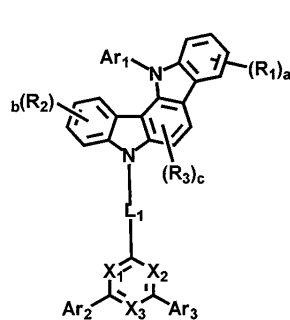


[0076] [화학식 6]



[0077]

[화학식 7]



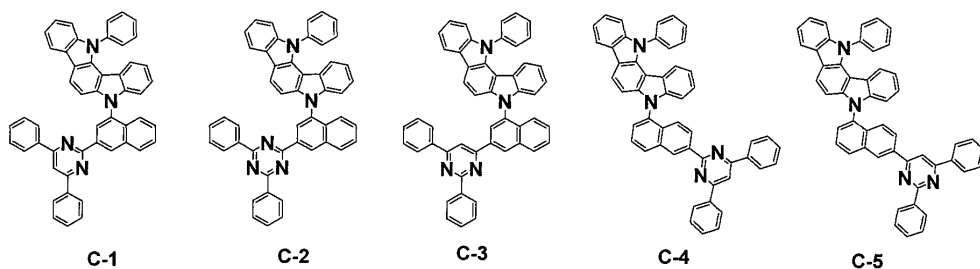
[0078] 상기 화학식 2 내지 7에서,

[0079] L<sub>1</sub>, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>, Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 및 a 내지 c는 상기 화학식 1에서의 정의와 같다.

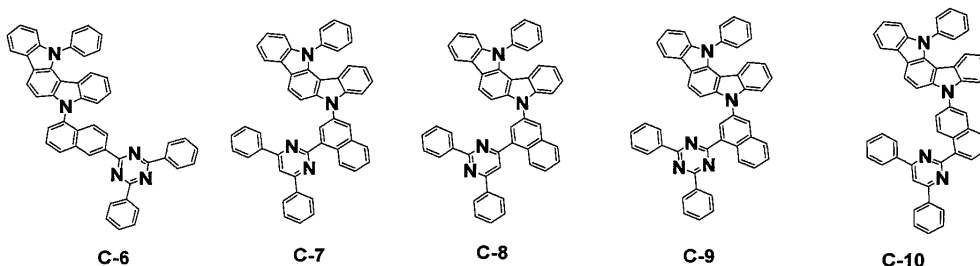
[0080] 본원의 일 예에 따르면, 화학식 1에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub> 중 적어도 둘은 N이고, Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>25</sub>)아릴이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이며, a, b, c, 및 d는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이다.

[0081] 본원의 다른 일 예에 따르면, 상기 화학식 1에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>3</sub>는 모두 N이고, Ar<sub>1</sub> 내지 Ar<sub>3</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>)아릴이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>, 및 R<sub>12</sub>는 모두 수소이며, a, b, c, 및 d는 모두 0인 정수이다.

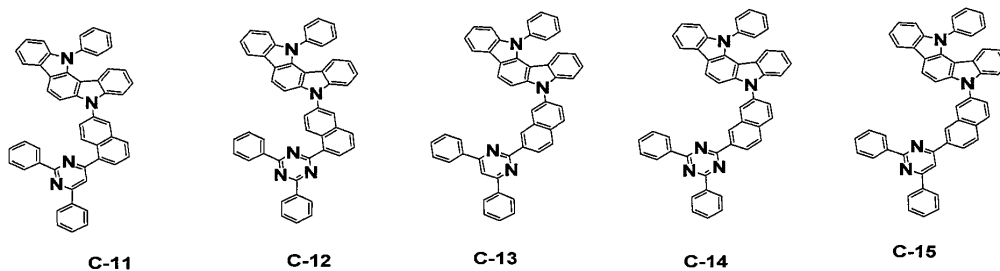
[0082] 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



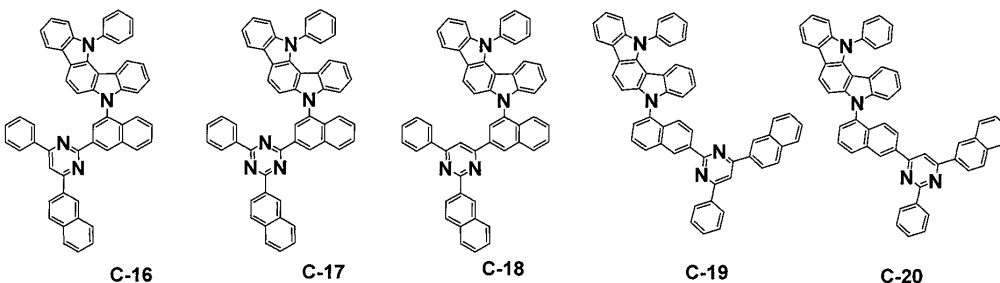
[0083]



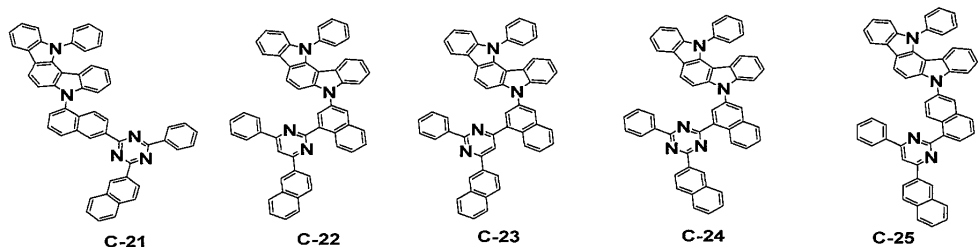
[0084]



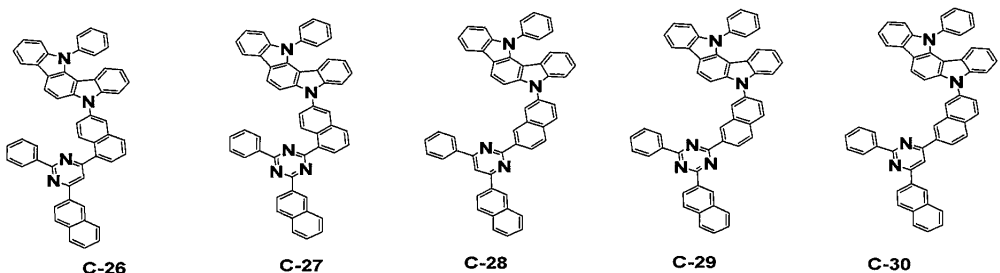
[0085]



[0086]



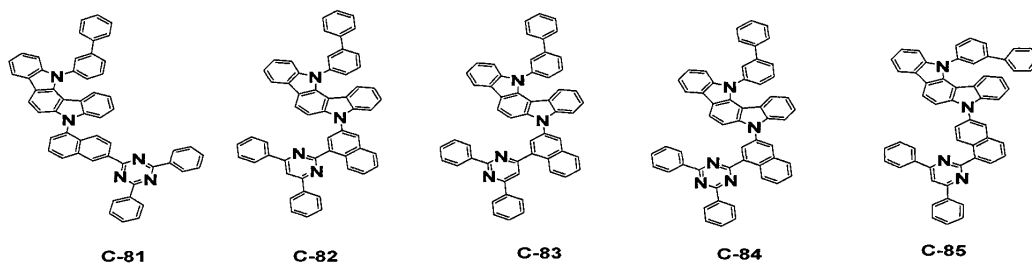
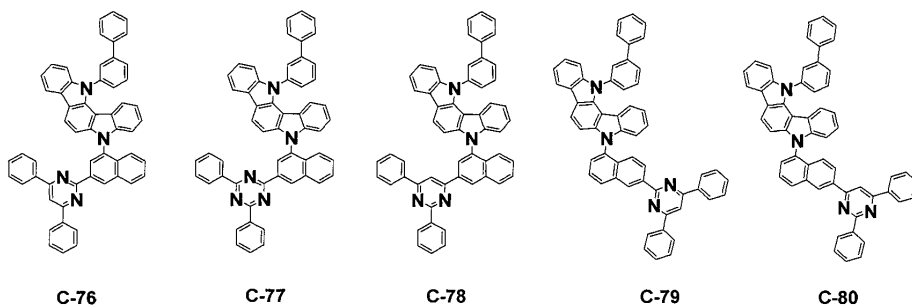
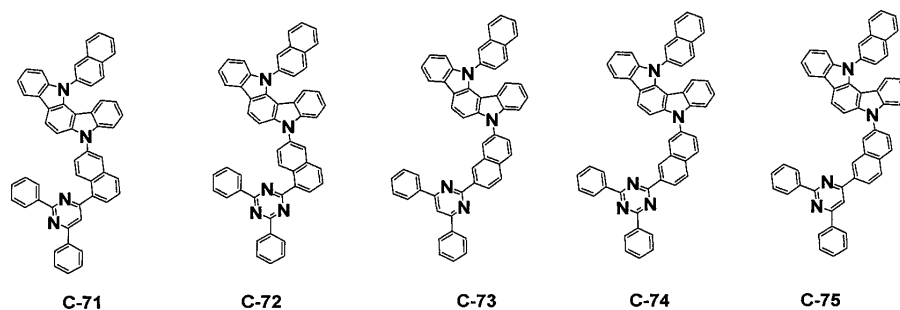
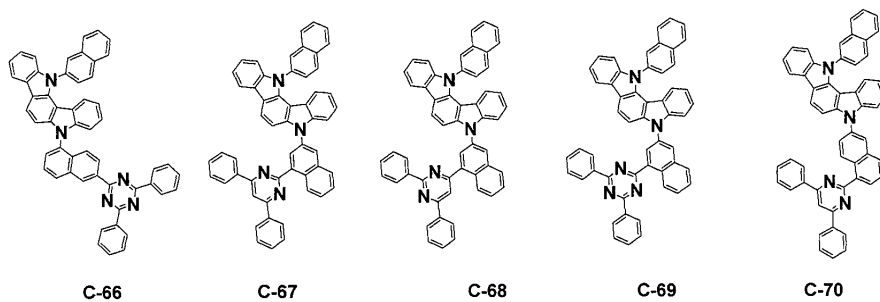
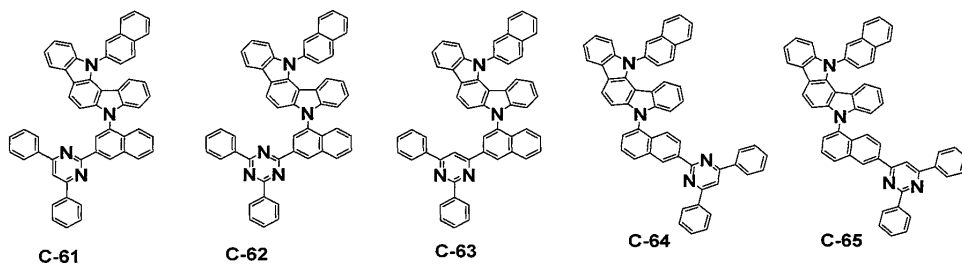
[0087]



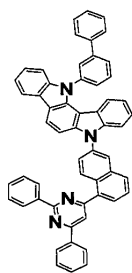
[0088]



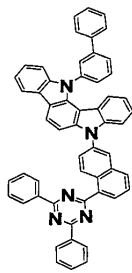




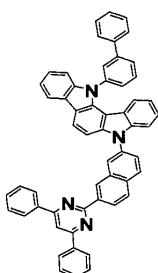




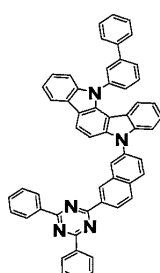
C-86



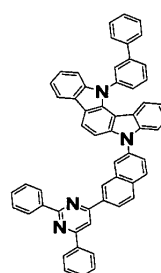
C-87



C-88

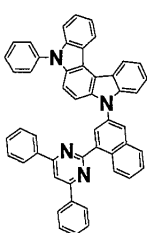


C-89

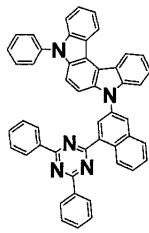


C-90

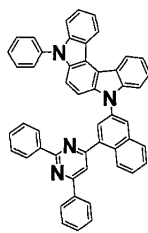
[0100]



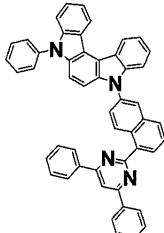
C-91



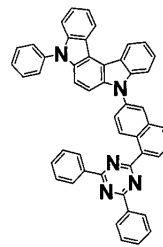
C-92



C-93

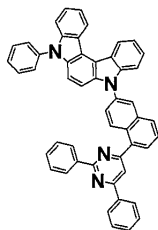


C-94

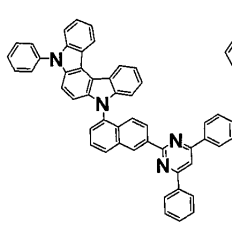


C-95

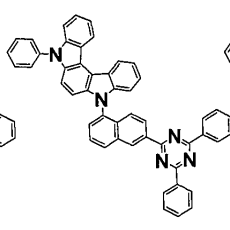
[0101]



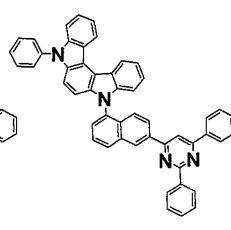
C-96



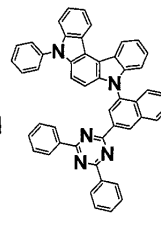
C-97



C-98

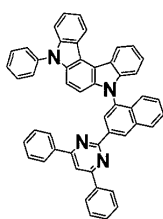


C-99

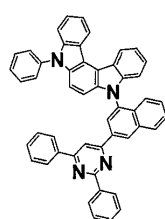


C-100

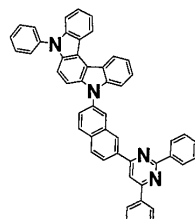
[0102]



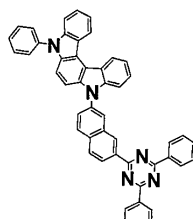
C-101



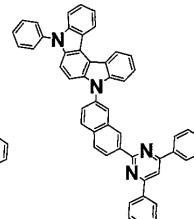
C-102



C-103

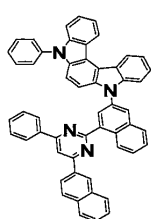


C-104

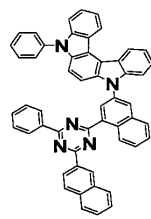


C-105

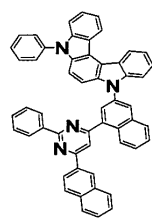
[0103]



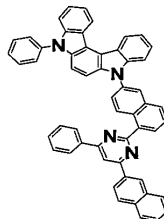
C-106



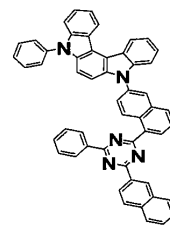
C-107



C-108

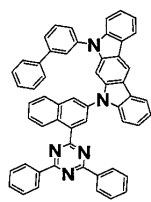


C-109

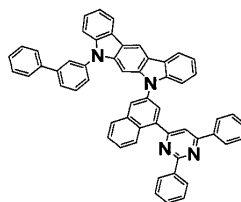


C-110

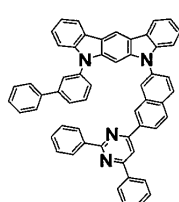
[0104]



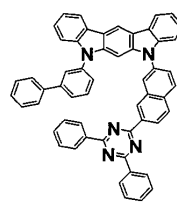
C-111



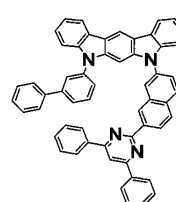
C-112



C-113

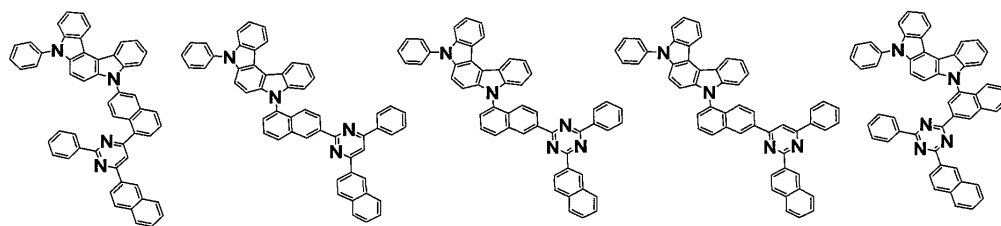


C-114



C-115

[0105]



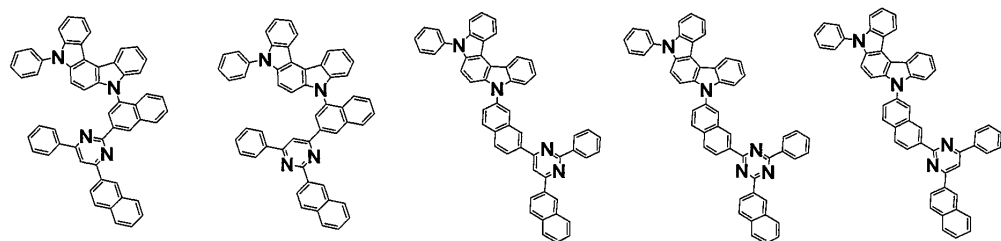
C-116

C-117

C-118

C-119

C-120



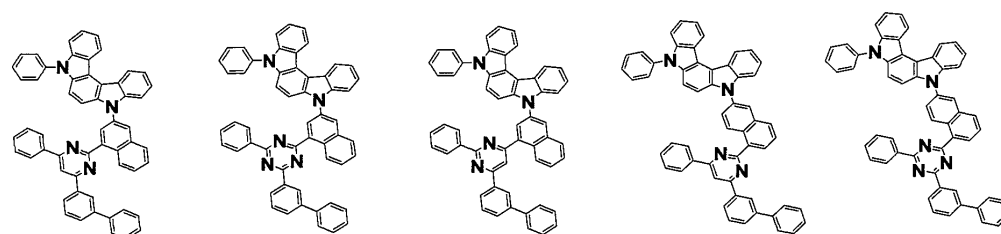
C-121

C-122

C-123

C-124

C-125



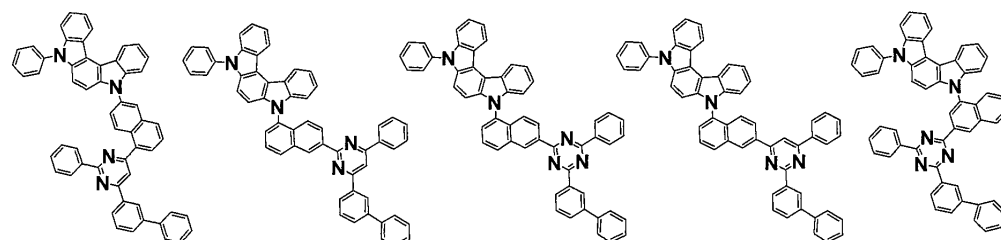
C-126

C-127

C-128

C-129

C-130



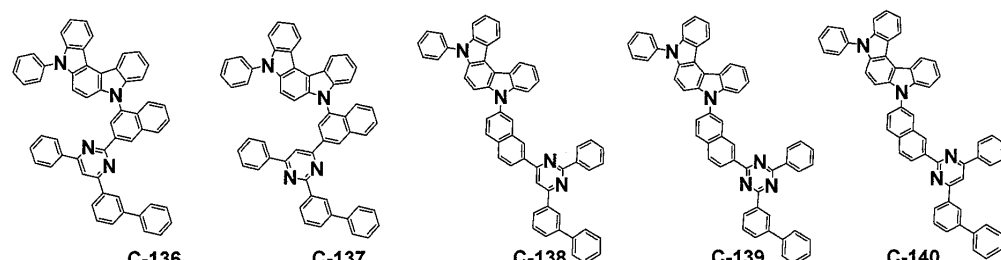
C-131

C-132

C-133

C-134

C-135



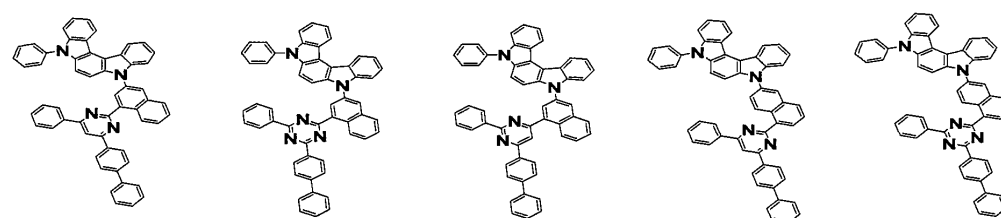
C-136

C-137

C-138

C-139

C-140



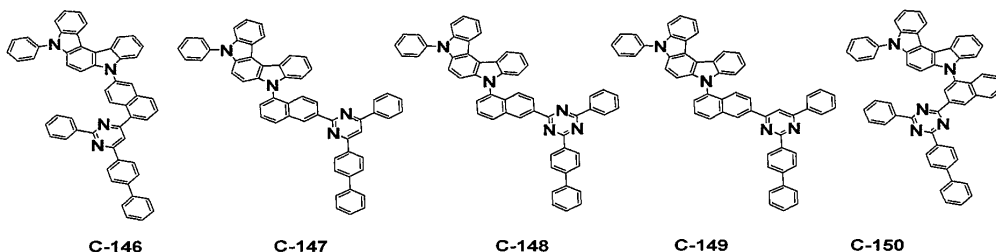
C-141

C-142

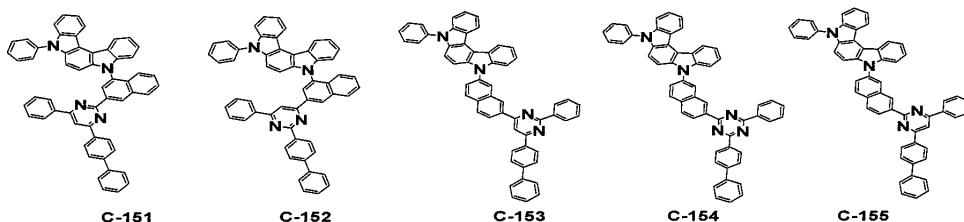
C-143

C-144

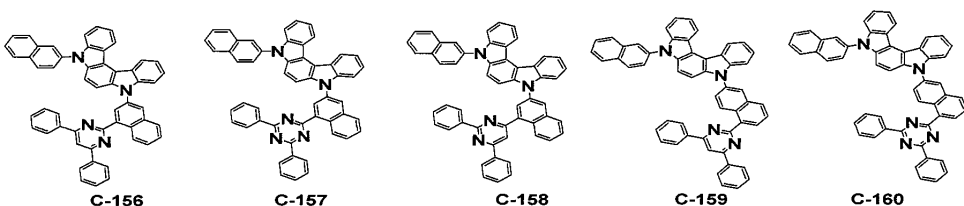
C-145



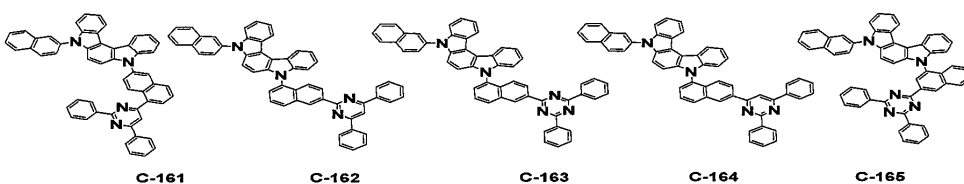
[0112]



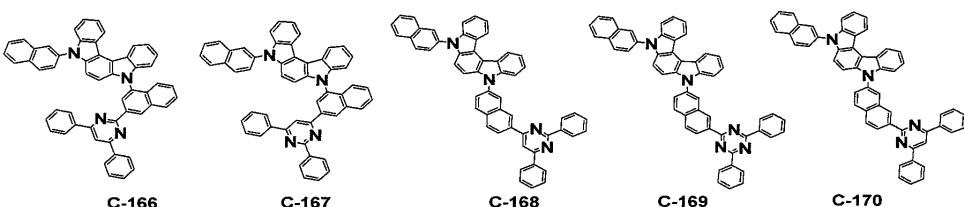
[0113]



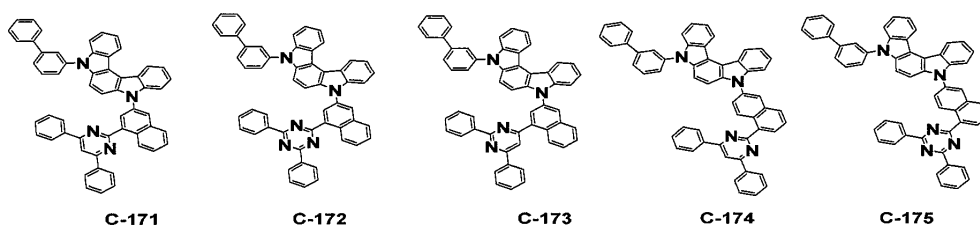
[0114]



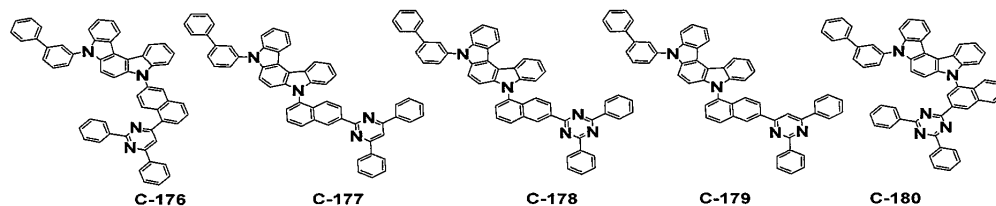
[0115]



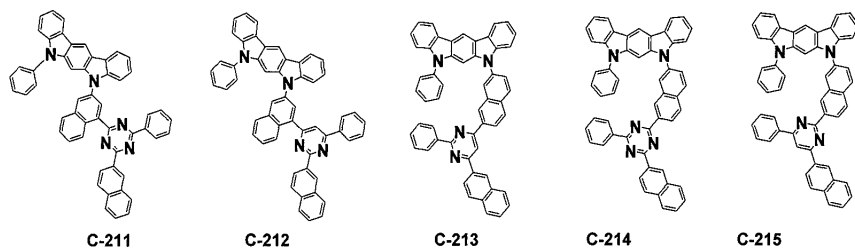
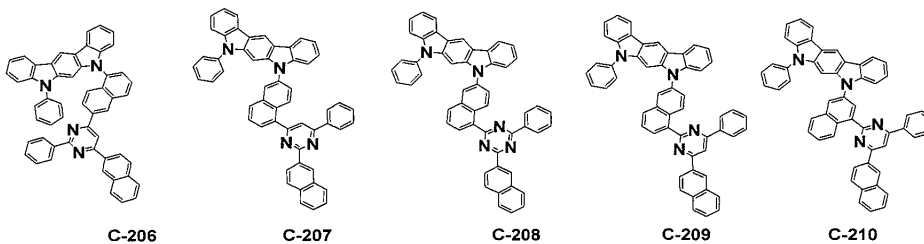
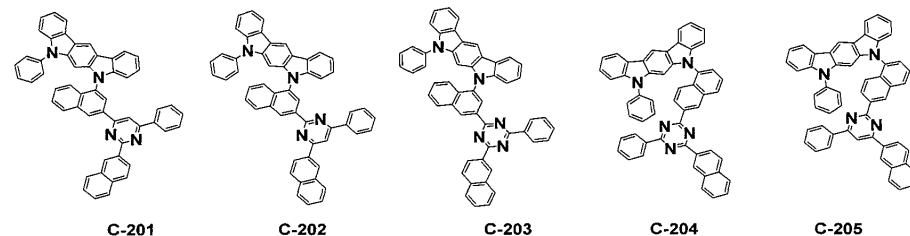
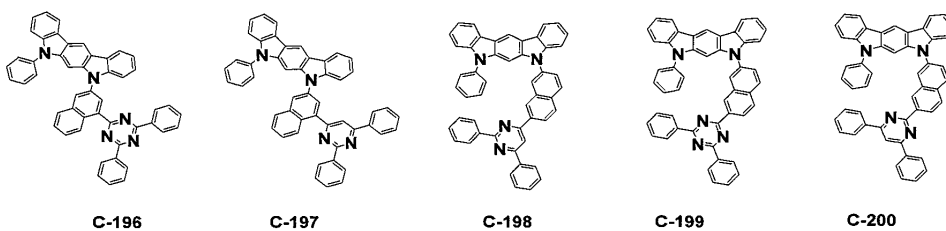
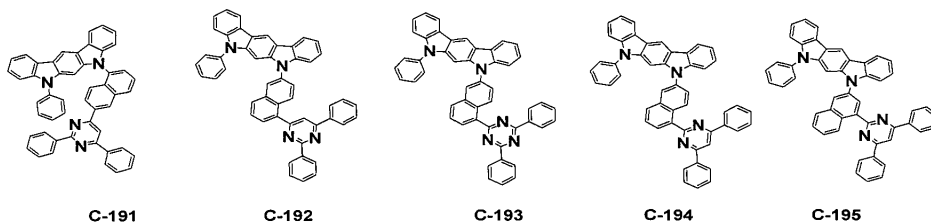
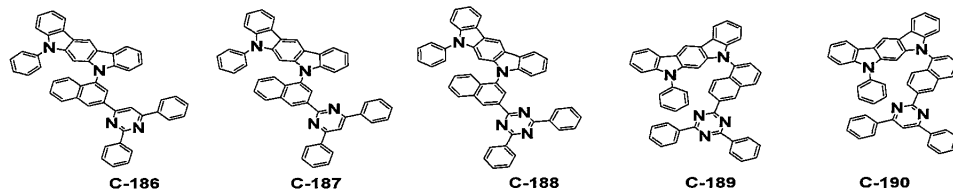
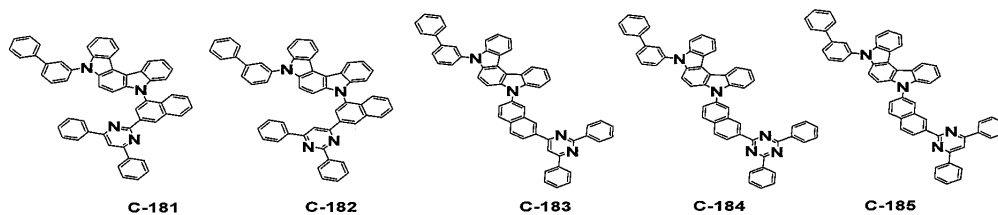
[0116]

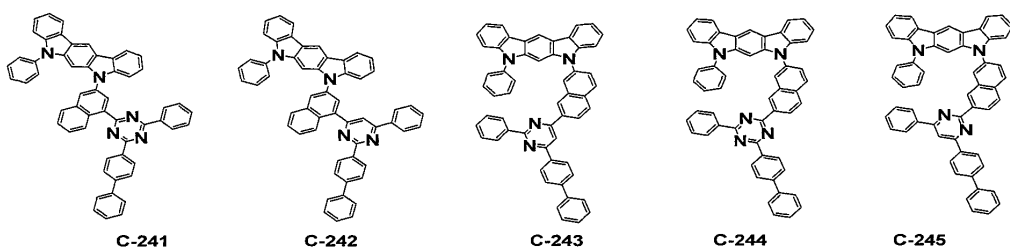
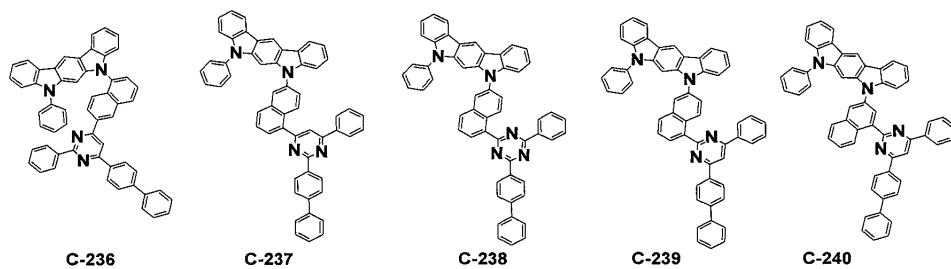
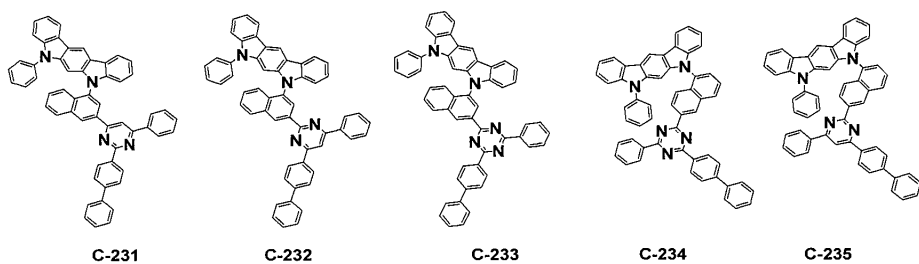
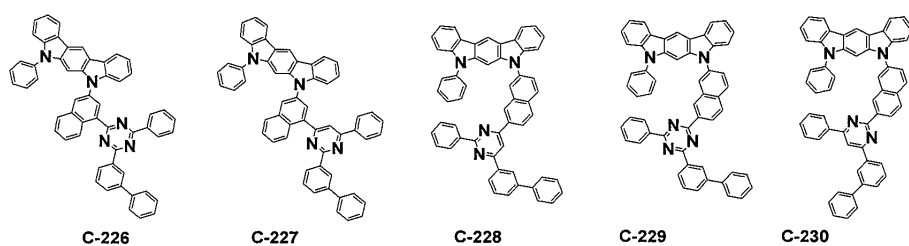
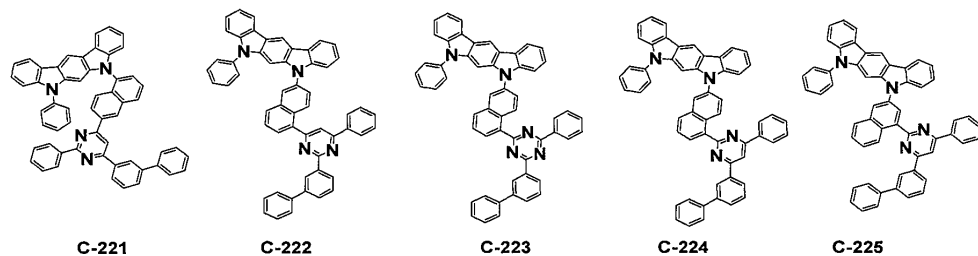
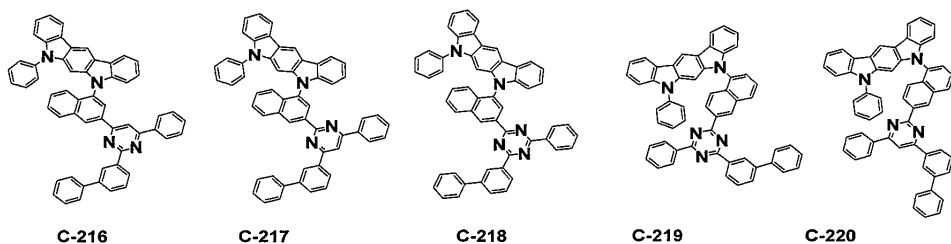


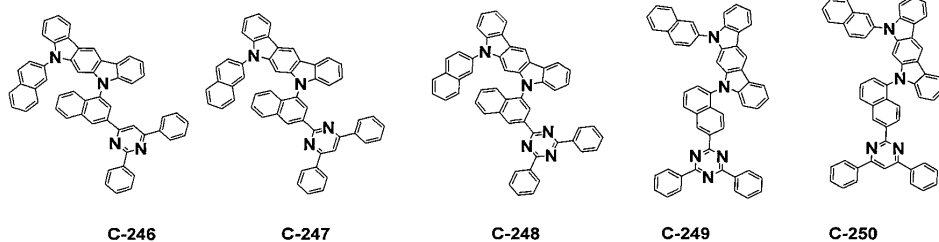
[0117]



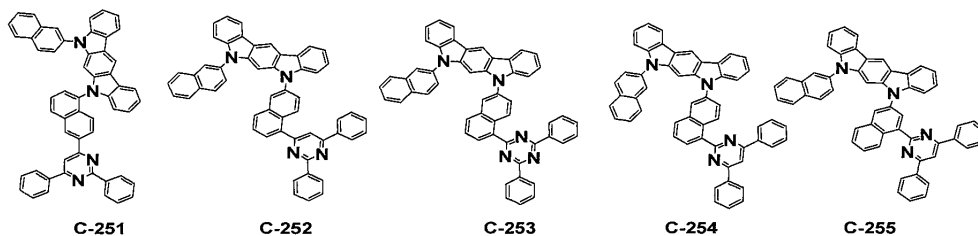
[0118]



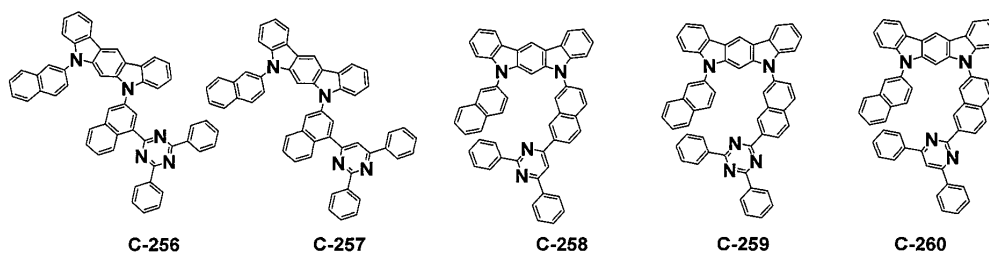




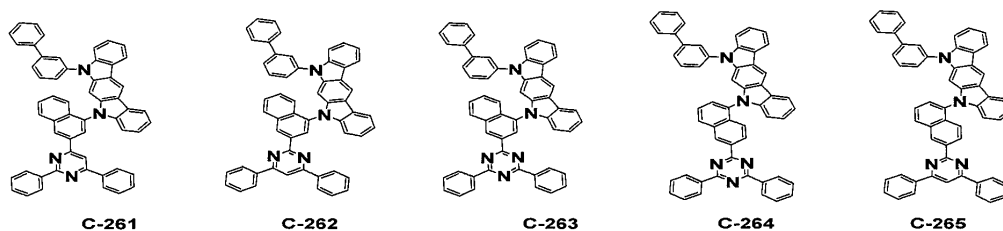
[0132]



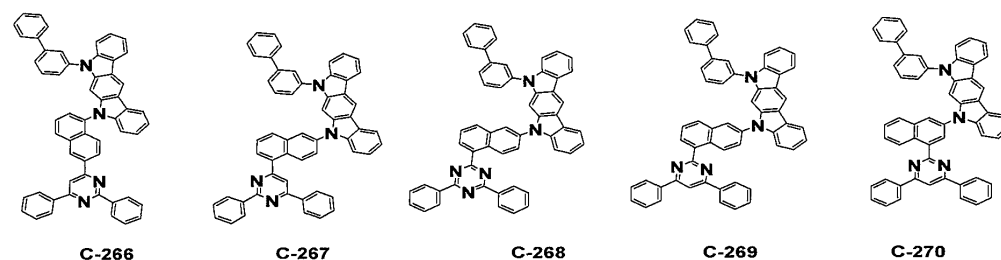
[0133]



[0134]



[0135]



[0136]

[0137] 본원은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료, 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

[0138] 일 예에 따른 유기 전계 발광 재료는 본원의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0139] 한편, 본원에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 포함한다. 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 추가로 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 1족, 2족, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란타넘계금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속, 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체화합물을 추가로 포함할 수도 있다.

[0140] 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 양극(애노드)이고, 다른 하나는 음극(캐소드)일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 주입층, 계면

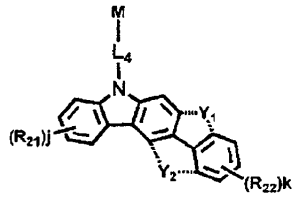
층(interlayer), 정공 차단층, 전자 차단층, 및 전자 버퍼층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

- [0141] 양극과 발광층 사이에 정공 주입층, 정공 전달층 또는 전자 차단층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 정공 주입층은 양극에서 정공 전달층 또는 전자 차단층으로의 정공 주입 장벽(또는 정공 주입 전압)을 낮출 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 전자 차단층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 발광층으로부터의 전자의 오버플로우를 차단하여 엑시톤을 발광층 내에 가두어 발광 누수를 방지할 수 있다. 정공 전달층 또는 전자 차단층은 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다.
- [0142] 발광층과 음극 사이에 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층, 전자 주입층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 전자 버퍼층은 전자주입을 조절하고 발광층과 전자 주입층 사이의 계면 특성을 향상시킬 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공 차단층 또는 전자 전달층도 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다.
- [0143] 상기 발광 보조층은 양극과 발광층 사이에 위치하거나, 음극과 발광층 사이에 위치하는 층으로서, 발광 보조층이 상기 양극과 발광층 사이에 위치할 경우, 정공의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 전자의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있고, 발광 보조층이 음극과 발광층 사이에 위치할 경우, 전자의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 정공의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있다. 또한, 상기 정공 보조층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도(또는 주입 속도)를 원활하게 하거나 블록킹하는 효과를 나타낼 수 있으며, 이에 따라 전하 밸런스(charge balance)를 조절할 수 있다. 유기 전계 발광 소자가 정공 전달층을 2 층 이상 포함할 경우, 추가로 포함되는 정공 전달층은 정공 보조층 또는 전자 차단층의 용도로 사용될 수 있다. 상기 발광 보조층, 상기 정공 보조층, 또는 상기 전자 차단층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및/또는 수명의 개선 효과를 가질 수 있다.
- [0144] 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 하나 이상의 층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 음극 표면에 할로젠화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 유기 전계 발광 소자의 구동 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는  $\text{SiO}_x$  ( $1 \leq x \leq 2$ ),  $\text{AlO}_x$  ( $1 \leq x \leq 1.5$ ),  $\text{SiON}$ ,  $\text{SiAlON}$  등이 있고, 할로젠화 금속의 바람직한 예로는  $\text{LiF}$ ,  $\text{MgF}_2$ ,  $\text{CaF}_2$ , 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는  $\text{Cs}_2\text{O}$ ,  $\text{Li}_2\text{O}$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{SrO}$ ,  $\text{BaO}$ ,  $\text{CaO}$  등이 있다.
- [0145] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역, 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도판트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하생성층으로 사용하여 2개 이상의 발광층을 가진, 백색 발광을 하는 유기 전계 발광소자를 제조할 수 있다.
- [0146] 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다. 발광층에 사용될 경우, 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는, 상기 발광층은 하나 이상의 도판트를 추가로 더 포함할 수 있으며, 필요한 경우, 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외의 다른 화합물을, 제2 호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다. 이 때, 제1 호스트 재료와 제 2 호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위일 수 있다.
- [0147] 상기 제2 호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하나, 하기 화학식 11 내지 화학식 16으로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 발광 효율 면에서 특히 바람직하다.
- [0148] [화학식 11]
- [0149]  $\text{H}-(\text{Cz}-\text{L}_4)_n-\text{M}$
- [0150] [화학식 12]



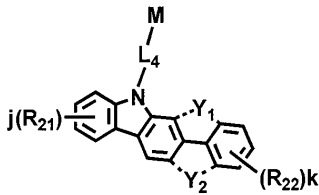
[0151]  $H-(Cz)_i-L_4-M$

[0152] [화학식13]



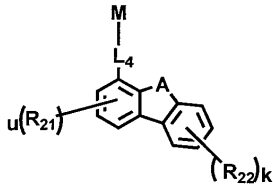
[0153]

[0154] [화학식14]



[0155]

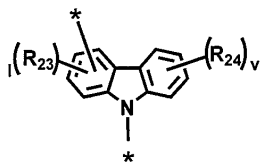
[0156] [화학식15]



[0157]

[0158] 상기 화학식 11 내지 15에서,

[0159] Cz는 하기 구조이며,



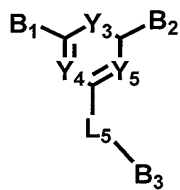
[0160]

[0161] A는 -O- 또는 -S-이고;

[0162]  $R_{21}$  내지  $R_{24}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴 또는  $-SiR_{25}R_{26}R_{27}$ 이며,  $R_{25}$  내지  $R_{27}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;  $L_4$ 는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고; M은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며;  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 각각 독립적으로 -O-, -S-,  $-N(R_{31})-$ ,  $-C(R_{32})(R_{33})-$ 이고,  $Y_1$ 과  $Y_2$ 가 동시에 존재하지는 않으며;  $R_{31}$  내지  $R_{33}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고,  $R_{32}$  및  $R_{33}$ 은 동일하거나 상이할 수 있으며; h 및 i는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, j, k, l 및 v는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, u는 0 내지 3의 정수이고, h, i, j, k, l, u 또는 v가 2 이상의 정수인 경우 각각의  $(Cz-L_4)$ , 각각의 (Cz), 각각의  $R_{21}$ , 각각의  $R_{22}$ , 각각의  $R_{23}$  또는 각각의  $R_{24}$ 는 동일하거나 상이할 수 있다.



[0163] [화학식 16]



[0164]

[0165] 상기 화학식 16에서,

[0166]  $Y_3$  내지  $Y_5$ 는 각각 독립적으로  $CR_{34}$  또는 N이고;

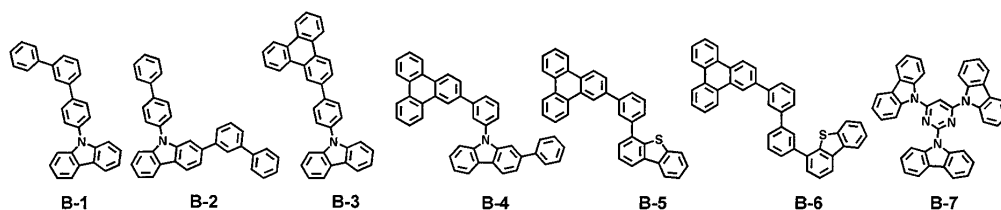
[0167]  $R_{34}$ 는 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

[0168]  $B_1$  및  $B_2$ 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

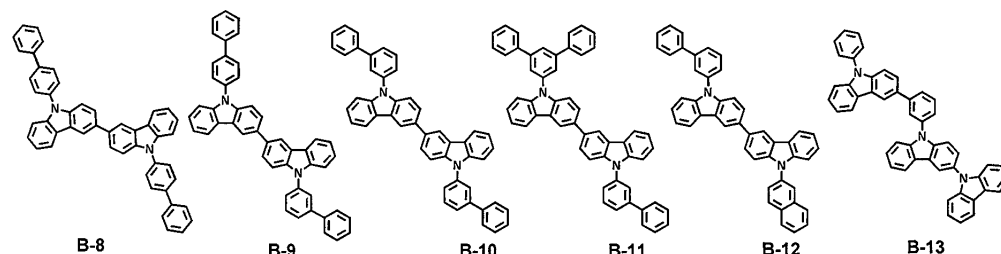
[0169]  $B_3$ 은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

[0170]  $L_5$ 는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이다.

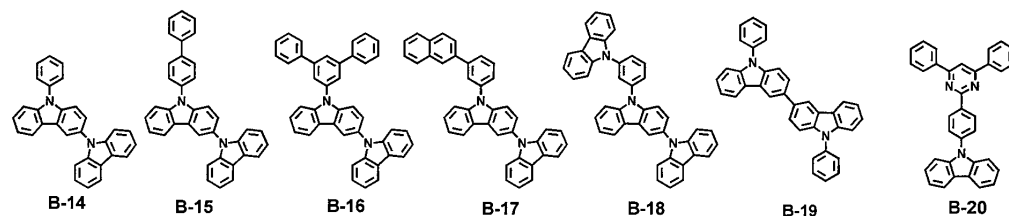
[0171] 구체적으로 상기 제2 호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같다.



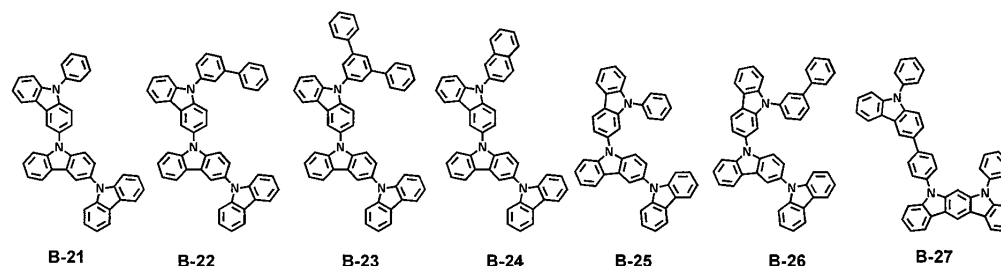
[0172]



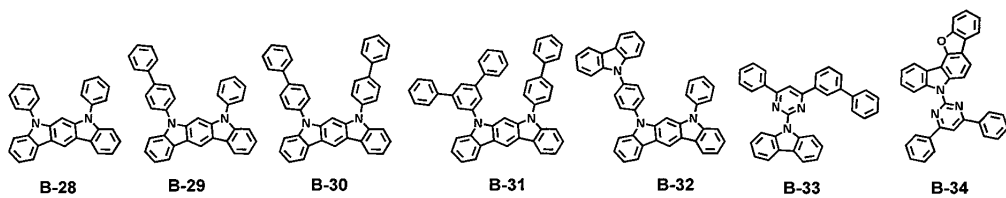
[0173]



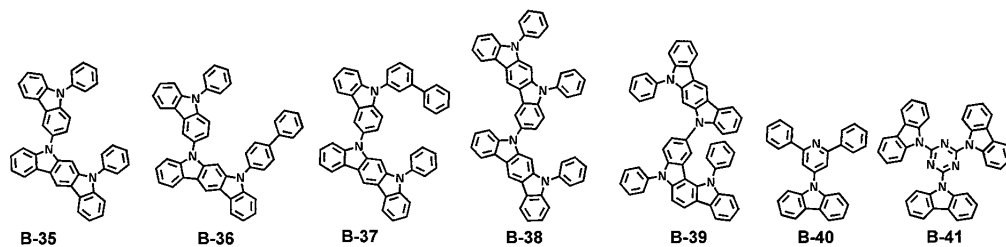
[0174]



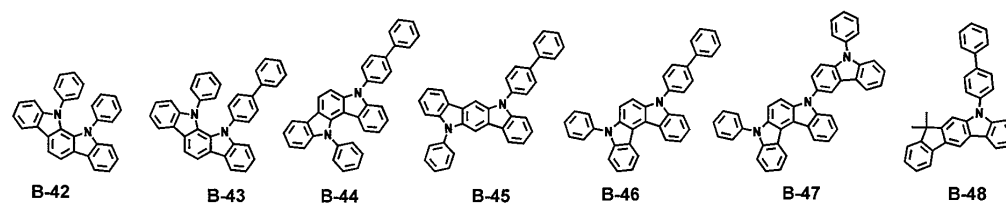
[0175]



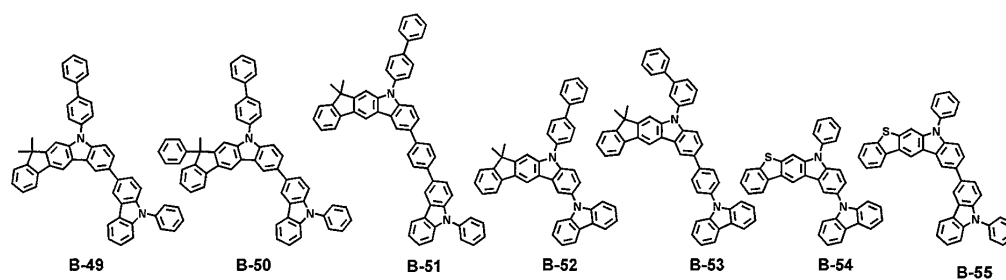
[0176]



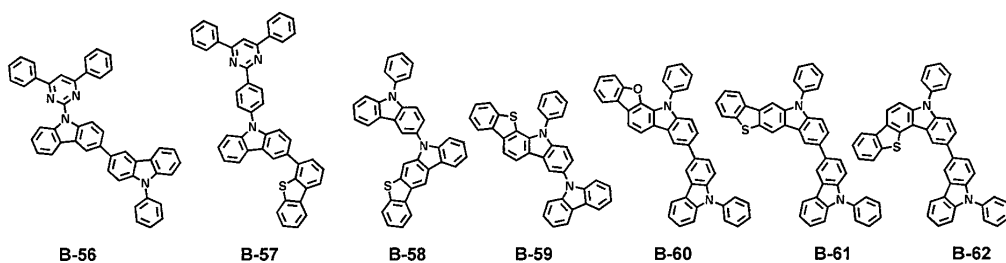
[0177]



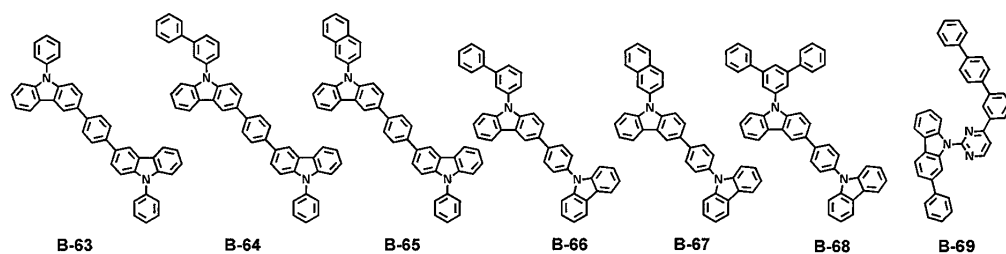
[0178]



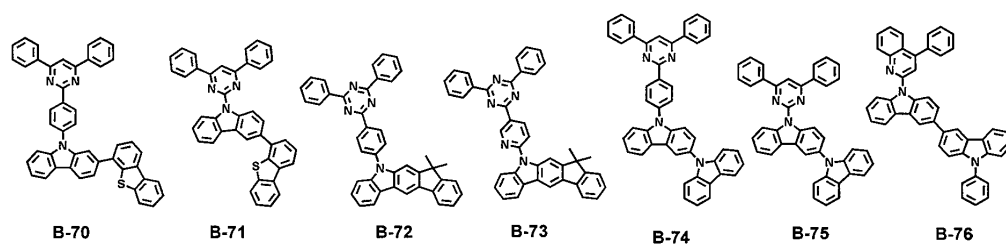
[0179]



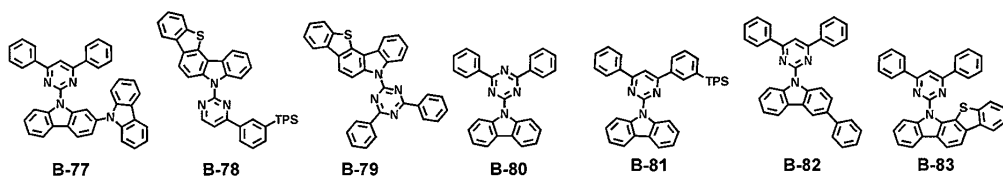
[0180]



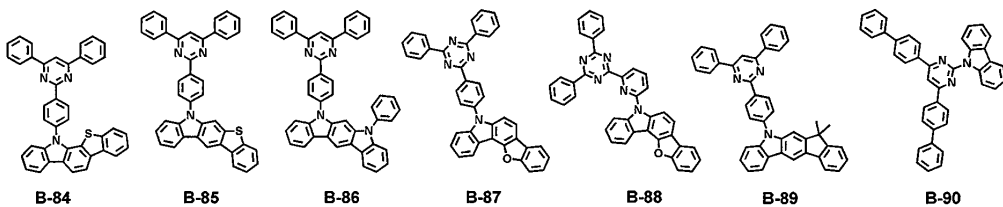
[0181]



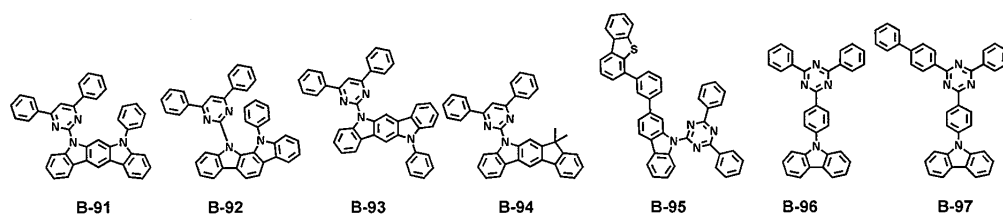
[0182]



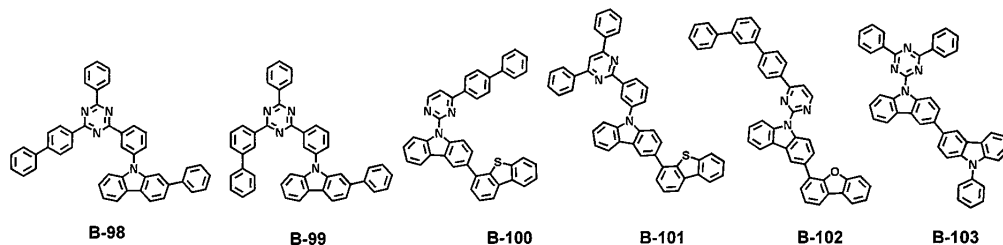
[0183]



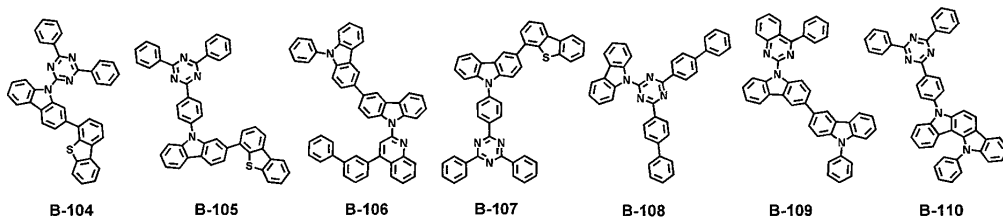
[0184]



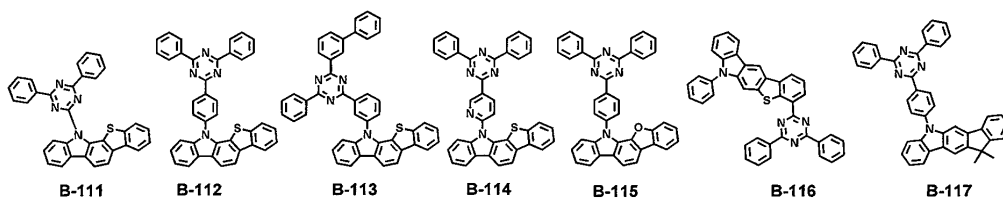
[0185]



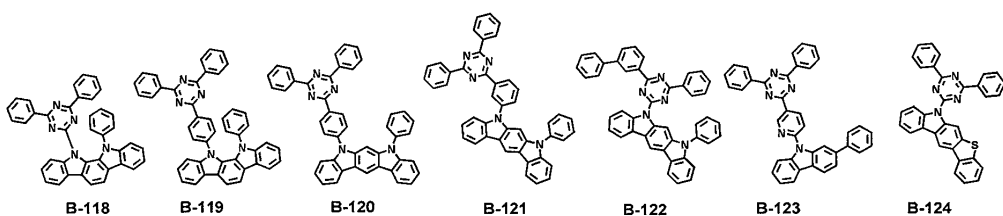
[0186]



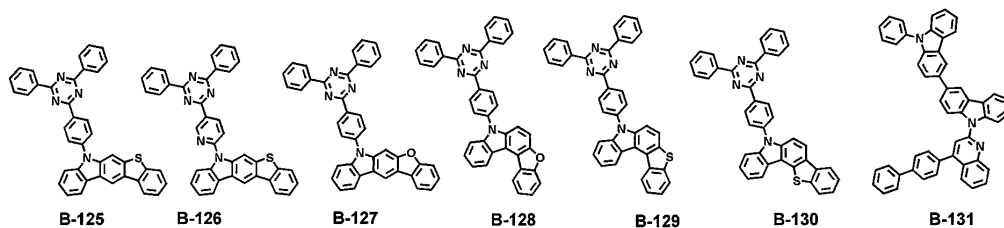
[0187]



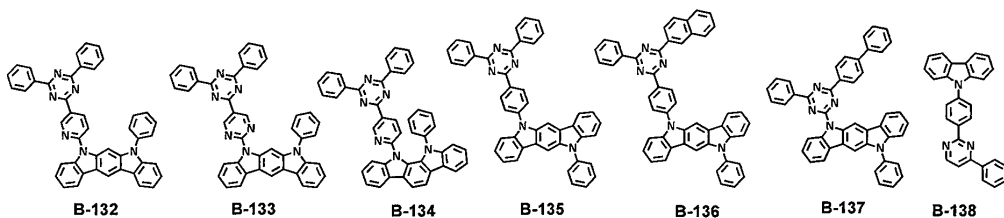
[0188]



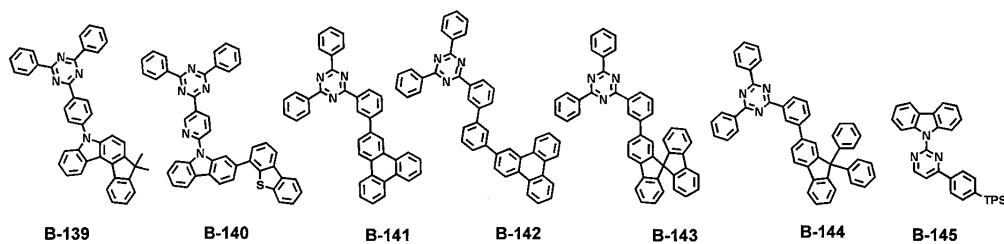
[0189]



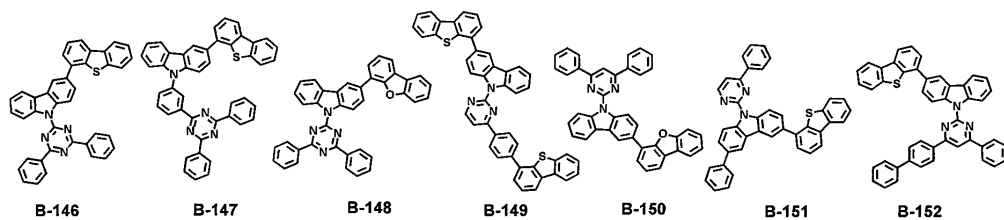
[0190]



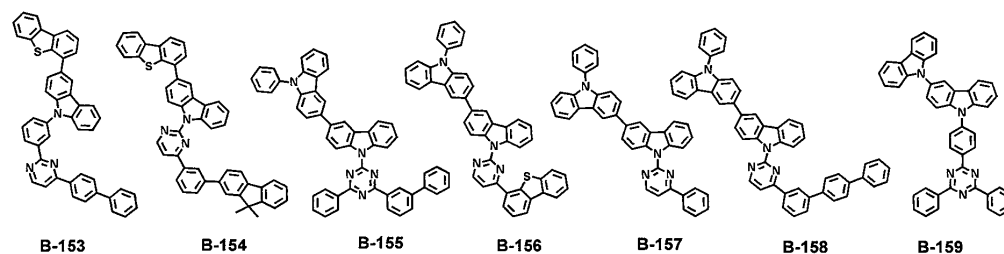
[0191]



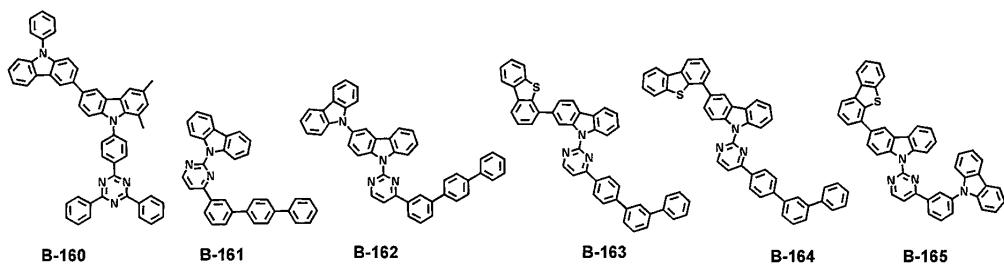
[0192]



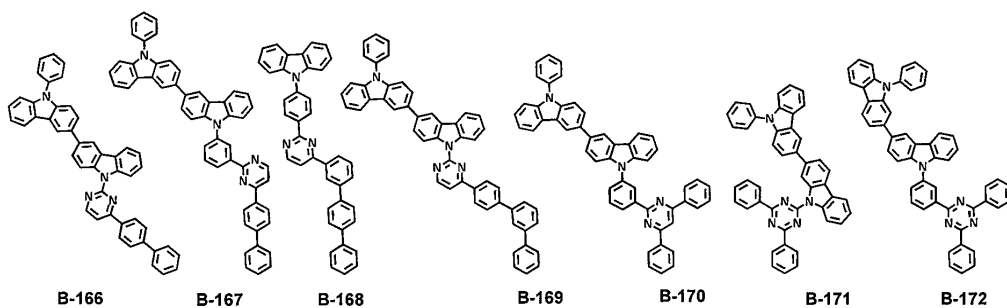
[0193]



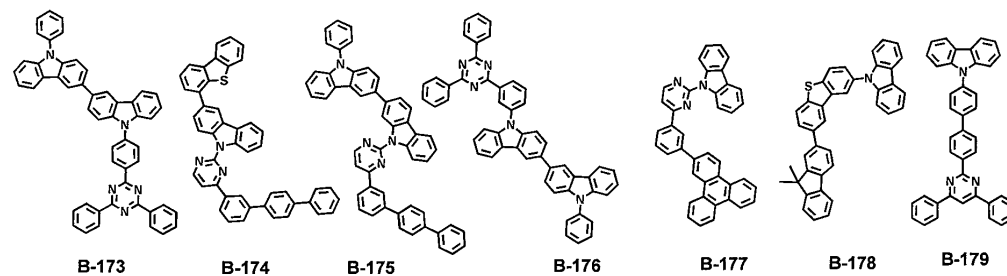
[0194]



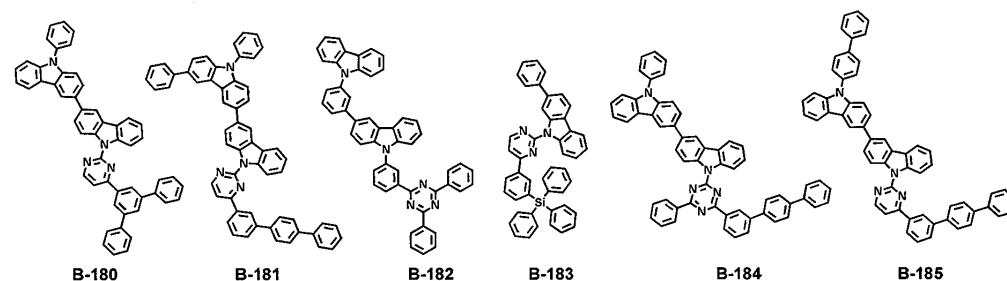
[0195]



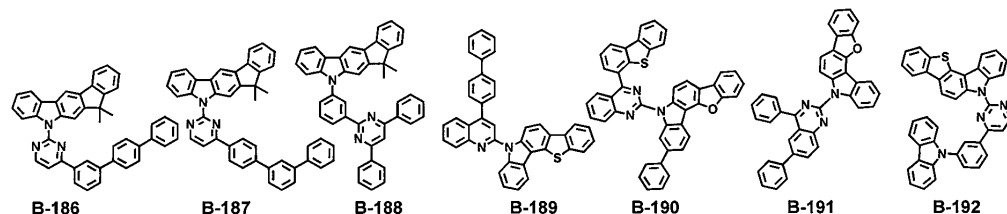
[0196]



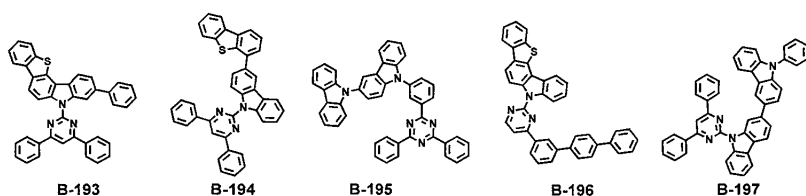
[0197]



[0198]



[0199]



[0200]

[0201]

[여기서, TPS는 트리페닐실릴(triphenylsilyl)기이다]

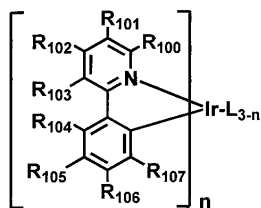
[0202]

본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로는 하나 이상의 인광 도판트가 바람직하다. 본원의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물이 바람직하고, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물이 더욱 바람직하며, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물이 더더욱 바람직하다.

[0203]

본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 101 로 표시되는 화합물을 사용할 수 있다.

[0204] [화학식 101]

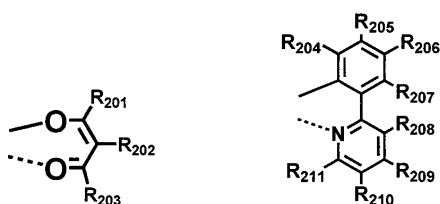


[0205]

[0206] 상기 화학식 101에서,

[0207] L은 하기 구조 1 및 2에서 선택되고;

[0208] [구조 1] [구조 2]



[0209]

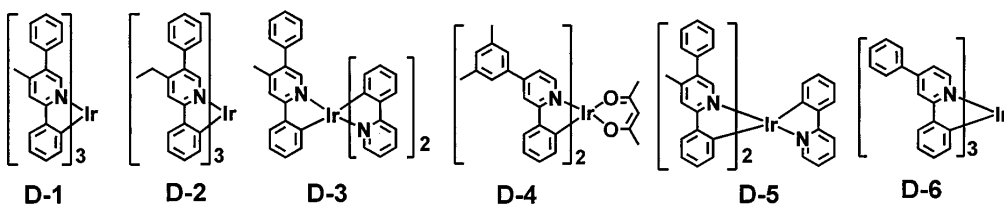
[0210] R<sub>100</sub> 내지 R<sub>103</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된 (3-30원) 헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이거나; R<sub>100</sub> 내지 R<sub>103</sub>은 인접 치환기가 서로 연결되어 피리딘과 함께 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 퀴놀린, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조프로피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조프로퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조티에노퀴놀린, 또는 치환 또는 비치환된 인데노퀴놀린 형성이 가능하며;

[0211] R<sub>104</sub> 내지 R<sub>107</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이거나; R<sub>104</sub> 내지 R<sub>107</sub>은 인접 치환기가 서로 연결되어 벤젠과 함께 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조프로피리딘, 또는 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘 형성이 가능하며;

[0212] R<sub>201</sub> 내지 R<sub>211</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이거나; R<sub>201</sub> 내지 R<sub>211</sub>은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있으며;

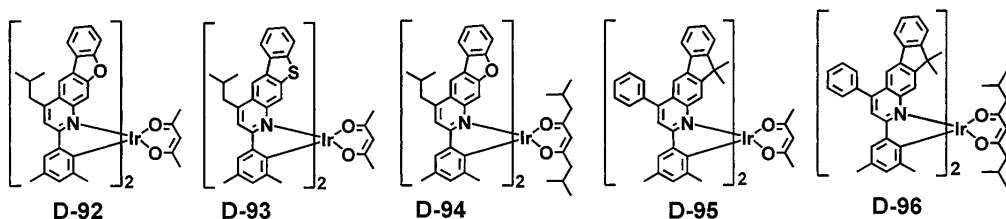
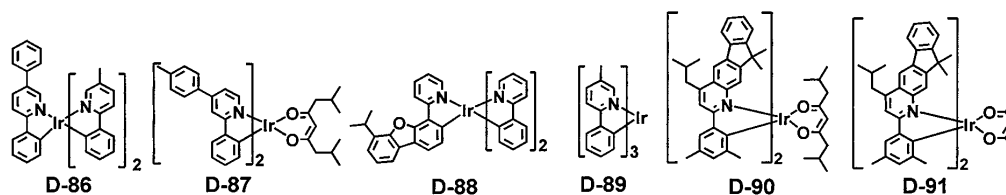
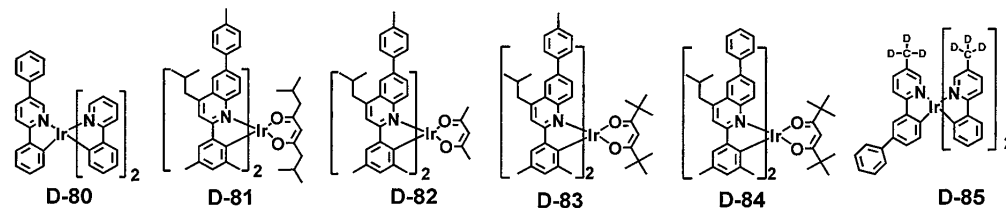
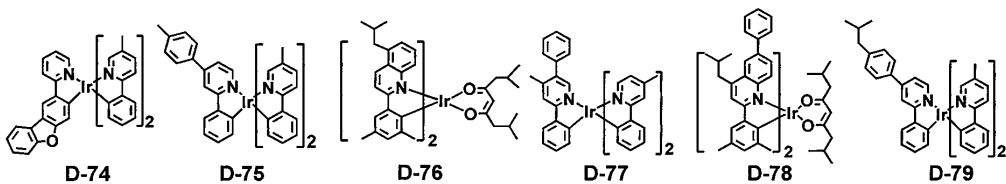
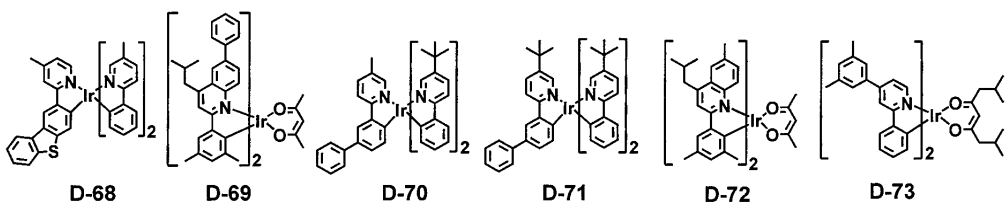
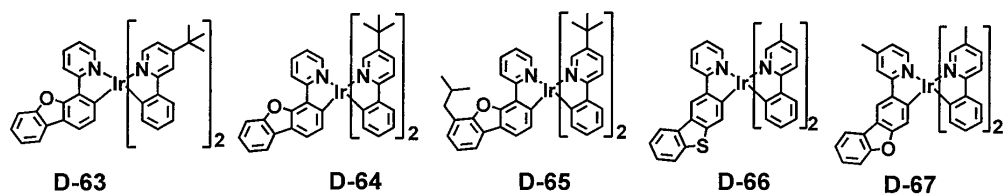
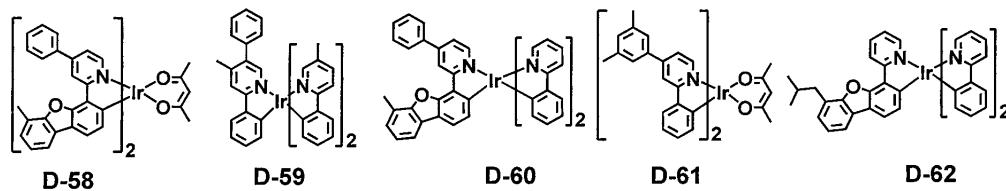
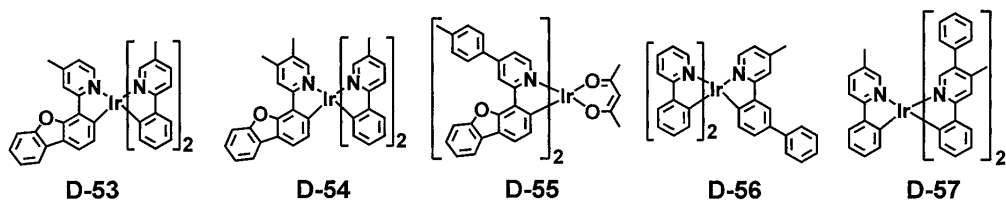
[0213] n은 1 내지 3의 정수이다.

[0214] 구체적으로, 상기 도판트 화합물의 구체적인 예는 다음과 같으나, 이에 한정되지는 않는다.

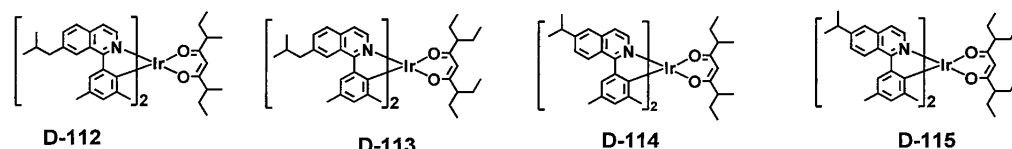
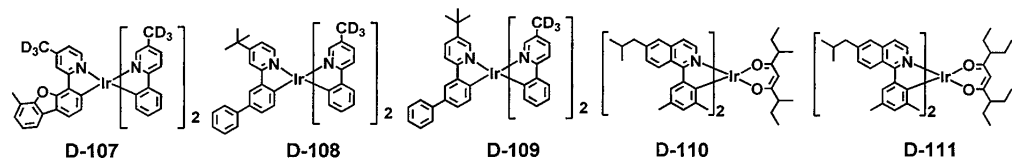
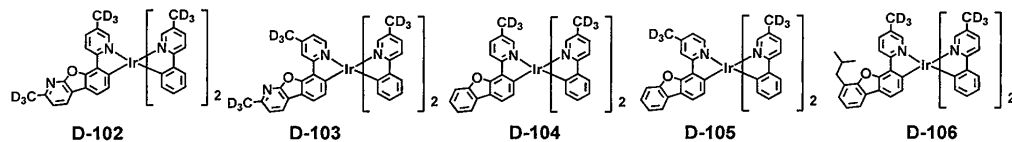
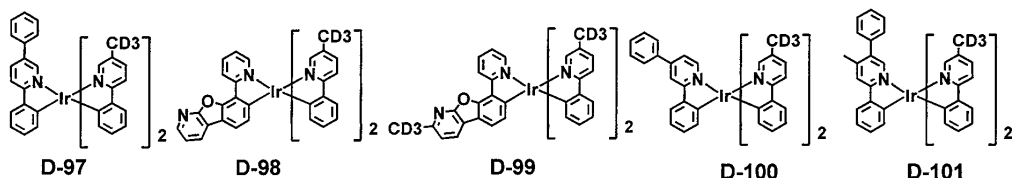


[0215]









본원의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공 증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온 플레이팅 등의 건식 성막법이나, 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다. 본원의 호스트 화합물과 도판트 화합물을 성막할 때, 공증착 또는 혼합증착으로 공정할 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

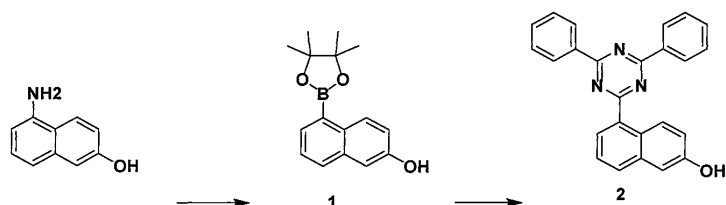
습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로푸란, 디옥산 등의 적절한 용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 각 층을 형성하는 재료가 용해 또는 분산될 수 있고, 성막성에 문제가 없는 것이라면 어느 것이어도 된다.

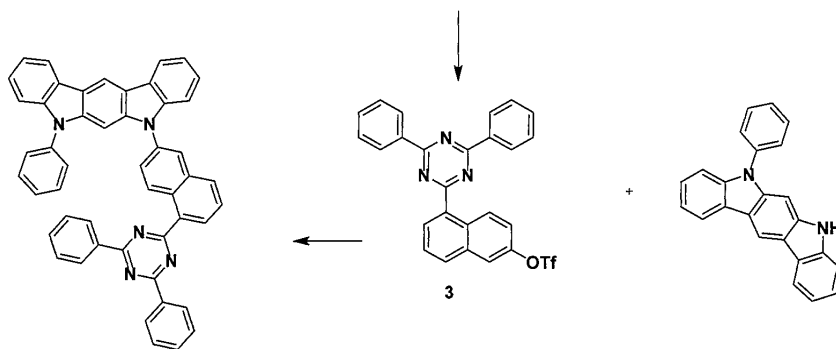
상기 공증착이란 두 가지 이상의 이성질체 재료를 각각의 개별 도가니 소스에 넣고, 두 셀을 동시에 전류를 인가하여 재료를 증발시켜 혼합 증착하는 방식이고, 상기 혼합 증착이란 증착 전 두 가지 이상의 이성질체 재료를 하나의 도가니 소스에 혼합한 후, 하나의 셀에 전류를 인가하여 재료를 증발시켜 혼합 증착하는 방식이다.

또한, 본원의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 디스플레이 장치, 예를 들면, 스마트폰, 태블릿, 노트북, PC, TV 또는 차량용의 디스플레이 장치, 또는 조명 장치, 예를 들면, 옥외 또는 옥내용 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 대표 화합물을 들어 본원에 따른 호스트 화합물의 제조방법 및 이를 포함하는 소자의 특성을 설명한다.

#### [실시예 1] 화합물 C-193의 제조





**화합물 1 의 합성**

플라스크에 5-아미노나프탈렌-2-올 (70 g, 440 mmol), 및 메탄올 1.7 L 를 넣어 녹인 후, HCl 400 mL 및 물 640 mL 을 넣은 뒤 상온에서 2분정도 교반시키고, 소듐나이트라이트 (30.34 g, 440 mmol) 을 위 플라스크에 넣은 뒤 30분 동안 교반하였다. 이 후 비스(피나콜라토)디보론 (167 g, 660 mmol) 을 넣고 24시간 동안 상온에서 교반하였다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 **화합물 1** (27 g, 수율: 22%) 을 얻었다.

**화합물 2 의 합성**

플라스크에 **화합물 1** (27 g, 100 mmol), 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (26.7 g, 100 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>) (11.5 g, 0.10 mmol), 및 탄산칼륨 (41.4 g, 300 mmol) 을 에탄올 150 mL, 물 150 mL 및 톨루엔 300 mL 를 넣어 녹인 후 120℃에서 3시간 동안 환류하여 교반시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 **화합물 2** (29.7 g, 수율: 79%) 를 얻었다.

**화합물 3 의 합성**

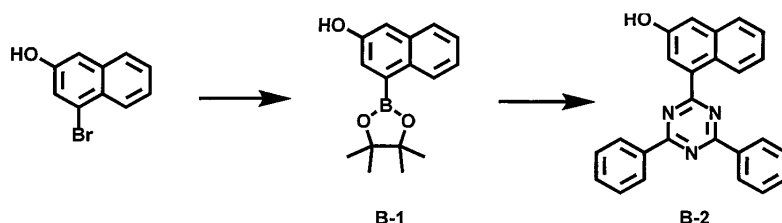
플라스크에 **화합물 2** (29.7 g, 79 mmol) 을 다이클로로메탄 400 mL 로 녹인 후 트리에틸아민 33 mL 를 넣고 0℃에서 10분 정도 교반시켰다. 이 후, 플라스크에 트리플루오로메탄설포닉 엔하이드라이드 16 mL 를 천천히 넣고 1시간 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 **화합물 3** (25 g, 수율: 62.7%) 을 얻었다.

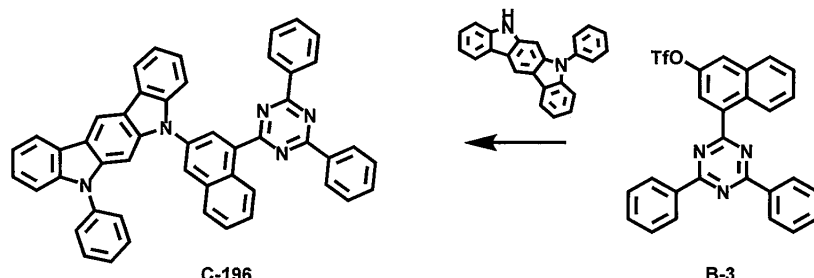
**화합물 C-193의 합성**

플라스크에 **화합물 3** (25 g, 49 mmol), 5-페닐-5,7-디하이드로인돌[2,3-b]카바졸 (14.9 g, 45 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (1.6 g, 2 mmol), 2-디시클로헥실스포노-2',6'-디메톡시비페닐 (1.4 g, 4 mmol), 소듐-tert-부톡시드 (10 g, 112 mmol), 및 o-자일렌 245 mL 을 넣어 녹인 후 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 **화합물 C-193** (10 g, 수율: 32 %) 을 얻었다.

화합물	MW	Tg	M.P
C-193	689.82	156℃	298℃

**[실시예 2] 화합물 C-196의 제조**





[0255]

[0256]

화합물 B-1 의 합성

[0257]

플라스크에 4-브로모나프탈렌-2-올 (9 g, 40 mmol), 비스(피나콜라토)디보론 (12.3 g, 48 mmol), 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II)디클로라이드 (566 mg, 0.807 mmol), 포타슘아세테이트 (7.9 g, 81 mmol) 및 1,4-다이옥산 200 mL 을 넣어 녹인 후 110℃에서 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압증류 후 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 **화합물 B-1** (9.1 g, 수율: 83%)을 얻었다.

[0258]

화합물 B-2 의 합성

[0259]

플라스크에 **화합물 B-1** (9.1 g, 34 mmol), 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (10.8 g, 40 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (1.9 g, 2mmol), 탄산칼륨 (13.9 g, 101 mmol), 에탄올 50 mL, 물 50 mL 및 톨루엔 100 mL를 넣어 녹인 후, 120℃에서 3시간 동안 환류하여 교반시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 **화합물 B-2** (8 g, 수율: 63%)을 얻었다.

[0260]

화합물 B-3 의 합성

[0261]

플라스크에 **화합물 B-2** (8.5 g, 23 mmol) 및 다이클로로메탄 113 mL을 넣어 녹인 후 트리에틸아민 9.5 mL 를 넣고 0℃에서 10분 정도 교반한 후 트리플루오로메탄설포닉 언하이드라이드 7.4 mL 를 천천히 넣고 1시간 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여수분을 제거한 뒤 건조시키고, 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 **화합물 B-3** (5.9 g, 수율: 51%)을 얻었다.

[0262]

화합물 C-196 의 합성

[0263]

플라스크에 **화합물 B-3** (5.9 g, 12 mmol), 5-페닐-5,7-디하이드로인돌[2,3-b]카바졸 (3 g, 9 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (0.329 g, 0.361 mmol), 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐 (0.297 g, 0.729 mmol), 소듐-tert-부톡시드 (1.7 g, 112 mmol), 및 o-자일렌 361 mL 을 넣어 녹인 후 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고, 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 **화합물 C-196** (1.7 g, 수율: 27 %)을 얻었다.

화합물	MW	Tg	M.P
C-196	689.82	154.6℃	262℃

[0264]

[0265]

[실시예 3] 화합물 C-9의 제조

[0266]

플라스크에 **화합물 B-3** (9.6 g, 19.5 mmol), 12-페닐-5,12-디하이드로인돌로[3,2-a]카바졸 (6.3 g, 19.5 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (0.7 g, 0.78 mmol), 2-디시클로헥실포스피노-2', 6'-디메톡시비페닐 (0.6 g, 1.5 mmol), 소듐-tert-부톡시드(4.5 g, 48.8 mmol) 및 o-자일렌 97.5 mL를 넣어 녹인 후 3시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면 감압증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고, 칼럼 크로마토그래피로 분리하여 **화합물 C-9** (1g, 수율: 7.6%)을 얻었다.

화합물	MW	Tg	M.P
C-9	689.82	159.68℃	307℃

[0267]

[0268]

**소자 제조예 1: 본원에 따른 적색 발광 유기 전계 화합물을 포함하는 OLED 소자 제조**

[0269]

본원의 유기 전계 발광 화합물을 이용하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조) 기판 상의 투명전극 ITO 박막( $10\Omega/\square$ )을 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO기판을 장착한 후, 진공 증착장비 내의 셀에 화합물 **HI-1**을 넣고 챔버 내의 진공도가  $10^{-7}$  torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 80 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HI-2**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HT-1**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10 nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HT-2**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 60 nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착 하였다. 정공 주입층, 및 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀에 호스트로서 화합물 **C-193**를 넣고, 또 다른 셀에 도판트로서 화합물 **D-39**를 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 상기 발광층 위에 전자 전달 재료로서 화합물 **ETL-1:EIL-1**을 50:50 중량비로 35 nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서 전자 주입층으로 화합물 **EIL-1**을 상기 전자 전달층 위에 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다. 재료 별로 각 화합물은  $10^{-6}$  torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0270]

**소자 제조예 2: 본원에 따른 적색 발광 유기 전계 화합물을 포함하는 OLED 소자 제조**

[0271]

발광층 호스트 재료로서 화합물 **C-196**을 사용한 것을 제외하고는, 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0272]

**소자 제조예 3: 본원에 따른 적색 발광 유기 전계 화합물을 포함하는 OLED 소자 제조**

[0273]

발광층 호스트 재료로서 화합물 **C-9**을 사용한 것을 제외하고는, 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0274]

**소자 비교예 1: 본원의 적색 발광 유기 전계 화합물을 포함하지 않는 OLED 소자 제조**

[0275]

발광층 호스트 재료로서 화합물 **H-1**을 사용한 것을 제외하고는, 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0276]

**소자 비교예 2: 본원의 적색 발광 유기 전계 화합물을 포함하지 않는 OLED 소자 제조**

[0277]

발광층 호스트 재료로서 화합물 **H-2**를 사용한 것을 제외하고는, 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0278]

**소자 비교예 3: 본원의 적색 발광 유기 전계 적색 발광 화합물을 포함하지 않는 OLED 소자 제조**

[0279]

발광층 호스트 재료로서 화합물 **H-3**을 사용한 것을 제외하고는, 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0280]

**소자 비교예 4: 본원의 적색 발광 유기 전계 적색 발광 화합물을 포함하지 않는 OLED 소자 제조**

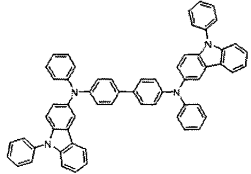
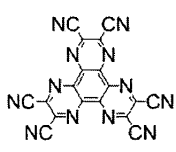
[0281]

발광층 호스트 재료로서 화합물 **H-4**를 사용한 것을 제외하고는, 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

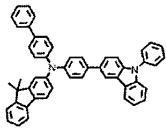
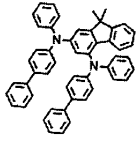
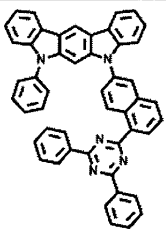
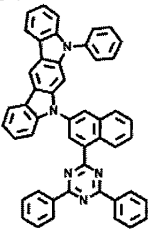
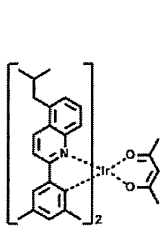
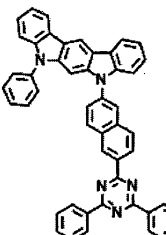
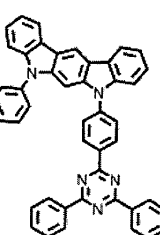
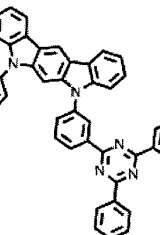
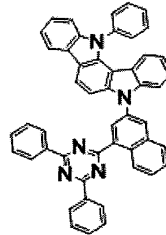
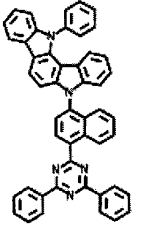
[0282]

소자 제조예 1 내지 3과 소자 비교예 1 내지 4에서 사용한 화합물을 하기 표 1에 구체적으로 나타내었다.

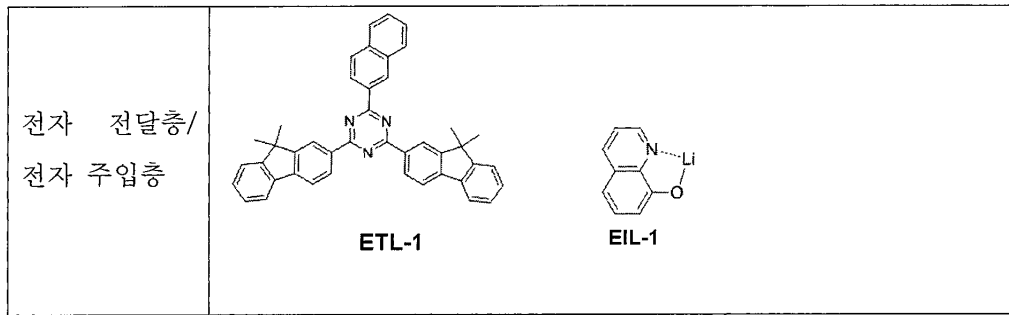
표 1

정공 주입층/ 정공 전달층	 <p>HI-1</p>	 <p>HI-2</p>
-------------------	---	---

[0283]

	 <p>HT-1</p>  <p>HT-2</p>
발광층	<div data-bbox="400 898 566 1198">  <p>C-193</p> </div> <div data-bbox="598 898 758 1198">  <p>C-196</p> </div> <div data-bbox="805 898 965 1198">  <p>D-39</p> </div> <div data-bbox="400 1234 566 1556">  <p>H-1</p> </div> <div data-bbox="598 1234 758 1556">  <p>H-2</p> </div> <div data-bbox="805 1234 965 1556">  <p>H-3</p> </div> <div data-bbox="400 1592 566 1892">  <p>C-9</p> </div> <div data-bbox="646 1592 805 1892">  <p>H-4</p> </div>

[0284]



**평가: 유기 전계 발광 소자의 수명특성 평가**

소자 제조예 1 내지 3과 소자 비교예 1 내지 4에서 제조된 유기 전계 발광 소자에 대해 1,000 nits 휘도 기준의 구동 전압, 발광색, 및 5,000 nits 휘도 기준의 빛의 세기가 100%에서 95%로 떨어지는 데까지의 시간(수명: T95)을 측정하여 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

**표 2**

	구동전압 (V)	발광색	수명 (T95, hr)
소자 제조예 1	2.9	적색	222.2
소자 제조예 2	2.9	적색	531.7
소자 제조예 3	3.1	적색	319.9
소자 비교예 1	2.8	적색	124.1
소자 비교예 2	2.8	적색	83.7
소자 비교예 3	2.9	적색	100.9
소자 비교예 4	2.9	적색	91.8

상기 표 2를 참조하면, 소자 제조예 1 내지 3에 따른 유기 전계 발광 소자가 소자 비교예 1 내지 4에 따른 유기 전계 발광 소자와 비교하여 수명특성이 현저하게 개선된 것을 확인할 수 있다. 이는 전술한 바와 같이, 인돌로 카바졸과 질소를 함유하는 방향족 육각고리기가 나프탈렌을 연결기로 하여 비대칭적으로 연결됨으로써, 전자 공액이 끊기면서 여기 상태에서의 화합물의 도너-억셉터(donor-acceptor) 전자 결합이 약화됨에 따라 높은 HOMO 에너지 준위를 갖게 되고, 결과적으로 상기 소자 비교예 대비 상대적으로 정공 전류특성이 향상됨에 따른 결과이다.

또한, 상기 비교예에 포함된 호스트 화합물들은 전자 전류특성이 빠른 반면 정공 전류특성이 상당히 느려 전하

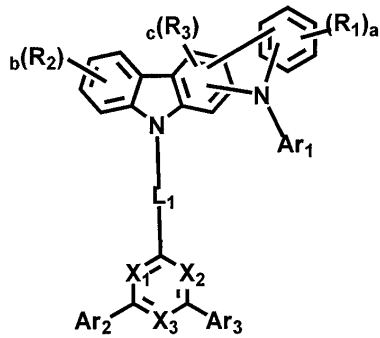
불균형(charge imbalance)로 인하여 수명이 저하되나, 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 화합물은 그 구조에 비대칭 연결을 포함함에 따라 정공 전도특성 향상으로 인하여 전하 균형(charge balance)이 개선되어 소자 특성 향상에 기여할 수 있다.

[0291]

다시 말해, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 발광용 호스트 재료로 사용한 소자는 개선된 수명 특성을 나타내어, 장수명이 요구되는 플렉시블 디스플레이, 백색유기발광소자(White Organic Light Emitting Device), 조명 및 자동차용 디스플레이 기기에 있어 이점을 가질 수 있다.

## 도면

### 도면1



专利名称(译)	有机电致发光化合物，含有它们的有机电致发光材料和有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020190053792A</a>	公开(公告)日	2019-05-20
申请号	KR1020180135786	申请日	2018-11-07
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	이효정 라프웰도미니아 조상희 강현주		
发明人	이효정 라프웰 도미니아 조상희 강현주		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/0067 H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/50 C09K2211/1044 C09K2211/1059		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020170149498 2017-11-10 KR		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

#### 摘要(译)

本发明涉及有机电致发光化合物，包括该有机电致发光化合物的有机电致发光材料以及有机电致发光器件。与包括常规有机电致发光化合物的有机电致发光器件相比，根据本发明的有机电致发光化合物可以制造具有改善的寿命特性的有机电致发光器件。

