



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2017-0059408  
 (43) 공개일자 2017년05월30일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C09K 11/06* (2006.01) *C07D 209/82* (2006.01)  
*C07D 307/91* (2006.01) *C07D 333/76* (2006.01)  
*C07D 487/04* (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)  
*H01L 51/50* (2006.01)  
 (52) CPC특허분류  
*C09K 11/06* (2013.01)  
*C07D 209/82* (2013.01)  
 (21) 출원번호 10-2016-0153209  
 (22) 출원일자 2016년11월17일  
 심사청구일자 없음  
 (30) 우선권주장  
 1020150162980 2015년11월20일 대한민국(KR)

(71) 출원인  
**룸엔드하스전자재료코리아유한회사**  
 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)  
 (72) 발명자  
**문두현**  
 경기도 화성시 병점3로 117 906동 1304호  
**양정은**  
 경기도 수원시 팔달구 덕영대로 697번길 48, 403  
 동 1203호(화서동, 화서주공아파트)  
 (74) 대리인  
**장훈**

전체 청구항 수 : 총 10 항

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

**(57) 요약**

본 발명은 유기 전계 발광 화합물, 유기 전계 발광 재료, 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 구동 전압이 낮고/낮거나, 전류 효율 및/또는 전력 효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

(52) CPC특허분류

*C07D 307/91* (2013.01)

*C07D 333/76* (2013.01)

*C07D 487/04* (2013.01)

*H01L 51/0071* (2013.01)

*H01L 51/0072* (2013.01)

*H01L 51/50* (2013.01)

*C09K 2211/1011* (2013.01)

*C09K 2211/1029* (2013.01)

*C09K 2211/1044* (2013.01)

---

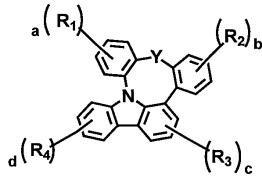
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Y는 S, O, 또는 NR<sub>5</sub>이고;

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며;

상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;

a, b 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, c는 0 내지 3의 정수이며, a 내지 d가 각각 독립적으로 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 동일하거나 상이할 수 있고;

단, Y가 NR<sub>5</sub>이고, a가 2인 경우, 두 개의 R<sub>1</sub>이, 이들이 부착된 아릴환과 융합되어 카바졸 고리를 형성하는 것은 제외한다.

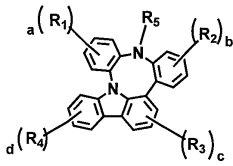
청구항 2

제1항에 있어서, 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C6-C30)아릴, 치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환된 (C1-C30)알콕시, 치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, 및 치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 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 이상인, 유기 전계 발광 화합물.

**청구항 3**

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2로 표시되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>25</sub>)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C<sub>6</sub>-C<sub>25</sub>)아릴아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 (C<sub>5</sub>-C<sub>25</sub>)의 치환 또는 비치환된 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며,

R<sub>5</sub>는 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴이고,

상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며,

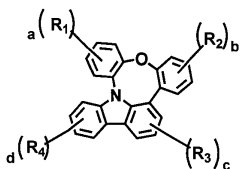
a 내지 d는 제1항에서 정의된 바와 같고,

단, a가 2인 경우, 두 개의 R<sub>1</sub>이, 이들이 부착된 아릴환과 융합되어 카바졸 고리를 형성하는 것은 제외한다.

**청구항 4**

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C<sub>6</sub>-C<sub>25</sub>)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C<sub>6</sub>-C<sub>25</sub>)아릴아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 (C<sub>5</sub>-C<sub>25</sub>)의 치환 또는 비치환된 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며,

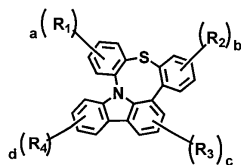
상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고,

a 내지 d는 제1항에서 정의된 바와 같다.

**청구항 5**

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 4로 표시되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 4]



상기 화학식 4 에서,

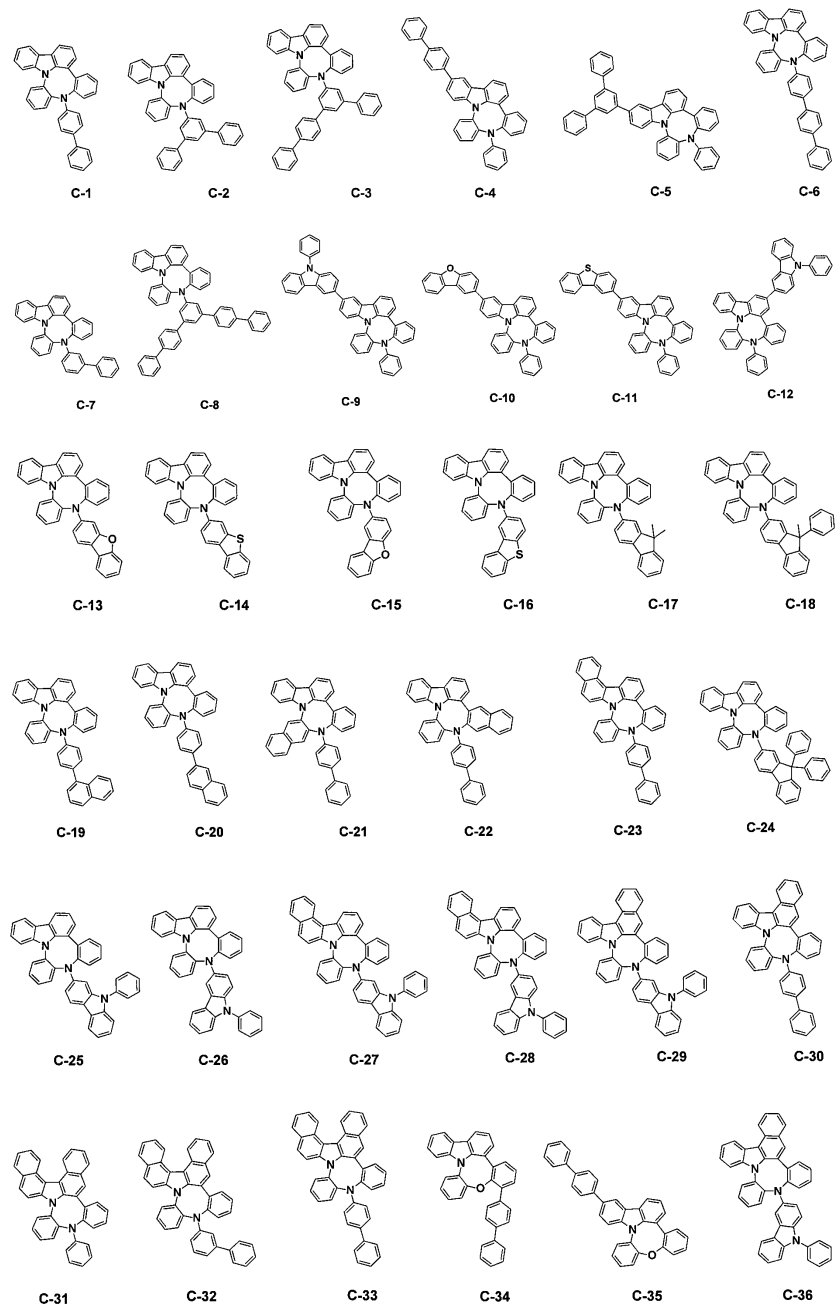
$R_1$  내지  $R_4$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C25)아릴아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 (C5-C25)의 치환 또는 비치환된 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며,

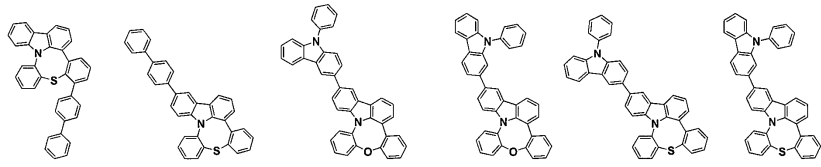
상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고,

a 내지 d는 제1항에서 정의된 바와 같다.

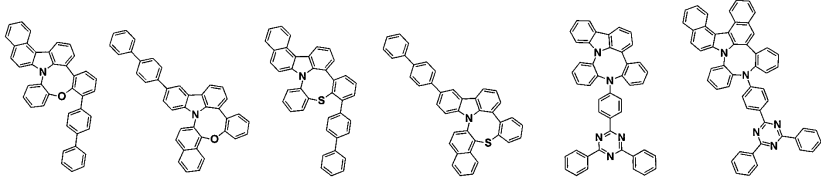
**청구항 6**

제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기에서 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

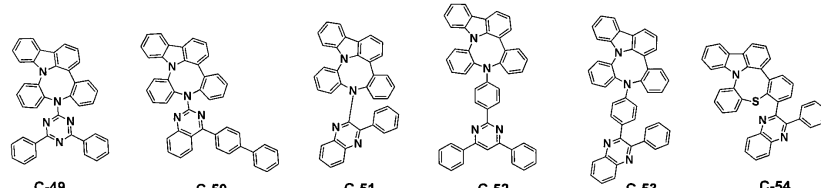




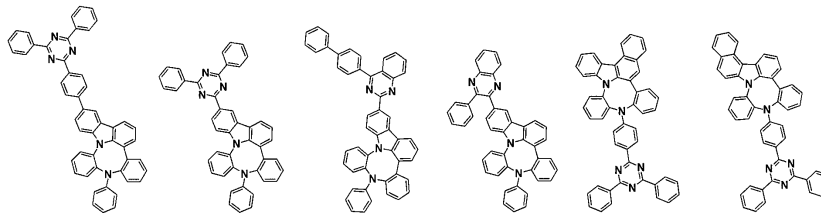
C-37 C-38 C-39 C-40 C-41 C-42



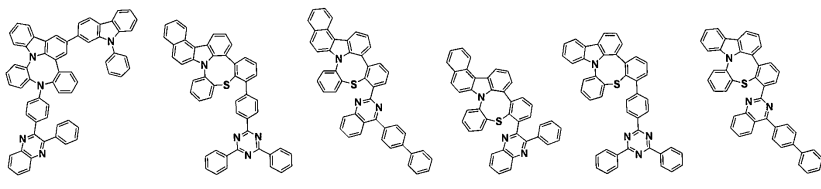
C-43 C-44 C-45 C-46 C-47 C-48



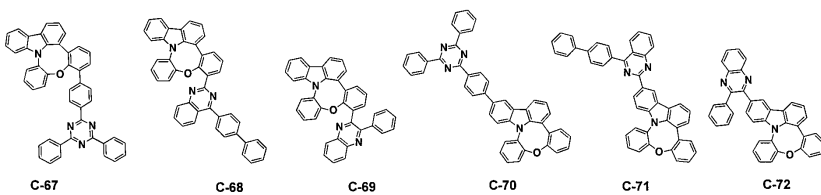
C-49 C-50 C-51 C-52 C-53 C-54



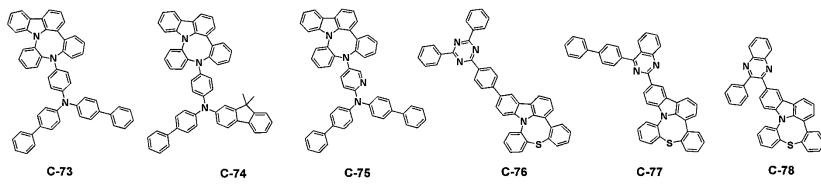
C-55 C-56 C-57 C-58 C-59 C-60



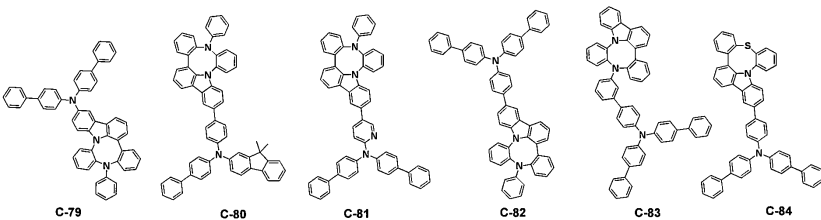
C-61 C-62 C-63 C-64 C-65 C-66



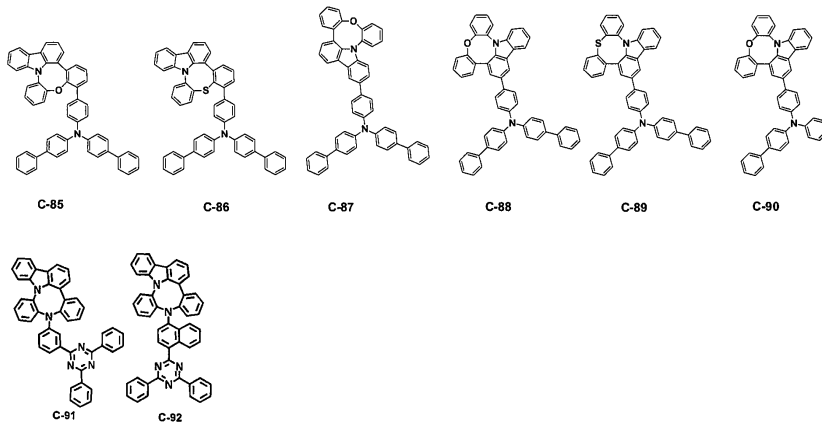
C-67 C-68 C-69 C-70 C-71 C-72



C-73 C-74 C-75 C-76 C-77 C-78



C-79 C-80 C-81 C-82 C-83 C-84



**청구항 7**

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 재료.

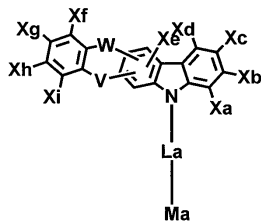
**청구항 8**

제7항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 재료는 호스트 재료 또는 전자 버퍼 재료인, 유기 전계 발광 재료.

**청구항 9**

제7항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 재료는 1종 이상의 제1 호스트 화합물 및 1종 이상의 제2 호스트 화합물을 포함하는 호스트 재료이고, 상기 제1 호스트 화합물은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하고, 상기 제2 호스트 화합물은 하기 화학식 5로 표시되는 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 재료.

[화학식 5]



상기 화학식 5에서,

Ma는 치환 또는 비치환된 질소 함유 (5-30원)헤테로아릴이고;

La는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이고;

V 및 W 중 어느 하나는 단일결합이고, 다른 하나는 NR<sub>6</sub>, CR<sub>7</sub>R<sub>8</sub>, S 및 O 중 어느 하나이고;

Xa 내지 Xi는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 또는 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

R<sub>6</sub> 내지 R<sub>8</sub>은 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)헤테로아릴이고;

상기 헤테로아틸은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

**청구항 10**

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

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

**배경 기술**

[0002] 표시 소자 중, 전계 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)피롤리네이트이리듐 (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 전력 효율 = [( $\pi$ /전압) × 전류 효율]의 관계에 있으므로 전력 효율은 전압에 반비례하는데, 인광용 호스트 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자는 형광 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자에 비해 전류 효율(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 호스트를 적절히 선택해야 한다.

[0006] 한편, 유기 전계 발광 소자는 이의 효율성 및 안정성을 높이기 위해 정공 주입층, 정공 전달층, 발광층, 전자 전달층 및 전자 주입층 등을 포함하는 다층 구조로 이루어진다. 이 때, 정공 전달층 등에 포함되는 화합물의 선정이 발광층으로의 정공 전달 효율, 발광 효율 및 수명 시간과 같은 소자 특성을 향상시킬 수 있는 수단으로 인식되고 있다.

[0007] 이와 관련해, 유기 전계 발광 소자에서 정공 주입 및 전달 재료로서 구리 프탈로시아닌(CuPc), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB), N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민(TPD), 4,4',4"-트리스(3-메틸페닐페닐아미노)트리페닐아민(MTDATA) 등이 사용되어 왔으나, 이러한 물질들 사용한 경우 유기 전계 발광 소자는 양자 효율 및 수명이 저하되는 문제가 있었다. 그 이유는 유기 전계 발광 소자를 높은 전류에서 구동하게 되면, 양극과 정공 주입층 사이에서 열 스트레스(thermal stress)가 발생하고, 이러한 열 스트레스에 의해 소자의 수명이 급격히 저하되기 때문이다. 또한, 정공 주입층에 사용되는 유기 물질은 정공의 운동성이 매우 크기 때문에, 정공과 전자의 전하 밸런스(hole-electron charge balance)가 깨지고 이로 인해 양자 효율(cd/A)이 낮아지게 된다. 따라서, 유기 전계 발광 소자의 내구성 향상을 위한 정공 전달층의 개발이 여전히 요구되고 있다.

[0008] 한편, 유기 전계 발광 소자의 효율을 향상시키기 위해, 소자에 포함되는 유기 전계 발광 재료의 개발뿐만 아니라 소자의 최적화가 요구된다. 이에, 전자 버퍼층을 발광층과 전자 주입층 사이에 삽입함으로써 유기 전계 발광

소자의 효율 향상을 도모하고자 하는 연구들이 진행되고 있다. 전자 버퍼층은 패널 제작 공정에서 고온에 노출 시 소자 내의 전류 특성이 변하여 발광 휘도의 저하가 발생할 수 있는 문제를 개선할 수 있는 층으로써, 전자 버퍼층에 포함되는 화합물의 특성이 중요하다. 뿐만 아니라 전자 버퍼층에 사용되는 화합물은 전자 끌어 당김 (electron withdrawing) 특성 및 전자친화도 LUMO(lowest unoccupied molecular orbital) 에너지 값에 의한 전자 주입 조절 역할을 하는 것이 바람직하며, 이를 통하여 유기 전계 발광 소자의 효율을 향상시키는 역할을 할 수 있다. 따라서, 유기 전계 발광 소자의 온도에 따른 열화 특성 개선 및 전자 주입 조절을 통한 효율 향상을 구현하기 위해, 전자 버퍼층을 구성하는 전자 버퍼 재료의 개발이 요구된다.

[0009] 한국 공개특허공보 제2015-0070827호는 카바졸 잔기의 탄소 위치 2번 및 3번 위치에 아릴아민 잔기가 각각 결합되고, 이들이 서로 융합되어 8각 고리를 형성하는 기본 골격의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 개시하고 있다. 그러나, 상기 문헌은 카바졸 잔기의 탄소 위치 1번 및 질소 원자에 직접 결합된 아릴이 질소 원자, 산소 원자 또는 황 원자를 링커로 하여 8각 고리를 형성하는 구조에 대해서는 개시하지 못한다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0010] (특허문헌 0001) 한국 공개특허공보 제2015-0070827호(2015. 6. 25. 발행)

**발명의 내용**

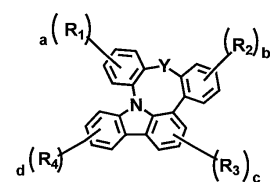
**해결하려는 과제**

[0011] 본 발명의 목적은, 첫째로 구동 전압이 낮고/낮거나, 전류 효율 및/또는 전력 효율과 같은 발광 효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며, 둘째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료를 제공하는 것이며, 셋째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

**과제의 해결 수단**

[0012] 상기의 기술적 과제를 해결하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0013] [화학식 1]



[0014] 상기 화학식 1에서,  
 [0015] Y 는 S, O 또는 NR<sub>5</sub>이고;

[0016] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며;

- [0018] 상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고;
- [0019] a, b 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, c는 0 내지 3의 정수이며, a 내지 d가 각각 독립적으로 2 이상의 정수인 경우, 각각의  $R_1$  내지  $R_4$ 는 동일하거나 상이할 수 있고;

[0020] 단, Y가 NR<sub>5</sub>이고, a가 2인 경우, 두 개의 R<sub>1</sub>이, 이들이 부착된 아릴환과 융합되어 카바졸 고리를 형성하는 것은 제외한다.

[0021] 상기 유기 전계 발광 화합물은 카바졸을 기반으로 8각 고리를 가지는 융합 고리 구조로, 낮은 분자량에 비해 상대적으로 높은 유리 전이 온도를 갖는다. 높은 유리 전이 온도를 갖는 본원의 화합물은 열적 안정성이 우수해 소자 구동시 높은 온도에서도 형태학적 안정성을 가질 수 있다. 또한 본원의 화합물은 구조의 특성상 치환이 용이하여, 치환기에 따라 다양한 층에 적용 가능하다.

**발명의 효과**

[0022] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 구동 전압이 낮고/낮거나, 전류 효율 및/또는 전력 효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0023] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.

[0024] 본원에서 “유기 전계 발광 화합물”은 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 화합물을 의미하며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다.

[0025] 본원에서 “유기 전계 발광 화합물”은 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.

[0026] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

[0027] 상기 화학식 1에서, Y는 S, O, 또는 NR<sub>5</sub>이다.

[0028] 상기 화학식 1에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있다. 또한, Y가 NR<sub>5</sub>이고, a가 2인 경우, 두 개의 R<sub>1</sub>이, 이들이 부착된 아릴환과 융합되어 카바졸 고리를 형성하는 것은 제외한다.

[0029] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는, 바람직하게는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C25)아릴아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 (C5-C25)의 치환 또는 비치환된 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며, 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴, 또는 비치환된 디(C6-C20)아릴아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 (C5-C20)의 비치환된 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 예를 들면, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐, 비치환된 비페닐, 비치환된 터페닐, 페닐로 치환된 카바졸릴, 비치환된 디벤조푸란일, 비치환된 디벤조티오펜일, 페닐로 치환된 퀴놀살리닐, 비페닐로 치환된 퀴나졸리닐, 디비페닐아미노로 치환된 피리딜, 디페닐로 치환된 트리아진일, 또는 비치환된 디비페닐아미노이거나, 인접한 치환체와 연결되어 벤젠 고리를 형성할 수 있다.

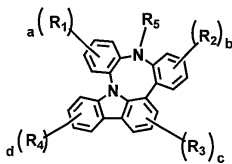
[0030] R<sub>5</sub>는, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴이며, 더욱 바람직하게는, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴이고, 예를 들면, 치환 또는 비치환된 페닐, 비치환된 나프틸페닐, 치환된 나프틸, 디비페닐아미노로 치환 또는 비치환된 비페닐, 비치환된 터페닐, 비치환된 쿼터페닐, 비치환된 펜타페닐, 메틸 또는 페닐로 치환된 플루오레닐, 페닐로 치환된 카바졸릴, 비치환된 디벤조푸란릴, 비치환된 디벤조티오펜릴, 하나 이상의 페닐로 치환된 트리아진릴, 페닐로 치환된 퀴놀살리닐, 비페닐로 치환된 퀴나졸리닐, 또는 디비페닐아미노로 치환된 피리딜일 수 있다.

[0031] 상기 화학식 1에서, 헤테로아틸은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고, 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

[0032] 상기 화학식 1에서, a, b 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고, c는 0 내지 3의 정수이며, a 내지 d가 각각 독립적으로 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>4</sub>는 동일하거나 상이할 수 있다. 바람직하게, a 내지 d는 0 내지 2의 정수이다.

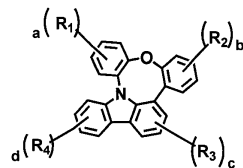
[0033] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 4 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0034] [화학식 2]



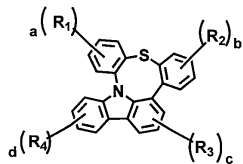
[0035]

[0036] [화학식 3]



[0037]

[0038] [화학식 4]



[0039]

[0040] 상기 화학식 2 내지 4에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub> 및 a 내지 d는 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[0041] 또한, 상기 화학식 2에서, a가 2인 경우, 두 개의 R<sub>1</sub>이, 이들이 부착된 아릴환과 융합되어 카바졸 고리를 형성하는 것은 제외한다.

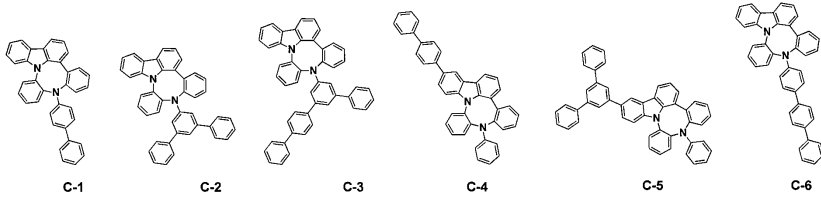
[0042] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은 쇠를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 1 내지 20개, 더 바람직하게는 1 내지 10개이다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 상기 탄소수는 바람직하게는 3 내지 20개, 더 바람직하게는 3 내지 7개이다. 상기 시클로알킬의 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(렌)"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 부분적으로 포화될 수도 있다. 상기 환 골격 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, 플루오란테닐, 스피로비플루오레닐 등이 있다. 본원에서 "(3-30원) 헤테로아릴(렌)"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, 티오펜, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진릴, 테트라진릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔릴, 피리디, 피라진릴, 피리미딘릴, 피리다진릴 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란릴, 벤조티오펜, 이소벤조푸란릴, 디벤조푸란릴, 디벤조티오펜, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 벤조카바졸릴, 페녹사진릴, 페노티아진릴, 페난트리딘릴, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로젠"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

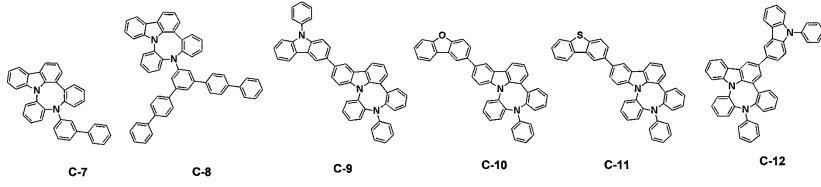
[0043] 또한, 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 본원의 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>8</sub>, Ma, La 및 Xa 내지 Xi에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C2-C30)알케닐, 치환된 (C2-C30)알키닐, 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (3-30원)헤테로아릴(렌), 치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환된 (C3-C30)시클로알케닐, 치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 치환된 (C1-C30)알콕시, 치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, 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)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 이상이며, 바람직하게는, 각각 독립적으로 (C1-C20)알킬, (C6-C20)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 및 (C1-C20)알킬로 치환 또는 비치환된 디(C6-C20)아릴아미노로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이며, 더욱 바람직하게는, 각각 독립적으로 (C1-C10)알킬, (C6-C10)아릴로 치환 또는 비치환된 (6-18 원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 및 (C1-C10)알킬로 치환 또는 비치환된 디(C6-C18)아릴아미노로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이며, 예를 들면, 각각 독립적으로 메틸; 디벤조티오펜, tert-부틸 또는 시아노로 치환 또는 비치환된 페닐; 비치환된 비페닐; 비치환된 터페닐; 비치환된 나프틸; 페닐로 치환된 퀴녹살리닐; 하나 이상의 페닐로 치환된 트리아진릴; 하나 이상의 페닐로 치환된 피리미딘릴; 비치환된 디벤조티오펜; 페닐로 치환된 카바졸릴; 디비페닐아미노; 페닐비페닐아미노; 및 디메틸로 치환된 플루오레닐비페닐아미노로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있다.

[0044] 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

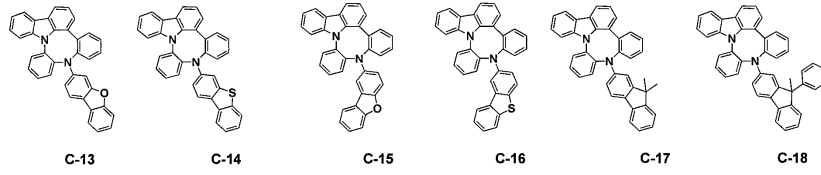
[0045]



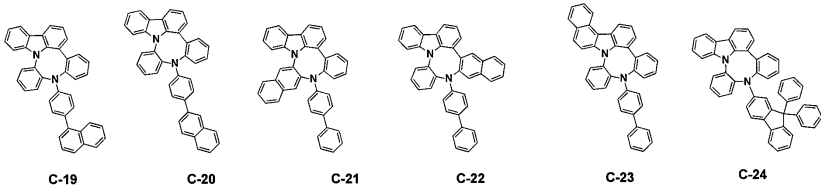
[0046]



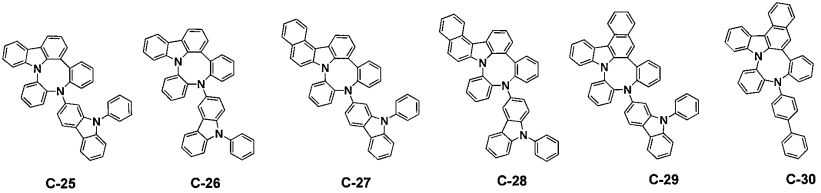
[0047]



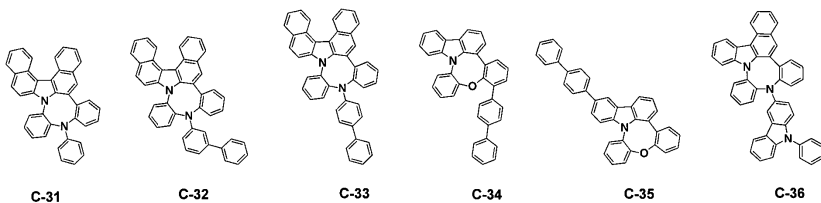
[0048]



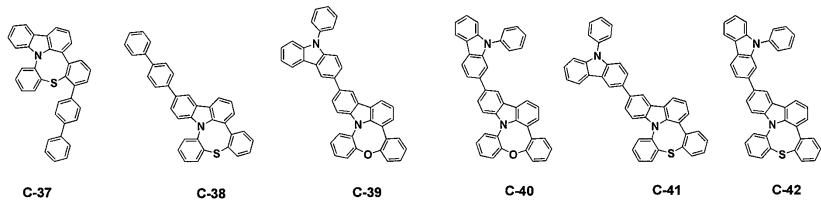
[0049]



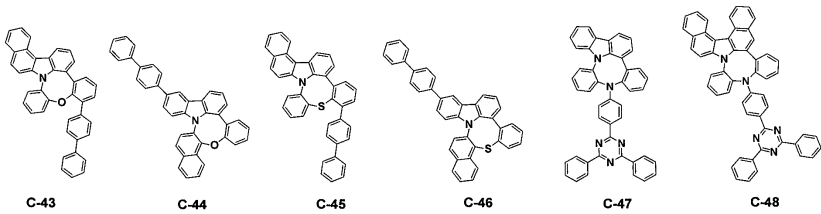
[0050]



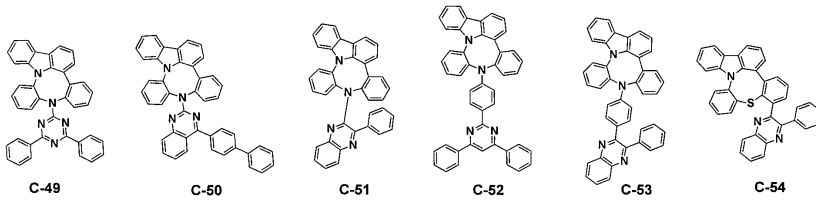
[0051]



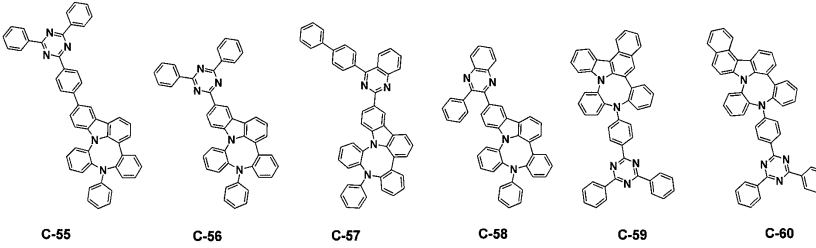
[0052]



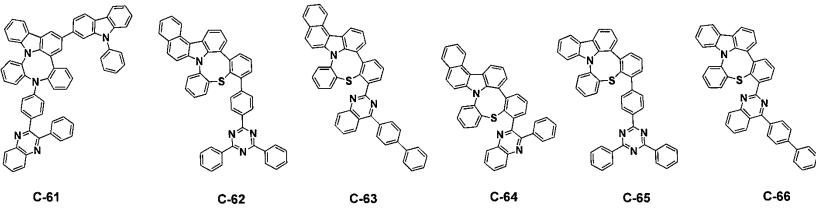
[0053]



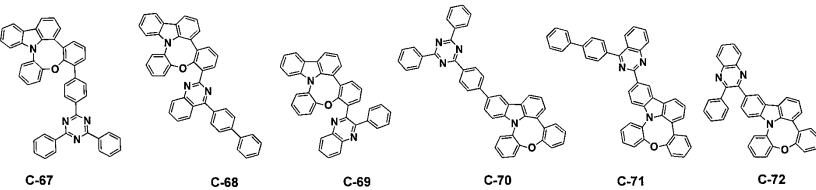
[0054]



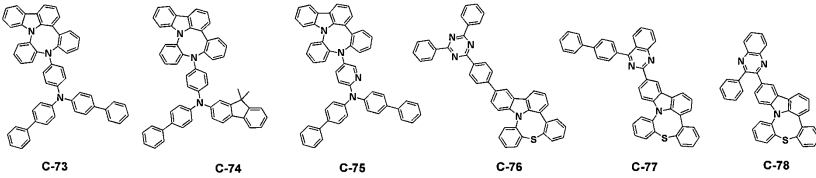
[0055]



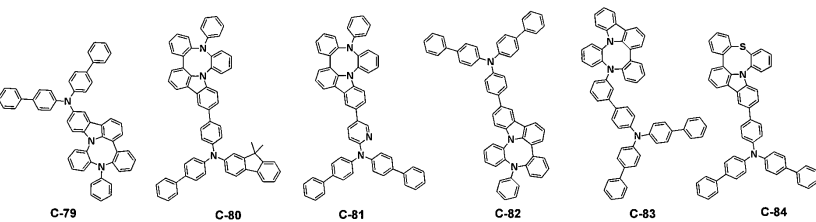
[0056]



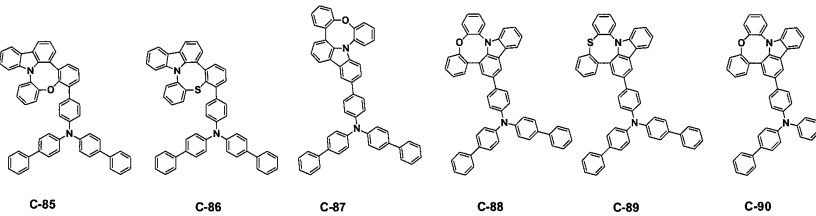
[0057]



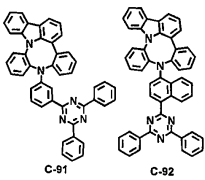
[0058]



[0059]

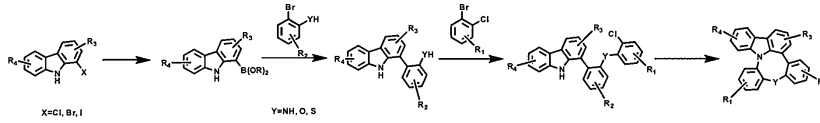


[0060]



[0061] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식에 나타난 바와 같이 제조할 수 있다.

[0062] [반응식 1]



[0063] [0064] 상기 반응식 1에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>는 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[0065] 한편, 본원의 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 포함한다. 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 1층 이상의 발광층을 포함하고, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 버퍼층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다. 여기서, 상기 정공 보조층 또는 상기 발광 보조층은 정공 전달층과 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도를 조절하는 층이다. 상기 정공 보조층 또는 상기 발광 보조층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및/또는 수명의 개선 효과를 갖는다. 전자 버퍼층은 전자 주입을 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.

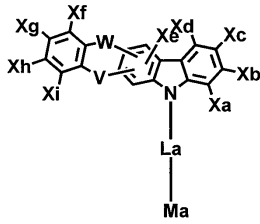
[0066] 본원의 일 양태에 따르면, 본원은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료를 제공한다. 상기 유기 전계 발광 재료는 본원의 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다. 상기 유기 전계 발광 재료는 바람직하게는 본원의 화학식 1로 표시되는 화합물, 본원의 화학식 5로 표시되는 화합물, 또는 이들 둘 다를 포함할 수 있다. 상기 유기 전계 발광 재료는 호스트 재료, 정공 전달 재료 또는 전자 버퍼 재료일 수 있고, 바람직하게는 호스트 재료 또는 전자 버퍼 재료일 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0067] 본원의 일 양태에 따르면, 본원의 화학식 1로 표시되는 화합물은 전자 버퍼 재료로서 유기 전계 발광 소자에 포함될 수 있다. 즉, 상기 전자 버퍼 재료는 본원의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 상기 전자 버퍼 재료는 전하의 흐름 특성을 제어하는 재료를 가리킨다. 이에, 상기 전자 버퍼 재료는 예를 들어, 전자를 트랩(trap)하거나, 전자를 블로킹(blocking)하거나, 또는 전자 전달 대역과 발광층 사이의 에너지 장벽을 낮추는 것일 수 있다. 상기 전자 버퍼 재료는 구체적으로는, 유기 전계 발광 소자의 전자 버퍼 재료일 수 있다. 유기 전계 발광 소자에서 상기 전자 버퍼 재료는 전자 버퍼층에 사용되거나, 전자 전달층, 전자 주입층 또는 발광층과 같은 다른 영역에 혼입되어 사용될 수 있다. 상기 전자 버퍼 재료는 유기 전계 발광 소자의 제조에 사용되는 통상의 물질을 추가로 포함하는 혼합물 또는 조성물일 수 있다.

[0068] 본원의 일 양태에 따르면, 본원의 화학식 1로 표시되는 화합물은 호스트 재료로서 유기 전계 발광 소자에 포함될 수 있다. 즉, 상기 호스트 재료는 본원의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 또한, 상기 호스트 재료는 1종 이상의 제1 호스트 화합물 및 1종 이상의 제2 호스트 화합물을 포함할 수 있다. 이 때, 제1 호스트 화합물과 제2 호스트 화합물의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다. 상기 제2 호스트 화합물은 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하며, 하기 화학식 5로 표시되는 화합물을 사용할 경우 구동 전압, 발광 효율 및/또는 전력 효율 면에서 바람직하다. 본원의 호스트 재료에서, 상기 제1 호스트 화합물은 본원의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하고, 상기 제2 호스트 화합물은 하기 화학식 5로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0069] 본원의 유기 전계 발광 재료는 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 및 하기 화학식 5로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0070] [화학식 5]



[0071]

[0072] 상기 화학식 5에서, Ma는 치환 또는 비치환된 질소 함유 (5-30원)헤테로아릴이고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 질소 함유 (5-25원)헤테로아릴이고, 더욱 바람직하게는 치환 또는 비치환된 질소 함유 (5-18원)헤테로아릴이고, 예를 들면, 치환된 트리아진일, 치환된 피리미딘일, 치환된 벤조이미다졸릴, 치환된 퀴놀살리닐, 치환된 퀴놀릴, 치환된 퀴나졸리닐, 또는 비치환된 나프티리디닐일 수 있다. 상기 치환된 질소 함유 (5-30원)헤테로아릴의 치환기는 디벤조티오펜일, tert-부틸 또는 시아노로 치환 또는 비치환된 페닐; 비치환된 비페닐; 비치환된 터페닐; 비치환된 나프틸; 비치환된 디벤조티오펜일; 또는 페닐로 치환된 카바졸릴일 수 있다.

[0073] 상기 화학식 5에서, La는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이고, 바람직하게는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴렌이고, 더욱 바람직하게는 단일 결합, 비치환된 (5-18원)헤테로아릴렌, 또는 비치환된 (C6-C18)아릴렌이고, 예를 들면, 단일 결합, 비치환된 페닐렌, 비치환된 비페닐렌, 비치환된 나프틸렌, 또는 비치환된 피리디닐렌일 수 있다.

[0074] 상기 화학식 5에서, V 및 W 중 어느 하나는 단일 결합이고, 다른 하나는 NR<sub>6</sub>, CR<sub>7</sub>R<sub>8</sub>, S 및 O 중 어느 하나이고, 바람직하게는 V 및 W 중 어느 하나는 단일 결합이고, 다른 하나는 NR<sub>6</sub>, S 및 O 중 어느 하나이다.

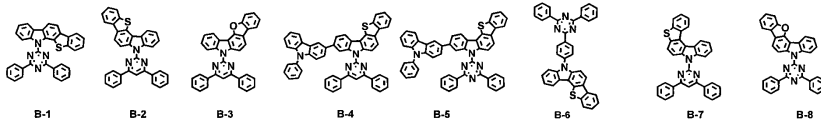
[0075] 상기 화학식 5에서, Xa 내지 Xi는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 또는 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고, 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴이고, 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 (C6-C18)아릴로 치환 또는 비치환된 (6-18원)헤테로아릴이고, 예를 들면, 각각 독립적으로 수소, 비치환된 페닐, 비치환된 나프틸, 비치환된 비페닐, 또는 페닐로 치환된 카바졸릴일 수 있다.

[0076] 상기 화학식 5에서, R<sub>6</sub> 내지 R<sub>8</sub>은 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)헤테로아릴이고, 바람직하게는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴이고, 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 비치환된 (C6-C18)아릴이고, 예를 들면, 비치환된 페닐, 비치환된 나프틸, 또는 비치환된 비페닐일 수 있다.

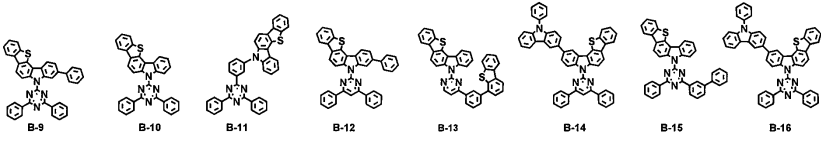
[0077] 상기 화학식 5에서, 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며, 바람직하게는 N을 포함한다.

[0078] 상기 화학식 5의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

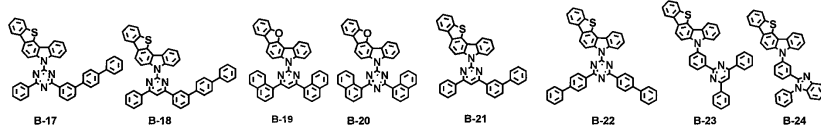
[0079]



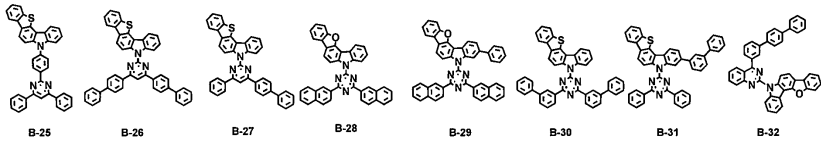
[0080]



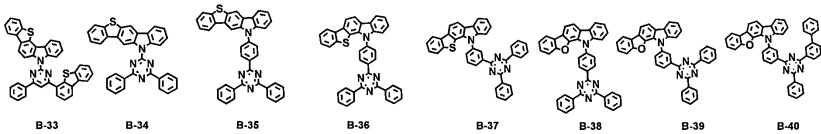
[0081]



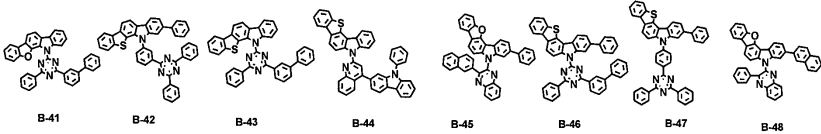
[0082]



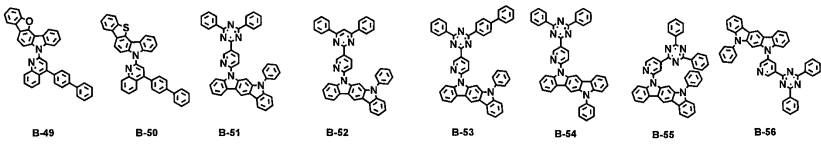
[0083]



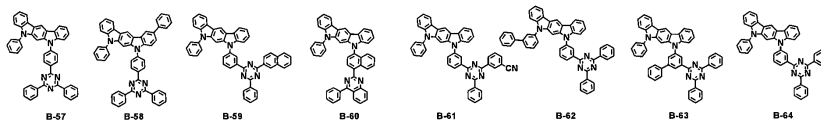
[0084]



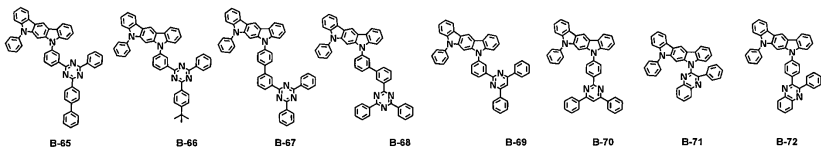
[0085]



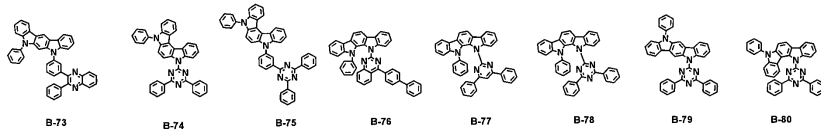
[0086]



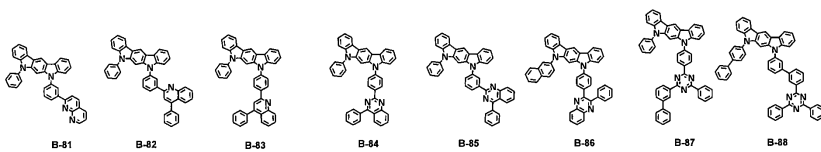
[0087]



[0088]



[0089]



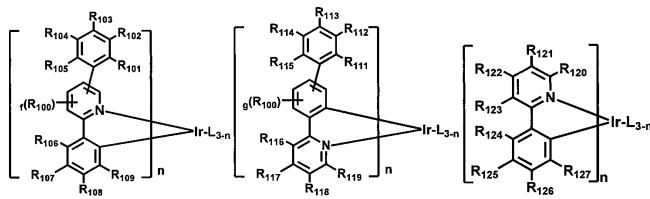
[0090] 본원의 화학식 5로 표시되는 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조될 수 있고, 특히 다수의 특허 문

헌에 개시되어 있는 합성 방법을 이용할 수 있다. 예를 들면, 공지된 물질인 화합물 B-1 및 B-15는 하기의 특허 공개공보에 개시된 방법으로 합성할 수 있으나, 이들에 제한되는 것은 아니다. 구체적으로, 화합물 B-1과 그 유도체들의 합성법은 한국 특허공개공보 제2016-0010333호(2016.1.27. 공개)에 개시되어 있다. 또한, 화합물 B-15와 그 유도체들의 합성법은 한국 특허공개공보 제2013-0011446호(2013.1.30. 공개)에 개시되어 있다.

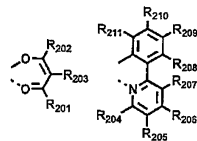
[0091] 본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트는 하나 이상의 인광 또는 형광 도판트일 수 있으며, 하나 이상의 인광 도판트가 바람직하다. 본원의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뎀(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물이 바람직하고, 이리듐(Ir), 오스뎀(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물이 더욱 바람직하며, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물이 더욱 바람직하다.

[0092] 본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 101 내지 103으로 표시되는 화합물을 사용할 수 있다.

[0093] [화학식 101]      [화학식 102]      [화학식 103]



[0094] 상기 화학식 101 내지 103에서,  
 [0095] L은 하기 구조에서 선택되고;  
 [0096] L은 하기 구조에서 선택되고;



[0097] R<sub>100</sub>은 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이며;  
 [0098] R<sub>101</sub> 내지 R<sub>109</sub> 및 R<sub>111</sub> 내지 R<sub>123</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; R<sub>106</sub> 내지 R<sub>109</sub>는 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합 고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며; R<sub>120</sub> 내지 R<sub>123</sub>은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬 또는 아릴로 치환 또는 비치환된 퀴놀린 형성이 가능하며;

[0099] R<sub>124</sub> 내지 R<sub>127</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; R<sub>124</sub> 내지 R<sub>127</sub>은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합 고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

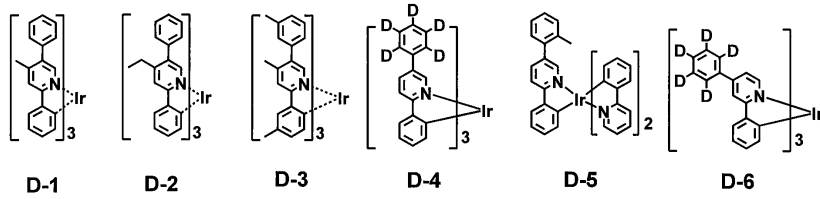
[0100] R<sub>201</sub> 내지 R<sub>211</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-30)아릴이고, R<sub>208</sub> 내지 R<sub>211</sub>은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합 고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

[0101] f 및 g는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며; f 또는 g가 각각 2 이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>100</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

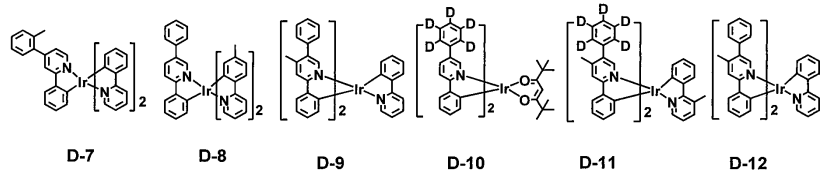
[0102] f 및 g는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며; f 또는 g가 각각 2 이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>100</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

[0103] n은 1 내지 3의 정수이다.

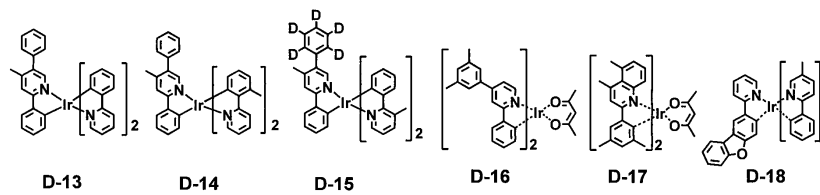
[0104] 상기 도판트 화합물의 구체적인 예는 다음과 같다.



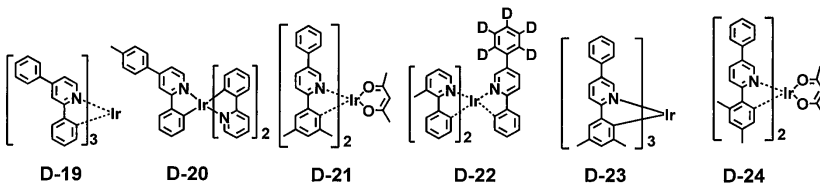
[0105]



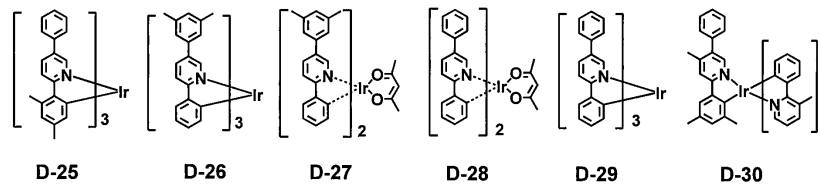
[0106]



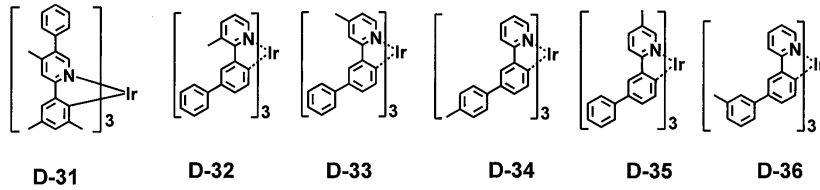
[0107]



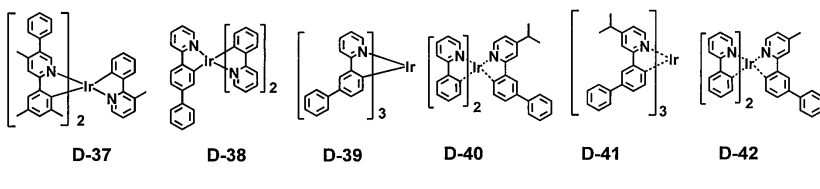
[0108]



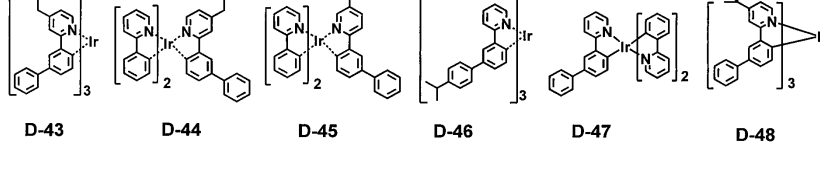
[0109]



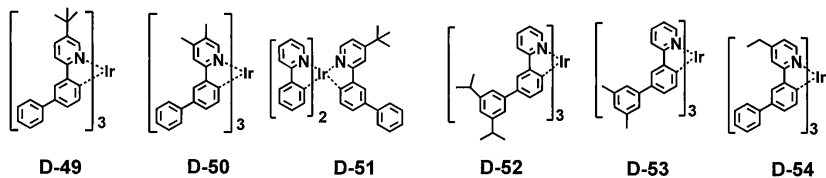
[0110]



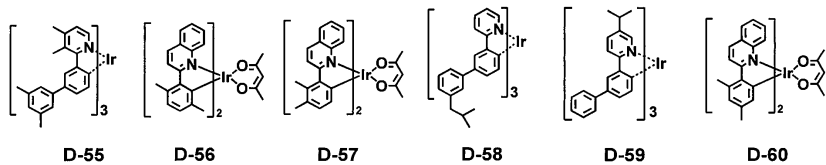
[0111]



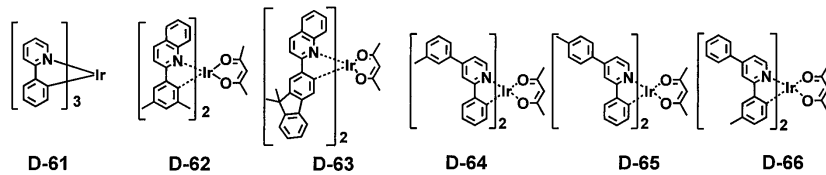
[0112]



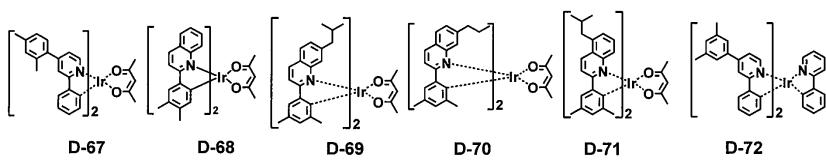
[0113]



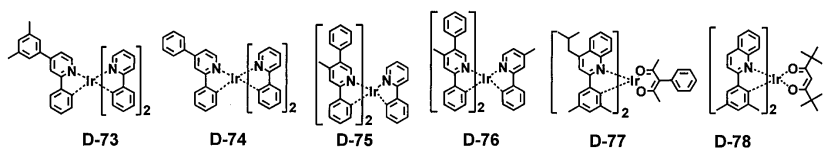
[0114]



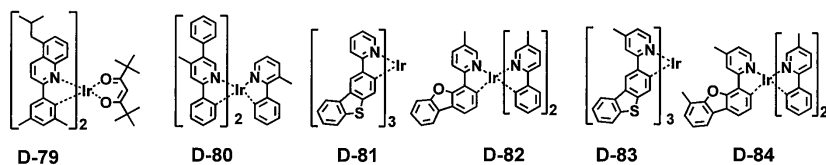
[0115]



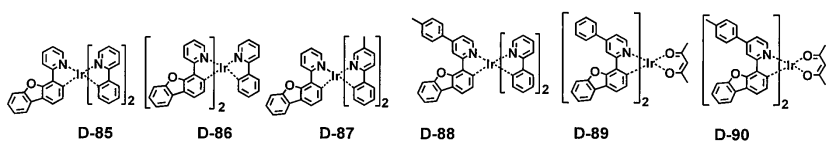
[0116]



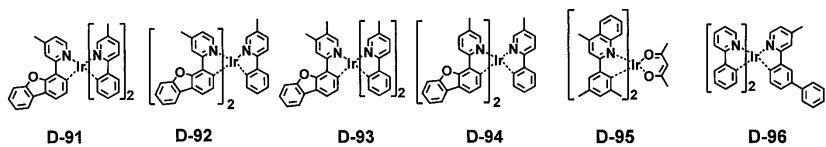
[0117]



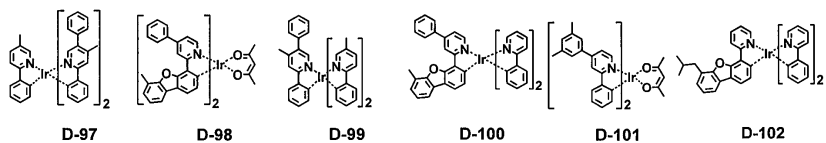
[0118]



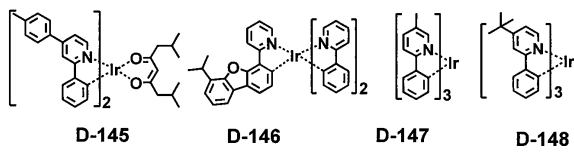
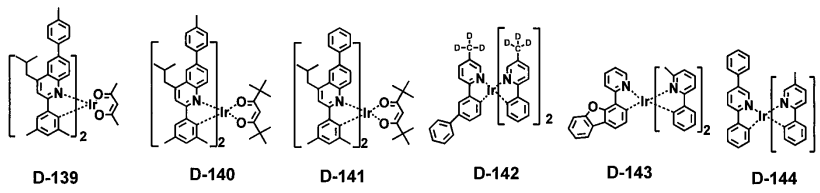
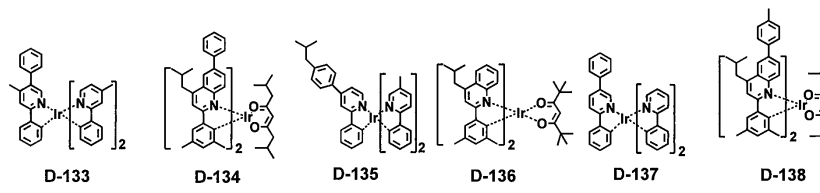
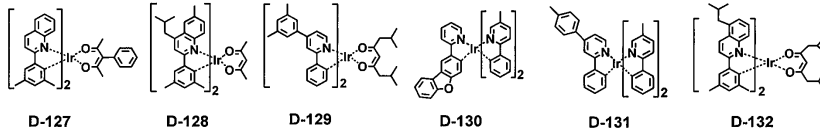
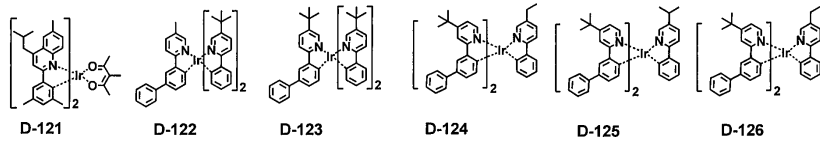
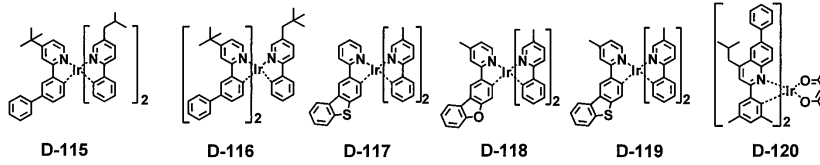
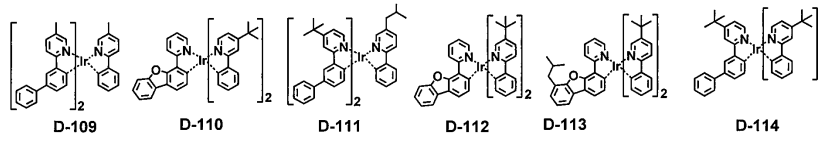
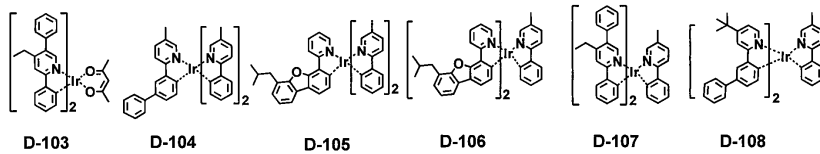
[0119]



[0120]



[0121]



[0122]

[0123]

[0124]

[0125]

[0126]

[0127]

[0128]

[0129]

[0130] 본원의 유기 전계 발광 소자는 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하고, 이와 동시에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있다.

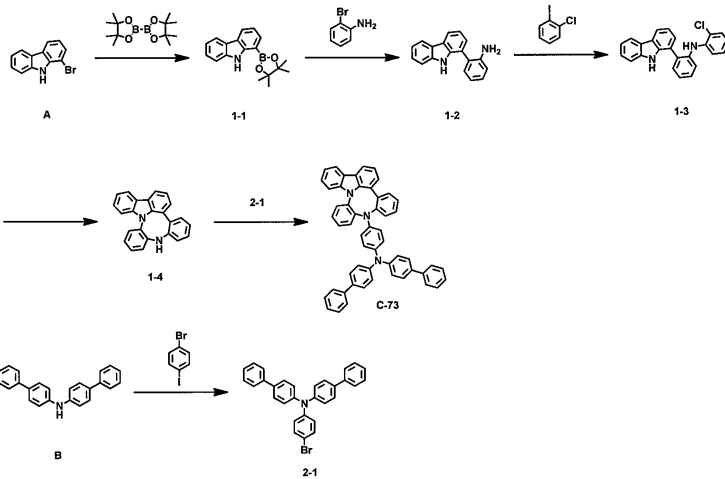
[0131] 본원의 일 양태에 따르면, 본원의 유기 전계 발광 소자의 발광층 중 적어도 1층은 1종 이상의 도판트 화합물 및 1종 이상의 호스트 화합물을 포함하고, 상기 호스트 화합물은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물일 수 있다. 또한, 상기 유기 전계 발광 소자의 전자 버퍼층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0132] 본원의 일 양태에 따르면, 본원의 유기 전계 발광 소자의 발광층 중 적어도 1층은 1종 이상의 도판트 화합물 및 2종 이상의 호스트 화합물을 포함하고, 상기 호스트 화합물 중 제1 호스트 화합물은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이고, 제2 호스트 화합물은 상기 화학식 5로 표시되는 화합물일 수 있다. 또한, 상기 유기 전계 발광 소

자의 전자 버퍼층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

- [0133] 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기물층에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이 금속, 란타넘 계열 금속 및 d-전이 원소의 유기 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 착체 화합물을 더 포함할 수도 있고, 나아가 상기 유기물층은 발광층 및 전하 생성층을 더 포함할 수 있다.
- [0134] 또한, 본원의 상기 유기 전계 발광 소자는 본원의 화합물 이외에 당업계에 알려진 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함하는 발광층 하나 이상을 더 포함함으로써 백색 발광을 할 수 있다. 또한, 필요에 따라, 황색 또는 오렌지색 발광층을 더 포함할 수도 있다.
- [0135] 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측 표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 일층(이하, 이들을 “표면층”이라고 지칭함) 이상을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 금속의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 음극 표면에 할로겐화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 이것에 의해 구동의 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는  $\text{SiO}_x(1 \leq x \leq 2)$ ,  $\text{AlO}_x(1 \leq x \leq 1.5)$ ,  $\text{SiON}$  또는  $\text{SiAlON}$  등이 있고, 할로겐화 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.
- [0136] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 이렇게 제조된 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 전하 생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진 백색 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.
- [0137] 본원의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공 증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막법이나, 잉크젯 프린팅(ink jet printing), 노즐 프린팅(nozzle printing), 슬롯 코팅(slot coating), 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0138] 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.
- [0139] 이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 대표 화합물을 들어 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물의 제조 방법 및 이를 포함하는 소자의 발광 특성을 설명한다. 그러나, 본원은 하기의 예들에 한정되는 것은 아니다.

[0140] [실시예 1] 화합물 C-73의 제조



[0141]

[0142] 1) 화합물 1-1의 제조

[0143] 반응용기에 화합물 A 20 g (81.2 mmol), 비스(피나콜레이트)다이보란 26.8 g (105 mmol), 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II) 디클로라이드 2.8 g (4 mmol), 아세트산 칼륨 16 g (162 mmol), 및 1,4-다이옥산 400 mL를 첨가한 후, 140°C에서 밤새 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 에틸 아세테이트로 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-1 15.4 g (77 %)를 얻었다.

[0144] 2) 화합물 1-2의 제조

[0145] 반응용기에 화합물 1-1 14 g (56.6 mmol), 2-브로모아닐린 6.1 mL (54 mmol), 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐 2.6 g (2.3 mmol), 탄산칼륨 19.6 g (142 mmol), 톨루엔 280 mL, 에탄올 70 mL 및 증류수 70 mL를 첨가한 후, 120°C에서 5 시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 에틸 아세테이트로 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-2 8.6 g (59 %)를 얻었다.

[0146] 3) 화합물 1-3의 제조

[0147] 반응용기에 화합물 1-2 8.3 g (32 mmol), 1-클로로-2-아이오도벤젠 4.3 mL (35 mmol), 팔라듐(II) 아세테이트 289 mg (1.3 mmol), 트리-tert-부틸포스핀 1.27 mL (2.6 mmol), 나트륨-tert-부톡사이드 6.2 g (64 mmol) 및 o-자일렌 160 mL를 첨가한 후, 160°C에서 2시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 에틸 아세테이트로 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-3 3.4 g (29 %)를 얻었다.

[0148] 4) 화합물 1-4의 제조

[0149] 반응용기에 화합물 1-3 3.4 g (9.2 mmol), 팔라듐(II) 아세테이트 1 g (4.6 mmol), 트리-tert-부틸포스핀 4.3 mL (9.2 mmol), 탄산세슘 12 g (36.8 mmol) 및 o-자일렌 60 mL를 첨가한 후, 160°C에서 2시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 에틸 아세테이트로 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 1-4 1.2 g (40 %)를 얻었다.

[0150] 5) 화합물 2-1의 제조

[0151] 반응용기에 화합물 B 10 g (31 mmol), 1-브로모-4-아이오도벤젠 13.2 g (46 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤) 디팔라듐(0) 855 mg (0.9 mmol), 트리(o-톨릴)포스핀 757 mg (2.5 mmol), 나트륨-tert-부톡사이드 6 g (62 mmol) 및 톨루엔 310 mL를 첨가한 후, 120°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 에틸 아세테이트로 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 2-1 7 g (47 %)를 얻었다.

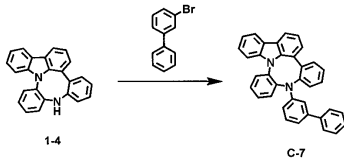
[0152] 6) 화합물 C-73의 제조

[0153] 반응용기에 화합물 **1-4** 2.7 g (8.1 mmol), 화합물 **2-1** 4.6 g (9.7 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) 223 mg (0.2 mmol), 트리(*o*-톨릴)포스핀 198 mg (0.6 mmol), 나트륨-*tert*-부톡사이드 1.6 g (16 mmol) 및 톨루엔 80 mL를 첨가한 후, 120°C에서 2시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 에틸 아세테이트로 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **C-73** 4 g (61 %)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P.
<b>C-73</b>	727.9	393 nm	459 nm	258 °C

[0154]

[0155] [실시에 2] 화합물 **C-7**의 제조



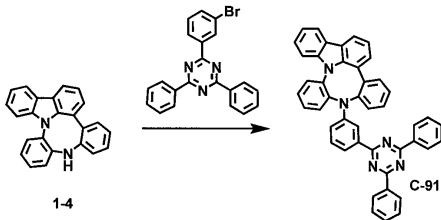
[0156]

[0157] 반응 용기에 실시예 1에서와 동일한 방법으로 제조된 화합물 **1-4** 3.1 g (9.3 mmol), 3-브로모-1,1'-비페닐 2.6 g (11.2 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) 256 mg (0.28 mmol), 트리(*o*-톨릴)포스핀 227 mg (0.74 mmol), 나트륨-*tert*-부톡사이드 1.8 g (18.6 mmol), 및 톨루엔 93 mL를 첨가한 후, 120°C에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 에틸 아세테이트로 추출하였다. 추출한 유기층을 황산마그네슘으로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **C-7** 2.8 g (62 %)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P.
<b>C-7</b>	484.6	307 nm	395 nm	274 °C

[0158]

[0159] [실시에 3] 화합물 **C-91**의 제조



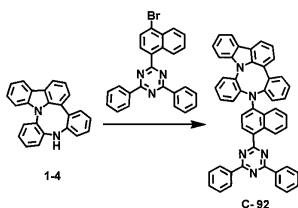
[0160]

[0161] 반응 용기에 실시예 1에서와 동일한 방법으로 제조된 **1-4** 3.5 g (10.5 mmol), 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 4.9 g (12.6 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) 385 mg (0.4 mmol), 트리(*o*-톨릴)포스핀 256 mg (0.8 mmol), 나트륨-*tert*-부톡사이드 2.0 g (21 mmol), 및 톨루엔 90 mL를 첨가한 후, 130°C에서 2 시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **C-91** 2.4 g (36 %)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P.
<b>C-91</b>	640.10	308 nm	428 nm	198 °C

[0162]

[0163] [실시에 4] 화합물 **C-92**의 제조



[0164]

[0165] 반응 용기에 실시예 1에서와 동일한 방법으로 제조된 **1-4** 2.7 g (8.1 mmol), 2-(4-브로모-1-나프탈레닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 3.9 g (8.9 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) 300 mg (0.3 mmol), 2-디시클로

로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐 333 mg (0.8 mmol), 나트륨-tert-부톡사이드 2.0 g (21 mmol), 및 o-자일렌 41 mL를 첨가한 후, 150°C에서 2시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 회전 증발기로 용매를 제거하였다. 이 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 C-92 3.0 g(54 %)를 얻었다.

	MW	UV	PL	M.P.
C-92	690.10	390 nm	457 nm	318 °C

이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 발광 특성을 설명한다.

**[소자 제조예 1-1] 본원에 따른 제1 호스트 화합물 및 제2 호스트 화합물을 공증착한 OLED 소자 제조**

본원의 유기 전계 발광 화합물을 이용하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스 (지오마텍사 제조) 기판 상의 투명 전극 ITO 박막(10Ω/□)을, 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 HI-1을 넣고 챔버 내의 진공도가 10<sup>-6</sup> 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-2를 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-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10 nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HT-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 30 nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착하였다. 정공 주입층 및 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀 두 군데에 호스트로서 각각 화합물 C-7, 및 화합물 B-51를 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-1을 넣은 후, 두 호스트 물질은 1:1의 같은 속도로 증발시키고 동시에 도판트 물질은 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 15 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ET-1과 화합물 EI-1을 각각 4:6의 속도로 증발시켜 상기 발광층 위에 35 nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서, 전자 주입층으로 화합물 EI-1을 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다. 재료 별로 각 화합물은 10<sup>-6</sup> torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

**[비교예 1-1] 호스트로서 제2 호스트 화합물만 포함하는 OLED 소자 제조**

발광층의 호스트로서 화합물 B-51만을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1-1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

**[비교예 1-2] 호스트로서 중래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제조**

발광층의 호스트로서 화합물 CBP, 및 도판트로서 화합물 D-1을 사용하여 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하고, 정공 차단층으로 화합물 Balq을 10 nm 두께로 증착한 후, 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ET-1과 화합물 EI-1을 4:6의 속도로 증발시켜 발광층 위에 25 nm 두께의 전자 전달층을 증착한 것 외에는 소자 제조예 1-1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

이상과 같이 제조된 유기 전계 발광 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 구동 전압, 발광 효율, 전력 효율, 및 CIE 색 좌표 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

**[표 1]**

	호스트	전압 [V]	발광효율 [cd/A]	전력효율 [lm/W]	색좌표 (x,y)
소자 제조예 1-1	C-7:B-51	3.4	52.6	48.6	0.310, 0.664
비교예 1-1	B-51	3.9	33.6	27.1	0.325, 0.655
비교예 1-2	CBP	5.5	43.2	24.7	0.304, 0.669

**[소자 제조예 2-1] 본원에 따른 제1 호스트 화합물 및 제2 호스트 화합물을 공증착한 OLED 소자 제조**

발광층의 도판트로서 화합물 D-13을 사용하고, 발광층의 호스트로서 사용된 제1 호스트 화합물 및 제2 호스트 화합물의 조합이 하기 표 2와 같은 것 외에는 소자 제조예 1-1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0179] **[비교예 2-1] 호스트로서 제2 호스트 화합물만 포함하는 OLED 소자 제조**

[0180] 발광층의 호스트로서 화합물 B-51만을 사용한 것 외에는 소자 제조에 2-1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0181] **[비교예 2-2] 호스트로서 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제조**

[0182] 발광층의 호스트로서 화합물 CBP, 및 도판트로서 화합물 D-13을 사용하여 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하고, 정공 차단층으로 화합물 Balq를 10 nm 두께로 증착한 후, 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ET-1과 화합물 EI-1을 4:6의 속도로 증발시켜 발광층 위에 25 nm 두께의 전자 전달층을 증착한 것 외에는 소자 제조에 2-1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0183] 이상과 같이 제조된 유기 전계 발광 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 구동 전압, 발광 효율, 전력 효율, 및 CIE 색 좌표 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0184] **[표 2]**

	호스트	전압 [V]	발광효율 [cd/A]	전력효율 [lm/W]	색좌표 (x,y)
소자 제조예 2-1	C-7:B-51	3.2	55.9	54.9	0.300, 0.661
비교예 2-1	B-51	3.1	41.6	42.2	0.314, 0.653
비교예 2-2	CBP	6.0	43.9	23.0	0.292, 0.666

[0185] **[소자 제조예 3-1] 본원에 따른 호스트 화합물을 증착한 OLED 소자 제조**

[0186] 진공 증착 장비 내의 한 셀에는 호스트로서 화합물 C-91을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-13을 넣은 후, 도판트 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 15 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착한 것 외에는 소자 제조에 1-1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0187] **[비교예 3-1] 호스트로서 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제조**

[0188] 발광층의 호스트로서 화합물 CBP, 도판트로서 화합물 D-13을 사용하여 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하고, 정공 차단층으로 화합물 Balq를 10 nm 두께로 증착한 후 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ET-1과 화합물 EI-1을 4:6의 속도로 증발시켜 발광층 위에 25 nm 두께의 전자 전달층을 증착한 것 외에는 소자 제조에 3-1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0189] 이상과 같이 제조된 유기 전계 발광 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 구동 전압, 발광 효율, 전력 효율, 및 CIE 색 좌표 결과를 하기 표 3에 나타내었다.

[0190] **[표 3]**

	호스트	전압 [V]	발광효율 [cd/A]	전력효율 [lm/W]	색좌표 (x,y)
소자 제조예 3-1	C-91	3.8	62.0	50.7	0.301, 0.663
비교예 3-1	CBP	5.8	42.7	23.1	0.295, 0.665

[0191] **[소자 제조예 4-1] 본원에 따른 호스트 화합물을 증착한 OLED 소자 제조**

[0192] 진공 증착 장비 내의 한 셀에는 호스트로서 화합물 C-91을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-74을 넣은 후, 도판트 물질은 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 10 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착한 것 외에는 소자 제조에 1-1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0193] **[비교예 4-1] 호스트로서 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제조**

[0194] 발광 재료로서 호스트에는 CBP, 도판트로는 화합물 D-74를 사용하여 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하고, 정공 차단층으로 화합물 Balq를 10 nm 두께로 증착한 후 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ET-1과 화합물 EI-1을 4:6의 속도로 증발시켜 발광층 위에 25 nm 두께의 전자 전달층을 증착한 것 외에는 소자 제조에 4-1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0197] 이상과 같이 제조된 유기 전계 발광 소자의 10mA/cm<sup>2</sup> 기준의 구동 전압, 발광 효율, 전력 효율, 및 CIE 색 좌표 결과를 하기 표 4에 나타내었다.

[0198] [표 4]

	호스트	전압 [V]	발광효율 [cd/A]	전력효율 [lm/W]	색좌표 (x,y)
소자 제조예 4-1	C-91	5.1	76.0	46.7	419, 565
비교예 4-1	CBP	7.7	66.1	27.2	422, 563

[0199] [0200] 상기 표 1 내지 4로부터, 본원의 유기 전계 발광 화합물을 발광용 호스트 재료로 포함한 OLED 소자는 발광 특성이 뛰어난 뿐만 아니라 종래의 발광 재료를 포함하는 OLED 소자에 비해 구동 전압을 강하시키고 발광 효율 및 전력 효율을 상승시킴으로써 소비 전력을 개선시킬 수 있음을 알 수 있다.

[0201] [비교예 5-1] 전자 버퍼층을 포함하지 않는 청색 발광 유기 전계 발광 소자 제조

[0202] OLED 소자를 다음과 같이 제조하였다. 우선, OLED용 글래스 (지오마텍사 제조) 상의 투명 전극 ITO 박막(10Ω/□)을 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기관 홀더에 ITO기관을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 HI-1을 넣고 챔버 내의 진공도가 10<sup>-7</sup> torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기관 위에 60 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HI-2을 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-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 20 nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HT-3을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착하였다. 정공 주입층 및 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 화합물 BH-1을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 BD-1을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 2 중량%로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 20 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 상기 발광층 위에 전자 전달층으로써 한쪽 셀에 화합물 ET-2를 넣고, 또 다른 셀에는 화합물 EI-1을 각각 넣은 후, 두 물질을 같은 속도로 증발시켜 50 중량%로 도핑함으로써 상기 발광층 위에 35 nm의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서, 전자 주입층으로 화합물 EI-1을 상기 전자 전달층 위에 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착장비를 이용하여 Al 음극을 상기 전자 주입층 위에 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다. 재료 별로 각 화합물은 10<sup>-6</sup> torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0203] [소자 제조예 5-1 및 5-2] 본원에 따른 화합물을 전자 버퍼 재료로 포함하는 청색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조

[0204] 전자 전달층의 두께를 25 nm로 줄이고 발광층과 전자 전달층 사이에 전자 버퍼층 5 nm를 삽입한 것 외에는 비교예 5-1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0205] 이상과 같이 제조된 유기 전계 발광 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 구동 전압, 발광 효율 및 CIE 색 좌표를 하기 표 5에 나타내었다.

[0206] [표 5]

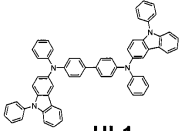
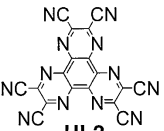
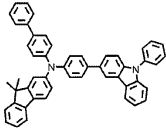
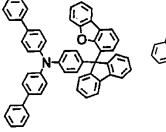
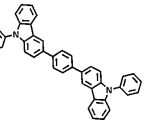
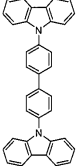
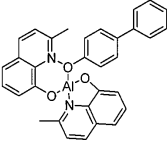
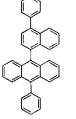
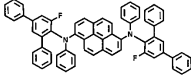
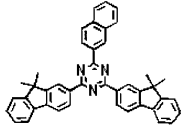
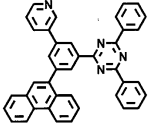

	전자 버퍼 재료	전압 (V)	효율 (cd/A)	색좌표 (x)	색좌표 (y)
비교예 5-1	-	4.2	5.8	139	88
소자 제조예 5-1	C-91	4.0	6.6	140	89
소자 제조예 5-2	C-92	4.1	6.2	140	90

[0207] [0208] 상기 표 5로부터, 본원의 유기 전계 발광 화합물을 전자 버퍼 재료로 포함한 OLED 소자는 전자 버퍼 재료를 포함하지 않은 OLED 소자에 비해 구동 전압을 강하시키고 발광 효율을 상승시킴으로써 소비 전력을 개선시킬 수 있

음을 알 수 있다.

[0209] 상기 소자 제조예들 및 상기 비교예들에 사용된 화합물을 하기 표 6에 나타내었다.

[0210] [표 6]

<p>정공 주입층/ 정공 전달층</p>	<div style="display: flex; flex-wrap: wrap; justify-content: space-around;"> <div style="text-align: center;">  <p><b>HI-1</b></p> </div> <div style="text-align: center;">  <p><b>HI-2</b></p> </div> <div style="text-align: center;">  <p><b>HT-1</b></p> </div> <div style="text-align: center;">  <p><b>HT-2</b></p> </div> <div style="text-align: center;">  <p><b>HT-3</b></p> </div> </div>
<p>발광층</p>	<div style="display: flex; flex-wrap: wrap; justify-content: space-around;"> <div style="text-align: center;">  <p><b>CBP</b></p> </div> <div style="text-align: center;">  <p><b>Balq</b></p> </div> <div style="text-align: center;">  <p><b>BH-1</b></p> </div> <div style="text-align: center;">  <p><b>BD-1</b></p> </div> </div>
<p>전자 전달층/ 전자 주입층</p>	<div style="display: flex; flex-wrap: wrap; justify-content: space-around;"> <div style="text-align: center;">  <p><b>ET-1</b></p> </div> <div style="text-align: center;">  <p><b>ET-2</b></p> </div> <div style="text-align: center;">  <p><b>EI-1</b></p> </div> </div>

[0211]

专利名称(译)	标题：有机电致发光化合物，有机电致发光材料和含有它们的有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020170059408A</a>	公开(公告)日	2017-05-30
申请号	KR1020160153209	申请日	2016-11-17
[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		
当前申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	MOON DOO HYEON 문두현 YANG JEONG EUN 양정은		
发明人	문두현 양정은		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 C07D307/91 C07D333/76 C07D487/04 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0072 C07D487/04 C09K11/06 C09K2211/1018 H01L51/0052 H01L51/0059 H01L51/006 H01L51/0061 H01L51/0065 H01L51/0067 H01L51/0071 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/0085 H01L51/5016 H01L51/5076 H01L51/508 H01L51/5096 H01L2251/5384		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020150162980 2015-11-20 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，有机电致发光材料和包含其的有机电致发光器件。关于根据本发明的有机电致发光化合物，驱动电压低且低，或者可以提供电流效率和/或功率效率优异的有机电致发光器件。

