



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0101281
(43) 공개일자 2019년08월30일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C09K 11/06 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2019-0000623

(22) 출원일자 2019년01월03일

심사청구일자 **없음**

(30) 우선권주장

1020180021237 2018년02월22일 대한민국(KR)

(71) 출원인

롭엔드하스전자재료코리아유한회사

충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)

(72) 발명자

오홍세

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

양정은

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

장춘

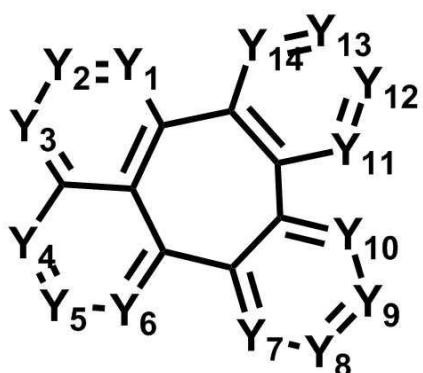
전체 청구항 수 : 총 9 항

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

(57) 요약

본원은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써 구동전압, 발광효율 및/또는 수명 특성이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류

C09K 2211/1033 (2013.01)

C09K 2211/1044 (2013.01)

C09K 2211/1048 (2013.01)

C09K 2211/1051 (2013.01)

C09K 2211/1059 (2013.01)

C09K 2211/1088 (2013.01)

C09K 2211/1092 (2013.01)

(72) 발명자

이태진

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

조상희

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

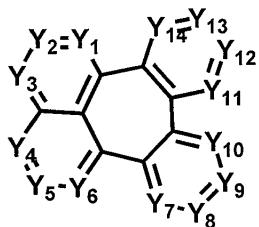
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물:

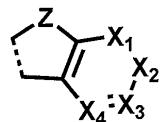
[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Y_1 내지 Y_{14} 는 각각 독립적으로 N 또는 CR_1 이고, R_1 이 복수 개인 경우 각각의 R_1 은 서로 같거나 상이할 수 있고;
단, Y_1 내지 Y_{14} 중 적어도 한 쌍의 인접한 두 개는 하기 화학식 2와 융합하여 고리를 형성하며;

[화학식 2]



Z 는 NR_2 , O , S , CR_3R_4 또는 SiR_5R_6 이고;

X_1 내지 X_4 는 각각 독립적으로 N 또는 CR_7 이며, R_7 이 복수 개인 경우 각각의 R_7 은 서로 같거나 상이할 수 있고;
점선은 화학식 1의 Y_1 내지 Y_{14} 중 인접한 두 개와 융합하는 부위를 의미하고;

R_2 은 $\xi-La-(Ar)a$ 이며;

La는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이고;

Ar은 수소, 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, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴(3-30원)헤테로아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이고;

R_1 및 R_7 은 각각 독립적으로 수소, 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, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴(3-30원)헤테로아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이고;

릴아미노, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴(3-30원)헤테로아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 두 개의 R₁ 또는 인접한 두 개의 R₇은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있으며;

R₃ 내지 R₆은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; R₃과 R₄ 또는 R₅와 R₆은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

a는 1 내지 4의 정수이고, a가 2 이상인 경우 각각의 Ar은 서로 같거나 상이할 수 있다.

청구항 2

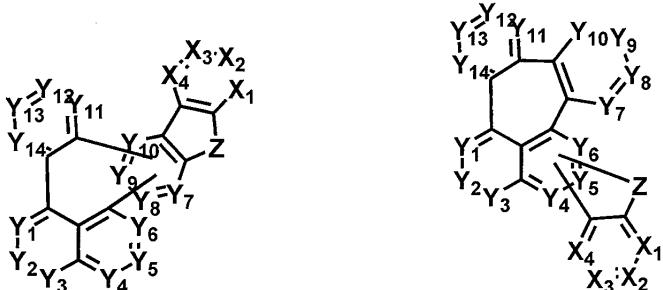
제1항에 있어서, 상기 La, Ar, R₁ 및 R₃ 내지 R₇에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (3-30원)헤테로아릴(렌), 치환된 (C3-C30)시클로알킬(렌), 치환된 (C1-C30)알콕시, 치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환된 (C6-C30)아릴(3-30원)헤테로아릴아미노, 및 치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노의 치환기는 각각 독립적으로 중수소; 할로겐; 시아노; 카르복실; 니트로; 히드록시; (C1-C30)알킬; 할로(C1-C30)알킬; (C2-C30)알케닐; (C2-C30)알카닐; (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 (5-30원)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; 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 3 및 4 중 어느 하나로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 3]

[화학식 4]



상기 화학식 3 및 4에서,

Y₁ 내지 Y₁₄, Z 및 X₁ 내지 X₄은 청구항 1에서의 정의와 동일하다.

청구항 4

제1항에 있어서,

Z는 NR₂, O 또는 S이고;

La는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이며;

Ar은 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴(5-15원)헤테로아릴아미노이고;

R_1 은 수소이며;

R_7 은 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헵테로아릴, 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴(5-15원)헵테로아릴아미노이고;

a는 1 또는 2인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

Z는 NR₂, O 또는 S이고;

La는 단일결합, 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 비치환된 (5-15원)헵테로아릴렌이며;

Ar은 비치환된 (C6-C15)아릴, (C6-C15)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헵테로아릴, (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노, 또는 비치환된 (C6-C15)아릴(5-15원)헵테로아릴아미노이고;

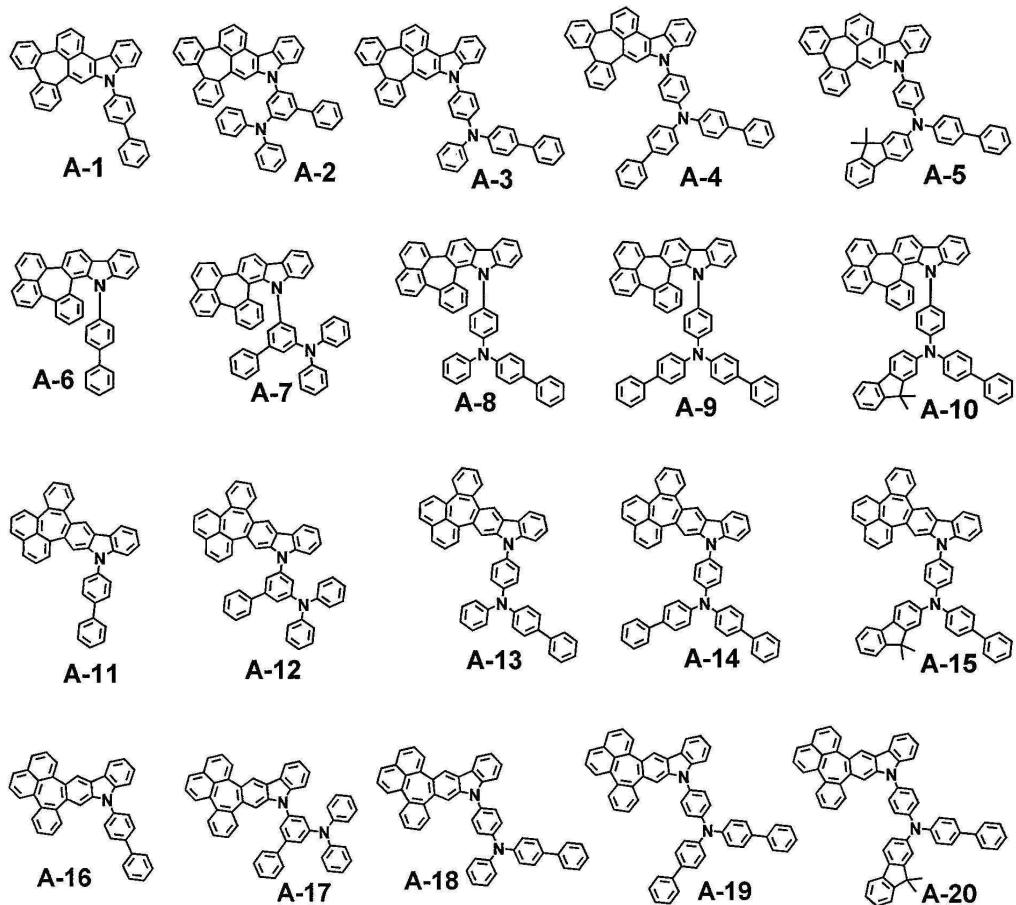
R_1 은 수소이며;

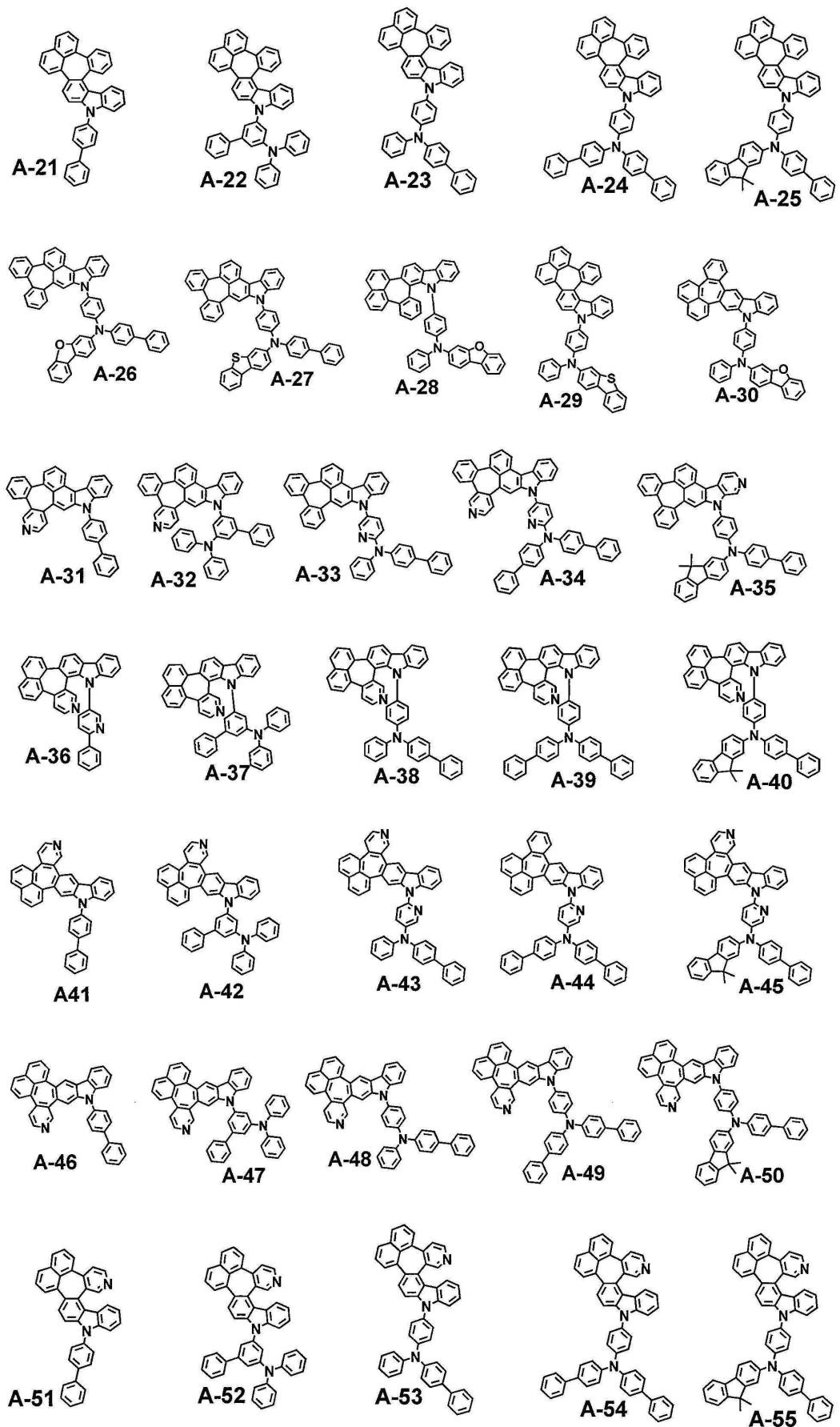
R_7 은 수소, 비치환된 (C6-C15)아릴, (C6-C15)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헵테로아릴, (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노, 또는 비치환된 (C6-C15)아릴(5-15원)헵테로아릴아미노이고;

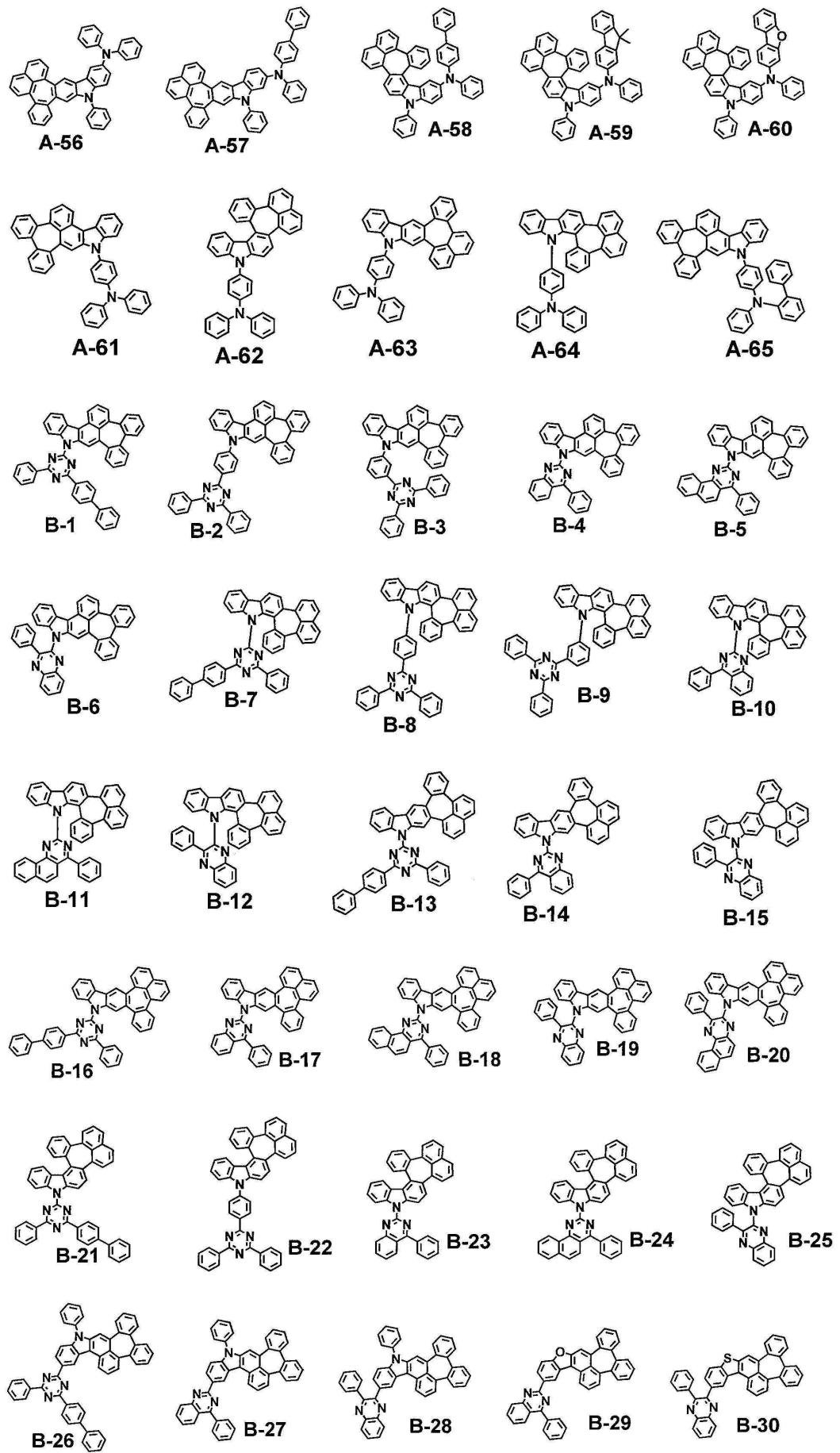
a는 1 또는 2인, 유기 전계 발광 화합물.

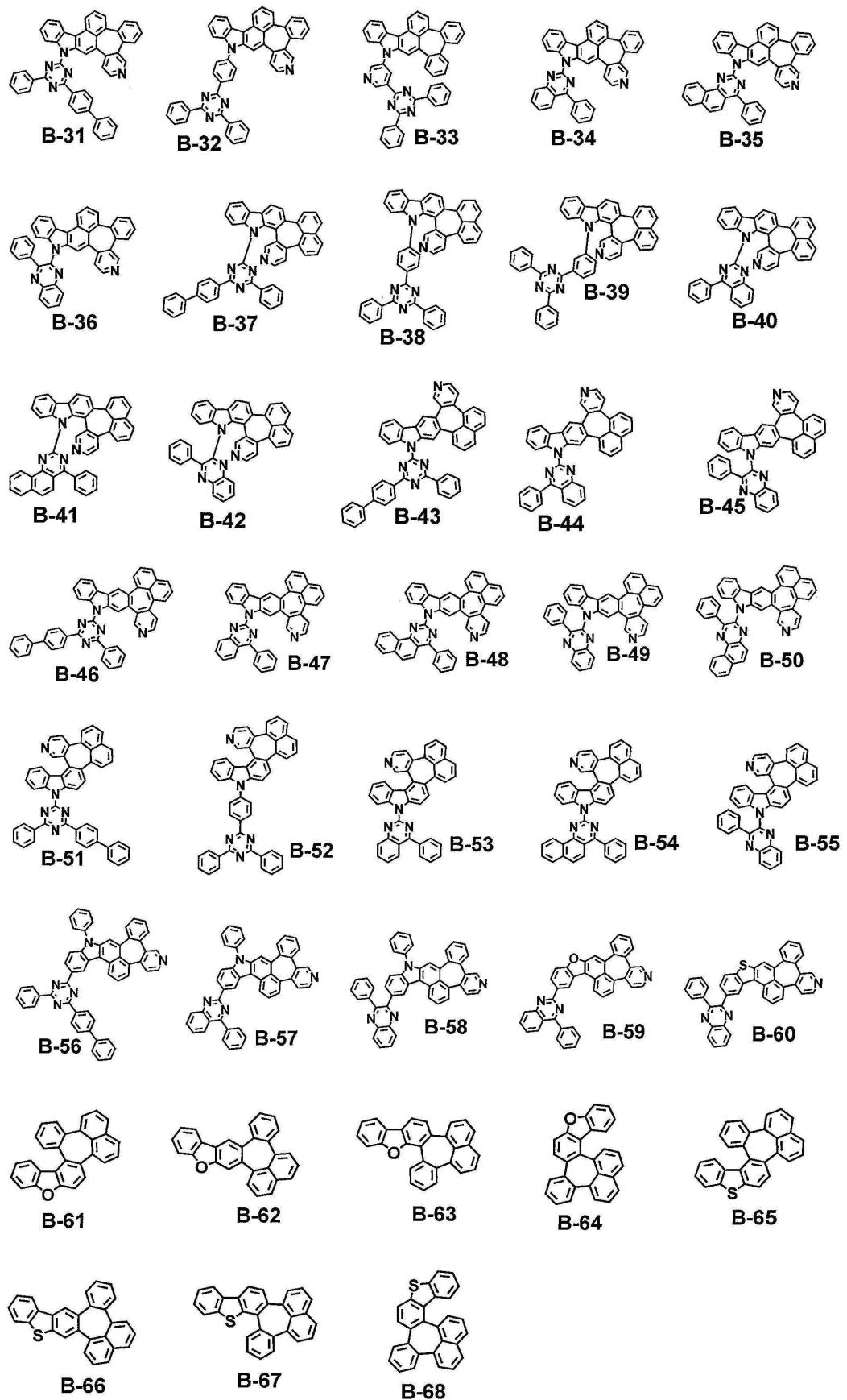
청구항 6

제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물들로부터 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물:









청구항 7

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

청구항 8

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

청구항 9

제8항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 화합물을 발광층, 정공전달 대역 또는 이들 모두에 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명**기술 분야**

[0001] 본원은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 전계 발광 소자(electroluminescent device; EL 소자)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 별로는 비스(2-(2'-벤조티에닐)-피리디네이토-N,C-3')이리듐(아세틸아세토네이트) [(acac)Ir(btp)₂], 트리스(2-페닐피리딘)이리듐 [Ir(ppy)₃] 및 비스(4,6-디플루오로페닐피리디네이토-N,C2)피콜리네이토이리듐 (Firpic) 등의 재료가 알려져 있다.

[0004] 종래 기술에서, 인광용 호스트 재료로는 4,4'-N,N'-디카르바졸-비페닐(CBP)가 가장 널리 알려져 있었다. 최근에는, 일본의 파이오니어 등이 정공 차단층의 재료로 사용되던 바토큐프로인(Bathocuproine, BCP) 및 알루미늄(III)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 = [(π /전압) × 전류효율]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(1m/W) 면에서 큰 이점이 없다. (3) 또한, 유기 전계 발광 소자에 사용할 경우, 작동 수명 측면에서도 만족스럽지 못하며, 발광 효율도 여전히 개선이 요구된다.

[0006] 또한, 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 물질을 사용한 경우 유기 전계 발광 소자는 양자 효율 및 수명이 저하되는 문제가 있었다. 그 이유는 유기 전계 발광 소자를 높은 전류에서 구동하게 되면, 양극(애노드)과 정공 주입층 사이에서 열 스트레스(thermal stress)가 발생하고, 이러한 열 스트레스에 의해 소자의 수명이 급격히 저하되기 때문이다. 또한, 정공 주입층에 사용되는 유기물질은 정공의 운동성이 매우 크기 때문에, 정공과 전자의 전하 밸런스(hole-electron charge balance)가 깨지고 이로 인해 양자 효율(cd/A)이 낮아지게 된다.

[0007] 발광 효율, 구동 전압 및/또는 수명을 개선시키기 위하여 유기 전계 발광 소자의 유기층에 여러 재료들 또는 컨셉들이 제안되어 왔으나, 현실적으로 사용하기에는 만족스럽지 못하였다.

[0008] 한국 등록특허공보 제0573137호는 플루오렌 구조와 카바졸 구조를 포함하는 유기 전계 발광 화합물을 개시하고 있으나, 여전히 구동전압, 발광효율 및 수명의 측면에서 개선될 필요성을 갖고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0009] (특허문헌 0001) 한국 등록특허공보 제0573137호 (2006.04.17 등록)

발명의 내용

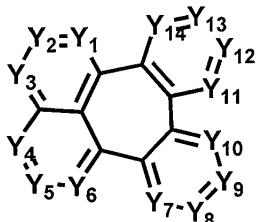
해결하려는 과제

[0010] 본원의 목적은, 첫째로 구동전압, 발광효율 및/또는 수명 특성이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조하는데 효과적인 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며, 둘째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0011] 일반적으로 낮은 유리 전이 온도를 갖는 물질로 구성된 박막은 소자 구동 시 발생되는 열에 의해서 쉽게 변형될 수 있으며, 박막 내에서의 전하 이동성을 감소시켜 OLED 소자의 성능을 저하시킬 수 있다. 따라서, OLED 소자에서 높은 유리 전이 온도를 갖는 물질이 유리할 수 있다. 유리 전이 온도를 높일 수 있는 여러 가지 방법 중 비교적 쉽게 실시할 수 있는 방법은 치환기를 결합시킴으로써 분자량을 증가시키는 것이나. 그러나, 이 방법에 따르면 유기 화합물의 증착 온도도 상승하기 때문에 한계가 있다. 이에, 본 발명자들은 예의 연구한 결과, 본원의 유기 전계 발광 화합물이 뒤틀린 구조를 가짐으로써 같은 분자량을 갖는 다른 화합물들에 비하여 높은 유리 전이 온도(T_g)를 가져 우수한 열적 안정성(thermal stability)을 제공할 수 있고, 그에 따라 본원 발명의 과제 달성을 기여할 수 있음을 발견하였다. 구체적으로, 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0012] [화학식 1]



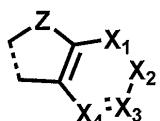
[0013]

[0014] 상기 화학식 1에서

[0015] Y_1 내지 Y_{14} 는 각각 독립적으로 N 또는 CR_1 이고, R_1 이 복수 개인 경우 각각의 R_1 은 서로 같거나 상이할 수 있고;

[0016] 단, Y_1 내지 Y_{14} 중 적어도 한 쌍의 인접한 두 개는 하기 화학식 2와 융합하여 고리를 형성하며;

[0017] [화학식 2]



[0018]

[0019] Z는 NR_2 , O, S, CR_3R_4 또는 SiR_5R_6 이고;

[0020] X_1 내지 X_4 는 각각 독립적으로 N 또는 CR_7 이며, R_7 이 복수 개인 경우 각각의 R_7 은 서로 같거나 상이할 수 있고;

[0021] 점선은 화학식 1의 Y_1 내지 Y_{14} 중 인접한 두 개와 융합하는 부위를 의미하고;

[0022] $\xi-\text{La-(Ar)}_a$
R₂은 이며;

[0023] La는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헵테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이고;

[0024] Ar은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헵테로아릴, 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, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴(3-30원)헵테로아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이고;

[0025] R₁ 및 R₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헵테로아릴, 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, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴(3-30원)헵테로아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 두 개의 R₁ 또는 인접한 두 개의 R₇은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있으며;

[0026] R₃ 내지 R₆은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헵테로아릴이거나; R₃과 R₄ 또는 R₅와 R₆은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

[0027] a는 1 내지 4의 정수이고, a가 2 이상인 경우 각각의 Ar은 서로 같거나 상이할 수 있다.

발명의 효과

[0028] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용하면 낮은 구동전압, 높은 발광효율 및/또는 우수한 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0029] 도 1은 본원의 유기 전계 발광 화합물의 대표적인 화학식이다

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0030] 이하에서 본원을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본원의 범위를 제한하도록 해석되어서는 안된다.

[0031] 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.

[0032] 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 베퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료일 수 있다.

[0033] 본원의 유기 전계 발광 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 상기 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자를 구성하는 1 이상의 층에 포함될 수 있고, 이에 한정되는 것은 아니지만, 상기 화학식 1의 화합물은 발광층, 정공전달 대역 및/또는 전자전달 대역을 구성하는 층 중 적어도 하나의 층에 포함될 수 있다. 상기 화학식 1의 화합물이 발광층에 포함되는 경우 화학식 1의 화합물은 호스트 재료로 포함될 수 있다. 여기서, 호스트 재료는 녹색 또는 적색 발광 유기 전계 발광 소자의 호스트 재료일 수 있다. 또한, 상

기 화학식 1의 화합물이 정공전달 대역에 포함되는 경우 화학식 1의 화합물은 정공전달층, 정공보조층 및/또는 발광보조층에 포함될 수 있고, 각각 정공전달 재료, 정공보조 재료 및/또는 발광보조 재료로 포함될 수 있다. 또한, 상기 화학식 1의 화합물이 전자전달 대역에 포함되는 경우 화학식 1의 화합물은 정공차단층, 전자전달층, 전자버퍼층 및/또는 전자주입층에 포함될 수 있고, 각각 정공차단 재료, 전자전달 재료, 전자버퍼 재료 및/또는 전자주입 재료로 포함될 수 있다.

[0034] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

[0035] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은 쇄를 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"은 쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 2 내지 20개, 더 바람직하게는 2 내지 10개이다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알키닐"은 쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알키닐을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 2 내지 20개, 더 바람직하게는 2 내지 10개이다. 상기 알키닐의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬(렌)"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, 테트라하이드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라하이드로피란 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 25개, 더 바람직하게는 6 내지 18개이다. 상기 아릴은 스피로 구조를 가진 것을 포함한다. 상기 아릴의 예로서, 폐닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 폐닐나프틸, 나프틸페닐, 폐닐터페닐, 플루오레닐, 폐닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 폐난트레닐, 폐닐폐난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 폐릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 스피로비플루오레닐, 아줄레닐기 등이 있다. 더욱 구체적으로는, 폐닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-안트릴기, 2-안트릴기, 9-안트릴기, 벤즈안트릴기, 1-폐난트릴기, 2-폐난트릴기, 3-폐난트릴기, 4-폐난트릴기, 9-폐난트릴기, 나프타세닐기, 피레닐기, 1-크리세닐기, 2-크리세닐기, 3-크리세닐기, 4-크리세닐기, 5-크리세닐기, 6-크리세닐기, 벤조[c]폐난트릴기, 벤조[g]크리세닐기, 1-트리페닐레닐기, 2-트리페닐레닐기, 3-트리페닐레닐기, 4-트리페닐레닐기, 1-플루오레닐기, 2-플루오레닐기, 3-플루오레닐기, 4-플루오레닐기, 9-플루오레닐기, 벤조플루오레닐기, 디벤조플루오레닐기, 2-비페닐일기, 3-비페닐일기, 4-비페닐일기, o-터페닐기, m-터페닐-4-일기, m-터페닐-3-일기, m-터페닐-2-일기, p-터페닐-4-일기, p-터페닐-3-일기, p-터페닐-2-일기, m-쿼터페닐기, 3-플루오란테닐기, 4-플루오란테닐기, 8-플루오란테닐기, 9-플루오란테닐기, 벤조플루오란테닐기, o-톨릴기, m-톨릴기, p-톨릴기, 2,3-자일릴기, 3,4-자일릴기, 2,5-자일릴기, 메시틸기, o-쿠멘일기, m-쿠멘일기, p-쿠멘일기, p-t-부틸페닐기, p-(2-페닐프로필)페닐기, 4'-메틸비페닐일기, 4"-t-부틸-p-터페닐-4-일기, 9,9-디메틸-1-플루오레닐기, 9,9-디메틸-2-플루오레닐기, 9,9-디메틸-3-플루오레닐기, 9,9-디페닐-4-플루오레닐기를 들 수 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, 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, 벤조인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 벤조퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 벤조퀴녹살리닐, 나프티리디닐, 카바졸릴, 벤조카바졸릴, 디벤조카바졸릴, 폐녹사진일, 폐노티아진일, 폐난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 더욱 구체적으로는, 1-피롤릴기, 2-피롤릴기, 3-피롤릴기,

피라지닐기, 2-피리디닐기, 2-피리미디닐기, 4-피리미디닐기, 5-피리미디닐기, 1,2,3-트리아진-4-일기, 1,2,4-트리아진-3-일기, 1,3,5-트리아진-2-일기, 1-이미다졸릴기, 2-이미다졸릴기, 1-인돌리디닐기, 2-인돌리디닐기, 3-인돌리디닐기, 5-인돌리디닐기, 6-인돌리디닐기, 7-인돌리디닐기, 8-인돌리디닐기, 2-이미다조피리디닐기, 3-이미다조피리디닐기, 5-이미다조피리디닐기, 6-이미다조피리디닐기, 7-이미다조피리디닐기, 8-이미다조피리디닐기, 3-피리디닐기, 4-피리디닐기, 1-인돌릴기, 2-인돌릴기, 3-인돌릴기, 4-인돌릴기, 5-인돌릴기, 6-인돌릴기, 7-인돌릴기, 1-이소인돌릴기, 2-이소인돌릴기, 3-이소인돌릴기, 4-이소인돌릴기, 5-이소인돌릴기, 6-이소인돌릴기, 7-이소인돌릴기, 2-푸릴기, 3-푸릴기, 2-벤조푸라닐기, 3-벤조푸라닐기, 4-벤조푸라닐기, 5-벤조푸라닐기, 6-벤조푸라닐기, 7-벤조푸라닐기, 1-이소벤조푸라닐기, 3-이소벤조푸라닐기, 4-이소벤조푸라닐기, 5-이소벤조푸라닐기, 6-이소벤조푸라닐기, 7-이소벤조푸라닐기, 2-퀴놀릴기, 3-퀴놀릴기, 4-퀴놀릴기, 5-퀴놀릴기, 6-퀴놀릴기, 7-퀴놀릴기, 8-퀴놀릴기, 1-이소퀴놀릴기, 3-이소퀴놀릴기, 4-이소퀴놀릴기, 5-이소퀴놀릴기, 6-이소퀴놀릴기, 7-이소퀴놀릴기, 8-이소퀴놀릴기, 2-퀴녹살리닐기, 5-퀴녹살리닐기, 6-퀴녹살리닐기, 1-카바졸릴기, 2-카바졸릴기, 3-카바졸릴기, 4-카바졸릴기, 9-카바졸릴기, 아자카바졸릴-1-일기, 아자카바졸릴-2-일기, 아자카바졸릴-3-일기, 아자카바졸릴-4-일기, 아자카바졸릴-5-일기, 아자카바졸릴-6-일기, 아자카바졸릴-7-일기, 아자카바졸릴-8-일기, 아자카바졸릴-9-일기, 1-페난트리디닐기, 2-페난트리디닐기, 3-페난트리디닐기, 4-페난트리디닐기, 6-페난트리디닐기, 7-페난트리디닐기, 8-페난트리디닐기, 9-페난트리디닐기, 10-페난트리디닐기, 1-아크리디닐기, 2-아크리디닐기, 3-아크리디닐기, 4-아크리디닐기, 9-아크리디닐기, 2-옥사졸릴기, 4-옥사졸릴기, 5-옥사졸릴기, 2-옥사디아졸릴기, 5-옥사디아졸릴기, 3-푸라자닐기, 2-티에닐기, 3-티에닐기, 2-메틸피롤-1-일기, 2-메틸피롤-3-일기, 2-메틸피롤-4-일기, 2-메틸피롤-5-일기, 3-메틸피롤-1-일기, 3-메틸피롤-2-일기, 3-메틸피롤-4-일기, 3-메틸피롤-5-일기, 2-t-부틸피롤-4-일기, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일기, 2-메틸-1-인돌릴기, 4-메틸-1-인돌릴기, 2-메틸-3-인돌릴기, 4-메틸-3-인돌릴기, 2-t-부틸-1-인돌릴기, 4-t-부틸-1-인돌릴기, 2-t-부틸-3-인돌릴기, 4-t-부틸-3-인돌릴기, 1-디벤조푸라닐기, 2-디벤조푸라닐기, 3-디벤조푸라닐기, 4-디벤조푸라닐기, 1-디벤조티오페닐기, 2-디벤조티오페닐기, 3-디벤조티오페닐기, 4-디벤조티오페닐기, 1-실라플루오레닐기, 2-실라플루오레닐기, 3-실라플루오레닐기, 4-실라플루오레닐기, 1-게르마플루오레닐기, 2-게르마플루오레닐기, 3-게르마플루오레닐기, 4-게르마플루오레닐기를 들 수 있다. 본원에서 "할로겐"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0036]

또한 "오소(ortho)", "메타(meta)", "파라(para)"는 모든 치환기의 치환 위치를 뜻하며, 오소(ortho) 위치란 치환기의 위치가 바로 이웃하는 화합물을 나타내고, 일 예로, 벤젠일 경우 1, 2 자리를 뜻하고, 메타(meta) 위치란 바로 이웃 치환위치의 다음 치환위치를 나타내며, 벤젠을 예시로 했을 때 1, 3 자리를 뜻하며, 파라(para) 위치란 메타(meta) 위치의 다음 치환위치로서, 벤젠을 예시로 했을 때 1, 4 자리를 뜻한다.

[0037]

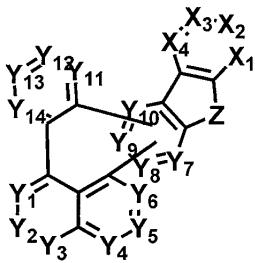
또한, 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환기)로 대체되는 것을 뜻한다. 본원의 La, Ar, R₁ 및 R₃ 내지 R₇에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (3-30원)헵테로아릴(렌), 치환된 (C3-C30)시클로알킬(렌), 치환된 (C1-C30)알콕시, 치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환된 디(C1-C30)알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환된 (C6-C30)아릴(3-30원)헵테로아릴아미노, 및 치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노의 치환기는 각각 독립적으로 중수소; 할로겐; 시아노; 카르복실; 니트로; 히드록시; (C1-C30)알킬; 할로(C1-C30)알킬; (C2-C30)알케닐; (C2-C30)알카닐; (C1-C30)알콕시; (C1-C30)알킬티오; (C3-C30)시클로알킬; (C3-C30)시클로알케닐; (3-7원)헵테로시클로알킬; (C6-C30)아릴옥시; (C6-C30)아릴티오; (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30 원)헵테로아릴; (5-30원)헵테로아릴로 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; 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 이상이고, 본원의 일양태에 따르면, 상기 치환기는 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬 및/또는 (C6-C15)아릴이다. 구체적으로, 상기 치환기는 각각 독립적으로 메틸 및/또는 페닐일 수 있다.

[0038]

상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 3 및 4 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0039]

[화학식 3]



[0040]

상기 화학식 3 및 4에서,

[0042]

Y₁ 내지 Y₁₄, Z 및 X₁ 내지 X₄은 화학식 1에서의 정의와 동일하다.

[0043]

상기 화학식 1에서, Y₁ 내지 Y₁₄는 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이고, R₁이 복수 개인 경우 각각의 R₁은 서로 같거나 상이할 수 있다. 단, Y₁ 내지 Y₁₄ 중 적어도 한 쌍의 인접한 두 개는 상기 화학식 2와 융합하여 고리를 형성 한다.

[0044]

상기 화학식 2에서, X₁ 내지 X₄은 각각 독립적으로 N 또는 CR₇이며, R₇이 복수 개인 경우 각각의 R₇은 서로 같거나 상이할 수 있고, R₂은 $\xi\text{-La}\{Ar\}_a$ 이다.

[0045]

상기 화학식 2에서, Z는 NR₂, O, S, CR₃R₄ 또는 SiR₅R₆이다. 본원의 일양태에 있어서는, Z는 NR₂, O 또는 S이다.

[0046]

상기 화학식 2에서, La는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헵테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이다. 본원의 일양태에 있어서는, La는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헵테로아릴렌이고, 본원의 다른 일양태에 있어서는, La는 단일결합, 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 비치환된 (5-15원)헵테로아릴렌이다. 구체적으로, La는 단일결합, 페닐렌, 비페닐렌, 피리딜렌, 트리아진일렌, 퀴나졸리닐렌, 퀴녹살리닐렌, 벤조퀴나졸리닐렌, 벤조퀴녹살리닐렌 등일 수 있다.

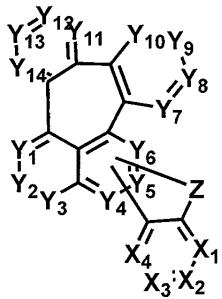
[0047]

상기 화학식 2에서, Ar은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헵테로아릴, 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, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴(3-30원)헵테로아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이다. 본원의 일양태에 있어서는, Ar은 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헵테로아릴, 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴(5-15원)헵테로아릴아미노이고, 본원의 다른 일양태에 있어서는, Ar은 비치환된 (C6-C15)아릴; (C6-C15)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헵테로아릴; (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노; 또는 비치환된 (C6-C15)아릴(5-15원)헵테로아릴아미노이다. 구체적으로, Ar은 페닐, 비페닐, 디페닐트리아지닐, 디페닐아미노, 페닐비페닐아미노, 디비페닐아미노, 비페닐디메틸플루오레닐아미노, 페닐디벤조푸라닐아미노, 페닐디벤조티오페닐아미노, 비페닐디벤조푸라닐아미노, 비페닐디벤조티오페닐아미노 등일 수 있다.

[0048]

상기 화학식 2에서, R₁ 및 R₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헵테로아릴, 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 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴(3-30원)헵테로아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 두 개의 R₁ 또는 인접한 두 개의 R₇은 서로 연결되어

[화학식 4]



고리를 형성할 수 있다.

[0049] 본원의 일양태에 있어서는, R₁은 수소이다.

[0050] 본원의 일양태에 있어서는, R₇은 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴(5-15원)헤테로아릴아미노이고, 본원의 다른 일양태에 있어서는, R₇은 수소; 비치환된 (C6-C15)아릴; (C6-C15)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴; (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노; 또는 비치환된 (C6-C15)아릴(5-15원)헤테로아릴아미노이다. 구체적으로, R₇은 수소, 폐닐비페닐트리아지닐, 폐닐퀴나졸리닐, 폐닐퀴녹살리닐, 디페닐아미노, 폐닐비페닐아미노, 폐닐디메틸플루오레닐아미노, 폐닐디벤조푸라닐아미노 등일 수 있다.

[0051] 상기 화학식 2에서, R₃ 내지 R₆은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; R₃과 R₄ 또는 R₅와 R₆은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

[0052] a는 1 내지 4의 정수이고, a가 2 이상인 경우 각각의 Ar은 서로 같거나 상이할 수 있다. 본원의 일양태에 있어서는, a는 1 또는 2이다.

[0053] 본원의 일양태에 따르면, Z는 NR₂, O 또는 S이고; La는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이며; Ar은 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴(5-15원)헤테로아릴아미노이고; R₁은 수소이며; R₇은 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴(5-15원)헤테로아릴아미노이고; a는 1 또는 2이다.

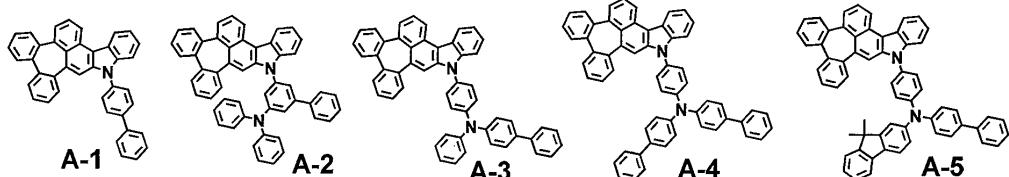
[0054] 본원의 다른 일양태에 따르면, Z는 NR₂, O 또는 S이고; La는 단일결합, 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이며; Ar은 비치환된 (C6-C15)아릴, (C6-C15)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노, 또는 비치환된 (C6-C15)아릴(5-15원)헤테로아릴아미노이고; R₁은 수소이며; R₇은 수소, 비치환된 (C6-C15)아릴, (C6-C15)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노, 또는 비치환된 (C6-C15)아릴(5-15원)헤테로아릴아미노이고; a는 1 또는 2이다.

[0055] 본원 화학식에서, 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 고리를 형성하는 경우, 상기 고리는 치환 또는 비치환된 (3-30원) 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리일 수 있다. 또한, 형성된 고리는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다. 예를 들면, 상기 융합된 고리는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜 고리, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 고리, 치환 또는 비치환된 나프탈렌 고리, 치환 또는 비치환된 폐난트렌 고리, 치환 또는 비환된 플루오렌 고리, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜 고리, 치환 또는 비치환된 벤조푸란 고리, 치환 또는 비치환된 인돌 고리, 치환 또는 비치환된 인덴 고리, 치환 또는 비치환된 벤젠 고리 또는 치환 또는 비치환된 카바졸 고리 형태일 수 있다.

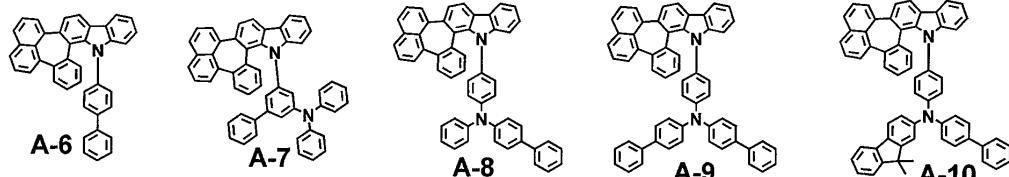
[0056] 본원 화학식에서, 헤테로아릴(렌)은 각각 독립적으로, B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다. 또한, 상기 헤테로원자는 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알록시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 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, 및 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기가 결합될 수 있다.

[0057]

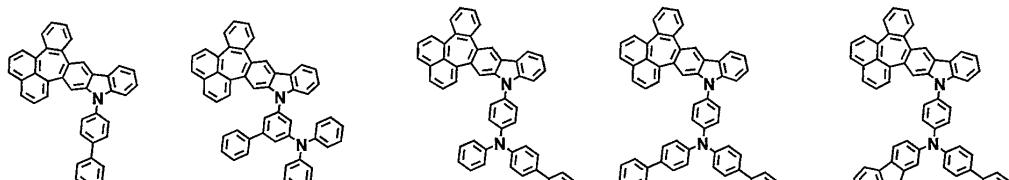
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.



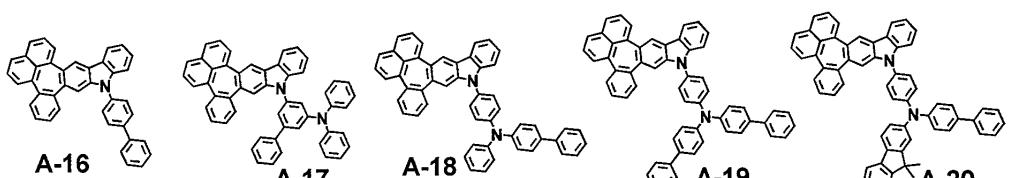
[0058]



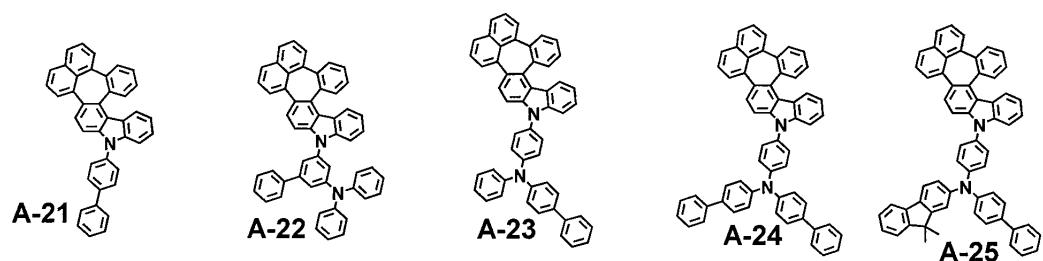
[0059]



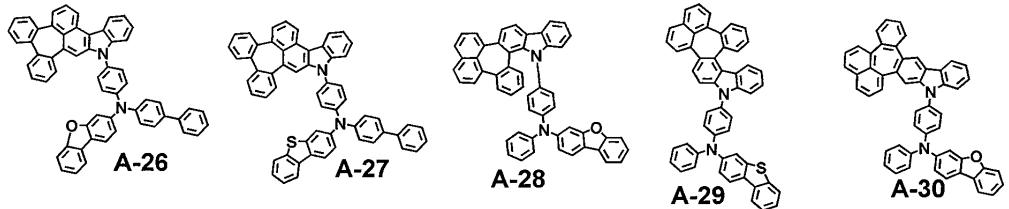
[0060]



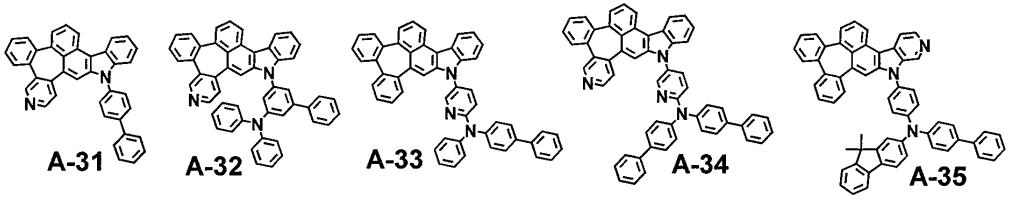
[0061]



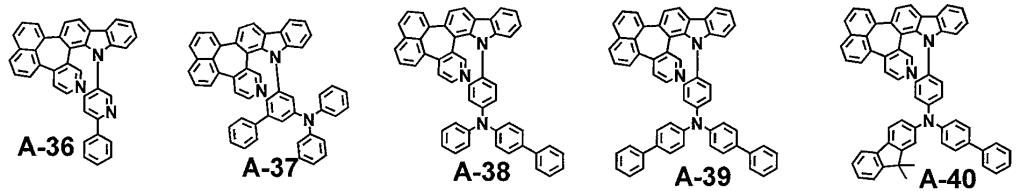
[0062]



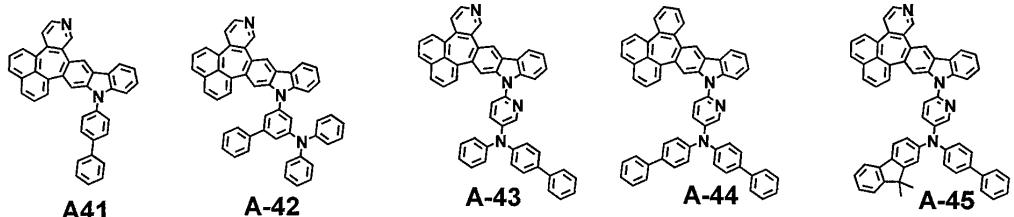
[0063]



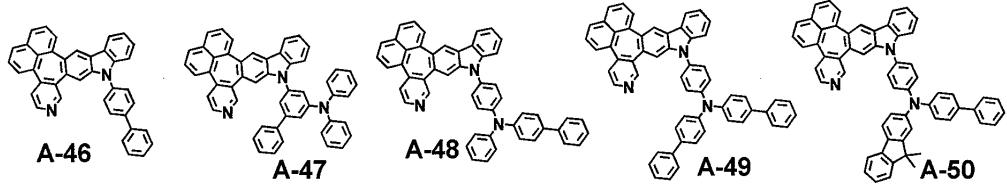
[0064]



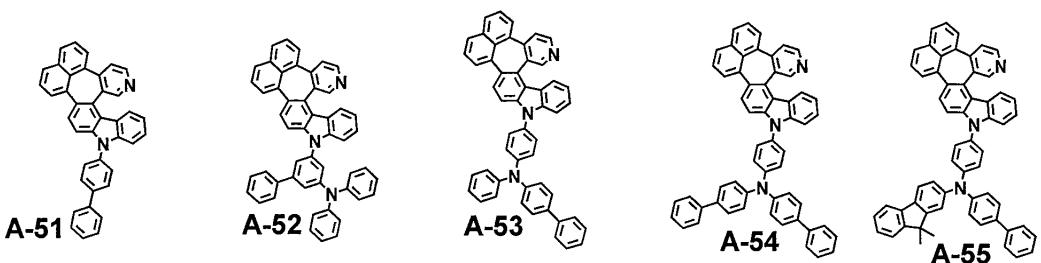
[0065]



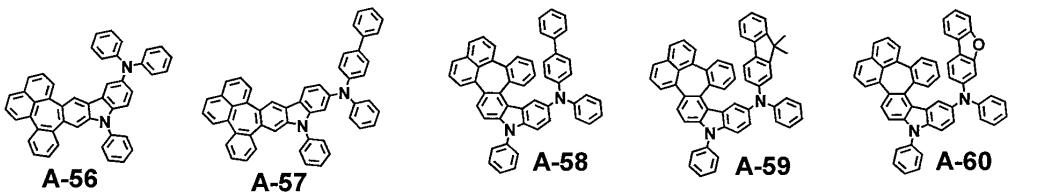
[0066]



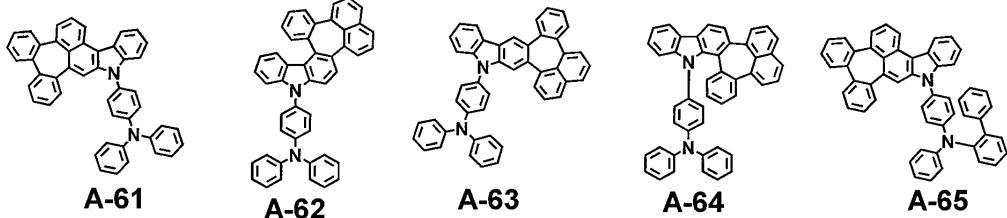
[0067]



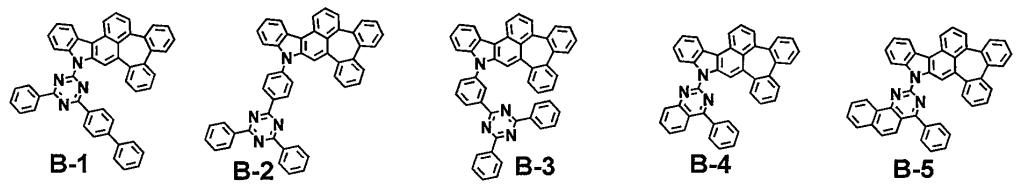
[0068]



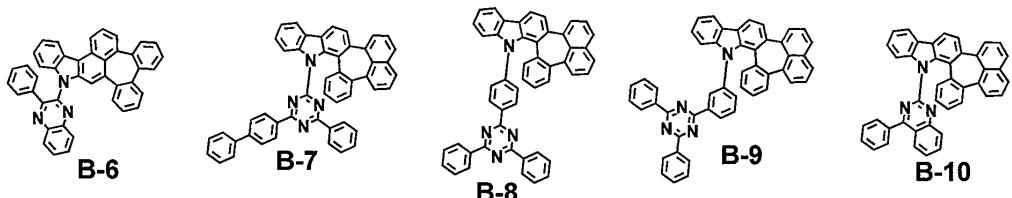
[0069]



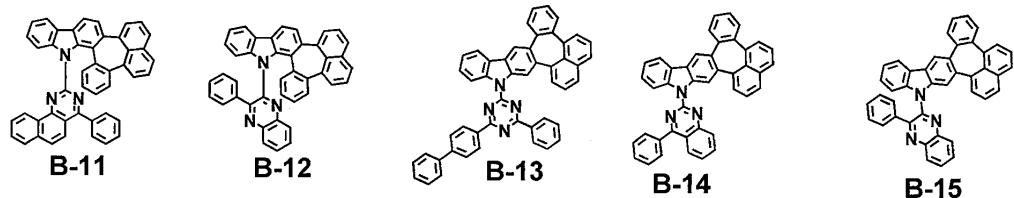
[0070]



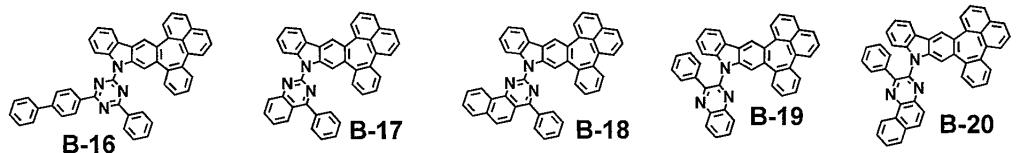
[0071]



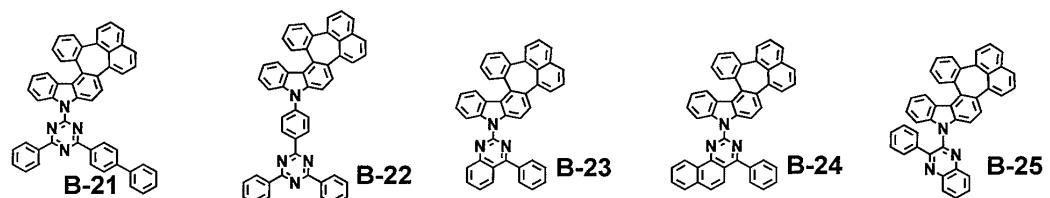
[0072]



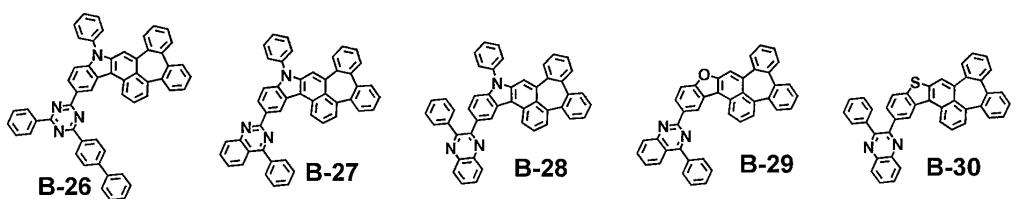
[0073]



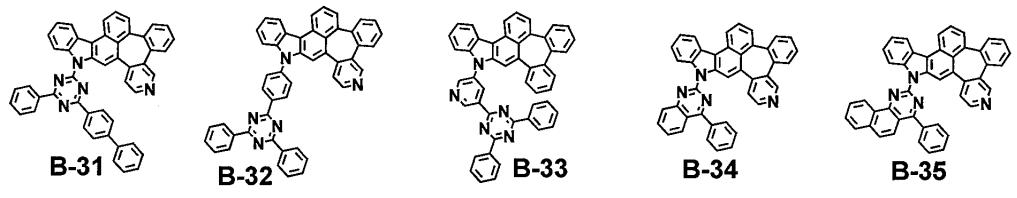
[0074]



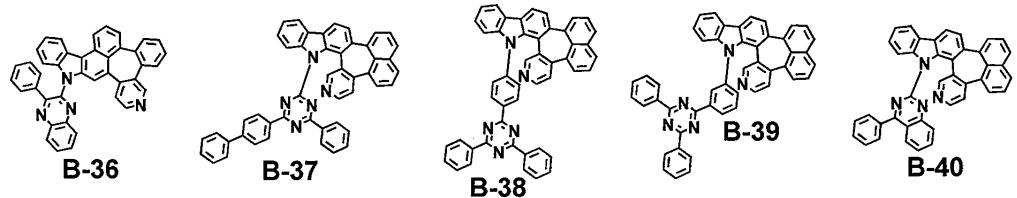
[0075]



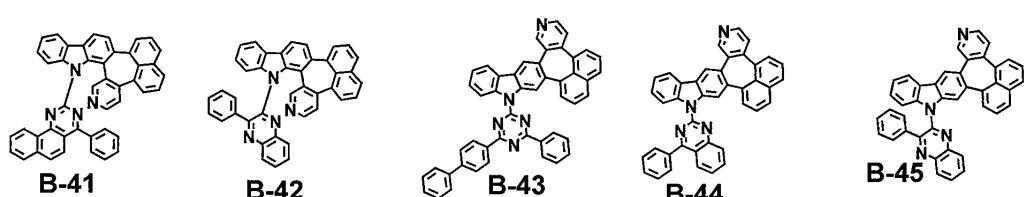
[0076]



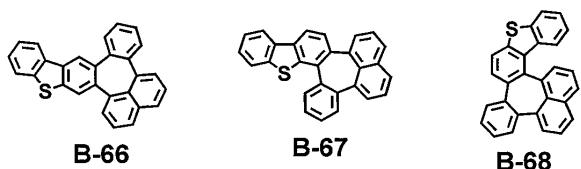
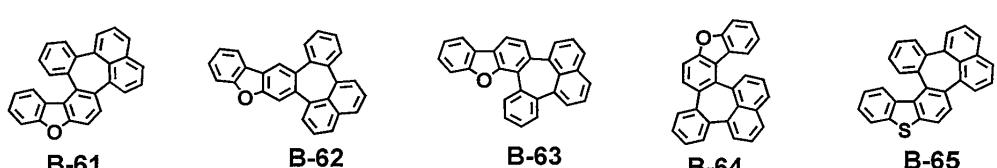
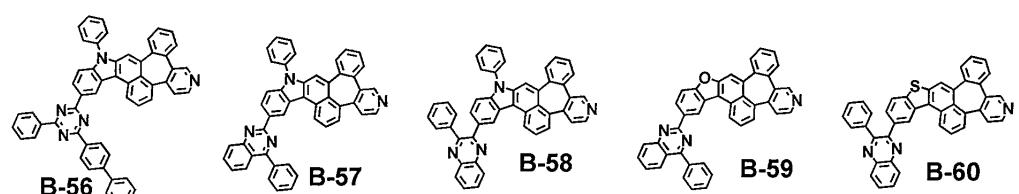
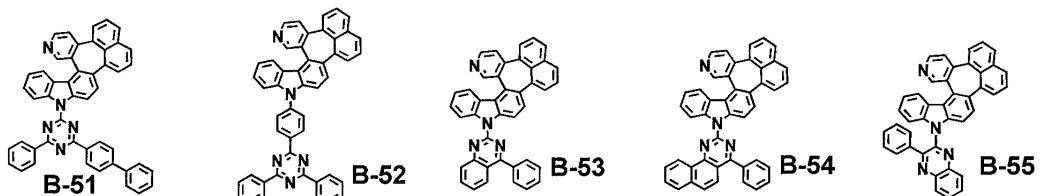
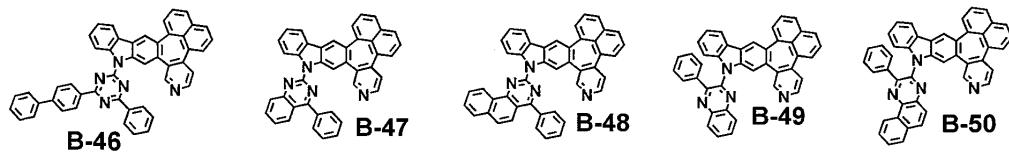
[0077]



[0078]



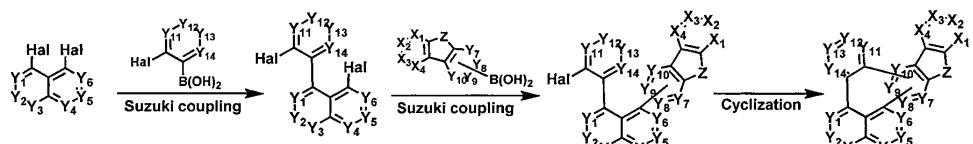
[0079]



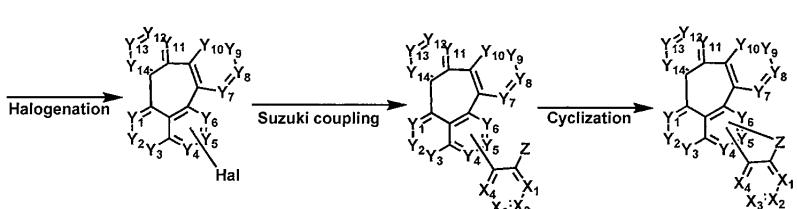
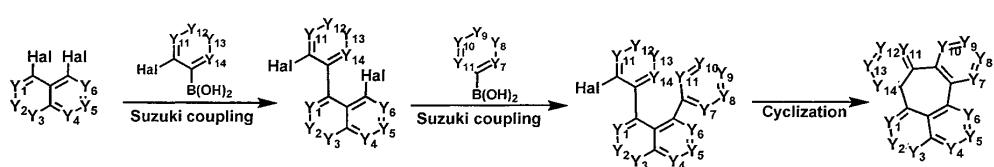
[0085] 본원에 따른 화학식 1의 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식에 나타난 바와 같이 제조할 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0086]

[반응식 1]



[반응식 2]



- [0091] 상기 반응식에서 Y_1 내지 Y_{14} , Z 및 X_1 내지 X_4 는 화학식 1에서의 정의와 동일하고, Hal은 할로겐이다.
- [0092] 상기에서 화학식 1로 표시되는 본원의 예시적 합성예를 설명하였지만, 이들은 모두 Buchwald-Hartwig cross-coupling 반응, Suzuki cross-coupling 반응, Intramolecular acid-induced cyclization 반응, Pd(II)-catalyzed oxidative cyclization 반응, Grignard 반응, Heck 반응, Cyclic Dehydration 반응, SN_1 치환 반응, SN_2 치환 반응, 및 Phosphine-mediated reductive cyclization 반응 등에 기초한 것으로 구체적 합성예에 명시된 치환기 이외에 화학식 1에 정의된 다른 치환기가 결합되더라도 상기 반응이 진행된다는 것을 당업자라면 쉽게 이해할 수 있을 것이다.
- [0093] 본원의 정공전달 대역은 정공전달층, 정공주입층, 전자차단층 및 정공보조층으로 이루어진 군으로부터 하나 이상의 층으로 구성될 수 있고, 상기 각 층들은 하나 이상의 층으로 이루어질 수 있다.
- [0094] 본원의 일양태에 의하면, 상기 정공전달 대역은 정공전달층을 포함한다. 또한, 상기 정공전달 대역은 정공전달 층을 포함하고, 정공주입층, 전자차단층 및 정공보조층 중 하나 이상의 층을 추가로 더 포함할 수 있다.
- [0095] 또한, 본원은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [0096] 상기 재료는 발광층의 호스트 재료이거나, 정공전달재료, 정공보조재료 또는 발광보조재료, 구체적으로 적색 발광 유기 전계 발광 소자의 정공전달재료, 정공보조재료 또는 발광보조재료일 수 있고, 정공전달층이 2개 층 이상일 경우 발광층에 인접한 정공전달층에 포함되는 정공전달재료(정공보조재료)일 수 있다.
- [0097] 상기 재료는 본원의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다. 2종 이상의 재료가 하나의 층에 포함되는 경우, 혼합증착되어 층을 형성할 수도 있고, 별도로 동시에 공증착되어 층을 형성할 수 있다.
- [0098] 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 베퍼층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층 중 어느 하나의 층 이상에 포함될 수 있다. 경우에 따라 바람직하게는, 발광층, 정공전달층, 정공보조층 또는 발광보조층 중 하나 이상에 포함될 수 있다. 정공전달층이 2개 층 이상인 경우 그 중 적어도 하나의 층에 사용될 수 있다. 예를 들어, 정공전달층에 사용될 경우, 본원의 유기 전계 발광 화합물은 정공전달 재료로서 포함될 수 있다.
- [0099] 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물이 발광층에 사용될 경우, 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는, 상기 발광층은 하나 이상의 도판트를 추가로 더 포함할 수 있다. 필요한 경우, 본원의 유기 전계 발광 화합물은 코호스트(co-host) 재료로 사용될 수 있다. 즉, 발광층은 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물(제1호스트 재료) 이외의 다른 유기 전계 발광 화합물을 제2호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다. 이 때, 제1호스트 재료와 제2호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.
- [0100] 본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로는 하나 이상의 인광 또는 형광 도판트를 사용할 수 있고, 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 화합물일 수 있고, 경우에 따라 바람직하게는, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토메탈화 착체 화합물일 수 있으며, 경우에 따라 더 바람직하게는, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물일 수 있다.
- [0101] 본원에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖는다.
- [0102] 상기 제1전극과 제2전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 베퍼층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다. 여기서 제2 전극은 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있고, 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다. 또한, 상기 정공 주입층은 p-도판트를, 상기 전자 주입층은 n-도판트를 추가로 도핑할 수 있다.
- [0103] 상기 유기물층에 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 추가로 포함할 수도 있다.
- [0104] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층은 1족, 2족, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란탄계열

금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속, 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체화합물을 추가로 포함할 수도 있다.

[0105] 또한, 본원의 상기 유기 전계 발광 소자는 본원의 화합물 이외에 당업계에 알려진 청색, 적색 또는 녹색 발광화합물을 포함하는 발광층 하나 이상을 더 포함함으로써 백색 발광을 할 수 있다. 또한, 필요에 따라, 황색 또는 오렌지색 발광층을 더 포함할 수도 있다.

[0106] 또한, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물은 양자점(QD)을 포함하는 유기 전계 발광 소자에도 사용될 수 있다.

[0107] 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 하나 이상의 층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 애노드 표면에 규소 및 알루미늄의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 캐소드 표면에 할로겐화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 유기 전계 발광 소자의 구동 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 SiO_x ($1 \leq X \leq 2$), AlO_x ($1 \leq X \leq 1.5$), SiON , SiAlON 등이 있고, 할로겐화 금속의 바람직한 예로는 LiF , MgF_2 , CaF_2 , 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등이 있다.

[0108] 애노드와 발광층 사이에 정공 주입층, 정공 전달층 또는 전자 차단층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 정공 주입층은 애노드에서 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. 정공 전달층 또는 전자 차단층도 복수의 층이 사용될 수 있다.

[0109] 발광층과 캐소드 사이에 전자 베퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층 또는 전자 주입층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 전자 베퍼층은 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.

[0110] 여기서, 상기 정공보조층 또는 상기 발광보조층은 상기 정공전달층과 상기 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도를 조절하는 용도로 사용될 수 있다. 상기 정공보조층 또는 상기 발광보조층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및 수명의 개선 효과를 제공할 수 있다.

[0111] 또한, 발광 보조층은 애노드와 발광층 사이에 위치하거나, 캐소드와 발광층 사이에 위치하는 층으로서, 상기 애노드와 발광층 사이에 위치할 경우, 정공의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 전자의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용되거나, 상기 캐소드와 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 있는 층이다. 또한, 상기 전자 차단층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 발광층으로부터의 전자의 오버플로우를 차단하여 엑시톤을 발광층 내에 가두어 발광 누수를 방지하는 층이다. 상기 정공 전달층을 2층 이상 포함할 경우, 추가로 포함되는 층을 상기 정공 보조층 또는 상기 전자 차단층의 용도로 사용할 수 있다. 상기 정공 보조층과 전자 차단층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및/또는 수명의 개선효과를 갖는다.

[0112] 본원의 전자전달 대역은 발광층과 캐소드 사이에 전자가 이동하는 영역을 의미하며, 예를 들어 정공 차단층, 전자 전달층, 전자 베퍼층 및 전자 주입층 중 하나 이상을 포함할 수 있다. 상기 정공 차단층, 전자 전달층, 전자 베퍼층 및 전자 주입층은 각각 하나의 단일층, 또는 2개 이상의 층이 적층된 복수의 층일 수 있다.

[0113] 본원의 일 양태에 따르면, 본원의 유기 전계 발광 소자는 본원의 유기 전계 발광 화합물 이외에 아진계 화합물을 전자 전달 재료, 전자 주입 재료, 전자 베퍼 재료 및 정공 차단 재료 중 하나 이상으로 더 포함할 수 있다.

[0114] 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 희토류 금속 및 이

들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진 백색 발광을 하는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

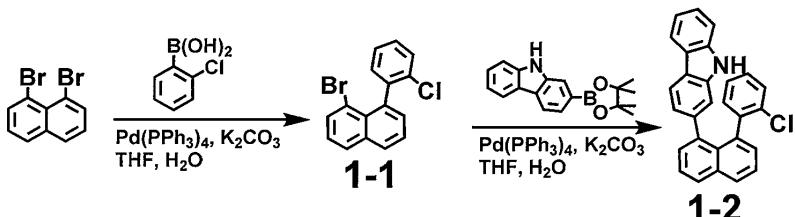
[0115] 본원의 유기 전계 발광 소자의 각종의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막법이나 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다. 본원의 제1 호스트 화합물과 제2 호스트 화합물을 성막할 때, 공중착 또는 혼합증착으로 공정한다.

[0116] 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.

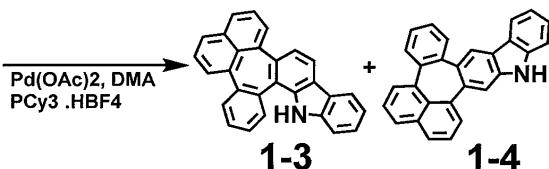
[0117] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 디스플레이 장치, 예를 들면, 스마트폰, 태블릿, 노트북, PC, TV 또는 차량용의 디스플레이 장치, 또는 조명 장치, 예를 들면, 옥외 또는 옥내용 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

[0118] 이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 대표 화합물을 들어 본원에 따른 화합물의 제조방법 및 이의 물성을 나타내었다. 그러나, 본원은 하기의 예들에 한정되는 것은 아니다.

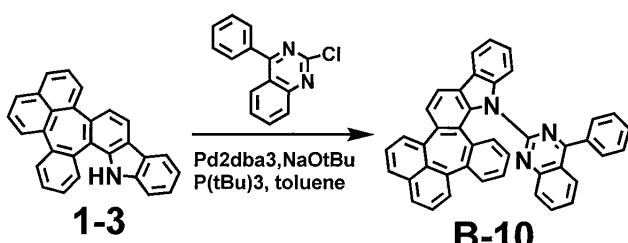
[실시예 1] 화합물 B-10의 제조



[0120]



[0121]



[0122]

화합물 1-1의 제조

[0124] 플라스크에 1,8-디브로모나프탈렌 (100 g, 349.7 mmol), (2-클로로페닐)보론산 (82 g, 524.6 mmol), 테트라카스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) ($Pd(PPh_3)_4$) (20.2 g, 17.5 mmol), 탄산칼륨 (120.8 g, 874.5 mmol), 테트라하이드로푸란(THF) 1500 mL 및 증류수 400 mL를 넣어 녹인 후, 100°C에서 18시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-1 (78 g, 수율: 70%)을 얻었다.

[0125]

화합물 1-2의 제조

[0126] 플라스크에 화합물 1-1 (10 g, 31 mmol), 2-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥실보렌-2-일)-9H-카바졸 (11.1 g, 38 mmol), 테트라카스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) ($Pd(PPh_3)_4$) (1.8 g, 1.55 mmol), 탄산칼륨 (10.9 g, 79 mmol), 테트라하이드로푸란 160 mL 및 증류수 40 mL를 넣어 녹인 후, 100°C에서 18시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-2 (8 g, 수율: 63%)을 얻었다.

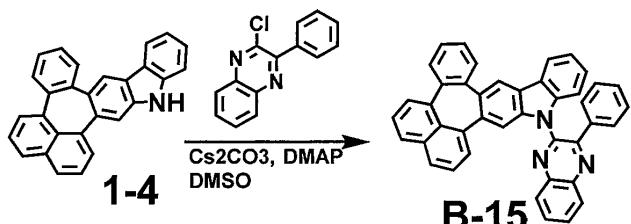
[0127] 화합물 1-3 및 화합물 1-4의 제조

플라스크에 화합물 1-2 (26 g, 64 mmol), Pd(OAc)₂ (2.9 g, 13 mmol), 리간드(트리시클로헥실포스포늄 테트라플루오로보레이트) (7.1 g, 19 mmol), Cs₂CO₃ (62.9 g, 193 mmol) 및 디메틸 아세트아미드(DMA) 322 mL를 넣어 녹인 후, 6시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각시키고 여기에 증류수를 넣었다. 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 살레이트로 건조시켰다. 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-3 (17 g, 수율: 72%)와 화합물 1-4 (3.2 g, 수율: 14%)을 얻었다.

[0129] 화합물 B-10의 제조

플라스크에 화합물 1-3 (7.0 g, 19 mmol), 2-염화-4-페닐퀴나졸린 (4.6 g, 19 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (0.87 g, 0.95 mmol), 트리-t-부틸포스핀 (0.77 mL, 1.9 mmol, 50% 톨루엔 용액), 소디움 t-부톡사이드 (3.6 g, 38 mmol) 및 톨루엔 190 mL를 넣고, 3시간 동안 환류하였다. 상온으로 식힌 반응 용액은 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 노란색 고체 화합물 B-10 (5.8 g, 수율: 53%, 녹는점: 310°C, 유리전이온도: 169°C)을 얻었다.

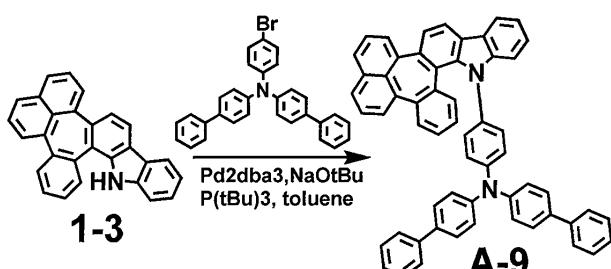
[0131] [실시예 2] 화합물 B-15의 제조



[0132]

플라스크에 화합물 1-4 (3.2 g, 8.7 mmol), 2-클로로-3-페닐퀴녹살린 (2.5 g, 1.0 mmol), 탄산세슘 (5.7 g, 17 mmol), 4-디메틸아미노피리딘(DMAP) (0.53 g, 4.4 mmol), 이메틸 일산화황(DMSO) 22 mL를 넣어 녹인 후, 4시간 동안 100°C에서 교반시켰다. 반응이 끝나면, 상온으로 냉각하고 여기에 증류수와 메탄올을 넣었다. 생성된 고체를 필터를 통하여 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 B-15 (2.5 g, 수율: 50%, 녹는점: 215°C, 유리전이온도: 170°C)을 얻었다.

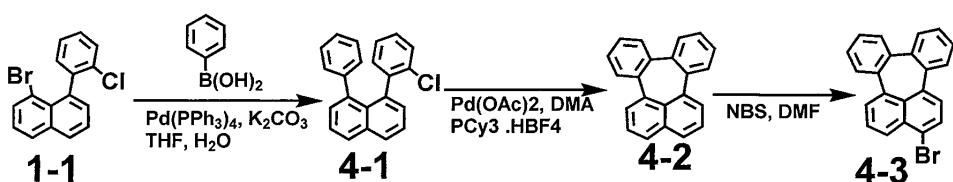
[0134] [실시예 3] 화합물 A-9의 제조



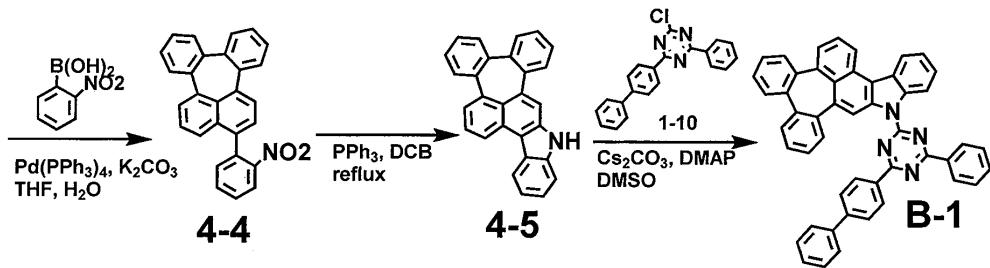
[0135]

플라스크에 화합물 1-3 (4.1 g, 11 mmol), N-(1,1'-비페닐-4-일)-N-(4-브로모페닐)-[1,1'-비페닐]-4-아민 (5.3 g, 11 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (0.51 g, 0.55 mmol), 트리-t-부틸포스핀 (0.45 mL, 1.1 mmol, 50% 톨루엔 용액), 소디움 t-부톡사이드 (2.1 g, 22 mmol) 및 톨루엔 111 mL를 넣고, 4시간 동안 환류하였다. 상온으로 식힌 반응 용액은 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 흰색 고체 화합물 A-9 (3.9 g, 수율: 46%, 녹는점: 216°C, 유리전이온도: 176°C)을 얻었다.

[0137] [실시예 4] 화합물 B-1의 제조



[0138]



[0139]

화합물 4-1의 제조

[0141] 플라스크에 화합물 1-1 (30 g, 94.5 mmol), 페닐보론산(15 g, 122.9 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) ($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$) (5.5 g, 4.73 mmol), 탄산칼륨 (32.7 g, 236.3 mmol), 테트라히드로푸란 480 mL 및 중류수 120 mL를 넣어 녹인 후, 100°C에서 18시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 4-1 (26 g, 수율: 87%)을 얻었다.

[0142]

화합물 4-2의 제조

[0143] 플라스크에 화합물 4-1 (26 g, 82.6 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (3.7 g, 16.5 mmol), 리간드(트리시클로헥실포스포늄 테트라플루오로보레이트) (9.1 g, 24.8 mmol), Cs_2CO_3 (80.7 g, 247.8 mmol) 및 디메틸 아세트아미드(DMA) 413 mL를 넣어 녹인 후, 3시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각시키고 중류수를 넣었다. 메틸렌 클로라이드(MC)로 추출하고 마그네슘 설페이트로 건조시켰다. 감압 중류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 4-2 (23 g, 수율: 70%)을 얻었다.

[0144]

화합물 4-3의 제조

[0145] 플라스크에 화합물 4-2 (7 g, 25.1 mmol)을 디메틸 포름아미드(DMF) 125 mL에 녹이고 N-브로모모숙신이미드(NBS) (5.4 g, 30.1 mmol)을 넣었다. 4시간 동안 상온에서 교반하고 메탄올과 중류수를 넣었다. 생성된 고체를 감압 여과하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 4-3 (5.6 g, 수율: 62%)를 얻었다.

[0146]

화합물 4-4의 제조

[0147] 플라스크에 화합물 4-3 (13 g, 37 mmol), 2-니트로페닐보론산 (8.0 g, 48 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) ($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$) (2.1 g, 1.85 mmol), 탄산칼륨 (12.8 g, 92.5 mmol), 테트라히드로푸란 180 mL 및 중류수 45 mL를 넣어 녹인 후, 100°C에서 18시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 4-4 (7.6 g, 수율: 52%)을 얻었다.

[0148]

화합물 4-5의 제조

[0149] 플라스크에 화합물 4-4 (7.6 g, 19 mmol), 트리페닐포스핀 (12.5 g, 47.5 mmol), 1,2-디클로로벤젠 95 mL를 넣고, 200°C로 18시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면, 감압 중류하여 용매를 제거한 후, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 4-5 (2.5 g, 수율: 36%)을 얻었다.

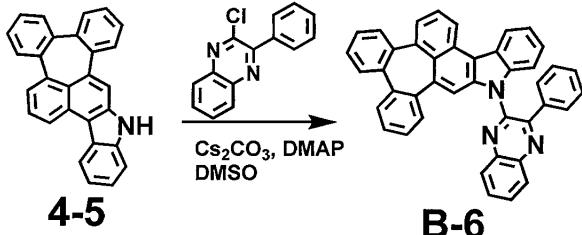
[0150]

화합물 B-1의 제조

[0151] 플라스크에 화합물 4-5 (2.5 g, 6.8 mmol), 화합물 1-10 (2.3 g, 6.8 mmol), Cs_2CO_3 (2.8 g, 20.4 mmol), 4-디메틸아미노페리딘(DMAP) (0.42 g, 3.4 mmol), 이메틸 일산화황(DMSO) 68 mL를 넣어 녹인 후, 2시간 동안 100°C에서 교반시켰다. 반응이 끝나면, 상온으로 냉각하고 여기에 중류수와 메탄올을 넣었다. 생성된 고체를 필터를 통하여 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 B-1 (2.2 g, 수율: 48%, 녹는점: 199°C, 유리전이온도: 177°C)을 얻었다.

[0152]

[실시예 5] 화합물 B-6의 제조



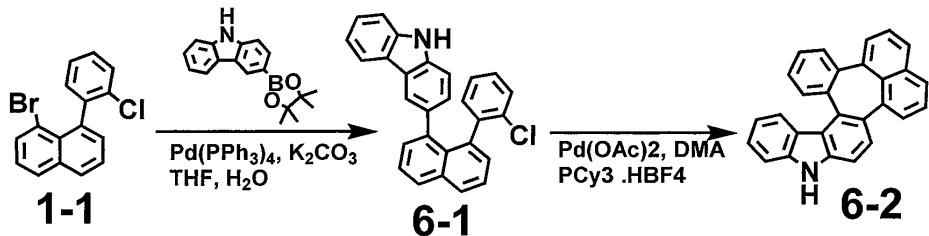
[0153]

[0154]

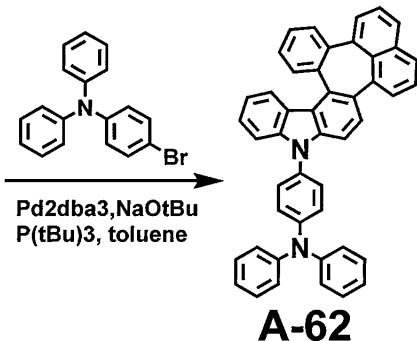
플라스크에 화합물 **4-5** (6.0 g, 16 mmol), 2-클로로-3-페닐퀴녹살린 (4.7 g, 20 mmol), Cs_2CO_3 (10.6 g, 33 mmol), 4-디메틸아미노파리딘(DMAP) (1.0 g, 8 mmol) 및 이메틸 일산화황(DMSO) 82 mL를 넣어 녹인 후, 6시간 동안 100°C에서 교반시켰다. 반응이 끝나면, 상온으로 냉각하고 여기에 중류수와 메탄올을 넣었다. 생성된 고체를 필터를 통하여 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **B-6** (4.4 g, 수율: 47%, 녹는점: 271°C, 유리전이온도: 172°C)을 얻었다.

[0155]

[실시예 6] 화합물 A-62의 제조



[0156]



[0157]

[0158]

화합물 6-1의 제조

[0159]

플라스크에 화합물 **1-1** (35 g, 110 mmol), 3-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥실보렌-2-일)-9H-카바졸 (38.8 g, 132 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) ($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$) (6.5 g, 5.5 mmol), 탄산칼륨 (38.1 g, 275 mmol), 테트라히드로푸란 560 mL 및 중류수 140 mL를 넣어 녹인 후, 100°C에서 18시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 전조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **6-1** (30 g, 수율: 67%)을 얻었다.

[0160]

화합물 6-2의 제조

[0161]

플라스크에 화합물 **6-1** (30 g, 74 mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (3.3 g, 15 mmol), 리간드(트리시클로헥실포스포늄 테트라플루오로보레이트) (8.2 g, 22 mmol), Cs_2CO_3 (72.6 g, 223 mmol) 및 디메틸 아세트아미드(DMA) 372 mL를 넣어 녹인 후, 6시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각시키고 여기에 중류수를 넣었다. 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트로 전조시켰다. 침압 중류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **6-2** (24 g, 수율: 44%)을 얻었다.

[0162]

화합물 A-62의 제조

[0163]

플라스크에 화합물 **6-2** (5.0 g, 14 mmol), 4-브로모-N,N-디페닐아닐린 (5.3 g, 16 mmol), 트리스(디벤질리텐

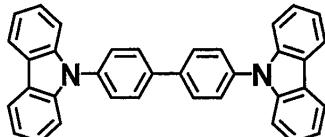
아세톤)디팔라듐(0) (0.62 g, 0.68 mmol), 트리-t-부틸포스핀 (0.54 mL, 1.4 mmol, 50% 툴루엔 용액), 소다음 t-부톡사이드 (2.6 g, 28 mmol) 및 툴루엔 136 mL를 넣고, 6시간 동안 환류하였다. 상온으로 식힌 반응 용액은 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 흰색 고체 화합물 A-62 (2.4 g, 수율: 29%, 녹는점: 188°C, 유리전이온도: 162°C)을 얻었다.

[0164] [소자 제조예 1 내지 3] 호스트로서 본원에 따른 화합물을 증착한 OLED 소자의 제조

본원에 따른 화합물을 포함하는 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조) 기판 상의 투명 전극 ITO 박막($10\Omega/\square$)을 아세톤, 에탄올 및 중류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로필 알코올에 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^{-6} 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 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 60 nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착하였다. 정공 주입층과 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 표 1의 화합물을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-71을 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ET-1과 화합물 EI-1을 1:1의 속도로 증발시켜 발광층 위에 35 nm 두께의 전자전달층을 증착하였다. 이어서, 전자주입층으로 화합물 EI-1을 상기 전자 전달층 위에 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 캐소드를 상기 전자 주입층 위에 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다.

[0166] [비교예 1] 호스트로서 비교 화합물을 증착한 OLED 소자의 제조

발광층의 호스트로서 화합물 A를 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.



[0168] 화합물 A

[0169] [표 1]

	호스트 재료	구동전압(V)	색상	수명(T95,hr)
비교예 1	CBP	9.2	적색	0.25
소자 제조예 1	B-10	4.9	적색	3.6
소자 제조예 2	B-15	3.5	적색	4.6
소자 제조예 3	B-6	3.6	적색	2.6

본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 사용한 유기 전계 발광 소자가 비교예 1의 화합물을 사용한 유기 전계 발광 소자보다 낮은 구동전압 및 우수한 수명 특성을 보였다.

[0170] [소자 제조예 4] 제2 정공전달재료로서 본원에 따른 화합물을 증착한 OLED 소자의 제조

본원에 따른 화합물을 포함하는 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조) 기판 상의 투명 전극 ITO 박막($10\Omega/\square$)을 아세톤, 이소프로필 알코올을 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이

소프로필 알코올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 **HI-1**을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 90 nm 두께의 제1 정공주입층을 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 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 **HT-1**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10 nm 두께의 제1 정공전달층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 제2 정공전달재료(보조재료)로서 표 2의 화합물을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 60 nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착하였다. 정공주입층과 정공전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 화합물 **H-1**을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 **D-71**를 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 2 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 **ET-1**과 화합물 **EI-1**을 1:1의 속도로 증발시켜 발광층 위에 35 nm 두께의 전자전달층을 증착하였다. 이어서, 전자주입층으로 화합물 **EI-1**을 상기 전자 전달층 위에 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 캐소드를 상기 전자 주입층 위에 1500 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다.

[0175] 이상과 같이 제조된 유기 전계 발광 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 구동 전압, 발광 효율, CIE 색좌표와 5,000 nits 휘도 기준 정전류에서의 처음 휘도 기준 98%의 휘도로 감소하는 데까지의 수명 시간의 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0176] [비교예 2] 제2 정공전달재료로서 비교 화합물을 증착한 OLED 소자의 제조

[0177] 제2 정공전달재료로서 화합물 **HT-1**을 사용한 것 외에는 소자 제조예 4와 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0178] 상기 소자 제조예 4와 동일한 방식으로 OLED 소자를 평가하였다.

[0179] [표 2]

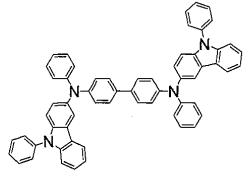
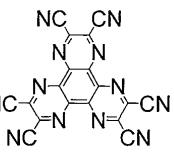
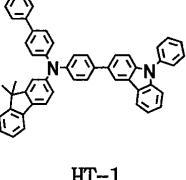
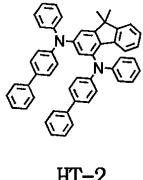
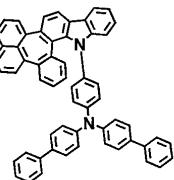
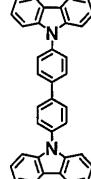
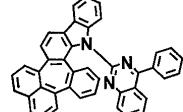
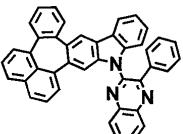
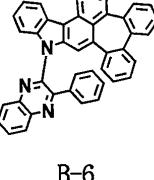
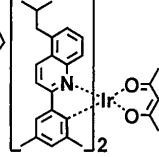
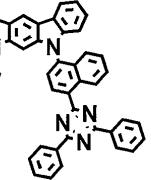
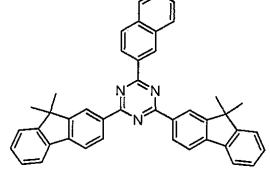
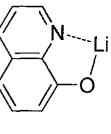
	제 2 정공 전달층 (보조층)	호스트	구동전압 (V)	발광효율 (cd/A)	CIE(x,y)	수명 (T98,hr)
소자 제조예 4	A-9	H-1	3.2	21.7	(0.670, 0.330)	83
비교예 2	HT-1		3.2	11.4	(0.661, 0.336)	27

[0180]

[0181] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 제2 정공전달재료로 사용한 유기 전계 발광 소자가 비교예 2의 화합물을 사용한 유기 전계 발광 소자보다 높은 발광효율 및 우수한 수명 특성을 보였다.

[0182]

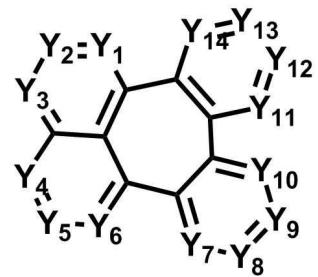
[표 3]

소자 제조예 및 비교예에서 사용된 유기 전계 발광 재료			
정공 주입층/ 정공 전달층	 HI-1	 HI-2	
	 HT-1	 HT-2	 A-9
발광층	 화합물 A	 B-10	 B-15
	 B-6	 D-71	 H-1
전자 전달층/ 전자 주입층	 ET-1	 EI-1	

[0183]

도면

도면1



专利名称(译)	有机电致发光化合物和包含其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020190101281A	公开(公告)日	2019-08-30
申请号	KR1020190000623	申请日	2019-01-03
[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)	롭엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	오홍세 양정은 이태진 조상희		
发明人	오홍세 양정은 이태진 조상희		
IPC分类号	C09K11/06		
CPC分类号	C09K11/06 C09K2211/1029 C09K2211/1033 C09K2211/1044 C09K2211/1048 C09K2211/1051 C09K2211/1059 C09K2211/1088 C09K2211/1092		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020180021237 2018-02-22 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

有机电致发光化合物和包含该有机电致发光元件的有机电致发光元件技术领域本发明涉及有机电致发光化合物和包括该有机电致发光化合物的有机电致发光元件。有机电致发光元件包含由根据本发明的化学式1表示的有机电致发光化合物，然后改善驱动电压，发光效率和/或使用寿命性能。

