



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

(11) 공개번호 10-2017-0069151  
 (43) 공개일자 2017년06월20일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C09K 11/06* (2006.01) *C07F 15/00* (2006.01)  
*H01L 51/00* (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)

(52) CPC특허분류  
*C09K 11/06* (2013.01)  
*C07F 15/0033* (2013.01)

(21) 출원번호 10-2016-0165699  
 (22) 출원일자 2016년12월07일  
 심사청구일자 없음

(30) 우선권주장  
 1020150176262 2015년12월10일 대한민국(KR)

(71) 출원인  
**룸엔드하스전자재료코리아유한회사**  
 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)

(72) 발명자  
**김 현**  
 경기도 수원시 영통구 매영로 310번길 27, 643동 1003호 (영통동, 신나무실 신원아파트)

**이가원**  
 경기도 화성시 삼성1로 5길 20

**장성우**  
 경기도 수원시 영통구 영통동 매영로310번길 36 531동 306호

(74) 대리인  
**장훈**

전체 청구항 수 : 총 8 항

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

**(57) 요약**

본 발명은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은, 색순도 및 효율이 현저히 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

(52) CPC특허분류

*H01L 51/0072* (2013.01)

*H01L 51/0085* (2013.01)

*H01L 51/5012* (2013.01)

*C09K 2211/1003* (2013.01)

*C09K 2211/1029* (2013.01)

*C09K 2211/185* (2013.01)

*H01L 2924/12044* (2013.01)

---

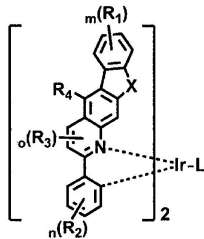
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X는 CR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, O 또는 S이고;

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;

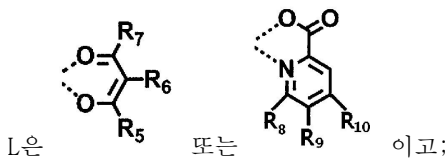
R<sub>4</sub>는 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬이며;

R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이며;

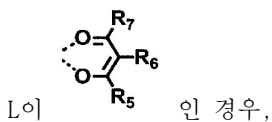
m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며;

o는 0 내지 2의 정수이고;

m, n 또는 o가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>1</sub>, 각각의 R<sub>2</sub> 또는 각각의 R<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

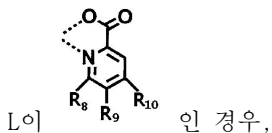


L은 또는 이고;



L이 인 경우,

R<sub>5</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;



L이 인 경우,

R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이거나; 인접한 치환기끼리 서로 연결되어, R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>이 연결된 피리딘 고리와 함께, 치환 또는 비치환된 (9-20원)의 헤테로아릴을 형성할 수 있고, 상기 헤테로아릴은 상기 피리딘 고리의 질소 원자에 추가하여 질소, 산소 및 황에서 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자를 더 포함할 수 있다.

**청구항 2**

제1항에 있어서, 상기 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴인, 유기 전계 발광 화합물.

**청구항 3**

제1항에 있어서, 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴인, 유기 전계 발광 화합물.

**청구항 4**

제1항에 있어서, 상기 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로, 중수소로 치환 또는 비치환된 (C1-C4)알킬 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고, 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 비치환된 (C1-C4)알킬, 또는 (C1-C4)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고, R<sub>4</sub>는 수소인, 유기 전계 발광 화합물.

**청구항 5**

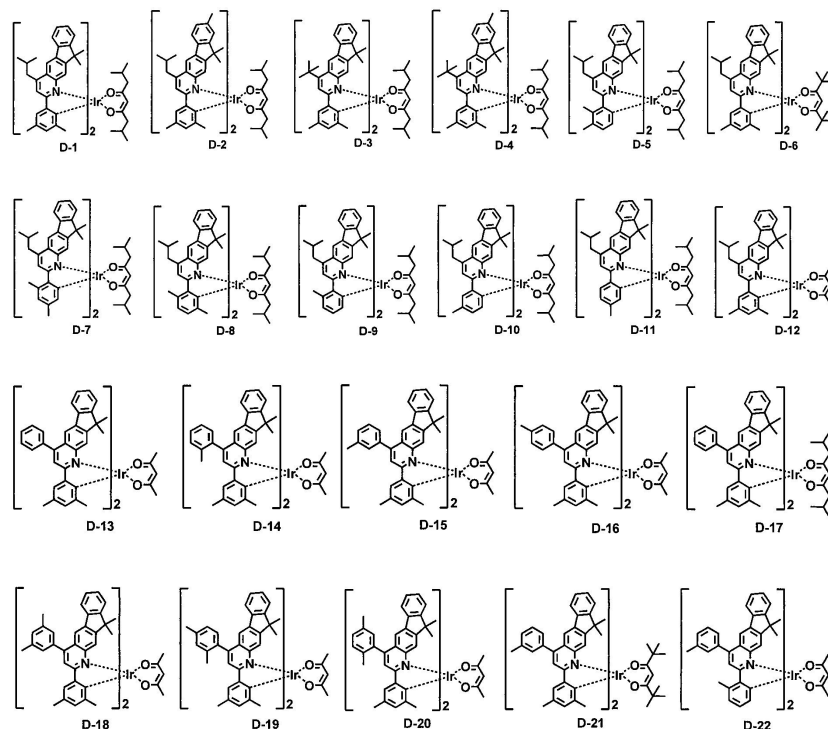
제1항에 있어서, 상기 R<sub>5</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴인, 유기 전계 발광 화합물.

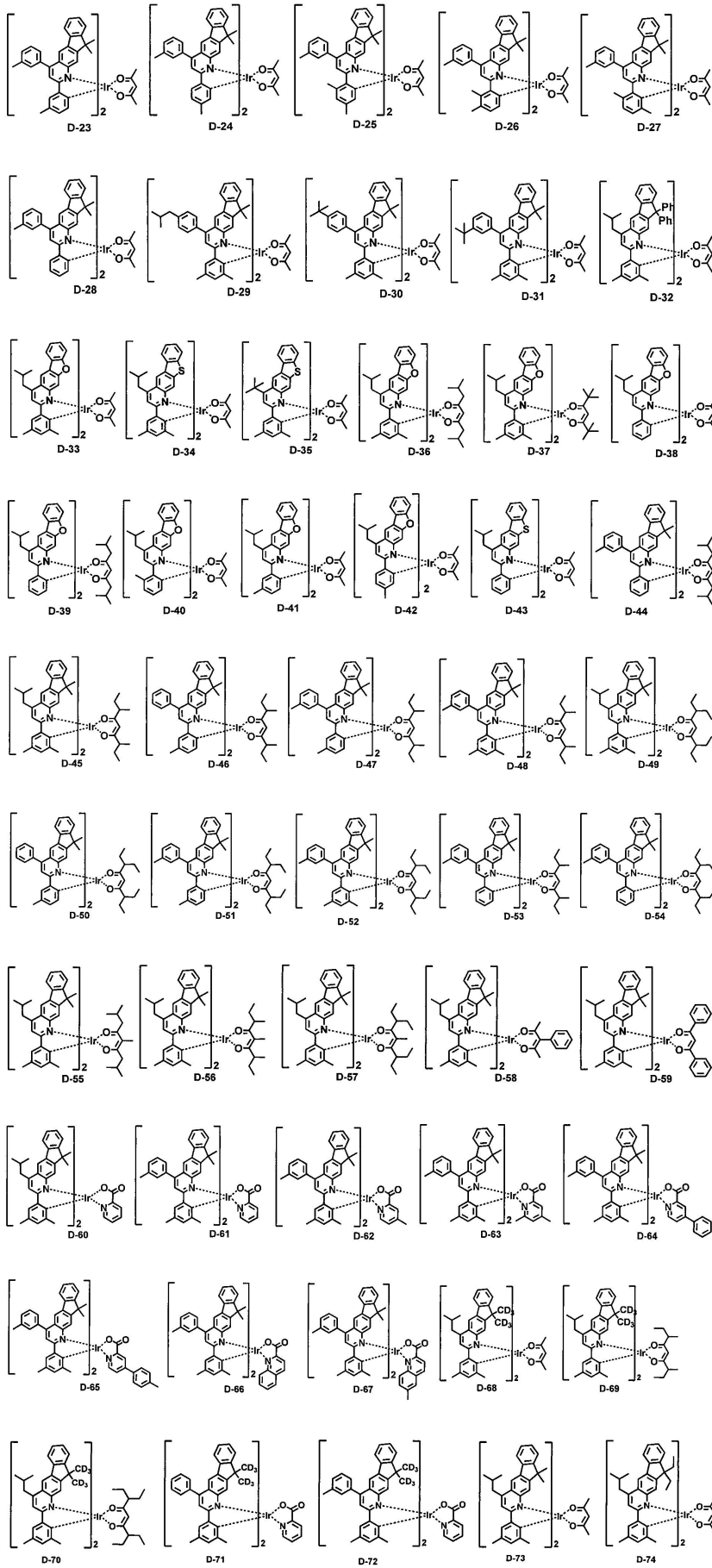
**청구항 6**

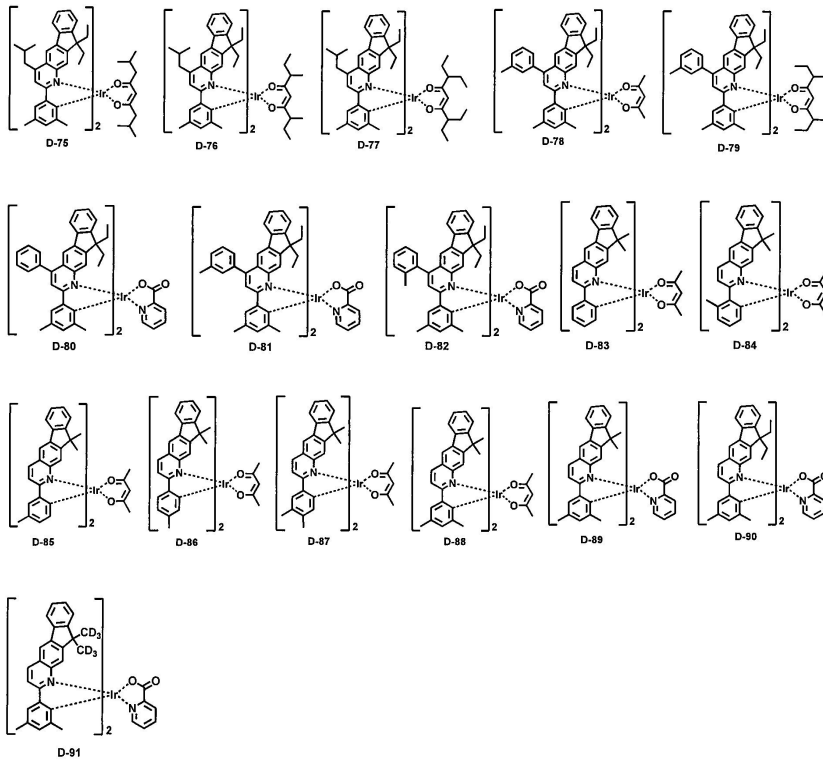
제1항에 있어서, R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이거나, 상기 R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub> 중 적어도 2개는 인접 치환기끼리 서로 연결되어, R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>이 연결된 피리딘 고리와 함께, (C1-C15)알킬로 치환 또는 비치환된 (9-16원)의 헤테로아릴을 형성할 수 있고, 상기 헤테로아릴은 상기 피리딘 고리의 질소 원자에 추가하여 질소, 산소 및 황에서 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자를 더 포함할 수 있는, 유기 전계 발광 화합물.

**청구항 7**

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







**청구항 8**

제1항의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

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

**배경 기술**

[0002] 표시 소자 중, 전계발광 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 전계 발광 소자를 처음으로 개발하였다[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 EL 소자는 통상 애노드 및 캐소드와 이들 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가지며, 상기 유기물층은 일반적으로 정공주입층, 정공전달층, 전자차단층, 발광층, 정공차단층, 전자전달층, 전자주입층 등을 포함할 수 있다. 이러한 유기 EL 소자는, 전압 인가에 의해 애노드에서 정공이, 캐소드에서 전자가 발광층에 주입되고, 정공과 전자의 재결합에 의해 에너지가 높은 엑시톤이 형성되고, 이 에너지에 의해 발광 유기 화합물이 여기 상태로 되며, 발광 유기 화합물의 여기 상태가 기저 상태로 돌아가면서 에너지를 빛으로 방출하는 원리에 의해 발광한다. 따라서, 유기 EL 소자의 발광 재료는 소자의 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인이다.

[0004] 상기 발광 재료는 기능적인 측면에서 호스트 재료와 도판트 재료로 구분될 수 있는데, 일반적으로 EL 특성이 가장 우수한 소자 구조는 호스트에 도판트를 도핑함으로써 형성된 발광층을 포함하는 구조라고 알려져 있다. 호스트/도판트 시스템은 호스트에서 도판트의 에너지 전이를 통하여 발광효율을 증가시키기 위한 것인데, 이와 같은 호스트/도판트 재료 시스템을 사용할 때, 도판트 및 호스트 재료는 발광 소자의 효율과 성능에 큰 영향을 미친다.

[0005] 현재까지 이리듐(III) 착물 계열이 인광 발광 재료의 도판트로 널리 알려져 있으며, 각각의 적색, 녹색 및 청색 발광별로 (acac)Ir(btp)<sub>2</sub>(비스(2-(2'-벤조티에닐)-피리디네이토-N,C3')이리듐(아세틸아세토네이트)), Ir(ppy)<sub>3</sub>(트리스(2-페닐피리딘)이리듐) 및 Firpic(비스(4,6-디플루오로페닐피리디네이토-N,C2)피콜리네이토이리듐) 등의

재료가 알려져 있다.

[0006] 그러나, 중대형 OLED 패널에서 요구되는 EL 특성 수준을 고려해 보았을 때, 보다 우수한 EL 성능, 즉 장수명, 고효율 및 높은 색순도 등을 제공할 수 있는 이리듐 착물 계열의 도판트 화합물을 개발이 여전히 필요하다.

[0007] 특히, 유기 EL 소자의 응용분야인 풀 컬러 디스플레이(full color display)를 구현하기 위해서는 "포화된(saturated)" 색으로 불리는, 특정 색을 방출하도록 구성된 픽셀이 요구된다. 특히 포화된 적색, 녹색 및 청색 픽셀이 요구되며, 이러한 포화된 색은 해당 분야에 공지된 CIE 좌표를 사용하여 측정될 수 있다. 이때 더 다양한 색을 표현하기 위해서는 적색, 녹색 및 청색 각각은 색 순도가 높아야 하며, 적색의 경우 CIE x좌표 기준 0.680 근처의 진 적색 좌표에 가까울수록 색순도는 높아지며, 이에 적합한 도판트 화합물에 대한 요구가 증가하고 있다.

[0008] 미국 등록특허공보 제7,951,472호는 2-페닐퀴놀린 계열의 리간드를 갖는 이리듐 착물을 유기 전계 발광 소자의 도판트 화합물로서 개시하고 있다. 그러나, 상기 문헌은 융합된 아자벤조플루오렌 리간드를 갖는 이리듐 착물을 구체적으로 개시하지 못한다.

### 선행기술문헌

#### 특허문헌

[0009] (특허문헌 0001) 미국 등록특허공보 제7,951,472호 (2011년 5월 31일 등록)

### 발명의 내용

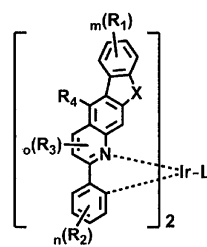
#### 해결하려는 과제

[0010] 본 발명의 목적은, 첫째로 색 순도 및 효율이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 화합물을 제공하는 것이며, 둘째로 상기 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

#### 과제의 해결 수단

[0011] 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.

[0012] [화학식 1]



[0013] 상기 화학식 1에서,  
 [0014] X는 CR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, O 또는 S이고;

[0016] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;

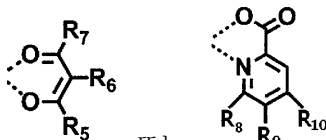
[0017] R<sub>4</sub>는 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬이며;

[0018] R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이며;

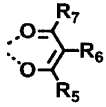
[0019] m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며;

[0020] o는 0 내지 2의 정수이고;

[0021] m, n 또는 o가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>1</sub>, 각각의 R<sub>2</sub> 또는 각각의 R<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

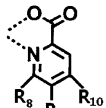


[0022] L은 또는 이고;



[0023] L이 인 경우,

[0024] R<sub>5</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아틸이고;



[0025] L이 인 경우,

[0026] R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아틸이거나; 인접한 치환기끼리 서로 연결되어, R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>이 연결된 피리딘 고리와 함께, 치환 또는 비치환된 (9-20원)의 헤테로아틸을 형성할 수 있고, 상기 헤테로아틸은 상기 피리딘 고리의 질소 원자에 추가하여 질소, 산소 및 황에서 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자를 더 포함할 수 있다.

**발명의 효과**

[0027] 본 발명에 따른 화합물을 통하여 색순도 및 효율이 현저히 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0028] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.

[0029] 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물, 상기 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료, 및 상기 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

[0030] 본 발명의 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

[0031] 본원에서, 상기 "(C1-C10)알킬"은 쇠를 구성하는 탄소수가 1 내지 10개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 5개인 것이 바람직하고, 탄소수가 1 내지 4개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, n-펜틸, 1-메틸부틸, 2-메틸부틸, 3-메틸부틸, 1,1-디메틸프로필, 1,2-디메틸프로필, 2,2-디메틸프로필 및 1-에틸프로필 등이 있다. 본원에서, 상기 "(C6-C30)아틸"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일 환계 또는 융합 환계 라디칼을 의미하고, 여기에서 환 골격 탄소수가 6 내지 20개인 것이 바람직하고, 6 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 상기 아틸의 구체적인 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 페닐터페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐 및 플루오란테닐 등이 있다.

[0032] 본원에서 "(3-30원)헤테로아틸"은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아틸기를 의미한다. 여기에서 환 골격 원자수가 9 내지 20개인 것이 바람직하고, 9 내지 16개인 것이 더 바람직하다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이다. 본원에서 헤테로아틸은 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 상기 헤테로아틸은 하나 이상의 헤테로아틸 또는 아틸기가 단일 결합에 의해 헤테로아틸기와 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아틸의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아

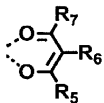
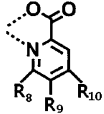
졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리달, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다.

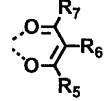
[0033] 또한, 본원에서, 상기 "치환 또는 비치환" 의 기재에서 '치환' 은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 상기 화학식 1의 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>12</sub>에서 치환된 알킬, 치환된 아릴 또는 치환된 헤테로아릴의 치환체는 각각 독립적으로, 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환되거나 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, (C1-C30)알킬 또는 시아노 또는 (3-30원)헤테로아릴 또는 트리(C6-C30)아릴실릴로 치환되거나 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 1종 이상의 것을 의미하고, 바람직하게는 각각 독립적으로, 중수소 또는 (C1-C6)알킬인 것을 의미한다.

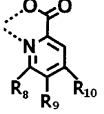
[0034] 상기 화학식 1에서, X는 CR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, O 또는 S이다.

[0035] 상기 화학식 1에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; 바람직하게는 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이며; 더 바람직하게는 수소, 비치환된 (C1-C4)알킬, 또는 (C1-C4)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이다. 예를 들어, 수소, 메틸, 이소부틸, tert-부틸, 또는 메틸, 이소부틸 또는 tert-부틸로 치환 또는 비치환된 페닐일 수 있다.

[0036] 상기 화학식 1에서, R<sub>4</sub>는 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬이고; 바람직하게는 수소이다.

[0037] 상기 화학식 1에서, L은  또는  이다.

[0038] 상기 화학식 1에서, L이  인 경우, R<sub>5</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; 바람직하게는 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이며; 더 바람직하게는 수소, 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이다. 예를 들어, 수소, 메틸, 이소부틸, tert-부틸, 펜틸 또는 페닐일 수 있다.

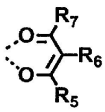
[0039] 상기 화학식 1에서, L이  인 경우, R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이거나, 인접한 치환기끼리 서로 연결되어, R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>이 연결된 피리딘 고리와 함께, 치환 또는 비치환된 (9-20원)의 헤테로아릴을 형성할 수 있고, 상기 헤테로아릴은 상기 피리딘 고리의 질소 원자에 추가하여 질소, 산소 및 황에서 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자를 더 포함할 수 있고; 바람직하게는 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이거나, 상기 R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub> 중 적어도 2개는 인접 치환기끼리 서로 연결되어, R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>이 연결된 피리딘 고리와 함께, (C1-C15)알킬로 치환 또는 비치환된 (9-16원)의 헤테로아릴을 형성할 수 있고, 상기 헤테로아릴은 상기 피리딘 고리의 질소 원자에 추가하여 질소, 산소 및 황에서 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자를 더 포함할 수 있

고; 예를 들어, 수소, 메틸, 또는 메틸로 치환된 페닐이거나, 상기 R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub> 중 적어도 2개는 인접 치환기끼리 서로 연결되어, R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>이 연결된 피리딘 고리와 함께, (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 퀴놀린을 형성할 수 있다.

[0040] 상기 화학식 1에서, 상기 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; 바람직하게는 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이며; 더 바람직하게는 중수소로 치환 또는 비치환된 (C1-C4)알킬 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이다. 예를 들어, 중수소로 치환 또는 비치환된 메틸, 중수소로 치환 또는 비치환된 에틸 또는 페닐일 수 있다.

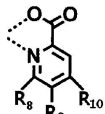
[0041] 상기 화학식 1에서, m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, o는 0 내지 2의 정수이고, m, n 또는 o가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>1</sub>, 각각의 R<sub>2</sub> 또는 각각의 R<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0042] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1에서, X는 CR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, O 또는 S이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이고, R<sub>4</sub>는 수소이고, L은



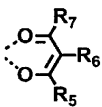
이고, R<sub>5</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고, 상기 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이고, m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, o는 0 내지 2의 정수이고, m, n 또는 o가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>1</sub>, 각각의 R<sub>2</sub> 또는 각각의 R<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0043] 본 발명의 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1에서, X는 CR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, O 또는 S이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이고, R<sub>4</sub>는 수소이고, L은



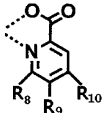
이고, 상기 R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이거나, 상기 R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub> 중 적어도 2개는 인접 치환기끼리 서로 연결되어, R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>이 연결된 피리딘 고리와 함께, (C1-C15)알킬로 치환 또는 비치환된 (9-16원)의 헤테로아릴을 형성할 수 있고, 상기 헤테로아릴은 상기 피리딘 고리의 질소 원자에 추가하여 질소, 산소 및 황에서 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자를 더 포함할 수 있고, 상기 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이고, m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, o는 0 내지 2의 정수이고, m, n 또는 o가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>1</sub>, 각각의 R<sub>2</sub> 또는 각각의 R<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

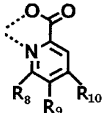
[0044] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1에서, X는 CR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, O 또는 S이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 비치환된 (C1-C4)알킬, 또는 (C1-C4)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고, R<sub>4</sub>는 수소이



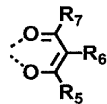
고, L은 이고, R<sub>5</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 비치환된 (C1-C5)알킬, 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고, 상기 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로, 중수소로 치환된 또는 비치환된 (C1-C4)알킬 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고, m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, o는 0 내지 2의 정수이고, m, n 또는 o가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>1</sub>, 각각의 R<sub>2</sub> 또는 각각의 R<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

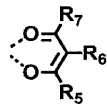
[0045] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1에서, X는 CR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, O 또는 S이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 비치환된 (C1-C4)알킬, 또는 (C1-C4)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고, R<sub>4</sub>는 수소이



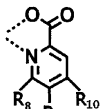
고, L은  이고, 상기 R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 또는 메틸로 치환된 페닐이거나, 상기 R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub> 중 적어도 2개는 인접 치환기끼리 서로 연결되어, R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>이 연결된 피리딘 고리와 함께, (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 퀴놀린을 형성할 수 있으며, 상기 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로, 중수소로 치환 또는 비치환된 (C1-C4)알킬 또는 비치환된 (C6-C15)아릴이고, m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, o는 0 내지 2의 정수이고, m, n 또는 o가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>1</sub>, 각각의 R<sub>2</sub> 또는 각각의 R<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

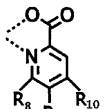
[0046] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1에서, X는 CR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, O 또는 S이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 이소부틸, tert-부틸, 또는 메틸, 이소부틸 또는 tert-부틸로 치환 또는 비치환된 페닐이



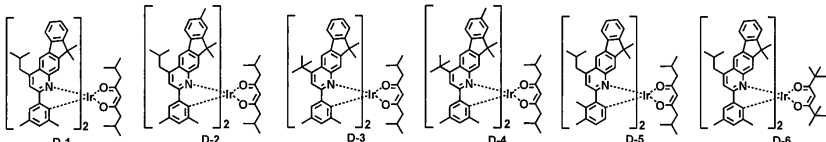
고, R<sub>4</sub>는 수소이고, L은  이고, R<sub>5</sub> 내지 R<sub>7</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 이소부틸, tert-부틸, 펜틸 또는 페닐이고, 상기 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로, 중수소로 치환 또는 비치환된 메틸, 중수소로 치환 또는 비치환된 에틸 또는 페닐이고, m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, o는 0 내지 2의 정수이고, m, n 또는 o가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>1</sub>, 각각의 R<sub>2</sub> 또는 각각의 R<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0047] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1에서, X는 CR<sub>11</sub>R<sub>12</sub>, O 또는 S이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 이소부틸, tert-부틸, 또는 메틸, 이소부틸 또는 tert-부틸로 치환 또는 비치환된 페닐이

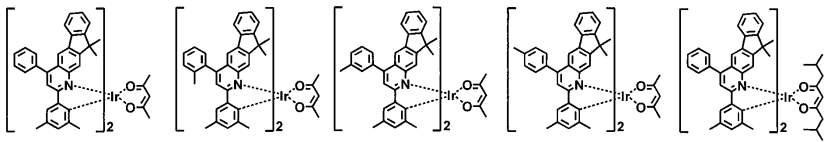


고, R<sub>4</sub>는 수소이고, L은  이고, 상기 R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>은 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 또는 메틸로 치환된 페닐이거나, 상기 R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub> 중 적어도 2개는 인접 치환기끼리 서로 연결되어, R<sub>8</sub> 내지 R<sub>10</sub>이 연결된 피리딘 고리와 함께, (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 퀴놀린을 형성할 수 있으며, 상기 R<sub>11</sub> 및 R<sub>12</sub>는 각각 독립적으로, 중수소로 치환 또는 비치환된 메틸, 중수소로 치환 또는 비치환된 에틸 또는 페닐이고, m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, o는 0 내지 2의 정수이고, m, n 또는 o가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R<sub>1</sub>, 각각의 R<sub>2</sub> 또는 각각의 R<sub>3</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

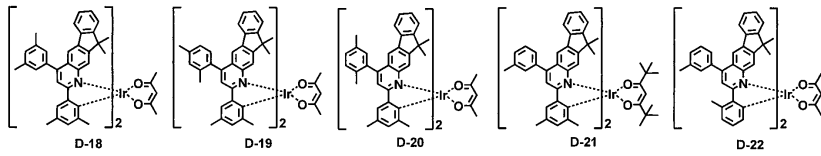
[0048] 상기 화학식 1의 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[0049] 

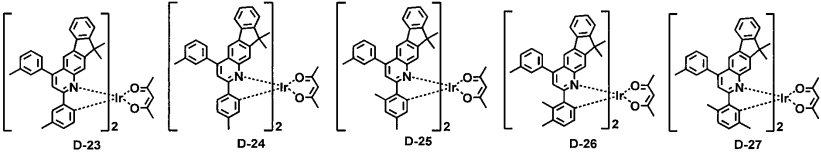
[0050] 

[0051] 

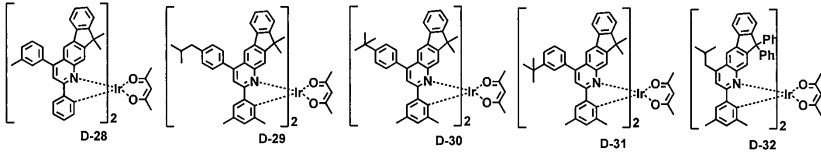
[0052]



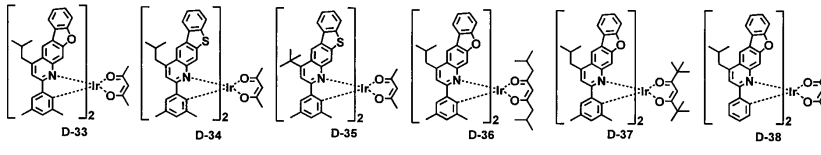
[0053]



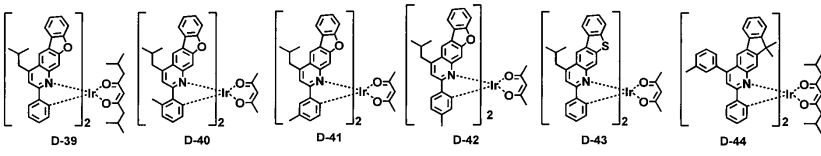
[0054]



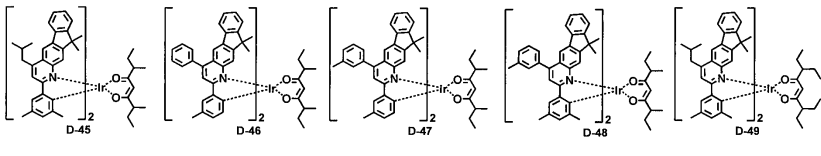
[0055]



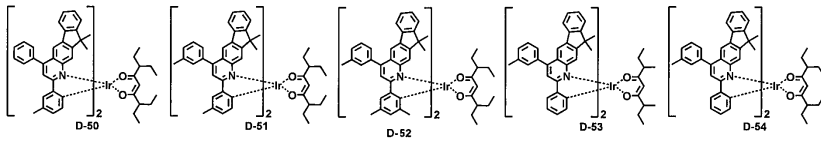
[0056]



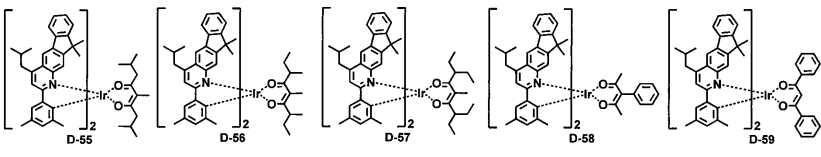
[0057]



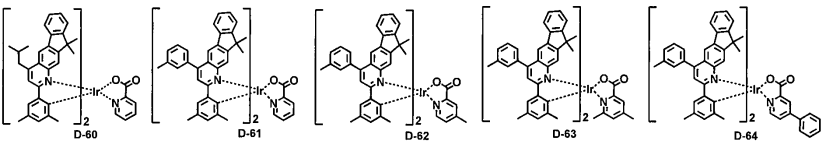
[0058]



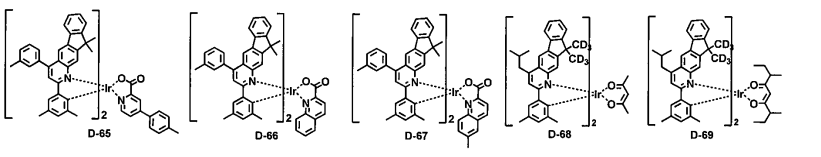
[0059]

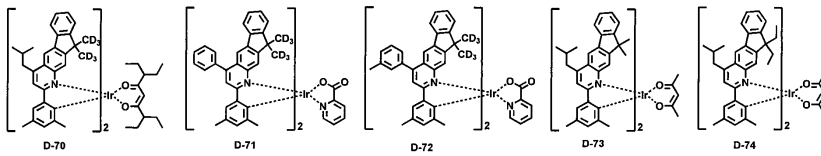


[0060]

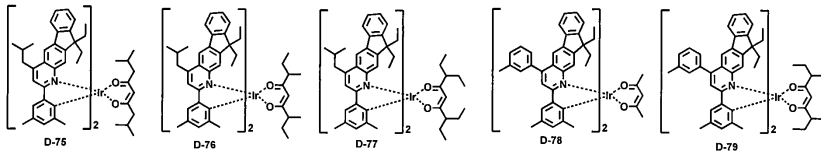


[0061]

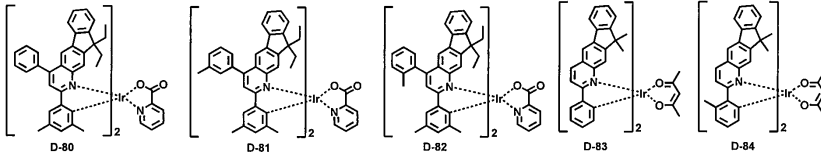




[0062]



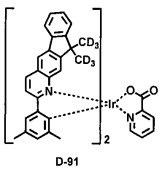
[0063]



[0064]



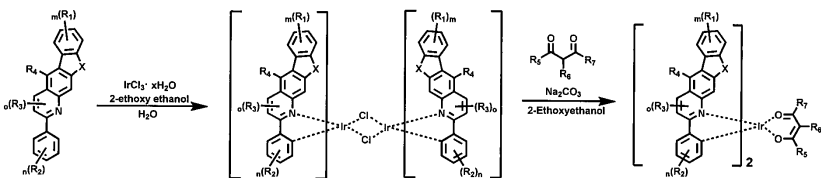
[0065]



[0066]

[0067] 본 발명에 따른 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식 1에 나타난 바와 같이 제조할 수 있다.

[0068] [반응식 1]



[0069]

[0070] 상기 반응식 1에서, 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>7</sub>, X, m, n, 및 o는 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[0071] 또한, 본 발명은 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0072] 상기 재료는 본 발명의 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0073] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 가질 수 있다. 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다.

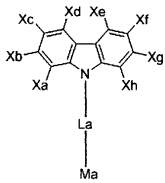
[0074] 상기 제1전극과 제2전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공주입층, 정공전달층, 정공보조층, 발광보조층, 전자전달층, 전자주입층, 계면층(interlayer), 정공차단층, 전자버퍼층 및 전자차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다. 여기서, 발광보조층은 애노드와 발광층 사이에 위치하거나, 캐소드와 발광층 사이에 위치하는 층으로서; 상기 애노드와 발광층 사이에 위치할 경우, 정공의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 전자의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용되거나, 상기 캐소드와 발광층 사이에 위치할 경우, 전자의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 정공의 오버플로우를 차단하

는 용도로 사용될 수 있다. 또한, 상기 정공보조층은 정공전달층(또는 정공주입층)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 전자차단층은 정공전달층(또는 정공주입층)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 정공보조층과 전자차단층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및 수명의 개선효과를 갖는다.

[0075] 본 발명의 화학식 1의 화합물은 도판트 물질로서 상기 발광층에 포함될 수 있다. 또한 상기 발광층은 하나 이상의 호스트 물질을 추가로 포함할 수 있다.

[0076] 본 발명의 화합물과 함께 조합되어 사용할 수 있는 호스트 화합물로는 하기 화학식 2로 표시되는 화합물을 들 수 있다.

[0077] [화학식 2]



[0078]

[0079] 상기 화학식 2에서,

[0080] Ma는 치환 또는 비치환된 질소 함유 (5-11원)헤테로아릴이고;

[0081] La는 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이고;

[0082] Xa 내지 Xh는 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, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

[0083] 상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

[0084] 상기 화학식 2에서, 치환 알킬, 치환 알케닐, 치환 알키닐, 치환 시클로알킬, 치환 아릴, 치환 헤테로아릴, 치환 트리알킬실릴, 치환 트리아릴실릴, 치환 디알킬아릴실릴, 치환 알킬디아릴실릴, 치환 알킬아릴아미노, 치환 모노아릴아미노, 치환 디아릴아미노, 또는 치환 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 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; 트리(C6-C30)아릴실릴, (C6-C30)아릴, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴, 또는 트리(C6-C30)아릴실릴(C6-C30)아릴로 치환되거나 비치환된 (3-30원)헤테로아릴; (C1-C30)알킬, 할로젠, (C6-C30)아릴, 또는 (3-30원)헤테로아릴로 치환되거나 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 1종 이상의 것일 수 있다.

[0085] 상기 화학식 2에서, 바람직하게는, 상기 La는 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌일 수 있고; 더 바람직하게는, 단일 결합, 또는 트리(C6-C10)아릴실릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌일 수 있다. 구체적으로, La는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌, 치환 또는 비치환된 나프틸렌, 또는 치환 또는 비치환

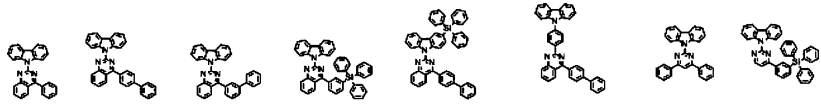
된 비페닐렌일 수 있다.

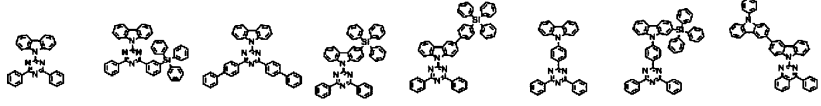
[0086] 상기 화학식 2에서, 바람직하게는, 상기 Ma는 치환 또는 비치환된 질소 함유 (5-11원)헤테로아릴 수 있고; 더 바람직하게는, 시아노, (C1-C6)알킬, 트리(C6-C12)아릴실릴, (C6-C18)아릴, 또는 (5-15원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 질소 함유 (6-11원)헤테로아릴일 수 있다.

[0087] 구체적으로는, 상기 Ma는 치환 또는 비치환된 피롤릴, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴, 치환 또는 비치환된 피라졸릴, 치환 또는 비치환된 트리아진일, 치환 또는 비치환된 테트라진일, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴, 치환 또는 비치환된 테트라졸릴, 치환 또는 비치환된 피리딜, 치환 또는 비치환된 피라진일, 치환 또는 비치환된 피리미딘일, 치환 또는 비치환된 피리다진일, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸릴, 치환 또는 비치환된 이소인돌릴, 치환 또는 비치환된 인돌릴, 치환 또는 비치환된 인다졸릴, 치환 또는 비치환된 벤조티아디아졸릴, 치환 또는 비치환된 퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 신놀리닐, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐, 또는 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐일 수 있고; 더더욱 구체적으로는 치환 또는 비치환된 트리아진일, 치환 또는 비치환된 피리미딘일, 치환 또는 비치환된 피리딜, 치환 또는 비치환된 퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐, 또는 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐일 수 있다.

[0088] 상기 화학식 2에서, 바람직하게는, 상기 Xa 내지 Xh는 각각 독립적으로, 수소, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 치환 또는 비치환된 (6-20원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 트리(C6-C15)아릴실릴이거나; 인접한 치환기와 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (6-20원) 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소, 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고; 더 바람직하게는, 각각 독립적으로, 수소, 시아노, 트리(C6-C10)아릴실릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (10-20원)헤테로아릴이거나, 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 벤젠, 치환 또는 비치환된 인돌, 치환 또는 비치환된 벤조인돌, 치환 또는 비치환된 인텐, 치환 또는 비치환된 벤조푸란, 또는 치환 또는 비치환된 벤조티오펜을 형성할 수 있다. 구체적으로는, 상기 Xa 내지 Xh 중의 적어도 하나, 예를 들어, Xb, Xc, Xf 또는 Xg는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜; 치환 또는 비치환된 디벤조푸란; 치환 또는 비치환된 카바졸; 치환 또는 비치환된 벤조카바졸이거나, 인접한 치환기와 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 벤젠, 치환 또는 비치환된 인돌, 치환 또는 비치환된 벤즈인돌, 치환 또는 비치환된 인텐, 치환 또는 비치환된 벤조푸란, 또는 치환 또는 비치환된 벤조티오펜을 형성할 수 있다

[0089] 상기 화학식 2로 표시되는 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

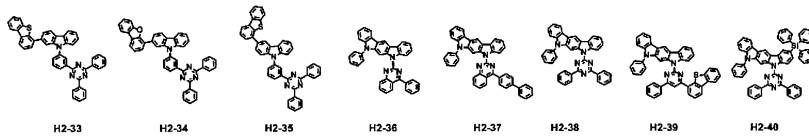
[0090]  H2-1 H2-2 H2-3 H2-4 H2-5 H2-6 H2-7 H2-8

[0091]  H2-9 H2-10 H2-11 H2-12 H2-13 H2-14 H2-15 H2-16

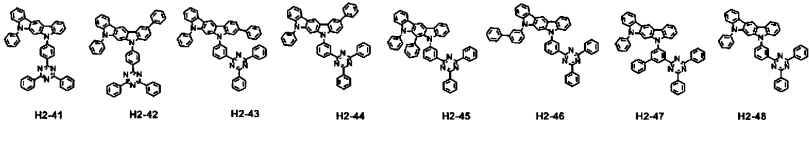
[0092]  H2-17 H2-18 H2-19 H2-20 H2-21 H2-22 H2-23 H2-24

[0093]  H2-25 H2-26 H2-27 H2-28 H2-29 H2-30 H2-31 H2-32

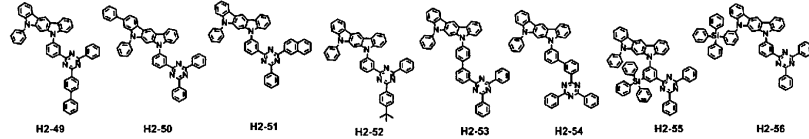
[0094]



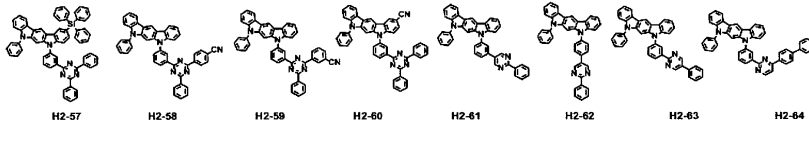
[0095]



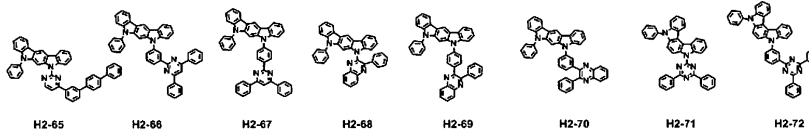
[0096]



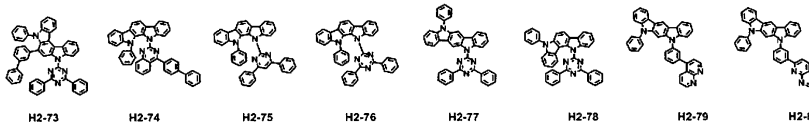
[0097]



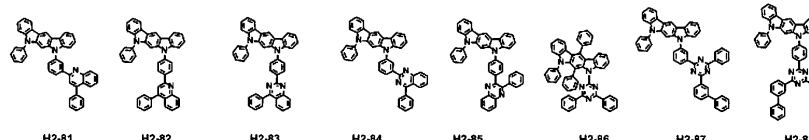
[0098]



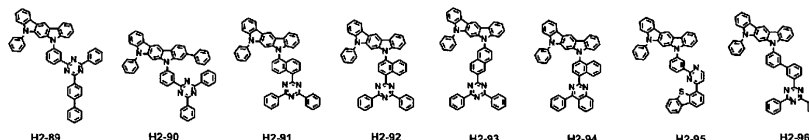
[0099]



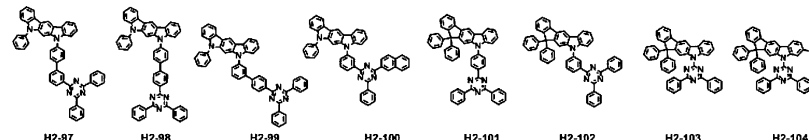
[0100]



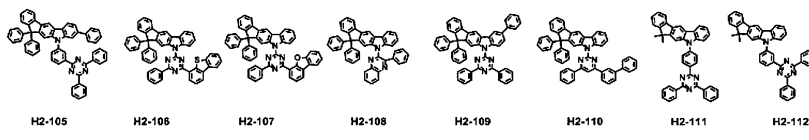
[0101]



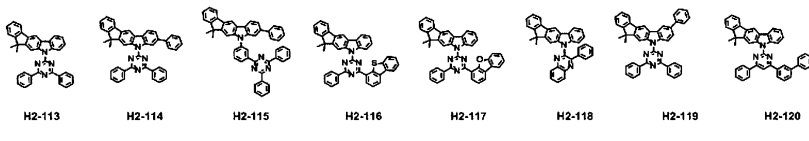
[0102]



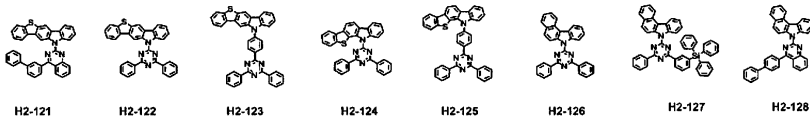
[0103]



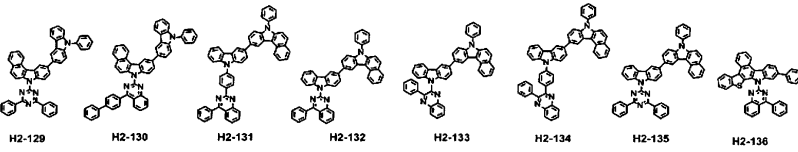
[0104]



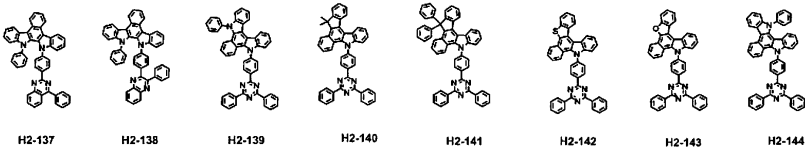
[0105]



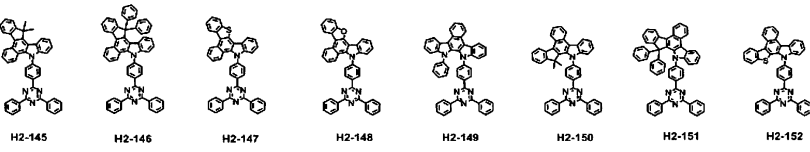
[0106]



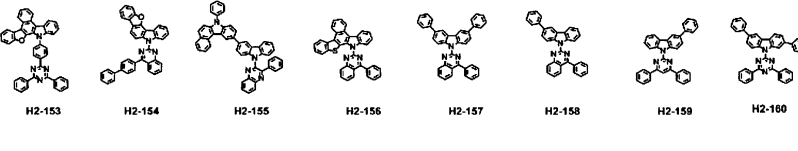
[0107]



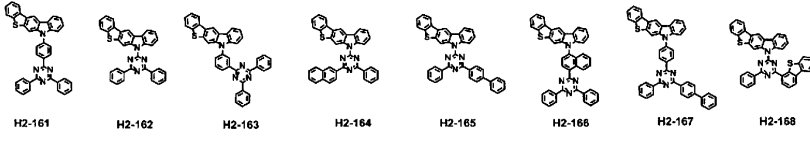
[0108]



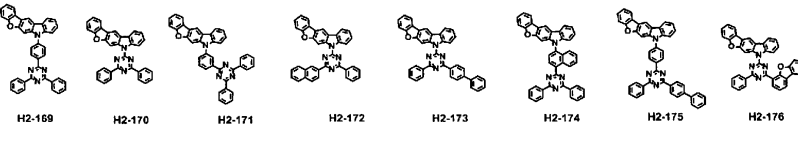
[0109]



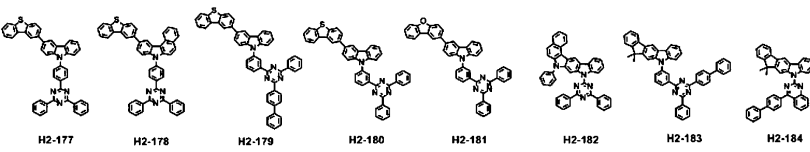
[0110]



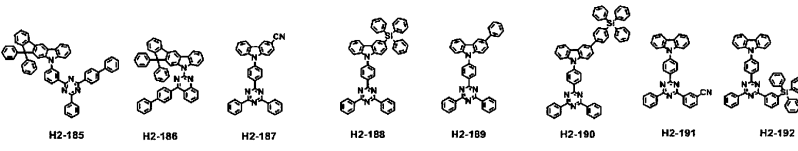
[0111]



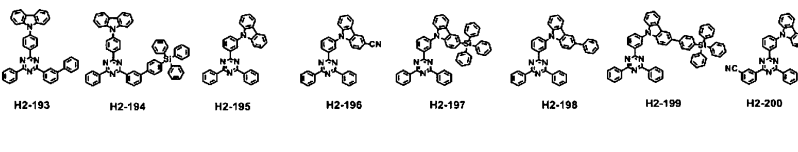
[0112]



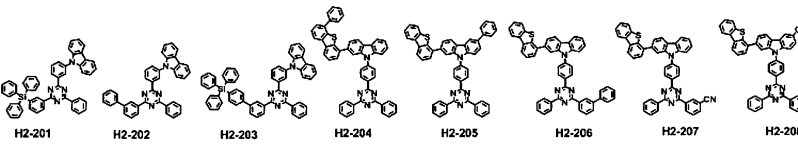
[0113]



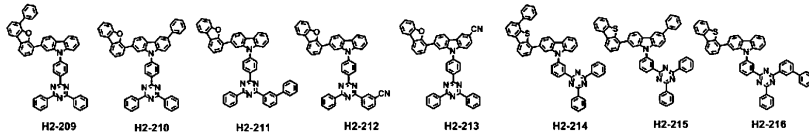
[0114]



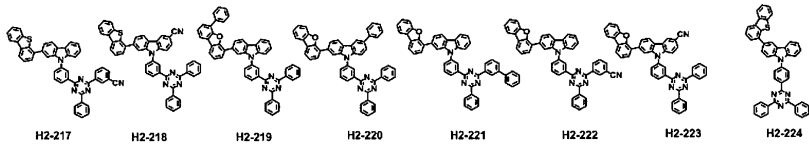
[0115]



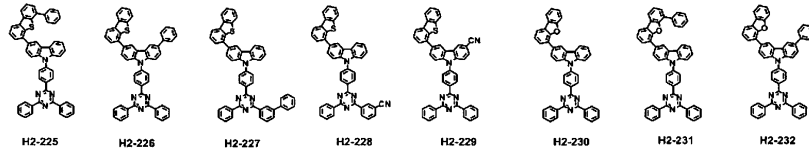
[0116]



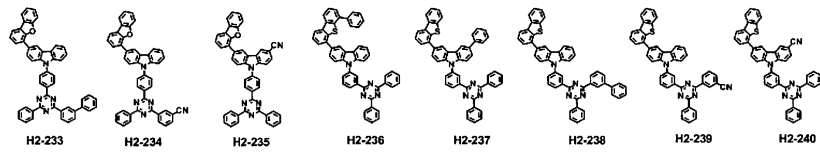
[0117]



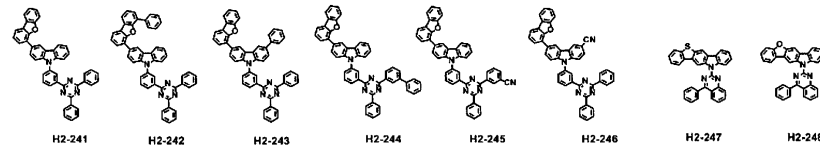
[0118]



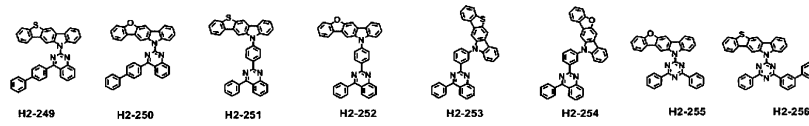
[0119]



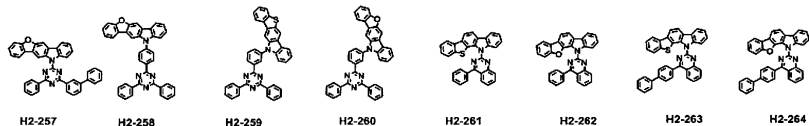
[0120]



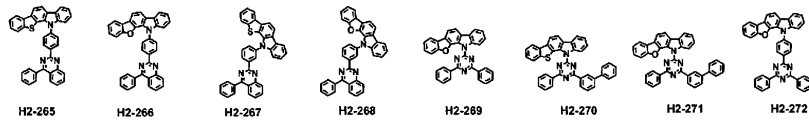
[0121]



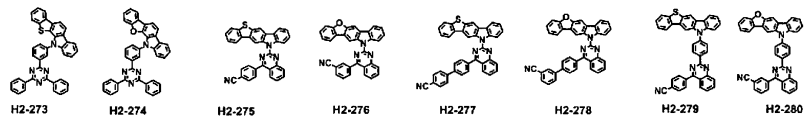
[0122]



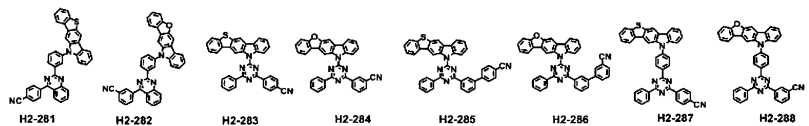
[0123]



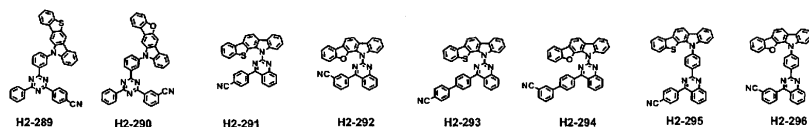
[0124]

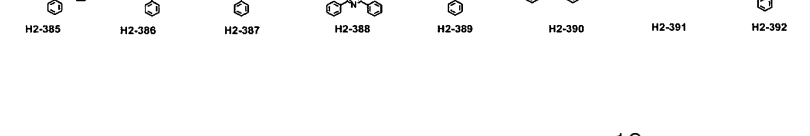
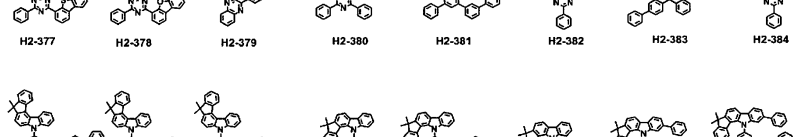
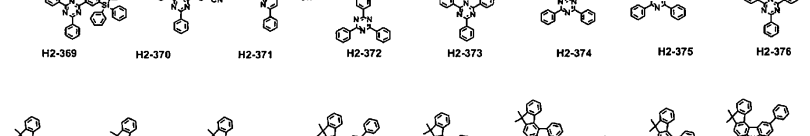
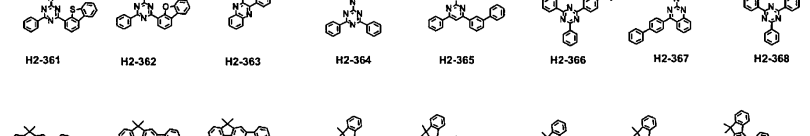
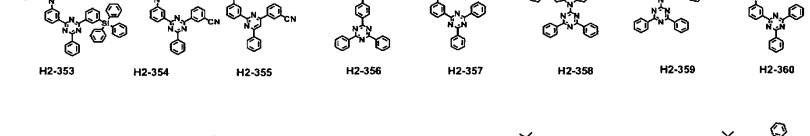
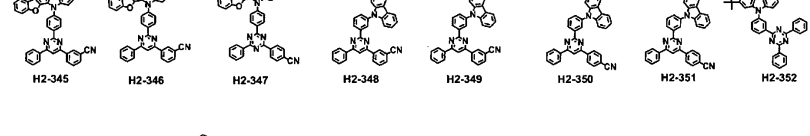
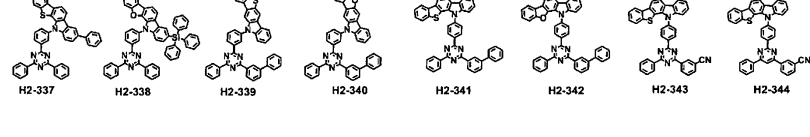
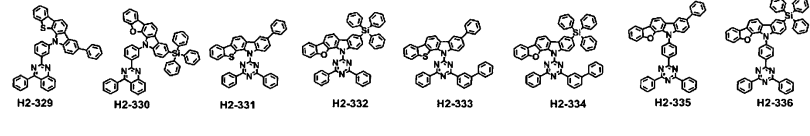
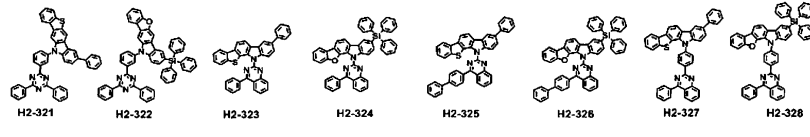
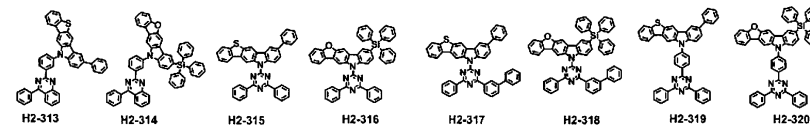
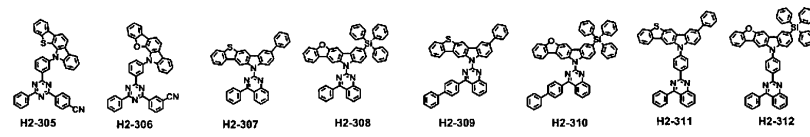
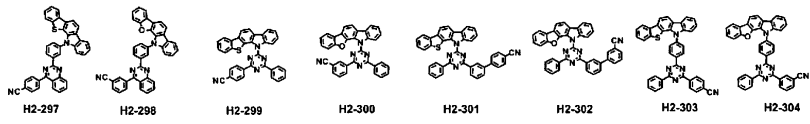


[0125]

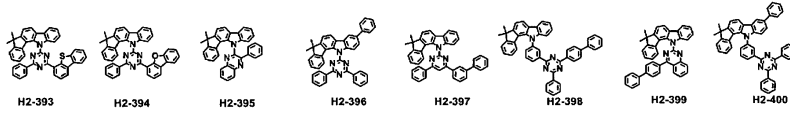


[0126]

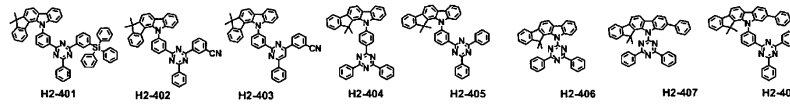




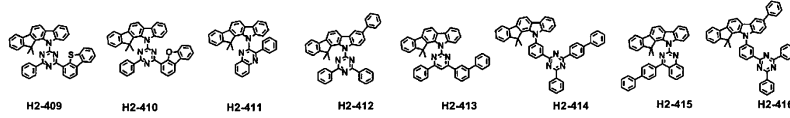
[0139]



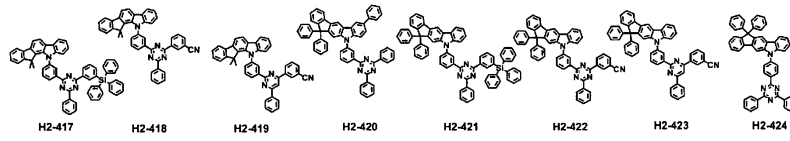
[0140]



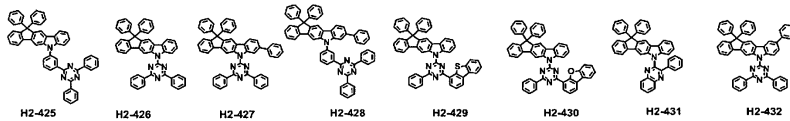
[0141]



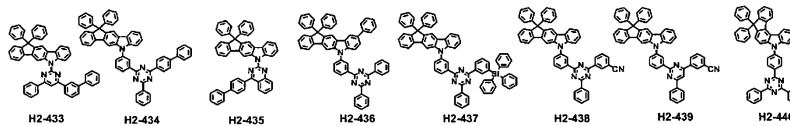
[0142]



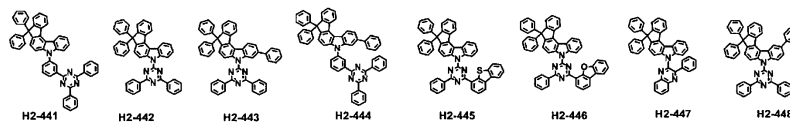
[0143]



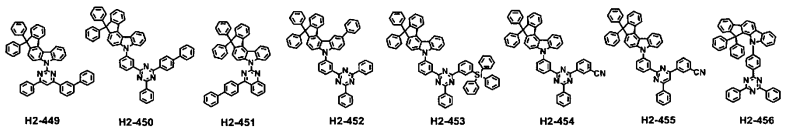
[0144]



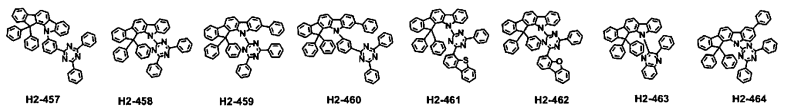
[0145]



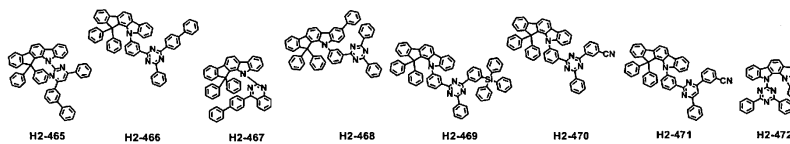
[0146]



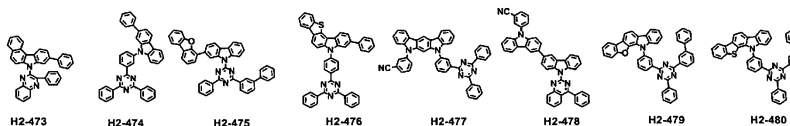
[0147]



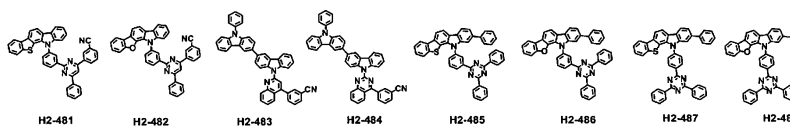
[0148]

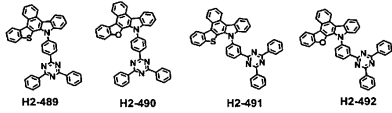


[0149]



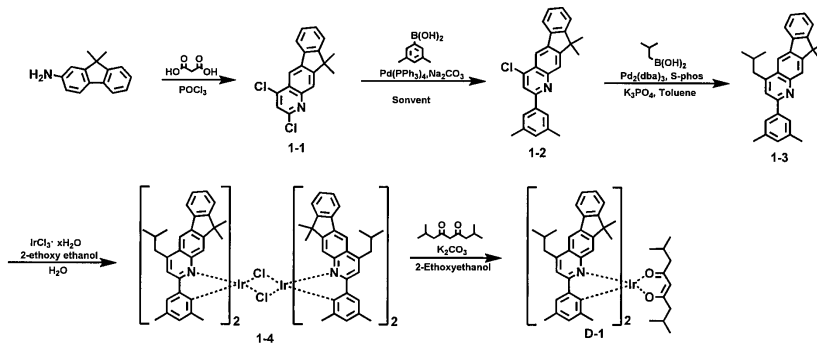
[0150]





- [0151]
- [0152] 본 발명은 추가의 양태로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 상기 화학식 2로 표시되는 화합물의 조합, 및 상기 조합을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [0153] 본 발명은 추가의 양태로 유기 전계 발광 소자 제조용 혼합물 또는 조성물을 제공한다. 상기 혼합물 또는 조성물은 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다. 상기 혼합물 또는 조성물은 유기 전계 발광 소자의 발광층 제조용 혼합물 또는 조성물일 수 있다. 상기 혼합물 또는 조성물은 본 발명의 화합물 이외에도, 상기 화학식 2로 표시되는 호스트 화합물을 추가로 포함할 수 있다. 또한, 상기 혼합물 또는 조성물은 상기 화학식 2로 표시되는 호스트 화합물과 조합되는, 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 혼합물 또는 조성물일 수 있다. 또한, 상기 혼합물 또는 조성물은 유기 전계 발광 소자의 제조를 위해 포함되는 통상의 물질을 추가로 포함할 수 있다.
- [0154] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 화학식 1의 화합물을 포함하고, 이와 동시에 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있다.
- [0155] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1의 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타넘계열 금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 착체화합물을 더 포함할 수도 있다. 나아가 상기 유기물층은 발광층 및 전하생성층을 더 포함할 수 있다.
- [0156] 또한, 본 발명의 상기 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 화합물을 포함하는 발광층 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.
- [0157] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 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 발광매체층 측의 음극 표면에 할로겐화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 이것에 의해 구동의 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는  $SiO_x$  ( $1 \leq x \leq 2$ ),  $AlO_x$  ( $1 \leq x \leq 1.5$ ),  $SiON$  또는  $SiAlON$  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.
- [0158] 또한, 본 발명의 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 전하생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진 백색 유기 전계 발광소자를 제조할 수 있다.
- [0159] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공증착, 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 있다.
- [0160] 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.
- [0161] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광특성을 설명한다.

[0162] [실시예 1] 화합물 D-1의 제조



[0163]

[0164] 1) 화합물 1-1의 제조

[0165] 반응 용기에 말론산(malonic acid) (38 g, 358 mmol)와 POCl<sub>3</sub>(356 mL, 3822 mmol)를 넣고 실온에서 10분간 교반하였다. 여기에 9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민 (50 g, 239 mmol)을 천천히 적가한 후 150℃에서 교반하였다. 혼합물에 H<sub>2</sub>O를 천천히 적가한 뒤, 메틸렌 클로라이드(MC)로 추출하였다. 용매를 제거한 후, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-1 (33.5 g, 45 %)를 얻었다.

[0166] 2) 화합물 1-2의 제조

[0167] 반응 용기에 화합물 1-1 (16.5 g, 53 mmol), 3,5-디메틸페닐 보론산 (9.45 g, 63 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (1.82 g, 1.58 mmol), Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (16.70 g, 157.53 mmol), 톨루엔 (214 mL), 및 H<sub>2</sub>O (79 mL)를 넣고 120℃에서 환류하였다. 반응물을 실온으로 식히고, 에틸 아세테이트와 H<sub>2</sub>O로 추출하였다. 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-2 (15.3 g, 76 %)을 얻었다.

[0168] 3) 화합물 1-3의 제조

[0169] 반응 용기에 화합물 1-2 (15.3 g, 39.85 mmol), 이소부틸 보론산 (8.198 g, 79.71 mmol), 2-디사이클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시타이페닐(S-Phos) (1.30 g, 2.81 mmol), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> (41.43 g, 172.28 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)(Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>)(1.46 g, 1.41 mmol), 및 톨루엔 (266 mL)을 넣고 12시간 교반하였다. 반응물을 실온으로 식히고, 에틸 아세테이트와 H<sub>2</sub>O로 추출한 뒤, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-3 (15.1 g, 93 %)를 얻었다.

[0170] 4) 화합물 1-4의 제조

[0171] 반응 용기에 화합물 1-3 (15.1 g, 37.23 mmol), IrCl<sub>3</sub>·xH<sub>2</sub>O (5.05 g, 16.92 mmol), 2-에톡시에탄올 (130 mL), 및 H<sub>2</sub>O (43.4 mL)를 넣고 130℃에서 24 시간 동안 환류하였다. 반응물을 실온으로 식히고, H<sub>2</sub>O를 넣고 30분간 교반하였다. 고체를 여과하여 화합물 1-4 (7.9 g, 45 %)를 얻었다.

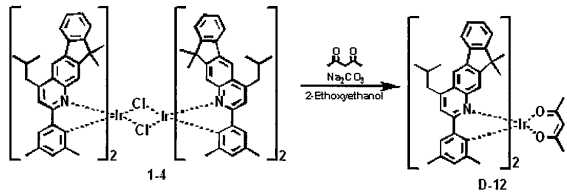
[0172] 5) 화합물 D-1의 제조

[0173] 화합물 1-4 (3.5 g, 1.69 mmol), 2,8-디메틸노네인-4,6-디온 (3.11 g, 16.88 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.34 g, 16.88 mmol), 및 2-에톡시에탄올 (21 mL)을 넣고 실온에서 밤새 반응시켰다. 고체를 여과하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 D-1 (0.7 g, 18 %)을 얻었다.

	분자량	MP(℃)	UV(nm)	PL(nm)
D-1	1184.62	330	288	615

[0174]

[0175] [실시예 2] 화합물 D-12의 제조



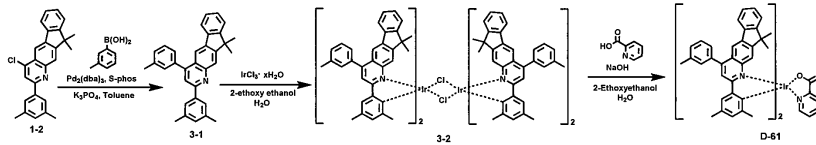
[0176]

[0177] 화합물 1-4 (7.9 g, 3.81 mmol), 아세틸아세톤 (3.8 g, 38.10 mmol), Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (4.04 g, 38.10 mmol), 및 2-에톡시에탄올 (48 mL)을 넣고 실온에서 밤새 반응시켰다. 고체를 여과하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 D-12 (3 g, 36 %)을 얻었다.

	분자량	MP(°C)	UV(nm)	PL(nm)
D-12	1100.46	372	276	617

[0178]

[0179] [실시예 3] 화합물 D-61의 제조



[0180]

[0181] 1) 화합물 3-1의 제조

[0182] 2L 둥근 바닥 플라스크에 화합물 1-2(67.2 g, 181.68 mmol), m-톨릴 보론산(49.40 g, 363.35 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)(Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>)(6.65 g, 7.27 mmol), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>(188.97 g, 890.23 mmol), 2-디사이클로헥실포스포노-2',6'-디메톡시바이페닐(s-phos)(6.00 g, 14.53 mmol)와 톨루엔(1200 ml)을 넣고 24시간 동안 환류교반 하였다. 반응 완료 후 실온으로 식히고 에틸 아세테이트로 추출하고, MgSO<sub>4</sub> 처리 하였다. 반응 혼합물을 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 3-1(46 g, 58%)를 얻었다.

[0183] 2) 화합물 3-2의 제조

[0184] 질소하에서 1L 둥근 바닥 플라스크에 화합물 3-1(46 g, 104.64 mmol), IrCl<sub>3</sub>·xH<sub>2</sub>O(14.22 g, 47.56 mmol), 2-에톡시에탄올(365 mL, 0.13 M)와 H<sub>2</sub>O(122 mL)을 가하고 24시간 동안 환류교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 식히고 용매를 최대한 제거 후 500 ml 물을 가하고 30분간 교반한다. 반응 혼합물을 메탄올과 헥산으로 닦아주고 건조하여 화합물 3-2(50.7 g, 97%)을 얻었다.

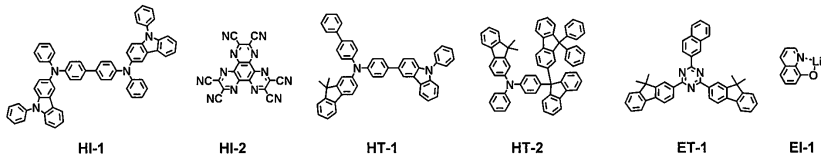
[0185] 3) 화합물 D-61의 제조

[0186] 질소하에서 250 ml 둥근 바닥 플라스크에 화합물 3-2(10 g, 4.53 mmol), 피콜린산(1.11 g, 9.05 mmol), NaOH(0.36 g, 9.05 mmol), 2-에톡시에탄올 (105 mL, 0.043 M)과 H<sub>2</sub>O(10 ml)를 넣고 실온에서 24 시간 동안 교반한다. 반응 후 330 mL 물을 가하고 30분간 교반 후 필터한다. 필터 후 얻은 반응 혼합물을 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 D-61(0.8 g, 30%)를 얻었다.

[0187] [소자 실시예 1-1 및 1-2] 본 발명에 따른 도판트를 포함하는 OLED 소자 제조

[0188] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 OLED 소자를 제조하였다. 우선, 투명전극 ITO 박막(10Ω/□)이 올려진 OLED용 글래스(지오마텍사 제조)를, 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>-6</sup> torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기관 위에 80 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HI-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1정공 주입층 위에 5nm두께의 제2

정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HT-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2정공 주입층 위에 10nm두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HT-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1정공 전달층 위에 60nm 두께의 제2정공 전달층을 증착하였다. 정공 주입층, 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀에 호스트로서 화합물 H2-16을 넣고, 또 다른 셀에는 하기 표 1에 기재된 도판트 물질을 넣은 후, 호스트 물질을 증발시키고 동시에 도판트 물질을 호스트 물질과는 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물ET-1과 화합물 EI-1을 1:1의 속도로 증발시켜 발광층 위에 30 nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서, 전자 주입층으로 화합물 EI-1을 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착장비를 이용하여 Al 음극을 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다.



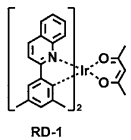
[0189]

[0190]

[비교예 1-1] 종래의 도판트를 포함하는 OLED 소자 제조

[0191]

발광층의 도판트로서 하기 화합물 RD-1을 사용한 것 외에는 소자 실시예 1-1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.



[0192]

[0193]

상기 소자 실시예 1-1 및 1-2, 비교예 1-1에서 제조한 유기 전계 발광 소자의 평가 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[0194]

[표 1]

	호스트	도판트	전압 (V)	효율 (cd/A)	색좌표 (x, y)	
소자 실시예 1-1	H2-16	D-12	4.2	32.7	668	331
소자 실시예 1-2	H2-16	D-1	4.1	34.0	669	330
비교예 1-1	H2-16	RD-1	4.2	22.4	660	338

[0195]

[0196]

본 발명에 의한 유기 전계 발광 화합물을 이용하면 종래의 유기 전계 발광 화합물과 대비하여 우수한 효율 및 색 순도를 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

[0197]

이는 비교예의 퀴놀린 리간드에 비해 소자 실시예의 아자벤조[b]플루오렌 리간드가 유기 전계 발광 소자로 하여금 더욱 우수한 효율을 나타내도록 하는데 기여한 것으로 이해될 수 있다. 더욱이, 본 발명에 따르면 아자벤조[b]플루오렌 리간드의 바깥쪽에 치환기 (상기 소자 실시예에서는 알킬 치환기)가 도입되어 있는데, 이러한 치환기가 이리듐 착물의 8면체 구조(octahedral structure)에 입체 장애(steric hinderance)를 주게 되어 3중항-3중항 소멸이 줄어들어 효율이 증가하는 특성을 극대화시킨 것으로 이해될 수 있다.

[0198]

한편, 상기 본 발명의 아자벤조[b]플루오렌 리간드를 아자벤조[a]플루오렌 리간드와 비교하면, 양자역학 시뮬레이션 결과에 의했을 때 아자벤조[b]플루오렌 리간드와 이리듐 금속의 결합 길이가 아자벤조[a]플루오렌 리간드에 비하여 더 짧는데, 이와 같이 결합 길이가 짧을수록 이리듐 원자에 의한 스핀 오비탈 커플링(spin orbital coupling)이 더 강하게 작용함으로써 더 좋은 효율을 보일 것이라고 예측할 수 있다.

专利名称(译)	标题：有机电致发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020170069151A</a>	公开(公告)日	2017-06-20
申请号	KR1020160165699	申请日	2016-12-07
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
当前申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	KIM HYUN 김현 LEE GA WON 이가원 JANG SUNG WOO 장성우		
发明人	김현 이가원 장성우		
IPC分类号	C09K11/06 C07F15/00 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0085 C07F15/0033 C09K11/06 C09K2211/1029 C09K2211/185 H01L51/001 H01L51/5016 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/5088 H01L51/5092 H01L51/56		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020150176262 2015-12-10 KR		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

本发明涉及有机电致发光化合物和包含其的有机电致发光器件。根据本发明的有机电致发光化合物可以制造其中色纯度和效率显著提高的有机电致发光器件。

