



(19) 대한민국특허청(KR)
 (12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0061649
 (43) 공개일자 2019년06월05일

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

(71) 출원인
 롬엔드하스전자재료코리아유한회사
 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)

(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/0055 (2013.01)
 (21) 출원번호 10-2017-0160254
 (22) 출원일자 2017년11월28일
 심사청구일자 없음

(72) 발명자
 오홍세
 경기도 화성시 석우동 삼성1로5길 20
 이태진
 경기도 화성시 석우동 삼성1로5길 20
 (뒷면에 계속)

(74) 대리인
 장춘

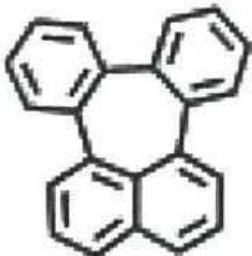
전체 청구항 수 : 총 9 항

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

(57) 요 약

본원은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써 종래의 유기 전계 발광 소자에 비해 높은 발광 효율 및/또는 장 수명의 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류

H01L 51/006 (2013.01)

H01L 51/50 (2013.01)

C09K 2211/1014 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

C09K 2211/1044 (2013.01)

C09K 2211/1059 (2013.01)

C09K 2211/1088 (2013.01)

C09K 2211/1092 (2013.01)

(72) 발명자

양정은

경기도 화성시 석우동 삼성1로5길 20

이연건

경기도 화성시 석우동 삼성1로5길 20

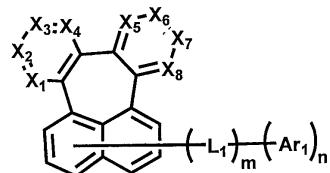
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



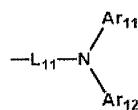
상기 화학식 1에서,

X₁ 내지 X₈은 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이고;

R₁은 수소 또는 $-\left(L_2\right)_o\left(Ar_2\right)_p$ 이며;

L₁ 및 L₂은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이고;

Ar₁ 및 Ar₂은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴



실릴, 또는 이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 고리를 형성할 수 있으며;

L₁₁은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고;

Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이며;

m, n, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수이다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 Ar₁, Ar₂, L₁, L₂, L₁₁, Ar₁₁ 및 Ar₁₂에서 치환된 (C1-C30)알킬(렌), 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 및 치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 헤드록시, (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 (3-30원)헤테로아릴, (3-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디-

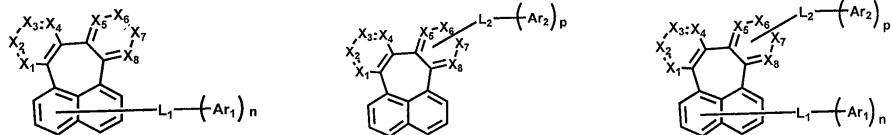
(C1-C30)알킬아미노, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬 (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1-1] [화학식 1-2]

[화학식 1-3]



상기 화학식 1-1 내지 1-3에서,

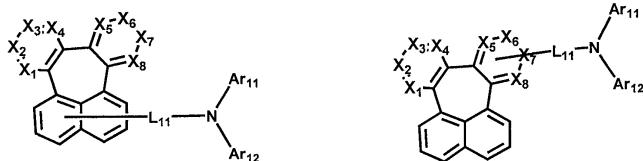
X₁ 내지 X₈은 각각 독립적으로 N 또는 CH이고,

L₁, L₂, Ar₁, Ar₂, n 및 p는 각각 청구항 1에서의 정의와 동일하다.

청구항 4

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

[화학식 2-1] [화학식 2-2]



상기 화학식 2-1 및 2-2에서,

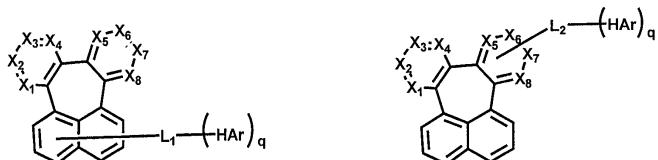
X₁ 내지 X₈은 각각 독립적으로 N 또는 CH이고,

L₁₁, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 각각 청구항 1에서의 정의와 동일하다.

청구항 5

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 3-1 또는 3-2로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 3-1] [화학식 3-2]



상기 화학식 3-1 및 3-2에서,

HAr은 치환 또는 비치환된 (3-30원) 헤테로아릴이고,

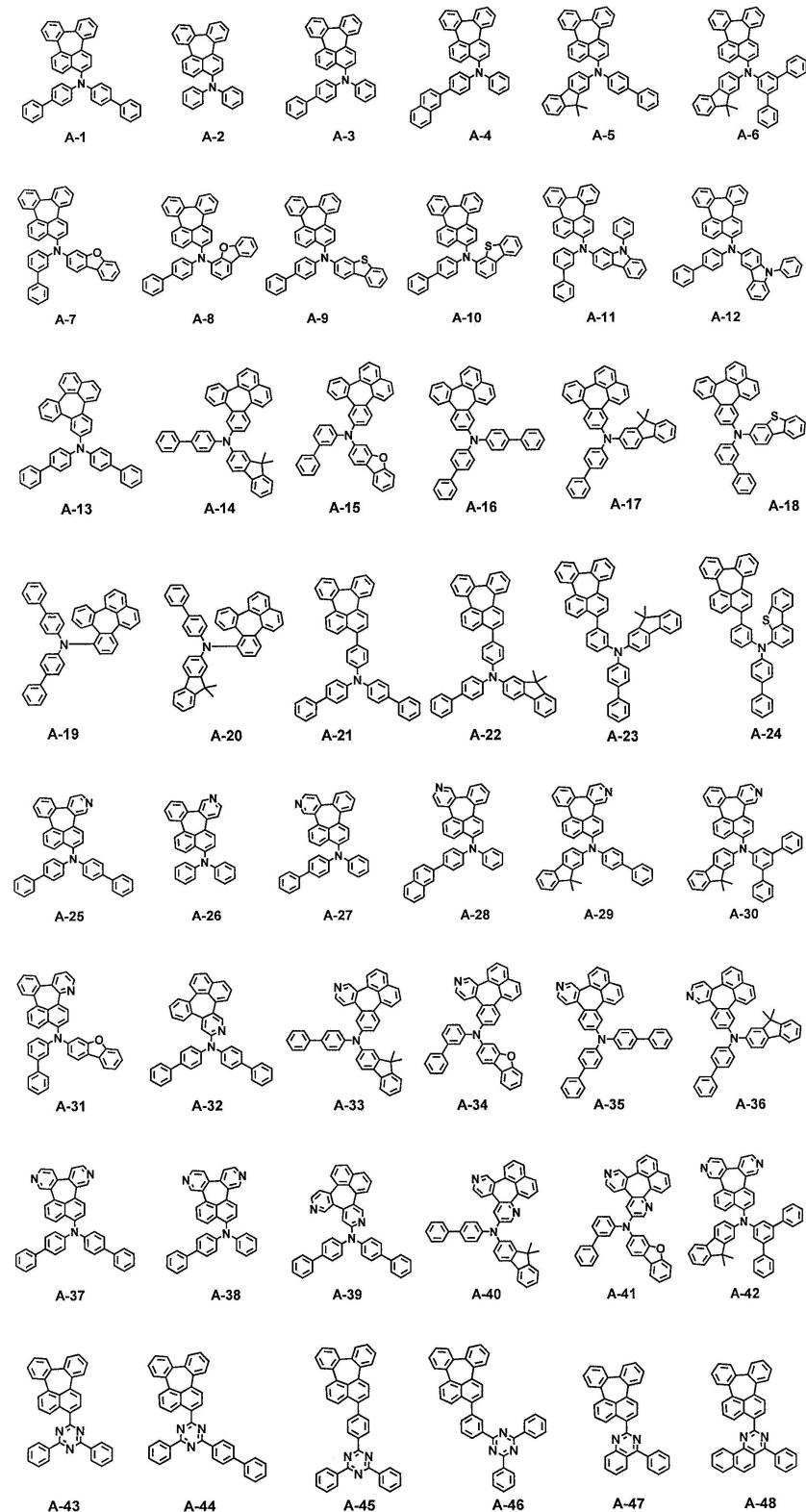
X₁ 내지 X₈은 각각 독립적으로 N 또는 CH이며,

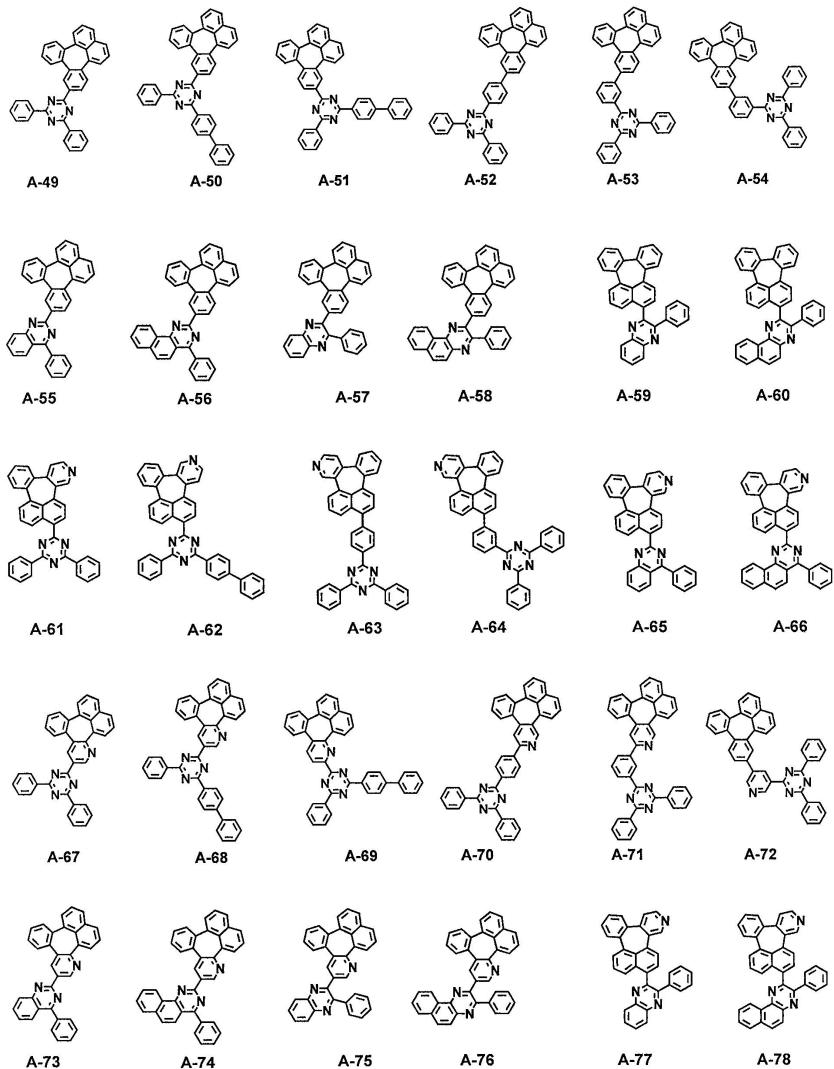
q는 0 내지 2의 정수이고,

L_1 및 L_2 는 각각 청구항 1에서의 정의와 동일하다.

청구항 6

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





청구항 7

제1항에 기재된 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 재료.

청구항 8

제1항에 기재된 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

청구항 9

제8항에 있어서, 상기 화합물을 정공 전달 대역에 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]

이스트만 코닥 사의 Tang 등이 1987년에 발광층과 전하 전달층으로 이루어진 TPD/Alq₃ 이중층 저분자 녹색 유기 전계 발광 소자(OLED)를 처음으로 개발한 이후, 유기 전계 발광 소자에 대한 연구가 급속도로 빠르게 이루어져 현재 상용화에 이르렀다. 유기 전계 발광 소자(organic electroluminescent device; OLED)는 유기 발광 재료에 전기를 가해 전기 에너지를 빛으로 바꾸는 소자로서, 통상 양극 (애노드) 및 음극 (캐소드)과 이들 사이에 유기 물층을 포함하는 구조를 가진다. 유기 전계 발광 소자는 이의 효율성 및 안정성을 높이기 위해 정공 전달 대역,

발광층, 전자 전달 대역 등을 포함하는 다층 구조로 이루어진다.

[0003] 또한, 유기 전계 발광 소자의 성능은 각각의 대역 또는 층에 포함되는 화합물에 따라 크게 좌우되므로, 유기 전계 발광 소자의 성능을 향상시킬 수 있는 새로운 화합물의 연구가 활발히 진행되고 있다.

[0004] 예를 들어, 유기 전계 발광 소자에서 정공 전달 대역(hole transport zone)에 포함되는 화합물로서 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. 이는 유기 전계 발광 소자를 높은 전류에서 구동하게 되면, 양극과 정공 주입층 사이에서 열 스트레스(thermal stress)가 발생하고, 이러한 열 스트레스에 의해 소자의 수명이 급격히 저하되기 때문이다. 또한, 정공 전달 대역에 사용되는 유기 물질은 정공의 운동성이 매우 크기 때문에, 정공과 전자의 전하 밸런스(hole-electron charge balance)가 깨지고 이로 인해 양자 효율(cd/A)이 낮아지게 된다. 그러므로, 정공 전달 대역에 사용되는 기존의 화합물을 대체할 수 있는 새로운 화합물이 요구된다.

[0005] 그 밖에도, 유기 전계 발광 소자의 발광 효율, 구동 전압 및/또는 수명 특성을 개선시키기 위한 다양한 재료 및 소자들의 연구가 계속 중이다.

발명의 내용

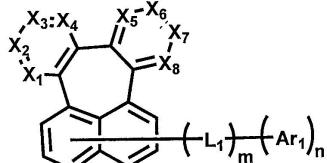
해결하려는 과제

[0006] 본원의 목적은 높은 발광 효율 및/또는 장 수명의 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조하는데 효과적인 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0007] 본 발명자들은 디벤조[4,5:6,7]사이클로헵타 [1,2,3-디]나프탈렌 잔기 화합물을 기반으로 한 7원 고리 화합물인, 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0008] [화학식 1]



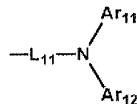
[0010] 상기 화학식 1에서,

[0011] X₁ 내지 X₈은 각각 독립적으로 N 또는 CR₁이고;

[0012] R₁은 수소 또는 -(L₂)_p-(Ar₂)_p이며;

[0013] L₁ 및 L₂은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이고;

[0014] Ar₁ 및 Ar₂은 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)아릴



실릴, 또는 Ar_{11} 이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 고리를 형성할 수 있으며;

[0015] L_{11} 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헥테로아릴렌이고;

[0016] Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헥테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이며;

[0017] m , n , o 및 p 는 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수이다.

발명의 효과

[0018] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써, 높은 발광 효율 및/또는 장 수명의 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0019] 도 1은, 본원의 유기 전계 발광 화합물의 기본 골격을 나타낸 것이다.

도 2는, 본원의 유기 전계 발광 화합물의 기본 골격을 3D 문자 구조로 나타낸 것이다.

도 3은, 본원의 유기 전계 발광 화합물의 기본 골격을 3D 문자 구조로 나타낸 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0020] 이하에서 본원을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.

[0021] 본원의 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 상기 제1 전극에 대향하는 제2 전극; 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이의 발광층을 포함하고, 상기 제1 전극과 발광층 사이에 정공 전달 대역을 포함할 수 있으며, 상기 발광층과 상기 제2 전극 사이에 전자 전달 대역을 포함할 수 있다. 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 애노드이고, 다른 하나는 캐소드일 수 있다.

[0022] 본원에서 "유기 전계 발광 화합물"은 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 화합물을 의미하며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 재료층에 포함될 수 있다.

[0023] 본원에서 "유기 전계 발광 재료"는 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 재료를 의미하고, 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있으며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다. 예를 들면, 상기 유기 전계 발광 재료는 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료, 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료 등 일 수 있다.

[0024] 본원에서 "정공 전달 대역"은 제1 전극과 발광층 사이에서 정공이 이동하는 영역을 의미하며, 예를 들어 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층 및 전자 차단층 중 하나 이상을 포함할 수 있다. 상기 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층 및 전자 차단층은 각각 하나의 단일층, 또는 2개 이상의 층이 적층된 복수의 층일 수 있다. 본원의 일 태양에 따르면, 상기 정공 전달 대역은 제1 정공 전달층 및 제2 정공 전달층을 포함할 수 있다. 상기 제2 정공 전달층은 복수의 정공 전달층 중 하나 이상의 층일 수 있으며, 정공 보조층, 발광 보조층 및 전자 차단층 중 하나 이상을 포함할 수 있다. 또한, 본원의 다른 일 태양에 따르면, 상기 정공 전달 대역은 제1 정공 전달층 및 제2 정공 전달층을 포함하고, 상기 제1 정공 전달층은 제1 전극과 발광층 사이에 위치할 수 있고, 상기 제2 정공 전달층은 제1 정공 전달층과 발광층 사이에 위치할 수 있으며, 제2 정공 전달층은 정공 전달층, 발광 보조층, 정공 보조층 및/또는 전자 차단층의 역할을 하는 층일 수 있다.

[0025] 상기 정공 전달층은 애노드 (또는 정공 주입층)와 발광층 사이에 위치하고, 애노드에서 전달되어 온 정공을 원활하게 발광층으로 이동하게 하며, 캐소드에서 전달되어 온 전자를 차단하여 발광층에 머무르도록 하는 기능도 할 수 있다. 상기 발광 보조층은 애노드와 발광층 사이에 위치하거나, 캐소드와 발광층 사이에 위치하는 층으로서, 발광 보조층이 상기 애노드와 발광층 사이에 위치할 경우, 정공의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 전자의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있고, 발광 보조층이 캐소드와 발광층 사이에 위치할 경우, 전자

의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 정공의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있다. 또한, 상기 정공 보조층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도(또는 주입 속도)를 원활하게 하거나 블록킹하는 효과를 나타낼 수 있으며, 이에 따라 전하 밸런스(charge balance)를 조절할 수 있다.

[0026] 또한, 상기 전자 차단층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 발광층으로부터의 전자의 오버플로우를 차단하여 엑시톤을 발광층 내에 가두어 발광 누수를 방지할 수 있다. 유기 전계 발광 소자가 정공 전달층을 2 층 이상 포함할 경우, 추가로 포함되는 정공 전달층은 발광 보조층, 정공 보조층, 전자 차단층 등의 용도로 사용될 수 있다. 상기 발광 보조층, 상기 정공 보조층, 및/또는 상기 전자 차단층은 유기 전계 발광 소자의 발광 효율 및/또는 수명의 개선 효과를 가질 수 있다.

[0027] 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-프로파닐, 2-프로파닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 환골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환의 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 환골격 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, 페롤리딘, 티올란, 테트라하이드로파란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴"은 환골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계라디칼을 의미하고, 부분적으로 포화될 수도 있다. 상기 환골격 탄소수는 바람직하게는 6 내지 25개, 더 바람직하게는 6 내지 18개이다. 상기 아릴은 스퍼로 구조를 가진 것을 포함한다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 페닐터페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 페레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 스퍼로비플루오레닐 등이 있다. 본원에서 "(3-30원)헤테로아릴"은 환골격 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, 스퍼로 구조를 가진 것도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 페롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 페리딜, 페라진일, 페리미딘일, 페리다진일 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, 페녹사진일, 페노티아진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로겐"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

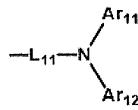
[0028] 또한, 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 상기 화학식 1, 3-1 및 3-2의 상기 Ar₁, Ar₂, L₁, L₂, L₁₁, Ar₁₁ 및 Ar₁₂에서 치환된 (C1-C30)알킬(렌), 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (3-30원)헤테로아릴(렌), 치환된 (C3-C30)시클로알킬(렌), 치환된 (C1-C30)알콕시, 치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴 및 치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오,

(C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴, (3-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이다. 상기 치환체는, 본원의 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 (C1-C20)알킬 및/또는 (C6-C25)아릴이고; 본원의 다른 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 (C1-C10)알킬 및/또는 (C6-C18)아릴이며; 예를 들면, 각각 독립적으로 메틸, 페닐, 비페닐 중 하나 이상일 수 있다.

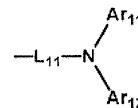
[0029] 상기 화학식 1에서, X_1 내지 X_8 은 각각 독립적으로 N 또는 CR_1 이고; R_1 은 수소 또는 $\begin{array}{c} \text{Ar}_1 \\ | \\ -L_1-N- \\ | \\ \text{Ar}_{12} \end{array}$ 이다.

[0030] 상기 화학식 1에서, L_1 및 L_2 은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이고; 본원의 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴렌이며; 본원의 다른 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 단일결합, 비치환된 (C6-C18)아릴렌, 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴렌이다. 예를 들면, L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로, 단일 결합, 페닐렌, 트리아지닐렌, 퀴나졸리닐렌, 퀴녹살리닐렌, 벤조퀴나졸리닐렌, 벤조퀴녹살리닐렌 또는 피리딜렌일 수 있다.

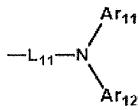
[0031] 상기 화학식 1에서, Ar_1 및 Ar_2 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는



비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 또는 이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 고리를 형성할 수 있고; 본원의 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 수소, 치환 또



는 비치환된 (C6-C25)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴, 또는 |며; 본원의 다른 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 수소, 비치환된 (C6-C18)아릴, (C6-C18)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤



테로아릴, 또는 이다. 예를 들면, Ar_1 및 Ar_2 은 각각 독립적으로, 수소, 페닐, 비페닐, 디페닐트리아진일, 페닐비페닐트리아진일, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 벤조퀴나졸리닐, 벤조퀴녹살리닐, 디메틸플루오레닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오페닐 등 일 수 있다.

[0032] 상기 L_{11} 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고; 본원의 일 양태에 따르면, 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴렌이며; 본원의 다른 일 양태에 따르면, 단일결합, 비치환된 (C6-C18)아릴렌, 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴렌이다. 예를 들면, L_{11} 은 단일결합이다.

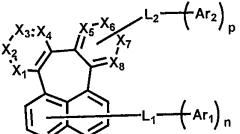
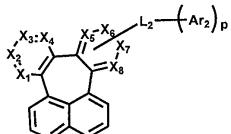
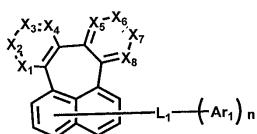
[0033] 상기 Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고; 본원의 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴이며; 본원의 다른 일 양태에 따르면, 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 (C6-C18)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴렌이다. 예를 들면, Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 각각 독립적으로 페닐,

비페닐, 디메틸플루오레닐, 나프ти페닐, 터페닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오페닐, 페닐카바졸릴일 수 있다. 또한, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 각각 서로 동일하거나, 상이할 수 있다.

[0034] 상기 화학식 1에서, m, n, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수이다.

[0035] 본원의 일 양태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0036] [화학식 1-1] [화학식 1-2] [화학식 1-3]

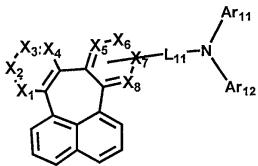
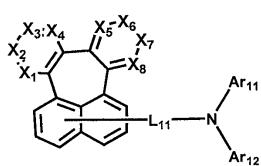


[0037]

[0038] 상기 화학식 1-1 내지 1-3에서, X₁ 내지 X₈은 각각 독립적으로 N 또는 CH이고, L₁, L₂, Ar₁, Ar₂, n 및 p는 각각 화학식 1에서의 정의와 동일하다.

[0039] 본원의 일 양태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2-1 및 2-2 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0040] [화학식 2-1] [화학식 2-2]

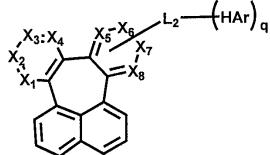
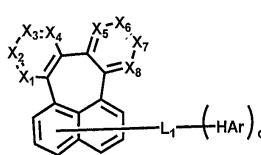


[0041]

[0042] 상기 화학식 2-1 및 2-2에서, X₁ 내지 X₈은 각각 독립적으로 N 또는 CH이고, L₁₁, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 각각 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하다.

[0043] 본원의 일 양태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 3-1 및 3-2 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0044] [화학식 3-1] [화학식 3-2]



[0045]

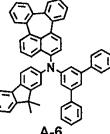
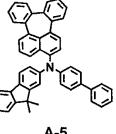
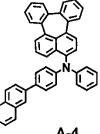
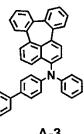
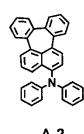
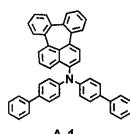
[0046] 상기 화학식 3-1 및 3-2에서, HAr은 치환 또는 비치환된 전자-풍부한 (3-30원)헤테로아릴이고, 본원의 일 양태에 따르면, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이며, 본원의 다른 일 양태에 따르면, 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴이고, 본원의 또 다른 일 양태에 따르면, (C6-C18)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴이다. 예를 들면, HAr은 디페닐트리아진일, 페닐비페닐트리아진일, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 벤조퀴나졸리닐, 벤조퀴녹살리닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오페닐 등 일 수 있다.

[0047]

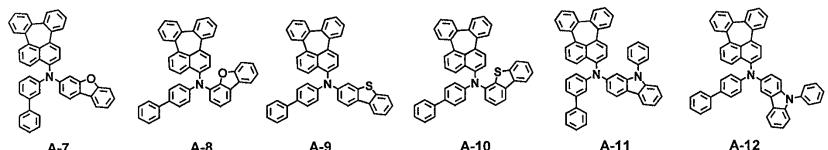
상기 화학식 3-1 및 3-2에서, X₁ 내지 X₈은 각각 독립적으로 N 또는 CH이고, q는 0 내지 2의 정수이며, L₁ 및 L₂는 각각 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하다.

[0048]

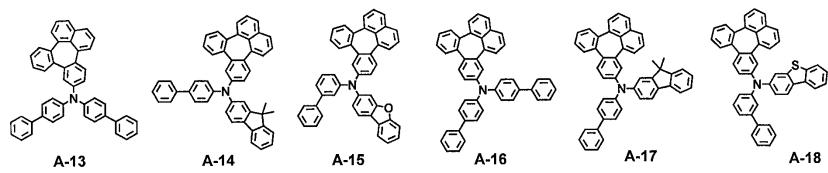
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물들로부터 선택된 어느 하나일 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



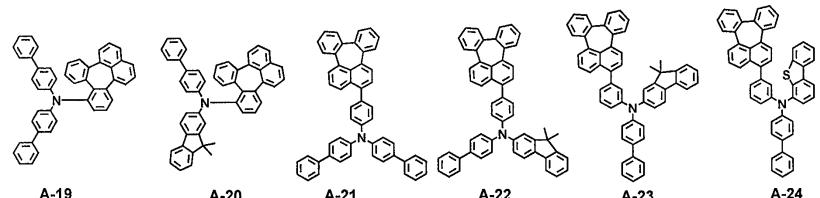
[0049]



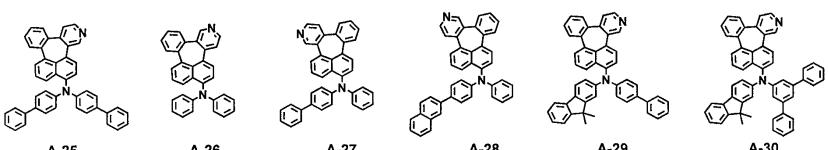
[0050]



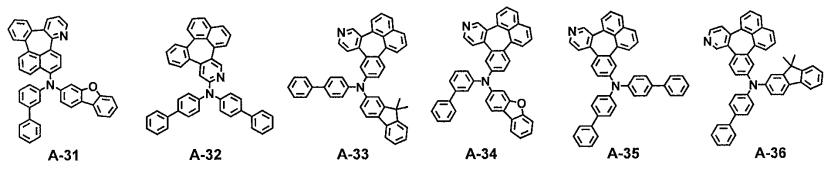
[0051]



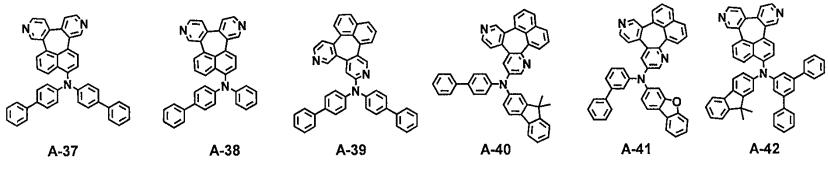
[0052]



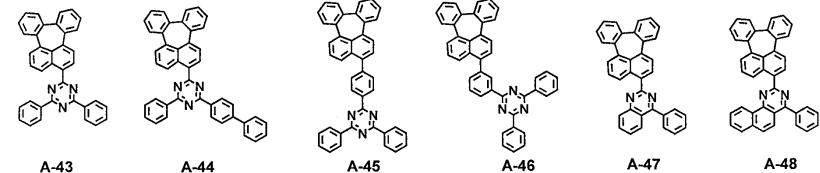
[0053]



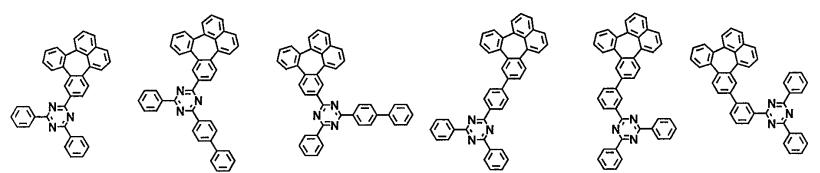
[0054]



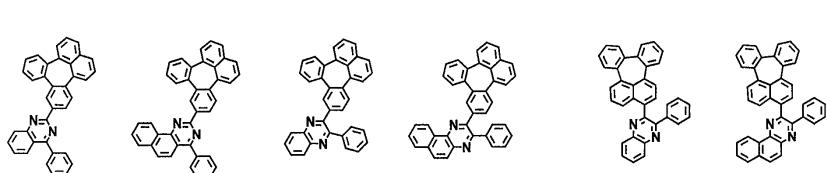
[0055]



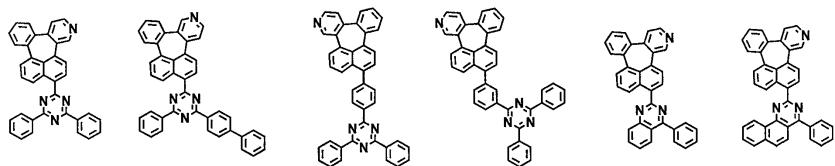
[0056]



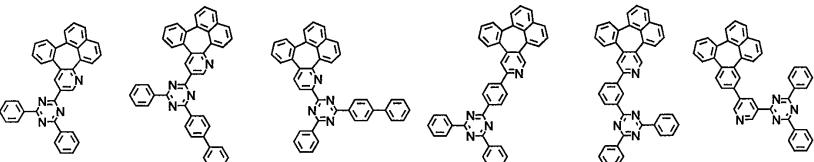
[0057]



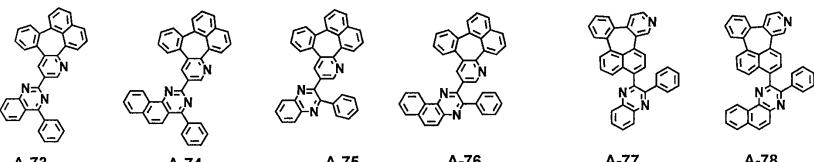
[0058]



[0059]



[0060]

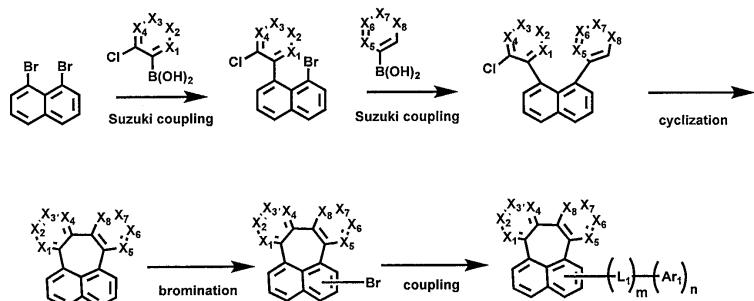


[0061]

[0062] 본원의 화학식 1로 표시되는 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있다. 예를 들면, 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 반응식 1에 나타난 바와 같이 합성될 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0063]

[반응식 1]



[0064]

[0065] 상기 반응식 1에서, X₁ 내지 X₈, L₁, Ar₁, m 및 n은 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

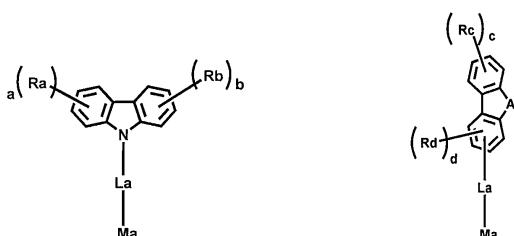
[0066]

[0066] 본원의 화합물과 함께 조합되어 사용할 수 있는 호스트 화합물로는 하기 화학식 4 및 5 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0067]

[화학식 4]

[화학식 5]



[0068]

[0069] 상기 화학식 4 및 5에서,

[0070]

Ma는 치환 또는 비치환된 (C₆-C₃₀)아릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C₆-C₃₀)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고;

[0071]

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

[0072]

A는 S, O, NR₇ 또는 CR₈R₉O이고;

[0073]

R_a 내지 R_d는 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)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

[0074]

R₇ 내지 R₉는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이며; R₈ 및 R₉는 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고;

[0075]

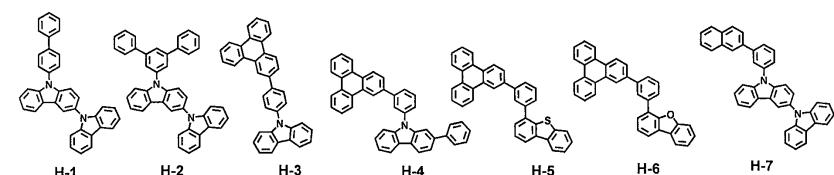
a 내지 c는 1 내지 4의 정수이고, d는 1 내지 3의 정수이며;

[0076]

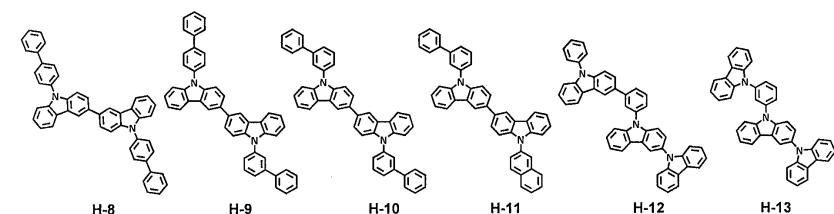
상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

[0077]

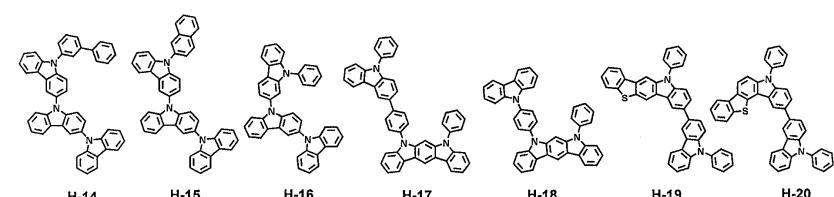
상기 화학식 4 및 5 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



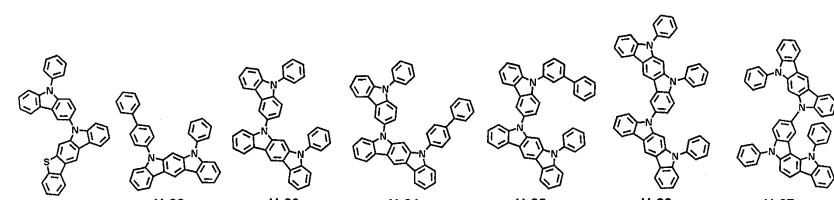
[0078]



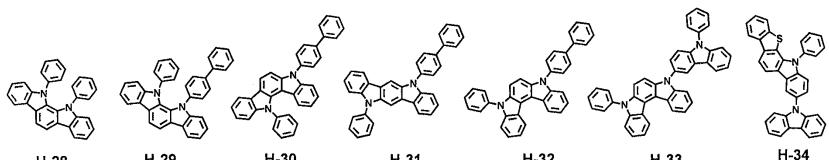
[0079]



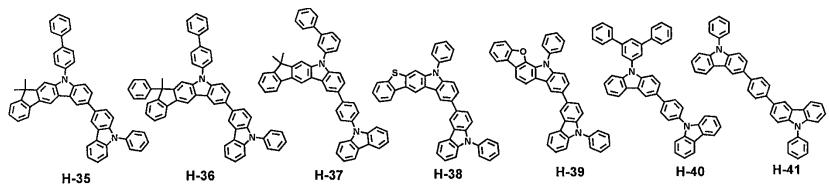
[0080]



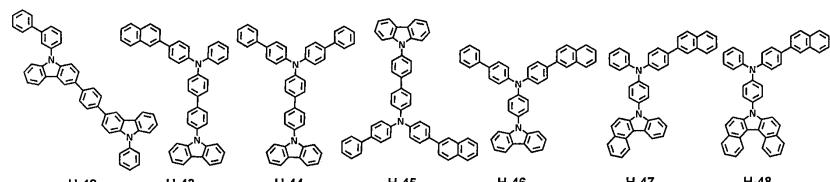
[0081]



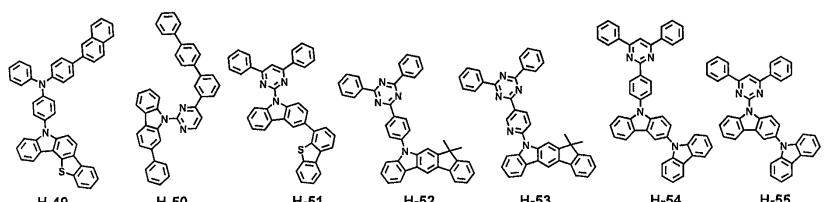
[0082]



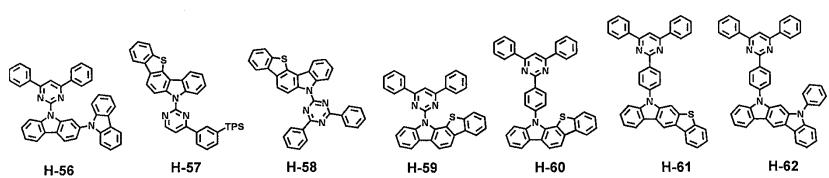
[0083]



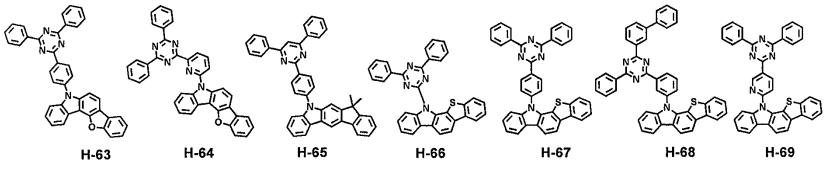
[0084]



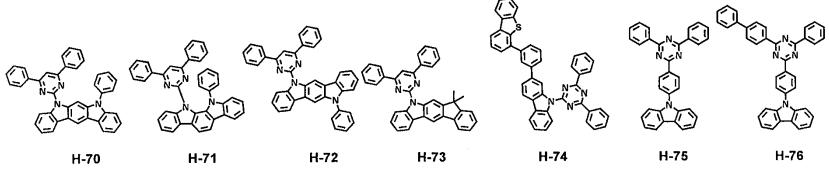
[0085]



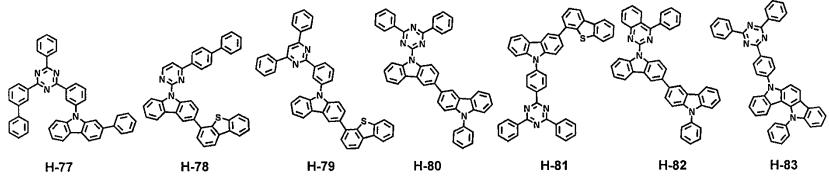
[0086]



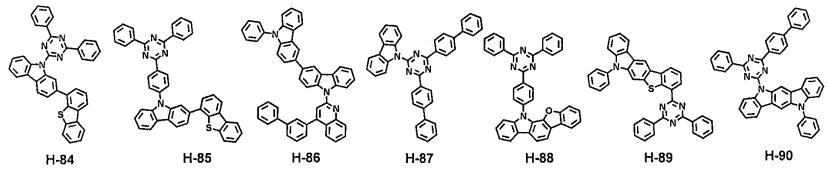
[0087]



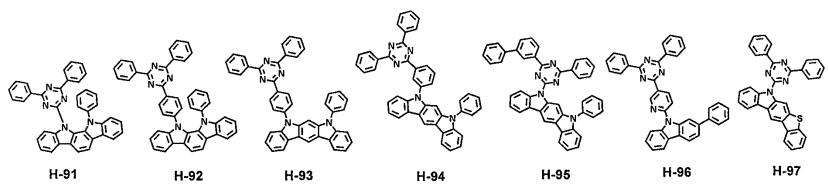
[0088]



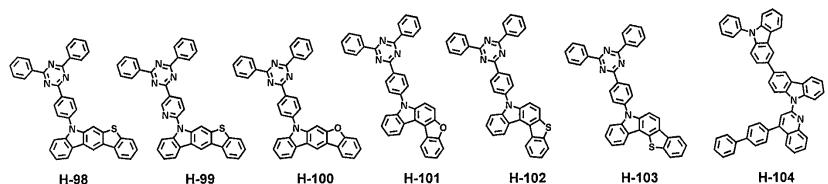
[0089]



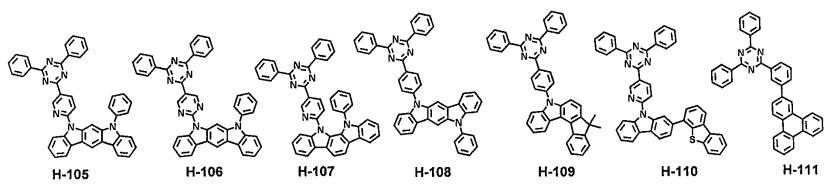
[0090]



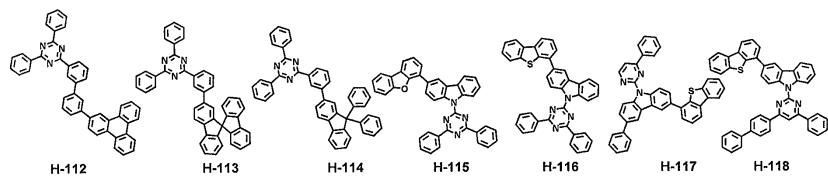
[0091]



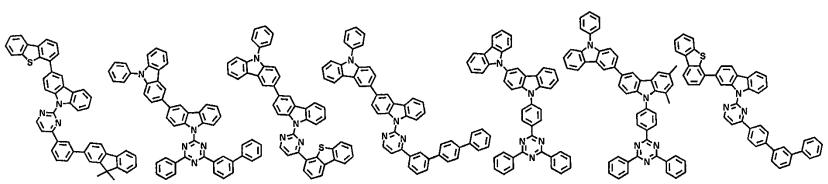
[0092]



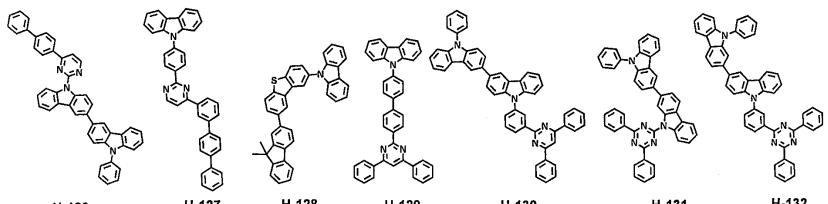
[0093]



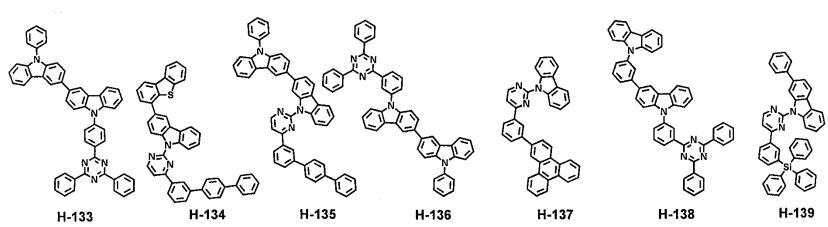
[0094]



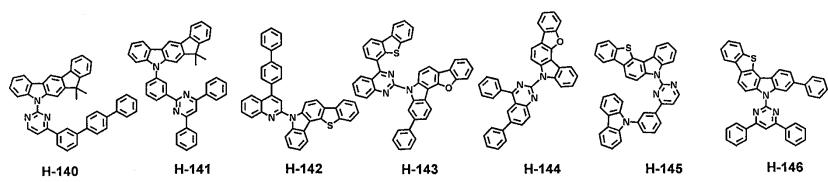
[0095]



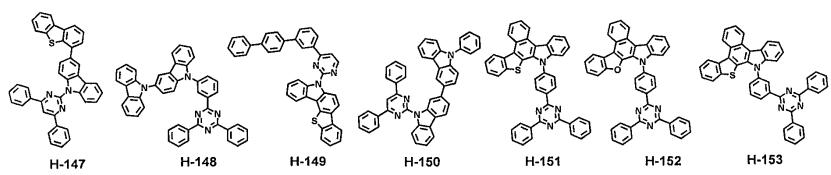
[0096]



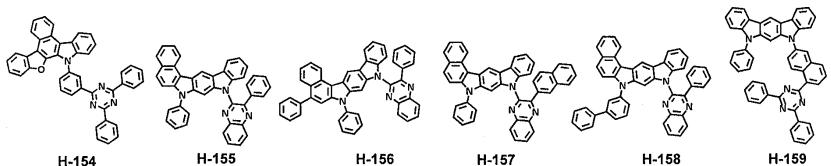
[0097]



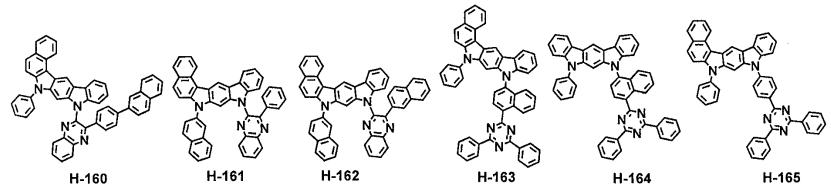
[0098]



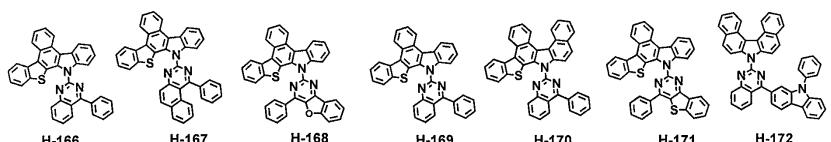
[0099]



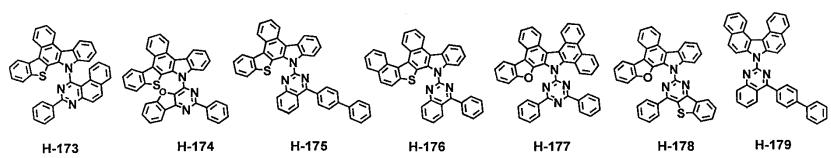
[0100]



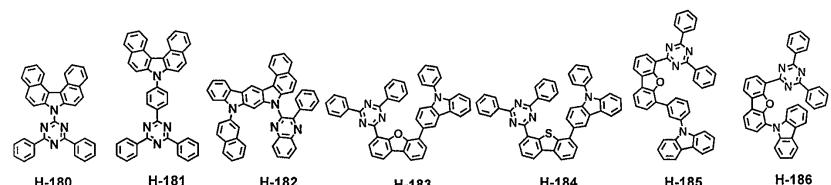
[0101]



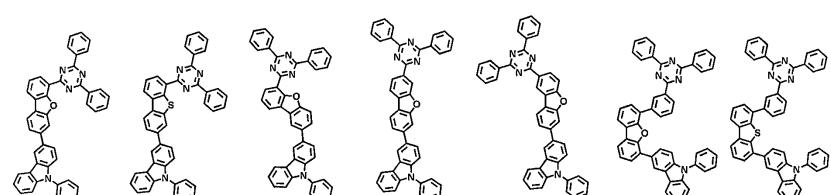
[0102]



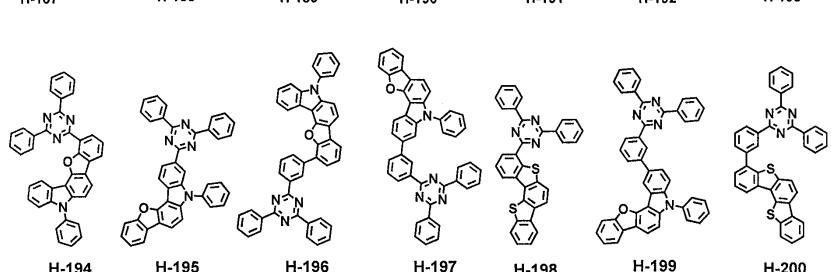
[0103]



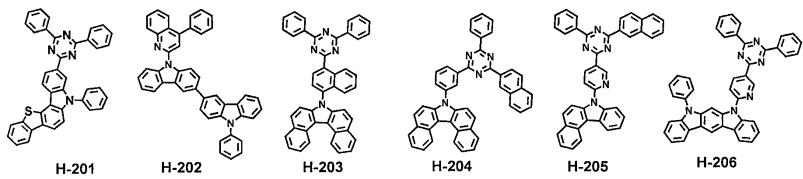
[0104]



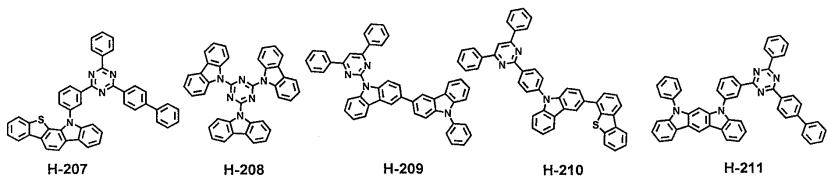
[0105]



[0106]



[0107]



[0108]

[여기서, TPS는 트리페닐실릴(triphenylsilyl)기이다]

[0110]

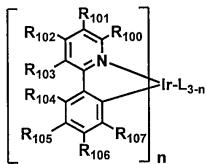
본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로는 하나 이상의 인광 또는 형광 도판트를 사용할 수 있고, 인광 도판트가 바람직하다. 본원의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(0s), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물일 수 있고, 경우에 따라 바람직하게는, 이리듐(Ir), 오스뮴(0s), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물일 수 있으며, 경우에 따라 더 바람직하게는, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물일 수 있다.

[0111]

본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 101로 표시되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0112]

[화학식 101]



[0113]

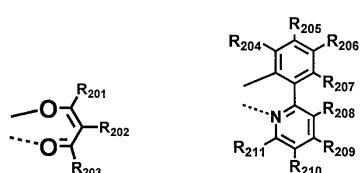
상기 화학식 101에서,

[0114]

L은 하기 구조 1 또는 2에서 선택되고;

[0115]

[구조 1] [구조 2]



[0116]

R₁₀₀ 내지 R₁₀₃은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헵테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; R₁₀₀ 내지 R₁₀₃은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조푸로페리딘, 치환 또는 비치환된 벤조티에노페리딘, 치환 또는 비치환된 인데노페리딘, 치환 또는 비치환된 벤조푸로퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조티에노퀴놀린, 또는 치환 또는 비치환된 인데노퀴놀린 형성이 가능하며;

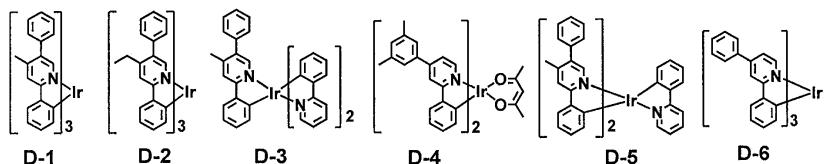
[0117]

R₁₀₄ 내지 R₁₀₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헵테로아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; R₁₀₄ 내지 R₁₀₇은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란, 치환 또는 비치환된 인데노페리딘, 치환 또는 비치환된 벤조푸로페리딘, 또는 치환 또는 비치환된 벤조티에노페리딘 형성이 가능하며;

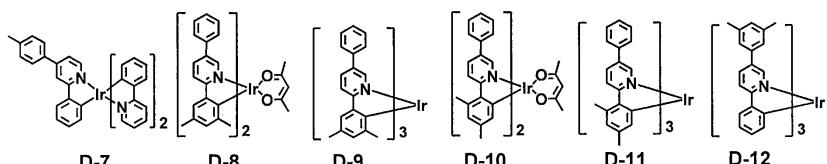
[0120] R₂₀₁ 내지 R₂₁₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고, 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있으며;

[0121] n은 1 내지 3의 정수이다.

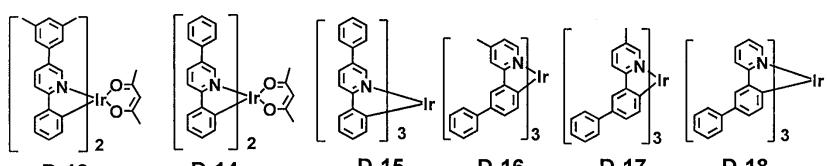
[0122] 구체적으로, 상기 도판트 화합물의 구체적인 예는 다음과 같으나, 이에 한정되지는 않는다.



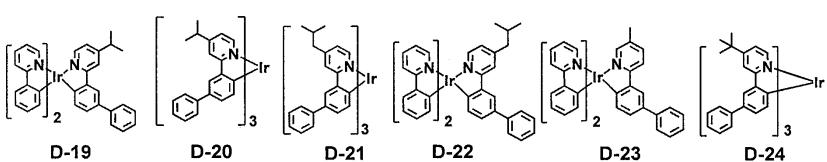
[0123]



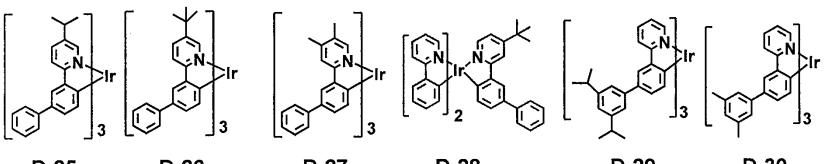
[0124]



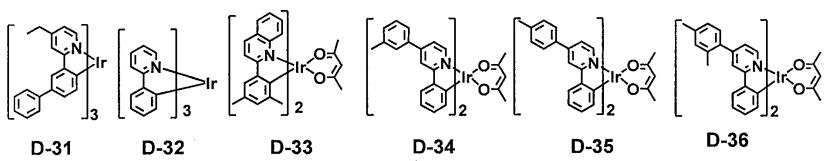
[0125]



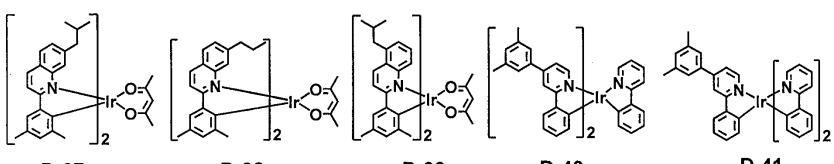
[0126]



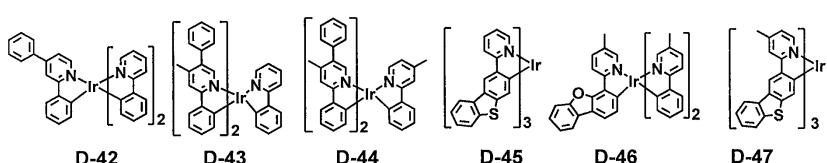
[0127]



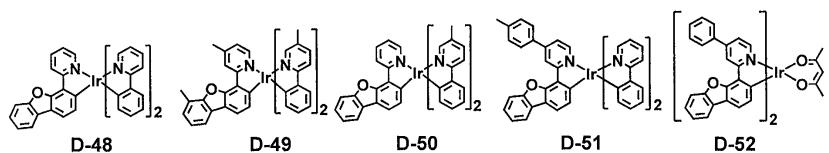
[0128]



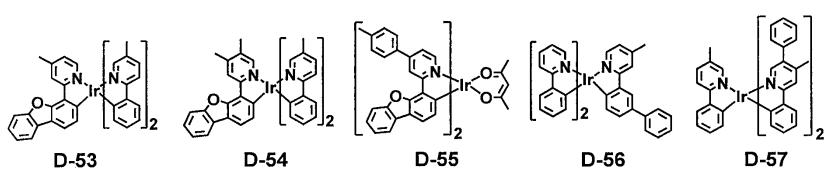
[0129]



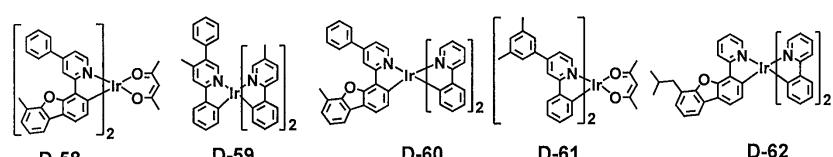
[0130]



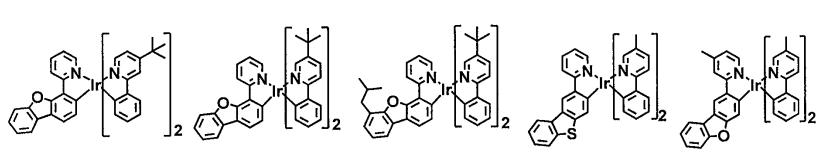
[0131]



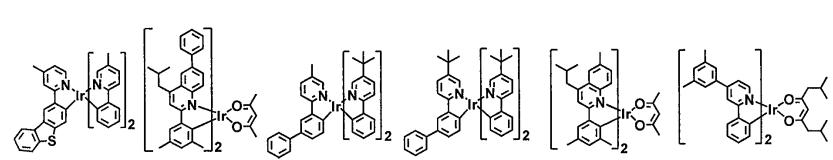
[0132]



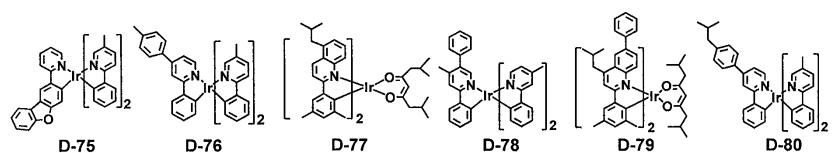
[0133]



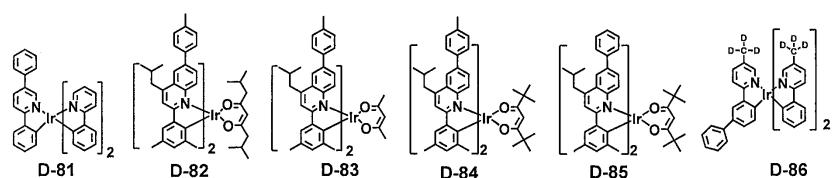
[0134]



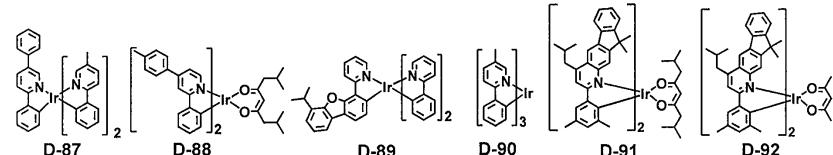
[0135]



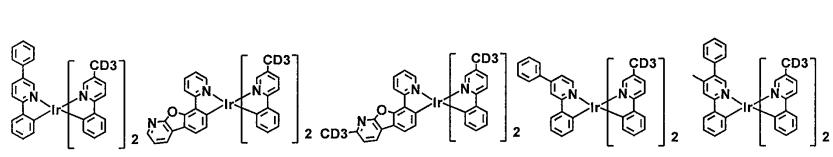
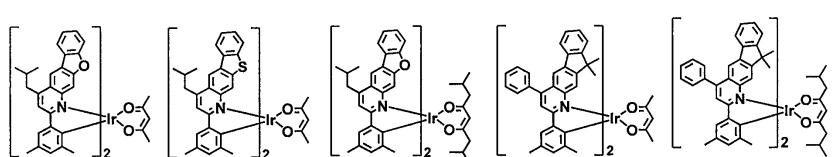
[0136]



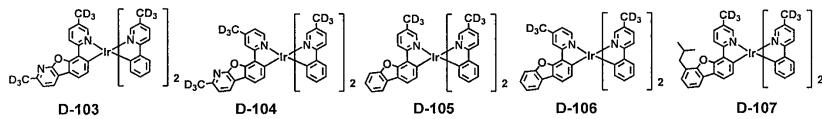
[0137]



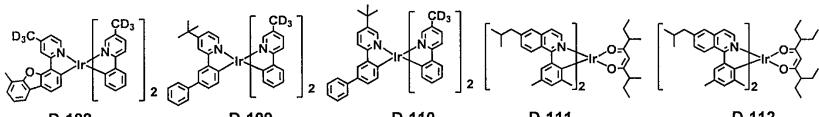
[0138]



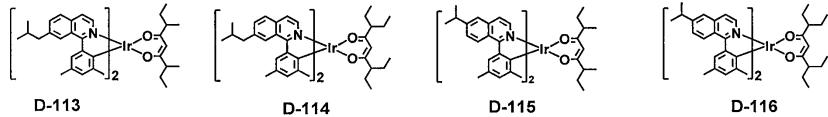
[0140]



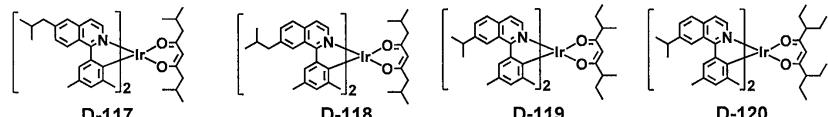
[0141]



[0142]



[0143]



[0144]

본원의 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 전계 발광 소자를 구성하는 1 이상의 층에 포함될 수 있고, 예를 들어, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 베퍼층, 전자 주입층, 계면층 (interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층에서 선택되는 하나 이상의 층에 포함될 수 있다. 또한, 본원의 화학식 1로 표시되는 화합물은 이에 한정되는 것은 아니지만, 정공 전달 대역에 포함될 수 있고, 정공 전달 대역에 포함되는 경우 발광 보조층에 포함될 수도 있다.

[0145]

본원의 유기 전계 발광 재료, 예를 들어, 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 및 전자 주입 재료 중 하나 이상의 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 상기 재료는 정공 전달 대역 재료일 수 있다. 상기 정공 전달 대역 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0146]

본원의 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 포함한다. 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 애노드이고, 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 1층 이상의 발광층을 포함하고, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 베퍼층, 전자 주입층, 계면층 (interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

[0147]

본원의 유기 전계 발광 소자는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 본원의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 높은 발광 효율 및/또는 장 수명의 특성을 나타낼 수 있다. 또한, 상기 화합물은 통상의 유기 전계 발광 화합물에 비해 상대적으로 낮은 분자량임에도 불구하고, 트위스트된 구조로 인해 높은 유리 전이 온도(Tg), 예를 들면 130°C 이상의 높은 유리 전이 온도를 가질 수 있다.

[0148]

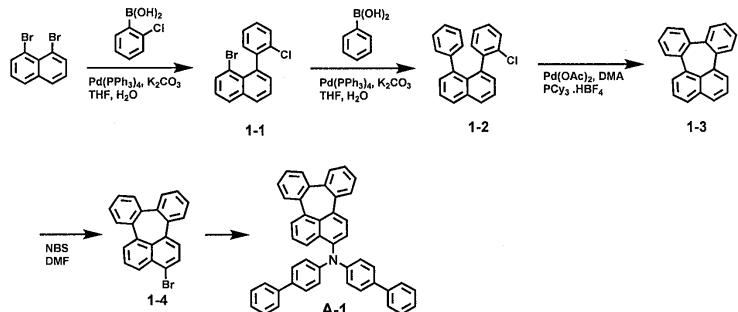
또한, 본원은 화학식 1로 표시되는 포함하는 화합물을 이용하여 디스플레이 장치를 제공할 수 있다. 즉, 본원의 화합물을 이용하여 표시 장치 또는 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다. 구체적으로, 본원의 화합물을 이용하여 디스플레이 장치, 예를 들면, 스마트폰, 태블릿, 노트북, PC, TV 또는 차량용의 디스플레이 장치, 또는 조명 장치, 예를 들면, 옥외 또는 옥내용 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

[0149]

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

[0151]

[실시예 1] 화합물 A-1의 제조



[0152]

[0153]

1) 화합물 1-1의 합성

[0154]

플라스크에 1,8-디브로모나프탈렌 (100 g, 349.7 mmol), (2-클로로페닐)보론산 (82 g, 524.6 mmol), 테트라카스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) ($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$) (20.2 g, 17.5 mmol), 탄산칼륨 (120.8 g, 874.5 mmol) 테트라하이드로푸란 1500 mL 및 중류수 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.

[0155]

2) 화합물 1-2의 합성

[0156]

플라스크에 화합물 1-1 (30 g, 94.5 mmol), 폐닐보론산 (15 g, 122.9 mmol), 테트라카스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) ($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$) (5.5 g, 4.73 mmol), 탄산칼륨 (32.7 g, 236.3 mmol), 테트라하이드로푸란 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 1-2 (26 g, 수율: 87%)을 얻었다.

[0157]

3) 화합물 1-3의 합성

[0158]

화합물 1-2 (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 다이메틸 아세트아마이드(DMA) 413 mL를 3시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각시키고 중류수를 넣었다. 메틸렌 클로라이드(MC)로 추출하고 마그네슘 설페이트로 건조시켰다. 김압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-3 (23 g, 수율: 70%)을 얻었다.

[0159]

4) 화합물 1-4의 합성

[0160]

화합물 1-3 (7 g, 25.1 mmol)을 디메틸 포름아미드 (DMF) 125 mL에 녹이고, N-브로모숙신이미드(NBS) (5.4 g, 30.1 mmol)을 넣었다. 4시간 동안 상온에서 교반하고 메탄올과 중류수를 넣었다. 생성된 고체를 김압 여과하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-4 (5.6 g, 수율: 62 %)를 얻었다.

[0161]

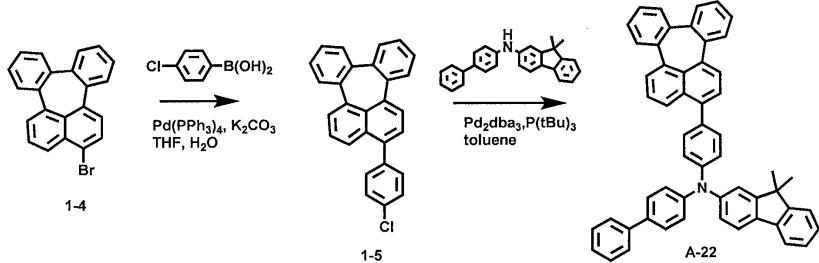
5) 화합물 A-1의 합성

[0162]

플라스크에 화합물 1-4 (5.6 g, 15.7 mmol), 디([1,1'-바이페닐]-4-일)아민 (5.6 g, 17.3 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (0.72 g, 0.79 mmol), 트리-t-부틸포스핀 (0.64 mL, 1.57 mmol 50% 툴루엔 용액), 소디움 t-부톡사이드 (3.0 g, 31.4 mmol), 및 툴루엔 157 mL를 넣고 2시간 동안 환류시켰다. 상온으로 식힌 반응용액은 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 노란색 고체 **화합물 A-1** (7.6 g, 81%)을 얻었다(녹는점(M.P.): 224°C).

[0163]

[실시예 2] 화합물 A-22의 제조



[0164]

[0165]

1) 화합물 1-5의 합성

[0166]

플라스크에 화합물 1-4 (7.0 g, 19.6 mmol), 4-클로로페닐보론산 (4.0 g, 25.5 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) ($Pd(PPh_3)_4$) (1.13 g, 0.98 mmol), 탄산칼륨 (6.8 g, 49 mmol), 테트라하이드로푸란 100 mL 및 증류수 25 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 1-5 (6.1 g, 수율: 80 %)을 얻었다.

[0167]

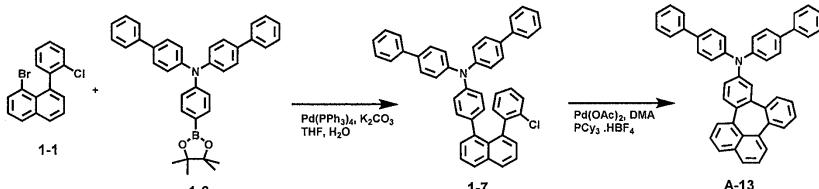
2) 화합물 A-22의 합성

[0168]

플라스크에 화합물 1-5 (6.1 g, 15.7 mmol), N-1,1'-비페닐-4-일-9,9-다이메틸-9H-프루오렌-2-아민 (6.3 g, 17.3 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (0.72 g, 0.80 mmol), 트리-t-부틸포스핀 (0.64 mL, 1.57 mmol 50% 툴루엔 용액), 소디움 t-부톡사이드 (3.0 g, 31.4 mmol), 및 툴루엔 160 mL를 넣고 4시간 동안 환류시켰다. 상온으로 식힌 반응용액은 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 노란색 고체 화합물 A-22 (0.98 g, 9%)을 얻었다(M.P.: 182°C).

[0169]

[실시예 3] 화합물 A-13의 제조



[0170]

1) 화합물 1-7의 합성

[0171]

플라스크에 화합물 1-1 (15 g, 47.2 mmol), 화합물 1-6 (25 g, 47.2 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) ($Pd(PPh_3)_4$) (2.7 g, 2.36 mmol), 탄산칼륨 (16.3 g, 118 mmol), 테트라하이드로푸란 240 mL 및 증류수 60 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 1-7 (14.8 g, 수율: 49 %)을 얻었다.

[0172]

2) 화합물 A-13의 합성

[0173]

화합물 1-7 (14 g, 22.1 mmol), $Pd(OAc)_2$ (0.99 g, 4.42 mmol), 리간드(트리시클로헥실포스포늄 테트라플루오로보레이트) (2.44 g, 6.63 mmol), Cs_2CO_3 (21.6 g, 66.3 mmol) 및 다이메틸아세트아마이드 (DMA) 110 mL를 3시간 동안 환류교반시켰다. 상온으로 냉각시키고 증류수를 넣었다. 메틸렌 클로라이드(MC)로 추출하고 마그네슘 설페이트로 건조시켰다. 감압 증류하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 노란색 고체 화합물 A-13 (2.4 g, 수율: 18%)을 얻었다(M.P.: 161°C).

[0174]

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

[0175]

[소자 제조예 1] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자의 제조

[0177]

본원의 유기 전계 발광 화합물을 이용하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조) 기판 상의 투명전극 ITO 박막($10\Omega/\square$)을 아세톤 및 이소프로판알콜을 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판알콜에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 HIL-1을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 90 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HIL-2을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 HTL-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10 nm 두께의 제1 정공 전달 대역을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 A-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달 대역 위에 60 nm 두께의 제2 정공 전달 대역(보조층)을 증착하였다. 정공 주입층, 정공 전달 대역을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀에 발광층 호스트로서 화합물 H-164를 넣고, 또 다른 셀에는 화합물 D-39를 넣은 후, 두 물질을 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 2중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달 대역 위에 40nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ET-1 과 화합물 EI-1을 1:1의 속도로 증발시켜 발광층 위에 35 nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서, 전자 주입층으로 화합물 EI-1을 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 1500 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다.

[0178]

[소자 제조예 2 및 3] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자의 제조

[0179]

소자 제조예 2 및 3은, 제2 정공 전달 대역(보조층)에 각각 화합물 A-22 및 A-13을 사용한 것 외에는 소자 제조 예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0180]

[소자 비교예 1] 본원에 따르지 않는 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자의 제조

[0181]

소자 비교예 1은, 제2 정공 전달 대역(보조층)에 화합물 HTL-1을 사용한 것 외에는 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0182]

상기 소자 제조예 1 내지 3 및 소자 비교예 1에서 제조된 OLED 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 발광 효율, CIE 색 좌표, 5,000nits 휘도 기준 정전류에서의 처음 휘도를 기준으로 하여 98%의 휘도로 감소하는데 걸리는 시간(수명; T98), 및 유리 천이 온도를 하기 표 1에 나타내었다.

[0183]

[표 1]

	발광효율 [cd/A]	색좌표 (x,y)	수명 T98 [Hr]	유리천이온도 Tg(°C)
소자 제조예 1	20.0	(0.669, 0.330)	200	152
소자 제조예 2	17.5	(0.668, 0.331)	80	160
소자 제조예 3	16.4	(0.668, 0.332)	107	141
소자 비교예 1	11.2	(0.662, 0.336)	22	130

[0184]

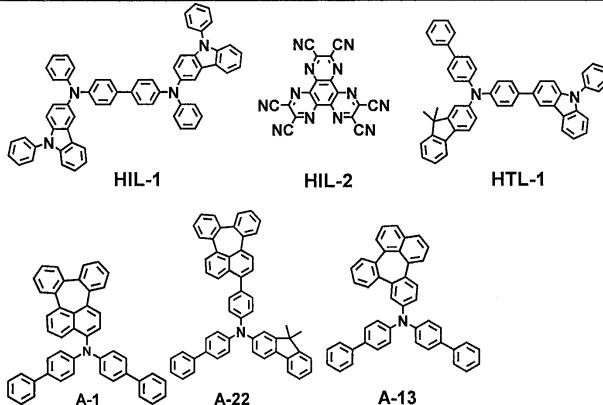
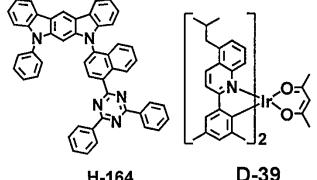
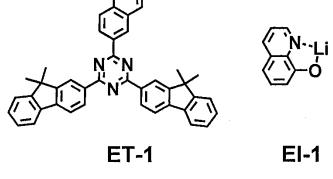
상기 표 1로부터, 본원의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는, 본원의 유기 전계 발광 화합물을 포함하지 않는 유기 전계 발광 소자에 비해 높은 유리 천이 온도, 높은 발광 효율 및/또는 개선된 수명 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

[0185]

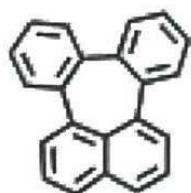
상기 소자 제조예 및 소자 비교예에서 사용된 화합물은 하기 표 2와 같다.

[0187]

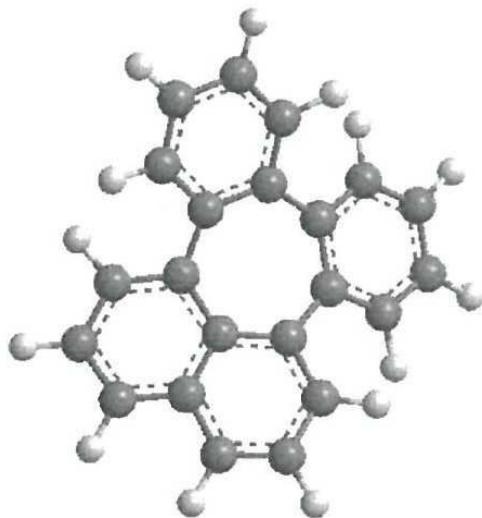
[표 2]

정공 전달 대역	
발광층	
전자 전달층	

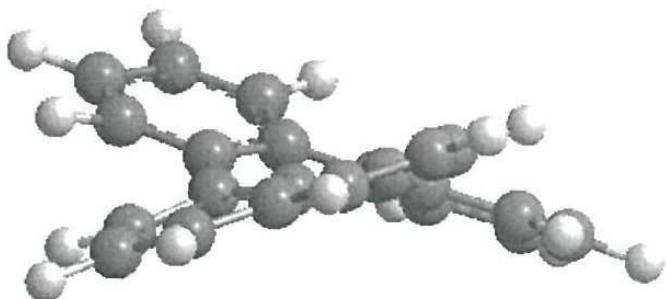
[0188]

도면**도면1**

도면2



도면3



专利名称(译)	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	KR1020190061649A	公开(公告)日	2019-06-05
申请号	KR1020170160254	申请日	2017-11-28
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	오홍세 이태진 양정은 이연건		
发明人	오홍세 이태진 양정은 이연건		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/0055 H01L51/006 H01L51/50 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/1059 C09K2211/1088 C09K2211/1092		
代理人(译)	张本勋		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本申请涉及一种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器件，并且通过包含根据本发明的有机电致发光化合物，与常规有机电致发光器件相比，该有机电致发光领域具有高发光效率和/或长寿命的特性。可以提供发光器件。

