



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0090695
 (43) 공개일자 2019년08월02일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
 (52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/006 (2013.01)
 (21) 출원번호 10-2019-0003137
 (22) 출원일자 2019년01월10일
 심사청구일자 없음
 (30) 우선권주장
 1020180009157 2018년01월25일 대한민국(KR)

(71) 출원인
 립엔드하스전자재료코리아유한회사
 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)
 (72) 발명자
 홍진리
 경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
 임영목
 경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
 (74) 대리인
 장훈

전체 청구항 수 : 총 10 항

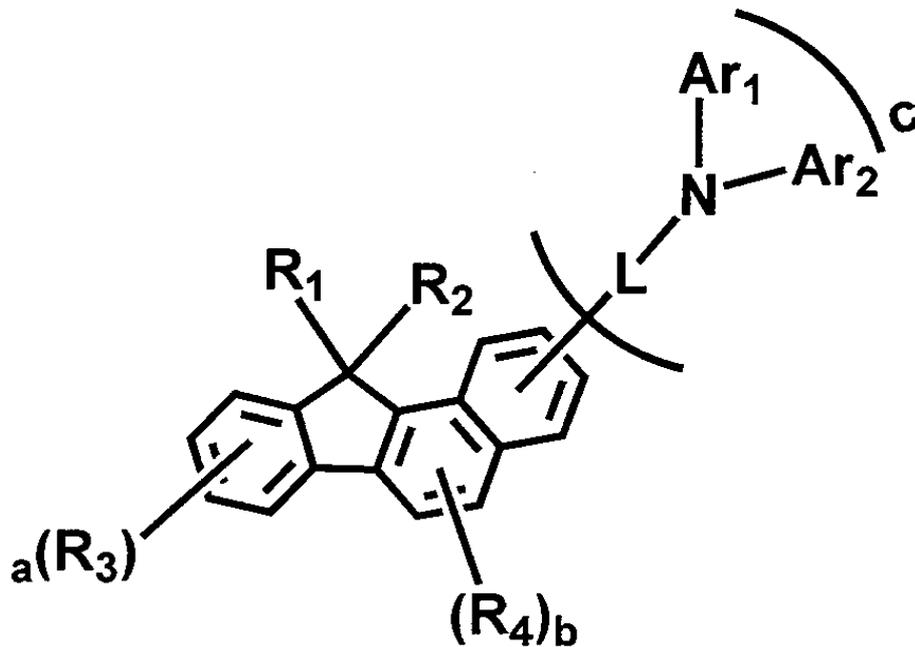
(54) 발명의 명칭 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

(57) 요약

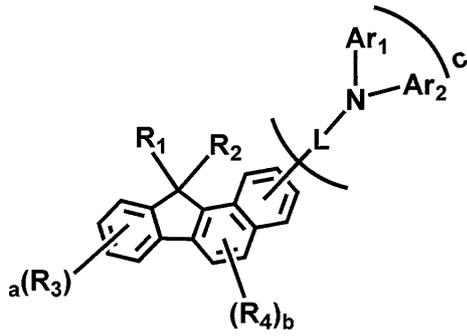
본원은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 정공 전달층 및/또는 정공 보조층에 포함함으로써, 발광 효율 및 구동수명이 개선된 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



[화학식 1]



상기 화학식 1에서 각 치환기에 대한 정의는 명세서에서 정의한 바와 같다.

(52) CPC특허분류

H01L 51/0073 (2013.01)

H01L 51/0074 (2013.01)

H01L 51/50 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

C09K 2211/1088 (2013.01)

C09K 2211/1092 (2013.01)

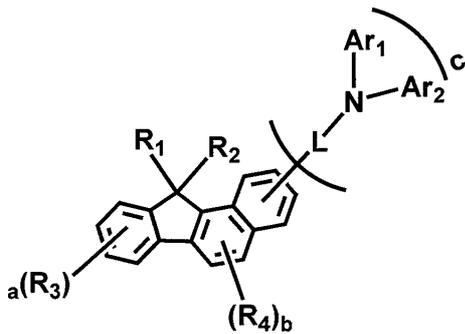
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고;

R_3 및 R_4 는 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, 또는 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴이이고;

L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이며;

Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고;

a는 1 내지 4의 정수이고, b는 1 또는 2의 정수이며, a 또는 b가 2 이상인 경우 각각의 R_3 및 R_4 는 서로 같거나 상이할 수 있으며;

c는 1 또는 2의 정수이며 c가 2인 경우, Ar_1 및 Ar_2 는 같거나 상이할 수 있다.

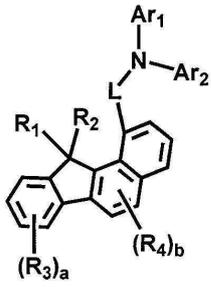
청구항 2

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 1-6 중 어느 하나로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물:

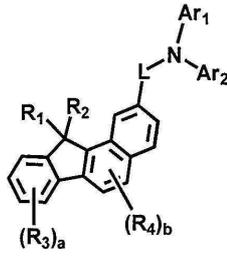
[화학식 1-1]

[화학식 1-2]

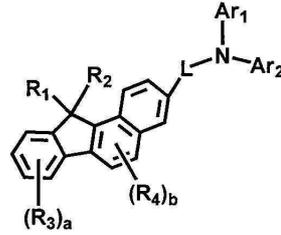
[화학식 1-3]



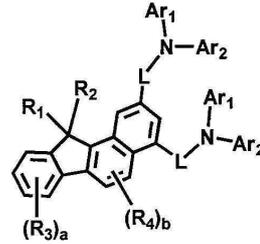
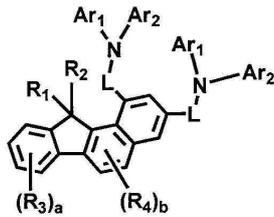
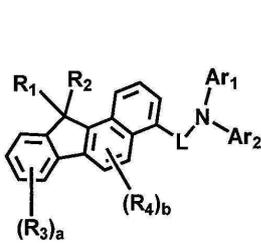
[화학식 1-4]



[화학식 1-5]



[화학식 1-6]

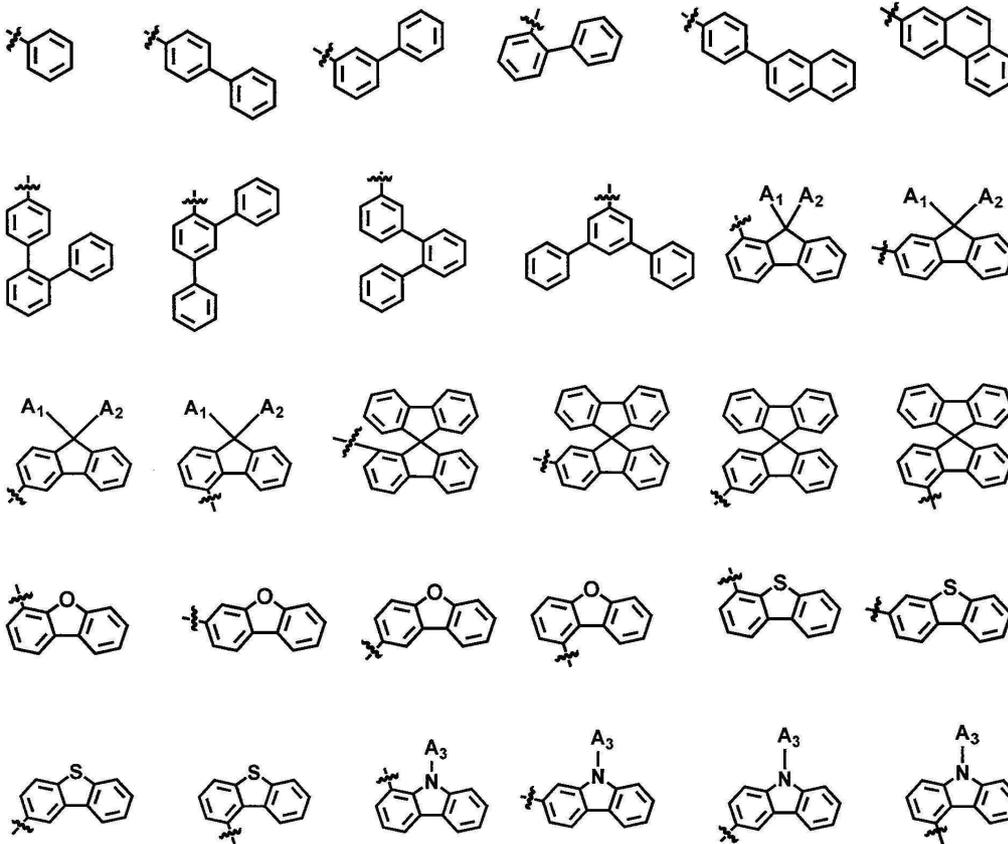


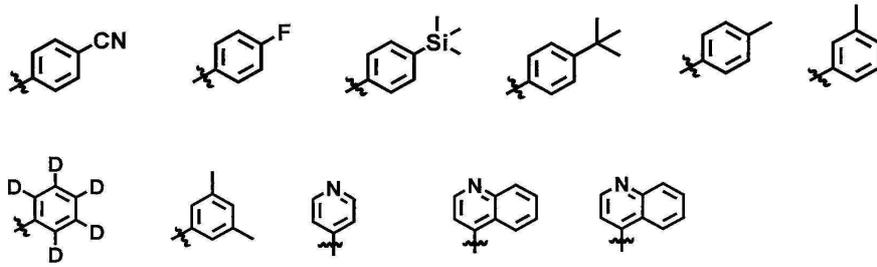
상기 화학식 1-1 내지 1-6에서, R₁ 내지 R₄, Ar₁, Ar₂, L, a, 및 b는 제1항에서의 정의와 같다.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 화학식 1에서 Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로, 하기 그룹 I에 나열된 치환기 중 하나인, 유기 전계 발광 화합물:

[그룹 I]





상기 그룹 I에서, A₁ 내지 A₃은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;

L'은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이며;

는 N과의 연결 위치를 나타낸다.

청구항 4

제1항에 있어서, 상기 화학식 1의 R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C18)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이고,

R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로, 수소 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이며,

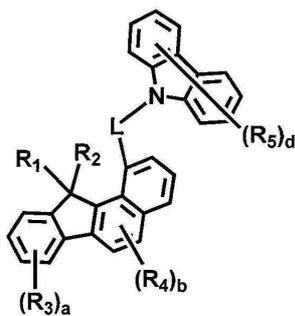
L은 단일 결합이거나, 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴렌이고,

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로, 제3항에 기재된 그룹 I에 나열된 치환기 중 하나이거나, 서로 연결되어 아민기가 치환 또는 비치환된 카바졸을 형성하는, 유기 전계 발광 화합물.

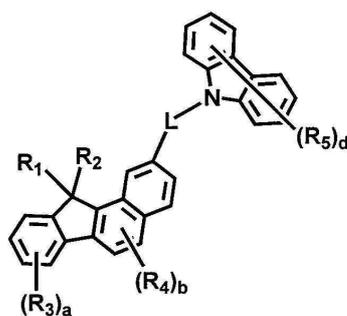
청구항 5

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 I-1 내지 I-4 중 어느 하나로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물:

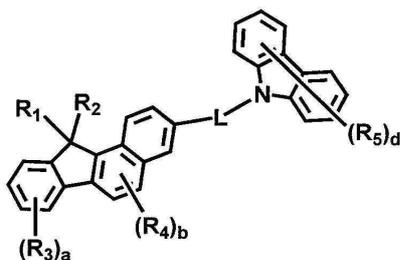
[화학식 I-1]



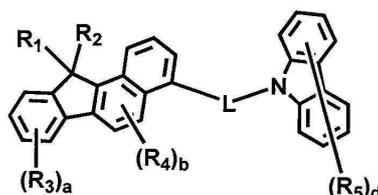
[화학식 I-2]



[화학식 I-3]



[화학식 I-4]



상기 화학식 I-1 내지 I-4에서, R₁ 내지 R₄, L, a, 및 b는 제1항에서의 정의와 같고;

R₅는 수소 또는 -NR_xR_y 이며;

상기 R_x 및 R_y는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;

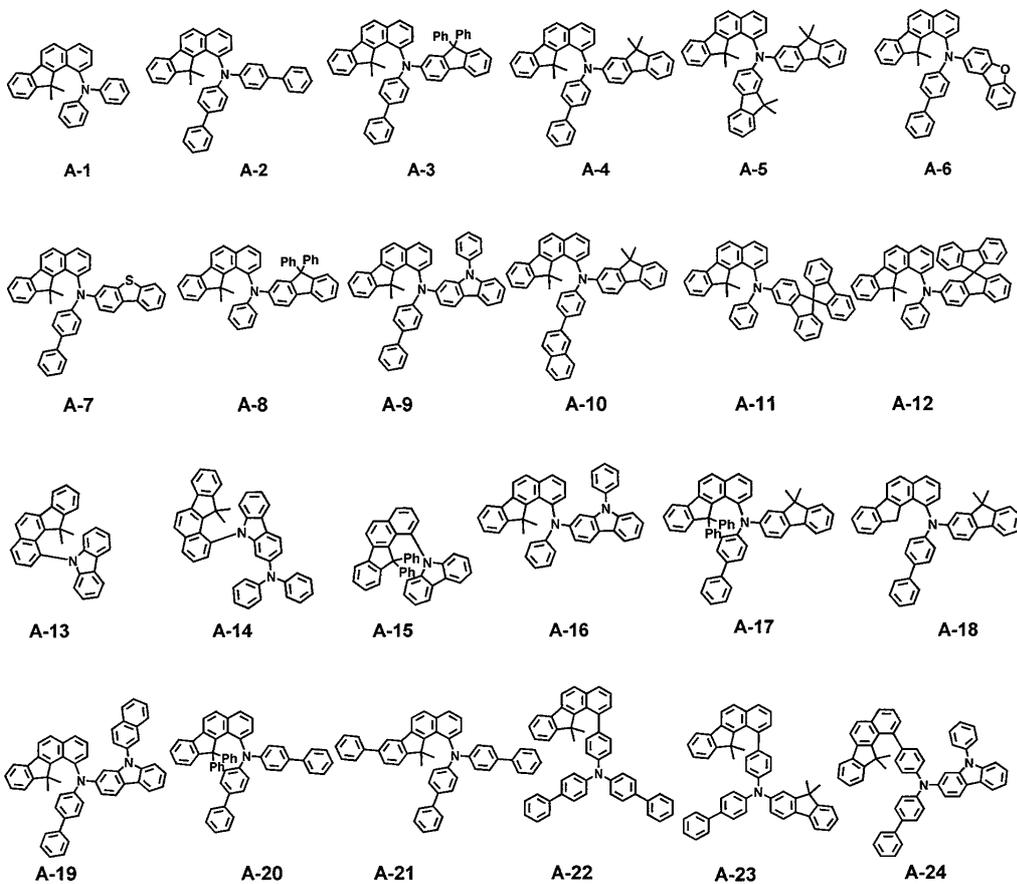
d는 1 또는 2의 정수이며, d가 2인 경우 각각의 R₅는 같거나 상이할 수 있다.

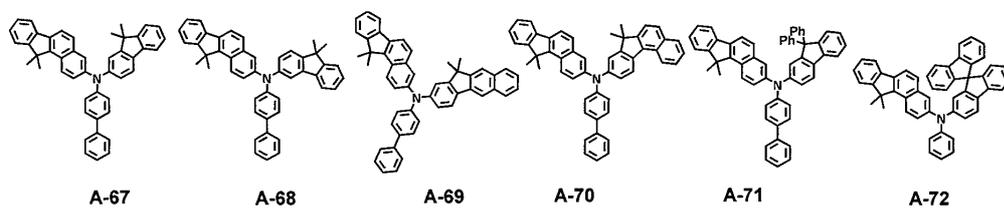
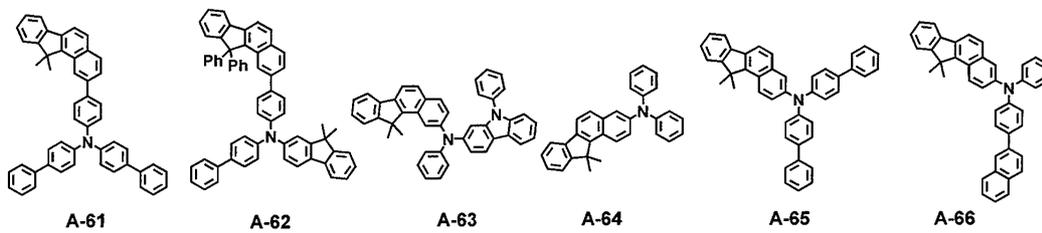
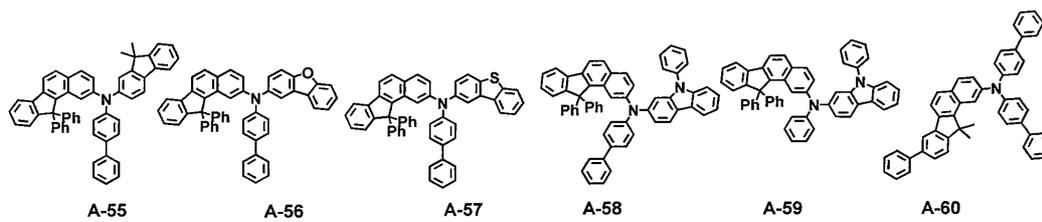
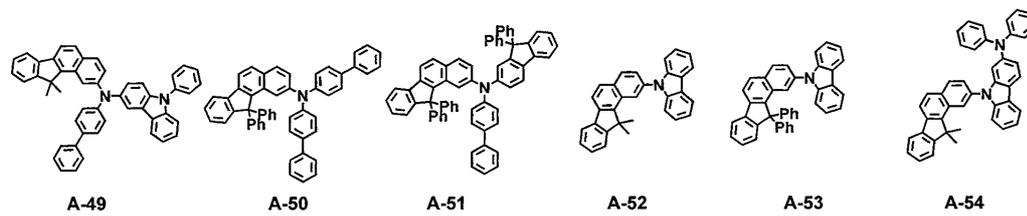
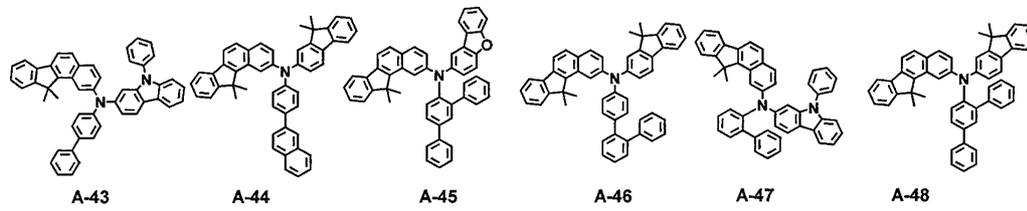
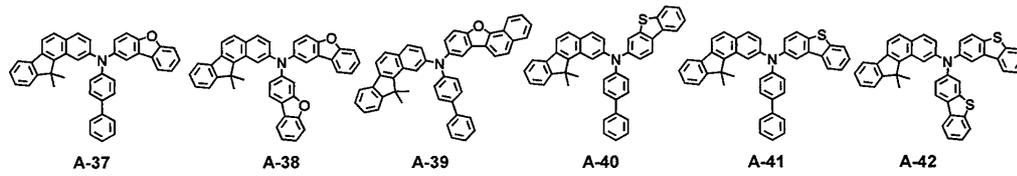
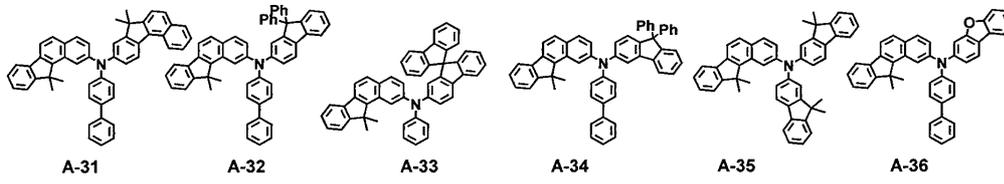
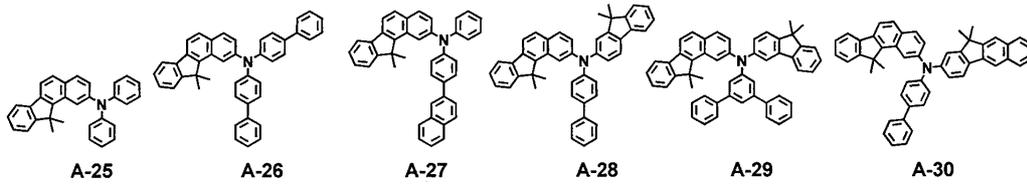
청구항 6

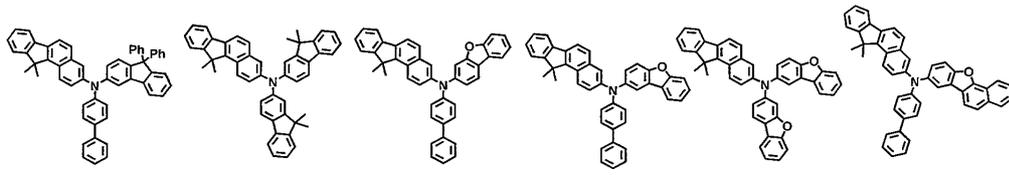
제1항에 있어서, 상기 R₁ 내지 R₄, Ar₁, Ar₂, 및 L에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (3-30원)헤테로아릴(렌), 치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환된 (C1-C30)알콕시, 치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴 및 치환된 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30 원)헤테로아릴, (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴 카보닐, 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 7

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







A-73

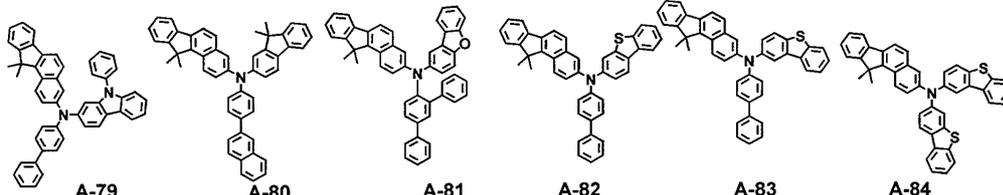
A-74

A-75

A-76

A-77

A-78



A-79

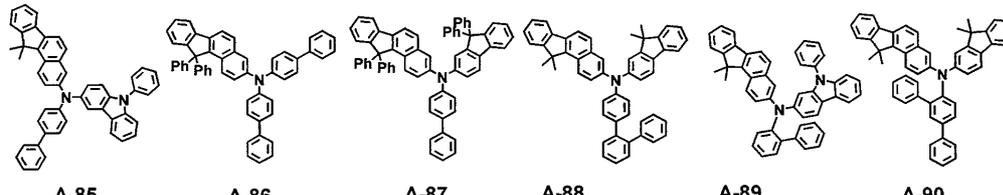
A-80

A-81

A-82

A-83

A-84



A-85

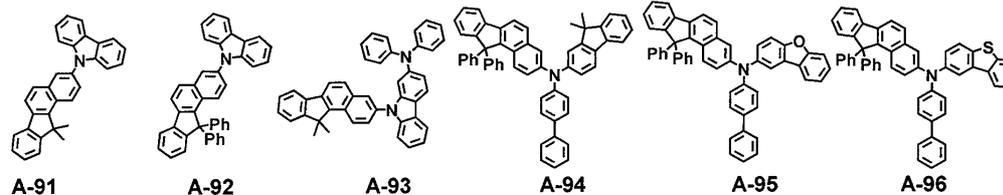
A-86

A-87

A-88

A-89

A-90



A-91

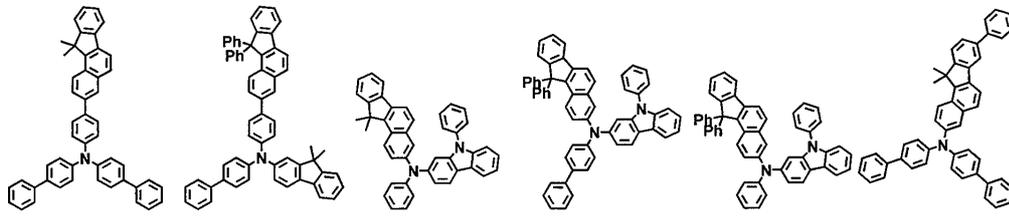
A-92

A-93

A-94

A-95

A-96



A-97

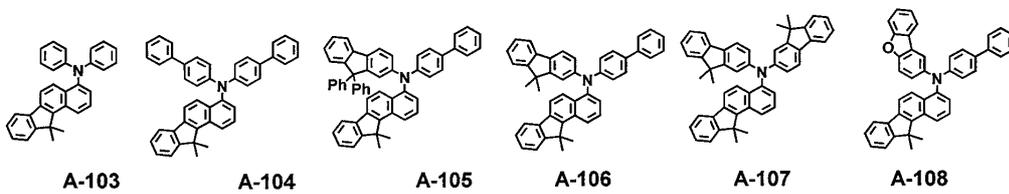
A-98

A-99

A-100

A-101

A-102



A-103

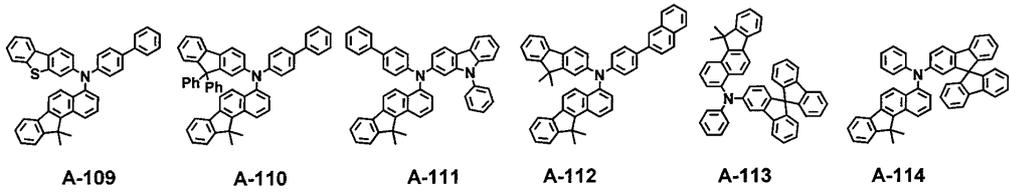
A-104

A-105

A-106

A-107

A-108



A-109

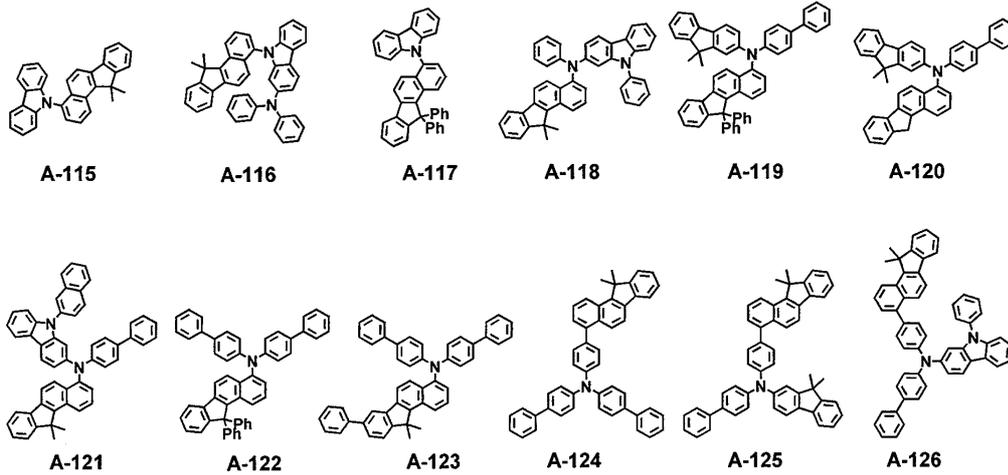
A-110

A-111

A-112

A-113

A-114



청구항 8

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

청구항 9

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

청구항 10

제9항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 화합물을 정공 전달층 및/또는 정공 보조층에 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술분야

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

배경기술

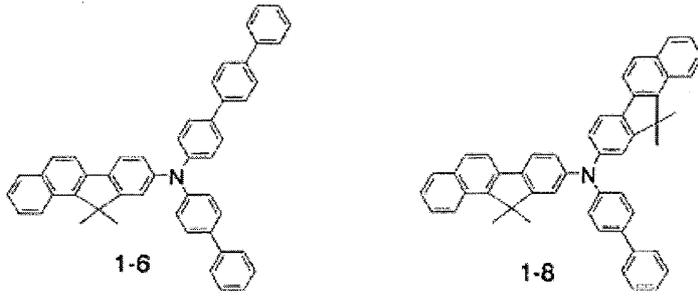
[0002] 전계 발광 소자(electroluminescent device: EL 소자)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 전계 발광 소자(organic electroluminescent device)는 유기 발광 재료에 전기를 가해 전기 에너지를 빛으로 바꾸는 소자로서, 통상 양극(애노드) 및 음극(캐소드)과 이들 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 유기 전계 발광 소자의 유기물층은 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 차단층, 발광층(호스트 및 도판트 재료 포함), 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층, 전자 주입층 등을 포함할 수 있다. 상기 유기물층에 사용되는 재료는 기능에 따라 정공 주입재료, 정공 전달재료, 정공 보조재료, 발광 보조재료, 전자 차단재료, 발광 재료, 전자 버퍼재료, 정공 차단재료, 전자 전달재료, 전자 주입재료 등으로 나뉘어 있다. 이러한 유기 전계 발광 소자에서는 전압 인가에 의해 양극에서 정공이, 음극에서 전자가 발광층에 주입되고, 정공과 전자의 재결합에 의해 에너지가 높은 엑시톤이 형성된다. 이 에너지에 의해 유기 발광 화합물이 여기 상태로 되며, 유기 발광 화합물의 여기 상태가 기저 상태로 돌아가면서 에너지를 빛으로 방출하여 발광하게 된다.

[0004] 한편, 유기 전계 발광 소자는 이의 효율성 및 안정성을 높이기 위해 상기와 같이 다층 구조로 이루어지는데, 이때, 정공 전달층 등에 포함되는 화합물의 선정이 발광층으로의 정공 전달 효율, 발광 효율 및 수명 시간과 같은 소자 특성을 향상시킬 수 있는 수단으로 인식되고 있다.

[0005] 이와 관련해, 유기 전계 발광 소자에서 정공 주입 및 전달 재료로서 구리 프탈로시아닌(CuPc), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB), N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민(TPD), 4,4',4''-트리스(3-메틸페닐페닐아미노)트리페닐아민(MTDATA) 등이 사용되어 왔으나, 이러한 물질을 사용한 경우 유기 전계 발광 소자는 발광 효율 및 수명이 저하되는 문제가 있었다. 그 이유는 유기 전계 발광 소자를 높은 전류에서 구동하게 되면, 양극과 정공 주입층 사이에서 열 스트레스(thermal stress)가 발생하고, 이러한 열 스트레스에 의해 소자의 수명이 급격히 저하되기 때문이다. 또한, 정공 주입층에 사용되는 유기물질은 정공의 이동성이 매우 크기 때문에, 구동전압이 상승하고 발광효율이 낮아지며 수명이 감소하는 문제가 발생되어 왔다.

[0006] 일본 공개특허공보 제2014-047197호는 하기 구조와 같은 정공 수송 특성을 갖는 벤조플루오레닐 아민 화합물을 포함하는 유기 EL 소자를 개시하고 있으나, 여전히 발광 효율 및 수명의 측면에서 개선될 필요성을 갖고 있다.



[0007]

[0008] 이에, 유기 전계 발광 소자의 내구성 향상을 위한 정공 전달층의 개발이 여전히 요구되고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0009] (특허문헌 0001) 일본 공개특허공보 제2014-047197호 (2014. 3. 17 공개)

발명의 내용

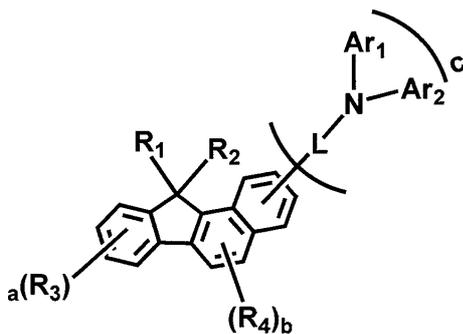
해결하려는 과제

[0010] 본 발명의 목적은, 첫째로 낮은 구동 전압 및/또는 높은 발광 효율 및/또는 긴 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며, 둘째로 상기 유기 전계 발광 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]

[0014] 상기 화학식 1에서,

- [0015] R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고;
- [0016] R_3 및 R_4 는 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, 또는 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴이고;
- [0017] L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이며;
- [0018] Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고;
- [0019] a는 1 내지 4의 정수이고, b는 1 또는 2의 정수이며, a 또는 b가 2 이상인 경우 각각의 R_3 및 R_4 는 서로 같거나 상이할 수 있으며;
- [0020] c는 1 또는 2의 정수이며, c가 2인 경우, Ar_1 및 Ar_2 는 같거나 상이할 수 있다.

발명의 효과

- [0021] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 정공 전달층 및/또는 정공 보조층에 사용한 OLED 소자는 종래의 유기 전계 발광 화합물을 사용한 OLED 소자에 비해 발광 효율 및 구동 수명 면에서 상당히 개선된 효과를 나타낸다.

도면의 간단한 설명

- [0022] 도 1은 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물의 대표적인 화학식이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0023] 이하에서 본원을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본원의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안된다.
- [0024] 본원은 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물, 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 유기 전계 발광 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.
- [0025] 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.
- [0026] 본원에서 "유기 전계 발광 재료"는 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 재료를 의미하고, 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있으며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다. 예를 들면, 상기 유기 전계 발광 재료는 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료, 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료 등이 될 수 있다.
- [0027] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은 쇠를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 20개인 것이 바람직하고, 1 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 여기에서 탄소수가 3 내지 20개인 것이 바람직하고, 3 내지 7개인 것이 더 바람직하다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴(렌)"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 부분적으로 포화될 수도 있으며, 스피로 구조를 포함한다. 상기 환 골격 탄소수는 6 내지 20개인 것이 바람직하고, 6 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 상기 아릴의 예로서 구체적으로는, 페닐, 비페닐, 터페닐, 퀴터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 디메틸플루오레닐, 디페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디페닐벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 벤조페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 벤즈안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크리세닐, 벤조크리세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 벤조플

루오란테닐, 톨릴(toyly), 자일릴(xylyl), 메시틸(mesityl), 쿠메닐(cumenyl), 스피로[플루오렌-플루오렌]일, 스피로[플루오렌-벤조플루오렌]일, 아줄레닐 등이 있다. 더욱 구체적으로 상기 아릴은 o-톨릴, m-톨릴, p-톨릴, 2,3-자일릴, 3,4-자일릴, 2,5-자일릴, 메시틸, o-쿠메닐, m-쿠메닐, p-쿠메닐, p-t-부틸페닐, p-(2-페닐프로필)페닐, 4'-메틸비페닐, 4"-t-부틸-p-터페닐-4-일, o-비페닐, m-비페닐, p-비페닐, o-터페닐, m-터페닐-4-일, m-터페닐-3-일, m-터페닐-2-일, p-터페닐-4-일, p-터페닐-3-일, p-터페닐-2-일, m-쿼터페닐, 1-나프틸, 2-나프틸, 1-플루오레닐, 2-플루오레닐, 3-플루오레닐, 4-플루오레닐, 9-플루오레닐, 9,9-디메틸-1-플루오레닐, 9,9-디메틸-2-플루오레닐, 9,9-디메틸-3-플루오레닐, 9,9-디메틸-4-플루오레닐, 9,9-디페닐-1-플루오레닐, 9,9-디페닐-2-플루오레닐, 9,9-디페닐-3-플루오레닐, 9,9-디페닐-4-플루오레닐, 1-안트릴, 2-안트릴, 9-안트릴, 1-페난트릴, 2-페난트릴, 3-페난트릴, 4-페난트릴, 9-페난트릴, 1-크리세닐, 2-크리세닐, 3-크리세닐, 4-크리세닐, 5-크리세닐, 6-크리세닐, 벤조[c]페난트릴, 벤조[g]크리세닐, 1-트리페닐레닐, 2-트리페닐레닐, 3-트리페닐레닐, 4-트리페닐레닐, 3-플루오란테닐, 4-플루오란테닐, 8-플루오란테닐, 9-플루오란테닐, 벤조플루오란테닐을 들 수 있다.

[0028] 본원에서 “(3-30원)헤테로아릴(렌)”은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, Si, P, 및 Ge로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미하고, 여기에서 환 골격 원자수가 5 내지 25개인 것이 바람직하다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴기 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서 구체적으로는, 푸릴, 티오펜, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아지닐, 테트라지닐, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라자닐, 피리디닐, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다진일 등의 단일환계 헤테로아릴, 벤조푸라닐, 벤조티오펜, 이소벤조푸라닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오펜, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이미다조피리디닐, 이소인돌릴, 인돌릴, 벤조인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 아자카바졸릴, 벤조카바졸릴, 디벤조카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리디닐, 벤조디옥솔릴, 인돌리지디닐, 아크리디닐, 실라플루오레닐, 게르마플루오레닐, 등의 융합환계 헤테로아릴 등이 있다. 더욱 구체적으로, 상기 헤테로아릴은 1-피롤릴, 2-피롤릴, 3-피롤릴, 2-피리디닐, 3-피리디닐, 4-피리디닐, 2-피리미디닐, 4-피리미디닐, 5-피리미디닐, 6-피리미디닐, 1,2,3-트리아진-4-일, 1,2,4-트리아진-3-일, 1,3,5-트리아진-2-일, 1-이미다졸릴, 2-이미다졸릴, 1-피라졸릴, 1-인돌리지디닐, 2-인돌리지디닐, 3-인돌리지디닐, 5-인돌리지디닐, 6-인돌리지디닐, 7-인돌리지디닐, 8-인돌리지디닐, 2-이미다조피리디닐, 3-이미다조피리디닐, 5-이미다조피리디닐, 6-이미다조피리디닐, 7-이미다조피리디닐, 8-이미다조피리디닐, 1-인돌릴, 2-인돌릴, 3-인돌릴, 4-인돌릴, 5-인돌릴, 6-인돌릴, 7-인돌릴, 1-이소인돌릴, 2-이소인돌릴, 3-이소인돌릴, 4-이소인돌릴, 5-이소인돌릴, 6-이소인돌릴, 7-이소인돌릴, 2-푸릴, 3-푸릴, 2-벤조푸라닐, 3-벤조푸라닐, 4-벤조푸라닐, 5-벤조푸라닐, 6-벤조푸라닐, 7-벤조푸라닐, 1-이소벤조푸라닐, 3-이소벤조푸라닐, 4-이소벤조푸라닐, 5-이소벤조푸라닐, 6-이소벤조푸라닐, 7-이소벤조푸라닐, 2-퀴놀릴, 3-퀴놀릴, 4-퀴놀릴, 5-퀴놀릴, 6-퀴놀릴, 7-퀴놀릴, 8-퀴놀릴, 1-이소퀴놀릴, 3-이소퀴놀릴, 4-이소퀴놀릴, 5-이소퀴놀릴, 6-이소퀴놀릴, 7-이소퀴놀릴, 8-이소퀴놀릴, 2-퀴녹살리닐, 5-퀴녹살리닐, 6-퀴녹살리닐, 1-카바졸릴, 2-카바졸릴, 3-카바졸릴, 4-카바졸릴, 9-카바졸릴, 아자카바졸-1-일, 아자카바졸-2-일, 아자카바졸-3-일, 아자카바졸-4-일, 아자카바졸-5-일, 아자카바졸-6-일, 아자카바졸-7-일, 아자카바졸-8-일, 아자카바졸-9-일, 1-페난트리디닐, 2-페난트리디닐, 3-페난트리디닐, 4-페난트리디닐, 6-페난트리디닐, 7-페난트리디닐, 8-페난트리디닐, 9-페난트리디닐, 10-페난트리디닐, 1-아크리디닐, 2-아크리디닐, 3-아크리디닐, 4-아크리디닐, 9-아크리디닐, 2-옥사졸릴, 4-옥사졸릴, 5-옥사졸릴, 2-옥사디아졸릴, 5-옥사디아졸릴, 3-푸라자닐, 2-티에닐, 3-티에닐, 2-메틸피롤-1-일, 2-메틸피롤-3-일, 2-메틸피롤-4-일, 2-메틸피롤-5-일, 3-메틸피롤-1-일, 3-메틸피롤-2-일, 3-메틸피롤-4-일, 3-메틸피롤-5-일, 2-t-부틸피롤-4-일, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일, 2-메틸-1-인돌릴, 4-메틸-1-인돌릴, 2-메틸-3-인돌릴, 4-메틸-3-인돌릴, 2-t-부틸-1-인돌릴, 4-t-부틸-1-인돌릴, 2-t-부틸-3-인돌릴, 4-t-부틸-3-인돌릴, 1-디벤조푸라닐, 2-디벤조푸라닐, 3-디벤조푸라닐, 4-디벤조푸라닐, 1-디벤조티오펜, 2-디벤조티오펜, 3-디벤조티오펜, 4-디벤조티오펜, 1-실라플루오레닐, 2-실라플루오레닐, 3-실라플루오레닐, 4-실라플루오레닐, 1-게르마플루오레닐, 2-게르마플루오레닐, 3-게르마플루오레닐, 4-게르마플루오레닐을 들 수 있다.

[0029] 본원에서 “할로젠”은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0030] 또한, "오소(ortho; o)", "메타(meta; m)", "파라(para; p)"는 모든 치환기의 치환 위치를 뜻하며, 오소(ortho) 위치란 치환기의 위치가 바로 이웃하는 화합물을 나타내고, 일 예로 벤젠일 경우 1, 2 자리를 뜻하고, 메타(meta) 위치란 바로 이웃 치환위치의 다음 치환위치를 나타내며 일 예로, 벤젠일 경우 1, 3자리를 뜻하며,

파라(para) 위치란 메타(meta) 위치의 다음 치환위치로써 일 예로 벤젠일 경우 1, 4자리를 뜻한다.

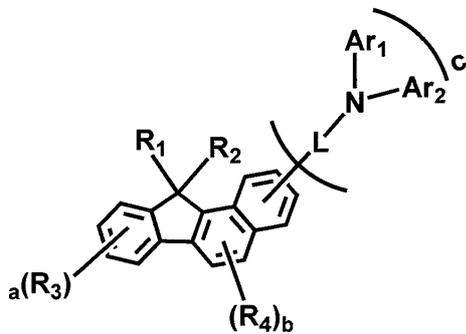
[0031] 본원에서 "치환 또는 비치환된 고리"는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 의미하고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C5-C25)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리, 보다 바람직하게는 (C5-C18)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리일 수 있다.

[0032] 또한 본원의 "치환 또는 비치환" 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 본원의 R₁ 내지 R₄, Ar₁, Ar₂, 및 L에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (3-30원)헤테로아릴(렌), 치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환된 (C1-C30)알콕시, 치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴 및 치환된 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30 원)헤테로아릴, (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 것이 바람직하며, 예를 들면, 비치환된 메틸, 비치환된 페닐 또는 비치환된 나프틸일 수 있다.

[0033] 이하, 일 구현예에 따른 유기 전계 발광 화합물을 설명한다.

[0034] 일 구현예에 따른 유기 전계 발광 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0035] [화학식 1]



[0036] [0037] 상기 화학식 1에서,

[0038] R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고;

[0039] R₃ 및 R₄는 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, 또는 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴이고;

[0040] L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이며;

[0041] Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고;

[0042] a는 1 내지 4의 정수이고, b는 1 또는 2의 정수이며, a 또는 b가 2 이상인 경우 각각의 R₃ 및 R₄는 서로 같거나

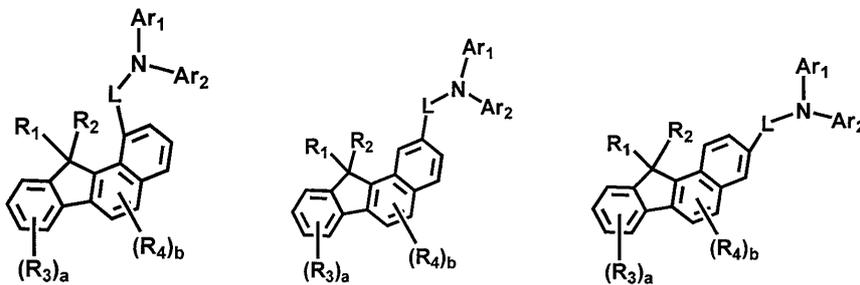
상이할 수 있으며;

[0043] c는 1 또는 2의 정수이며 c가 2인 경우, Ar₁ 및 Ar₂는 같거나 상이할 수 있다.

[0044] 일 구현예에 따른 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 유기 전계 발광 소자의 정공 전달층 및/또는 정공 보조층에 포함될 수 있다. 정공 보조층은 정공 전달층과 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도를 원활하게 하거나 블록킹하는 효과를 나타낼 수 있으며, 이에 따라 전하 밸런스를 조절할 수 있는 층이다. 일 예에 따른 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 공명 구조를 형성하여 정공 및 전자의 흐름을 적절히 균형 맞출 수 있고 이에 따라 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 효율을 개선할 수 있다. 구체적으로, 상기 유기 전계 발광 화합물은 정공을 받기 쉬운 벤조플루오렌 구조에 전자가 풍부한 아릴아민기를 도입하여 정공의 주입 및 정공의 이동도를 증가시키고, HOMO 에너지 레벨을 상승시켜 정공의 주입을 보다 용이하게 할 수 있다.

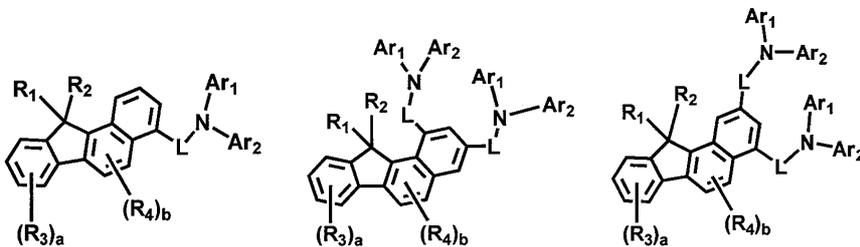
[0045] 일 예에서, 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-6 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0046] [화학식 1-1] [화학식 1-2] [화학식 1-3]



[0047]

[0048] [화학식 1-4] [화학식 1-5] [화학식 1-6]



[0049]

[0050] 상기 화학식 1-1 내지 1-6에서, R₁ 내지 R₄, Ar₁, Ar₂, L, a, 및 b는 상기 화학식 1에서의 정의한 바와 같다.

[0051] 일 예로, 상기 화학식 1 및 화학식 1-1 내지 1-6에서, R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나, 인접한 치환체와 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고, 바람직하게는, 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C18)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴일 수 있으며, 보다 바람직하게는, 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C4)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴일 수 있다. 예를 들어, R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 또는 페닐일 수 있다.

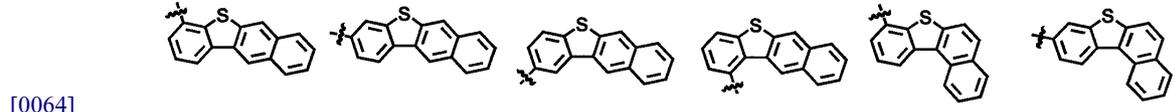
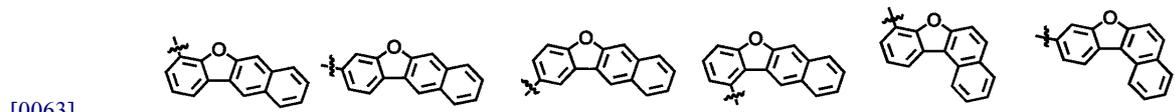
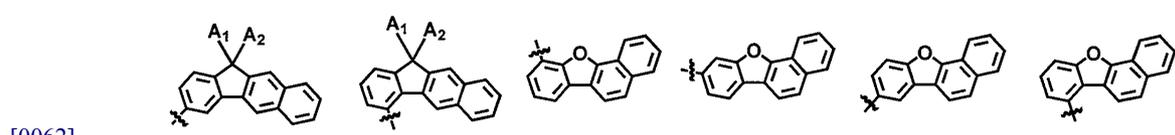
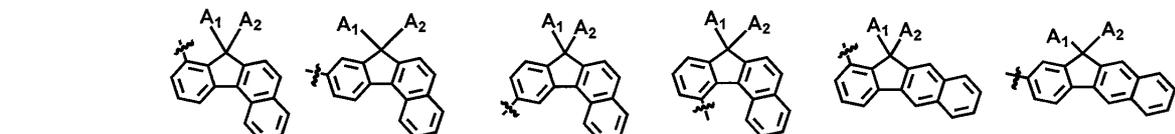
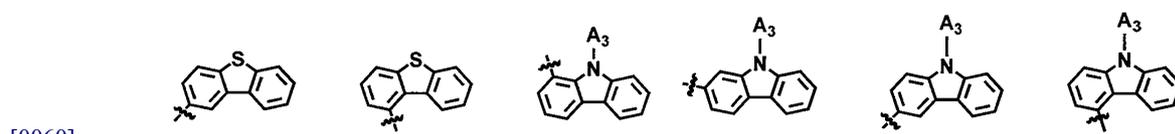
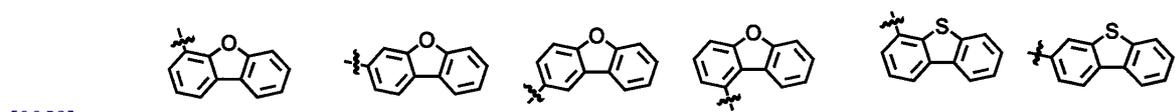
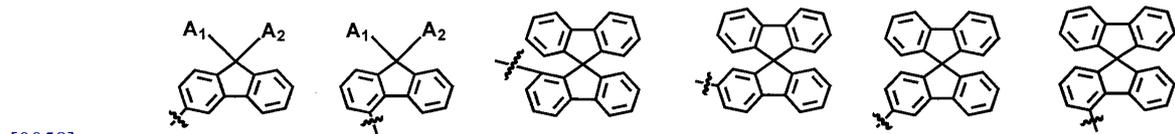
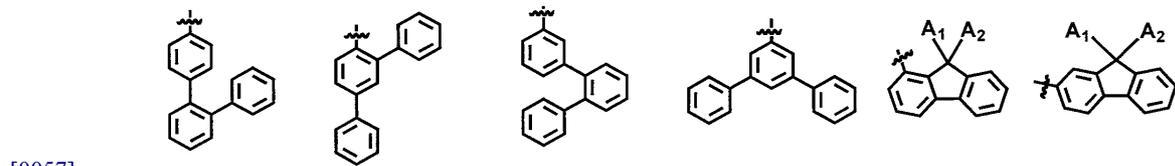
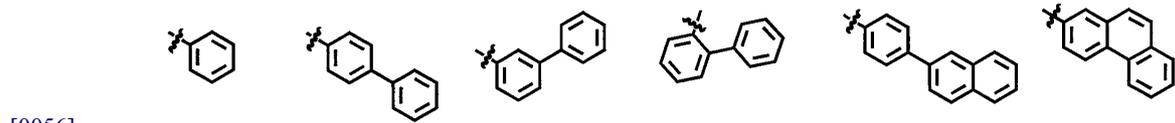
[0052] 일 예로, 상기 화학식 1 및 화학식 1-1 내지 1-6에서 R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 또는 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴일 수 있고, 바람직하게는, 각각 독립적으로, 수소 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴일 수 있으며, 보다 바람직하게는, 수소 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴일 수 있다. 예를 들어, R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로, 수소 또는 페닐일 수 있다.

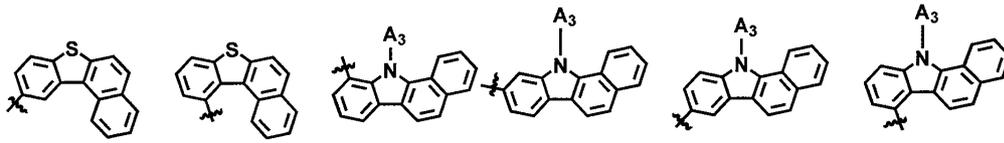
[0053] 일 예로, 상기 화학식 1 및 화학식 1-1 내지 1-6에서 L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는

치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이며, 바람직하게는, 단일 결합 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴렌일 수 있으며, 보다 바람직하게는, 단일 결합 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌일 수 있다. 예를 들어, L은 단일 결합 또는 페닐렌일 수 있다.

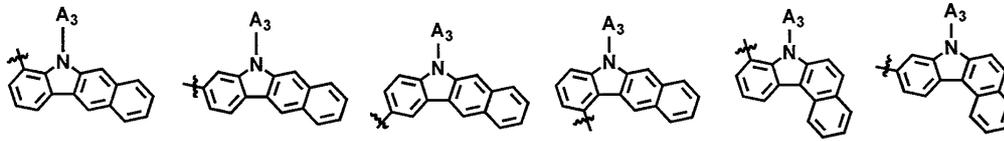
[0054] 일 예로, 상기 화학식 1 및 화학식 1-1 내지 1-6에서 Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고, 바람직하게는, 각각 독립적으로, 하기 그룹 I에 나열된 치환기 중 하나일 수 있다.

[0055] [그룹 I]

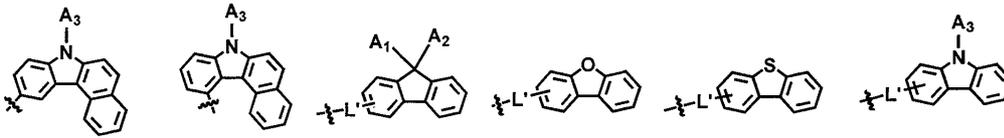




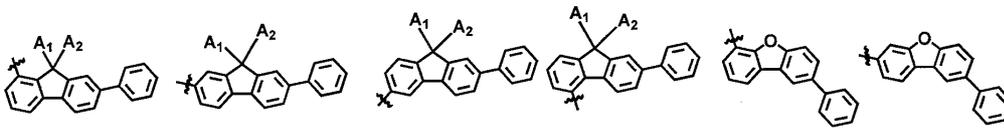
[0065]



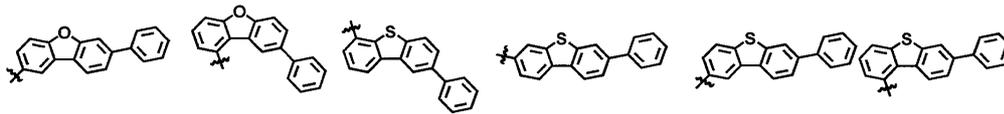
[0066]



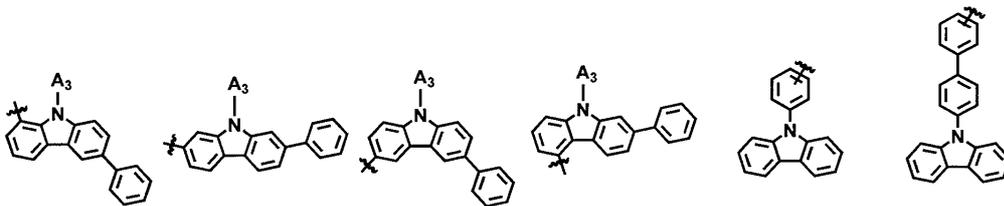
[0067]



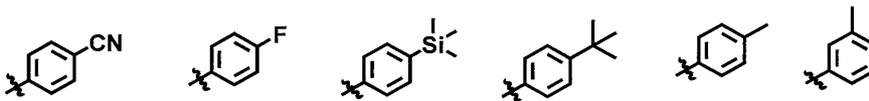
[0068]



[0069]



[0070]



[0071]



[0072]

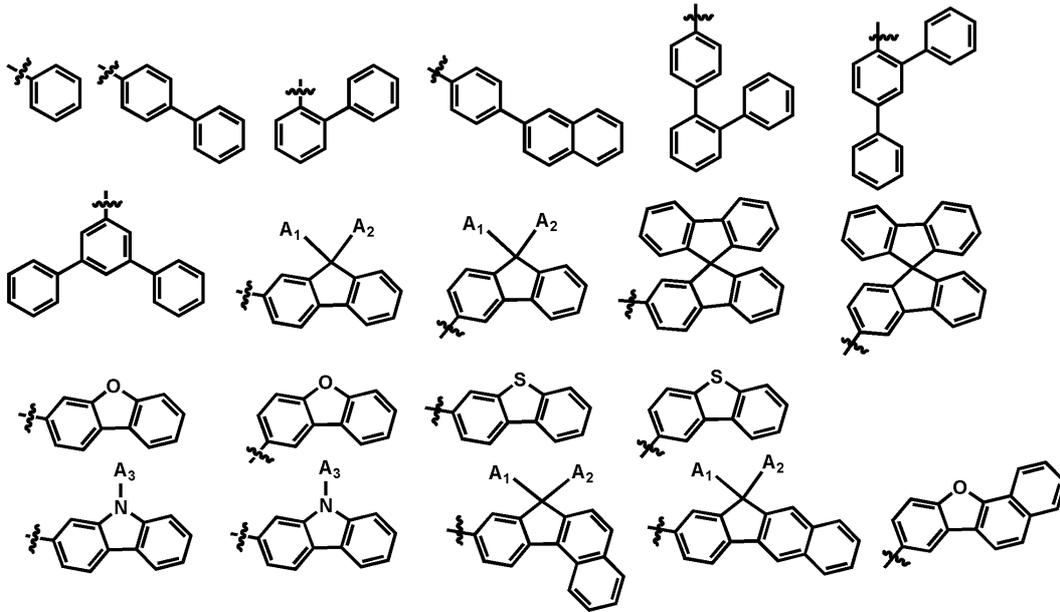
[0073] 상기 그룹 I에서, A₁ 내지 A₃은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고, 바람직하게는, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C18)알킬 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴일 수 있고, 보다 바람직하게는, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C4)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴일 수 있다. 예를 들어, A₁ 내지 A₃은 각각 독립적으로, 메틸, 페닐, 또는 나프틸일 수 있다.

[0074] 상기 그룹 I에서, L'은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고, 바람직하게는, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴렌일 수 있고, 보다 바람직하게는, 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴렌일 수 있다.

[0075] 상기 그룹 I에서,  는 N과의 연결 위치를 나타낸다.

[0076] 또한 보다 바람직하게는, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴 또는 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C25)의 단일환 또는 다환의 방향족의 고리를 형성할 수 있으며, 이 때 형성된 방향족 고리의 적어도 하나의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있으며, 바람직하게는, 각각 독립적으로 하기 그룹 II에 나열된 치환기 중 하나이거나, 서로 연결되어 아민기가 치환 또는 비치환된 카바졸를 형성할 수 있다.

[0077] [그룹 II]



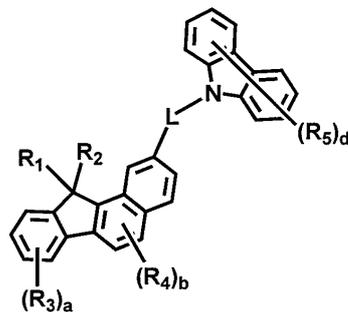
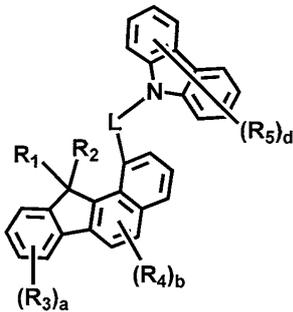
[0078]

[0079] 상기 그룹 II에서의 A₁ 내지 A₃, 및  의 정의는 상기 그룹 I에서 정의한 바와 같다.

[0080] 일 예에서, 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 하기 화학식 I-1 내지 I-4 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0081] [화학식 I-1]

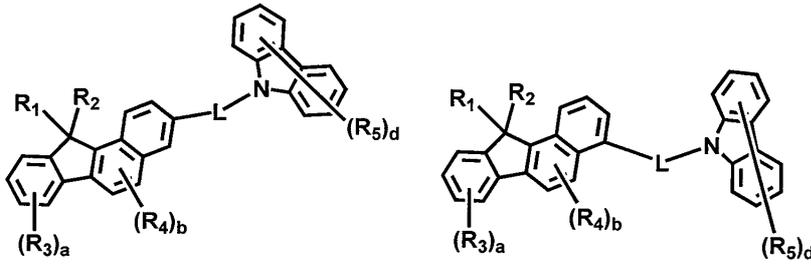
[화학식 I-2]



[0082]

[0083] [화학식 I-3]

[화학식 I-4]



[0084]

[0085]

[0086]

[0087]

[0088]

[0089]

[0090]

[0091]

[0092]

[0093]

[0094]

상기 화학식 I-1 내지 I-4에서, R₁ 내지 R₄, L, a, 및 b는 상기 화학식 1에서의 정의와 같고;

R₅는 수소 또는 -NR_xR_y 이며;

R_x 및 R_y는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고;

d는 1 또는 2의 정수이며, d가 2인 경우 R₅는 같거나 상이할 수 있다.

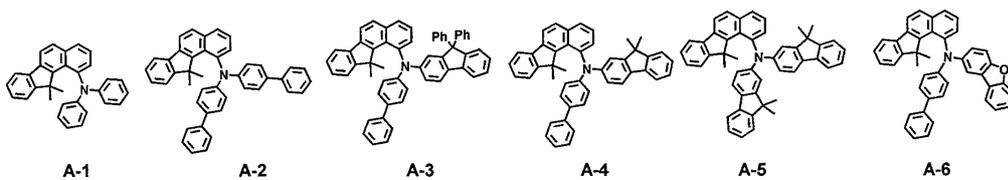
일 예로, 상기 화학식 I-1 내지 I-4에서 R₅는 수소 또는 -NR_xR_y 이며, 이 때 상기 R_x 및 R_y는 각각 독립적으로, 수소 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴일 수 있고, 바람직하게는 각각 독립적으로, 수소 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴일 수 있고, 보다 바람직하게는 각각 독립적으로, 수소 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴일 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 I-1 내지 I-4에서 R₅는 수소이거나, 페닐로 치환된 아민기일 수 있다.

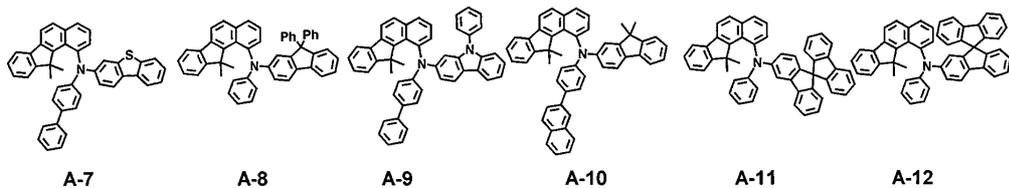
일 예로, 상기 화학식 1 및 화학식 1-1 내지 1-6에서 a는 1 내지 4의 정수이고, b는 1 또는 2의 정수이며, a 또는 b가 2 이상인 경우 각각의 R₃ 및 R₄는 서로 같거나 상이할 수 있으며, c는 1 또는 2의 정수이며 c가 2인 경우, Ar₁ 및 Ar₂는 같거나 상이할 수 있다.

본원의 일 예에 따른 유기 전계 발광 화합물은, 상기 화학식 1에서 R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C18)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이고; R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로, 수소 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴이며; L은 단일 결합이거나 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴렌이고; Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (3-25원)헤테로아릴 또는 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C25)의 단일환 또는 다환의 방향족의 고리를 형성할 수 있다.

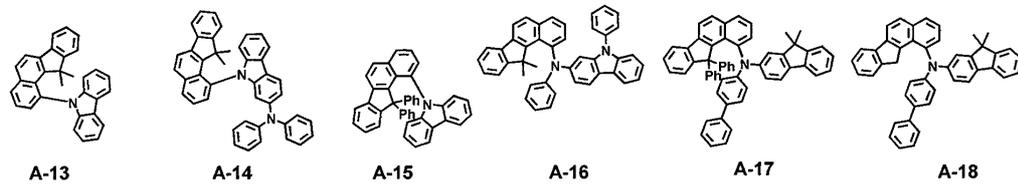
본원의 또 다른 일 예에 따르면, 상기 화학식 1에서 R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로, 수소, 메틸, 또는 페닐이고; R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로, 수소 또는 페닐이며; L은 단일 결합 또는 페닐렌이고; Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 상기 그룹 II에 나열된 치환기 중 하나이거나, 서로 연결되어 아민기가 치환 또는 비치환된 카바졸을 형성할 수 있다.

일 예에 따르면, 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

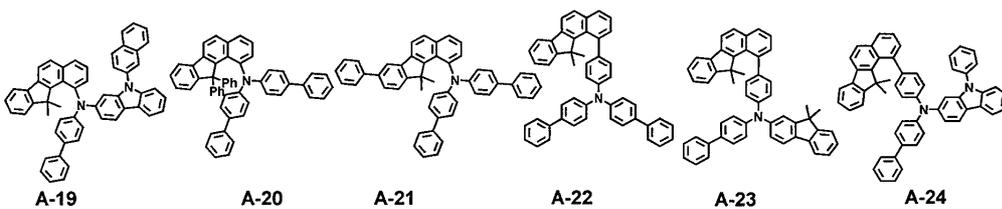




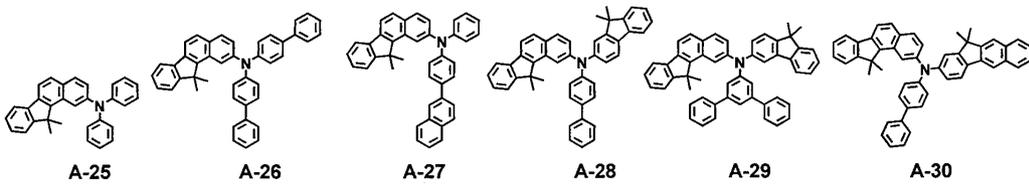
[0095]



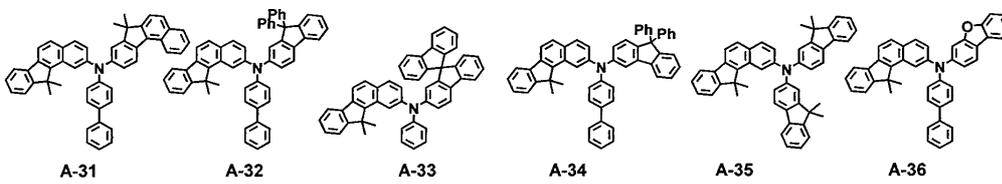
[0096]



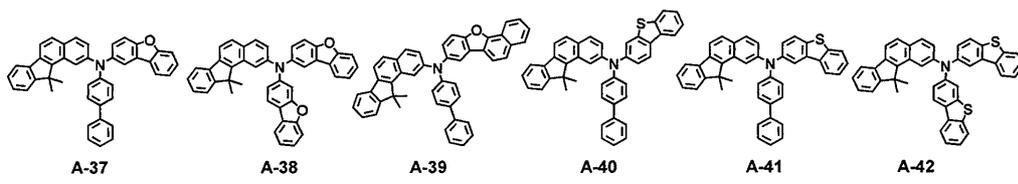
[0097]



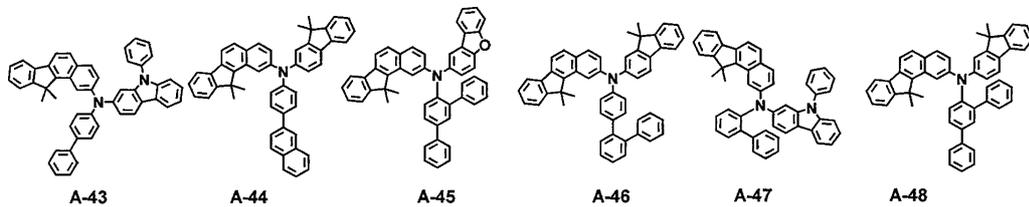
[0098]



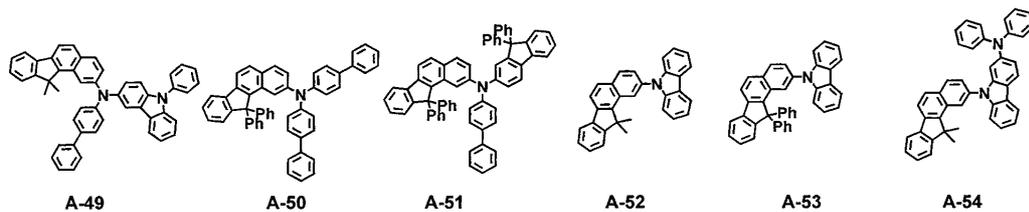
[0099]



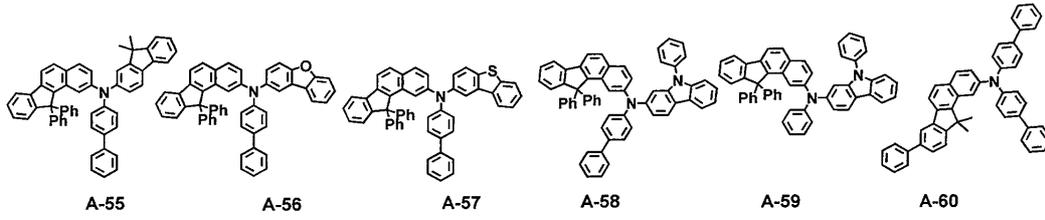
[0100]



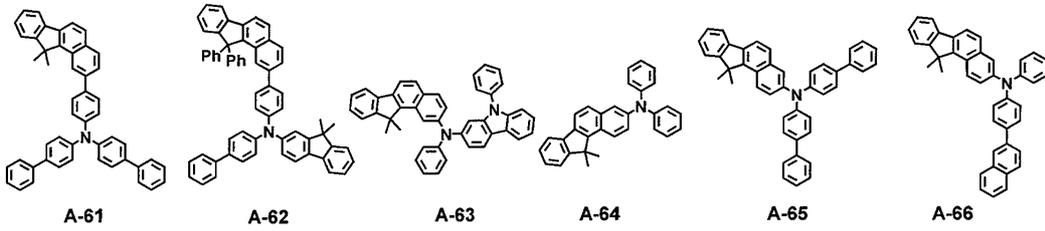
[0101]



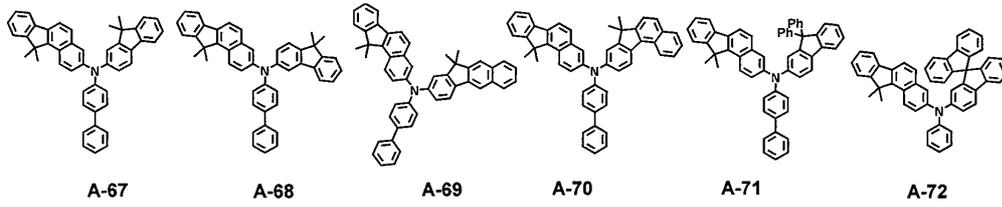
[0102]



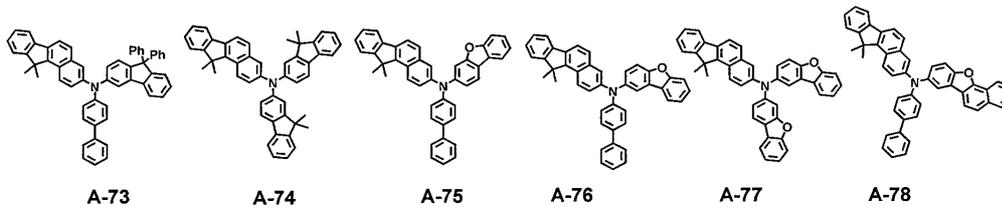
[0103]



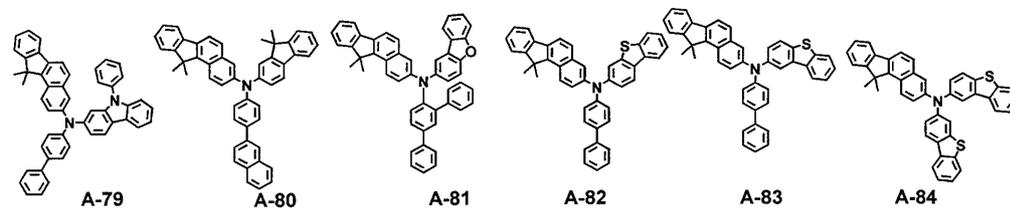
[0104]



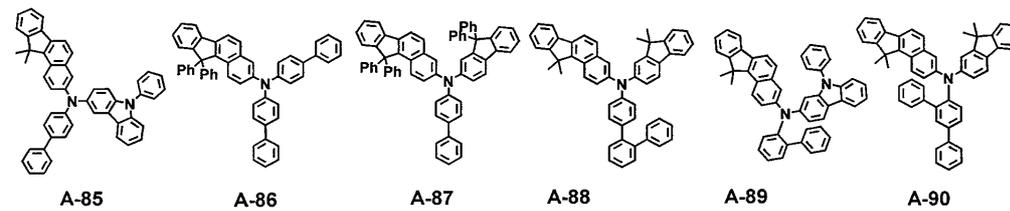
[0105]



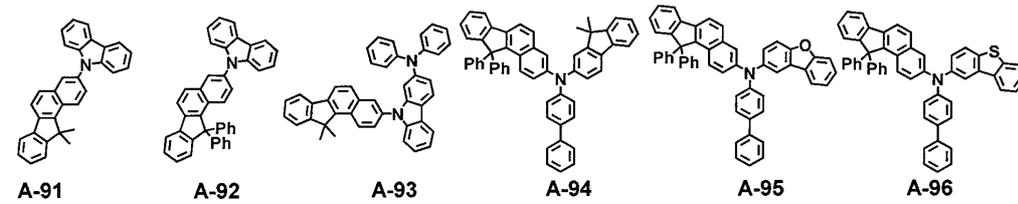
[0106]



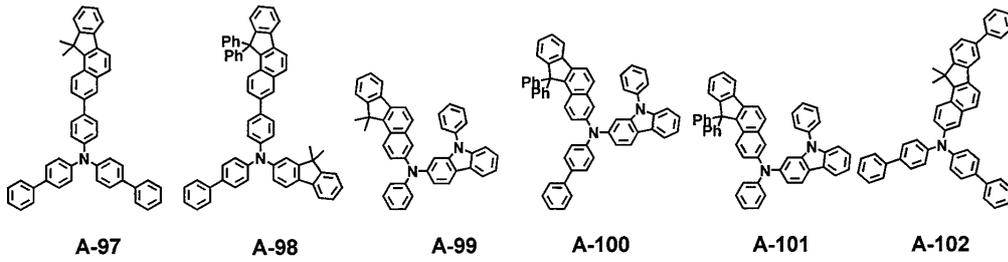
[0107]



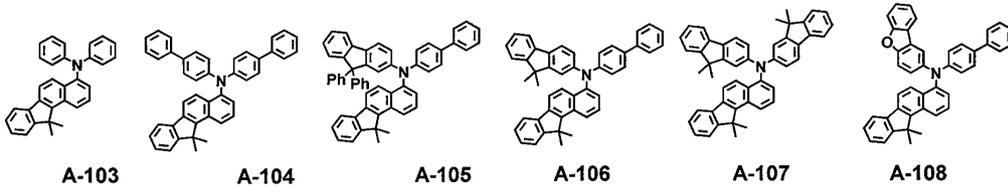
[0108]



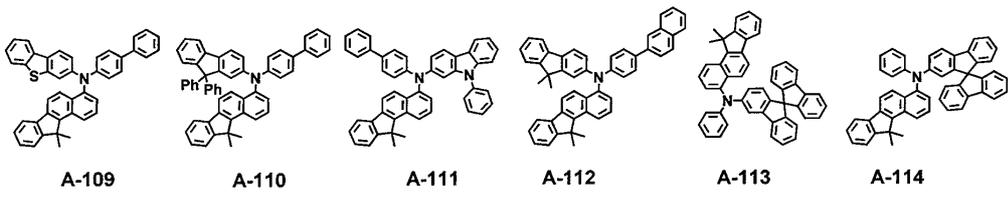
[0109]



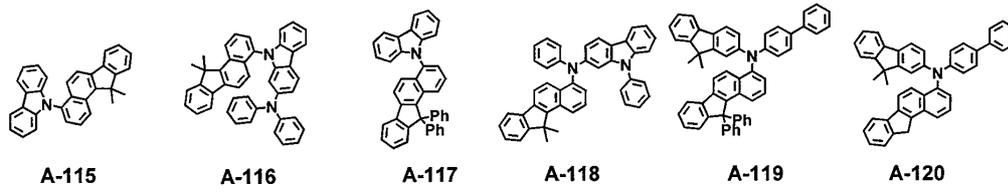
[0110]



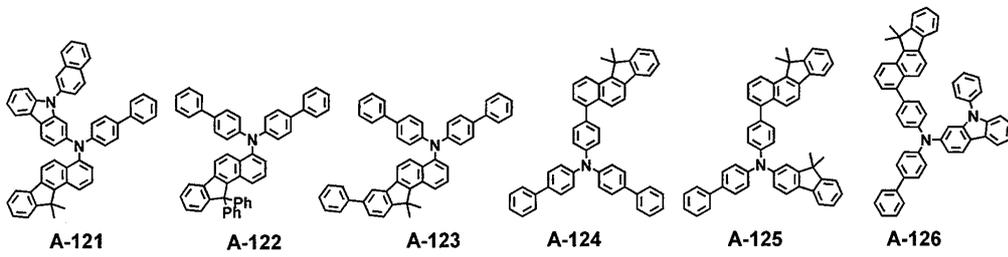
[0111]



[0112]



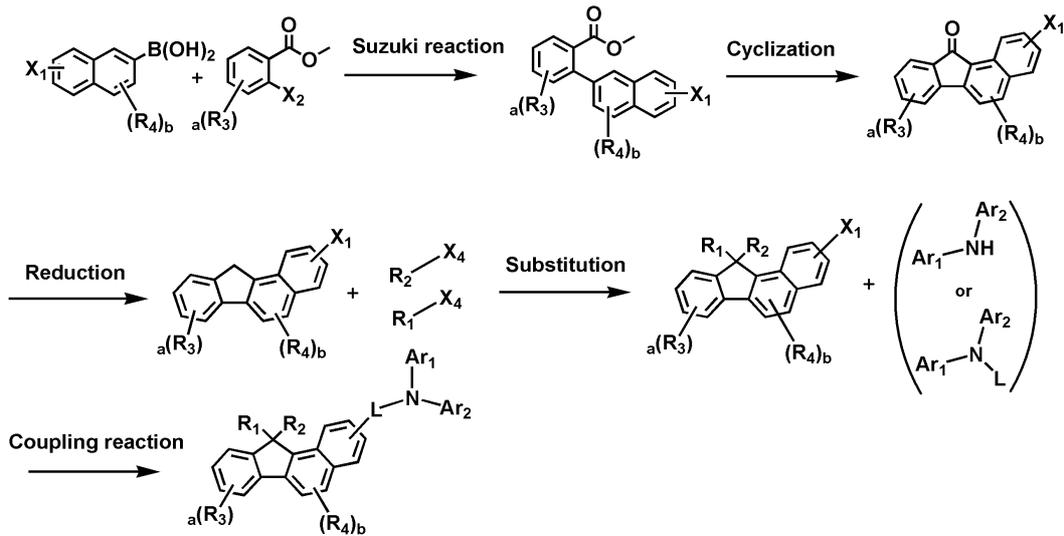
[0113]



[0114]

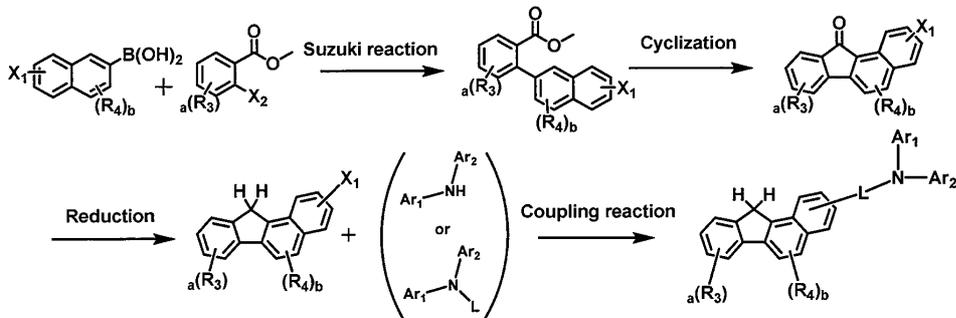
[0115] 본원에 따른 화학식 1의 화합물은 하기 반응식 1 내지 3에 나타난 바와 같이 제조될 수 있으나, 이에 한정되지 않으며, 당업자에게 공지된 합성 방법으로도 제조될 수 있다.

[0116] [반응식 1]



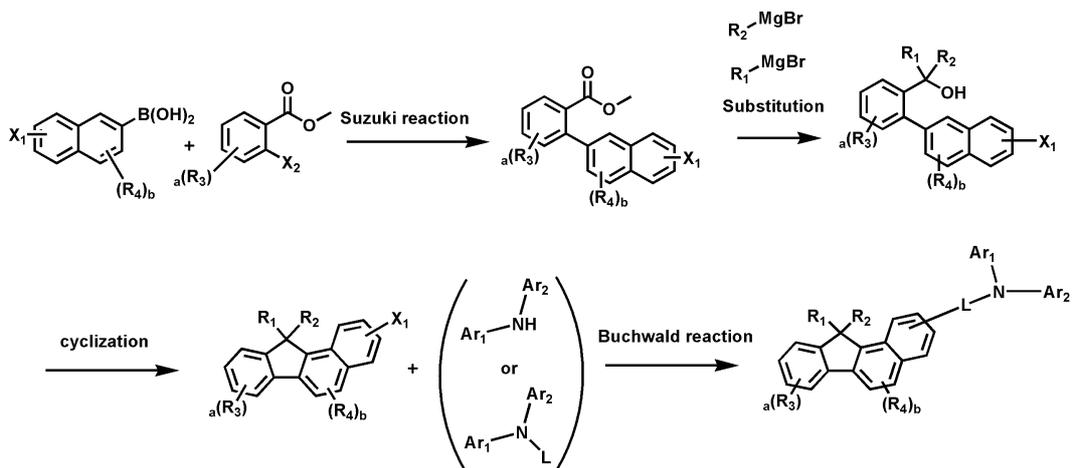
[0117]

[0118] [반응식 2]



[0119]

[0120] [반응식 3]



[0121]

[0122] 상기 반응식 1 내지 3에서, R_1 내지 R_4 , Ar_1 , Ar_2 , a 및 b 는 화학식 1에서의 정의와 같으며, X_1 , X_2 , 및 X_4 는 각각 독립적으로, Cl, Br, 또는 I 이다.

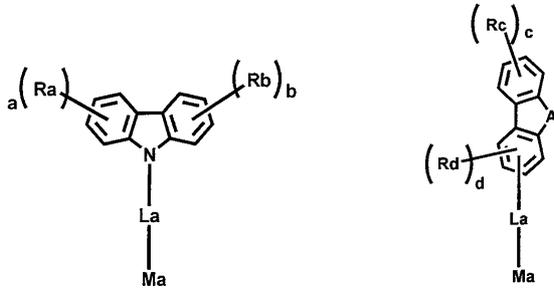
[0123] 본원은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 유기 전계 발광 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

[0124] 상기 유기 전계 발광 재료는 본원의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다. 바람직하게는 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물

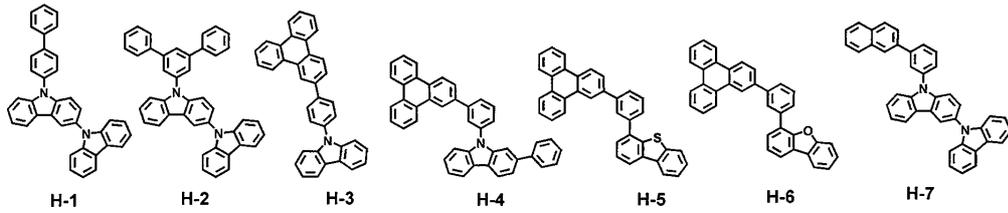
은 유기 전계 발광 소자의 정공 전달층 (HTL) 재료로서 포함될 수 있다.

[0125] 본원의 유기 전계 발광 재료에는 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외에 하나 이상의 호스트 화합물을 포함할 수 있다. 일 예에 따른 호스트 화합물은 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용가능하고, 예를 들어, 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시되는 화합물에서 선택되는 것이 발광 효율 면에서 바람직하나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

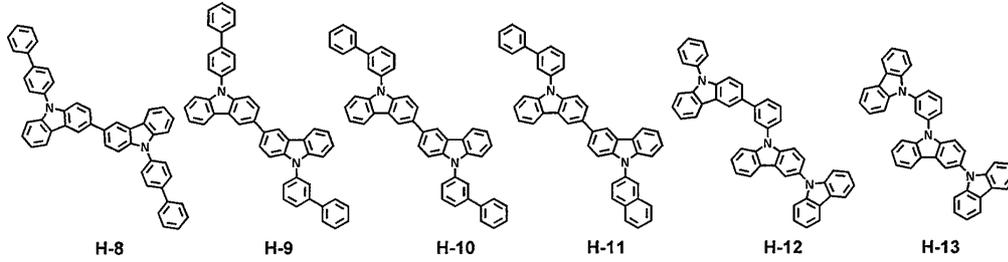
[0126] [화학식 2] [화학식 3]



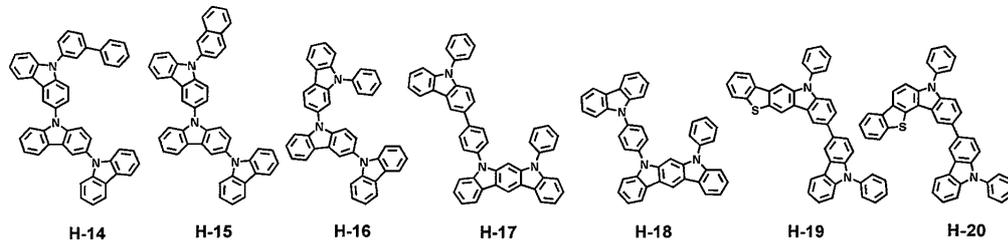
- [0127]
- [0128] 상기 화학식 2 및 3에서,
- [0129] Ma는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고;
- [0130] La는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고;
- [0131] A는 S, O, NR₇ 또는 CR₈R₉이고;
- [0132] Ra 내지 Rd는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (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;
- [0133] 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;
- [0134] a 내지 c는 각각 독립적으로, 1 내지 4의 정수이고, d는 1 내지 3의 정수이며;
- [0135] 상기 헤테로아릴(렌)은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.
- [0136] 상기 화학식 2 및 화학식 3 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.



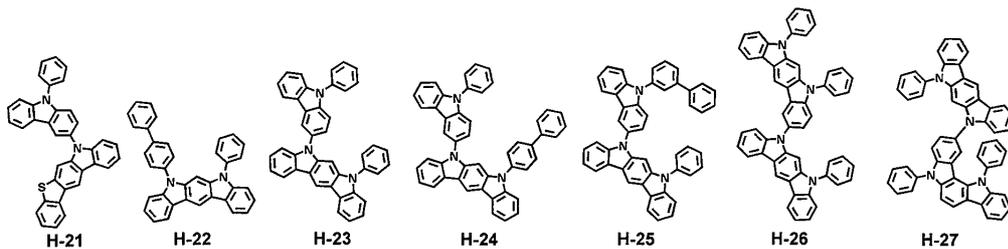
[0137]



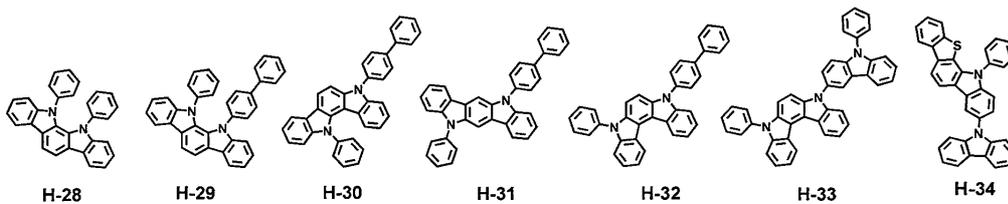
[0138]



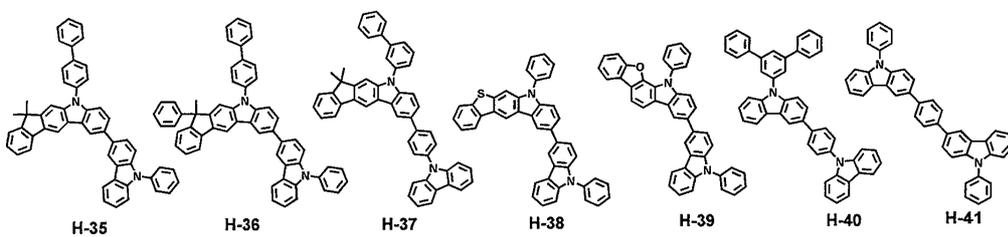
[0139]



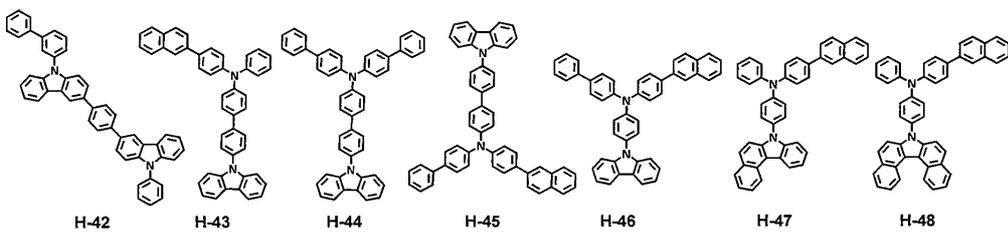
[0140]



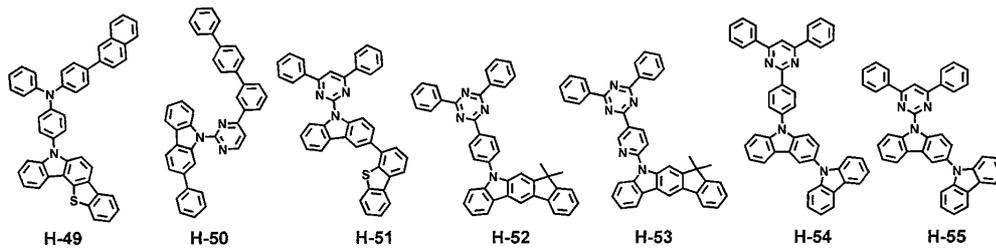
[0141]



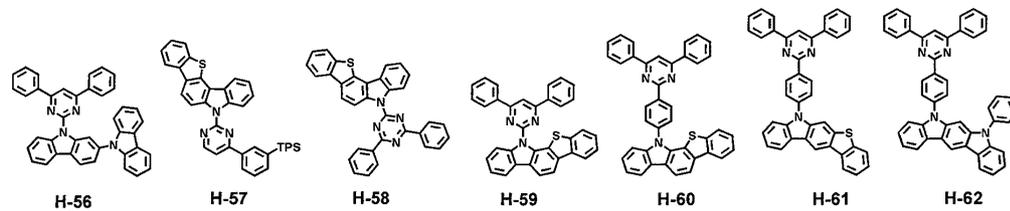
[0142]



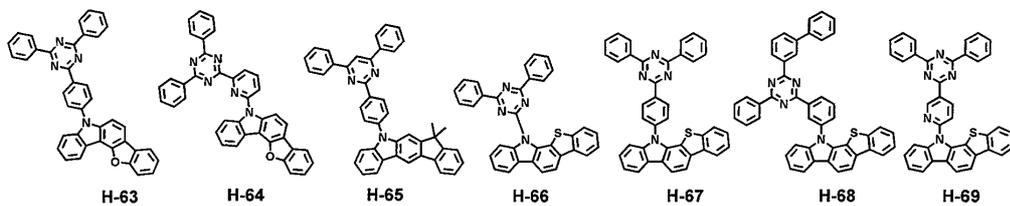
[0143]



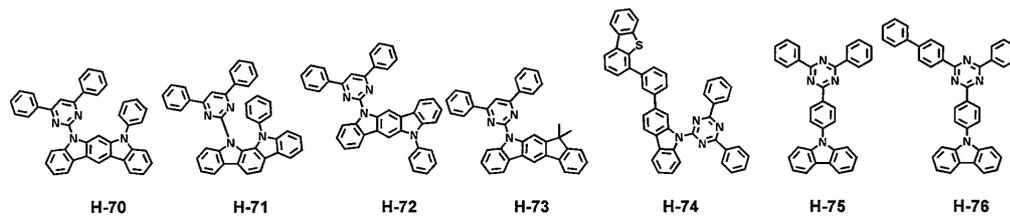
[0144]



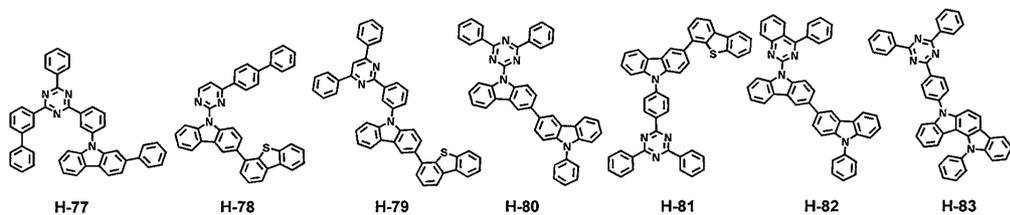
[0145]



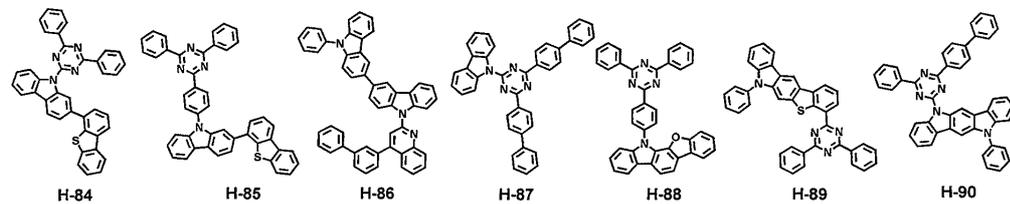
[0146]



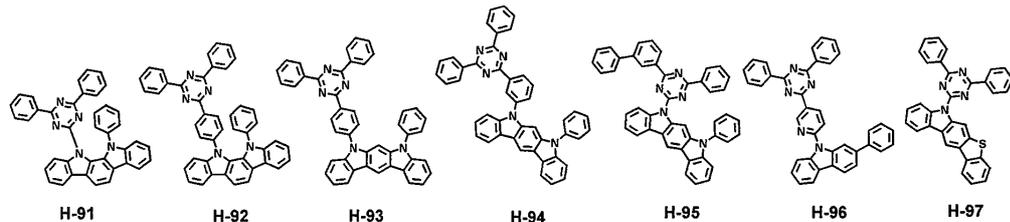
[0147]



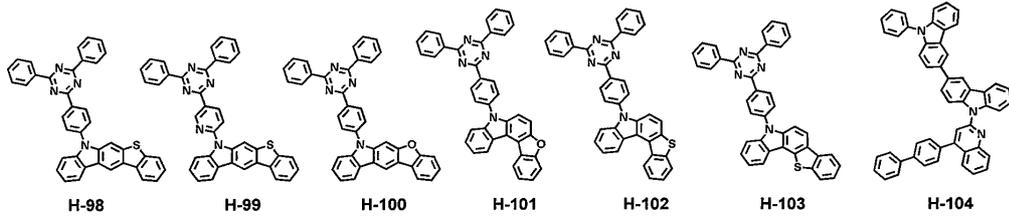
[0148]



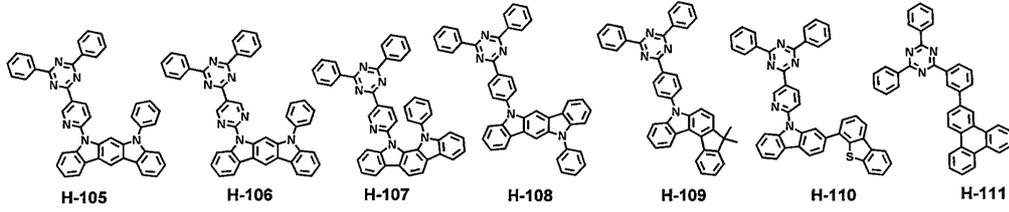
[0149]



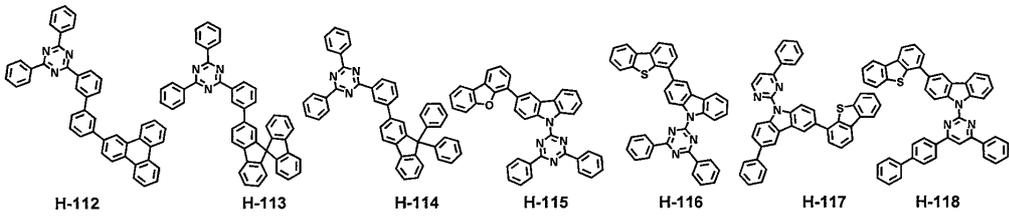
[0150]



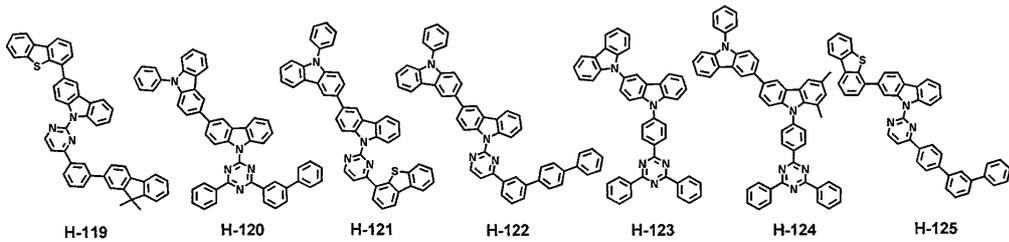
[0151]



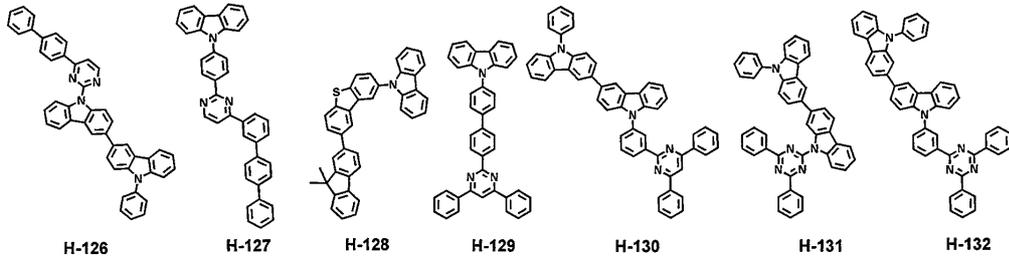
[0152]



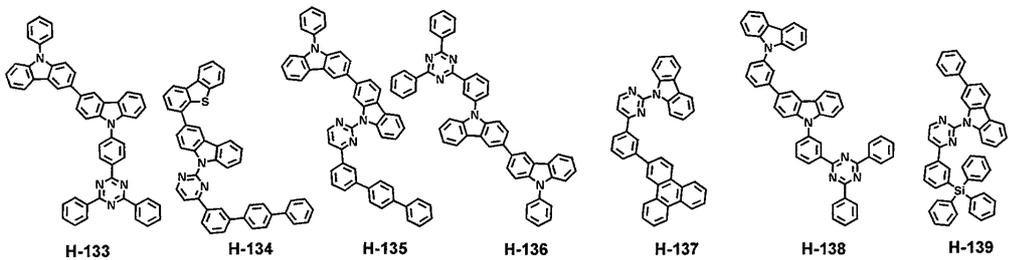
[0153]



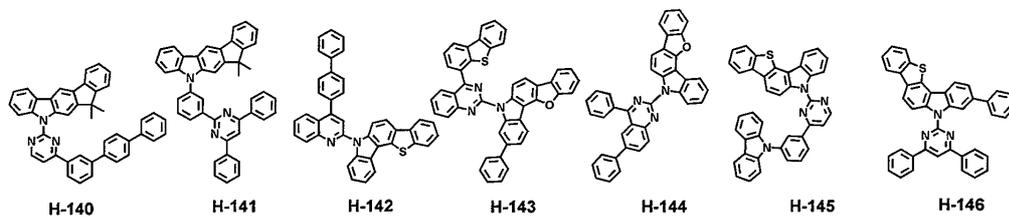
[0154]



[0155]

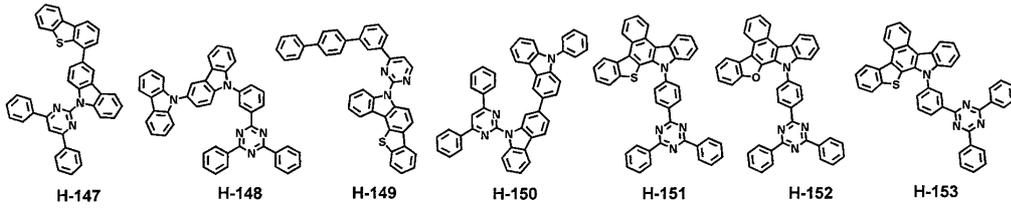


[0156]

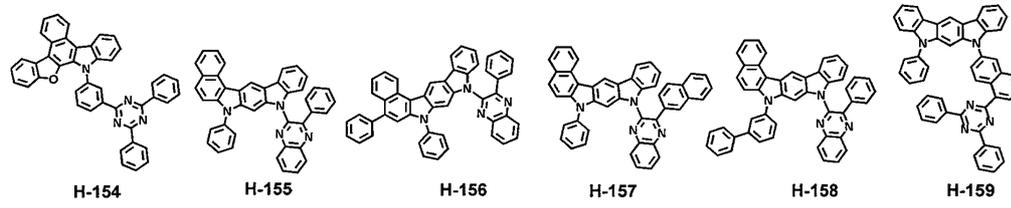


[0157]

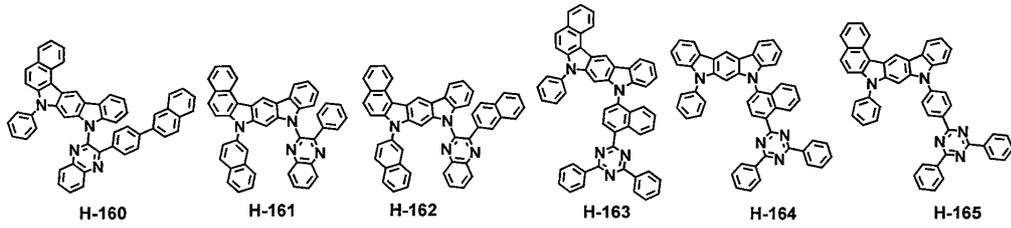
[0158]



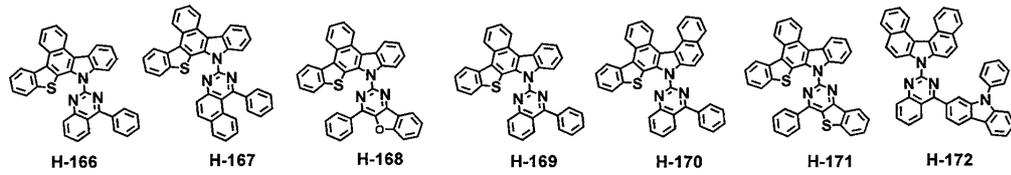
[0159]



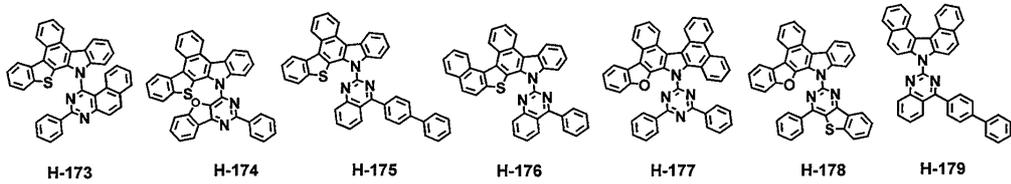
[0160]



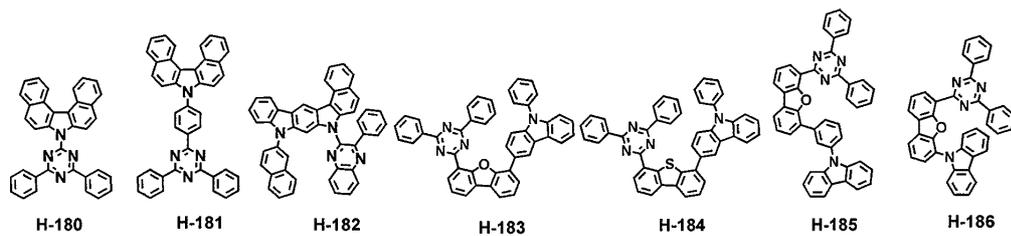
[0161]



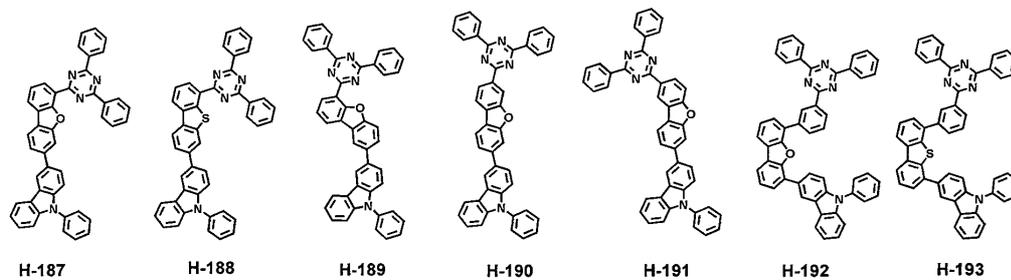
[0162]

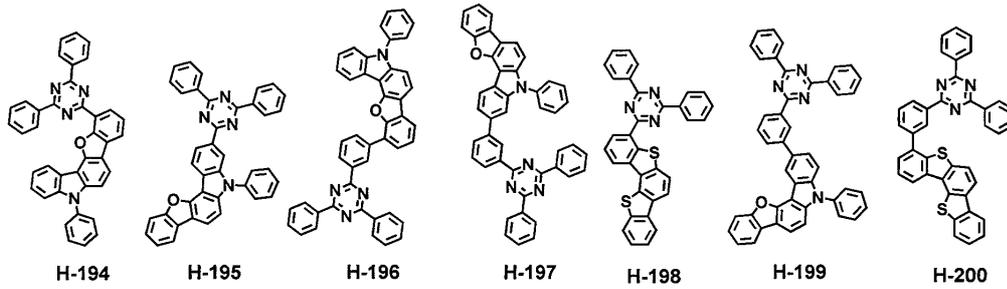


[0163]

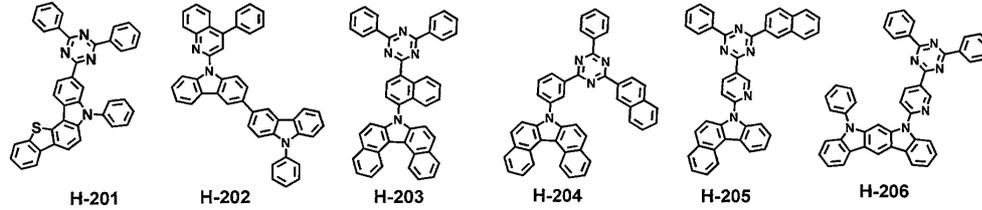


[0164]

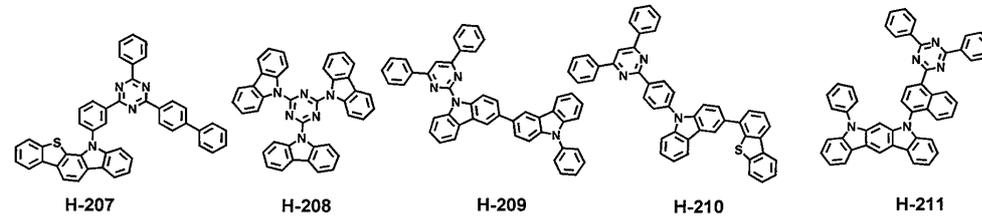




[0165]



[0166]



[0167]

[0168]

[여기서, TPS는 트리페닐실릴(triphenylsilyl)기이다]

[0169]

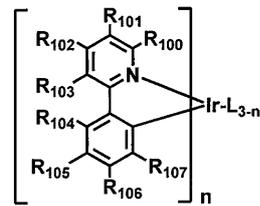
상기 유기 전계 발광 재료는 하나 이상의 도판트를 추가로 더 포함할 수 있다. 본원의 유기 전계 발광 재료에 포함되는 도판트로는 하나 이상의 인광 또는 형광 도판트를 사용할 수 있고, 인광 도판트가 바람직하다. 본원에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물일 수 있고, 경우에 따라 바람직하게는, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물일 수 있으며,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

[0170]

상기 도판트로 하기 화학식 101로 표시되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0171]

[화학식 101]



[0172]

상기 화학식 101에서,

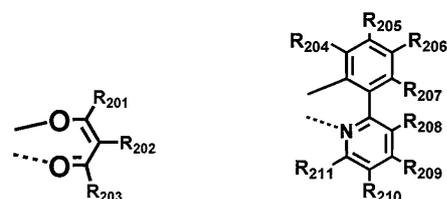
[0173]

L은 하기 구조 1 또는 2에서 선택되고;

[0174]

[구조 1]

[구조 2]



[0176]

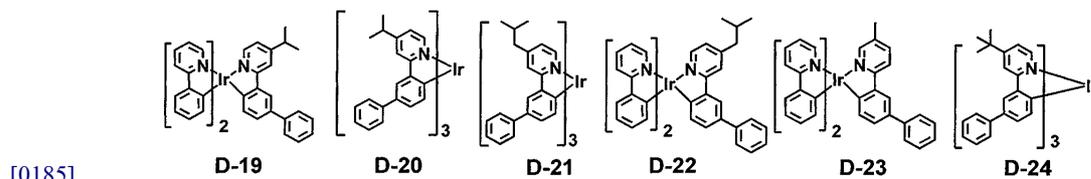
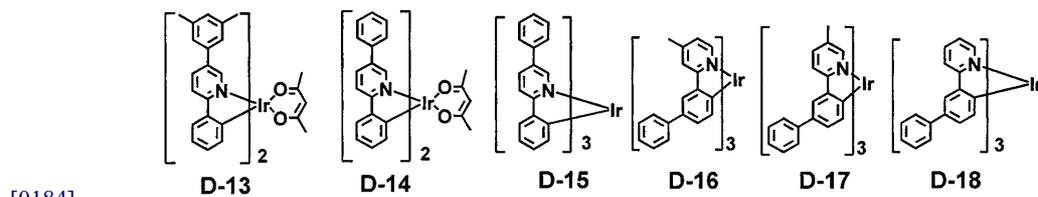
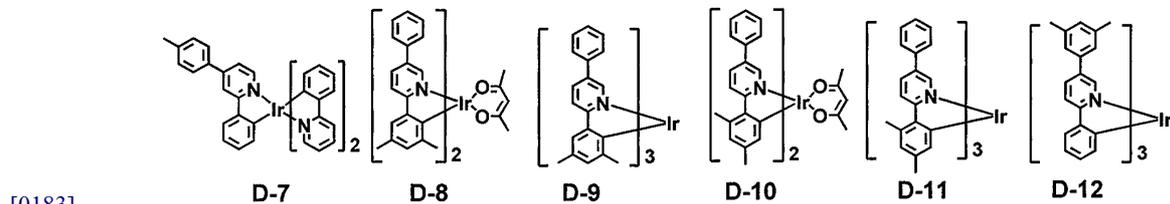
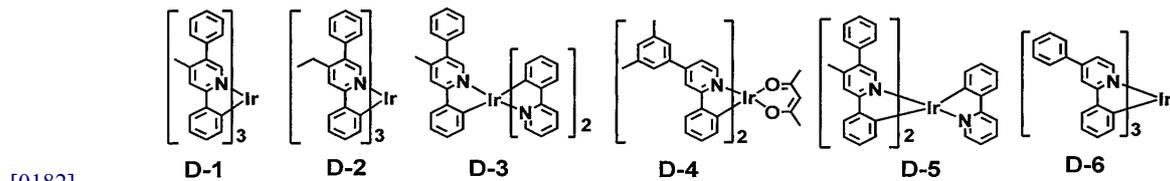
[0177] R_{100} 내지 R_{103} 은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; R_{100} 내지 R_{103} 은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조피로피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조프로퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조티에노퀴놀린, 또는 치환 또는 비치환된 인데노퀴놀린 형성이 가능하며;

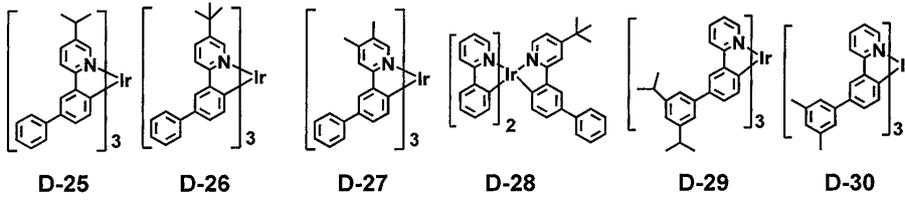
[0178] R_{104} 내지 R_{107} 은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; R_{104} 내지 R_{107} 은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조피로피리딘, 또는 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘 형성이 가능하며;

[0179] R_{201} 내지 R_{211} 은 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;

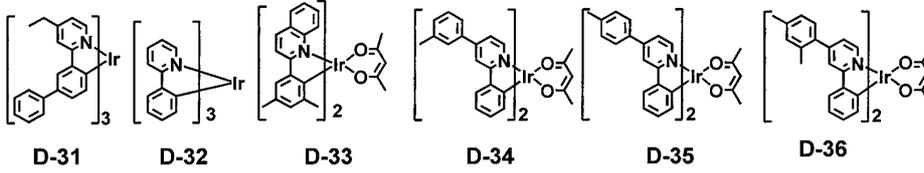
[0180] n 은 1 내지 3의 정수이다.

[0181] 구체적으로, 상기 도판트 화합물의 구체적인 예는 다음과 같으나, 이에 한정되지는 않는다.

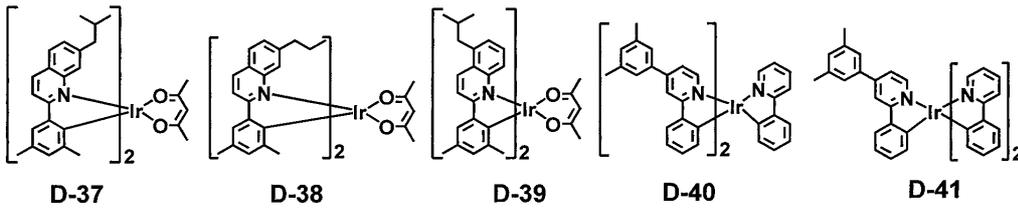




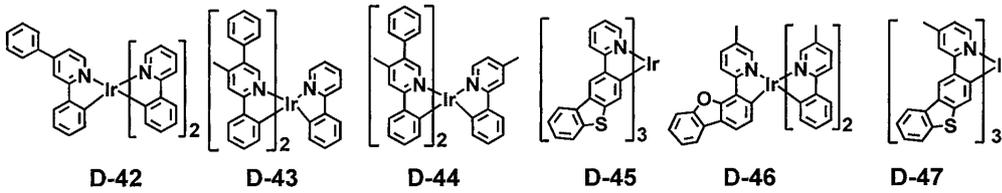
[0186]



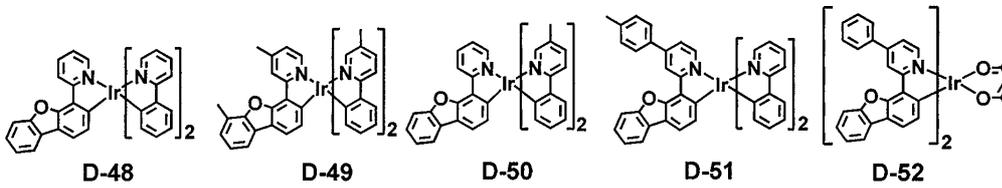
[0187]



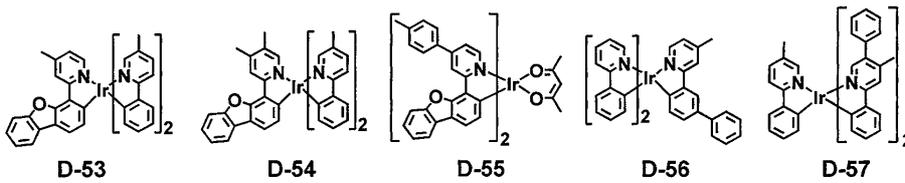
[0188]



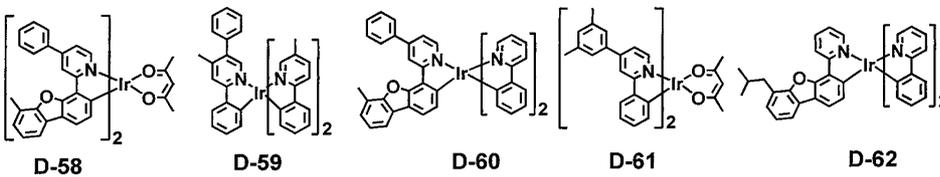
[0189]



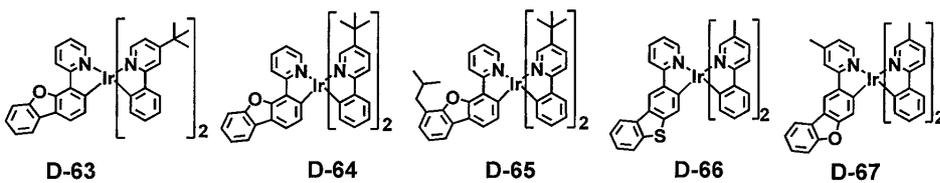
[0190]



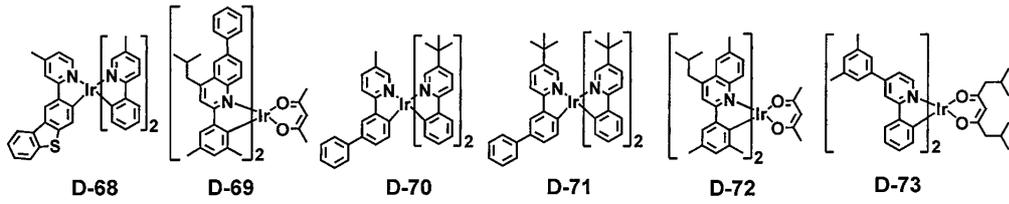
[0191]



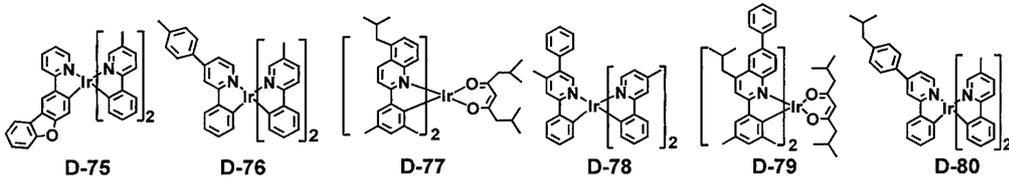
[0192]



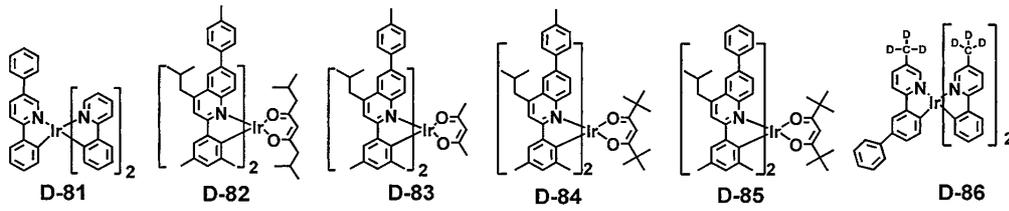
[0193]



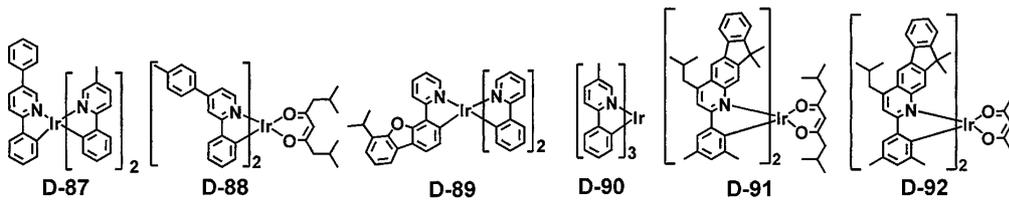
[0194]



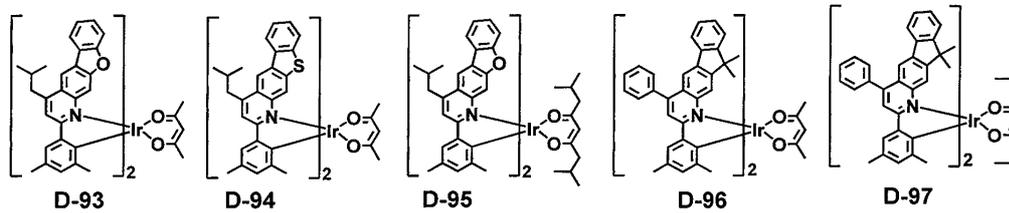
[0195]



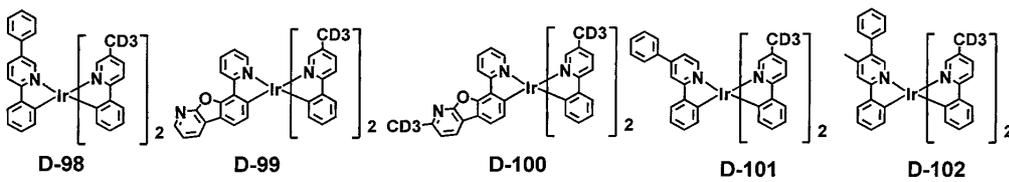
[0196]



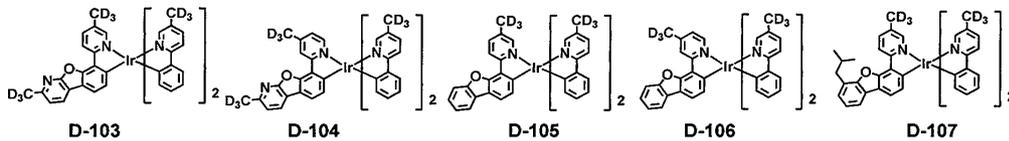
[0197]



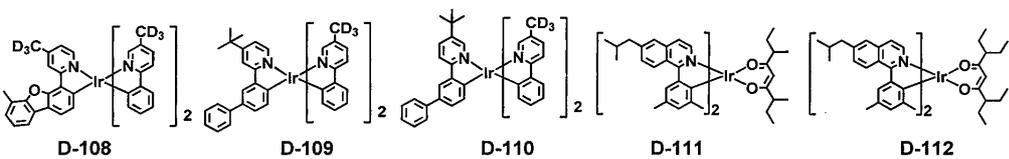
[0198]



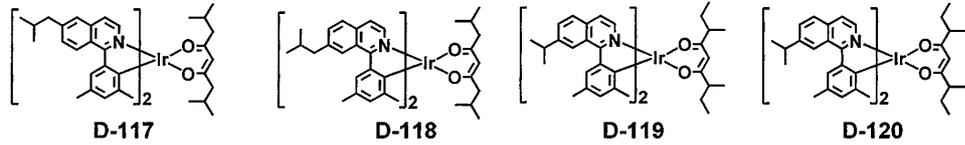
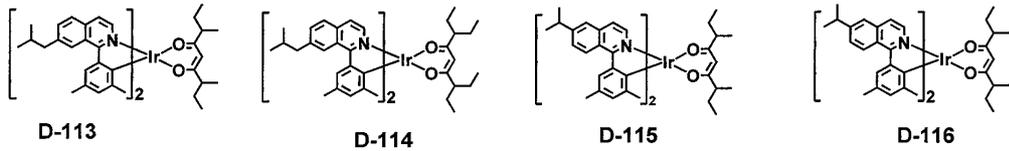
[0199]



[0200]



[0201]



[0202]

[0203]

[0204]

[0205]

[0206]

[0207]

[0208]

[0209]

[0210]

[0211]

[0212]

이하, 전술한 유기 전계 발광 화합물 또는 유기 전계 발광 재료를 적용한 유기 전계 발광 소자에 대해 설명한다.

본원에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 포함한다.

본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 유기 전계 발광 소자를 구성하는 1 이상의 층에 포함될 수 있다. 일 예에 따르면, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 정공 전달층 및/또는 정공 보조층을 포함한다. 상기 정공 전달층 및/또는 정공 보조층은 본원의 유기 전계 발광 화합물을 단독으로 포함하거나 유기 전계 발광 화합물 중 적어도 2종을 혼합하여 포함될 수도 있으며, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

상기 유기물층은 정공 전달층 및 정공 보조층 외에, 정공 주입층, 발광층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층, 전자 차단층 및 전자 버퍼층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있고, 각각의 층은 여러 층으로 추가 구성되어 질 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 추가로 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 1족, 2족, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란타게열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속, 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체 화합물을 추가로 포함할 수도 있다.

일 예에 따른 유기 전계 발광 재료는 백색 유기 전계 발광 소자(White Organic Light Emitting Device)를 위한 발광 재료로서 사용될 수 있다. 상기 백색 유기 전계 발광 소자는 R(적색), G(녹색) 또는 YG(황녹색), B(청색) 발광부들의 배열 형태에 따라 병렬 배치(side-by-side) 방식, 적층(stacking) 방식, 또는 색 변환 물질(color conversion material, CCM) 방식 등 다양한 구조들이 제안되고 있다. 또한 일 예에 따른 유기 전계 발광 재료는 양자점(QD)을 포함하는 유기 전계 발광 소자에도 사용될 수 있다.

상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 양극(애노드)이고 다른 하나는 음극(캐소드)일 수 있다. 이 때, 상기 제1 전극 및 제2 전극은 각각 투명한 도전성 물질로 형성되거나 반투과형 또는 반사형 도전성 물질로 형성될 수 있다. 상기 제1 전극 및 제2 전극을 형성하는 물질의 종류에 따라, 유기 전계 발광 소자는 전면 발광형, 배면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

양극과 발광층 사이에 정공 주입층, 정공 전달층 또는 전자 차단층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 정공 주입층은 양극에서 정공 전달층 또는 전자 차단층으로의 정공 주입 장벽(또는 정공 주입 전압)을 낮출 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 또한 상기 정공 주입층은 p-도판트로 도핑될 수 있다. 전자 차단층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 발광층으로부터의 전자의 오버플로우를 차단하여 엑시톤을 발광층 내에 가두어 발광 누수를 방지할 수 있다. 정공 전달층 또는 전자 차단층은 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다.

발광층과 음극 사이에 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층 또는 전자 주입층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 전자 버퍼층은 전자주입을 조절하고 발광층과 전자 주입층 사이의 계면 특성을 향상시킬 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공 차단층 또는 전자 전달층도 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다. 또한, 상기 전자 주입층은 n-도판트로 도핑될 수 있다.

상기 발광 보조층은 애노드와 발광층 사이에 위치하거나, 캐소드와 발광층 사이에 위치하는 층으로서, 발광 보

조층이 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, 전자의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 정공의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있다. 또한, 상기 정공 보조층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도(또는 주입 속도)를 원활하게 하거나 블록킹하는 효과를 나타낼 수 있으며, 이에 따라 전하 밸런스(charge balance)를 조절할 수 있다. 유기 전계 발광 소자가 정공 전달층을 2 층 이상 포함할 경우, 추가로 포함되는 정공 전달층은 정공 보조층 또는 전자 차단층의 용도로 사용될 수 있다. 상기 발광 보조층, 상기 정공 보조층, 또는 상기 전자 차단층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및/또는 수명의 개선 효과를 가질 수 있다.

[0213] 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측 표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 하나 이상의 층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 음극 표면에 할로겐화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 유기 전계 발광 소자의 구동 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 $SiO_x(1 \leq x \leq 2)$, $AlO_x(1 \leq x \leq 1.5)$, SiON, SiAlON 등이 있고, 할로겐화 금속의 바람직한 예로는 LiF, MgF_2 , CaF_2 , 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O , Li_2O , MgO, SrO, BaO, CaO 등이 있다.

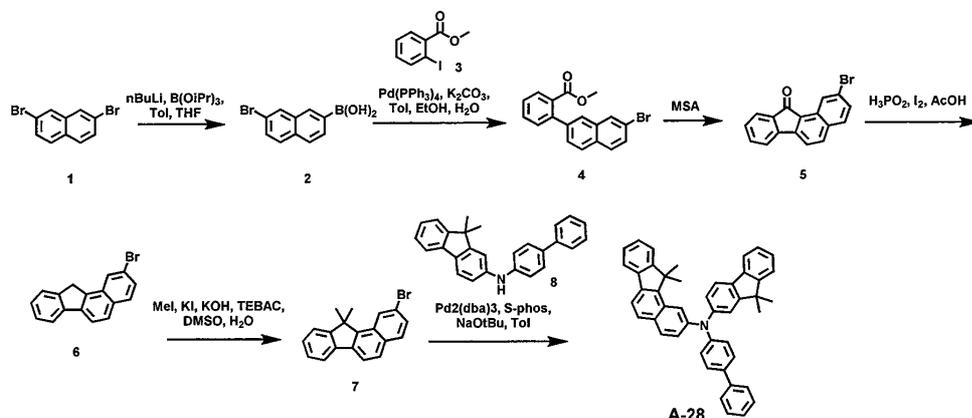
[0214] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도판트로서는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하 생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진, 백색 발광을 하는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

[0215] 본원의 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.

[0216] 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.

[0217] 이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 대표 화합물 또는 중간체 화합물의 합성 방법을 예로 들어 본원에 따른 화합물의 제조방법을 설명한다.

[0218] [실시예 1] 화합물 A-28의 합성



[0219]

[0220] 화합물 2의 합성

[0221] 플라스크에 화합물 1 (48.8 g, 170.7 mmol)을 톨루엔 (Toluene) 640 mL, 및 테트라히드로푸란 (THF) 210 mL에 용해한 후 트리이소프로필 보레이트 (B(OiPr)₃) (99 mL, 426.8 mmol)을 적가하고, 질소 분위기 하 -78℃에서 n-부틸리튬 (nBuLi) (102.0 mL, 256.0 mmol)을 천천히 적가하였다. 12시간 후 증류수를 넣어 반응을 종결한 후 EA/H₂O로 추출하여 화합물 2 (21.6 g, 수율: 50%)을 얻었다.

[0222] 화합물 4의 합성

[0223] 플라스크에 화합물 2 (21.6 g, 84.1 mmol), 화합물 3 (12.9 mL, 84.1 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (Pd(PPh₃)₄) (4.9 g, 4.3 mmol), 탄산칼륨 (K₂CO₃) (29.8 g, 215.3 mmol), THF 315 mL, 및 H₂O 105 mL를 넣어 녹인 후 3시간 동안 환류하여 교반시켰다. 반응이 끝나면 EA/H₂O로 추출한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 4 (29.4 g, 수율: 100%)을 얻었다.

[0224] 화합물 5의 합성

[0225] 플라스크에 화합물 4 (16.6 g, 48.7 mmol), 및 메탄 술폰산(Methane Sulfonic Acid; MSA) 150 mL를 넣은 후 70℃로 18시간 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 H₂O에 적가한 후 여과하여 화합물 5 (12.8 g, 수율: 85%)을 얻었다.

[0226] 화합물 6의 합성

[0227] 플라스크에 인산 (H₃PO₂) (7.2 mL, 66.2 mmol), 요오드 (I₂) (5.3 g, 20.7 mmol), 및 아세트산 (AcOH) 207 mL를 넣고 1시간 동안 환류교반한 후 화합물 5 (12.8 g, 41.4 mmol)를 넣어준 뒤 4시간 동안 환류하고 교반시켰다. 반응이 끝나면 EA/H₂O로 추출하여 화합물 6 (11.9 g, 수율: 97%)을 얻었다.

[0228] 화합물 7의 합성

[0229] 플라스크에 화합물 6 (9.9 g, 33.5 mmol), 요오드화 칼륨 (KI) (556 mg, 3.4 mmol), 수산화 칼륨 (KOH) (9.4 g, 167.5 mmol), 벤질트리에틸 암모늄클로라이드 (TEBAC) (382 mg, 1.7 mmol), 디메틸 술폰산 (DMSO) 168 mL, 및 H₂O 17 mL를 넣어준 후 30분 동안 상온에서 교반한 뒤, 요오드화 메틸 (MeI) (5.2 mL, 83.8 mmol)을 넣어준 후 22시간 동안 상온교반하였다. 반응이 끝나면 EA/H₂O로 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 7 (5.6 g, 수율: 52%)을 얻었다.

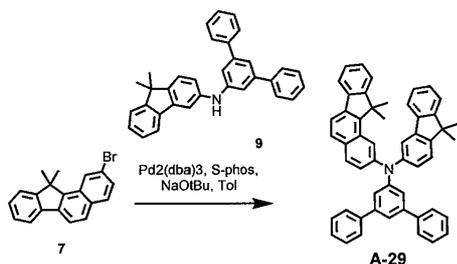
[0230] 화합물 A-28의 합성

[0231] 플라스크에 화합물 7 (5.6 g, 17.3 mmol), 화합물 8 (6.9 g, 19.1 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (Pd₂(dba)₃) (792 mg, 0.87 mmol), 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐 (S-phos) (710 mg, 1.7 mmol), 소듐-tert-부톡사이드 (NaOtBu) (4.2 g, 43.3 mmol), 및 Toluene 87 mL를 넣어준 후 30분 동안 환류하고 교반시켰다. 반응이 끝나면 EA/H₂O로 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 A-28 (4.5 g, 수율: 43%)을 얻었다.

	MW	M.P.
A-28	603.81	147 °C

[0232]

[0233] [실시예 2] 화합물 A-29의 합성



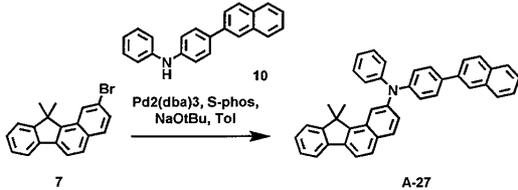
[0234]

[0235] 플라스크에 화합물 **7** (4.0 g, 12.4 mmol), 화합물 **9** (6.0 g, 13.6 mmol), Pd₂(dba)₃ (568 mg, 0.62 mmol), S-phos (509 mg, 1.24 mmol), NaOtBu (3.0 g, 31.0 mmol), 및 Toluene 62 mL을 넣어준 후 30분 동안 상온에서 교반시켰다. 반응이 끝나면 EA/H₂O로 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **A-29** (5.9 g, 수율: 70%)을 얻었다.

	MW	M.P.
A-29	679.89	175 °C

[0236]

[0237] [실시예 3] 화합물 A-27의 합성



[0238]

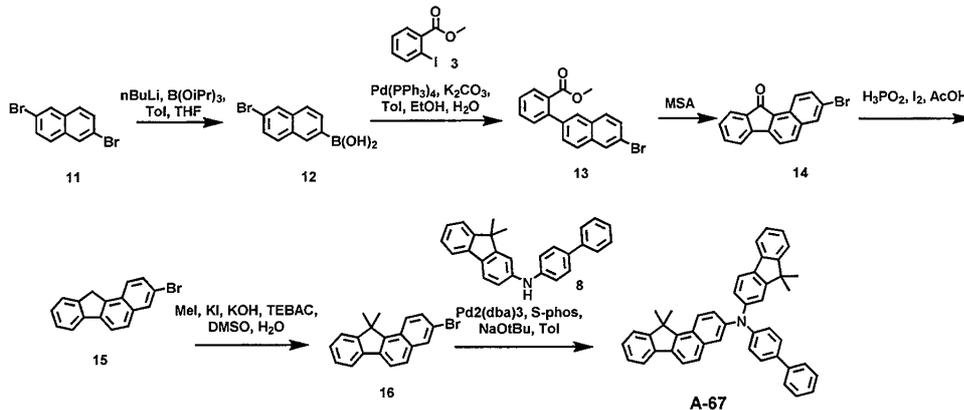
[0239] 화합물 A-27의 합성

[0240] 플라스크에 화합물 **7** (4.0 g, 12.4 mmol), 화합물 **10** (4.0 g, 13.6 mmol), Pd₂(dba)₃ (568 mg, 0.62 mmol), S-phos (509 mg, 1.24 mmol), NaOtBu (2.4 g, 24.8 mmol), Toluene 62 mL을 넣어준 후 30분 동안 상온에서 교반시켰다. 반응이 끝나면 EA/H₂O로 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **A-27** (5.0 g, 수율: 75%)을 얻었다.

	MW	M.P.
A-27	537.69	205 °C

[0241]

[0242] [실시예 4] 화합물 A-67의 합성



[0243]

[0244] 화합물 12의 합성

[0245] 플라스크에 화합물 **11** (50.0 g, 174.8 mmol)을 Toluene 650 mL, 및 THF 220 mL에 용해한 후, B(OiPr)₃ (100 mL, 437.0 mmol)을 적가한 후 질소 분위기하, -78°C에서 n-BuLi (100.0 mL, 262.3 mmol)을 천천히 적가하였다. 12시간 후 증류수를 넣어 반응을 종결한 후 EA/H₂O로 추출하여 화합물 **12** (28.5 g, 수율: 65%)을 얻었다.

[0246] 화합물 13의 합성

[0247] 플라스크에 화합물 **12** (28.5 g, 84.1 mmol), 화합물 **3** (16.6 mL, 113.6 mmol), Pd(PPh₃)₄ (6.6 g, 5.7 mmol), K₂CO₃ (39.3 g, 284.0 mmol), THF 570 mL, 및 H₂O 140 mL 를 넣어 녹인 후 6시간 동안 환류하여 교반시켰다.

반응이 끝나면 EA/H₂O로 추출한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **13** (14.5 g, 수율: 37%)을 얻었다.

[0248] 화합물 14의 합성

[0249] 플라스크에 화합물 **13** (14.5 g, 42.5 mmol), MSA 170 mL 를 넣은 후 70°C 로 18시간 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 H₂O에 적가한 후 여과하여 화합물 **14** (12.4 g, 수율: 92%)을 얻었다.

[0250] 화합물 15의 합성

[0251] 플라스크에 H₃PO₂ (7.0 mL, 64.2 mmol), I₂ (5.3 g, 20.7 mmol), 및 AcOH 200 mL를 1시간 동안 환류교반한 후 화합물 **14** (12.4 g, 40.1 mmol)를 넣어준 뒤 18시간 동안 환류하고 교반시켰다. 반응이 끝나면 EA/H₂O로 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **15** (10.3 g, 수율: 87%)을 얻었다.

[0252] 화합물 16의 합성

[0253] 플라스크에 화합물 **15** (10.3 g, 14.9 mmol), KI (579 mg, 3.5 mmol), KOH (9.8 g, 174.5 mmol), TEBAC (397 mg, 1.8 mmol), DMSO 175 mL, H₂O 17 mL를 넣어준 후 30분 동안 상온교반한 뒤, MeI (5.4 mL, 87.2 mmol)을 넣어준 후 19시간 동안 상온교반시켰다. 반응이 끝나면 EA/H₂O로 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **16** (8.8 g, 수율: 78%)을 얻었다.

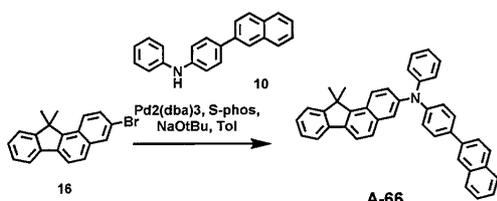
[0254] 화합물 A-67의 합성

[0255] 플라스크에 화합물 **16** (3.5 g, 10.8 mmol), 화합물 **8** (4.3 g, 11.9 mmol), Pd₂(dba)₃ (494 mg, 0.54 mmol), S-phos (443 mg, 1.08 mmol), NaOtBu (2.6 g, 27.0 mmol), 및 Toluene 54 mL을 넣어준 후 35분 동안 환류하고 교반시켰다. 반응이 끝나면 EA/H₂O로 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **A-67** (6.0 g, 수율: 92%)을 얻었다.

	MW	M.P
A-67	603.81	159 °C

[0256]

[0257] [실시예 5] 화합물 A-66의 합성



[0258]

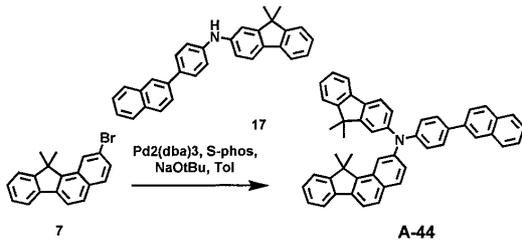
[0259] 화합물 A-66의 합성

[0260] 플라스크에 화합물 **16** (3.7 g, 11.4 mmol), 화합물 **10** (3.7 g, 12.6 mmol), Pd₂(dba)₃ (522 mg, 0.57 mmol), S-phos (468 mg, 1.14 mmol), NaOtBu (2.7 g, 28.5 mmol), 및 Toluene 57 mL을 넣어준 후 1시간 동안 환류하고 교반시켰다. 반응이 끝나면 EA/H₂O로 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **A-66** (3.5 g, 수율: 57%)을 얻었다.

	MW	M.P
A-66	537.69	119 °C

[0261]

[0262] [실시예 6] 화합물 A-44의 합성



[0263]

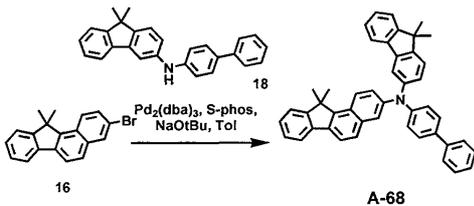
[0264] 화합물 A-44의 합성

[0265] 플라스크에 화합물 7 (4.3 g, 13.3 mmol), 화합물 17 (5.5 g, 13.3 mmol), Pd₂(dba)₃ (609 mg, 0.67 mmol), S-phos (546 mg, 1.33 mmol), NaOtBu (3.2 g, 33.3 mmol), 및 Toluene 100 mL을 넣어준 후 30분 동안 상온교반한다. 반응이 끝나면 EA/H₂O로 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분류하여 화합물 A-44 (6.7 g, 수율: 77%)을 얻었다.

	MW	M.P
A-44	653.87	234 °C

[0266]

[0267] [실시예 7] 화합물 A-68의 합성



[0268]

[0269] 화합물 A-68의 합성

[0270] 플라스크에 화합물 16 (3.0 g, 9.28 mmol), 화합물 18 (3.5 g, 9.75 mmol), Pd₂(dba)₃ (425 mg, 0.46 mmol), S-phos (381 mg, 0.93 mmol), NaOtBu (2.2 g, 23.2 mmol), Toluene 50 mL을 넣어준 후 30분 동안 환류교반한다. 반응이 끝나면 EA/H₂O로 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분류하여 화합물 A-68 (4.2 g, 수율: 75%)을 얻었다.

	MW	M.P
A-68	603.81	230 °C

[0271]

[0272] 이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 발광 특성을 설명한다.

[0273] [소자 실시예 1] 본원에 따른 적색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조

[0274] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막(10Ω/□)을 아세톤, 이소프로판알콜을 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판알콜에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기관 홀더에 ITO기관을 장착한 후, 진공 증착장비 내의 셀에 HI-1을 넣고 챔버 내의 진공도가 10⁻⁶ torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기관 위에 90nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 HI-2을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 셀에 HT-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10nm두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 A-28을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 60nm 두께의 제2 정공 전달층(정공 보조층)을 증착하

였다. 정공 주입층, 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀에 발광층 호스트로서 화합물 화합물 H-211을 넣고, 또 다른 셀에는 D-39를 넣은 후, 두 물질을 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 2 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 ET-1 과 EI-1 을 1:1의 속도로 증발시켜 발광층 위에 35nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서, 전자 주입층으로 EI-1 를 2nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착장비를 이용하여 Al 음극을 1,500nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제작 하였다.

[0275] [소자 실시예 2 및 3] 본 발명에 따르는 적색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조

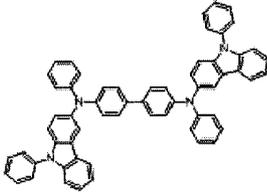
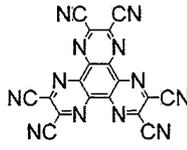
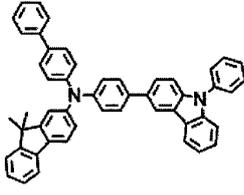
[0276] 소자 실시예 2 및 3은 제2정공 전달 재료로 각각 화합물 A-44 및 A-68을 사용한 것 외에는 상기 소자 실시예 1 과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0277] [비교예 1] 본 발명에 따르지 않는 적색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조

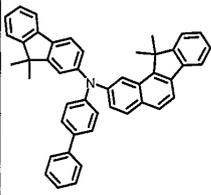
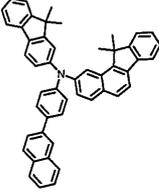
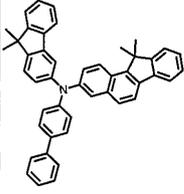
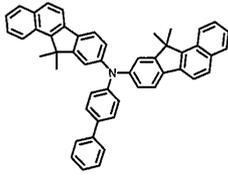
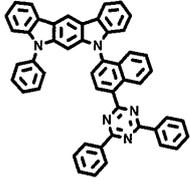
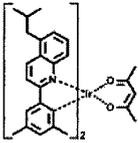
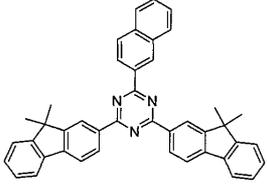
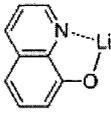
[0278] 제2 정공 전달 재료로, 화합물 Ref-1을 사용한 것 외에는, 상기 소자 실시예 1과 동일한 방식으로 OLED 소자를 제조하였다.

[0279] 상기 소자 실시예 1 내지 3 및 비교예 1에 사용된 화합물을 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

정공 주입층/ 정공 전달층	<div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="text-align: center;">  <p>HI-1</p> </div> <div style="text-align: center;">  <p>HI-2</p> </div> </div> <div style="text-align: center; margin-top: 20px;">  <p>HT-1</p> </div>
-------------------	---

[0280]

	 <p>A-28</p>	 <p>A-44</p>
	 <p>A-68</p>	 <p>Ref-1</p>
발광층	 <p>H-211</p>	 <p>D-39</p>
전자전달층/ 전자 주입층	 <p>ET-1</p>	 <p>EI-1</p>

[0281]

[0282]

이상과 같이 제조된 소자 실시예 1 내지 3 및 비교예 1의 유기 전계 발광 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 구동 전압, 발광효율, 및 CIE 색좌표와 5,000 nits 휘도 기준 정전류에서, 처음 휘도 기준 98%의 휘도로 감소하는데 걸린 시간을 하기 표 2에 나타내었다.

표 2

	제2 정공 전달 재료	호스트 재료	구동 전압 (V)	발광 효율 (cd/A)	색좌표 CIE (x,y)		수명 T98 (HR)
					x	y	
소자 실시예 1	A-28	H-211	2.8	22.3	0.669	0.330	70
소자 실시예 2	A-44		2.8	21.4	0.669	0.330	75
소자 실시예 3	A-68		2.8	21.8	0.668	0.332	44
비교예 1	Ref-1		3.2	11.2	0.663	0.335	37

[0283]

[0284]

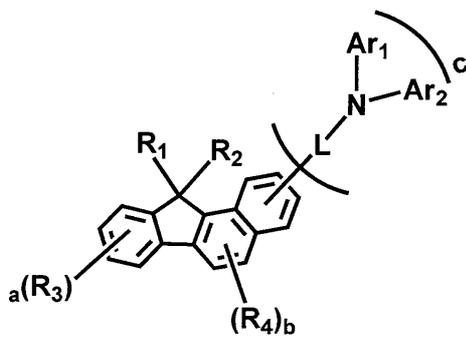
상기 표 2를 참조하면, 본원의 유기 전계 발광 화합물을 사용한 소자 실시예 1 내지 3의 OLED 소자는 비교예 1의 OLED 소자에 비해 구동 전압, 발광 효율, 및 수명 면에서 훨씬 우수한 효과를 발휘하는 바, 효율이 상승하면서 수명이 저하되는 종래의 문제점을 극복할 수 있는 특성을 확인할 수 있다.

[0285]

즉, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 정공 전달층 및/또는 정공 보조층 재료로 사용하면, 같은 휘도의 빛을 내기 위해 사용되는 전압을 낮추면서도 발광 효율 및 수명을 증가시킬 수 있는 장점을 가질 수 있다.

도면

도면1



专利名称(译)	有机电致发光化合物和包含其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020190090695A	公开(公告)日	2019-08-02
申请号	KR1020190003137	申请日	2019-01-10
[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	홍진리 임영목		
发明人	홍진리 임영목		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/006 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/50 C09K2211/1029 C09K2211/1088 C09K2211/1092		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020180009157 2018-01-25 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及由化学式1表示的有机电致发光化合物和包括该化合物的有机电致发光器件。通过在空穴传输层和/或空穴辅助层中包含根据本发明的有机电致发光化合物，可以生产具有提高的发光效率和驱动寿命的有机电致发光器件。在化学式1中，每个取代基与说明书中定义的相同。

