(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2024년07월12일
(11) 등록번호 10-2683908
(24) 등록일자 2024년07월08일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *C07D 471/04* (2006.01)
H10K 59/00 (2023.01) *H10K 99/00* (2023.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2022.01)
C07D 471/04 (2022.08)
(21) 출원번호 10-2017-0014450
(22) 출원일자 2017년02월01일
심사청구일자 2022년01월18일
(65) 공개번호 10-2018-0089737
(43) 공개일자 2018년08월09일
(56) 선행기술조사문헌
KR1020180050217 A

(73) 특허권자
듀폰스페셜티머터리얼스코리아 유한회사
충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)
(72) 발명자
양정은
경기도 화성시 삼성1로5길 20
(74) 대리인
장훈

전체 청구항 수 : 총 9 항 심사관 : 송이화

(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 것이다. 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써 낮은 구동전압 및/또는 높은 발광효율을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다. 이와 동시에 또는 선택적으로, 수명 특성이 양호하고/하거나 양호한 품질의 박막 형성이 가능한 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

(52) CPC특허분류
H10K 59/00 (2023.02)
H10K 85/6572 (2023.02)
C09K 2211/1029 (2013.01)

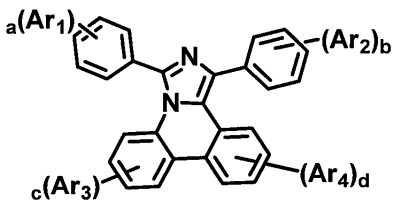
명 세 서

청구범위

청구항 1

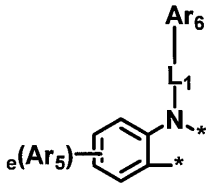
하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고;

Ar_3 및 Ar_4는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, $-NR_{11}R_{12}$, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고; 두 개의 Ar_3 및 두 개의 Ar_4 중 한쪽 이상은 반드시 서로 연결되어  의 융합고리를 형성하며(여기서, *은 Ar_3 또는 Ar_4의 결합위치를 나타냄);

R_{11} 및 R_{12}는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고;

L_1은 단일결합 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이고;

Ar_5는 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며;

Ar_6은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

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

a 및 b는 각각 독립적으로 1 내지 5의 정수이고, c 내지 e는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고;

a 내지 e가 각각 2 이상의 정수인 경우, 각각의 Ar_1, 각각의 Ar_2, 각각의 Ar_3, 각각의 Ar_4, 및 각각의 Ar_5는 서로 같거나 다를 수 있다.

청구항 2

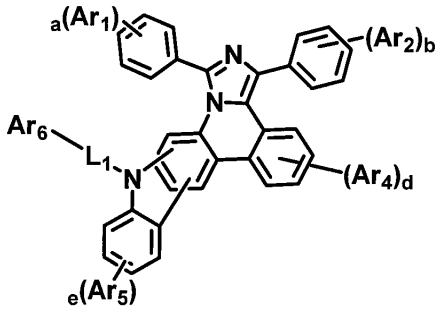
제1항에 있어서, 상기 Ar_1 내지 Ar_6 및 L_1에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬 및 치환된 (C3-C30)시클로알킬의 치환체는 각각 독립적으로 중수소; 할로겐; 시아노; 카르복실; 니트로; 히드록시; (C1-C30)알킬; 할로(C1-C30)알킬; (C2-C30)알케닐; (C2-C30)알키닐; (C1-C30)알콕시; (C1-C30)알킬티오; (C3-C30)시클로알킬; (C3-C30)시클로알케닐; (3-7원)헤테로시

클로알킬; (C6-C30)아릴옥시; (C6-C30)아릴티오; (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30 원)헤테로아릴; (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴; 트리(C1-C30)알킬실릴; 트리(C6-C30)아릴실릴; 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴; (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴; 아미노; 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노; (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬카보닐; (C1-C30)알콕시카보닐; (C6-C30)아릴카보닐; 디(C6-C30)아릴보로닐; 디(C1-C30)알킬보로닐; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐; (C6-C30)아르(C1-C30)알킬; 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인, 유기 전계 발광 화합물.

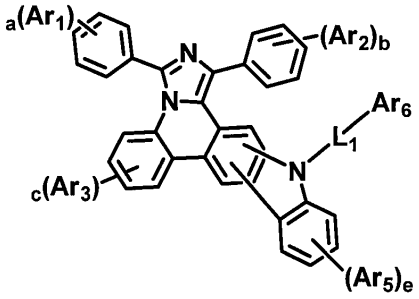
청구항 3

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 및 3 중 어느 하나로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 2]



[화학식 3]



상기 화학식 2 및 3에서,

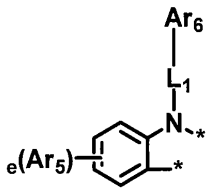
Ar_1 내지 Ar_6, L_1, 및 a 내지 e는 청구항 1에서의 정의와 같다.

청구항 4

제1항에 있어서,

Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고;

Ar_3 및 Ar_4는 각각 독립적으로 수소, 할로겐, $-NR_{11}R_{12}$, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고; 두 개의 Ar_3 및 두 개의 Ar_4 중 한쪽 이상은 반드시 서로 연결되어



의 융합고리를 형성하며;

L_1은 단일결합이고;

R_{11} 및 R_{12}는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고;

Ar_5는 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이며;

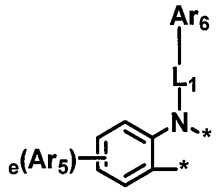
Ar_6은 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 수소, 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환된 (5-20원)헤테로아릴이고;

Ar_3 및 Ar_4는 각각 독립적으로 수소, 니트로로 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고; 두 개의 Ar_3 및 두 개의 Ar_4 중 한쪽 이상은 반드시 서로 연결되어



의 융합고리를 형성하며;

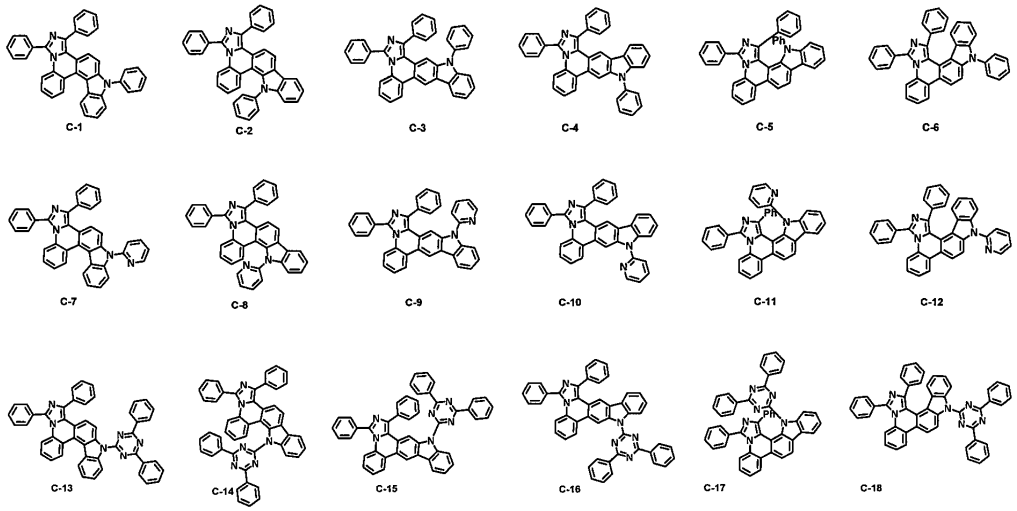
L_1은 단일결합이고;

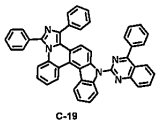
Ar_5는 수소 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이며;

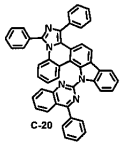
Ar_6은 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴인, 유기 전계 발광 화합물.

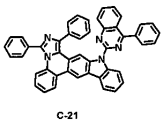
청구항 6

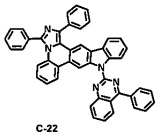
제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화합물들로부터 선택되는 하나 이상인, 유기 전계 발광 화합물.

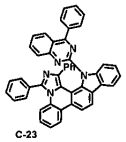


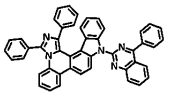

C-19

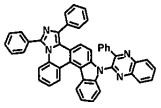

C-20

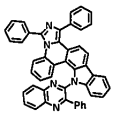

C-21

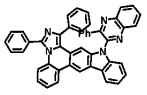

C-22

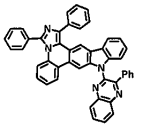

C-23

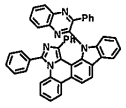

C-24

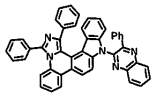

C-25

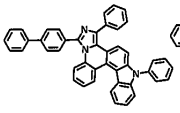

C-26

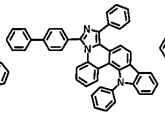

C-27

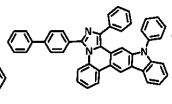

C-28

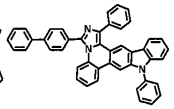

C-29

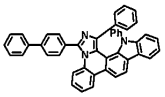

C-30

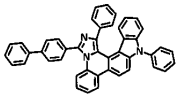

C-31

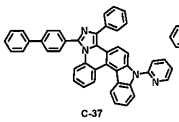

C-32

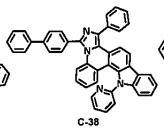

C-33

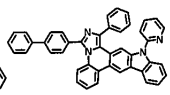

C-34

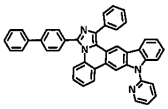

C-35

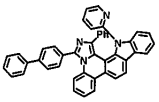

C-36

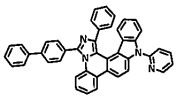

C-37

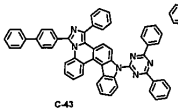

C-38

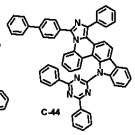

C-39

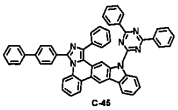

C-40

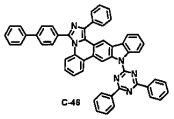

C-41

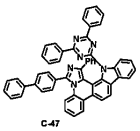

C-42

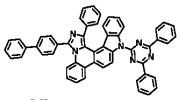

C-43

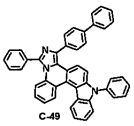

C-44

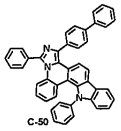

C-45

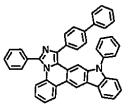

C-46

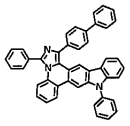

C-47

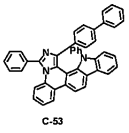

C-48

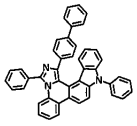

C-49

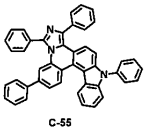

C-50

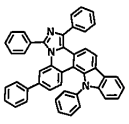

C-51

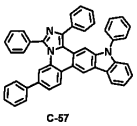

C-52

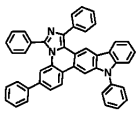

C-53


C-54


C-55


C-56


C-57


C-58

C-59

C-60

C-61

C-62

C-63

C-64

C-65

C-66

C-67

C-68

C-69

C-70

C-71

C-72

C-73

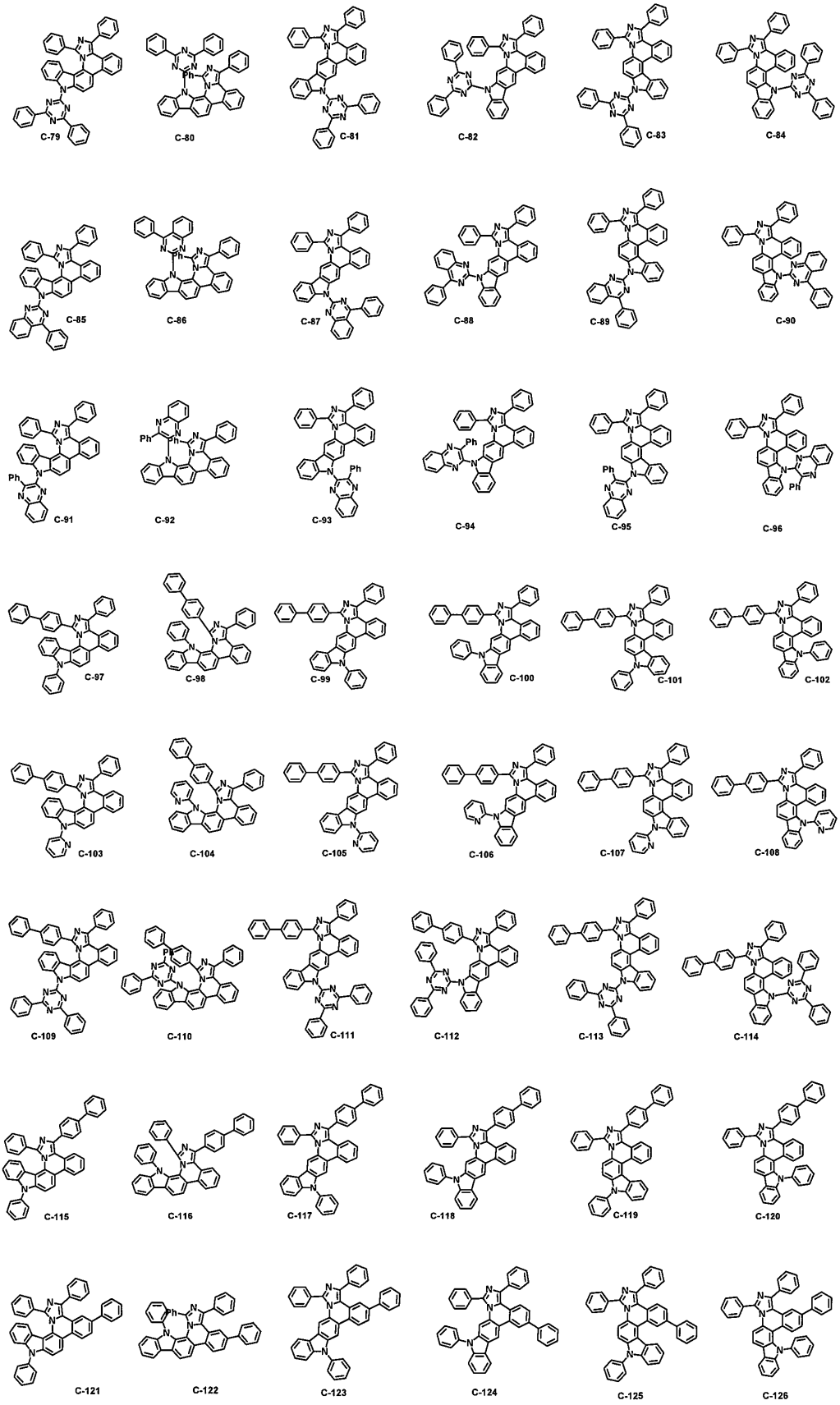
C-74

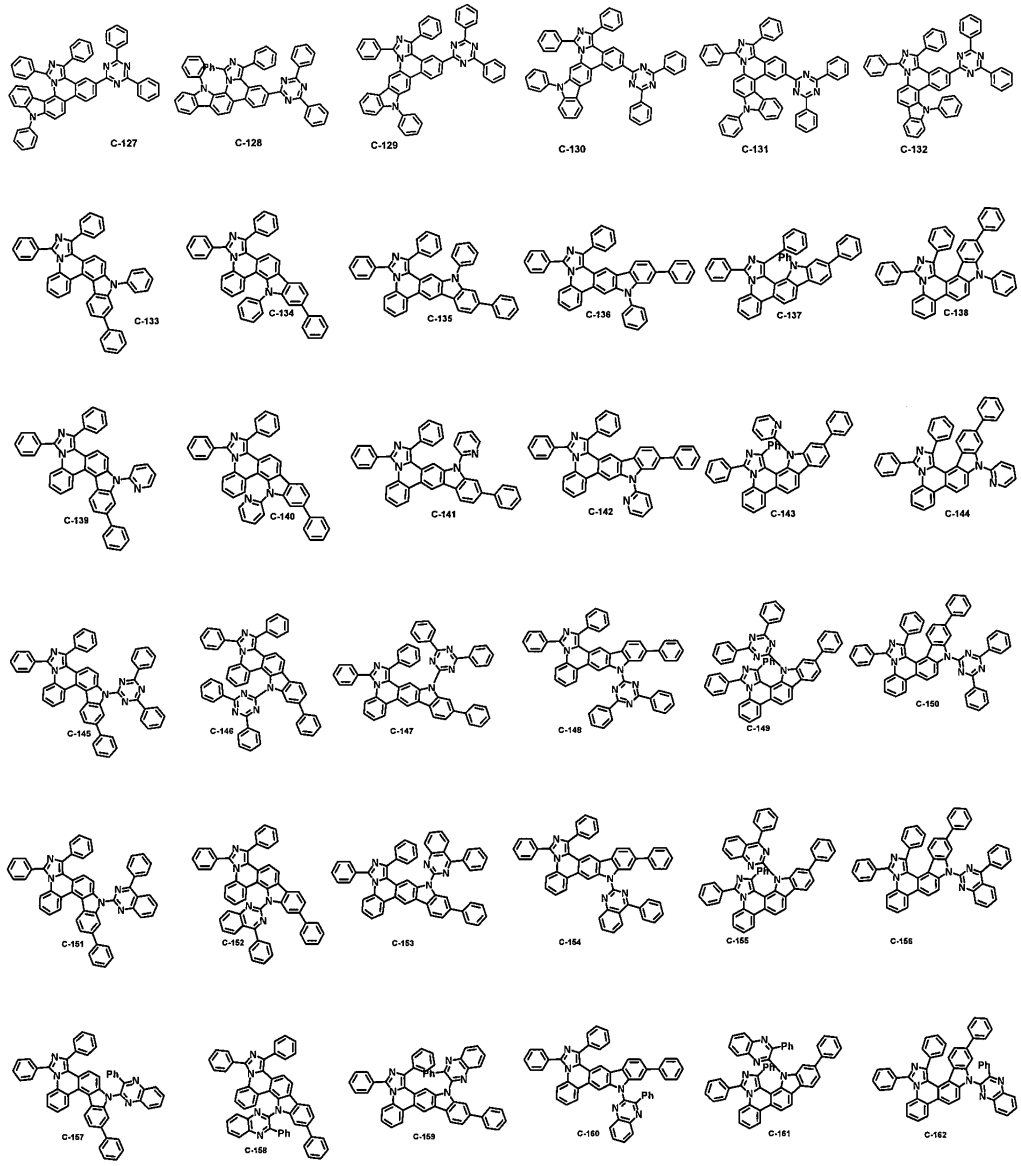
C-75

C-76

C-77

C-78


C-79
C-80
C-81
C-82
C-83
C-84
C-85
C-86
C-87
C-88
C-89
C-90
C-91
C-92
C-93
C-94
C-95
C-96
C-97
C-98
C-99
C-100
C-101
C-102
C-103
C-104
C-105
C-106
C-107
C-108
C-109
C-110
C-111
C-112
C-113
C-114
C-115
C-116
C-117
C-118
C-119
C-120
C-121
C-122
C-123
C-124
C-125
C-126



청구항 7

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

청구항 8

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

청구항 9

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 디스플레이 장치.

발명의 설명

기 술 분 야

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

배 경 기 술

[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 개발

하였다[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 전계 발광 소자에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재까지 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 전계 발광의 메커니즘상 형광 발광 재료에 비해 인광 발광 재료가 이론적으로 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있다는 점에서 인광 발광 재료의 개발 연구가 널리 수행되고 있다. 현재까지 이리듐(III)착물 계열이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 각 RGB 별로는 비스(2-(2'-벤조티에닐)-피리디네이토-N,C-3')이리듐(아세틸아세토네이트) [(acac)Ir(btp)$_2$], 트리스(2-페닐피리딘)이리듐 [Ir(ppy)$_3$] 및 비스(4,6-디플루오로페닐피리디네이토-N,C2)피콜리네이토이리듐 (Firpic) 등의 재료가 알려져 있다.

[0004] 종래 기술에서, 인광용 호스트 재료로는 4,4'-N,N'-디카르바졸-비페닐(CBP)가 가장 널리 알려져 있었다. 최근에는, 일본의 파이오니어 등이 정공 차단층의 재료로 사용되던 바토큐프로인(Bathocuproine, BCP) 및 알루미늄(III)비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)(4-페닐페놀레이트)(Balq)등을 호스트 재료로 이용해 고성능의 유기 전계 발광 소자를 개발한 바 있다.

[0005] 그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 다음과 같은 단점이 있다: (1) 유리 전이 온도가 낮고 열적 안정성이 낮아서, 진공 하에서 고온 증착 공정시 열화되며, 소자의 수명이 저하된다. (2) 유기 전계 발광 소자에서 전력효율 = [(π/전압) × 전류효율]의 관계에 있으므로 전력 효율은 전압에 반비례하는데, 인광용 호스트 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자는 형광 재료를 사용한 유기 전계 발광 소자에 비해 전류 효율(cd/A)은 높으나, 구동 전압 역시 상당히 높기 때문에 전력 효율(lm/w) 면에서 큰 이점이 없다. (3) 또한, 유기 전계 발광 소자에 사용할 경우, 작동 수명 측면에서도 만족스럽지 못하며, 발광 효율도 여전히 개선이 요구된다.

[0006] 한편, 대한민국 특허공개공보 KR 2014-0065357 A는 비페닐과 6원 환이 융합된 고리에 벤즈이미다졸이 융합된 코어구조를 갖는 화합물을 유기 전계 발광 소자의 호스트로 개시하고 있다. 그러나, 비페닐과 6원 환이 융합된 고리에 두 개의 아릴로 치환된 이미다졸이 융합된 코어구조를 갖는 화합물을 구체적으로 개시하지 못한다. 나아가, 소자의 수명 특성 및 박막의 품질 면에서 충분히 만족스럽지 못하다.

선행기술문헌

특허문헌

[0007] (특허문헌 0001) 대한민국 특허공개공보 KR 2014-0065357 A (2014. 05. 29 공개)

발명의 내용

해결하려는 과제

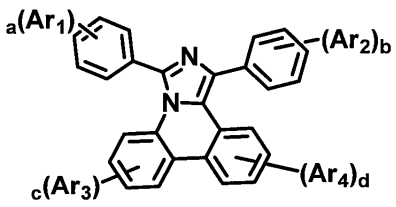
[0008] 본원의 목적은, 낮은 구동전압 및/또는 높은 발광효율을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조하는데 효과적인 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이다. 이와 동시에 또는 선택적으로, 수명 특성이 양호한 유기 전계 발광 소자를 제공하고/하거나 양호한 품질의 박막 형성이 가능한 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0009] 본 발명자들은 상기 특허문헌 1에 개시된 유기 전계 발광 화합물은 낮은 HOMO (highest occupied molecular orbital) 에너지 레벨을 가져 보조층에서 발광층으로의 효율적인 정공 전달을 제한하고, 보조층과 발광층의 HOMO 에너지 레벨 차이보다 보조층과 도판트의 HOMO 에너지 레벨 차이가 작아 소자 수명을 제한할 수 있음을 밝혀내었다. 또한, 특허문헌 1의 유기 전계 발광 화합물은 거의 완벽한 평면구조를 가져 박막 형성 시 결정성 및 집합성이 증가하여 박막의 품질이 떨어짐을 밝혀내었다.

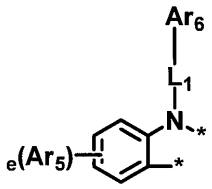
[0010] 상기의 기술적 과제를 해결하면서도 양호한 구동전압 또는 발광효율을 갖는 화합물을 개발하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본원을 완성하였다.

[0011] [화학식 1]

[0012] 

[0013] 상기 화학식 1에서,

[0014] Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고;

[0015] Ar_3 및 Ar_4는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, $-NR_{11}R_{12}$, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고; 두 개의 Ar_3 및 두 개의 Ar_4 중 한쪽 이상은 반드시 서로 연결되어  의 융합고리를 형성하며(여기서, *은 Ar_3 또는 Ar_4의 결합위치를 나타냄);

[0016] R_{11} 및 R_{12}는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고;

[0017] L_1은 단일결합 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이고;

[0018] Ar_5는 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며;

[0019] Ar_6은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

[0020] 상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며;

[0021] a 및 b는 각각 독립적으로 1 내지 5의 정수이고, c 내지 e는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고;

[0022] a 내지 e가 각각 2 이상의 정수인 경우, 각각의 Ar_1, 각각의 Ar_2, 각각의 Ar_3, 각각의 Ar_4, 및 각각의 Ar_5는 서로 같거나 다를 수 있다.

발명의 효과

[0023] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물은 낮은 구동전압, 높은 발광효율 및/또는 개선된 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다. 이와 함께 또는 선택적으로, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물은 평면 구조보다 약간 뒤틀린 분자구조를 가져 분자간 상호작용을 효과적으로 제어하여 재결정 및 집합 퀜칭을 제한할 수 있으므로, 박막의 품질을 증대시킬 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0024] 이하에서 본원을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본원의 범위를 제한하도록 해석되어서는 안 된다.

[0025] 본원에서 "유기 전계 발광 화합물"은 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 화합물을 의미하며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다.

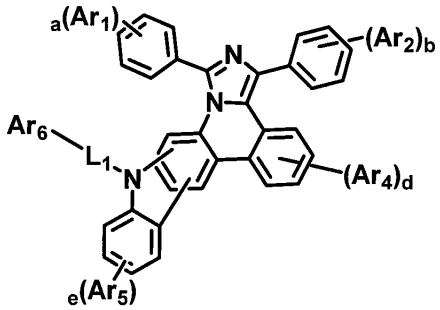
[0026] 본원에서 "유기 전계 발광 재료"는 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 재료를 의미하고, 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있으며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다. 예를 들면, 상기 유기 전계 발광 재료는 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료, 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료일 수 있다.

[0027] 본원의 유기 전계 발광 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 이에 한정되는 것은 아니지만, 상기 화학식 1의 화합물은 발광층에 포함될 수 있으며, 발광층에 포함되는 경우 화학식 1의 화합물은 호스트로 포함될 수 있다. 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 전자 버퍼층에 포함될 수 있으며, 전자 버퍼층에 포함되는 경우 화학식 1의 화합물은 전자 버퍼 재료로 포함될 수 있다.

[0028] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에 대해 보다 구체적으로 설명하면 다음과 같다.

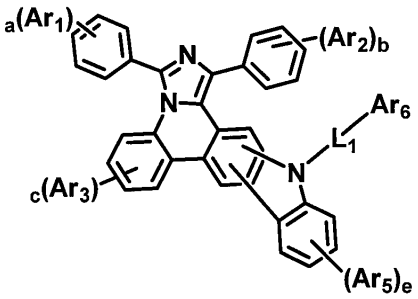
[0029] 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 2 및 3 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0030] [화학식 2]



[0031]

[0032] [화학식 3]



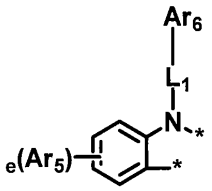
[0033]

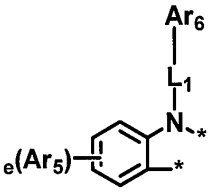
[0034] 상기 화학식 2 및 3에서,

[0035] Ar_1 내지 Ar_6, L_1, 및 a 내지 e는 화학식 1에서의 정의와 같다.

[0036] 상기 화학식 1에서, Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고, 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이며, 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환된 (5-20원)헤테로아릴이다. 구체적으로, Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 수소, 페닐, 또는 디페닐트리아진일 수 있다.

[0037] Ar_3 및 Ar_4는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, $-NR_{11}R_{12}$, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고; 두 개의 Ar_3 및 두 개의 Ar_4 중 한쪽 이상은 반드시

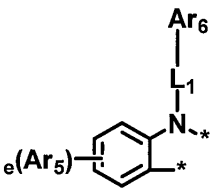
서로 연결되어  의 융합고리를 형성하고(여기서, *은 Ar_3 또는 Ar_4의 결합위치를 나타냄), 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 할로겐, $-NR_{11}R_{12}$, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고; 두 개의 Ar_3 및 두 개의 Ar_4 중 한쪽 이상은 반드시 서로 연결되어 상기 융합고리를 형성하며, 더욱 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 니트로로 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고; 두 개의 Ar_3 및 두 개의 Ar_4 중 한쪽 이상은 반드시 서로 연결되어 상기 융합고리를 형성한다. 구체적으로, Ar_3 및 Ar_4는 각각 독립적으로 수소, 페닐, 또는 디페닐트리아진일일 수 있다. 여기서, R_{11} 및 R_{12}는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고, 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이다.

[0038] 본원의 일양태에 따르면, 두 개의 Ar_3와 두 개의 Ar_4 중 한쪽이 서로 연결되어  의 융합고리를 형성한다.

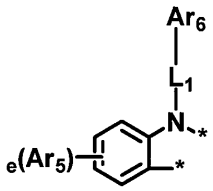
[0039] L_1은 단일결합 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이고, 바람직하게는 단일결합이다.

[0040] Ar_5는 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, 바람직하게는 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이며, 더욱 바람직하게는 수소 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이다. 구체적으로, Ar_5는 수소 또는 페닐일 수 있다.

[0041] Ar_6은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이며, 더욱 바람직하게는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이다. 구체적으로, Ar_6은 페닐, 피리딘일, 디페닐트리아진일, 페닐퀴나졸리닐, 또는 페닐퀴녹살리닐일 수 있다.

[0042] 본원의 일양태에 따르면, 상기 화학식 1에서, Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고; Ar_3 및 Ar_4는 각각 독립적으로 수소, 할로겐, $-NR_{11}R_{12}$, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고, 두 개의 Ar_3 및 두 개의 Ar_4 중 한쪽 이상은 반드시 서로 연결되어  의 융합고리를 형성하며; L_1은 단일결합이고; R_{11} 및 R_{12}는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고; Ar_5는 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이며; Ar_6은 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이다.

[0043] 본원의 다른 일양태에 따르면, 상기 화학식 1에서, Ar_1 및 Ar_2는 각각 독립적으로 수소, 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환된 (5-20원)헤테로아릴이고; Ar_3 및 Ar_4는 각각 독립적으로 수소, 니트로로 치환 또는

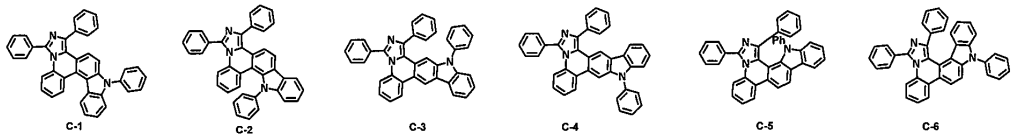
비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이고, 두 개의 Ar_3 및 두 개의 Ar_4 중 한쪽 이상은 반드시 서로 연결되어  의 융합고리를 형성하며; L_1은 단일결합이고; Ar_5는 수소 또는 비치환된 (C6-C20)아릴이며; Ar_6은 비치환된 (C6-C20)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20원)헤테로아릴이다.

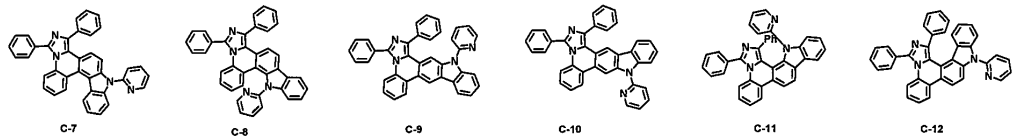
[0044] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은 쇄를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 1 내지 20개, 더 바람직하게는 1 내지 10개이다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알케닐"은 쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 2 내지 20개, 더 바람직하게는 2 내지 10개이다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알키닐"은 쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알키닐을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 2 내지 20개, 더 바람직하게는 2 내지 10개이다. 상기 알키닐의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 상기 탄소수는 바람직하게는 3 내지 20개, 더 바람직하게는 3 내지 7개이다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(3-7원)헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 3 내지 7개, 바람직하게는 5 내지 7개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군, 바람직하게는 O, S 및 N로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라하이드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라하이드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴(렌)"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 부분적으로 포화될 수도 있다. 상기 환 골격 탄소수는 바람직하게는 6 내지 25개, 더 바람직하게는 6 내지 18개이다. 상기 아릴은 스피로 구조를 가진 것을 포함한다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 페닐터페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 스피로비플루오레닐 등이 있다. 본원에서 "(3-30원)헤테로아릴"은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함하며, 스피로 구조를 가진 것도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 벤조인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 벤조퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 벤조퀴녹살리닐, 나프티리디닐, 카바졸릴, 벤조카바졸릴, 디벤조카바졸릴, 페녹사진일, 페노티아진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로겐"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

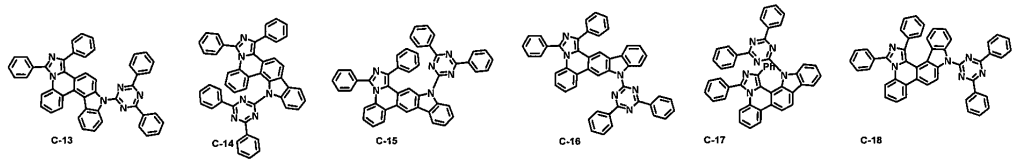
[0045] 또한, 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 상기 Ar_1 내지 Ar_6 및 L_1에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환된 (3-7원)헤테로시클로알킬 및 치환된 (C3-C30)시클로알킬의 치환체는 각각 독립적으로 중수소; 할로겐; 시아노; 카르복실; 니트로; 히드록시; (C1-C30)알킬; 할로(C1-C30)알킬; (C2-C30)알케닐; (C2-C30)알키닐; (C1-C30)알콕시; (C1-C30)알킬티오; (C3-C30)시클로알킬; (C3-C30)시클로알케닐; (3-7원)헤테로시클로알킬; (C6-C30)아릴옥시; (C6-C30)아릴티오; (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30 원)헤테로아릴; (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴; 트리(C1-

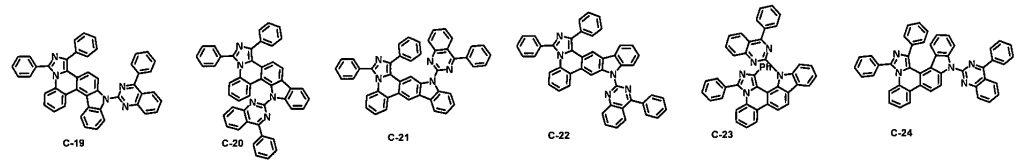
C30)알킬실릴; 트리(C6-C30)아릴실릴; 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴; (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴; 아미노; 모노- 또는 디-(C1-C30)알킬아미노; (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노; (C1-C30)알킬카보닐; (C1-C30)알콕시카보닐; (C6-C30)아릴카보닐; 디(C6-C30)아릴보로닐; 디(C1-C30)알킬보로닐; (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐; (C6-C30)아르(C1-C30)알킬; 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인 것을 의미하고, 바람직하게는 니트로, (C6-C12)아릴, 또는 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-20 원)헤테로아릴이다.

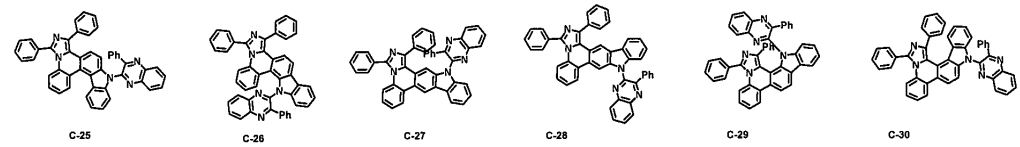
[0046] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

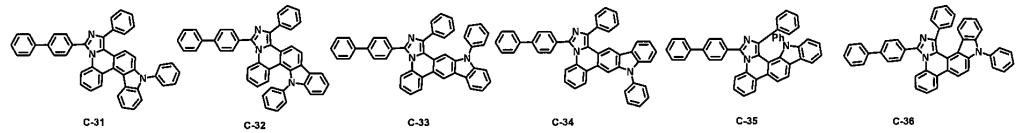
[0047] 

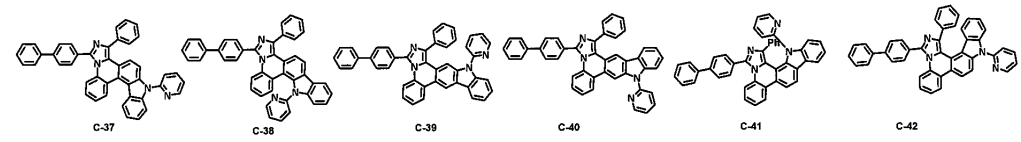
[0048] 

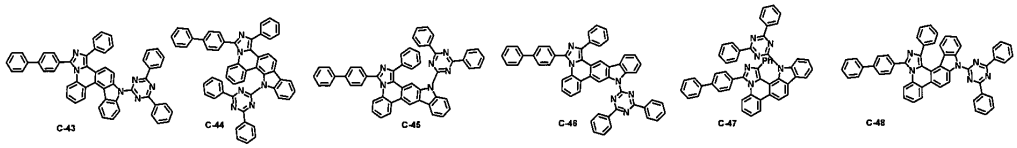
[0049] 

[0050] 

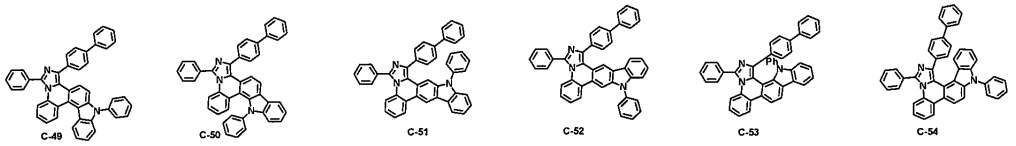
[0051] 

[0052] 

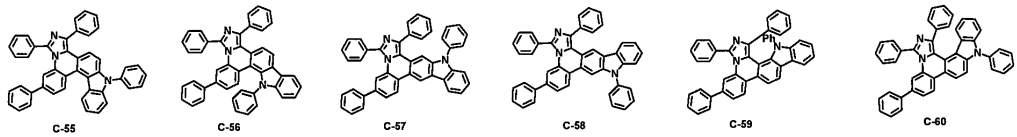
[0053] 

[0054] 

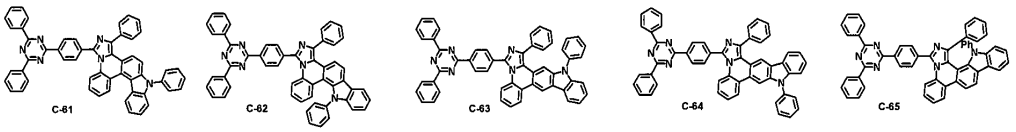
[0055]



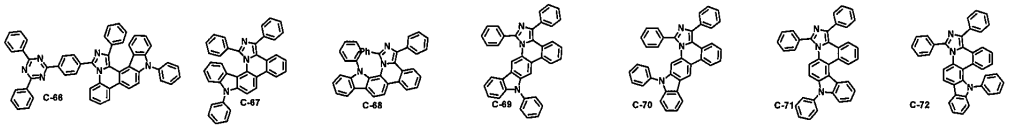
[0056]



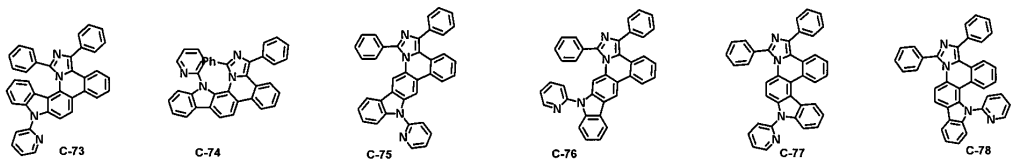
[0057]



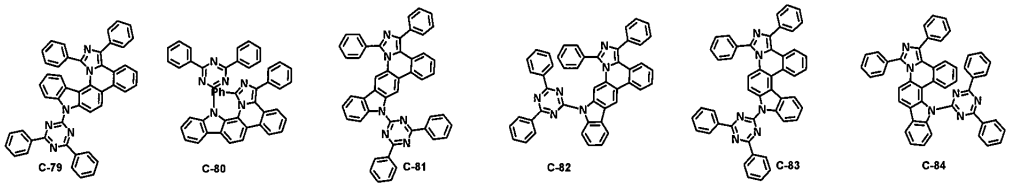
[0058]



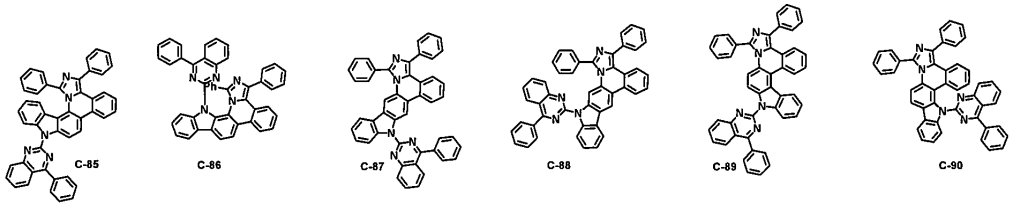
[0059]



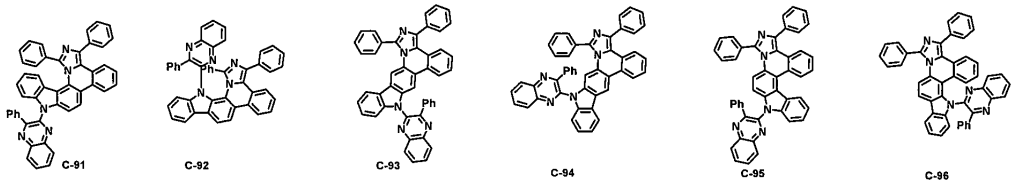
[0060]



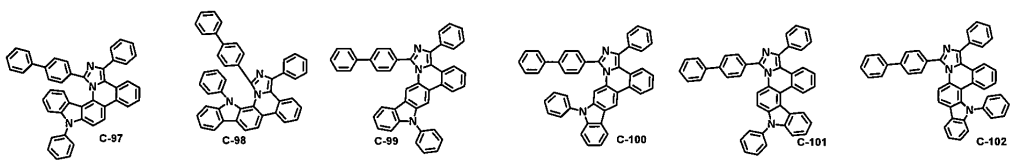
[0061]



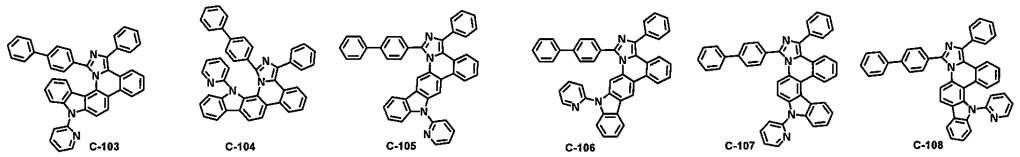
[0062]



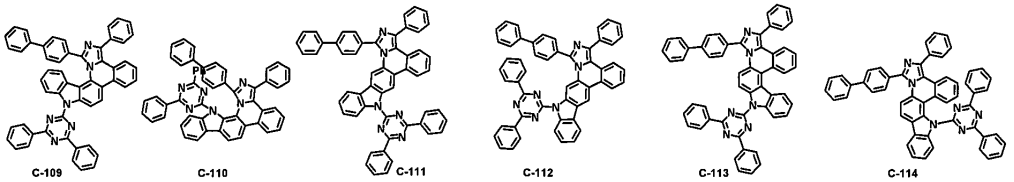
[0063]



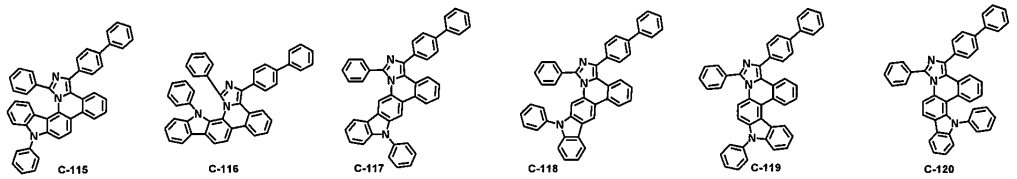
[0064]



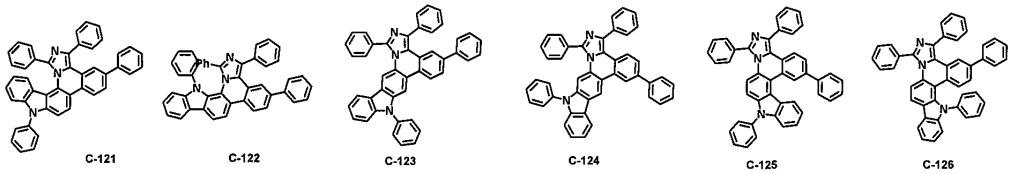
[0065]



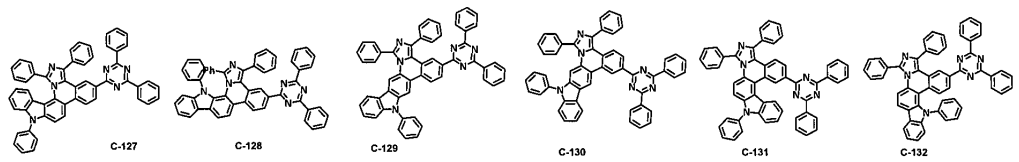
[0066]



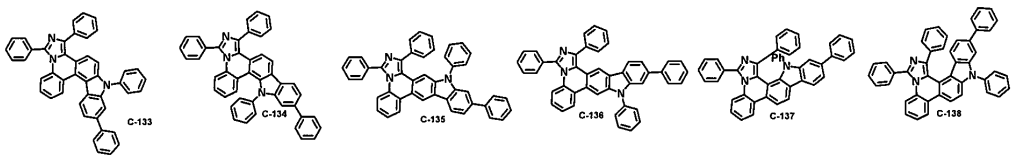
[0067]



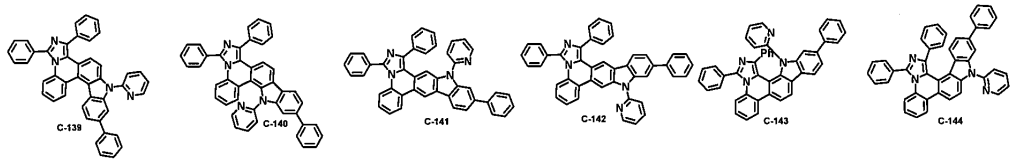
[0068]



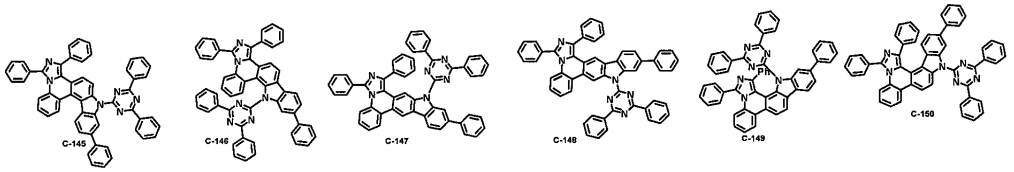
[0069]



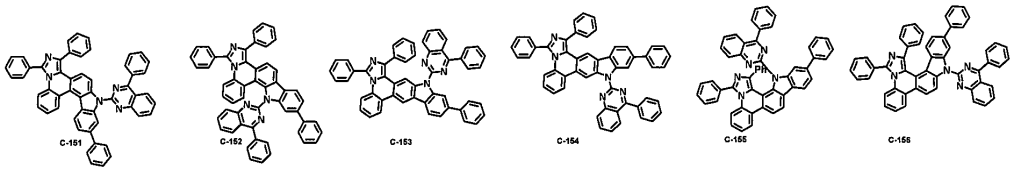
[0070]

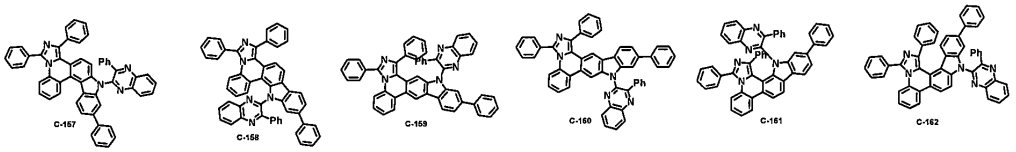


[0071]



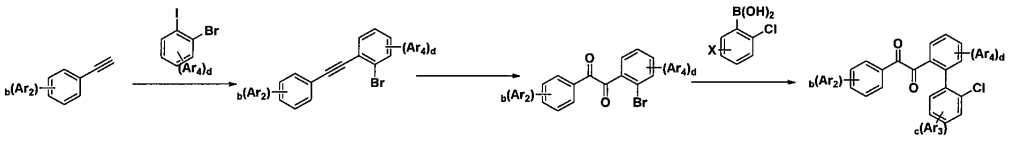
[0072]

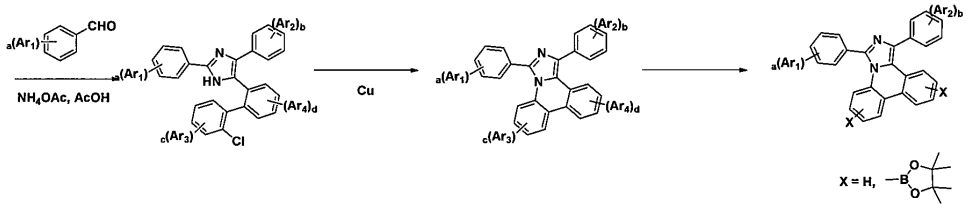


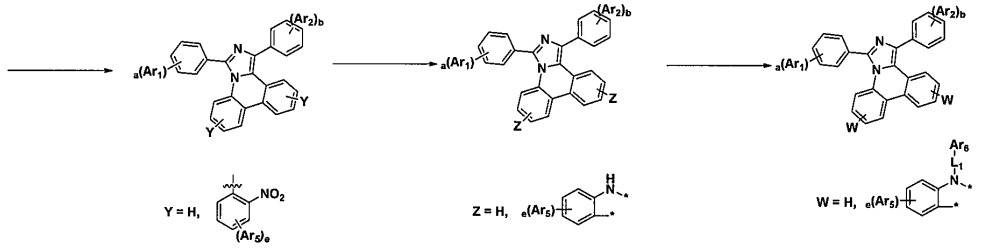
[0073] 

[0074] 본원에 따른 화학식 1의 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식에 나타난 바와 같이 제조할 수 있다.

[0075] [반응식 1]

[0076] 

[0077] 

[0078] 

[0079] 상기 반응식 1에서 Ar_1 내지 Ar_6, L_1 및 a 내지 e는 화학식 1에서의 정의와 동일하고, X는 수소 또는 보론산에스테르이다.

[0080] 본원은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0081] 상기 재료는 본원의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0082] 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 버퍼층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층 중 어느 하나의 층 이상에 포함될 수 있다. 경우에 따라 바람직하게는, 발광층 및 전자 버퍼층 중 어느 하나의 층 이상에 포함될 수 있다. 발광층에 사용될 경우, 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 또한, 전자 버퍼층에 사용될 경우, 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 전자 버퍼 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는, 상기 발광층은 하나 이상의 도판트를 추가로 더 포함할 수 있다. 필요한 경우, 본원의 유기 전계 발광 화합물은 코호스트(co-host) 재료로 사용될 수 있다. 즉, 발광층은 본원의 화학식 1 의 유기 전계 발광 화합물(제1 호스트 재료) 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다. 이 때, 제1 호스트 재료와 제 2호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

[0083] 상기 제2 호스트 재료는 공지된 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하며, 하기 화학식 11 내지 화학식 16으로 표시되는 화합물로 구성된 군으로부터 선택되는 것이 바람직할 수 있다.

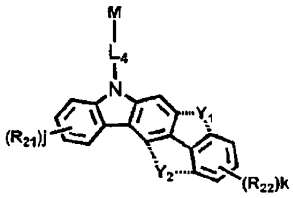
[0084] [화학식 11]

[0085] $H-(Cz-L_4)_h-M$

[0086] [화학식 12]

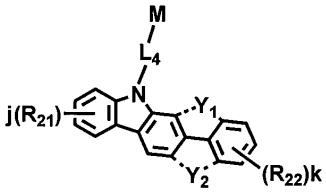
[0087] $H-(Cz)_i-L_4-M$

[0088] [화학식 13]



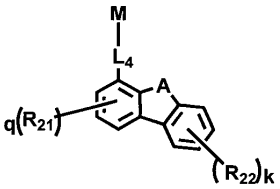
[0089]

[0090] [화학식 14]



[0091]

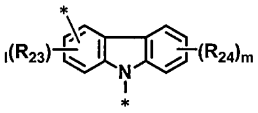
[0092] [화학식 15]



[0093]

[0094] 상기 화학식 11 내지 15에서,

[0095] Cz는 하기 구조이며,

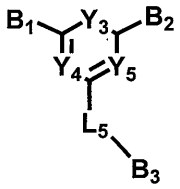


[0096]

[0097] A는 -O- 또는 -S-이고;

[0098] R_{21} 내지 R_{24}는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴 또는 $-SiR_{25}R_{26}R_{27}$이며, R_{25} 내지 R_{27}은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; L_4는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고; M은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며; Y_1 및 Y_2는 각각 독립적으로 -O-, -S-, $-N(R_{31})-$, 또는 $-C(R_{32})(R_{33})-$이고, Y_1과 Y_2가 동시에 존재하지는 않으며; R_{31} 내지 R_{33}은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, R_{32} 및 R_{33}은 동일하거나 상이할 수 있으며; h 및 i는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, j, k, l 및 m은 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이며, q는 1 내지 3의 정수이고, h, i, j, k, l, m 또는 q가 2 이상의 정수인 경우 각각의 $(Cz-L_4)$, 각각의 (Cz), 각각의 R_{21}, 각각의 R_{22}, 각각의 R_{23} 또는 각각의 R_{24}는 동일하거나 상이할 수 있다.

[0099] [화학식 16]



[0100]

[0101] 상기 화학식 16에서,

[0102] Y_3 내지 Y_5는 각각 독립적으로 CR_{34} 또는 N이고;

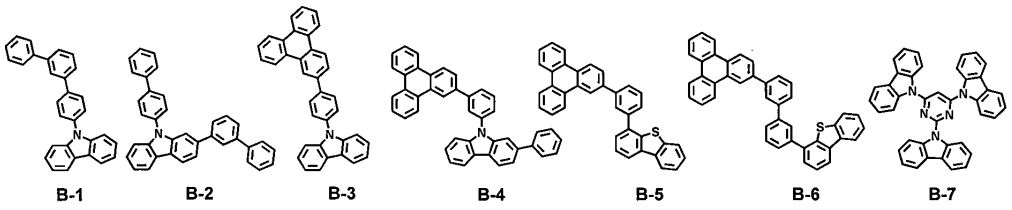
[0103] R_{34}는 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

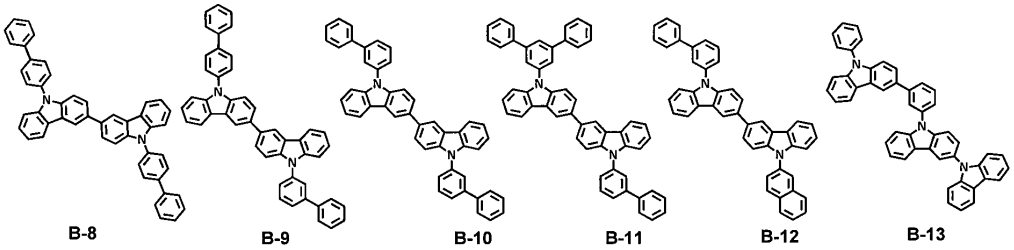
[0104] B_1 및 B_2는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

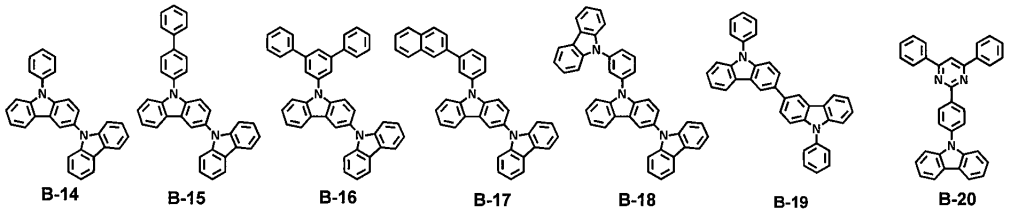
[0105] B_3은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고;

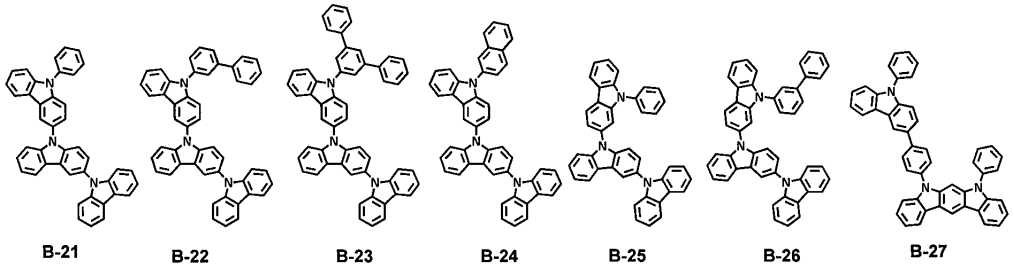
[0106] L_5는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이다.

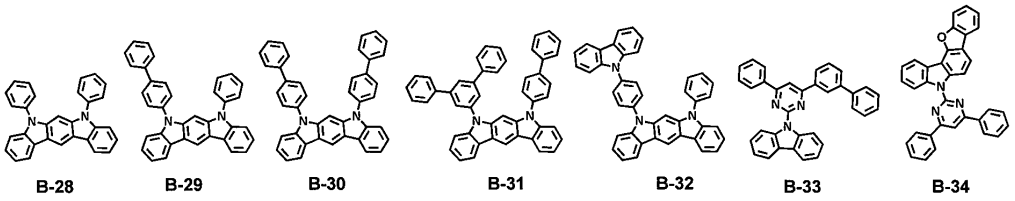
[0107] 구체적으로, 상기 제2 호스트 재료의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되지는 않는다.

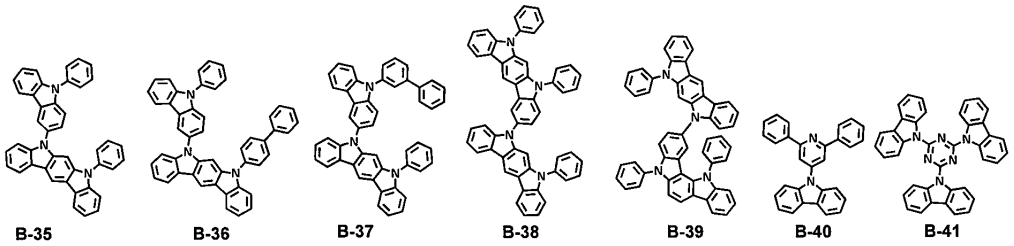
[0108] 

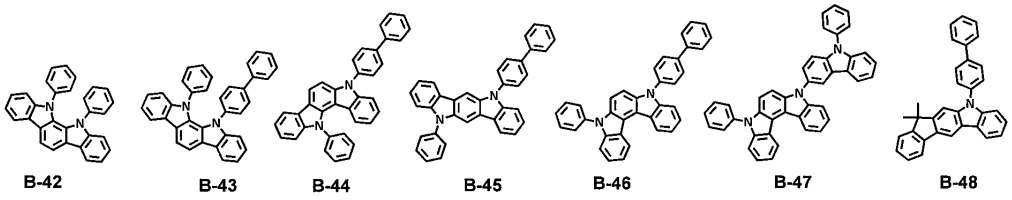
[0109] 

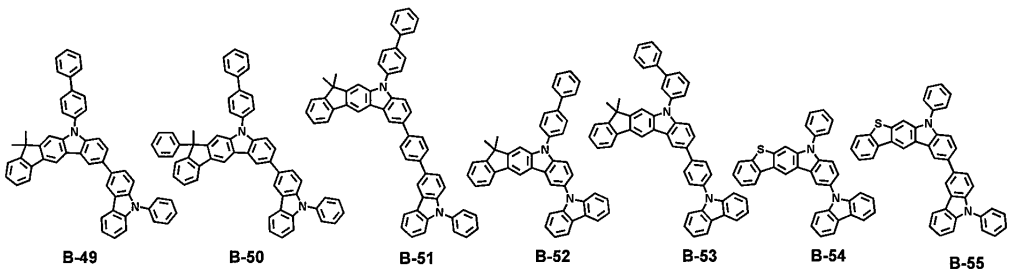
[0110] 

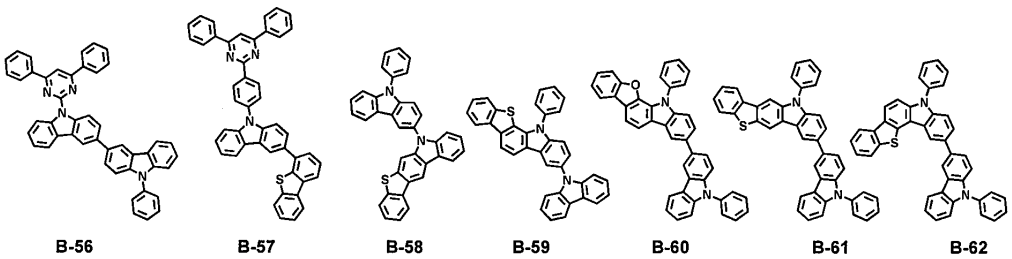
[0111] 

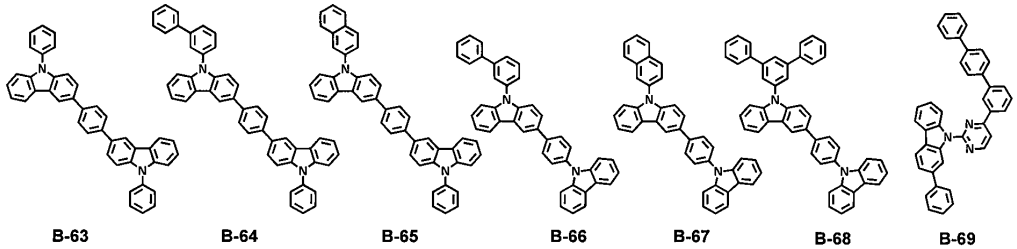
[0112] 

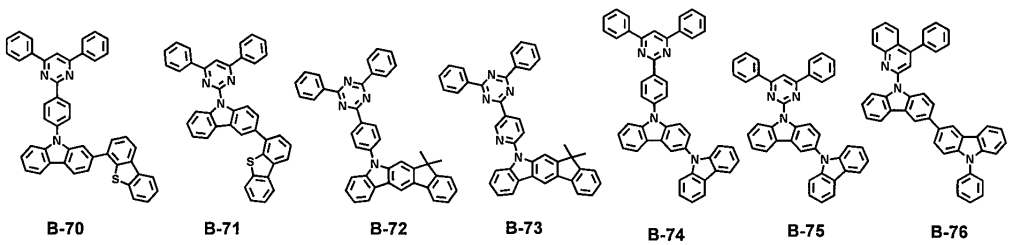
[0113] 

[0114] 

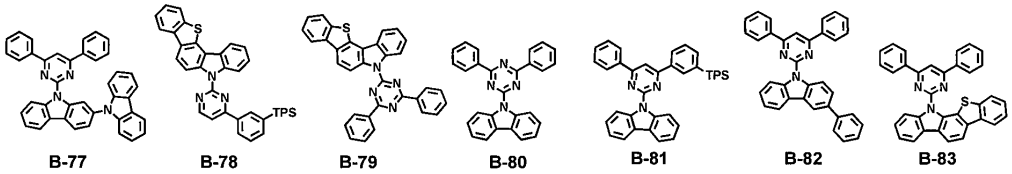
[0115] 

[0116] 

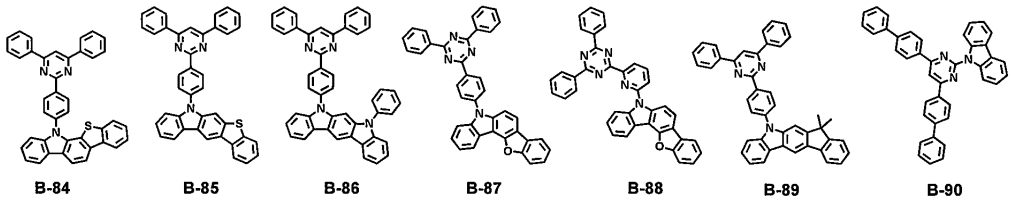
[0117] 

[0118] 

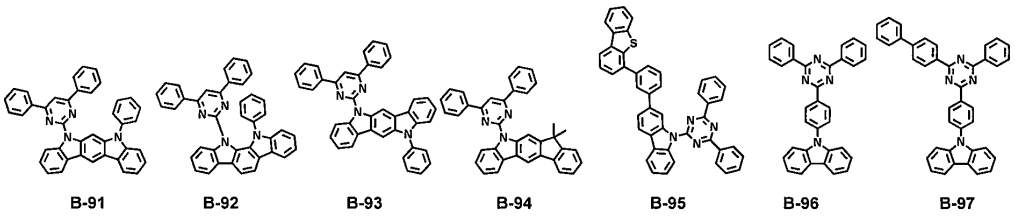
[0119]



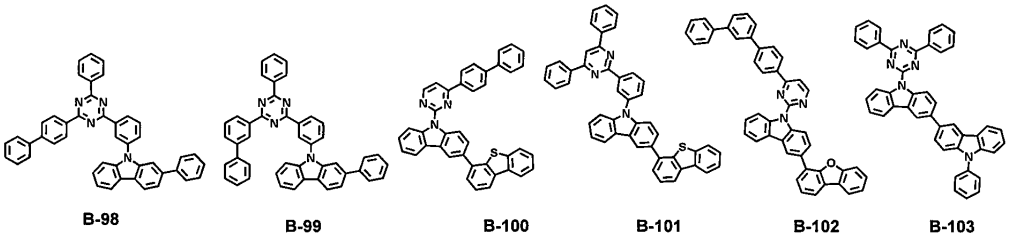
[0120]



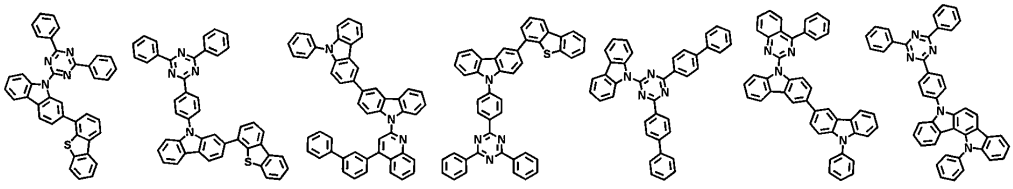
[0121]



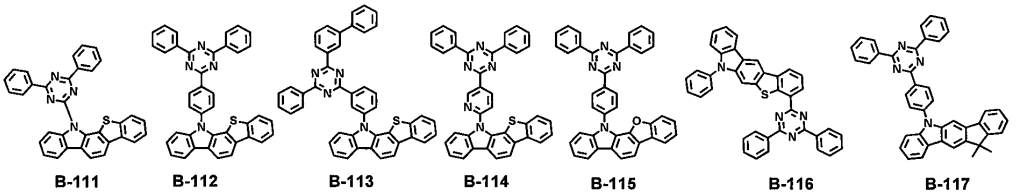
[0122]



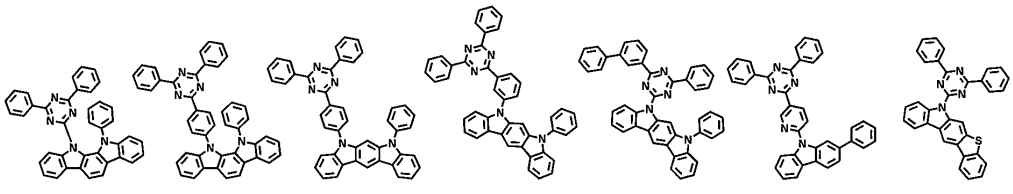
[0123]



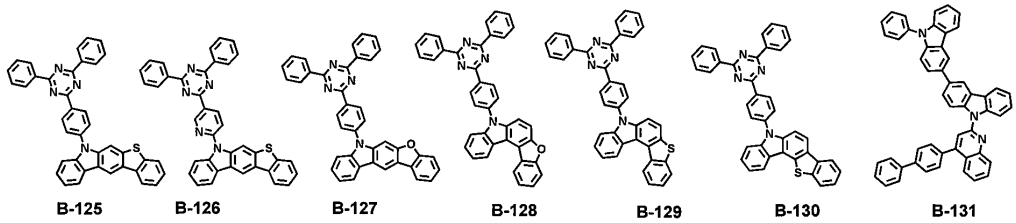
[0124]



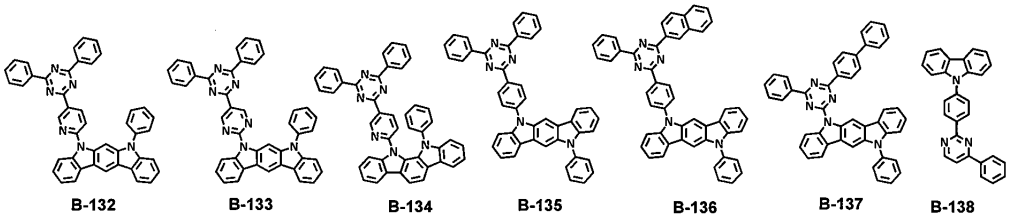
[0125]



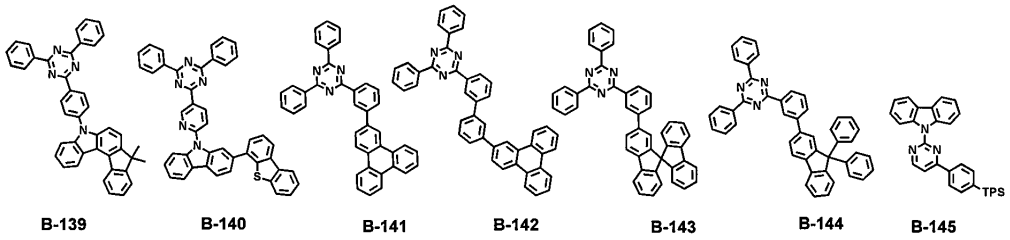
[0126]



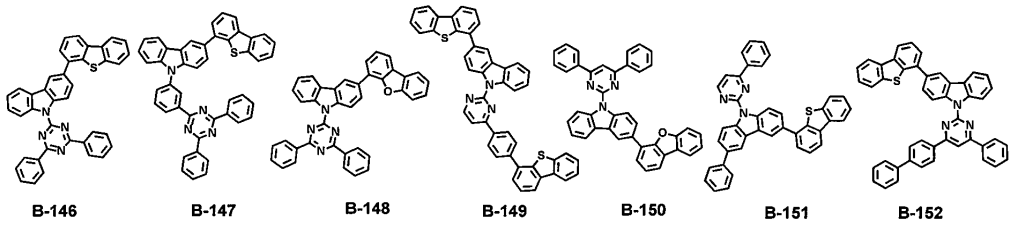
[0127]



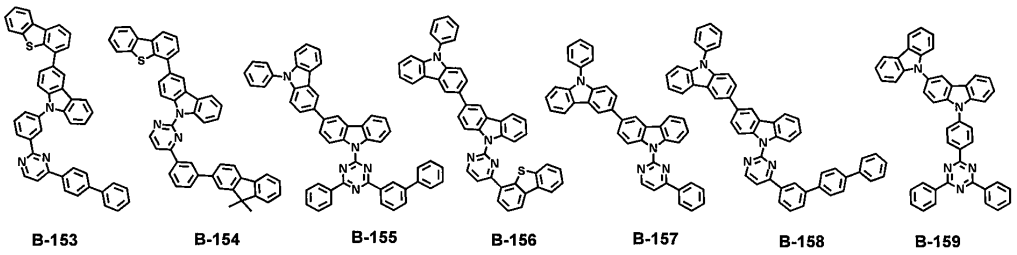
[0128]



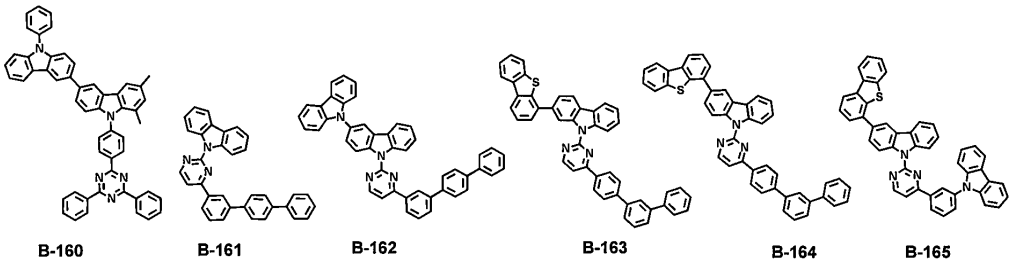
[0129]



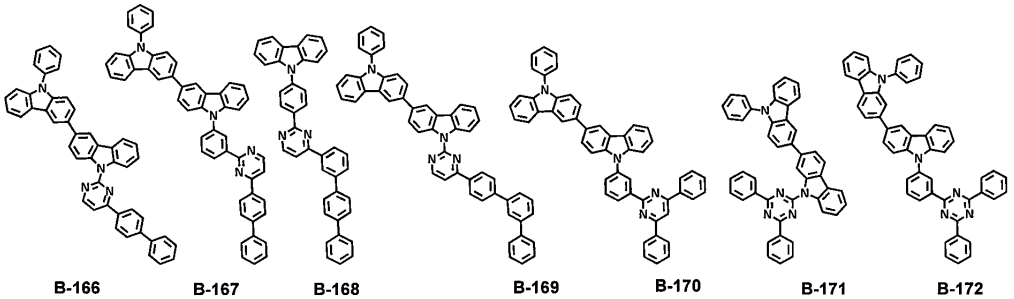
[0130]

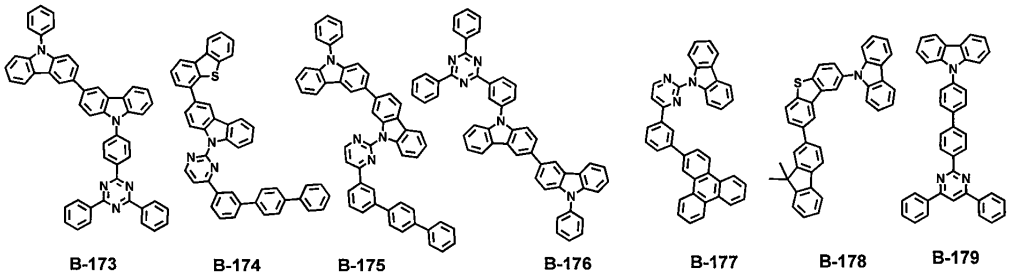


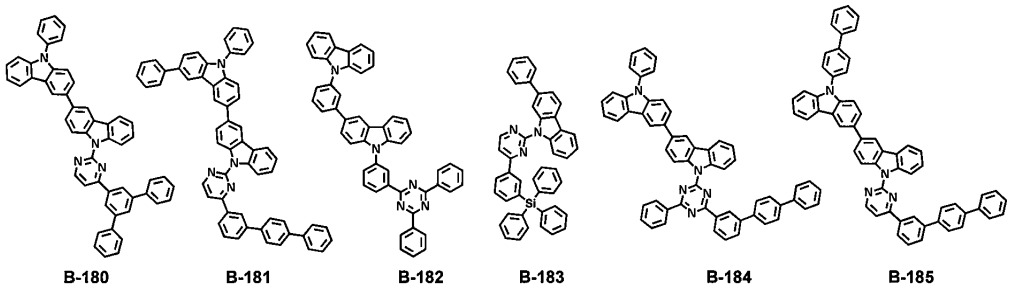
[0131]

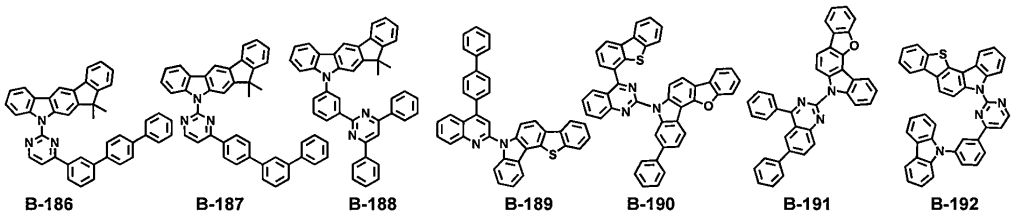


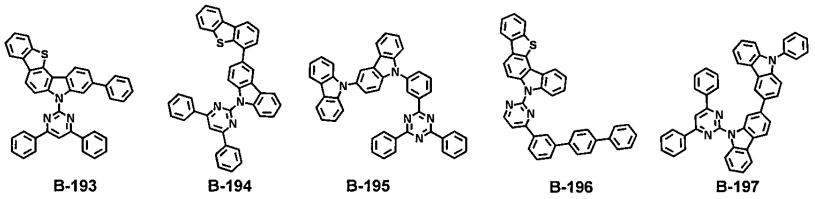
[0132]



[0133] 

[0134] 

[0135] 

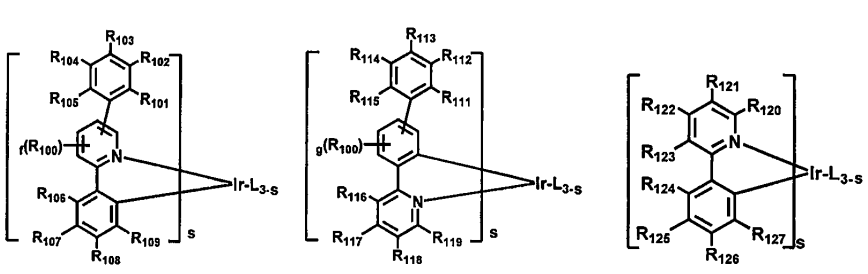
[0136] 

[0137] [여기서, TPS는 트리페닐실릴(triphenylsilyl)기이다]

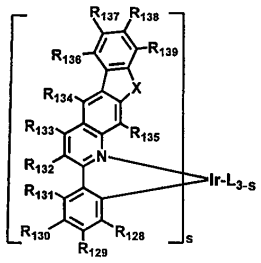
[0138] 본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로는 하나 이상의 인광 또는 형광 도판트를 사용할 수 있고, 인광 도판트가 바람직하다. 본원의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물일 수 있고, 경우에 따라 바람직하게는, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물일 수 있으며, 경우에 따라 더 바람직하게는, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물일 수 있다.

[0139] 본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 101 내지 104로 표시되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0140] [화학식 101] [화학식 102] [화학식 103]

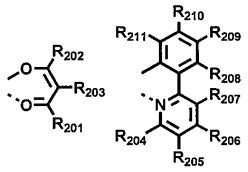
[0141] 

[0142] [화학식 104]

[0143] 

[0144] 상기 화학식 101 내지 104에서,

[0145] L은 하기 구조에서 선택되고;

[0146] 

[0147] R_{100}, R_{134} 및 R_{135}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이며;

[0148] R_{101} 내지 R_{109} 및 R_{111} 내지 R_{123}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 중수소 또는 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이고; R_{106} 내지 R_{109}는 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며; R_{120} 내지 R_{123}은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬, 아릴, 아르알킬 및 알킬아릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 퀴놀린 형성이 가능하며;

[0149] R_{124} 내지 R_{133} 및 R_{136} 내지 R_{139}는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; R_{124} 내지 R_{127}은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

[0150] X는 $CR_{51}R_{52}$, O 또는 S이고;

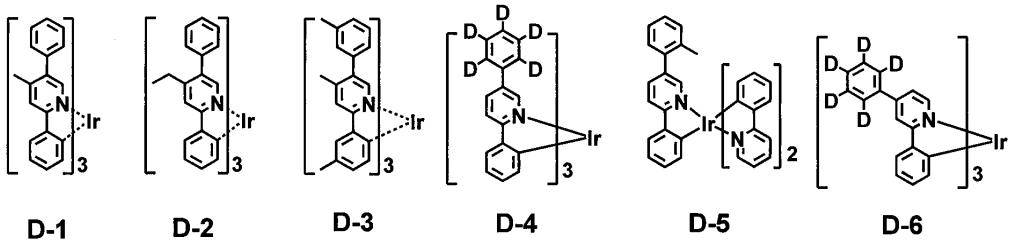
[0151] R_{51} 및 R_{52}는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이며;

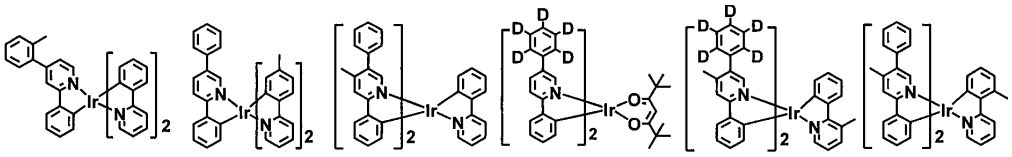
[0152] R_{201} 내지 R_{211}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 중수소 또는 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 알킬 또는 중수소로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고, R_{208} 내지 R_{211}은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있는데, 예를 들어 알킬로 치환 또는 비치환된 플루오렌, 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 또는 알킬로 치환 또는 비치환된 디벤조푸란 형성이 가능하며;

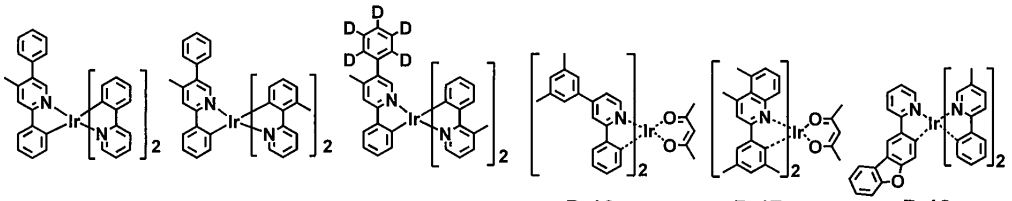
[0153] f 및 g는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며; f 또는 g가 각각 2 이상의 정수인 경우 각각의 R_{100}은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

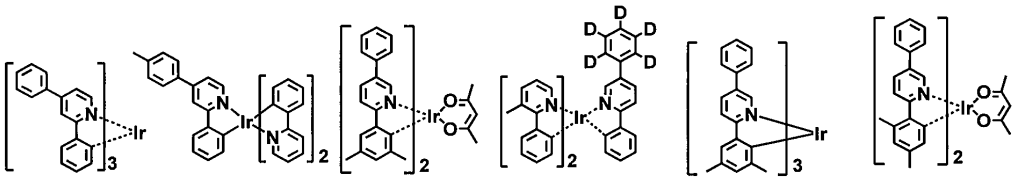
[0154] s는 1 내지 3의 정수이다.

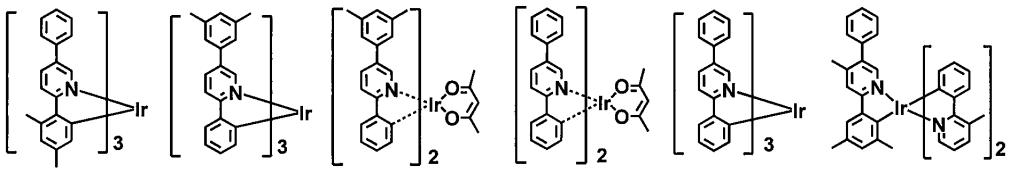
[0155] 구체적으로, 상기 도판트 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되지는 않는다.

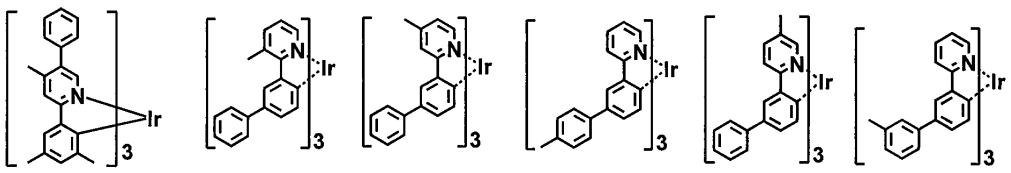
[0156] 
D-1 D-2 D-3 D-4 D-5 D-6

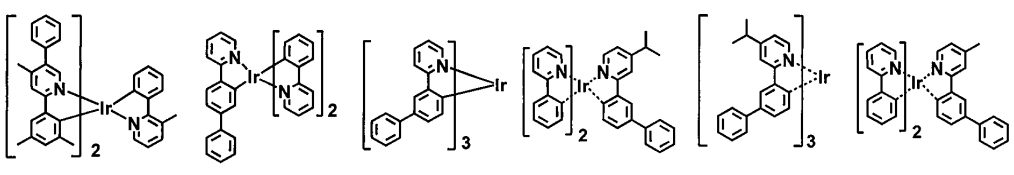
[0157] 
D-7 D-8 D-9 D-10 D-11 D-12

[0158] 
D-13 D-14 D-15 D-16 D-17 D-18

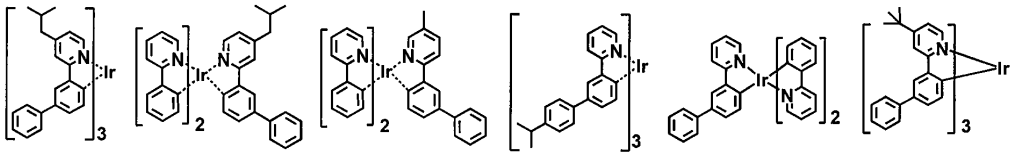
[0159] 
D-19 D-20 D-21 D-22 D-23 D-24

[0160] 
D-25 D-26 D-27 D-28 D-29 D-30

[0161] 
D-31 D-32 D-33 D-34 D-35 D-36

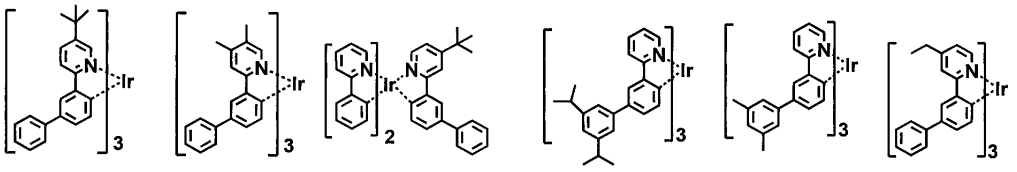
[0162] 
D-37 D-38 D-39 D-40 D-41 D-42

[0163]



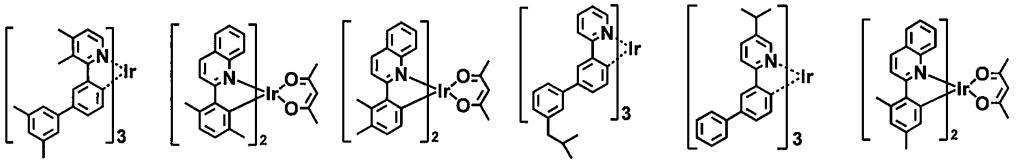
D-43 D-44 D-45 D-46 D-47 D-48

[0164]



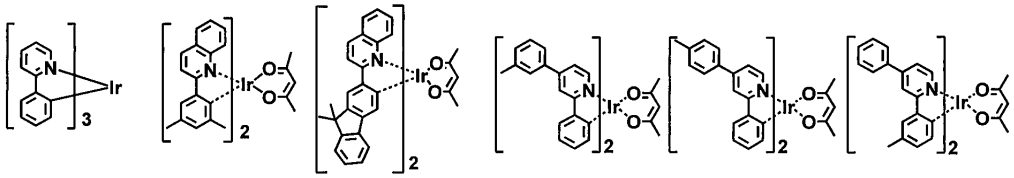
D-49 D-50 D-51 D-52 D-53 D-54

[0165]



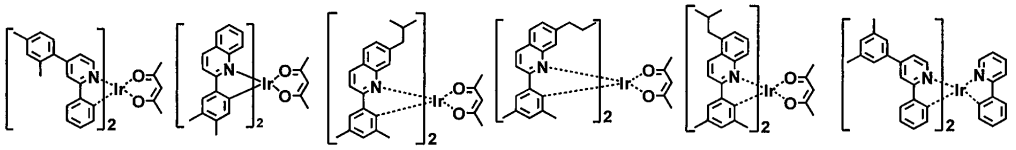
D-55 D-56 D-57 D-58 D-59 D-60

[0166]



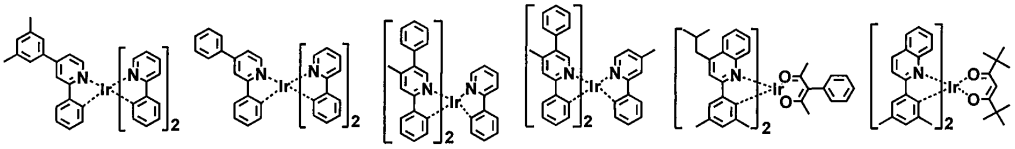
D-61 D-62 D-63 D-64 D-65 D-66

[0167]



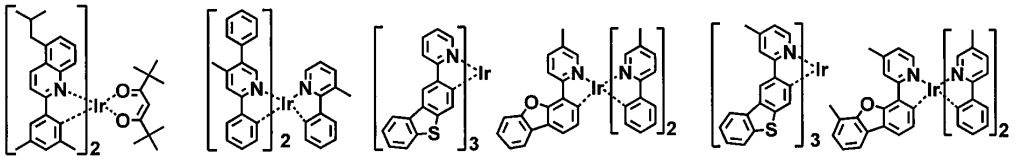
D-67 D-68 D-69 D-70 D-71 D-72

[0168]



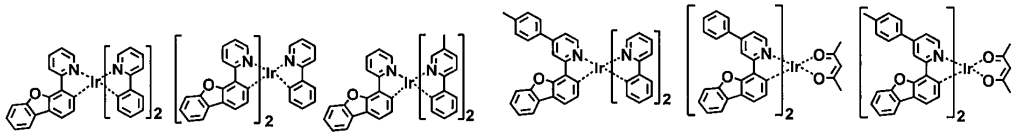
D-73 D-74 D-75 D-76 D-77 D-78

[0169]

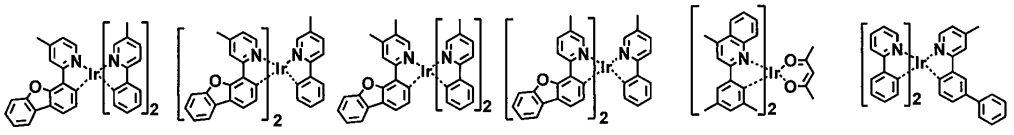


D-79 D-80 D-81 D-82 D-83 D-84

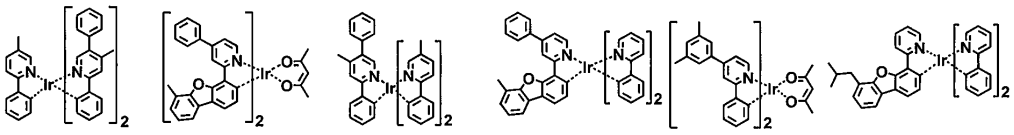
[0170]



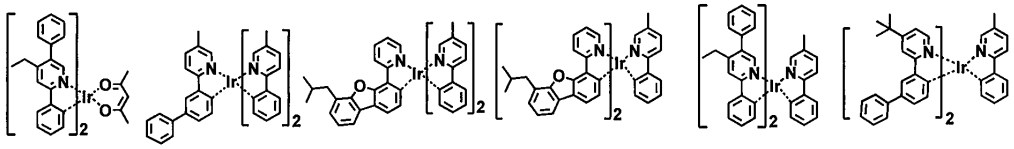
D-85 D-86 D-87 D-88 D-89 D-90

[0171] 

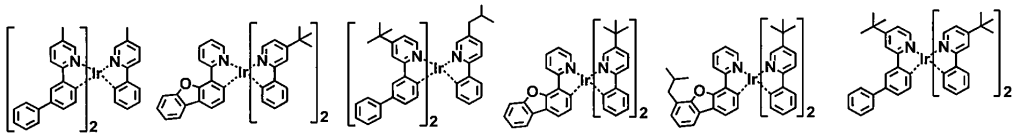
D-91 D-92 D-93 D-94 D-95 D-96

[0172] 

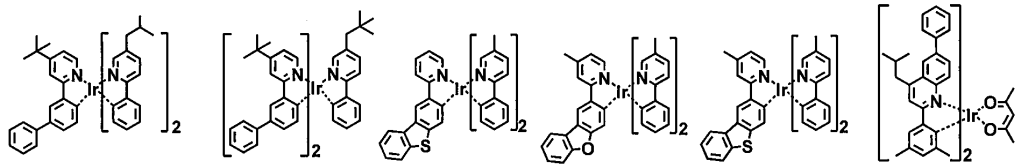
D-97 D-98 D-99 D-100 D-101 D-102

[0173] 

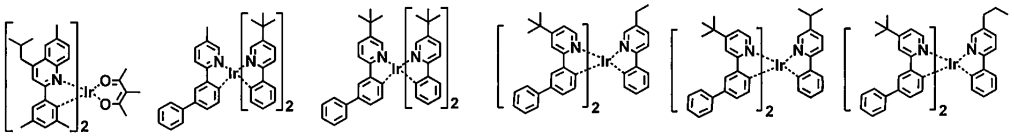
D-103 D-104 D-105 D-106 D-107 D-108

[0174] 

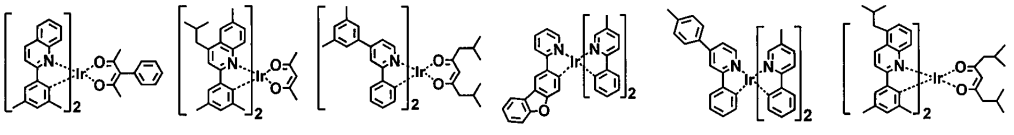
D-109 D-110 D-111 D-112 D-113 D-114

[0175] 

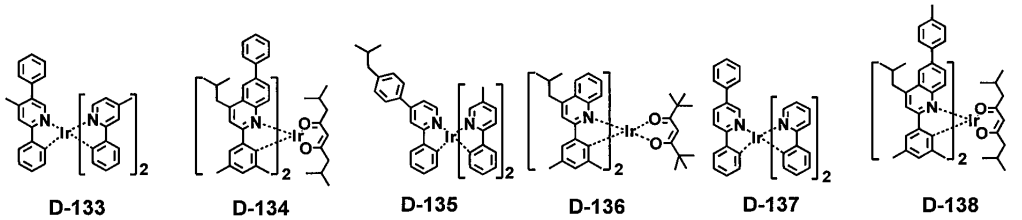
D-115 D-116 D-117 D-118 D-119 D-120

[0176] 

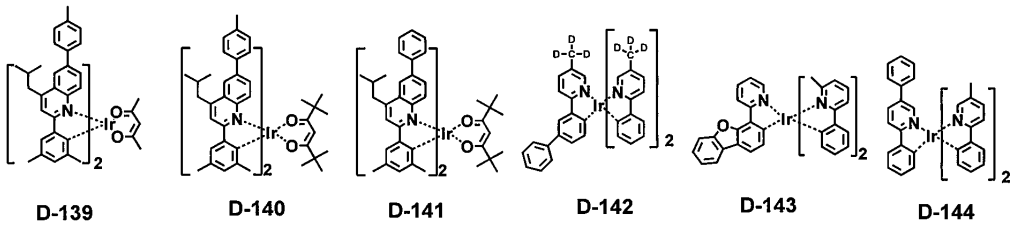
D-121 D-122 D-123 D-124 D-125 D-126

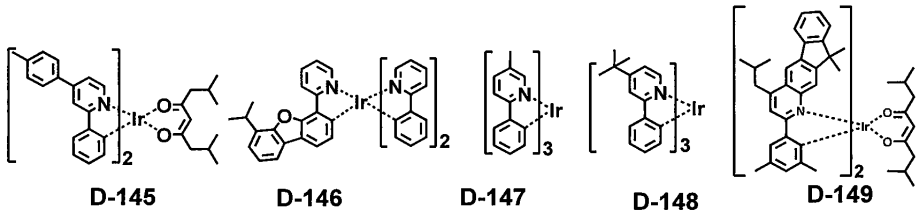
[0177] 

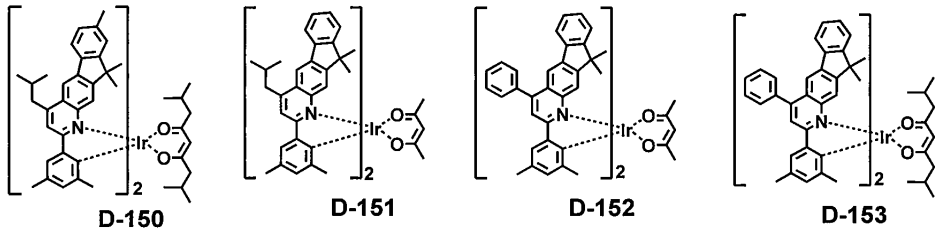
D-127 D-128 D-129 D-130 D-131 D-132

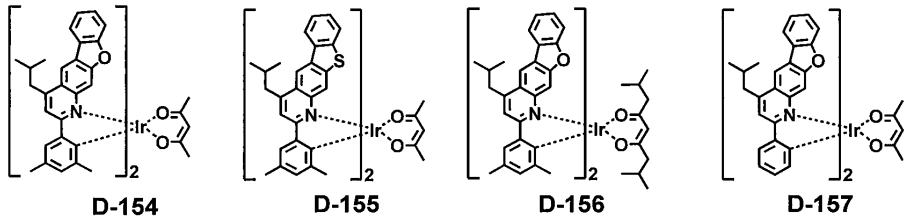
[0178] 

D-133 D-134 D-135 D-136 D-137 D-138

[0179] 

[0180] 

[0181] 

[0182] 

[0183] 본원에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖는다.

[0184] 상기 제1전극과 제2전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 버퍼층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

[0185] 상기 유기물층에 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 추가로 포함할 수도 있다.

[0186] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층은 1족, 2족, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란탄계열 금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속, 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체화합물을 추가로 포함할 수도 있다.

[0187] 또한, 본원의 상기 유기 전계 발광 소자는 본원의 화합물 이외에 당업계에 알려진 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함하는 발광층 하나 이상을 더 포함함으로써 백색 발광을 할 수 있다. 또한, 필요에 따라, 황색 또는 오렌지색 발광층을 더 포함할 수도 있다.

[0188] 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 하나 이상의 층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 애노드 표면에 규소 및 알루미늄의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 캐소드 표면에 할로겐화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 유기 전계 발광 소자의 구동 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 $SiO_X(1\leq X\leq 2)$, $AlO_X(1\leq X\leq 1.5)$, SiON, SiAlON 등이 있고, 할로겐화 금속의 바람직한 예로는 LiF, MgF_2, CaF_2, 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O, Li_2O, MgO,

SrO, BaO, CaO 등이 있다.

[0189] 애노드와 발광층 사이에 정공 주입층, 정공 전달층 또는 전자 차단층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 정공 주입층은 애노드에서 정공 전달층 또는 전자 차단층으로의 정공 주입 장벽(또는 정공 주입 전압)을 낮출 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공 전달층 또는 전자 차단층도 복수의 층이 사용될 수 있다.

[0190] 발광층과 캐소드 사이에 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층 또는 전자 주입층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 전자 버퍼층은 전자 주입을 조절하고 발광층과 전자 주입층 사이의 계면 특성을 향상시킬 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공 차단층 또는 전자 전달층도 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다.

[0191] 발광 보조층은 애노드와 발광층 사이에 위치하거나, 캐소드와 발광층 사이에 위치하는 층으로서, 상기 애노드와 발광층 사이에 위치할 경우, 정공의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 전자의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용되거나, 상기 캐소드와 발광층 사이에 위치할 경우, 전자의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 정공의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있다. 또한, 상기 정공 보조층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도(또는 주입 속도)를 원활하게 하거나 블록킹하는 효과를 나타낼 수 있으며, 이에 따라 전하 밸런스(charge balance)를 조절할 수 있는 층이다. 또한, 상기 전자 차단층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 발광층으로부터의 전자의 오버플로우를 차단하여 엑시톤을 발광층 내에 가두어 발광 누수를 방지하는 층이다. 상기 정공 전달층을 2층 이상 포함할 경우, 추가로 포함되는 층을 상기 정공 보조층 또는 상기 전자 차단층의 용도로 사용할 수 있다. 상기 정공 보조층과 전자 차단층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및/또는 수명의 개선효과를 갖는다.

[0192] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도판트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진 백색 발광을 하는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

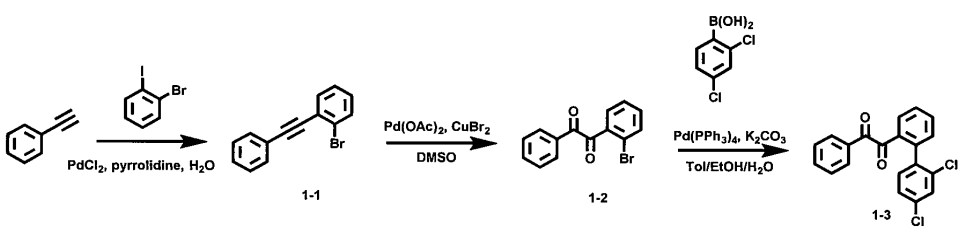
[0193] 본원의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막법이나 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다. 본원의 제1 호스트 화합물과 제2 호스트 화합물을 성막할 때, 공증착 또는 혼합증착으로 공정한다.

[0194] 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.

[0195] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 디스플레이 장치, 예를 들면, 스마트폰, 태블릿, 노트북, PC, TV 또는 차량용의 디스플레이 장치, 또는 조명 장치, 예를 들면, 옥외 또는 옥내용 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

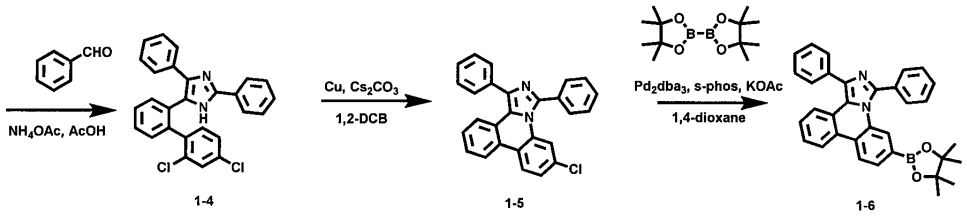
[0196] 이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 대표 화합물을 들어 본원에 따른 화합물의 제조방법 및 이의 물성을 나타내었다. 그러나, 본 발명은 하기의 예들에 한정되는 것은 아니다.

[0197] **[실시예 1] 화합물 C-81의 제조**

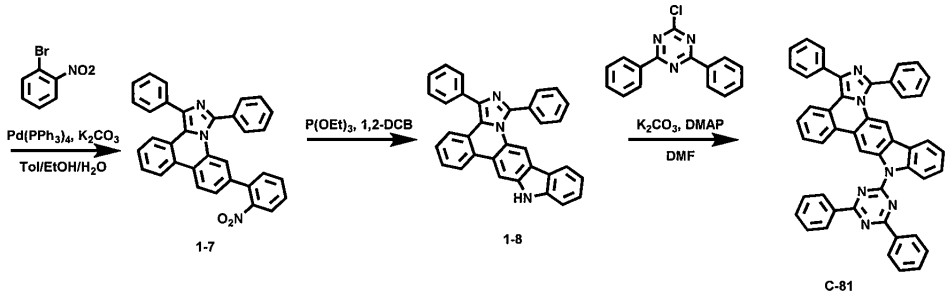


[0198]

[0199]



[0200]



[0201] **1) 화합물 1-1 의 합성**

[0202] 플라스크에 페닐아세틸렌 (17.3 g, 170 mmol), 1-브로모-2-아이오도벤젠 (40 g, 141 mmol), 팔라듐(II)클로라이드 (0.2 g, 1 mmol), 피롤리딘 (50 g, 707 mmol) 및 물 180 mL를 넣어 녹인 후, 24시간 동안 50℃에서 교반시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤, 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-1 (29 g, 수율: 80%)을 얻었다.

[0203] **2) 화합물 1-2의 합성**

[0204] 플라스크에 화합물 1-1 (28 g, 109 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 (2.4 g, 11 mmol), 브롬화제이구리 (2.4 g, 11 mmol) 및 DMSO 440 mL를 넣어 녹인 후, 20시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤, 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-2 (16.3 g, 수율: 52%)을 얻었다.

[0205] **3) 화합물 1-3의 합성**

[0206] 플라스크에 화합물 1-2 (18.2 g, 63 mmol), 2,4-디클로로페닐 보론산 (14.4 g, 76 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (3.6 g, 3 mmol), 2 M 탄산칼륨 (21.7 g, 80 mmol), 톨루엔 320 mL 및 에탄올 80 mL를 넣어 녹인 후, 5시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤, 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-3 (20.6 g, 수율: 92%)을 얻었다.

[0207] **4) 화합물 1-4의 합성**

[0208] 플라스크에 화합물 1-3 (20.6 g, 58 mmol), 벤즈알데히드 (6.1 g, 58 mmol), 암모늄 아세테이트 (26.8 g, 348 mmol) 및 아세트산 290 mL를 넣어 녹인 후, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤, 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-4 (23.5 g, 수율: 91.8%)을 얻었다.

[0209] **5) 화합물 1-5의 합성**

[0210] 플라스크에 화합물 1-4 (23.5 g, 53 mmol), 분말구리 (3.38 g, 53 mmol), 탄산세슘 (69 g, 213 mmol) 및 1,2-디클로로벤젠 350 mL를 넣어 녹인 후, 17시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤, 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-5 (18.3 g, 수율: 85%)을 얻었다.

[0211] **6) 화합물 1-6의 합성**

[0212] 플라스크에 화합물 1-5 (18.3 g, 45 mmol), 비스(피나콜라토)디보론 (13.7 g, 54 mmol), 트리스(디벤질인덴아세톤)디팔라듐 (2.0 g, 2 mmol), 2-디클로로헥실포스핀-2',6'-디메톡시비페닐 (s-phos) (1.85 g, 5 mmol), 아세트산칼륨 (11 g, 113 mmol) 및 1,4-디옥산 230 mL를 넣어 녹인 후, 4시간 동안 환류반응시켰다. 반응이 끝나

면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤, 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-6 (13.7 g, 수율: 61%)을 얻었다.

[0213] **7) 화합물 1-7의 합성**

[0214] 플라스크에 화합물 1-6 (13.2 g, 27 mmol), 2-브로모니트로벤젠 (4.45 g, 22 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (1.26 g, 1 mmol), 2 M 탄산칼륨 (7.64 g, 55 mmol), 톨루엔 120 mL 및 에탄올 30 mL를 넣어 녹인 후, 6시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤, 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-7 (7.2 g, 수율: 55%)을 얻었다.

[0215] **8) 화합물 1-8의 합성**

[0216] 플라스크에 화합물 1-7 (6.2 g, 13 mmol), 트리에틸 포스파이트 42 mL 및 1,2-디클로로벤젠 42 mL를 넣어 녹인 후, 17시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면, 감압증류 후에 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤, 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1-8 (1.5 g, 수율: 25%)을 얻었다.

[0217] **9) 화합물 C-81의 합성**

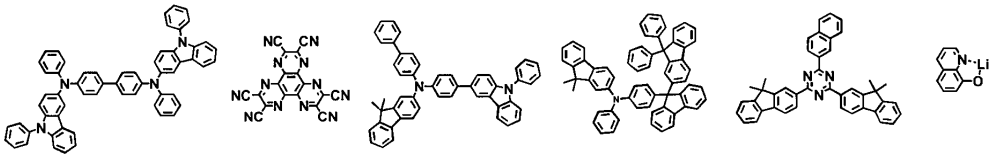
[0218] 플라스크에 화합물 1-8 (1.5 g, 3 mmol), 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (1.05 g, 4 mmol), 탄산칼륨 (0.9 g, 7 mmol), 4-디메틸아미노피리딘 (0.04 g, 0.3 mmol) 및 디메틸포름아미드 32 mL를 넣어 녹인 후, 4시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면, 생성된 고체를 여과하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 C-81 (1.7 g, 수율: 75%)을 얻었다.

[0219]

화합물	MW	UV	PL	M.P.
C-81	690.81	342 nm	463 nm	389℃

[0220] **[소자제조예 1] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 사용한 OLED 소자의 제조**

[0221] 본원의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED 용 글래스(지오마텍사 제조) 기판 상의 투명 전극 ITO 박막(10/□)을 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 HIL-1을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 80 nm 두께의 제1 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HIL-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공주입층 위에 5 nm 두께의 제2 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HTL-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공주입층 위에 10 nm 두께의 제1 정공전달층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HTL-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공전달층 위에 60 nm 두께의 제2 정공전달층을 증착하였다. 정공주입층과 정공전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 화합물 C-81을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-71을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ETL-1과 Liq를 1:1의 속도로 증발시켜 발광층 위에 30 nm 두께의 전자전달층을 증착하였다. 이어서, 전자주입층으로 Liq를 상기 전자전달층 위에 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 캐소드를 상기 전자주입층 위에 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다.

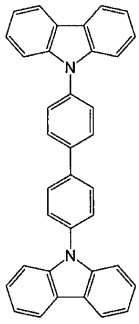
[0222] 

[0223] 그 결과, 3.5 V의 전압에서 21.7 cd/A의 발광 효율을 보였고, 1000 cd/m^2의 적색 발광이 확인되었다.

[0224]

[0225] **[비교예 1] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 사용한 OLED 소자의 제조**

[0226] 발광층의 호스트로서 화합물 A를 사용한 것 외에는 소자제조예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.



A

[0227]

[0228] 그 결과, 10.0 V의 전압에서 14.3 cd/A의 발광 효율을 보였고, 1000 cd/m^2의 적색 발광이 확인되었다.

[0229] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 호스트로 사용한 유기 전계 발광 소자의 구동전압과 발광효율의 특성이 종래의 유기 전계 발광 화합물을 사용한 유기 전계 발광 소자와 대비하여 훨씬 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다.