



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2024년12월06일

(11) 등록번호 10-2739202

(24) 등록일자 2024년12월02일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

H10K 99/00 (2023.01) C07F 5/02 (2006.01)

H10K 50/00 (2023.01)

(52) CPC특허분류

H10K 85/657 (2023.02)

C07F 5/02 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2018-0135437

(22) 출원일자 2018년11월06일

심사청구일자 2021년11월04일

(65) 공개번호 10-2020-0052513

(43) 공개일자 2020년05월15일

(56) 선행기술조사문헌

KR101876763 B1\*

(뒷면에 계속)

전체 청구항 수 : 총 12 항

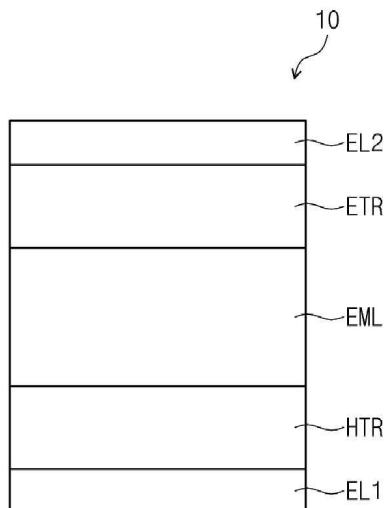
심사관 : 윤대위

(54) 발명의 명칭 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자용 다환 화합물

## (57) 요약

일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 제1 전극, 제1 전극 상에 배치된 정공 수송 영역, 정공 수송 영역 상에 배치된 발광층, 발광층 상에 배치된 전자 수송 영역 및 전자 수송 영역 상에 배치된 제2 전극을 포함하고, 발광층은 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하여 높은 발광 효율을 나타낼 수 있다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

*H10K 50/11* (2023.02)

*H10K 50/12* (2023.02)

(56) 선행기술조사문헌

KR101990818 B1\*

KR1020200011383 A\*

KR1020200019272 A\*

WO2018181188 A1\*

\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

---

## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 배치된 정공 수송 영역;

상기 정공 수송 영역 상에 배치된 발광층;

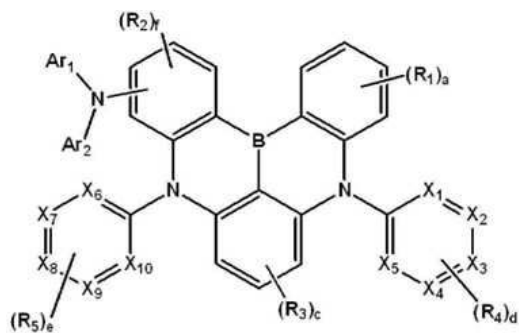
상기 발광층 상에 배치된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 배치된 제2 전극; 을 포함하고,

상기 제1 전극 및 상기 제2 전극은 각각 독립적으로, Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti, In, Sn, 및 Zn 중 선택되는 적어도 하나, 이들 중 선택되는 2종 이상의 화합물, 이들 중 선택되는 2종 이상의 혼합물, 또는 이들의 산화물을 포함하고,

상기 발광층은 하기 화학식 2로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>5</sub>는 모두 탄소이거나, 또는 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>5</sub> 중 두 개는 질소이고 나머지들은 탄소이며,

X<sub>6</sub> 내지 X<sub>10</sub>은 모두 탄소이고,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

a 및 b는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

c는 0 이상 3 이하의 정수이고,

d 및 e는 각각 독립적으로 0 이상 5 이하의 정수이고,

f는 0 이상 3 이하의 정수이며,

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>10</sub>이 모두 탄소인 경우, d는 2이고, 두 개의 R<sub>4</sub> 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 피리딘기이고, 나머지는 치환 또는 비치환된 페닐기이다.

#### 청구항 2

제 1에 있어서,

상기 발광층은 지연 형광을 방출하는 유기 전계 발광 소자.

### 청구항 3

제 1항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하는 지연 형광 발광층이고,

상기 도펀트는 상기 다환 화합물인 유기 전계 발광 소자.

### 청구항 4

제 1항에 있어서,

상기 발광층은 청색광을 방출하는 열활성 지연 형광 발광층인 유기 전계 발광 소자.

### 청구항 5

삭제

### 청구항 6

삭제

### 청구항 7

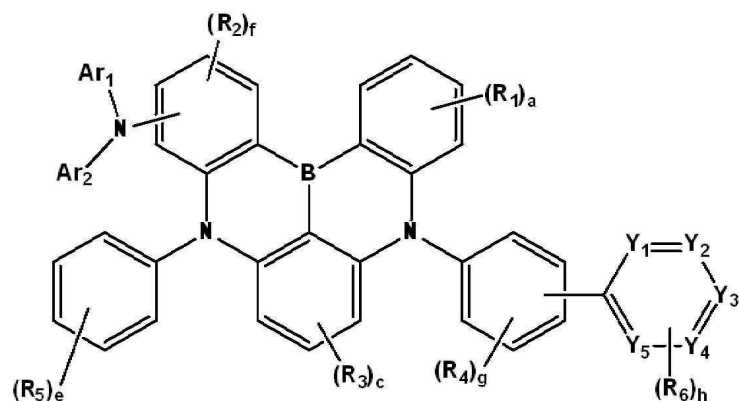
삭제

### 청구항 8

제 1항에 있어서,

상기 다환 화합물은 하기 화학식 5로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 5]



상기 화학식 5에서,

$Y_1$  내지  $Y_5$ 는 각각 독립적으로 탄소 또는 질소이고,

$Y_1$  내지  $Y_5$  중 어느 하나는 질소이고,

$R_4$ 는 치환 또는 비치환된 피리딘기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기이고,

$R_6$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

$g$ 는 1이고,

h는 0 이상 4 이하의 정수이며,

Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>, a, c, e, 및 f는 화학식 2에서 정의한 바와 동일하다.

#### 청구항 9

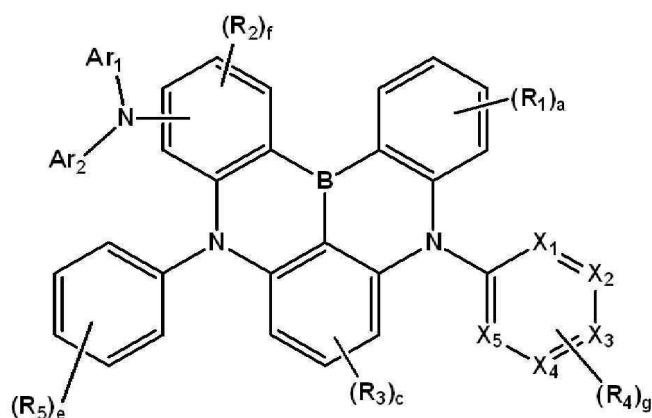
삭제

#### 청구항 10

제 1항에 있어서,

상기 다환 화합물은 하기 화학식 7로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 7]



상기 화학식 7에서,

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>5</sub> 중 두 개는 질소이고 나머지들은 탄소이며,

g는 0 이상 3 이하의 정수이며,

Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>, a, c, e 및 f는 화학식 2에서 정의한 바와 동일하다.

#### 청구항 11

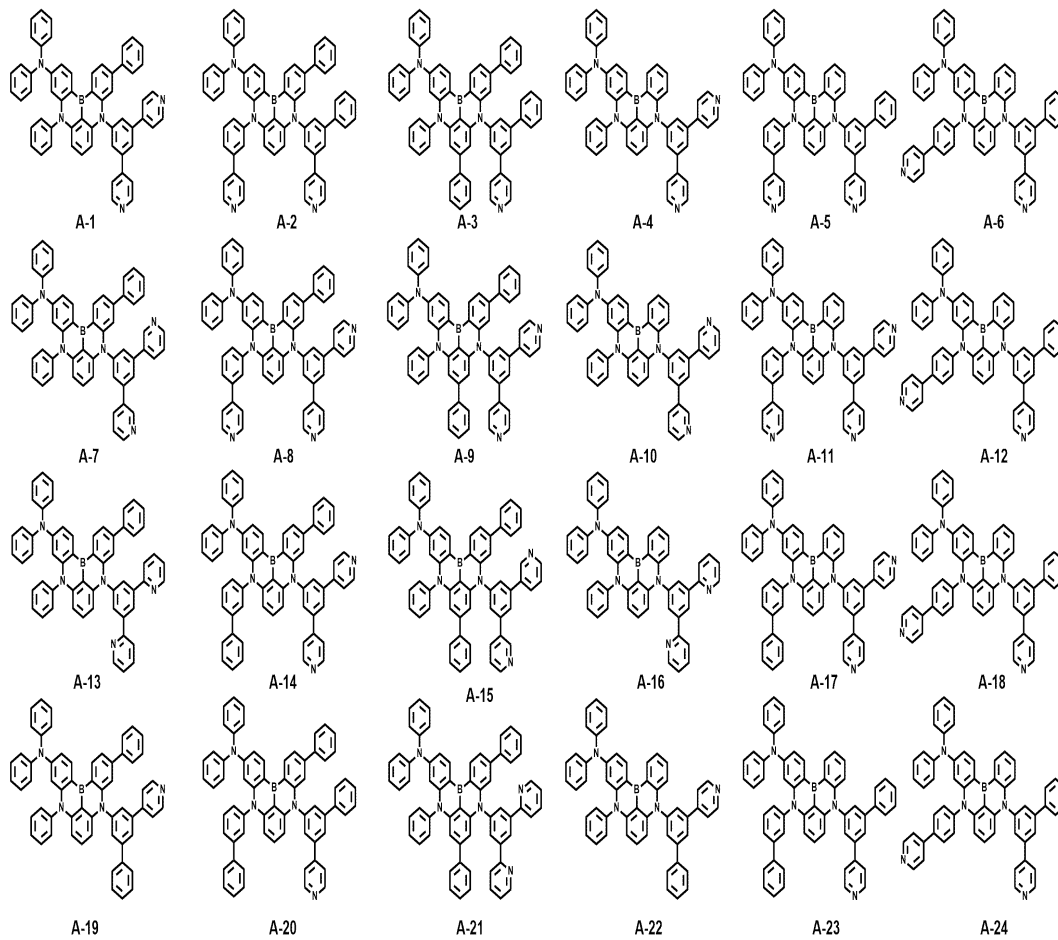
삭제

#### 청구항 12

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나인 유기 전계 발광 소자:

[화합물군 1]

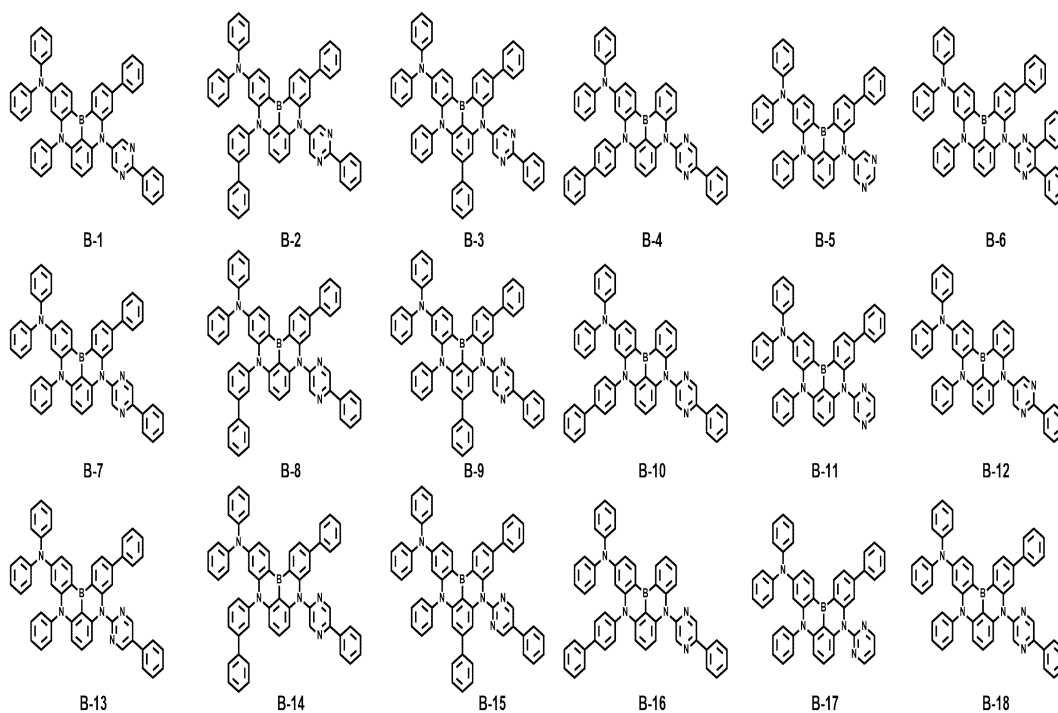


### 청구항 13

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물군 2에 표시된 화합물들 중 어느 하나인 유기 전계 발광 소자:

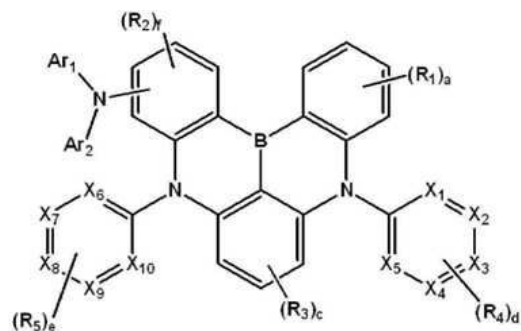
[화합물군 2]



#### 청구항 14

하기 화학식 2로 표시되는 다환 화합물:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

$X_1$  내지  $X_5$ 는 모두 탄소이거나, 또는  $X_1$  내지  $X_5$  중 두 개는 질소이고 나머지들은 탄소이며,

$X_6$  내지  $X_{10}$ 은 모두 탄소이고,

$R_1$  내지  $R_5$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

$Ar_1$  및  $Ar_2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

$a$  및  $b$ 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

$c$ 는 0 이상 3 이하의 정수이고,

$d$  및  $e$ 는 각각 독립적으로 0 이상 5 이하의 정수이고,

$f$ 는 0 이상 3 이하의 정수이며,

$X_1$  내지  $X_{10}$ 이 모두 탄소인 경우,  $d$ 는 2이고, 두 개의  $R_4$  중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 피리딘기이고, 나머지는 치환 또는 비치환된 페닐기이다.

#### 청구항 15

삭제

#### 청구항 16

삭제

#### 청구항 17

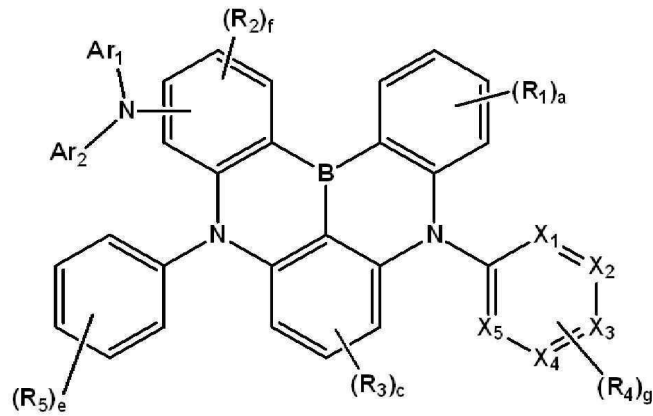
삭제

#### 청구항 18

제 14항에 있어서,

상기 화학식 2는 하기 화학식 7로 표시되는 다환 화합물:

[화학식 7]



상기 화학식 7에서,

$X_1$  내지  $X_5$  중 두 개는 질소이고 나머지들은 탄소이며,

$g$ 는 0 이상 3 이하의 정수이며,

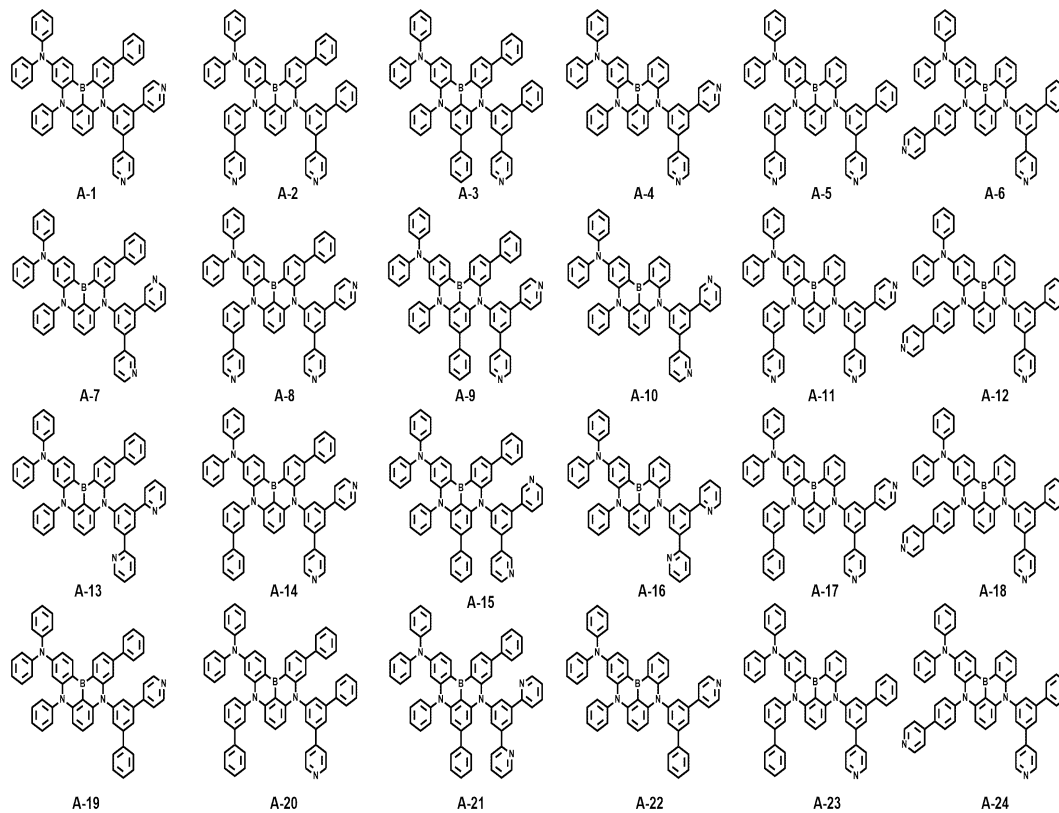
$Ar_1$ ,  $Ar_2$ ,  $R_1$  내지  $R_5$ ,  $a$ ,  $c$ ,  $e$  및  $f$ 는 화학식 2에서 정의한 바와 동일하다.

### 청구항 19

제 14항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나인 다환 화합물:

[화합물군 1]



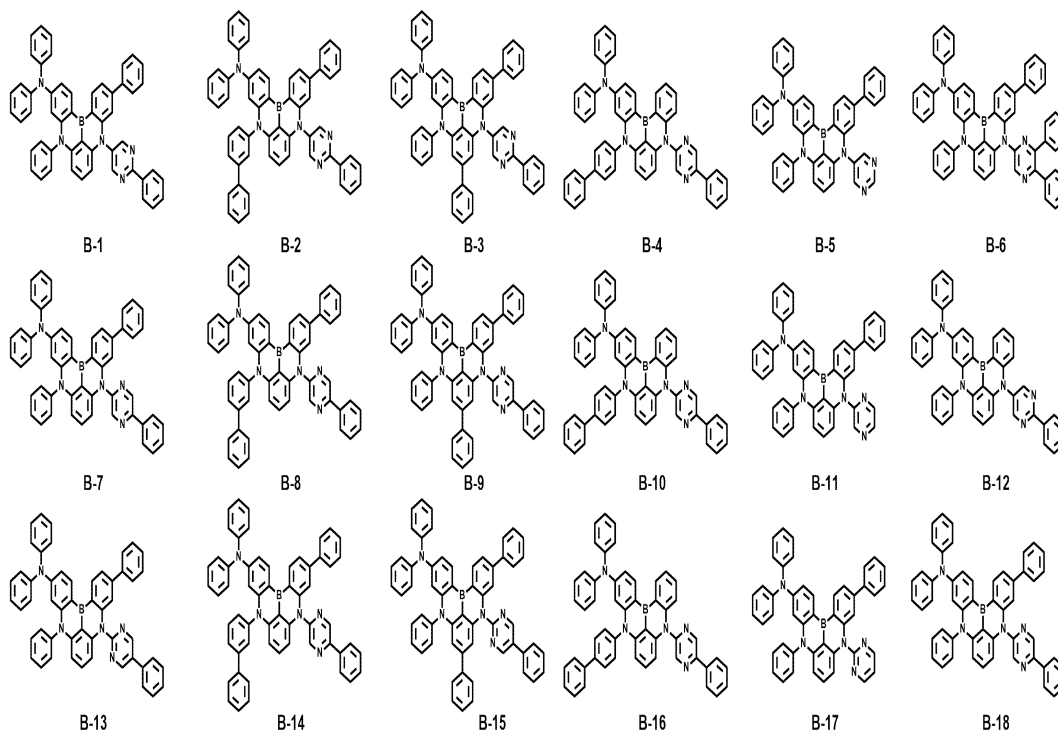
### 청구항 20

제 14항에 있어서,



상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물군 2에 표시된 화합물들 중 어느 하나인 다환 화합물:

[화합물군 2]



## 발명의 설명

## 기술 분야

[0001] 본 발명은 유기 전계 발광 소자 및 이에 사용되는 다환 화합물에 관한 것이다.

## 배경 기술

[0002] 최근, 영상 표시 장치로서, 유기 전계 발광 표시 장치(Organic Electroluminescence Display)의 개발이 왕성하게 이루어져 왔다. 유기 전계 발광 표시 장치는 액정 표시 장치 등과는 다르고, 제1 전극 및 제2 전극으로부터 주입된 정공 및 전자를 발광층에 있어서 재결합시킴으로써, 발광층에 있어서 유기 화합물을 포함하는 발광 재료를 발광시켜서 표시를 실현하는 소위 자발광형의 표시 장치이다.

[0003] 유기 전계 발광 소자를 표시 장치에 응용함에 있어서는, 유기 전계 발광 소자의 저 구동 전압화, 고 발광 효율화 및 장수명화가 요구되고 있으며, 이를 안정적으로 구현할 수 있는 유기 전계 발광 소자용 재료 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

[0004] 특히, 최근에는 고효율 유기 전계 발광 소자를 구현하기 위해 삼중항 상태의 에너지를 이용하는 인광 발광이나, 삼중항 여기자의 충돌에 의해 일중항 여기자가 생성되는 현상(Triplet-triplet annihilation, TTA)를 이용한 지연 형광 발광에 대한 기술이 개발되고 있으며, 지연 형광 현상을 이용한 열 활성화 지연 형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF) 재료에 대한 개발이 진행되고 있다.

## 발명의 내용

## 해결하려는 과제

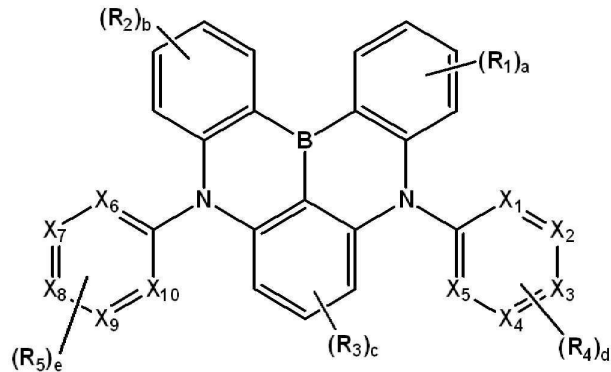
[0005] 본 발명의 목적은 장수명, 고효율의 유기 전계 발광 소자 및 이에 사용되는 다환 화합물을 제공하는 것이다.

[0006] 본 발명의 다른 목적은 열활성 지연 형광 발광 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자 및 열활성 지연 형광 발광 재료로 사용되는 다환 화합물을 제공하는 것이다.

# 과제의 해결 수단

[0007] 본 발명의 일 실시예는 제1 전극, 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역, 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층, 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역, 및 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고, 발광층은 하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0008] [화학식 1]



[0009]

[0010] 화학식 1에서,  $X_1$  내지  $X_{10}$ 은 각각 독립적으로 탄소 또는 질소이고,  $R_1$  내지  $R_5$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,  $a$  및  $b$ 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,  $c$ 는 0 이상 3 이하의 정수이고,  $d$  및  $e$ 는 각각 독립적으로 0 이상 5 이하의 정수이고,  $X_1$  내지  $X_{10}$ 이 모두 탄소인 경우,  $R_4$  및  $R_5$  중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

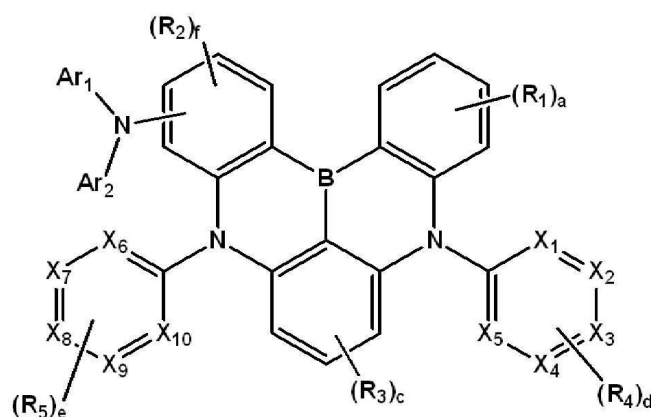
[0011] 발광층은 지연 형광을 방출하는 유기 전계 발광 소자일 수 있다.

[0012] 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하는 지연 형광 발광층이고, 상기 도펀트는 상기 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자일 수 있다.

[0013] 발광층은 청색광을 방출하는 열활성 지연 형광 발광층인 유기 전계 발광 소자일 수 있다.

[0014] 화학식 1은 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[0015] [화학식 2]

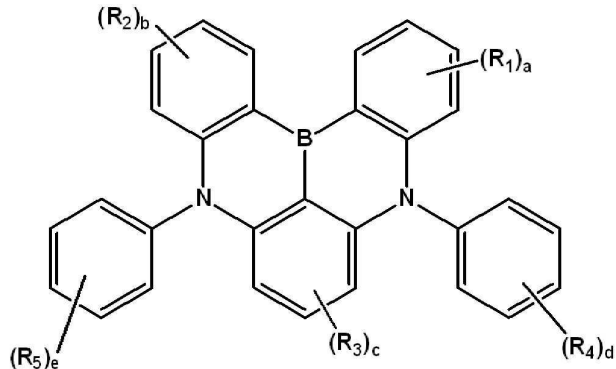


[0016]

[0017] 화학식 2에서,  $Ar_1$  및  $Ar_2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,  $f$ 는 0 이상 3 이하의 정수이며,  $X_1$  내지  $X_{10}$ ,  $R_1$  내지  $R_5$ ,  $a$  및  $c$  내지  $e$ 는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0018] 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시될 수 있다.

[0019] [화학식 3]

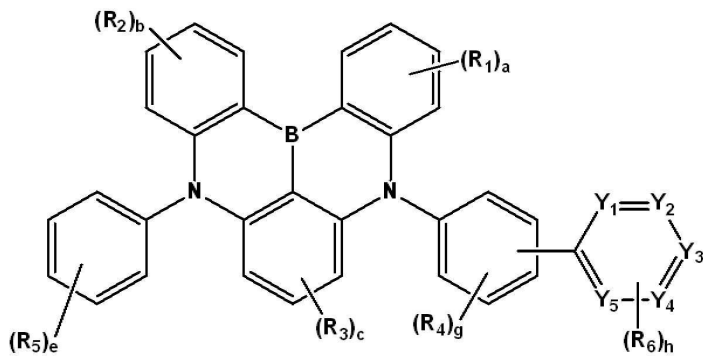


[0020]

[0021] 상기 화학식 3에서, R<sub>4</sub> 및 R<sub>5</sub>는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, R<sub>4</sub> 및 R<sub>5</sub> 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 N을 포함하는 헤테로아릴기이고, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>, a 내지 e는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0022] 화학식 3은 하기 화학식 4로 표시될 수 있다.

[0023] [화학식 4]

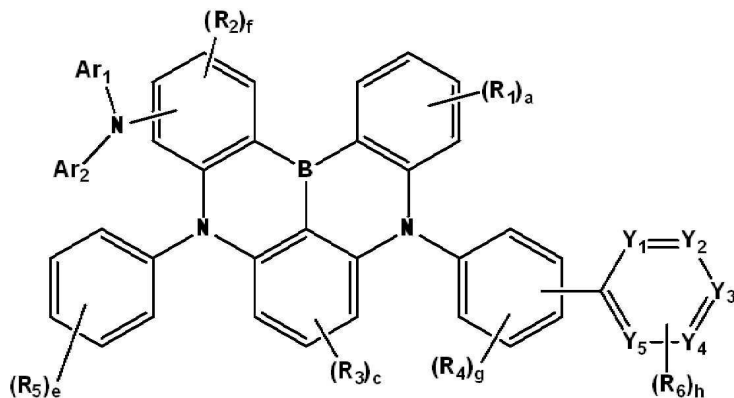


[0024]

[0025] 화학식 4에서, Y<sub>1</sub> 내지 Y<sub>5</sub>는 각각 독립적으로 탄소 또는 질소이고, Y<sub>1</sub> 내지 Y<sub>5</sub> 중 적어도 하나는 질소이고, R<sub>6</sub>은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, g는 0 이상 4 이하의 정수이고, h는 0 이상 4 이하의 정수이며, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>, a 내지 c 및 e는 화학식 3에서 정의한 바와 동일하다.

[0026] 화학식 4는 하기 화학식 5로 표시될 수 있다.

[0027] [화학식 5]



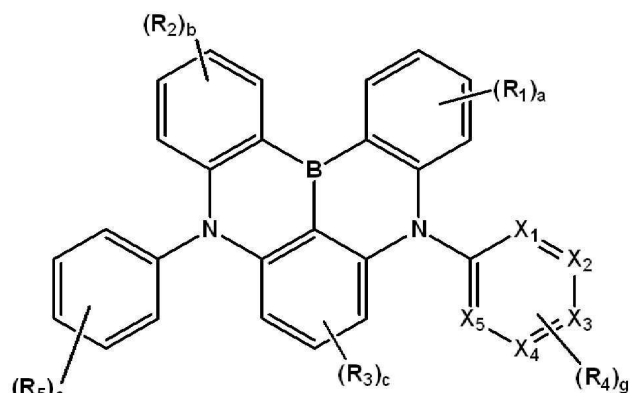
[0028]

[0029] 화학식 5에서, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기,

또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, f는 0 이상 3 이하의 정수이며, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>6</sub>, Y<sub>1</sub> 내지 Y<sub>5</sub>, a, c, e, g 및 h는 화학식 4에서 정의한 바와 동일하다.

[0030] 화학식 1은 하기 화학식 6으로 표시될 수 있다.

[0031] [화학식 6]

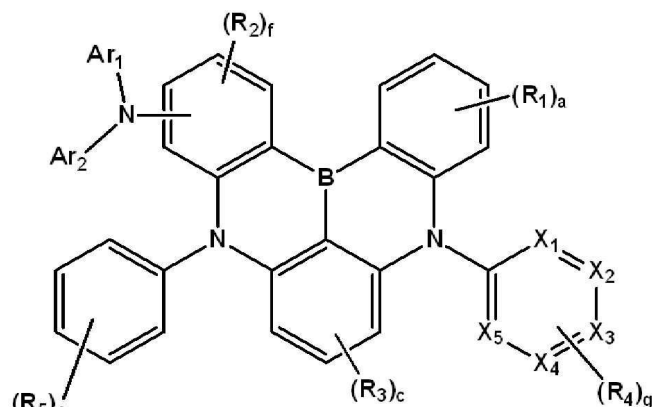


[0032]

[0033] 화학식 6에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>5</sub>는 각각 독립적으로 탄소 또는 질소이고, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>5</sub> 중 적어도 하나는 질소이고, g는 0 이상 4 이하의 정수이며, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>, a 내지 c 및 e는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0034] 화학식 6은 하기 화학식 7로 표시될 수 있다.

[0035] [화학식 7]



[0036]

[0037] 화학식 7에서, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, f는 0 이상 3 이하의 정수이며, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>5</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>, a, c, e 및 g는 화학식 6에서 정의한 바와 동일하다.

[0038] 화학식 7에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>5</sub> 중 두 개는 질소일 수 있다.

[0039] 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나일 수 있다.

[0040] 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물군 2에 표시된 화합물들 중 어느 하나일 수 있다.

[0041] 본 발명의 일 실시예는 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 제공한다.

### 발명의 효과

[0042] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 고효율 및 장수명을 얻을 수 있다.

[0043] 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 유기 전계 발광 소자의 수명과 효율을 개선할 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

- [0044] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.
- 도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.
- 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0045] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 본문에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.
- [0046] 각 도면을 설명하면서 유사한 참조부호를 유사한 구성요소에 대해 사용하였다. 첨부된 도면에 있어서, 구조물들의 치수는 본 발명의 명확성을 위하여 실제보다 확대하여 도시한 것이다. 제1, 제2 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.
- [0047] 본 출원에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다. 또한, 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "상에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다.
- [0048] 이하, 도 1 내지 도 3을 참조하여 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다.
- [0049] 도 1 내지 도 3을 참조하면, 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 순차적으로 적층된 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 전자 수송 영역(ETR) 및 제2 전극(EL2)을 포함할 수 있다.
- [0050] 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)은 서로 마주하고 배치되며, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에는 복수의 유기층들이 배치될 수 있다. 복수의 유기층들은 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 및 전자 수송 영역(ETR)을 포함할 수 있다. 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 발광층(EML)에 상술한 일 실시예의 다환 화합물을 포함할 수 있다.
- [0051] 한편, 도 2는 도 1과 비교하여, 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL) 및 전자 수송층(ETL)을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다. 또한, 도 3은 도 1과 비교하여 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 및 전자 저지층(EBL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL), 전자 수송층(ETL), 및 정공 저지층(HBL)을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다.
- [0052] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 제1 전극(EL1)은 도전성을 갖는다. 제1 전극(EL1)은 금속 합금 또는 도전성 화합물로 형성될 수 있다. 제1 전극(EL1)은 애노드(anode)일 수 있다.
- [0053] 제1 전극(EL1)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제1 전극(EL1)이 투과형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 이루어질 수 있다. 제1 전극(EL1)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들의 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 예시된 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다. 예를 들어, 제1 전극(EL1)은 ITO/Ag/ITO의 복수의 층을 포함하는 것일 수 있다.
- [0054] 정공 수송 영역(HTR)은 제1 전극(EL1) 상에 제공된다. 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 정공 버퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0055] 정공 수송 영역(HTR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

- [0056] 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 또는 정공 수송층(HTL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 정공 주입 물질과 정공 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 정공 수송 영역(HTR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1 전극(EL1)으로부터 차례로 적층된 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL), 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층, 정공 주입층(HIL)/정공 버퍼층, 정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층, 또는 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/전자 저지층(EBL)의 구조를 가질 수 있으나, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0057] 정공 수송 영역(HTR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0058] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 정공 주입층(HIL)은 공지의 정공 주입 재료를 포함할 수 있다. 예를 들어, 정공 주입층(HIL)은 트리페닐아민 함유 폴리에테르케톤(TPAPEK), 4-이소프로필-4'-메틸디페닐요오드늄테트라키스(펜타플루오로페닐)붕산염(PPBI), N, N'-디페닐-N, N'-비스-[4-(페닐-m-톨릴-아미노)-페닐]-페닐-4, 4'-디아민(DNTPD), 구리 프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물, 4, 4', 4''-트리스(3-메틸 페닐 페닐아미노)트리페닐아민(m-MTDATA), N, N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(NPB), N,N'-비스(1-나프틸)-N,N'-디페닐-4,4'-디아민( $\alpha$ -NPD), 4,4',4''-트리스(N,N 디페닐 아미노) 트리페닐아민(TDATA), 4,4',4''-트리스(N,N-2-나프틸 페닐 아미노)트리페닐아민(2-TNATA), 폴리아닐린/도데실 벤젠 설포산(PANI/DBSA), 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트)(PEDOT/PSS), 폴리아닐린/캄페실폰산(PANI/CSA), 폴리아닐린/폴리(4-스티렌설포네이트)(PANI/PSS), 또는 HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile) 등을 포함할 수 있다. 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0059] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 정공 수송층(HTL)은 공지의 정공 수송 재료를 포함할 수 있다. 예를 들어, 정공 수송층(HTL)은 1,1-비스[(디-4-트릴아미노)페닐]시클로헥산(TAPC), N-페닐카르바졸(N-Phenyl carbazole), 폴리비닐카르바졸(Polyvinyl carbazole) 등의 카르바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), 4,4',4''-트리스(N-카르바졸릴)트리페닐아민(TCTA), 또는 N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(NPB), N,N'-비스(1-나프틸)-N,N'-디페닐-4,4'-디아민( $\alpha$ -NPD) 등을 포함할 수 있다. 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0060] 한편, 정공 수송 영역(HTR)은 전자 저지층(EBL)을 더 포함하고, 전자 저지층(EBL)은 정공 수송층(HTL)과 발광층(EML) 사이에 배치될 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.
- [0061] 전자 저지층(EBL)은 당 기술분야에 알려진 일반적인 재료를 포함할 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 예를 들어, N-페닐카르바졸, 폴리비닐카르바졸 등의 카바졸계 유도체, 플루오렌(fluorine)계 유도체, TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4''-tris(N-carbazolyl)triphenylamine) 등과 같은 트리페닐아민계 유도체, NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diplienyl-benzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl) 또는 mCP 등을 포함할 수 있다. 또한, 전술한 바와 같이, 전자 저지층(EBL)은 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물을 포함할 수 있다.
- [0062] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 5000Å일 수 있다. 정공 주입층(HIL)의 두께는, 예를 들어, 약 30Å 내지 약 1000Å이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 30Å 내지 약 1000Å 일 수 있다. 예를 들어, 전자 저지층(EBL)의 두께는 약 10Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR), 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL) 및 전자 저지층(EBL)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.
- [0063] 정공 수송 영역(HTR)은 앞서 언급한 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 정공 수송 영역(HTR) 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 전하 생성 물질은 예를 들어, p-도펀트(dopant)일 수 있다. p-도펀트는 퀴논(quinone) 유도체, 금속 산화물 및 시아노(cyano)기 함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, p-도펀트의 비제한적인 예로는, TCNQ(Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



- [0064] 앞서 언급한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL) 외에, 정공 버퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 정공 버퍼층은 발광층(EML)에서 방출되는 광의 파장에 따른 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시킬 수 있다. 정공 버퍼층에 포함되는 물질로는 정공 수송 영역(HTR)에 포함될 수 있는 물질을 사용할 수 있다.
- [0065] 발광층(EML)은 정공 수송 영역(HTR) 상에 제공된다. 발광층(EML)의 두께는 예를 들어, 약 100 Å 이상 600 Å 이하일 수 있다. 발광층(EML)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0066] 발광층(EML)은 적색광, 녹색광, 청색광, 백색광, 황색광, 시안광 중 하나를 발광하는 것일 수 있다. 발광층(EML)은 형광 발광 물질 또는 인광 발광 물질을 포함할 수 있다.
- [0067] 일 실시예에서, 발광층(EML)은 형광 발광층일 수 있다. 예를 들어, 발광층(EML)에서 방출된 광 중 일부는 열활성 지연 형광 발광(Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF)에 의한 것일 수 있다. 구체적으로, 발광층(EML)은 열활성 지연 형광 발광하는 발광 성분을 포함하는 것일 수 있으며, 일 실시예에서, 발광층(EML)은 청색광을 방출하는 열활성 지연 형광 발광하는 발광층일 수 있다.
- [0068] 본 명세서에서, -\* 는 연결되는 위치를 의미한다.
- [0069] 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 아민기, 실릴기, 붕소기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 알킬기, 알케닐기, 아릴기 및 헤테로 고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미할 수 있다. 또한, 상기 예시된 치환기 각각은 치환 또는 비치환된 것일 수 있다. 예를 들어, 바이페닐기는 아릴기로 해석될 수도 있고, 페닐기로 치환된 페닐기로 해석될 수도 있다.
- [0070] 본 명세서에서, 할로젠 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.
- [0071] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 50 이하, 1 이상 30 이하, 1 이상 20 이하, 1 이상 10 이하 또는 1 이상 6 이하이다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, i-부틸기, 2-에틸부틸기, 3, 3-디메틸부틸기, n-펜틸기, i-펜틸기, 네오펜틸기, t-펜틸기, 시클로펜틸기, 1-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-에틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, n-헥실기, 1-메틸헥실기, 2-에틸헥실기, 2-부틸헥실기, 시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 4-t-부틸시클로헥실기, n-헵틸기, 1-메틸헵틸기, 2,2-디메틸헵틸기, 2-에틸헵틸기, 2-부틸헵틸기, n-옥틸기, t-옥틸기, 2-에틸옥틸기, 2-부틸옥틸기, 2-헥실옥틸기, 3,7-디메틸옥틸기, 시클로옥틸기, n-노닐기, n-데실기, 아다만틸기, 2-에틸데실기, 2-부틸데실기, 2-헥실데실기, 2-옥틸데실기, n-운데실기, n-도데실기, 2-에틸도데실기, 2-부틸도데실기, 2-헥실도데실기, 2-옥틸도데실기, n-트리데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, 2-에틸헥사데실기, 2-부틸헥사데실기, 2-헥실헥사데실기, 2-옥틸헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, n-노나데실기, n-이코실기, 2-에틸이코실기, 2-부틸이코실기, 2-헥실이코실기, 2-옥틸이코실기, n-헨이코실기, n-도코실기, n-트리코실기, n-테트라코실기, n-펜타코실기, n-헥사코실기, n-헵타코실기, n-옥타코실기, n-노나코실기, 및 n-트리아콘틸기 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.
- [0072] 본 명세서에서, 아릴기는 방향족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기를 의미한다. 아릴기는 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 아릴기의 고리 형성 탄소수는 6 이상 30 이하, 6 이상 20 이하, 또는 6 이상 15 이하일 수 있다. 아릴기의 예로는 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 퀸크페닐기, 섹시페닐기, 트리페닐에닐기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리스레닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.
- [0073] 본 명세서에서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수도 있다. 플루오레닐기가 치환되는 경우의 예시는 하기와 같다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.



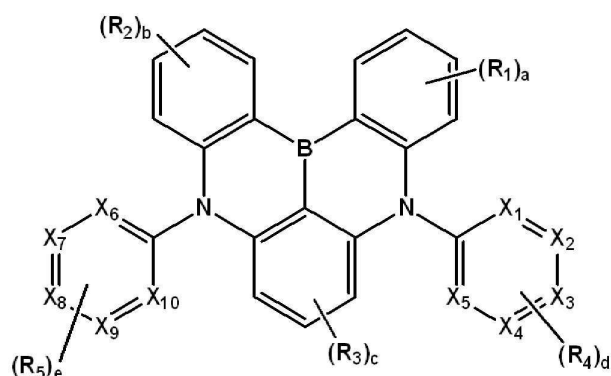
- [0075] 본 명세서에서, 헤테로아릴기는 이종 원소로 O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴기일 수 있다. 헤테로아릴기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하 또는 2 이상 20 이하이다. 헤테로아릴기는 단환식 헤테로아릴기일 수 있다.

테로아릴기 또는 다환식 헤테로아릴기일 수 있다. 다환식 헤테로아릴기는 예를 들어, 2환 또는 3환 구조를 갖는 것일 수 있다. 헤테로아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딘기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 페녹사질기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, N-아릴카바졸기, N-헤테로아릴카바졸기, N-알킬카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 티에노티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난트롤린기, 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페노티아지닐기, 디벤조실롤기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0076] 본 명세서에서, 아민기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 이상 30 이하일 수 있다. 아민기는 알킬 아민기 및 아릴 아민기를 포함할 수 있다. 아민기의 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 트리페닐아민기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0077] 일 실시예에서, 발광층(EML)은 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함한다.

[0078] [화학식 1]



[0079] 화학식 1에서,  $X_1$  내지  $X_{10}$ 은 각각 독립적으로 탄소 또는 질소이고,

[0081] 화학식 1에서,  $R_1$  내지  $R_5$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0082] 한편,  $R_1$  내지  $R_5$ 는 알킬기를 포함하지 않으며, 특히, 고리형 알킬기를 포함하지 않는다.  $R_1$  내지  $R_5$ 가 알킬기를 포함하는 경우, 헤테로아릴기를 치환기로서 보유하는 경우라도, 다중공명효과(Multiple resonance Effect)에 의해 HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital)와 LUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital)의 궤도 분리가 불충분하므로 소자에 적용되는 경우, 발광층의 반치폭이 30nm 이하로 작아지고, 삼중항 에너지 준위( $T_1$ )가 단일항 에너지 준위( $S_1$ )로 전환되는 역계간전이(reverse intersystem crossing, RISC)의 속도도 충분하지 않다.

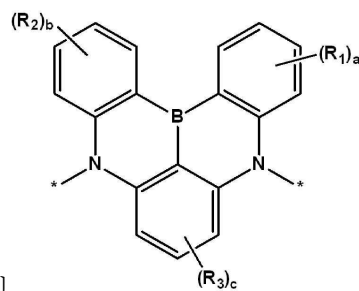
[0083] 화학식 1에서,  $a$  및  $b$ 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다. 한편,  $a$ 가 2 이상일 경우, 복수의  $R_1$ 은 서로 동일하거나 상이하고,  $b$ 가 2 이상일 경우, 복수의  $R_2$ 는 서로 동일하거나 상이하다.

[0084] 화학식 1에서,  $c$ 는 0 이상 3 이하의 정수이다. 한편,  $c$ 가 2 이상일 경우, 복수의  $R_3$ 은 서로 동일하거나 상이하다.

[0085] 화학식 1에서,  $d$  및  $e$ 는 각각 독립적으로 0 이상 5 이하의 정수이다. 한편,  $d$ 가 2 이상일 경우, 복수의  $R_4$ 는 서로 동일하거나 상이하고,  $e$ 가 2 이상일 경우, 복수의  $R_5$ 는 서로 동일하거나 상이하다.

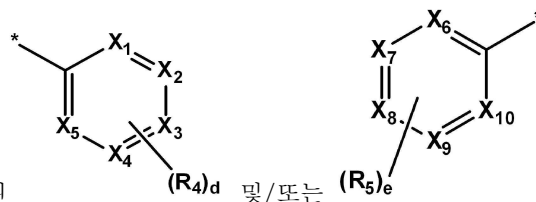
[0086] 화학식 1에서,  $X_1$  내지  $X_{10}$ 이 모두 탄소인 경우,  $R_4$  및  $R_5$  중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다. 이 경우,  $d$  및  $e$ 는 동시에 0은 아니다.





[0087] 본 발명에 따른 다환 화합물은 N-B-N이 이루는 고리구조인

부분은 전자 공여부



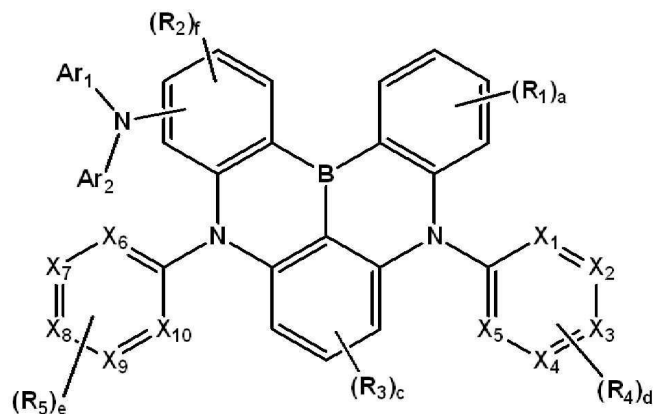
(electron donor)이고, 전자 공여부의 질소에 결합된

부분은 전

자 수용부(electron acceptor)일 수 있다. 하지만 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환 화합물은 전자 공여부의 질소에 결합된 전자 수용부를 포함함으로써, 분자 내 전자 밀도를 편재화시켜 일중항 에너지 준위(S1)와 삼중항 에너지 준위(T1) 차이의 절대값( $\Delta E_{ST}$ )이 작아지며, 삼중항 에너지 준위(T1)가 단일항 에너지 준위(S1)로 전환되는 역계간전이(reverse intersystem crossing, RISC)의 속도 정수가 커져 유기 전계 발광 소자의 장수명에 기여할 수 있다.

[0088] 일 실시예에서, 화학식 1은 아릴아민기를 치환기로 포함할 수 있다. 이 경우, 하기 화학식 1은 화학식 2로 표시될 수 있다.

[0089] [화학식 2]



[0090]

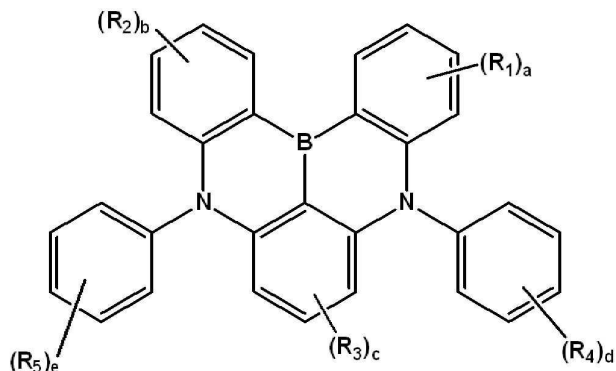
[0091] 화학식 2에서, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0092] 화학식 2에서, f는 0 이상 3 이하의 정수일 수 있다. 한편, f가 2 이상일 경우, 복수의 R<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하다.

[0093] 화학식 2에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>10</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>, a 및 c 내지 e는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0094] 일 실시예에서, 화학식 1의 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>10</sub> 이 모두 탄소일 수 있다. 이 경우, 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시될 수 있다.

[0095] [화학식 3]



[0096]

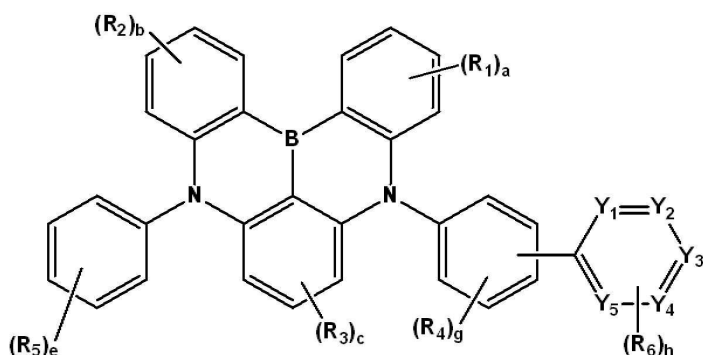
[0097] 화학식 3에서,  $R_4$  및  $R_5$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있고,  $R_4$  및  $R_5$  중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 N을 포함하는 헤테로아릴기일 수 있다. 이 경우, d 및 e는 동시에 0은 아니다.

[0098] 화학식 3에서,  $R_1$  내지  $R_3$ , a 내지 e는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0099] 일 실시예에서, 다환 화합물은 전자 공여부의 N에 전자 수용부로서 N을 포함하는 헤테로아릴기가 결합될 수 있다.

[0100] 일 실시예에서, 화학식 3의  $R_4$ 가 N을 포함하는 헤테로아릴기인 경우, 화학식 3는 하기 화학식 4로 표시될 수 있다.

[0101] [화학식 4]



[0102]

[0103] 화학식 4에서,  $Y_1$  내지  $Y_5$ 는 각각 독립적으로 탄소 또는 질소이고,  $Y_1$  내지  $Y_5$  중 적어도 하나는 질소일 수 있다.

[0104] 화학식 4에서,  $R_6$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

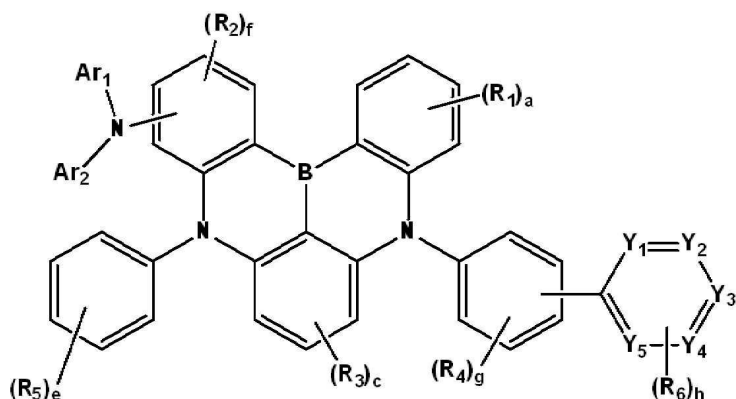
[0105] 화학식 4에서, g는 0 이상 4 이하의 정수이고, 한편, g가 2 이상일 경우, 복수의  $R_4$ 는 서로 동일하거나 상이하다. 한편, 화학식 4의 g는 화학식 3의 d보다 하나 작은 정수이며, 예를 들어, d가 1인 경우, g는 0이다.

[0106] 화학식 4에서, h는 0 이상 4 이하의 정수이고, 한편, h가 2 이상일 경우, 복수의  $R_6$ 은 서로 동일하거나 상이하다.

[0107] 화학식 4에서,  $R_1$  내지  $R_5$ , a 내지 c 및 e는 화학식 3에서 정의한 바와 동일하다.

[0108] 일 실시예에서, 화학식 4는 아릴아민기를 치환기로 포함할 수 있다. 이 경우, 화학식 4은 하기 화학식 5로 표시될 수 있다.

[0109] [화학식 5]



[0110]

[0111] 화학식 5에서, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

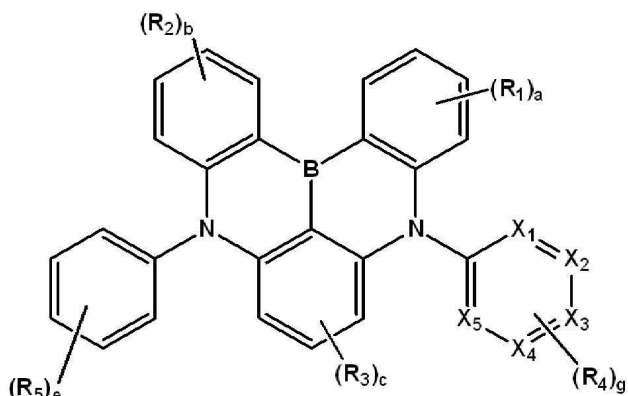
[0112] 화학식 5에서, f는 0 이상 3 이하의 정수이고, 한편, f가 2 이상일 경우, 복수의 R<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하다. 한편, 화학식 5의 f는 화학식 4의 b보다 하나 작은 정수이며, 예를 들어, b가 1인 경우, f는 0이다.

[0113] 화학식 5에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>6</sub>, Y<sub>1</sub> 내지 Y<sub>5</sub>, a, c, e, g 및 h는 화학식 4에서 정의한 바와 동일하다.

[0114] 일 실시예에서, 다환 화합물은 전자 수용부로 피리딘기를 포함할 수 있고, 이 경우, 화학식 4 또는 화학식 5의 Y<sub>1</sub> 내지 Y<sub>5</sub> 중 하나는 질소일 수 있다.

[0115] 일 실시예에서, 화학식 1의 X<sub>6</sub> 내지 X<sub>10</sub>이 모두 탄소일 수 있다. 이 경우, 화학식 1은 하기 화학식 6으로 표시될 수 있다.

[0116] [화학식 6]



[0117]

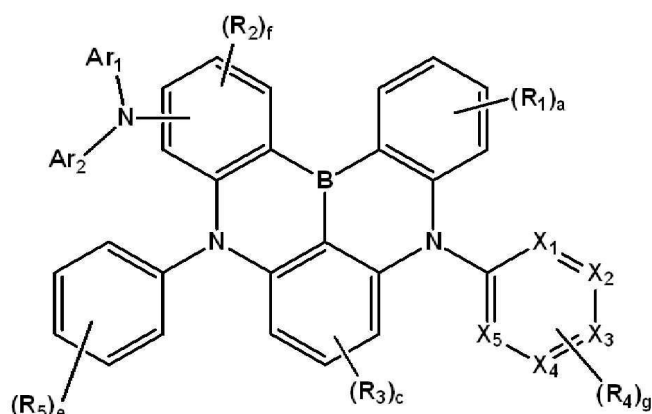
[0118] 화학식 6에서, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>5</sub>는 각각 독립적으로 탄소 또는 질소이고, X<sub>1</sub> 내지 X<sub>5</sub> 중 적어도 하나는 질소일 수 있다.

[0119] 화학식 6에서, g는 0 이상 4 이하의 정수이고, 한편, g가 2 이상일 경우, 복수의 R<sub>4</sub>는 서로 동일하거나 상이하다. 한편, 화학식 6의 g는 화학식 1의 d보다 하나 작은 정수이며, 예를 들어, d가 1인 경우, g는 0이다.

[0120] 화학식 6에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub>, a 내지 c 및 e는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0121] 일 실시예에서, 화학식 6은 아릴아민기를 치환기로 포함할 수 있다. 이 경우, 화학식 6은 하기 화학식 7로 표시될 수 있다.

[0122] [화학식 7]



[0123]

[0124]

화학식 7에서,  $Ar_1$  및  $Ar_2$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0125]

화학식 7에서,  $f$ 는 0 이상 3 이하의 정수이고, 한편,  $f$ 가 2 이상일 경우, 복수의  $R_2$ 는 서로 동일하거나 상이하다. 한편, 화학식 7의  $f$ 는 화학식 6의  $b$ 보다 하나 작은 정수이며, 예를 들어,  $b$ 가 1인 경우,  $f$ 는 0이다.

[0126]

화학식 7에서,  $X_1$  내지  $X_5$ ,  $R_1$  내지  $R_5$ ,  $a$ ,  $c$ ,  $e$  및  $g$ 는 화학식 6에서 정의한 바와 동일하다.

[0127]

일 실시예에서, 다환 화합물은 전자 공여부의 N에 전자 수용부로서 피리미딘기가 결합될 수 있다. 이 경우, 화학식 7의  $X_1$  내지  $X_5$  중 두 개는 질소일 수 있다.

[0128]

화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물은 지연 형광 발광 재료일 수 있다. 일 실시예의 다환 화합물은 열활성 지연 형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence) 재료일 수 있다.

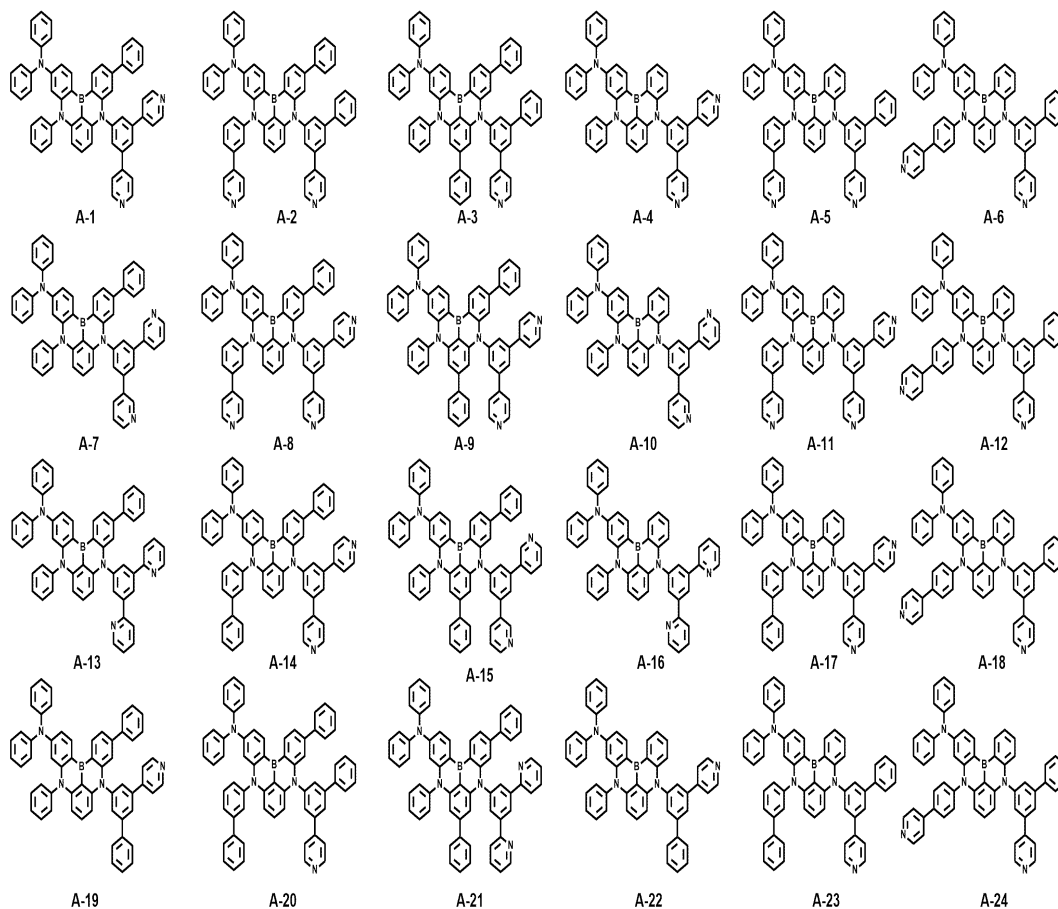
[0129]

예를 들어, 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 일중항 에너지 준위(S1)와 삼중항 에너지 준위(T1) 차이가 작아 열활성 지연 형광 발광 재료로 사용될 수 있다. 구체적으로, 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 열활성 지연 형광 발광하는 청색광 발광 재료로 사용될 수 있다. 다만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니며, 일 실시예의 다환 화합물은 녹색광 또는 적색광을 발광하는 열활성 지연 형광 재료일 수 있다.

[0130]

화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

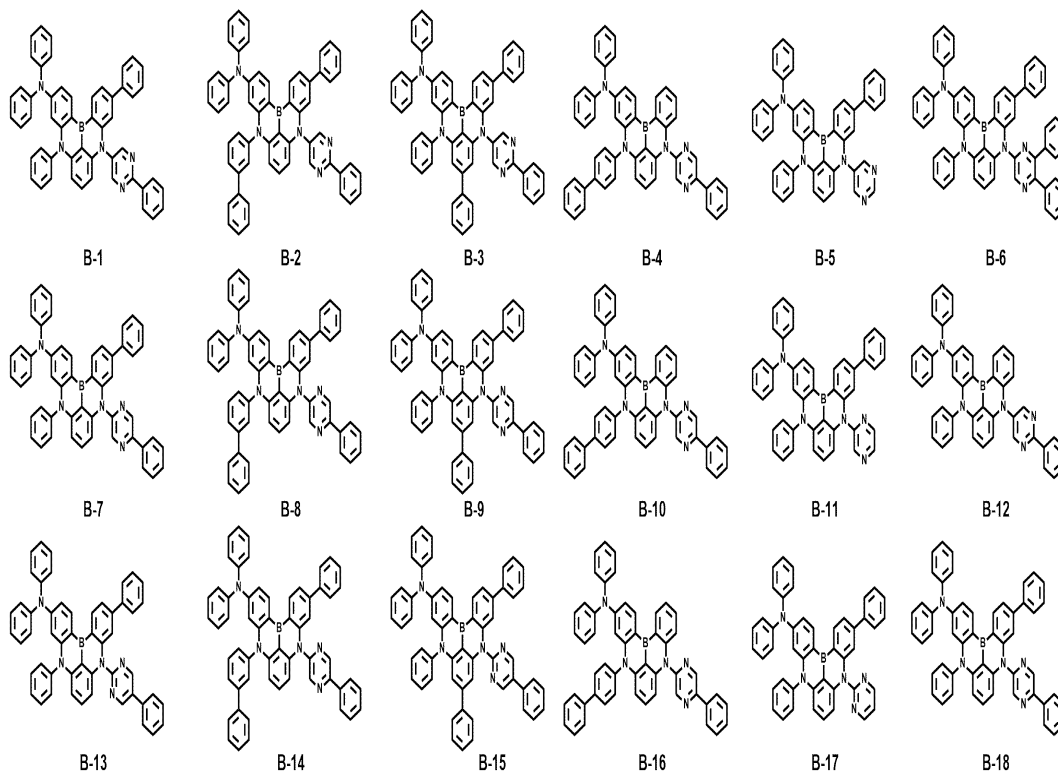
[0131] [화합물군 1]



[0132]

[0133] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물은 하기 화합물군 2에 표시된 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

[0134] [화합물군 2]



[0135]

[0136]

상술한 화학식 1로 표시된 다환 화합물은 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에 사용되어 유기 전계 발광 소자의 효율 및 수명을 개선시킬 수 있다. 구체적으로, 상술한 화학식 1로 표시된 다환 화합물은 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)에 사용되어 유기 전계 발광 소자의 발광 효율 및 수명을 개선시킬 수 있다.

[0137]

일 실시예에서, 발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함하며, 호스트는 지연 형광 발광용 호스트이고, 도펀트는 지연 형광 발광용 도펀트일 수 있다. 한편, 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물은 발광층(EML)의 도펀트 재료로 포함될 수 있다. 예를 들어, 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물은 TADF 도펀트로 사용되는 것일 수 있다.

[0138]

한편, 일 실시예에서 발광층(EML)은 공지의 호스트 재료를 포함할 수 있다. 예를 들어, 일 실시예에서 발광층(EML)은 호스트 재료로,  $\text{AlQ}_3$ (tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), CBP(4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), PVK(poly(n-vinylcarbazole), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene), TCTA(4,4',4''-Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene), TBADN(3-tert-butyl-9,10-di(naphthalen-2-yl)anthracene), DSA(distyrylarylene), CDBP(4,4'-bis(9-carbazolyl)-2,2'-dimethyl-biphenyl), MADN(2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), DPEPO (bis[2-(diphenylphosphino)phenyl] ether oxide), CP1 (Hexaphenyl cyclotriphosphazene), UGH2 (1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene),  $\text{DPSiO}_3$  (Hexaphenylcyclotrisiloxane),  $\text{DPSiO}_4$  (Octaphenylcyclotetrasiloxane), 또는 PPF (2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran) 등을 포함할 수 있다. 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니며, 제시된 호스트 재료 이외에 공지의 지연 형광 발광 호스트 재료가 포함될 수 있다.

[0139]

한편, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 공지의 도펀트 재료를 더 포함할 수 있다. 일 실시예에서 발광층(EML)은 도펀트로 스티릴 유도체(예를 들어, 1, 4-bis[2-(3-N-ethylcarbazolyl)vinyl]benzene(BCzVB), 4-(di-p-tolylamino)-4'-[(di-p-tolylamino)styryl]stilbene(DPAVB), N-(4-((E)-2-(6-((E)-4-(diphenylamino)styryl)naphthalen-2-yl)vinyl)phenyl)-N-phenylbenzenamine(N-BDAVB), 페렌 및 그 유도체(예를 들어, 2, 5, 8, 11-Tetra-t-butylperylene(TBP)), 피렌 및 그 유도체(예를 들어, 1, 1-dipyrene, 1, 4-dipyrenylbenzene, 1, 4-Bis(N, N-Diphenylamino)pyrene) 등의 2,5,8,11-Tetra-t-butylperylene(TBP)) 등을 포함할 수 있다.

[0140]

다시 도 1 내지 도 3을 참조하면, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 전자 수송 영역(ETR)은 발광층

(EML) 상에 제공된다. 전자 수송 영역(ETR)은, 전자 저지층, 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층(EIL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0141] 전자 수송 영역(ETR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0142] 예를 들어, 전자 수송 영역(ETR)은 전자 주입층(EIL) 또는 전자 수송층(ETL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 전자 주입 물질과 전자 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 전자 수송 영역(ETR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1 전극(EL1)으로부터 차례로 적층된 전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL), 정공 저지층/전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL) 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송 영역(ETR)의 두께는 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.

[0143] 전자 수송 영역(ETR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

[0144] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 예를 들어 전자 수송 영역(ETR)은 Alq3(Tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), 1,3,5-tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene, 2,4,6-tris(3'-(pyridin-3-yl)biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine, 2-(4-(N-phenylbenzimidazolyl-1-ylphenyl)-9,10-dinaphthylanthracene, TPBi(1,3,5-tri(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzene), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), TAZ(3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole), tBu-PBD(2-(4-Biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole), BA1q(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), Bebq2(berylliumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 및 이들의 혼합물을 포함할 수 있으나, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.

[0145] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함하는 경우 전자 수송층(ETL)들의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들어 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0146] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 예를 들어, LiF, LiQ(Lithium quinolate), Li<sub>2</sub>O, BaO, NaCl, CsF, Yb와 같은 란타넘족 금속, 또는 RbCl, RbI, KI와 같은 할로젠화 금속 등이 사용될 수 있으나 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 주입층(EIL)은 또한 전자 수송 물질과 절연성의 유기 금속염(organo metal salt)이 혼합된 물질로 이루어질 수 있다. 유기 금속염은 에너지 밴드 갭(energy band gap)이 대략 4eV 이상의 물질이 될 수 있다. 구체적으로 예를 들어, 유기 금속염은 금속 아세테이트(metal acetate), 금속 벤조에이트(metal benzoate), 금속 아세토아세테이트(metal acetoacetate), 금속 아세틸아세토네이트(metal acetylacetonate) 또는 금속 스테아레이트(stearate)를 포함할 수 있다.

[0147] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함하는 경우 전자 주입층(EIL)들의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0148] 전자 수송 영역(ETR)은 앞서 언급한 바와 같이, 정공 저지층을 포함할 수 있다. 정공 저지층은 예를 들어, BCP(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 및 Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0149] 제2 전극(EL2)은 전자 수송 영역(ETR) 상에 제공된다. 제2 전극(EL2)은 도전성을 갖는다. 제2 전극(EL2)은 금속 합금 또는 도전성 화합물로 형성될 수 있다. 제2 전극(EL2)은 캐소드(cathode)일 수 있다. 제2 전극(EL2)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제2 전극(EL2)DL 투과형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 이루어질 수 있다.

[0150] 제2 전극(EL2)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들의 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 예시된 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의



층 구조일 수 있다.

[0151] 도시하지는 않았으나, 제2 전극(EL2)은 보조 전극과 연결될 수 있다. 제2 전극(EL2)이 보조 전극과 연결되면, 제2 전극(EL2)의 저항을 감소시킬 수 있다.

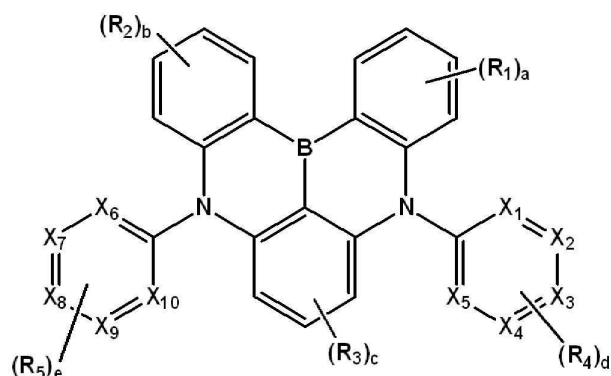
[0152] 유기 전계 발광 소자(10)에서, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)에 각각 전압이 인가됨에 따라 제1 전극(EL1)으로부터 주입된 정공(hole)은 정공 수송 영역(HTR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동되고, 제2 전극(EL2)으로부터 주입된 전자가 전자 수송 영역(ETR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동된다. 전자와 정공은 발광층(EML)에서 재결합하여 여기자(exciton)을 생성하며, 여기자가 여기 상태에서 바닥 상태로 떨어지면서 발광하게 된다.

[0153] 유기 전계 발광 소자(10)가 전면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 반사형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 투과형 전극 또는 반투과형 전극일 수 있다. 유기 전계 발광 소자(10)가 배면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 투과형 전극 또는 반투과형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 반사형 전극일 수 있다.

[0154] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 전술한 다환 화합물을 발광층 재료로 사용하여, 개선된 발광 효율 및 수명 특성을 나타낼 수 있다.

[0155] 본 발명의 일 실시예는 하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 제공한다.

[0156] [화학식 1]



[0157] 화학식 1에서,  $X_1$  내지  $X_{10}$ 은 각각 독립적으로 탄소 또는 질소이고,

[0159] 화학식 1에서,  $R_1$  내지  $R_5$ 는 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0160] 한편,  $R_1$  내지  $R_5$ 는 알킬기를 포함하지 않으며, 특히, 고리형 알킬기를 포함하지 않는다.  $R_1$  내지  $R_5$ 가 알킬기를 포함하는 경우, 분자 안정성이 저하되므로 소자에 적용되는 경우, 발광층의 반치폭이 30nm 이하로 작아지고, 삼중항 에너지 준위(T1)가 단일항 에너지 준위(S1)로 전환되는 역계간전이(reverse intersystem crossing, RISC)의 속도가 저하될 수 있다.

[0161] 화학식 1에서,  $a$  및  $b$ 는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이다. 한편,  $a$ 가 2 이상일 경우, 복수의  $R_1$ 은 서로 동일하거나 상이하고,  $b$ 가 2 이상일 경우, 복수의  $R_2$ 는 서로 동일하거나 상이하다.

[0162] 화학식 1에서,  $c$ 는 0 이상 3 이하의 정수이다. 한편,  $c$ 가 2 이상일 경우, 복수의  $R_3$ 은 서로 동일하거나 상이하다.

[0163] 화학식 1에서,  $d$  및  $e$ 는 각각 독립적으로 0 이상 5 이하의 정수이다. 한편,  $d$ 가 2 이상일 경우, 복수의  $R_4$ 는 서로 동일하거나 상이하고,  $e$ 가 2 이상일 경우, 복수의  $R_5$ 는 서로 동일하거나 상이하다.

[0164] 화학식 1에서,  $X_1$  내지  $X_{10}$ 이 모두 탄소인 경우,  $R_4$  및  $R_5$  중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다. 이 경우,  $d$  및  $e$ 는 동시에 0은 아니다.

[0165] 상기 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물에 대하여는 상술한 일 실시예의 유기 전계 발광 소자에서



설명한 다환 화합물에 대한 설명이 동일하게 적용될 수 있다.

[0166] 일 실시예에 따른 다환 화합물은 전술한 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0167] 일 실시예에 따른 다환 화합물은 전술한 화합물군 2에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0168] 이하, 구체적인 실시예 및 비교예를 통해 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다. 하기 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 예시에 불과하며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.

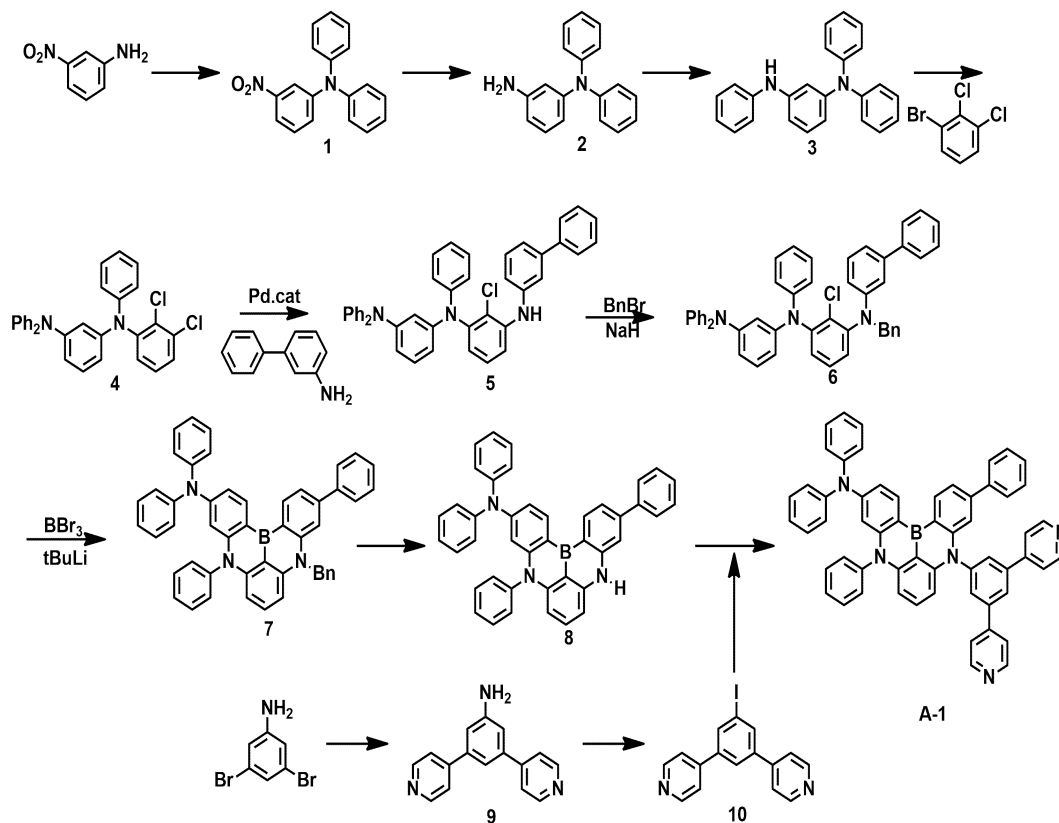
[0169] [실시예]

# 1. 다환 화합물의 합성

[0171] 먼저, 본 실시 형태에 따른 다환 화합물의 합성 방법에 대해서, 화합물 A-1, 화합물 A-2 및 화합물 A-3의 합성 방법을 예시하여 구체적으로 설명한다. 또한, 이하에 설명하는 다환 화합물의 합성법은 일 실시예로서, 본 발명의 실시형태에 따른 다환 화합물의 합성법이 하기의 실시예에 한정되지 않는다.

[0172] (화합물 A-1의 합성)

[0173] 일 실시예에 따른 다환 화합물 A-1은 예를 들어 하기 반응식에 의해 합성될 수 있다.



[0174]

[0175] 3-나이트로아닐린(25 g), 아이오도벤젠(81.2 g), 탄산칼륨(150 g) 및 아이오딘화구리(6.9 g)를 포함한 o-디클로로벤젠(300 ml) 용액을 8시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각 후, 반응 용액을 물에 따라 부었다. 목적물을 톨루엔으로 추출해, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카 겔 크로마토그래피로 정제해, 중간체 1을 51.0 g(수율 97%) 얻었다.

[0176] 상기에서 획득한 중간체 1(51 g)과 철분(30 g) 및 염화암모늄(29 g)을 포함한 에탄올(120 ml)과 물(60 ml)의 혼합 용액을, 오일바스 가열 조건하에서 4시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각하여, 반응 용액을 여과해 에탄올을 유거 후, 목적물을 아세트산에틸로 추출해, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카 겔 크로마토그래피로 정제해, 중간체 2를 42.5 g(수율 93%) 얻었다.

[0177] 상기에서 획득한 중간체 2(42.5 g)와 브로모벤젠(25.2 g), 나트륨부톡사이드(31 g), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>(2.1 g) 및 PH(tBu)<sub>3</sub>/BF<sub>4</sub>(2.6 g)를 포함한 톨루엔(570 ml) 용액을, 오일바스 가열 조건하에서 3시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각한 후, 반응 용액을 물에 따라 부었다. 목적물을 톨루엔으로 추출해, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압

농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카 겔 크로마토그래피로 정제해, 중간체 3을 52 g(수율 95%) 얻었다.

[0178] 상기에서 획득한 중간체 3(52 g)과 1-브로모-2, 3-디클로로벤젠(34.9 g), 나트륨부톡사이드(34 g),  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (3.2 g) 및  $\text{PH}(\text{tBu})_3/\text{BF}_4$ (4.1 g)를 포함한 톨루엔(350 ml) 용액을, 오일바스 가열 조건하에서 3시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각한 후, 반응 용액을 물에 따라 부었다. 목적물을 톨루엔으로 추출해, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카 겔 크로마토그래피로 정제해, 중간체 4를 67 g(수율 90%) 얻었다.

[0179] 상기에서 획득한 중간체 4(6.7 g)와 3-아미노비페닐(2.3 g), 나트륨부톡사이드(2.4 g),  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.22 g) 및  $\text{PH}(\text{tBu})_3/\text{BF}_4$ (0.29 g)를 포함한 톨루엔(50 ml) 용액을, 오일바스 가열 조건하에서 4시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각한 후, 반응 용액을 물에 따라 부었다. 목적물을 아세트산에틸로 추출해, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카 겔 크로마토그래피로 정제해, 중간체 5를 7.7 g(수율 90%) 얻었다.

[0180] 상기에서 획득한 중간체 5(7.7 g)와  $\text{NaH}$ (0.7 g)를 포함한 DMF(75 ml) 용액을, 빙랭하였다. 여기에 브롬화벤질(2.1 ml)을 더해, 빙랭하에서 2시간 교반하였다. TLC로 원료의 소실을 확인 후, 반응 용액을 물에 따라 부었다. 목적물을 톨루엔으로 추출해, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카 겔 크로마토그래피로 정제해, 중간체 6을 7.7 g(수율 69%) 얻었다.

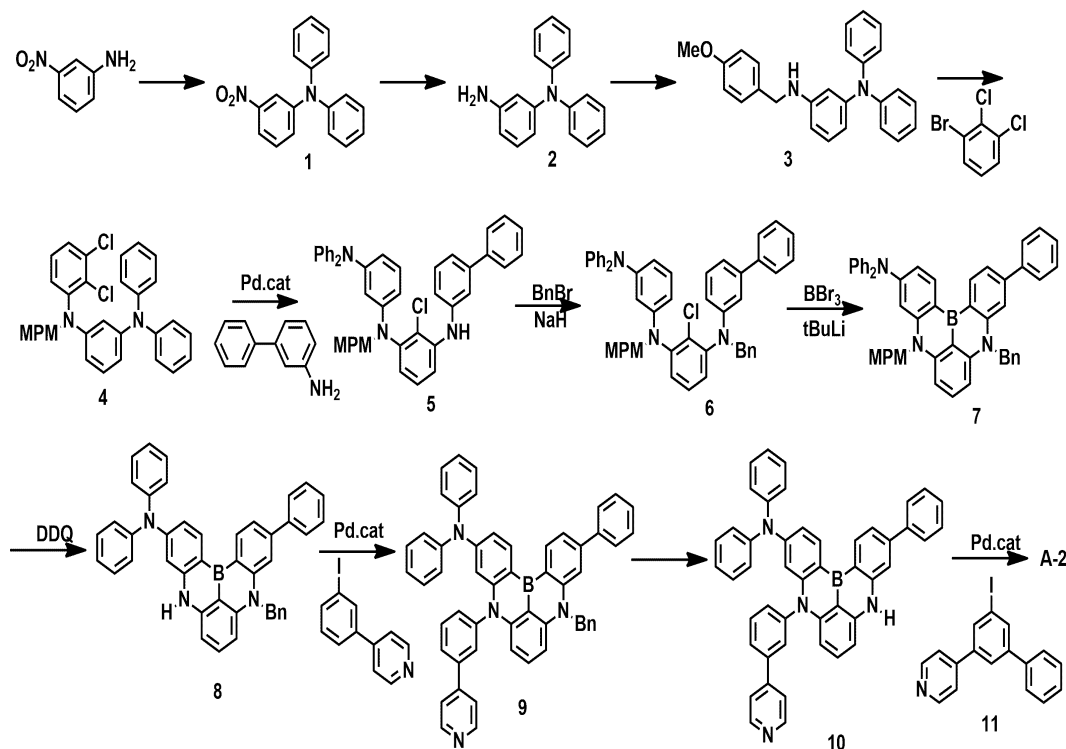
[0181] 상기에서 획득한 중간체 6(7.7 g)을 포함한 t-부틸벤젠(60 ml) 용액을,  $-78^\circ\text{C}$ 까지 냉각하였다. 여기에 t-BuLi/펜테인 용액(13.8 ml)을 더해,  $60^\circ\text{C}$ 에서 2시간 교반하였다. 그 후, 용액을  $-35^\circ\text{C}$ 까지 냉각해, 1 M의  $\text{BBr}_3$  헵테인 용액(22 ml)을 적하 후, 실온에서 3시간 교반하였다. 추가로 용액을  $-40^\circ\text{C}$ 까지 냉각해, 디이소프로필에틸아민(3.8 ml)을 적하하고,  $165^\circ\text{C}$ 에서 8시간 가열 교반한 후, 반응 혼합물을 실온까지 되돌려 증조수에 따라 부었다. 목적물을 아세트산에틸로 추출해, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카 겔 크로마토그래피로 정제해, 중간체 7을 1.5 g(수율 20%) 얻었다.

[0182] 상기에서 획득한 중간체 7(1.5 g)을 포함한 다이클로로메테인(30 ml) 용액을 빙랭해, 여기에 클로로폼산 1-클로로에틸(0.4 ml)을 적하했다. 실온에서 2시간 교반 후, 원료의 소실을 확인해, 용매를 유거하였다. 여기에 MeOH(30 ml)를 더해 1시간 가열 환류하였다. 획득한 혼합물을 실리카 겔 크로마토그래피로 정제해, 중간체 8을 0.5 g(수율 58%) 얻었다.

[0183] 상기에서 획득한 중간체 8(0.5 g)과 별도 조제한 중간체 10(0.3 g), 나트륨부톡사이드(0.2 g),  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.02 g) 및  $\text{PH}(\text{tBu})_3/\text{BF}_4$ (0.03 g)를 포함한 톨루엔(10 ml) 용액을, 오일바스 가열 조건하에서 4시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각한 후, 반응 용액을 물에 따라 부었다. 목적물을 아세트산에틸로 추출해, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카 겔 크로마토그래피로 정제해, 목적물인 A-1을 0.56 g(수율 80%) 얻었다. 또한 FAB-MS 측정에 의해, 목적물의 분자량이 817인 것을 확인하였다. 획득한 화합물 A-1은 추가로 승화 정제를 실시해, 평가용 시료로 사용했다.

[0184] (화합물 A-2의 합성)

[0185] 일 실시예에 따른 다환 화합물 A-2는 예를 들어 하기 반응식에 의해 합성될 수 있다.



[0186]

[0187] 상기 중간체 2까지의 합성 화합물 A-1과 동일하게 실시하였다.

[0188] 중간체 2(40g)를 포함한 아세트나이트릴 용액(500ml)에 4-메톡시벤질브로마이드(37.1g) 및 DIPEA(25.8g)를 더해, 오일 배스 가열 조건하에서 1시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각한 후, 반응 용액을 물에 부어 넣었다. 목적물을 다이클로로메탄으로 추출하고, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 3을 47g(수율 80%) 얻었다.

[0189] 상기에서 획득한 중간체 3(47g)과 1-브로모-2, 3-다이클로로벤젠(29.3g), 나트륨부톡사이드(17.8g), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>(3.2g) 및 PH(tBu)<sub>3</sub>/BF<sub>4</sub>(4.1g)를 포함한 톨루엔(350ml) 용액을, 오일 배스 가열 조건하에서 3시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각한 후, 반응 용액을 물에 부어 넣었다. 목적물을 톨루엔으로 추출하여, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 4를 58g(수율 90%) 얻었다.

[0190] 상기에서 획득한 중간체 4(7.3g)와 3-아미노비페닐(2.3g), 나트륨부톡사이드(2.4g), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>(0.22g) 및 PH(tBu)<sub>3</sub>/BF<sub>4</sub>(0.29g)를 포함한 톨루엔(50ml) 용액을, 오일 배스 가열 조건하에서 4시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각한 후, 반응 용액을 물에 부어 넣었다. 목적물을 아세트산에틸로 추출하여, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 5를 8.2g(수율 90%) 얻었다.

[0191] 상기에서 획득한 중간체 5(8.2g)와 NaH(0.7g)를 포함한 DMF(75ml) 용액을, 빙랭하였다. 여기에 벤질브로마이드(2.1ml)를 더해, 빙랭하에서 2시간 교반하였다. TLC에서 원료 소실을 확인 후, 반응 용액을 물에 부어 넣었다. 목적물을 톨루엔으로 추출하여, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 6을 7g(수율 75%) 얻었다.

[0192] 상기에서 획득한 중간체 6(7g)을 포함한 t-뷰틸헥센(60ml) 용액을, -78℃까지 냉각하였다. 여기에 t-BuLi/펜테인 용액(13.8ml)을 더해, 60℃에서 2시간 교반하였다. 그 후, 용액을 -35℃까지 냉각하여, 1M의 BBr<sub>3</sub> 헵탄 용액(22ml)을 적하 후, 실온에서 3시간 교반하였다. 추가로 용액을 -40℃까지 냉각하여, 다이아이스프로필에틸아민(3.8ml)을 적하하고, 165℃에서 8시간 가열 교반한 후, 반응 혼합물을 실온까지 되돌려 증조수에 부어 넣었다. 목적물을 아세트산에틸로 추출하여, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 7을 1.9g(수율 28%) 얻었다.

[0193] 상기에서 획득한 중간체 7(1.9g)을 포함한 다이클로로메테인-물(20:1)의 혼합 용매(30ml)를 빙랭하여, 여기에 DDQ(1.1당량)를 더했다. 실온에서 2시간 교반 후, 원료 소실을 확인하고, 반응 용액을 물에 부어 넣었다. 목적물을 다이클로로메테인으로 추출하여, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 목적물인 중간체 8을 1.35g(수율 85%) 얻었다.

[0194] 상기에서 획득한 중간체 8(1.35g)과 4-(3-iodophenyl)pyridine(0.76g), 나트륨부톡사이드(0.33g),  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.04g) 및  $\text{PH}(\text{tBu})_3/\text{BF}_4$ (0.06g)를 포함한 톨루엔(20ml) 용액을, 오일 배스 가열 조건하에서 4시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각한 후, 반응 용액을 물에 부어 넣었다. 목적물을 아세트산에틸로 추출하여, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 목적물인 중간체 9를 1.36g(수율 80%) 얻었다.

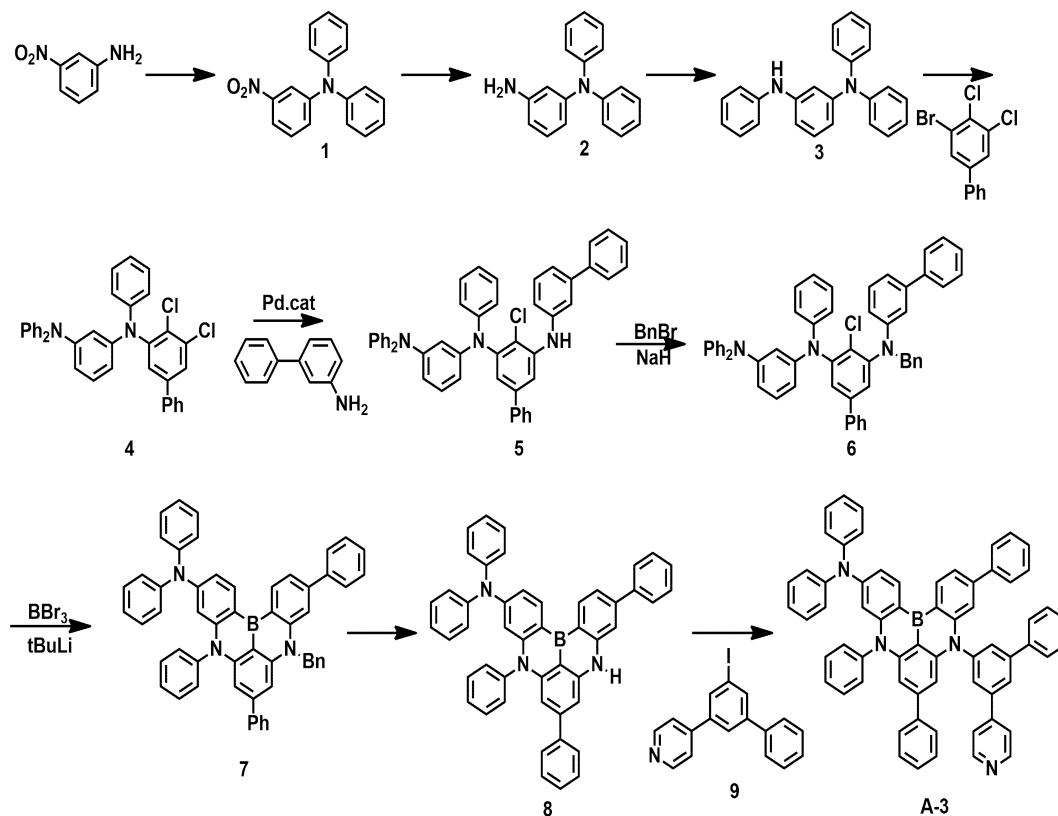
[0195] 상기에서 획득한 중간체 9(1.36g)를 포함한 다이클로로메테인(30ml) 용액을 빙랭하여, 여기에 클로로포름산1-클로로에틸(0.4ml)을 적하하였다. 실온에서 2시간 교반 후, 원료 소실을 확인하고, 용매를 유거하였다. 여기에 MeOH(30ml)를 더해 1시간 가열 환류하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 10을 0.84g(수율 70%) 얻었다.

[0196] 상기에서 획득한 중간체 10(0.84g)과 별도로 조제한 중간체 11(0.54g), 나트륨부톡사이드(0.2g),  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.02g) 및  $\text{PH}(\text{tBu})_3/\text{BF}_4$ (0.03g)를 포함한 톨루엔(10ml) 용액을, 오일 배스 가열 조건하에서 4시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각한 후, 반응 용액을 물에 부어 넣었다. 목적물을 아세트산에틸로 추출하여, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 목적물인 A-2를 0.86g(수율 76%) 얻었다. 또한 FAB-MS 측정에 의해, 목적물의 분자량이 893임을 확인하였다. 획득한 화합물 1은 추가로 승화 정제를 실시하여, 평가용 시료로 삼았다.

[0197] 또한 소자 발광 스펙트럼 측정으로부터, 화합물 A-2의 반치폭은 65nm로 추정하였다.

[0198] (화합물 A-3의 합성)

[0199] 일 실시예에 따른 다환 화합물 A-3는 예를 들어 하기 반응식에 의해 합성될 수 있다.



[0200] 상기 중간체 3까지의 합성은 합성 1과 동일하게 실시하였다.

[0202] 상기에서 획득한 중간체 3(52g)과 1-브로모-2, 3-다이클로로벤젠(47g), 나트륨부톡사이드(34g),

$\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (3.2g) 및  $\text{PH}(\text{tBu})_3/\text{BF}_4$ (4.1g)를 포함한 톨루엔(350ml) 용액을, 오일 베스 가열 조건하에서 3시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각한 후, 반응 용액을 물에 부어 넣었다. 목적물을 톨루엔으로 추출하여, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 4를 78g(수율 90%) 얻었다.

[0203] 상기에서 획득한 중간체 4(7.8g)와 3-아미노비페닐(2.3g), 나트륨부톡사이드(2.4g),  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.22g) 및  $\text{PH}(\text{tBu})_3/\text{BF}_4$ (0.29g)를 포함한 톨루엔(50ml) 용액을, 오일 베스 가열 조건하에서 4시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각한 후, 반응 용액을 물에 부어 넣었다. 목적물을 아세트산에틸로 추출하여, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 5를 8.2g(수율 85%) 얻었다.

[0204] 상기에서 획득한 중간체 5(8.2g)와  $\text{NaH}$ (0.7g)를 포함한 DMF(75ml) 용액을, 빙랭하였다. 여기에 벤질브로마이드(2 ml)를 더해, 빙랭하에서 2시간 교반하였다. TLC로 원료의 소실을 확인 후, 반응 용액을 물에 부어 넣었다. 목적물을 톨루엔으로 추출하여, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 6을 6.5g(수율 70%) 얻었다.

[0205] 상기에서 획득한 중간체 6(6.5g)을 포함한 t-부틸벤젠(60ml) 용액을,  $-78^\circ\text{C}$ 까지 냉각하였다. 여기에 t-BuLi/헵테인 용액(13.8ml)을 더해,  $60^\circ\text{C}$ 에서 2시간 교반하였다. 그 후, 용액을  $-35^\circ\text{C}$ 까지 냉각하여, 1M의  $\text{BBr}_3$  헵테인 용액(22ml)을 적하 후, 실온에서 3시간 교반하였다. 추가로 용액을  $-40^\circ\text{C}$ 까지 냉각하여, 다이아이소프로필에틸아민(3.8ml)을 적하하고,  $165^\circ\text{C}$ 에서 8시간 가열 교반한 후, 반응 혼합물을 실온까지 되돌려 중조수에 부어 넣었다. 목적물을 아세트산에틸로 추출하여, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 7을 1.6g(수율 25%) 얻었다.

[0206] 상기에서 획득한 중간체 7(1.6g)을 포함한 다이클로로메테인(30ml) 용액을 빙랭하여, 여기에 클로로포름산1-클로로에틸(0.4ml)을 적하하였다. 실온에서 2시간 교반 후, 원료 소실을 확인하여, 용매를 유거하였다. 여기에 MeOH(30ml)를 더해 1시간 가열 환류하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 중간체 8을 0.9g(수율 65%) 얻었다.

[0207] 상기에서 획득한 중간체 8(0.9g)과 별도로 조제한 중간체 9(0.3g), 나트륨부톡사이드(0.2g),  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.02g) 및  $\text{PH}(\text{tBu})_3/\text{BF}_4$ (0.03g)를 포함한 톨루엔(10ml) 용액을, 오일 베스 가열 조건하에서 4시간 가열 환류하였다. 실온까지 냉각한 후, 반응 용액을 물에 부어 넣었다. 목적물을 아세트산에틸로 추출하여, 황산마그네슘으로 건조 후, 감압 농축하였다. 획득한 혼합물을 실리카겔 크로마토그래피로 정제하여, 목적물인 A-3을 0.91g(수율 75%) 얻었다. 또한 FAB-MS 측정에 의해, 목적물의 분자량이 892임을 확인하였다. 획득한 화합물은 추가로 승화 정제를 실시하여, 평가용 시료로 삼았다.

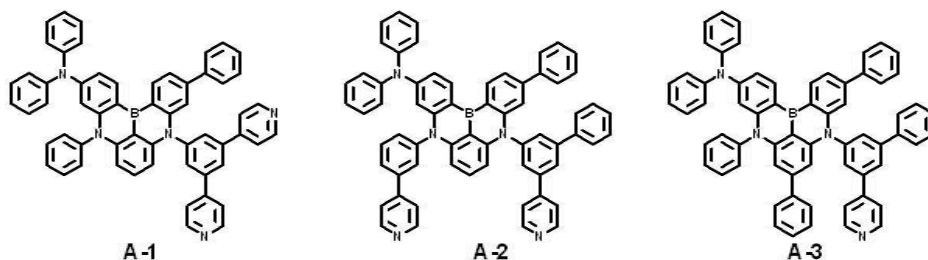
[0208] 또한 소자의 발광 스펙트럼 측정으로부터, 화합물 A-3의 반치폭은 58nm로 추정하였다.

[0209] 1. 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 제작 및 평가

[0210] (유기 전계 발광 소자의 제작)

[0211] 일 실시예의 다환 화합물을 발광층에 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자를 아래의 방법으로 제조하였다. 상술한 화합물 A-1, 화합물 A-2, 및 화합물 A-3의 다환 화합물을 발광층 재료로 사용하여 실시예 1 내지 실시예 3의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다. 하기에서는 실시예 1 내지 실시예 3 및 비교예 1 내지 비교예 5에서 발광층에 사용된 화합물을 나타내었다.

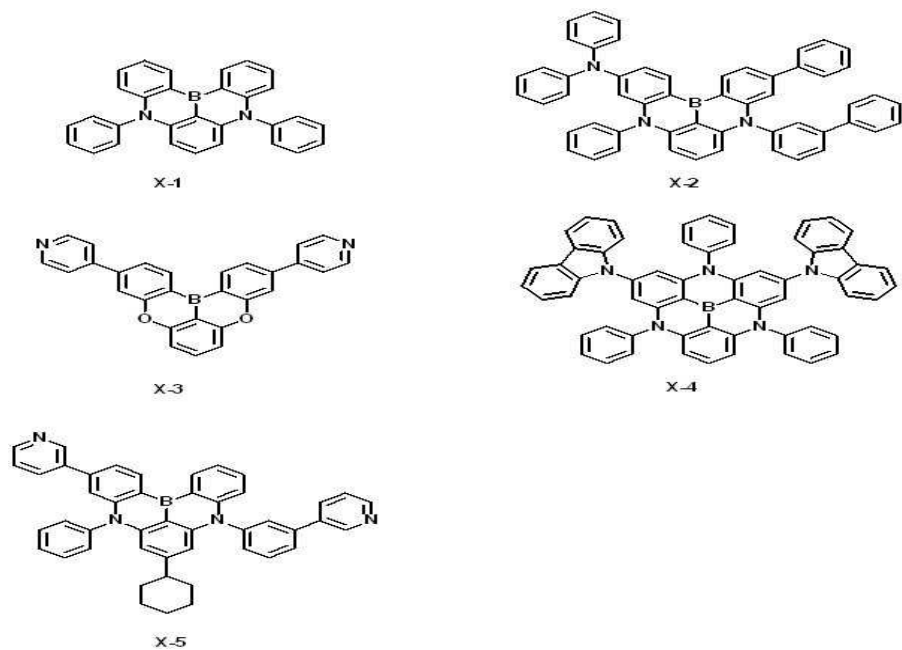
[0212] [실시예 화합물]



[0213]



[0214] [비교예 화합물]



[0215]

[0216] 실시예 및 비교예의 유기 전계 발광 소자는 아래의 방법으로 제조 하였다.

[0217] 유리 기판 상에 두께 1500Å의 ITO를 패터닝한 후, 초순수로 세척하고 UV 오존 처리를 10분간 실시하였다. 그 후, 100Å 두께로 HAT-CN을 증착하고, α-NPD를 두께 800Å로 증착하고, mCP를 50Å 두께로 증착하여 정공 수송 영역을 형성하였다.

[0218] 다음으로, 발광층 형성시 일 실시예의 다환 화합물 또는 비교예 화합물과 DPEPO를 6:94의 비율로 공증착하여 두께 200Å의 층을 형성하였다. 다음으로 DPEPO를 이용하여 100Å 두께의 층을 형성하였다. 즉, 공증착하여 형성된 발광층은 실시예 1 내지 실시예 3에서는 각각 화합물 A-1, A-2 및 A-3을 DPEPO와 혼합하여 증착하였고, 비교예 1 내지 비교예 4에서는 비교예 화합물 X-1, X-2, X-3, X-4 및 X-5를 DPEPO와 혼합하여 증착하였다.

[0219] 발광층 상에 TPBi로 두께 300Å의 층을 형성하고, LiF로 두께 5Å의 층을 형성하여 전자 수송 영역을 형성하였다. 다음으로, 알루미늄(Al)으로 두께 1000Å의 제2 전극을 형성하였다.

[0220] 실시예에서, 정공 수송 영역, 발광층, 전자 수송 영역, 및 제2 전극은 진공 증착 장치를 이용하여 형성하였다.

[0221] (유기 전계 발광 소자의 특성 평가)

[0222] 실시예 및 비교예에 따른 유기 전계 발광 소자의 특성을 평가하기 위하여 최대 발광 파장(nm) 및 외부 외부 양자 효율(%)을 측정하였다. 하마마츠 포토닉스 제 C9920-11 휘도 배향 특성 측정 장치를 이용하여 측정하였다.

표 1

[0223]

구분	발광층 도펀트	반치폭	$k_{RISC} (s^{-1})$	소자 수명
실시예 1	A-1	55nm	$5.1 \times 10^4$	147 %
실시예 2	A-2	65nm	$4.3 \times 10^4$	138 %
실시예 3	A-3	58nm	$3.9 \times 10^4$	135 %
비교예 1	비교예 화합물 X-1	28nm	$9.9 \times 10^3$	100 %
비교예 2	비교예 화합물 X-2	28nm	$1.4 \times 10^4$	118 %
비교예 3	비교예 화합물 X-3	40nm	$8.5 \times 10^3$	93%
비교예 4	비교예 화합물 X-4	23nm	$2.8 \times 10^4$	128%
비교예 5	비교예 화합물 X-5	30nm	$3.5 \times 10^4$	120%

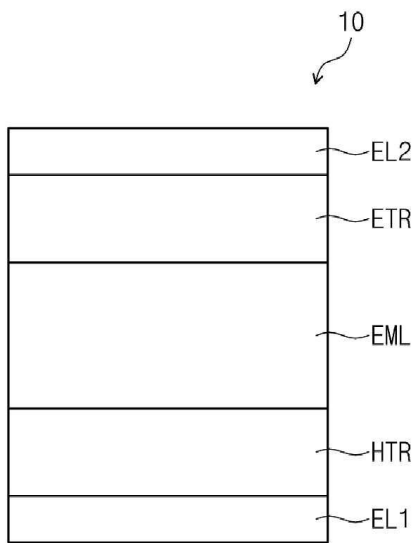
- [0224] 표 1을 참조하면, 일 실시예의 다환 화합물을 발광층의 도펀트 물질로 사용한 실시예 1 내지 실시예 3의 유기 전계 발광 소자는 비교예 1 내지 비교예 4와 비교하여 RISC 속도 정수( $k_{\text{RISC}}$ )가 큰 것을 알 수 있다. 또한, 일 실시예의 다환 화합물을 발광층의 도펀트 물질로 사용한 실시예 1 내지 실시예 4의 유기 전계 발광 소자는 비교예 1 내지 비교예 4와 비교하여 소자 수명이 향상되는 것을 확인할 수 있다.
- [0225] 실시예의 다환 화합물들은 30nm 내지 100nm의 반치폭, 바람직하게는 50nm 내지 70nm의 반치폭을 가져 분자 내에서 HOMO-LUMO의 전하가 분리된 구조를 취함으로써, RISC 속도가 향상되며, 소자의 수명을 향상시킬 수 있으므로 고효율의 열활성 지연 형광 재료로 사용될 수 있음을 확인할 수 있다.
- [0226] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자의 경우 상술한 일 실시예의 다환 화합물을 발광층에 포함하여 비교예에 비해 반치폭을 향상시키고, RISC 속도 정수( $k_{\text{RISC}}$ )를 높여, 소자의 장수명화가 가능해진다.
- [0227] 실시예와 비교하여, 비교예 화합물 X-1 및 X-2는 전자 공여부에 전자 수용부가 결합된 형태를 가지지 못한다. 따라서, 비교예 1 및 2의 유기 전계 발광 소자는 실시예들에 비하여 작은 반치폭을 가지며, RISC 속도 정수( $k_{\text{RISC}}$ )가 작으며, 소자의 수명이 상대적으로 낮게 나타났다.
- [0228] 비교예 3에 사용된 비교예 화합물 X-3은 피리딘기를 전자 수용부로 포함하고 있으나, 비교예 3의 유기 전계 발광 소자는 실시예들에 비하여 낮은 외부 양자 효율을 나타내었다. 이는 비교예 화합물 X-3이 O-B-O를 포함하는 전자 공여부를 포함하고 있어 다중공명효과가 발생하며, 분자 내 전자의 편재화가 잘 이루어지지 않은 것으로 판단된다.
- [0229] 비교예 4에 사용된 비교예 화합물 X-4는 N-B과 이루는 3개의 고리가축합되어 있는 형태이므로 비교예 4의 유기 전계 발광 소자는 실시예들에 비하여 작은 반치폭을 가지며, RISC 속도 정수( $k_{\text{RISC}}$ )가 작으며, 소자의 수명이 상대적으로 낮게 나타났다.
- [0230] 또한, 비교예 5의 유기 전계 발광 소자는 실시예들에 비하여 작은 반치폭을 가지며, RISC 속도 정수( $k_{\text{RISC}}$ )가 작으며, 소자의 수명이 상대적으로 낮게 나타났다. 이는 비교예 5에 사용된 비교예 화합물 X-5가 고리형 알킬기를 치환기로 포함하여 분자 내에서 전자 편재화가 잘 이루어지지 않은 것으로 판단된다.
- [0231] 이상에서는 본 발명의 바람직한 실시예를 참조하여 설명하였지만, 해당 기술 분야의 숙련된 당업자 또는 해당 기술 분야에 통상의 지식을 갖는 자라면, 후술될 특허청구범위에 기재된 본 발명의 사상 및 기술 영역으로부터 벗어나지 않는 범위 내에서 본 발명을 다양하게 수정 및 변경시킬 수 있음을 이해할 수 있을 것이다.
- [0232] 따라서, 본 발명의 기술적 범위는 명세서의 상세한 설명에 기재된 내용으로 한정되는 것이 아니라 특허청구범위에 의해 정하여져야만 할 것이다.

### 부호의 설명

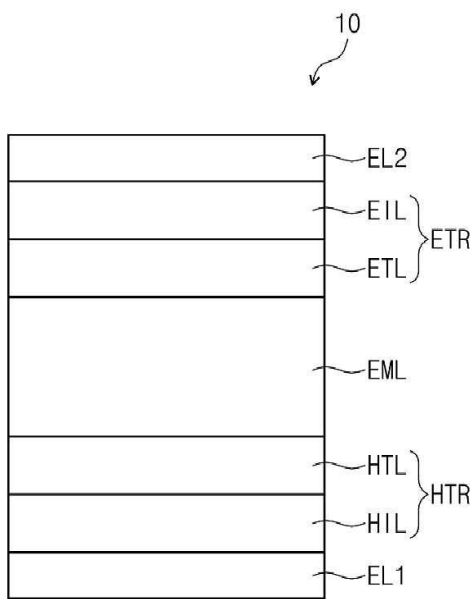
- [0233] 10 : 유기 전계 발광 소자                      EL1 : 제1 전극  
 EL2 : 제2 전극                                      HTR : 정공 수송 영역  
 EML : 발광층                                      ETR : 전자 수송 영역

도면

도면1



도면2





도면3

