



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0126559
(43) 공개일자 2017년11월20일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C07D 311/78 (2006.01) C07C 13/62 (2006.01)
C07C 211/54 (2006.01) C07D 209/56 (2006.01)
C07D 219/02 (2006.01) C07D 307/77 (2006.01)
C07D 333/50 (2006.01) C07D 335/04 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C07D 311/78 (2013.01)
C07C 13/62 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2016-0056626

(22) 출원일자 2016년05월09일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

삼성디스플레이 주식회사

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(72) 발명자

이토이, 히로아키

일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와쵸
2-7 주식회사 삼성 요코하마 연구소내

미야케, 히데오

일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와쵸
2-7 주식회사 삼성 요코하마 연구소내

카와무라, 히사유키

일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와쵸
2-7 주식회사 삼성 요코하마 연구소내

(74) 대리인

특허법인 고려

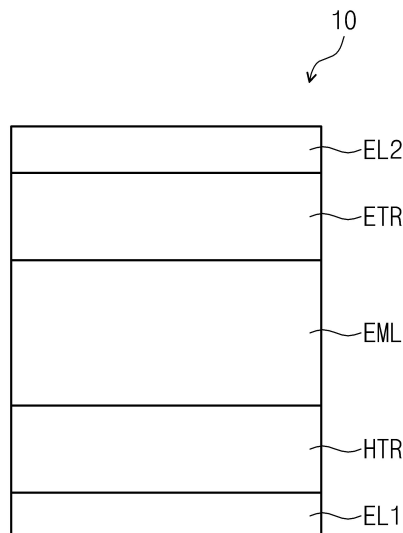
전체 청구항 수 : 총 20 항

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

(57) 요약

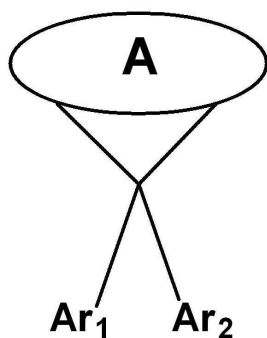
본 발명은 다환 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본 발명의 일 실시예에 따른 다환
(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



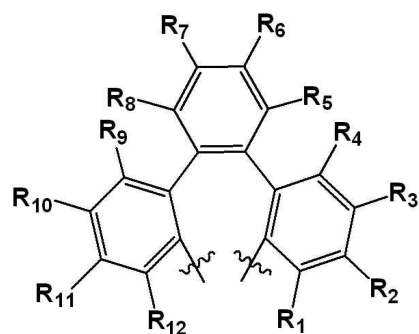
화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[화학식 1]

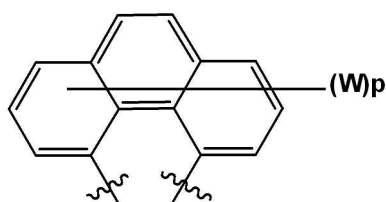


화학식 1에서, Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이거나, 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고, A 는 하기 화학식 2-1 또는 2-2로 표시된다.

[화학식 2-1]



[화학식 2-2]



(52) CPC특허분류

C07C 211/54 (2013.01)

C07D 209/56 (2013.01)

C07D 219/02 (2013.01)

C07D 307/77 (2013.01)

C07D 333/50 (2013.01)

C07D 335/04 (2013.01)

C09K 11/06 (2013.01)

H01L 51/0071 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

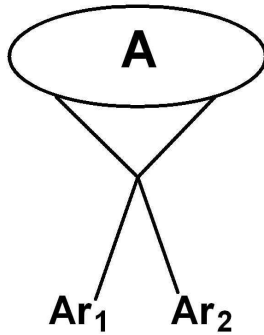
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물:

[화학식 1]



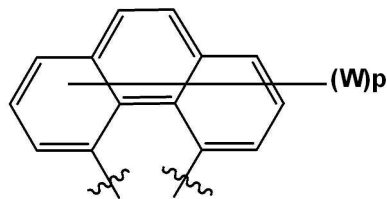
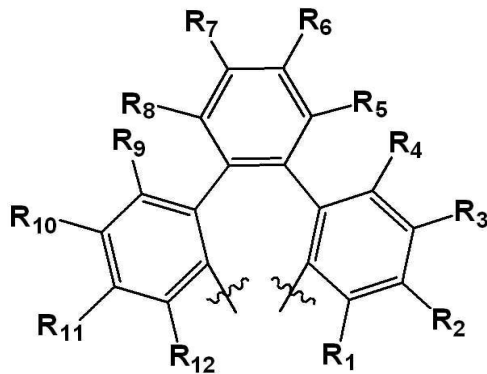
상기 화학식 1에서,

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이거나, 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

A는 하기 화학식 2-1 또는 2-2로 표시되며,

[화학식 2-1]

[화학식 2-2]



상기 화학식 2-1에서,

R₁ 내지 R₁₂는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이거나, 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

상기 화학식 2-2에서,

W는 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 60 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로 아릴기이며,

p는 0 이상 8 이하의 정수이고,

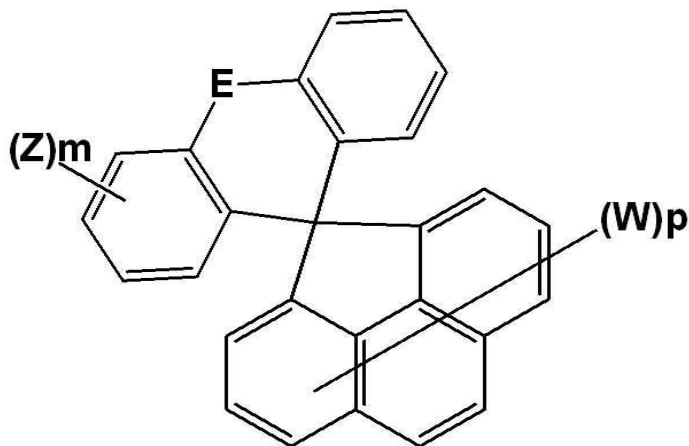
p가 2 이상인 경우, 복수의 W는 서로 동일하거나 상이하다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에 있어서,

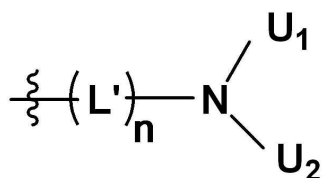
W 및 p는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하며,

E는 O, S 또는 NR'이고,

m은 0 또는 1이며,

Z 및 R'는 각각 독립적으로 하기 화학식 4로 표시되고,

[화학식 4]



상기 화학식 4에서,

U₁ 및 U₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고,

L'는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기이며,

n은 각각 독립적으로 0 또는 1이고,

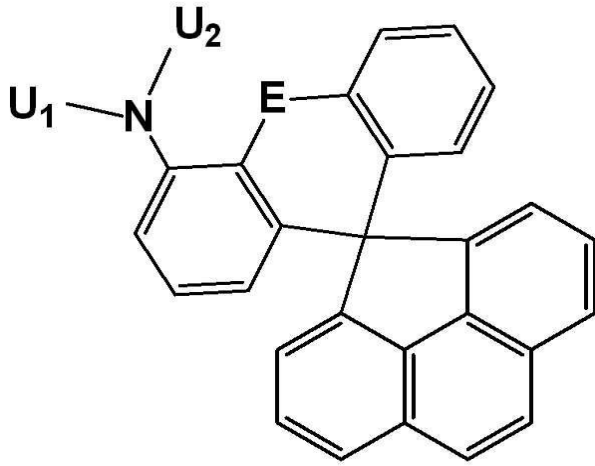
E가 NR'일 때, m은 0이고, E가 O 또는 S일 때, m은 1이다.

청구항 3

제2항에 있어서,

상기 화학식 3은 하기 화학식 5로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 5]



상기 화학식 5에서,

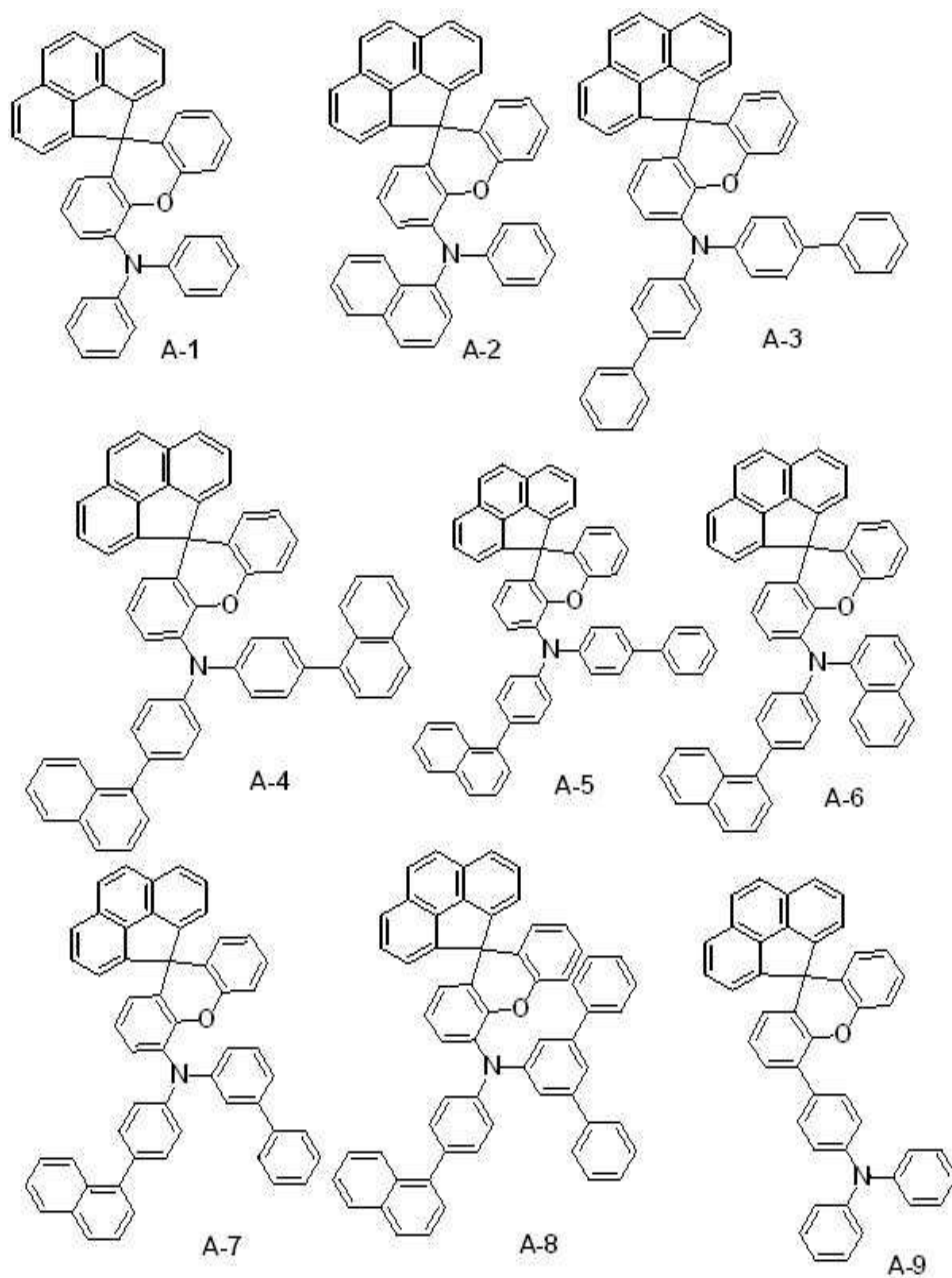
E, U₁ 및 U₂는 청구항 2에서 정의한 바와 동일하다.

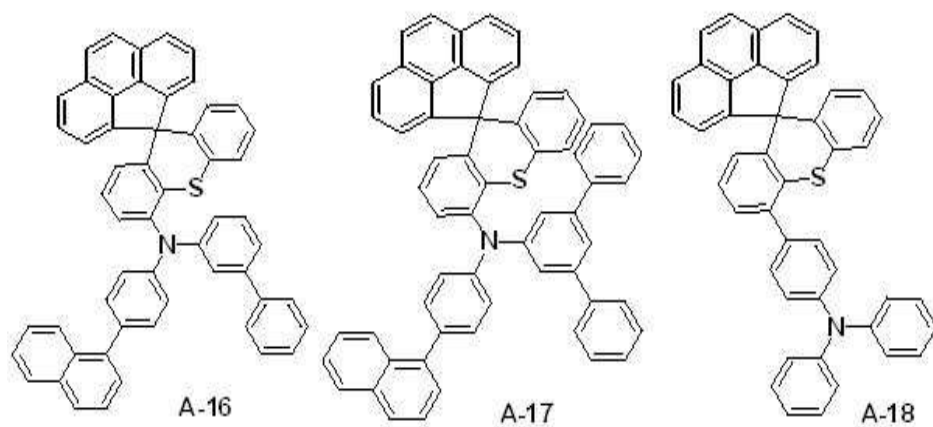
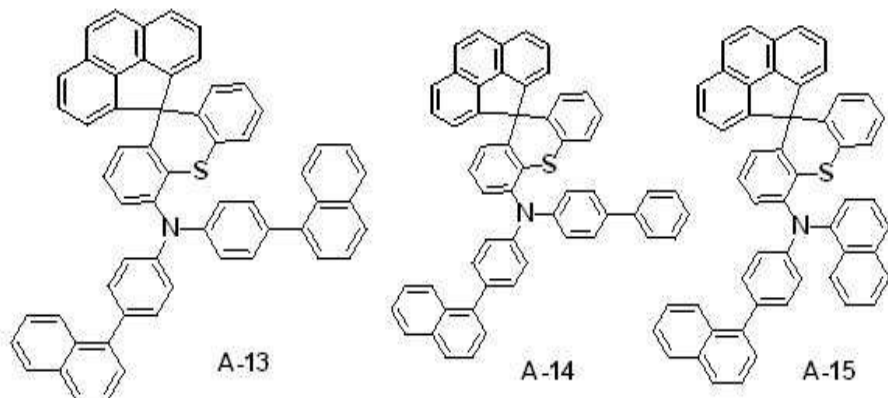
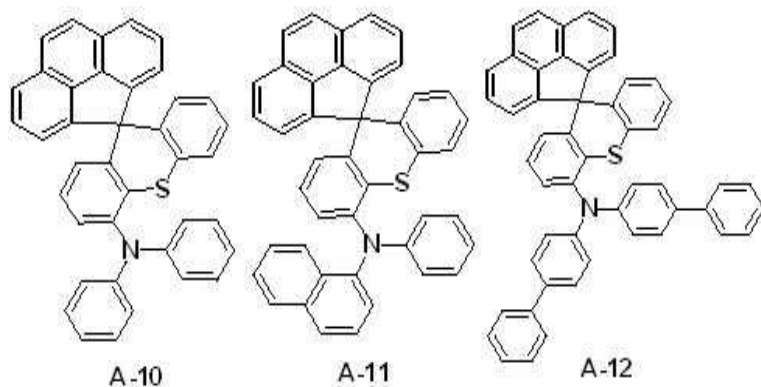
청구항 4

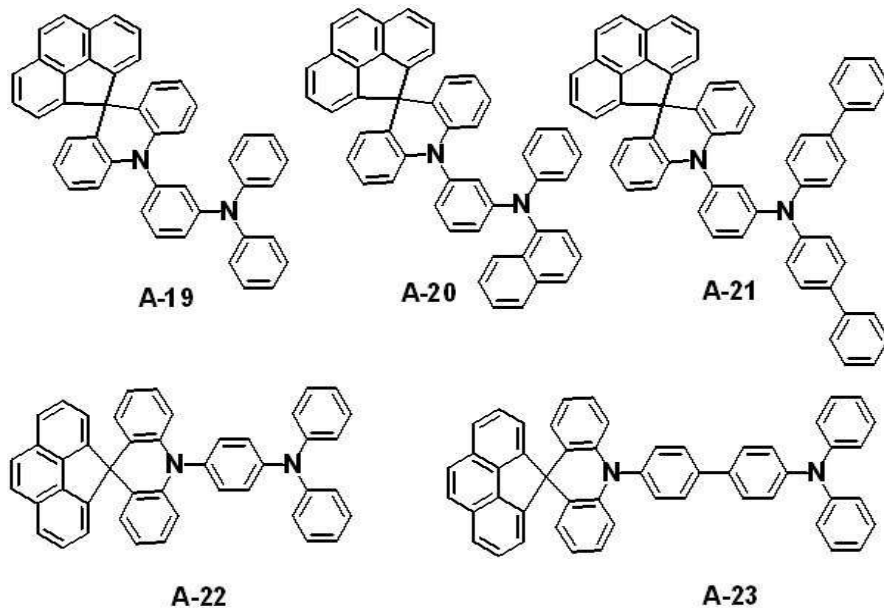
제1항에 있어서,

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

[화합물군 1]







청구항 5

제1항에 있어서,

A는 상기 화학식 2-1로 표시되고,

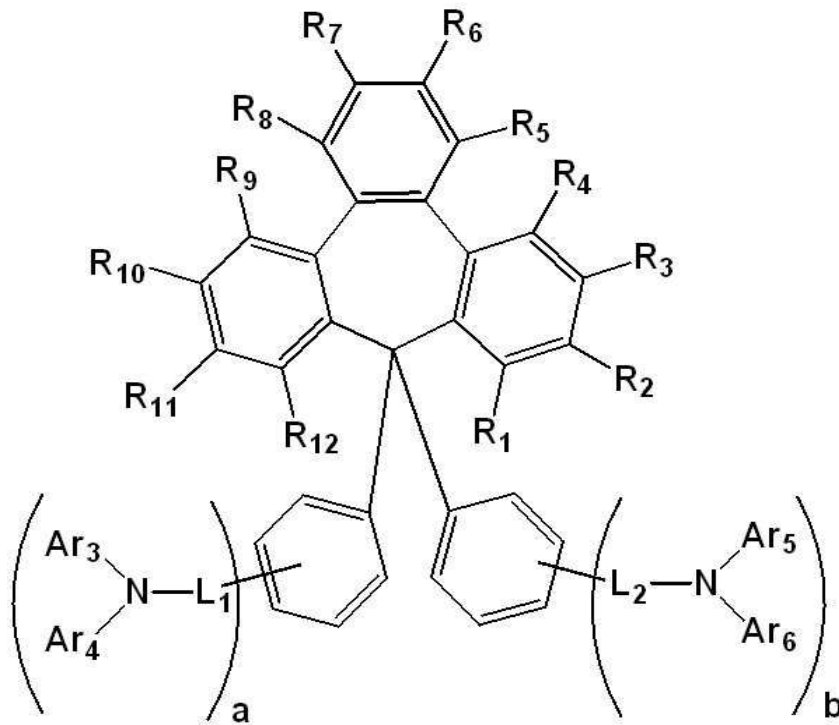
Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸기 또는 치환 또는 비치환된 피리딜기이거나, 서로 결합하여 고리를 형성하는 것인 다환 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 6으로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 6]



상기 화학식 6에서,

L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 직접 결합(direct linkage), 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴렌기이고,

Ar_3 내지 Ar_6 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이며,

a 및 b 는 각각 독립적으로 0 또는 1이고,

$a+b \neq 0$ 이며,

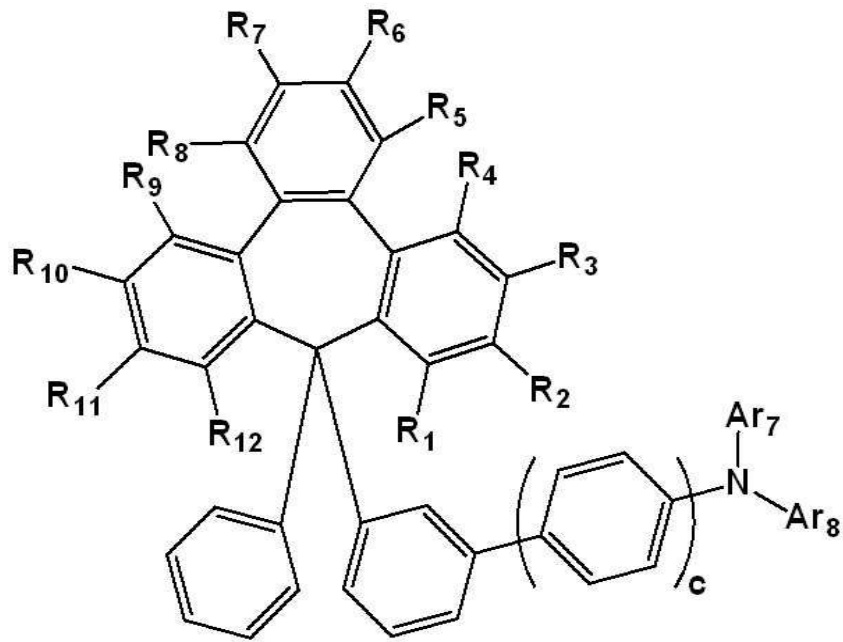
R_1 내지 R_{12} 는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 7로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 7]



상기 화학식 7에서,

Ar₇ 및 Ar₈은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고,

c는 0 또는 1 이며,

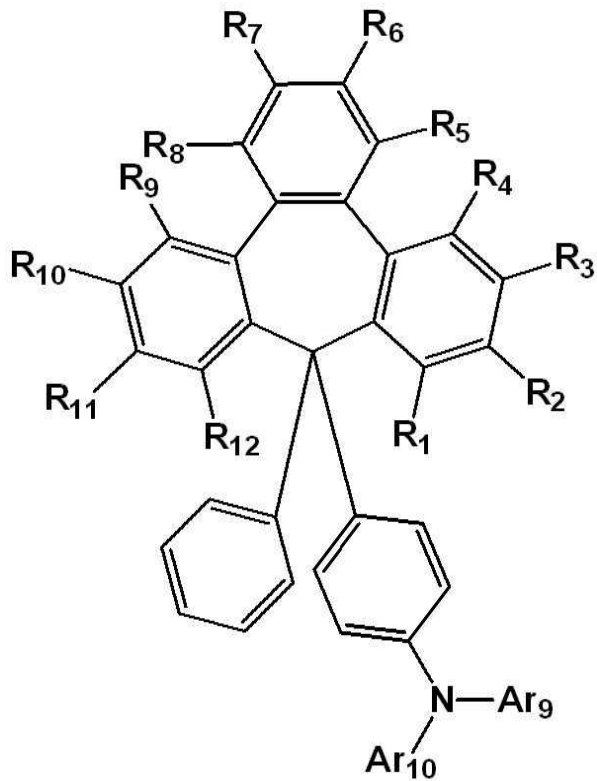
R₁ 내지 R₁₂는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 8로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 8]



상기 화학식 8에서,

Ar₉ 및 Ar₁₀은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고,

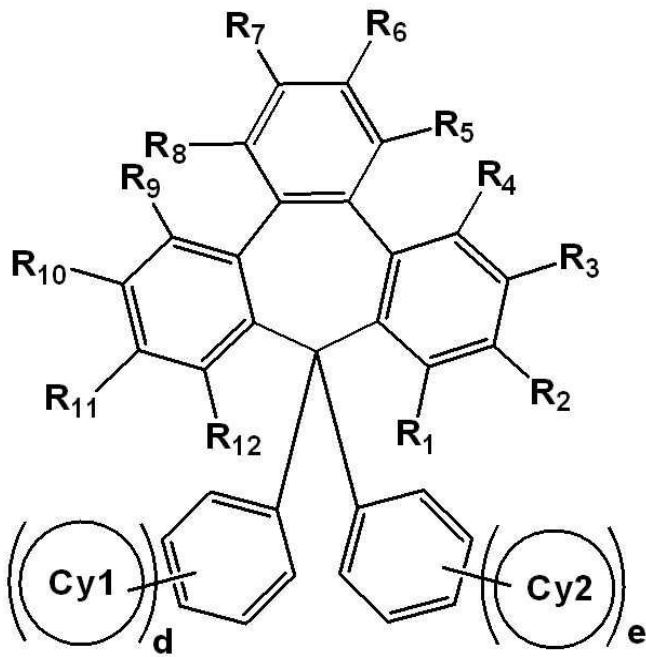
R₁ 내지 R₁₂는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 9로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 9]



상기 화학식 9에서,

Cy1 및 Cy2는 각각 독립적으로 이종 원소로 N을 1 이상 3 이하 포함하는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고,

d 및 e는 각각 독립적으로 0 또는 1이며,

$d+e \neq 0$ 이고,

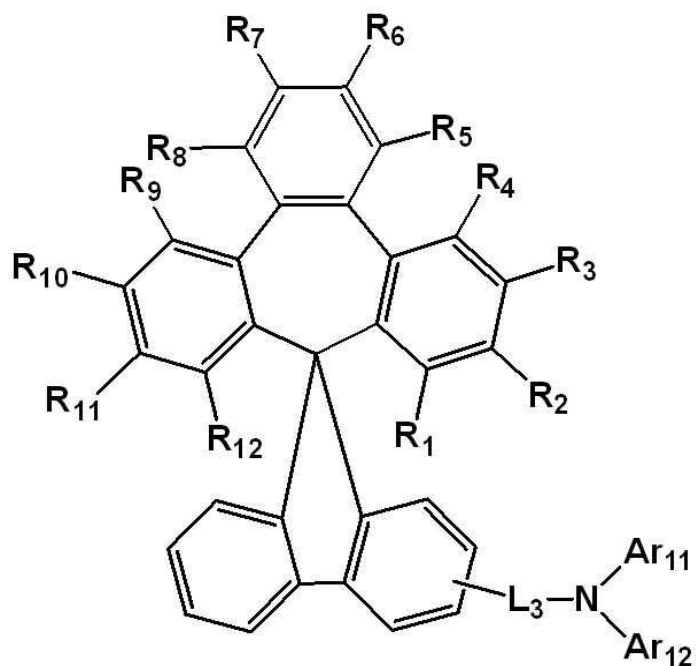
R₁ 내지 R₁₂는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 10

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 10으로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 10]



상기 화학식 10에서,

Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 각각 독립적으로 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고,

L_3 은 직접 결합, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴렌기이며,

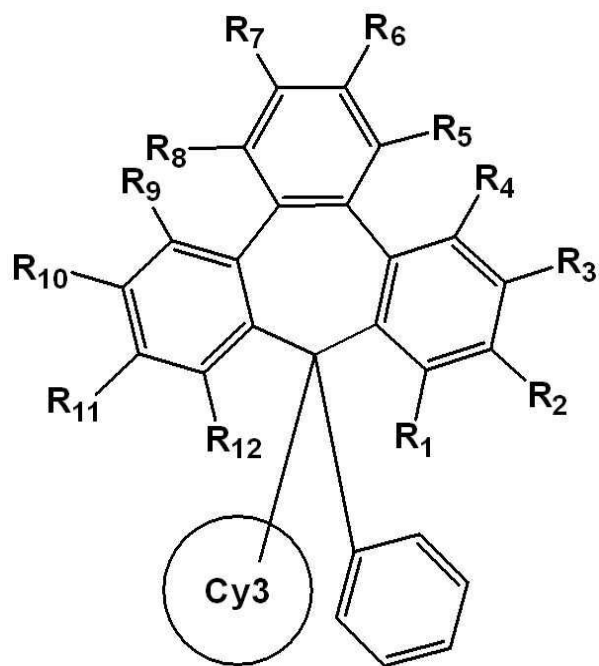
R_1 내지 R_{12} 는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 11

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 11로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 11]



상기 화학식 11에서,

Cy3은 치환 또는 비치환된 3환 또는 4환의 아틸기이고,

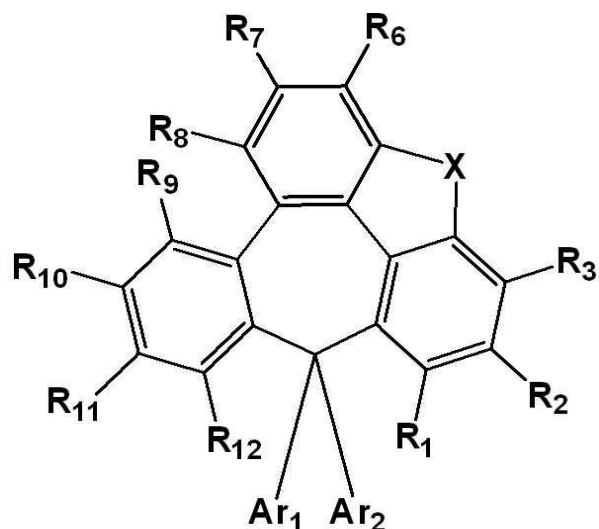
R₁ 내지 R₁₂는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 12

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 12로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 12]



상기 화학식 12에서,

X는 O, S, NR₁₃, CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고,

R₁₃ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸기 또는

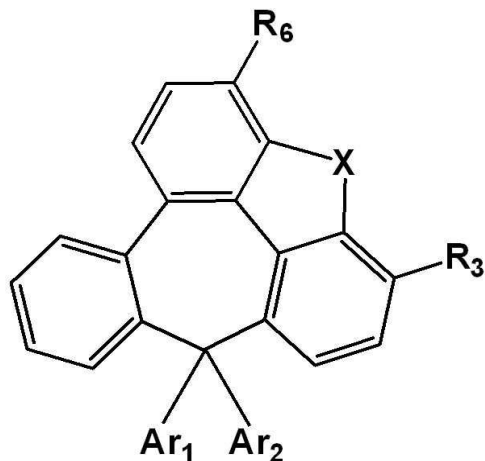
치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이며,
Ar₁, Ar₂, R₁ 내지 R₃ 및 R₆ 내지 R₁₂는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 13

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 13으로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 13]



상기 화학식 13에서,

X는 O, S, NR₁₃, CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고,

R₃ 및 R₆는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이며,

R₁₃ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고,

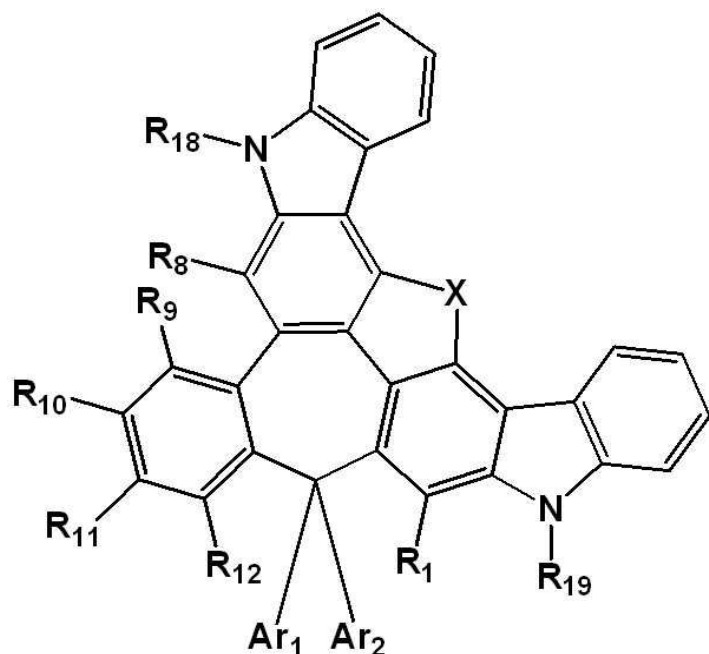
Ar₁ 및 Ar₂는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 14

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 14로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 14]



상기 화학식 14에서,

X는 O, S, NR₁₃, CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고,

R₁₃ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이며,

R₁₈ 및 R₁₉은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고,

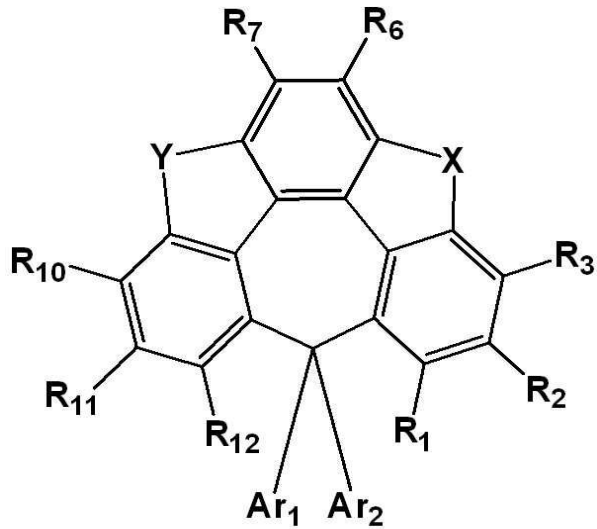
Ar₁, Ar₂, R₁ 및 R₈ 내지 R₁₂는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 15

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 15로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 15]



상기 화학식 15에서,

X는 O, S, NR₁₃, CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고,

Y는 O, S, NR₂₀ 또는 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기이며,

R₁₃ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고,

R₂₀은 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이며,

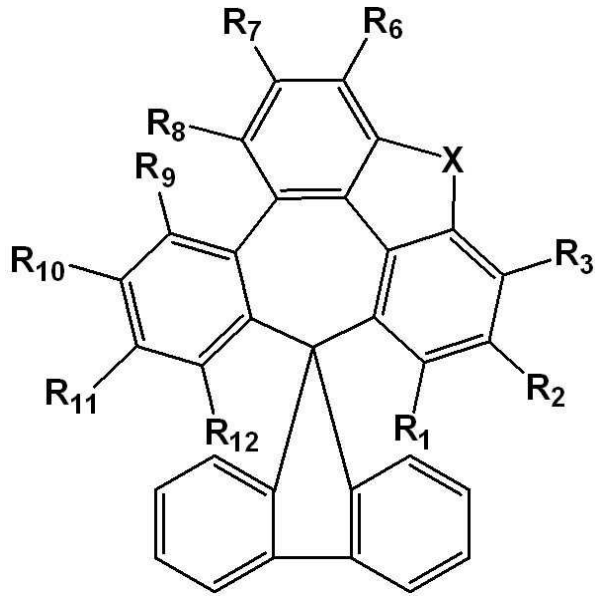
Ar₁, Ar₂, R₁ 내지 R₃, R₆, R₇ 및 R₁₀ 내지 R₁₂는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 16

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 16으로 표시되는 것인 다환 화합물:

[화학식 16]



상기 화학식 16에서,

X는 O, S, NR_{13} , $\text{CR}_{14}\text{R}_{15}$ 또는 $\text{SiR}_{16}\text{R}_{17}$ 이고,

R_{13} 내지 R_{17} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고,

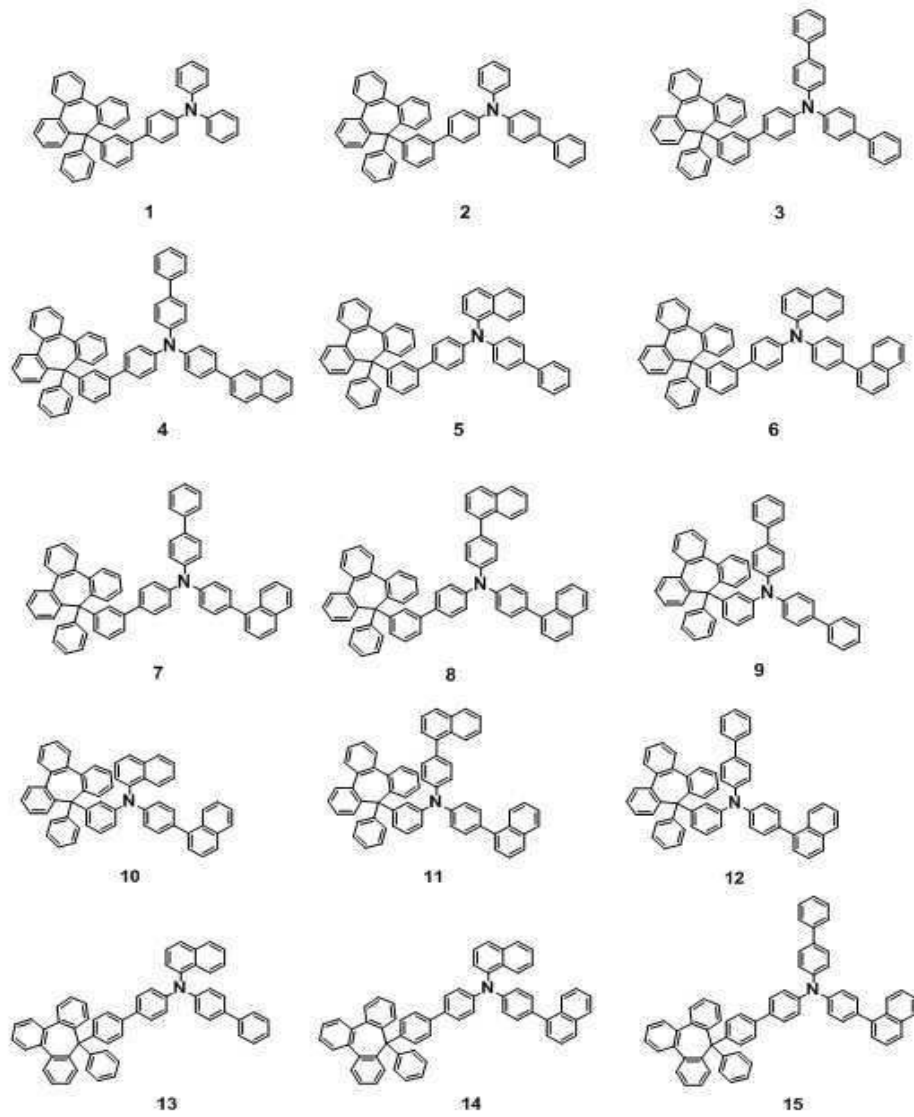
R_1 내지 R_3 및 R_6 내지 R_{12} 는 청구항 1에서 정의한 바와 동일하다.

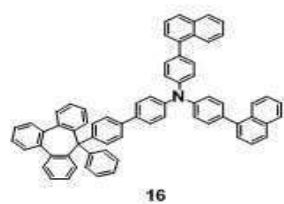
청구항 17

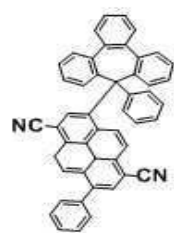
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 하기 화합물군 2 및 3에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나인 것인 다환 화합물:

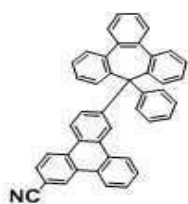
[화합물군 2]







31



32



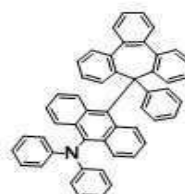
33



34



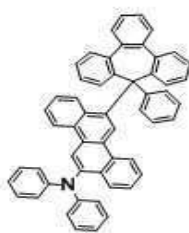
35



36



37



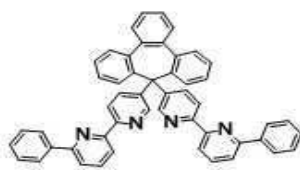
38



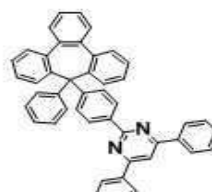
39



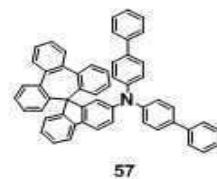
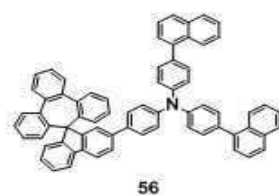
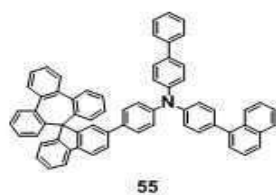
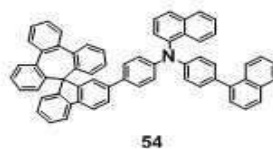
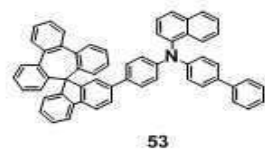
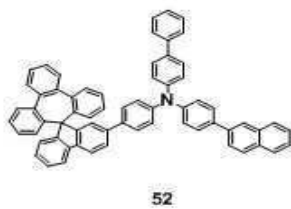
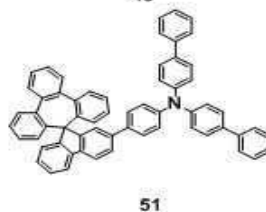
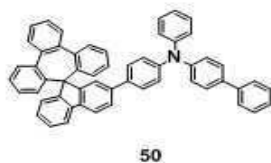
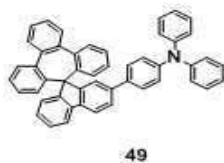
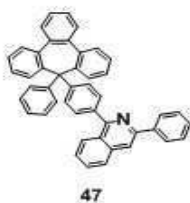
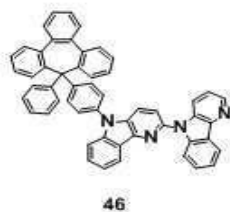
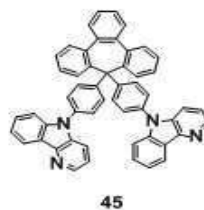
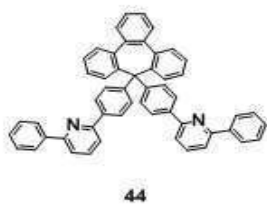
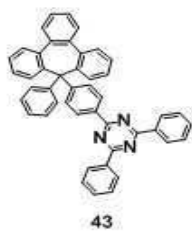
40

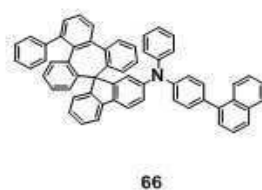
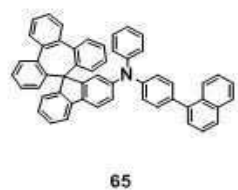
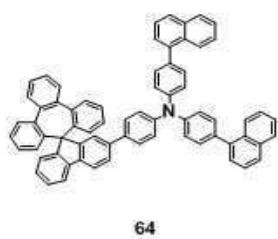
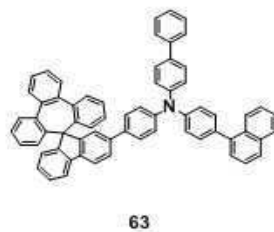
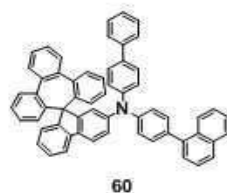
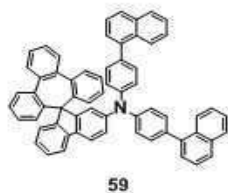
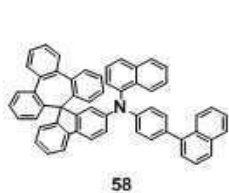


41

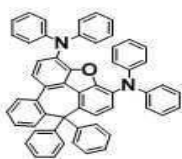


42

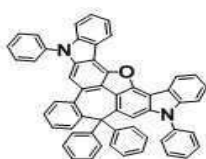




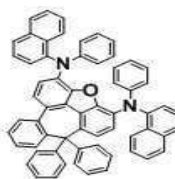
[화합물군 3]



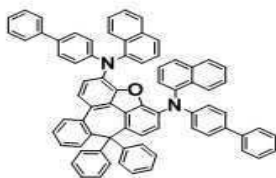
67



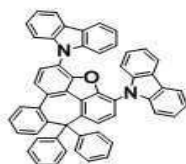
68



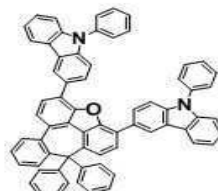
69



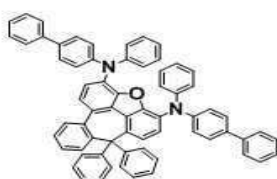
70



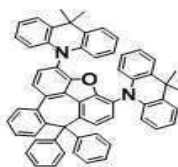
71



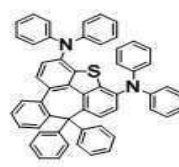
72



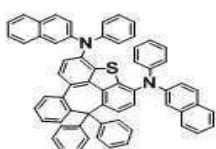
73



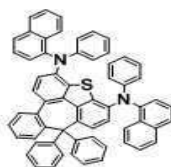
74



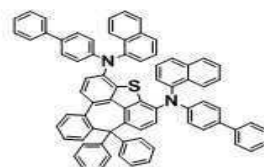
75



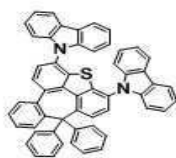
76



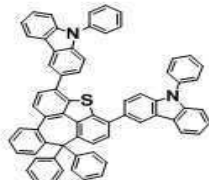
77



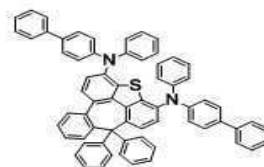
78



79



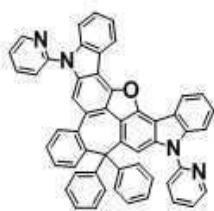
80



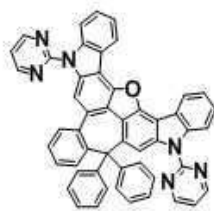
81



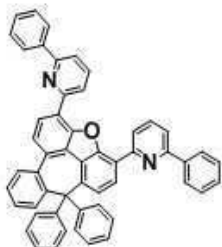
82



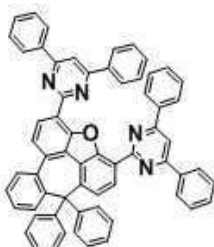
83



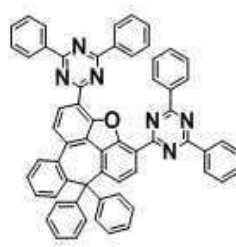
84



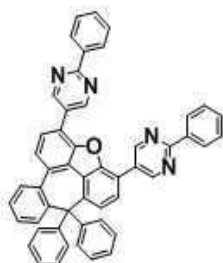
85



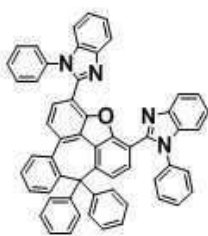
86



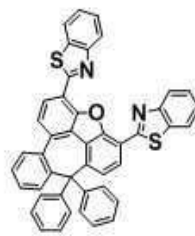
87



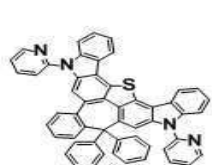
88



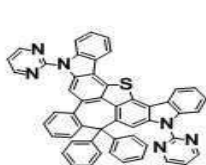
89



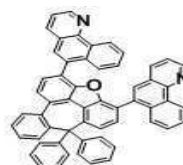
90



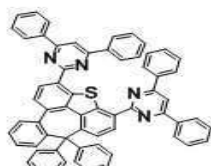
91



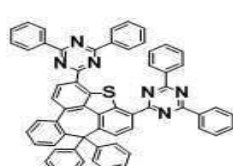
92



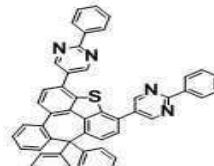
93



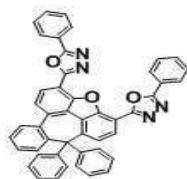
94



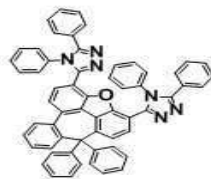
95



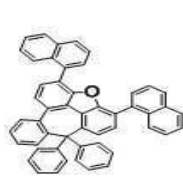
96



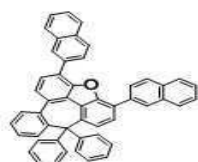
97



98



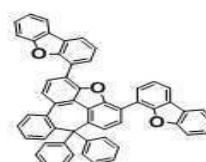
99



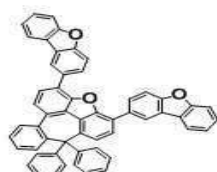
100



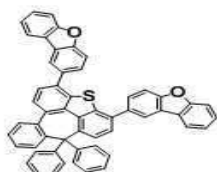
101



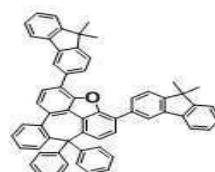
102



103



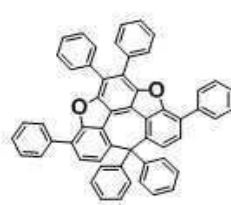
104



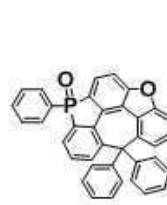
105



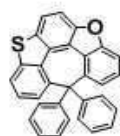
106



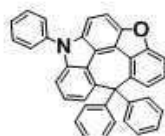
107



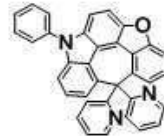
108



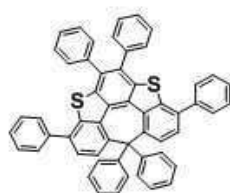
109



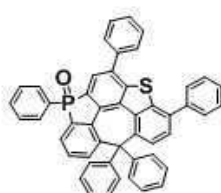
110



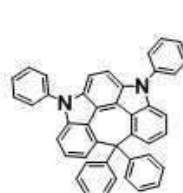
111



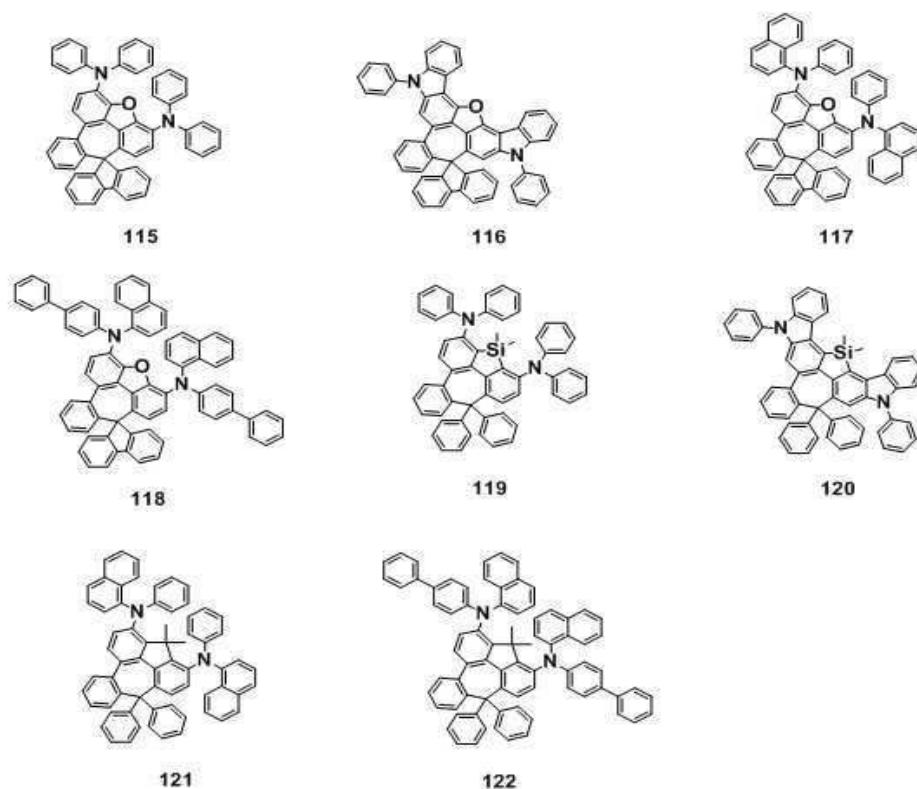
112



113



114



청구항 18

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역;

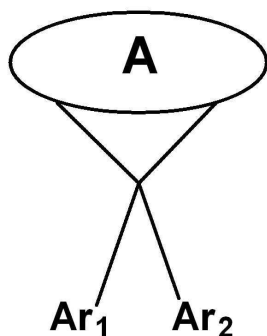
상기 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층;

상기 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고,

상기 정공 수송 영역 및 상기 발광층 중 적어도 하나는 하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자;

[화학식 1]

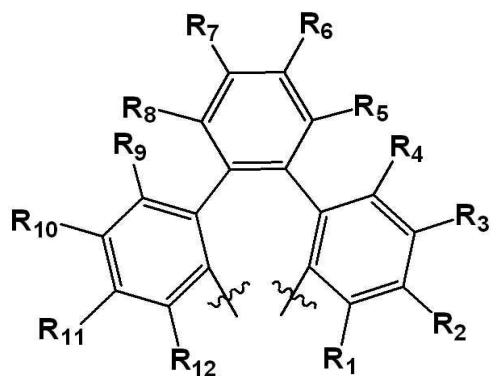


상기 화학식 1에서,

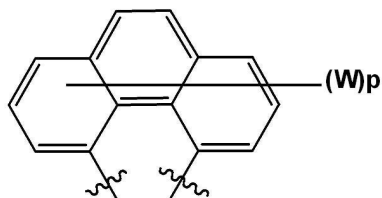
Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이거나, 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

A는 하기 화학식 2-1 또는 2-2로 표시되며,

[화학식 2-1]



[화학식 2-2]



상기 화학식 2-1에서,

R_1 내지 R_{12} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이거나, 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

상기 화학식 2-2에서,

W는 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 60 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로 아릴기이며,

p는 0 이상 8 이하의 정수이고,

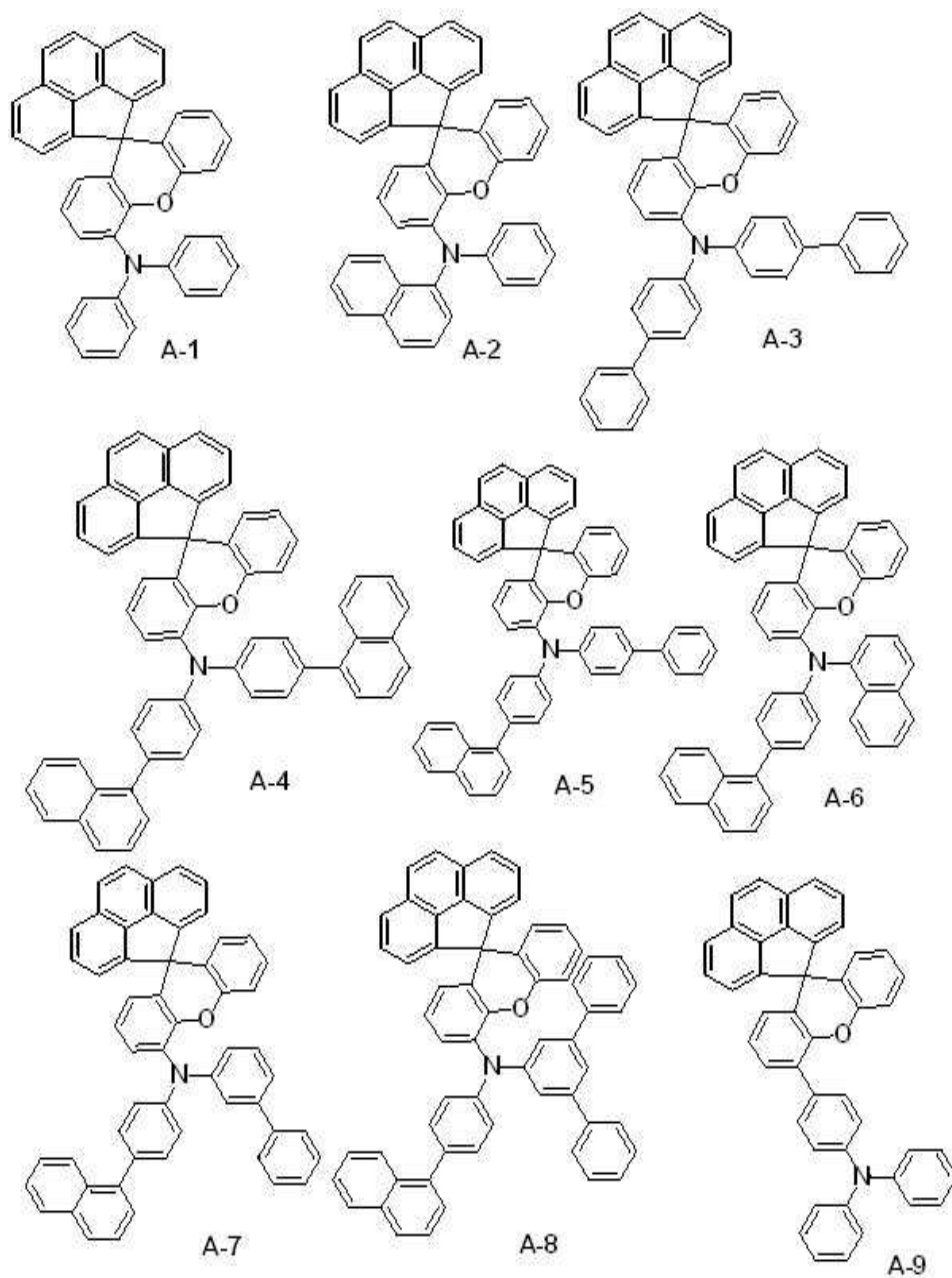
p가 2 이상인 경우, 복수의 W는 서로 동일하거나 상이하다.

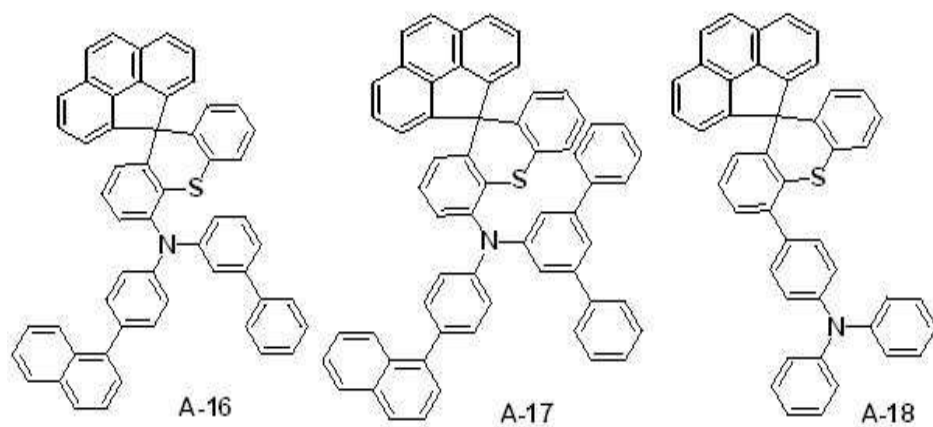
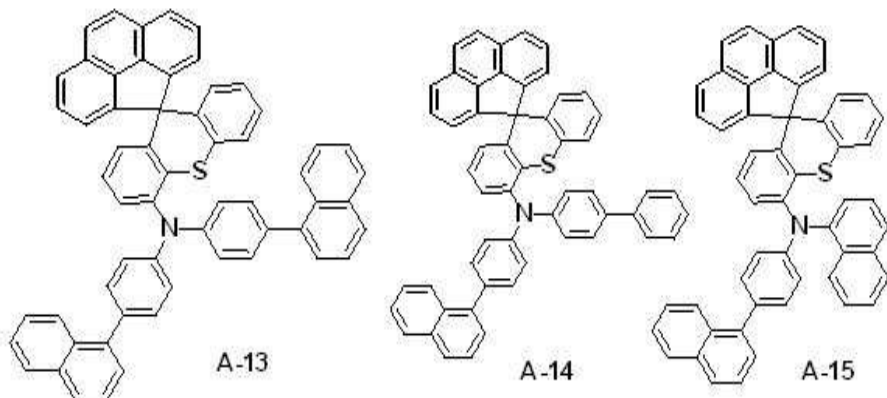
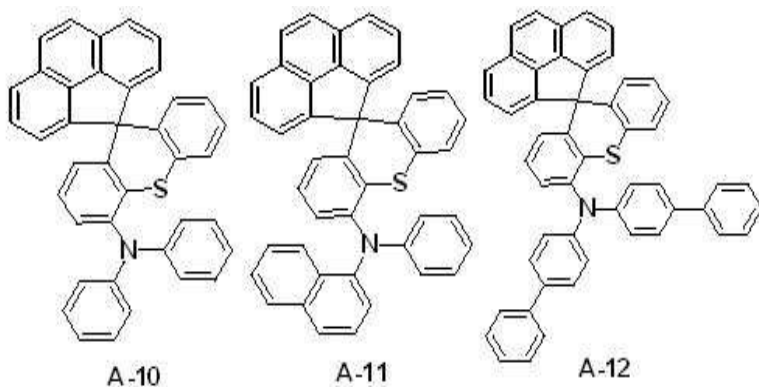
청구항 19

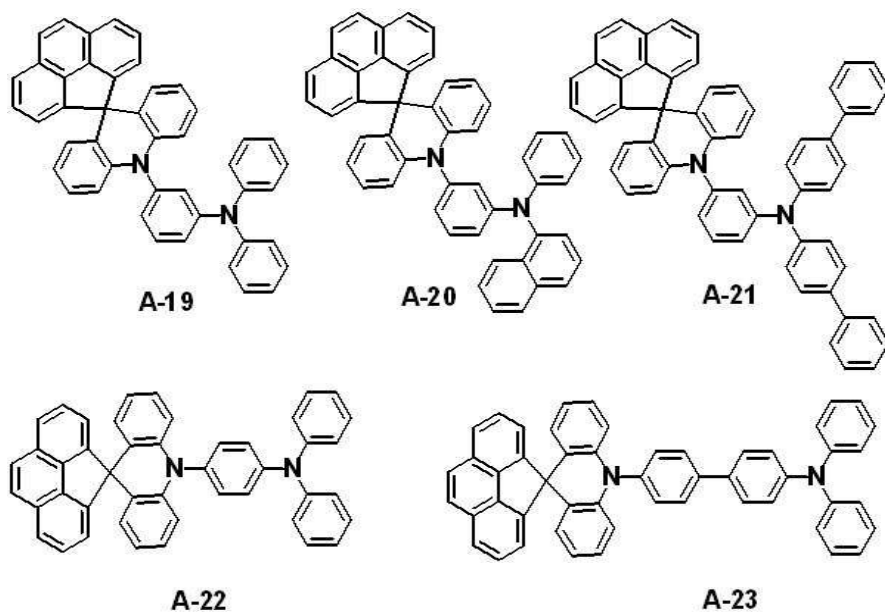
제18항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 하나인 것인 유기 전계 발광 소자:

[화합물군 1]





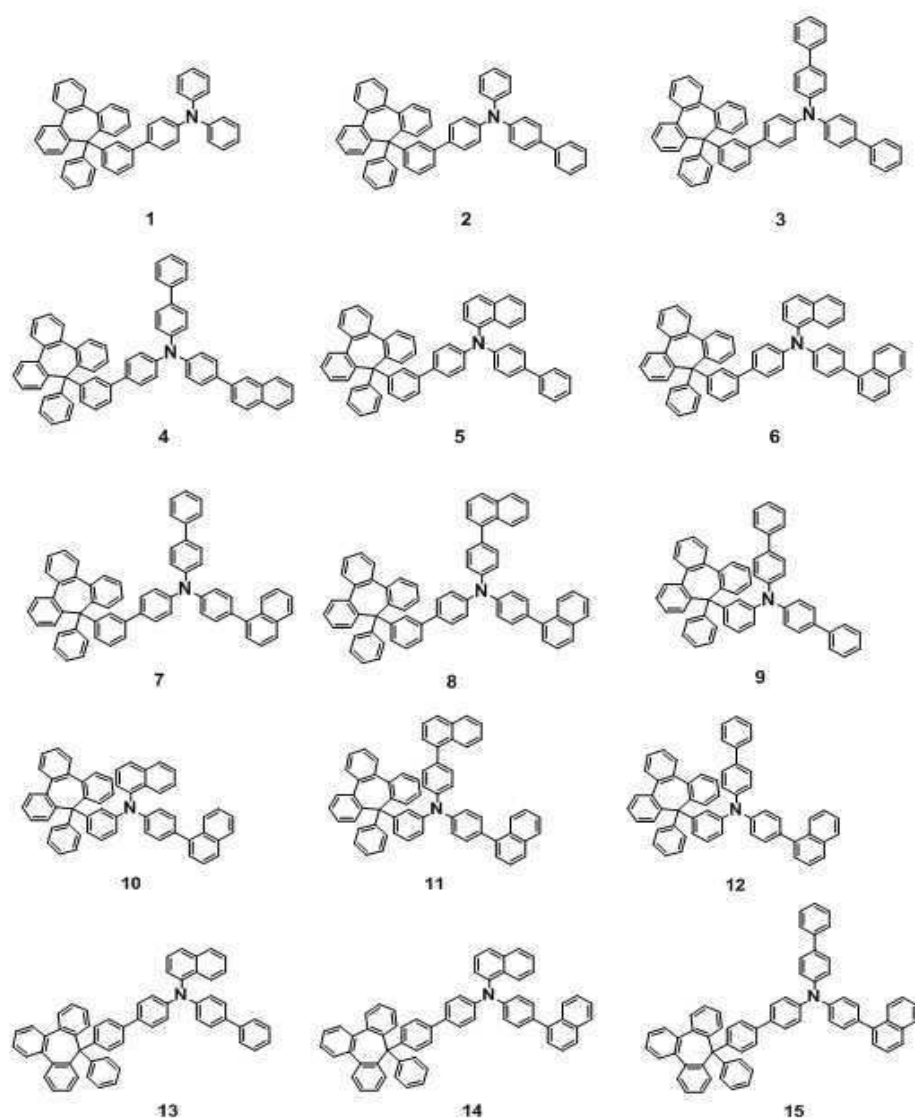


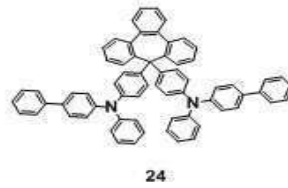
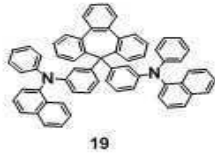
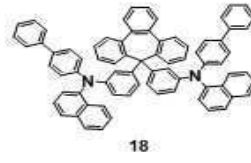
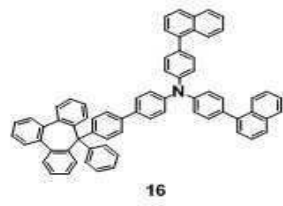
청구항 20

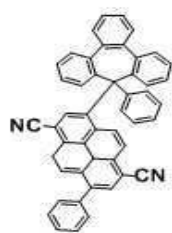
제18항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 하기 화합물군 2 및 3에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 하나인 것인 유기 전계 발광 소자:

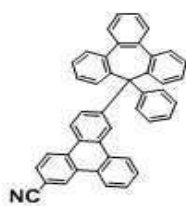
[화합물군 2]







31



32



33



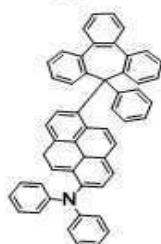
34



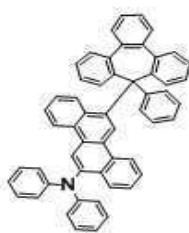
35



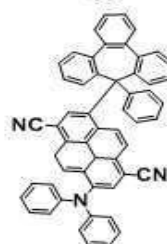
36



37



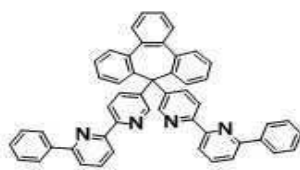
38



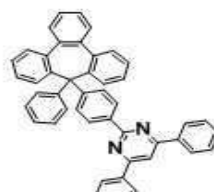
39



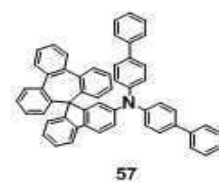
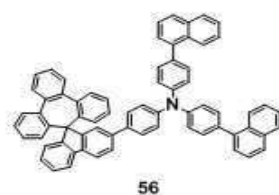
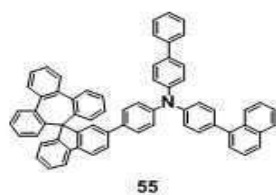
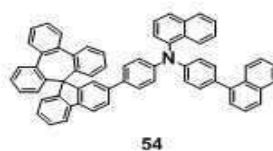
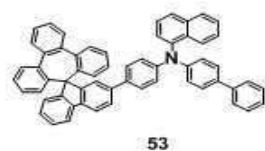
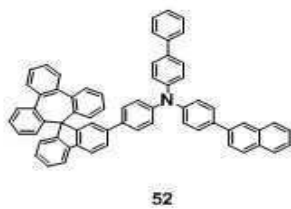
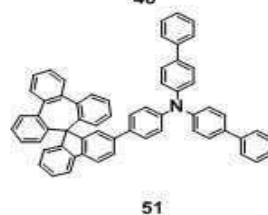
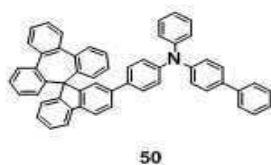
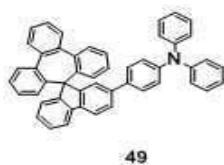
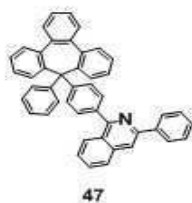
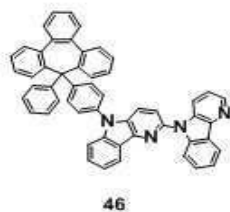
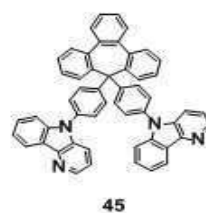
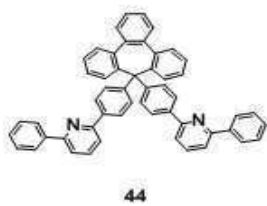
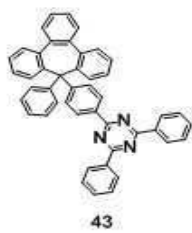
40

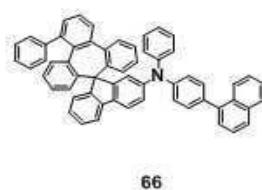
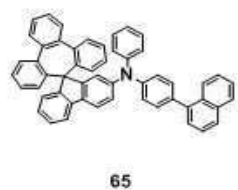
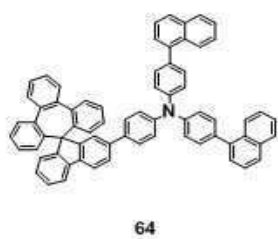
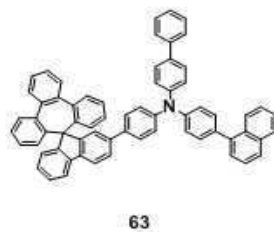
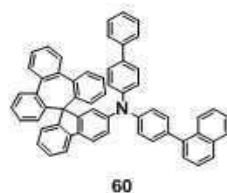
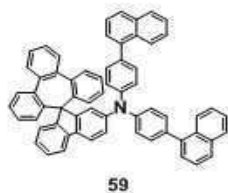
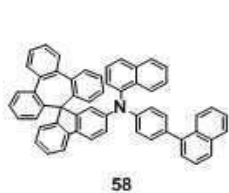


41

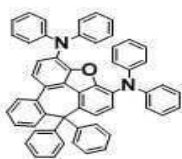


42

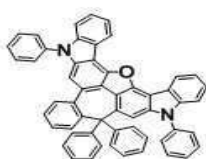




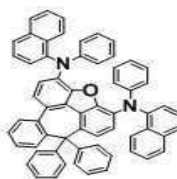
[화합물군 3]



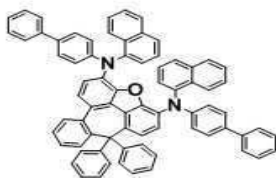
67



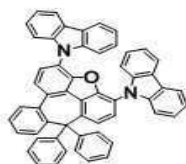
68



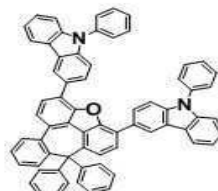
69



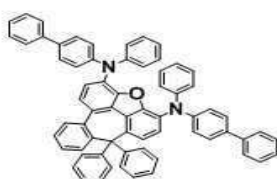
70



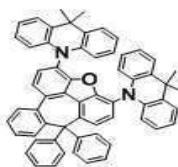
71



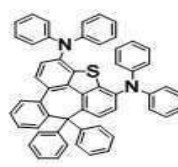
72



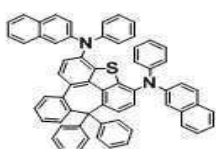
73



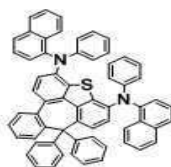
74



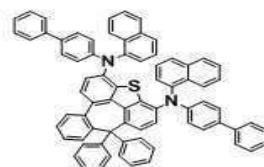
75



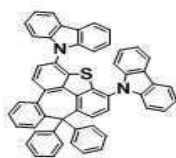
76



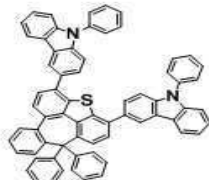
77



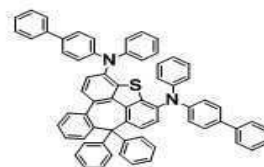
78



79



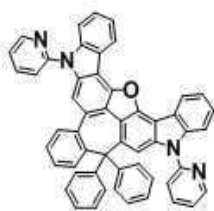
80



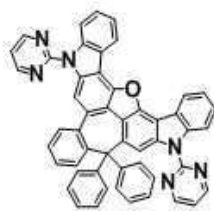
81



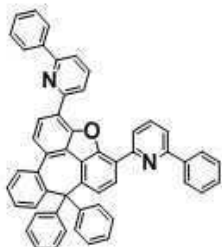
82



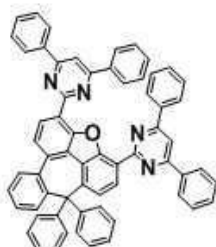
83



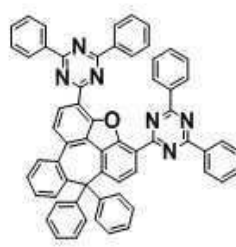
84



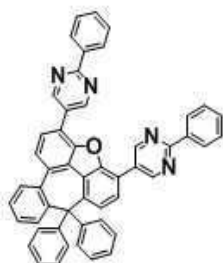
85



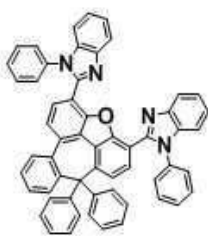
86



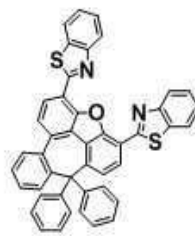
87



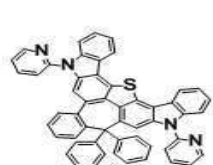
88



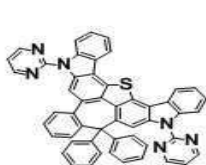
89



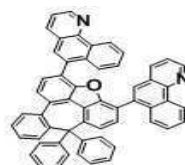
90



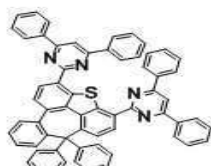
91



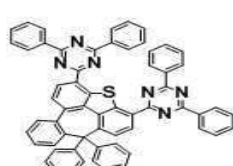
92



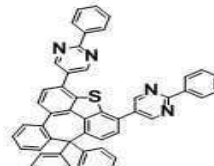
93



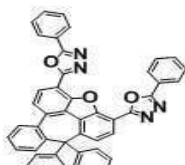
94



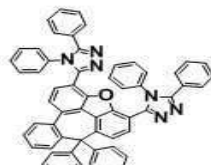
95



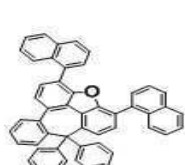
96



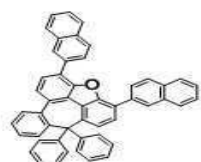
97



98



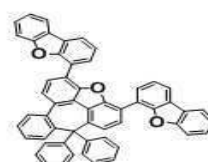
99



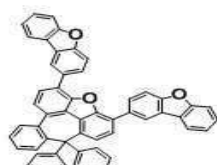
100



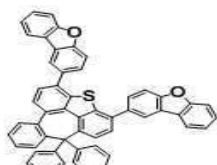
101



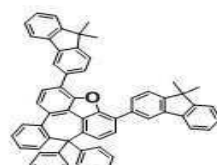
102



103



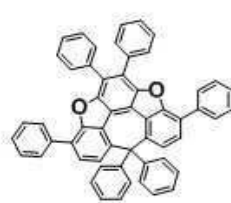
104



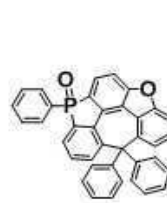
105



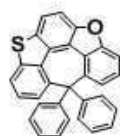
106



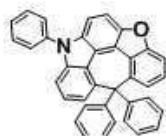
107



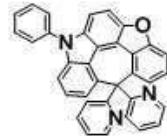
108



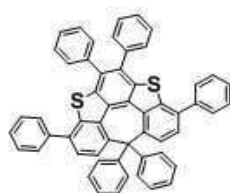
109



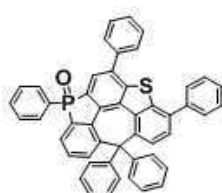
110



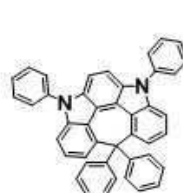
111



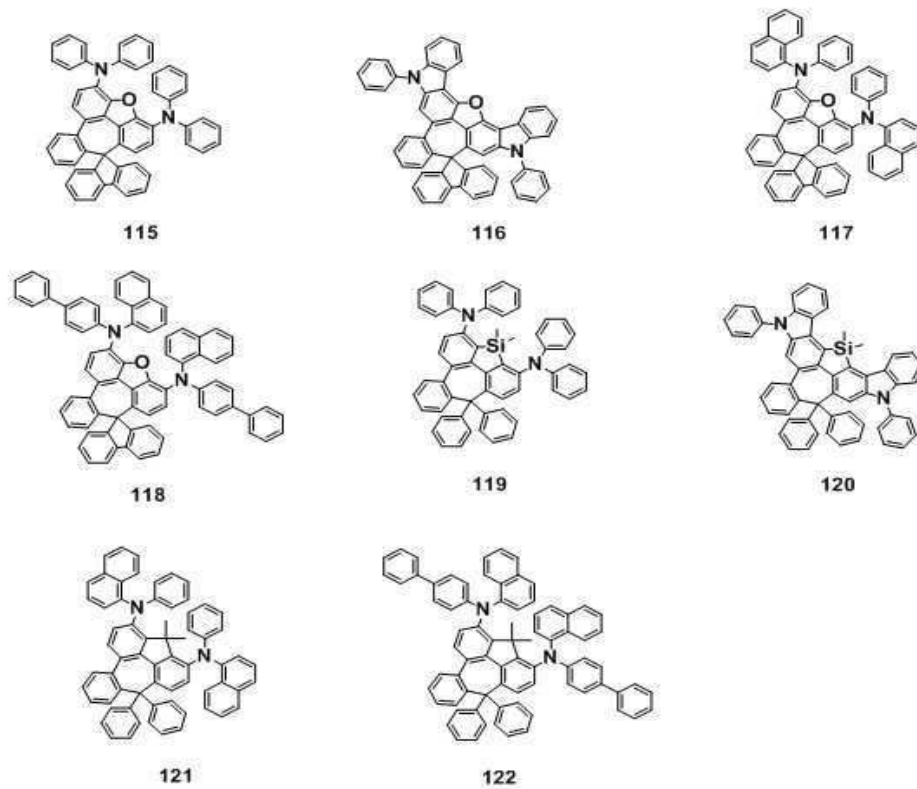
112



113



114



발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 다환 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 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 등과 는 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 소자로서는, 예를 들어, 제1 전극, 제1 전극 상에 배치된 정공 수송층, 정공 수송층 상에 배치된 발광층, 발광층 상에 배치된 전자 수송층 및 전자 수송층 상에 배치된 제2 전극으로 구성된 유기 소자가 알려져 있다. 제1 전극으로부터는 정공이 주입되고, 주입된 정공은 정공 수송층을 이동하여 발광층으로 주입된다. 한편, 제2 전극으로부터는 전자가 주입되고, 주입된 전자는 전자 수송층을 이동하여 발광층으로 주입된다. 발광층으로 주입된 정공과 전자가 재결합함으로써, 발광층 내에서 여기자가 생성된다. 유기 전계 발광 소자는 그 여기자의 복사 비활성에 의해 발생하는 광을 이용하여 발광한다. 또한, 유기 전계 발광 소자는 이상에 설명한 구성에 한정되지 않고, 여러 가지의 변형이 가능하다.

[0004] 유기 전계 발광 소자를 표시 장치에 응용함에 있어서, 유기 전계 발광 소자의 고 발광 효율화 및 장수명화가 요구되고 있으며, 이를 안정적으로 구현할 수 있는 유기 전계 발광 소자용 재료 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

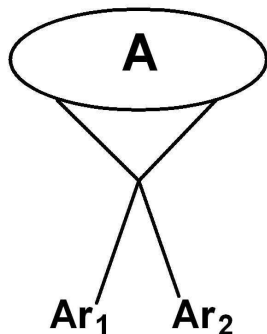
[0005] 본 발명은 다환 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다. 상세하게는, 본 발명은 발광 효율 및/또는 수명을 향상시킬 수 있는 다환 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공

하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

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

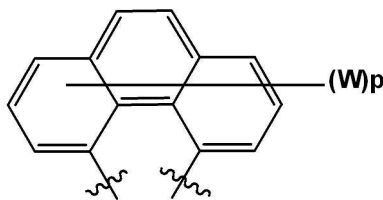
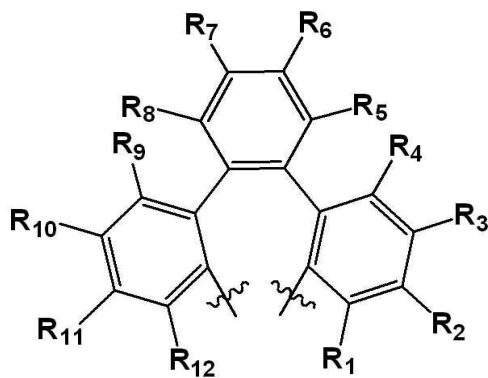
[화학식 1]



화학식 1에서, 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 헤테로 아릴기이거나, 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고, A는 하기 화학식 2-1 또는 2-2로 표시되며,

[화학식 2-1]

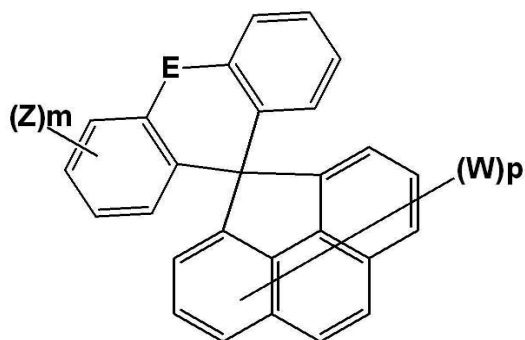
[화학식 2-2]



화학식 2-1에서, R_1 내지 R_{12} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이거나, 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고, 화학식 2-2에서, W는 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 60 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로 아릴기이며, p는 0 이상 8 이하의 정수이고, p가 2 이상인 경우, 복수의 W는 서로 동일하거나 상이하다.

화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시될 수 있다.

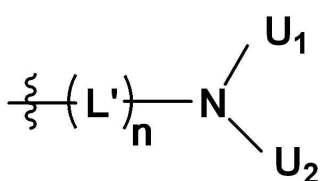
[0014] [화학식 3]



[0015]

[0016] 화학식 3에 있어서, W 및 p는 전술한 바와 동일하며, E는 O, S 또는 NR'이고, m은 0 또는 1이며, Z 및 R'는 각각 독립적으로 하기 화학식 4로 표시되고,

[0017] [화학식 4]

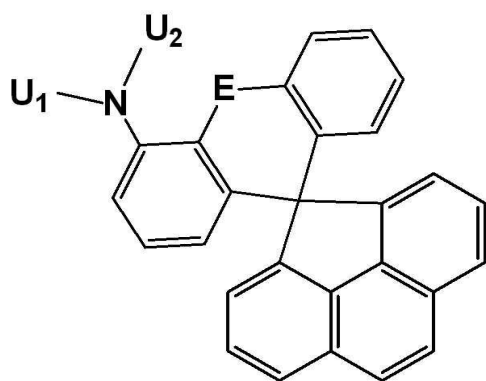


[0018]

[0019] 화학식 4에서, U₁ 및 U₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아틸기이고, L'는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸렌기이며, n은 각각 독립적으로 0 또는 1이고, E가 NR'일 때, m은 0이고, E가 O 또는 S일 때, m은 1이다.

[0020] 화학식 3은 하기 화학식 5로 표시될 수 있다.

[0021] [화학식 5]



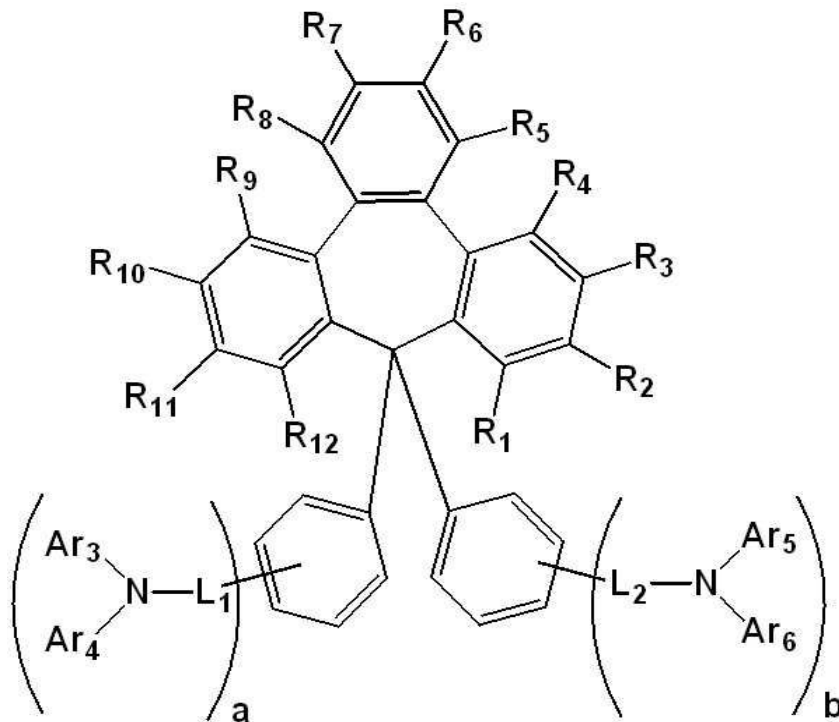
[0022]

[0023] 화학식 5에서, E, U₁ 및 U₂는 전술한 바와 동일하다.

[0024] 화학식 1에서 A는 화학식 2-1로 표시되고, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸기 또는 치환 또는 비치환된 피리딜기이거나, 서로 결합하여 고리를 형성하는 것일 수 있다.

[0025] 화학식 1은 하기 화학식 6으로 표시될 수 있다.

[0026] [화학식 6]

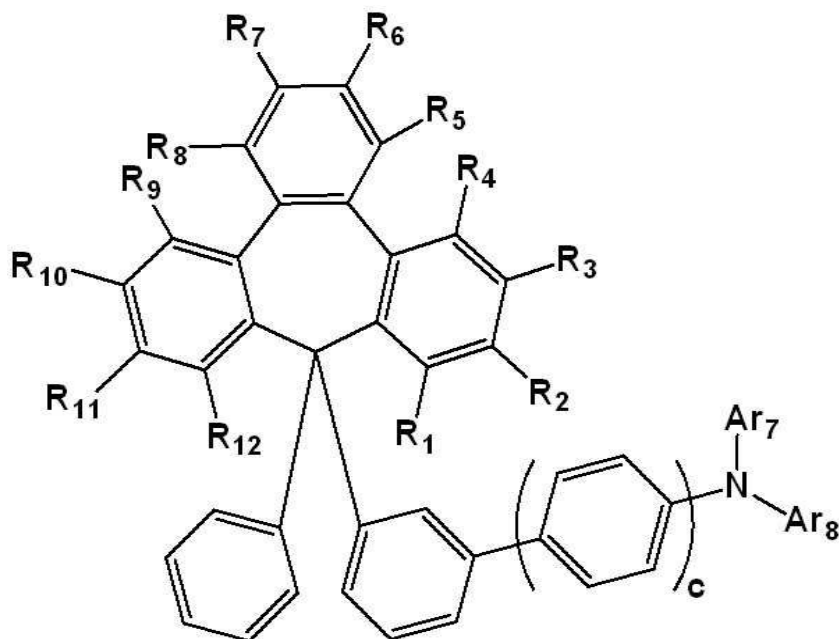


[0027]

[0028] 화학식 6에서, L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 직접 결합(direct linkage), 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아틸렌기이고, Ar_3 내지 Ar_6 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아틸기이며, a 및 b 는 각각 독립적으로 0 또는 1이고, $a+b \neq 0$ 이며, R_1 내지 R_{12} 는 전술한 바와 동일하다.

[0029] 화학식 1 은 하기 화학식 7로 표시될 수 있다.

[0030] [화학식 7]



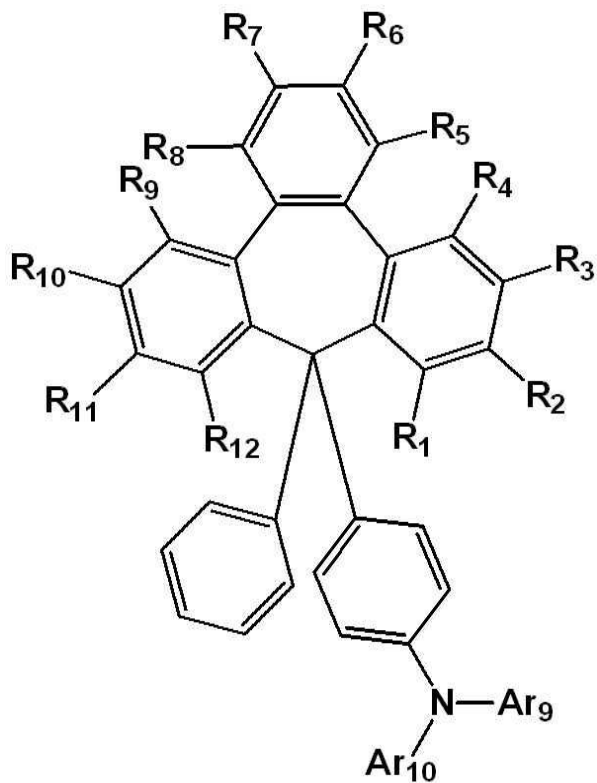
[0031]

[0032] 화학식 7에서, Ar_7 및 Ar_8 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아틸기이고, c 는 0 또는 1 이

며, R_1 내지 R_{12} 는 전술한 바와 동일하다.

[0033] 화학식 1은 하기 화학식 8로 표시될 수 있다.

[0034] [화학식 8]

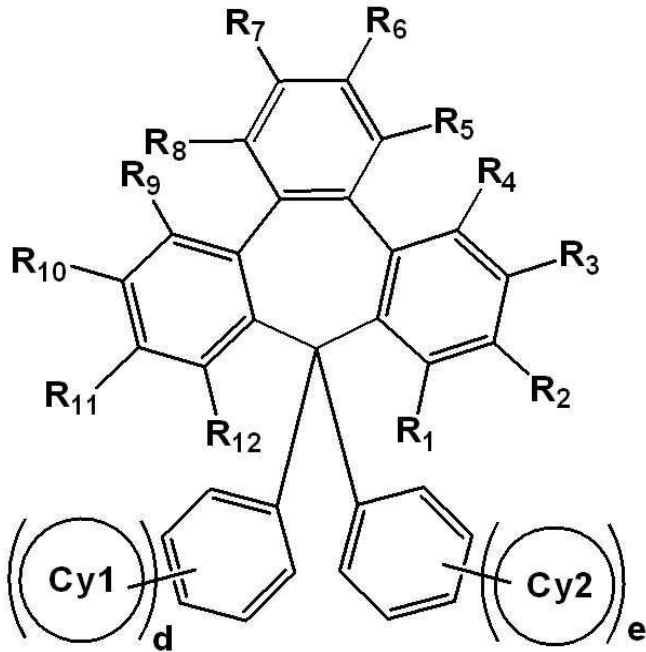


[0035]

[0036] 화학식 8에서, Ar_9 및 Ar_{10} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고, R_1 내지 R_{12} 는 전술한 바와 동일하다.

[0037] 화학식 1은 하기 화학식 9로 표시될 수 있다.

[0038] [화학식 9]



[0039]

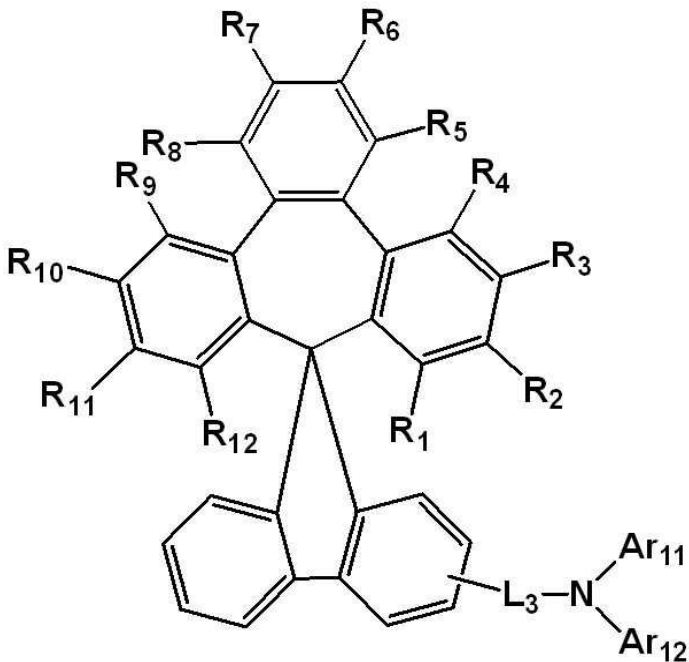
[0040] 화학식 9에서, Cy1 및 Cy2는 각각 독립적으로 이중 원자로 N을 1 이상 3 이하 포함하는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고, d 및 e는 각각 독립적으로 0 또는 1이며, d+e≠0이고, R₁ 내지 R₁₂는 전술한 바와 동일하다.

[0041]

화학식 1은 하기 화학식 10으로 표시될 수 있다.

[0042]

[화학식 10]

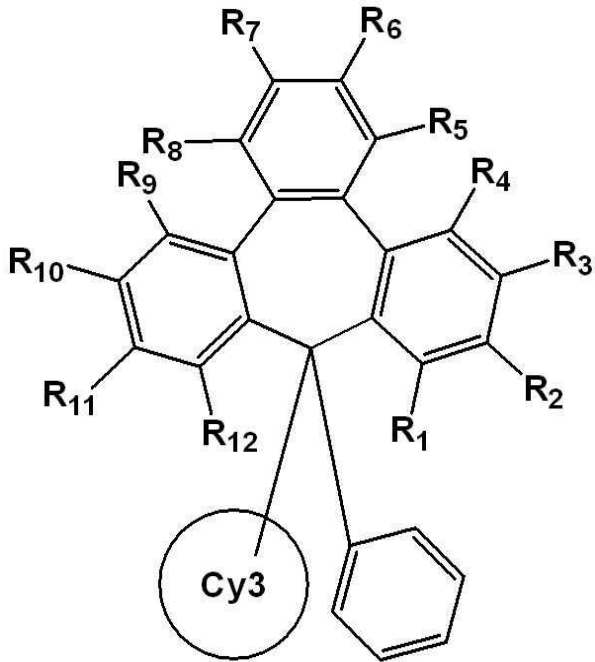


[0043]

[0044] 화학식 10에서, Ar₁₁ 및 Ar₁₂는 각각 독립적으로 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고, L₃은 직접 결합, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴렌기이며, R₁ 내지 R₁₂는 전술한 바와 동일하다.

[0045] 화학식 1은 하기 화학식 11로 표시될 수 있다.

[0046] [화학식 11]

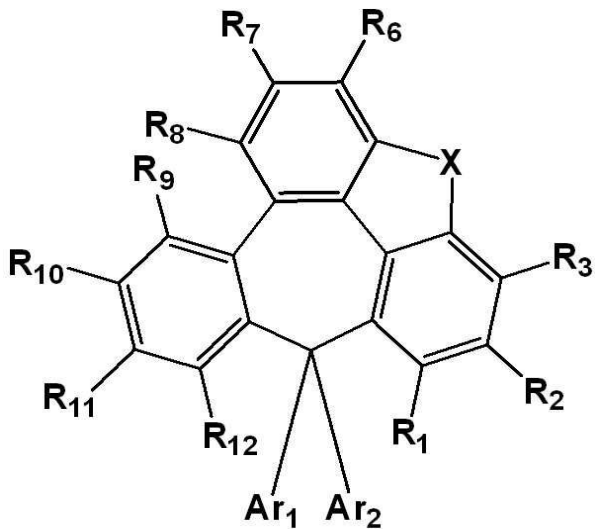


[0047]

[0048] 화학식 11에서, Cy3은 치환 또는 비치환된 3환 또는 4환의 아틸기이고, R₁ 내지 R₁₂는 전술한 바와 동일하다.

[0049] 화학식 1은 하기 화학식 12로 표시될 수 있다.

[0050] [화학식 12]

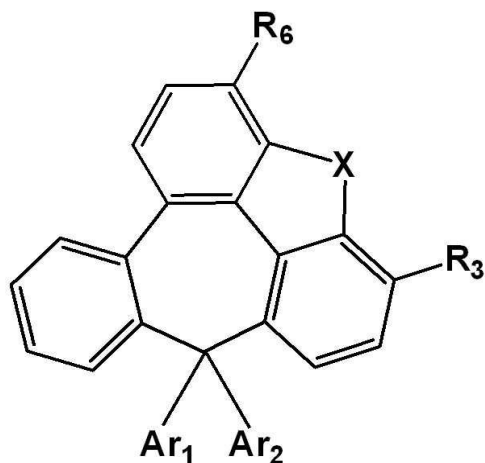


[0051]

[0052] 화학식 12에서, X는 O, S, NR₁₃, CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고, R₁₃ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠 기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아틸기이며, Ar₁, Ar₂, R₁ 내지 R₃ 및 R₆ 내지 R₁₂는 전술한 바와 동일하다.

[0053] 화학식 1은 하기 화학식 13으로 표시될 수 있다.

[0054] [화학식 13]

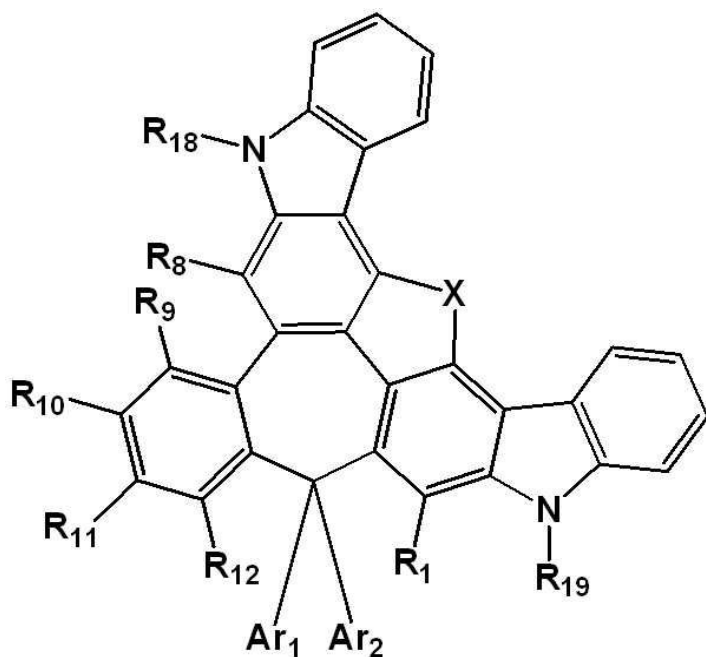


[0055]

[0056] 화학식 13에서, X는 O, S, NR₁₃, CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고, R₃ 및 R₆는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이며, R₁₃ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고, Ar₁ 및 Ar₂는 전술한 바와 동일하다.

[0057] 화학식 1은 하기 화학식 14로 표시될 수 있다.

[0058] [화학식 14]

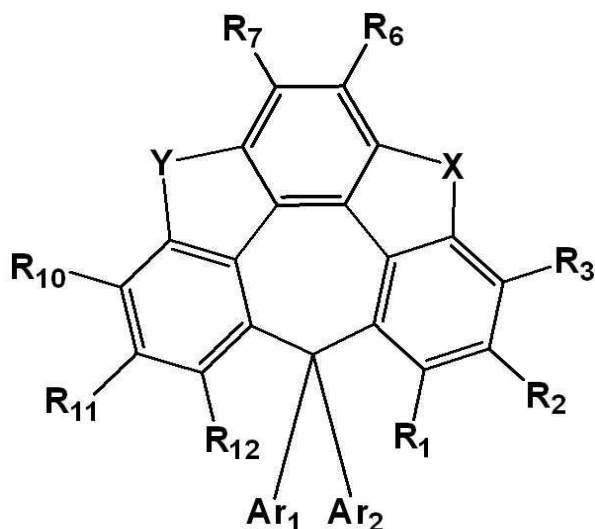


[0059]

[0060] 화학식 14에서, X는 O, S, NR₁₃, CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고, R₁₃ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이며, R₁₈ 및 R₁₉은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고, Ar₁, Ar₂, R₁ 및 R₈ 내지 R₁₂는 전술한 바와 동일하다.

[0061] 화학식 1은 하기 화학식 15로 표시될 수 있다.

[0062] [화학식 15]

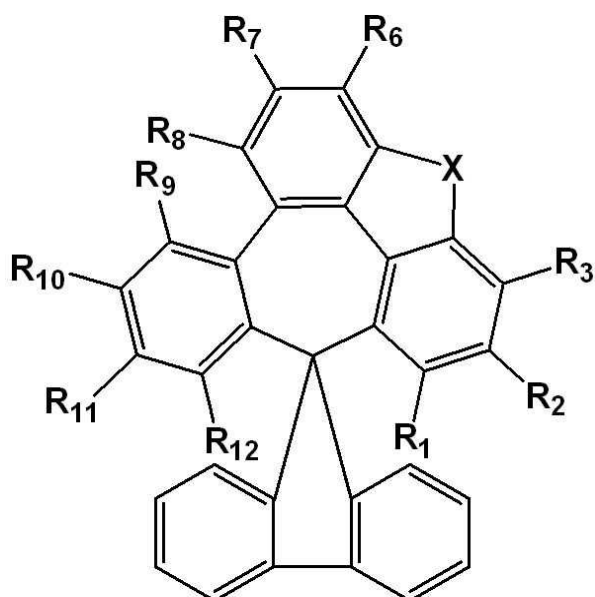


[0063]

[0064] 화학식 15에서, X는 O, S, NR₁₃, CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고, Y는 O, S, NR₂₀ 또는 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기이며, R₁₃ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고, R₂₀은 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이며, Ar₁, Ar₂, R₁ 내지 R₃, R₆, R₇ 및 R₁₀ 내지 R₁₂는 전술한 바와 동일하다.

[0065] 화학식 1은 하기 화학식 16으로 표시될 수 있다.

[0066] [화학식 16]



[0067]

[0068] 화학식 16에서, X는 O, S, NR₁₃, CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고, R₁₃ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고, R₁ 내지 R₃ 및 R₆ 내지 R₁₂는 전술한 바와 동일하다.

[0069] 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, 정공 수송 영역 및 발광층 중 적어도 하나는 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

[0070] 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물은 유기 전계 발광 소자용 재료로 사용될 수 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광 효율을 향상시킬 수 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물은 유기 전계 발광 소자의 수명을 향상시킬 수 있다.

[0071] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 향상된 발광 효율을 구현할 수 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 향상된 수명을 구현할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0072] 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.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0073] 이상의 본 발명의 목적들, 다른 목적들, 특징들 및 이점들은 첨부된 도면 및 이하의 바람직한 실시예들을 통해서 쉽게 이해될 것이다. 그러나 본 발명은 여기서 설명되는 실시예들에 한정되지 않고 다른 형태로 구체화될 수도 있다. 오히려, 여기서 소개되는 실시예들은 개시된 내용이 철저하고 완전해질 수 있도록 그리고 통상의 기술자에게 본 발명의 사상이 충분히 전달될 수 있도록 하기 위해 제공되는 것이다.

[0074] 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.

[0075] 본 명세서에서, "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. 반대로 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "하부에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 아래에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다.

[0076] 본 명세서에서,  는 연결되는 위치를 의미한다.

[0077] 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소, 할로젠기, 니트릴기, 니트로기, 아미노기, 실릴기, 붕소기, 포스핀 옥사이드기, 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, 비페닐기는 아릴기로 해석될 수도 있고, 페닐기로 치환된 페닐기로 해석될 수도 있다.

[0078] 본 명세서에서, "인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성"한다는 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리를 형성하는 것을 의미할 수 있다. 탄화수소 고리는 지방족 탄화수소 고리 및 방향족 탄화수소 고리를 포함한다. 헤테로 고리는 지방족 헤테로 고리 및 방향족 헤테로 고리를 포함한다. 탄화수소 고리 및 헤테로 고리는 단환 또는 다환일 수 있다. 또한, 인접하는 기와 서로 결합하여 형성된 고리는 다른 고리와 연결되어 스피로 구조를 형성하는 것일 수도 있다.

[0079] 본 명세서에서, "인접하는 기"는 해당 치환기가 치환된 원자와 직접 연결된 원자에 치환된 치환기, 해당 치환기

가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기 또는 해당 치환기와 입체구조적으로 가장 인접한 치환기를 의미할 수 있다. 예컨대, 1,2-디메틸벤젠(1,2-dimethylbenzene)에서 2개의 메틸기는 서로 "인접하는 기"로 해석될 수 있고, 1,1-디에틸시클로펜테인(1,1-diethylcyclopentene)에서 2개의 에틸기는 서로 "인접하는 기"로 해석될 수 있다.

[0080] 본 명세서에서, 할로겐기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.

[0081] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 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.

[0082] 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 또는 6 이상 20 이하일 수 있다. 아릴기의 예로는 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 비페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 퀴나페닐기, 섹시페닐기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0083] 본 명세서에서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수도 있다.

[0084] 본 명세서에서, 헤테로 아릴기는 이종 원소로 O, N, P 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로 아릴기일 수 있다. 헤테로 아릴기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하 또는 2 이상 20 이하이다. 헤테로 아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딘기, 디하이드로아크리딘기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 페녹사질기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피리도 인돌기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, N-아릴카바졸기, N-헤테로아릴카바졸기, N-알킬카바졸기, 벤조퀴놀리닐기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 티에노티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난쓰롤린기(phenanthroline), 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0085] 본 명세서에서, 아릴렌기는 2가인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0086] 본 명세서에서 헤테로 아릴렌기는 2가인 것을 제외하고는 전술한 헤테로 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[0087] 본 명세서에서, 실릴기는 알킬 실릴기 및 아릴 실릴기를 포함한다. 실릴기의 예로는 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0088] 본 명세서에서, 붕소기는 알킬 붕소기 및 아릴 붕소기를 포함한다. 붕소기의 예로는 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 디페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0089] 본 명세서에서, 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 이상 30 이하, 2 이상 30 이하 또는 2 이상 10 이하이다. 알케닐기의 예로는 비닐, 1-부테닐, 1-펜테닐, 1,3-부타디에닐 아릴, 스티레닐기, 스티베닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

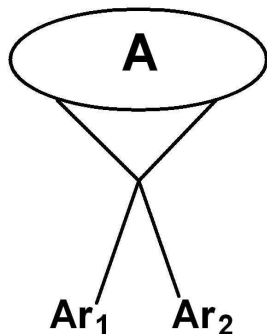
[0090] 본 명세서에서, 아민기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 이상 30 이하일 수 있다. 아민기는 알킬 아민기

및 아릴 아민기를 포함할 수 있다. 아민기의 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 트리페닐아민기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0091] 이하에서는 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물에 대해 설명한다.

[0092] 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0093] [화학식 1]



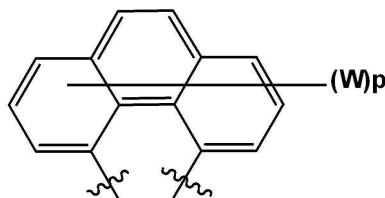
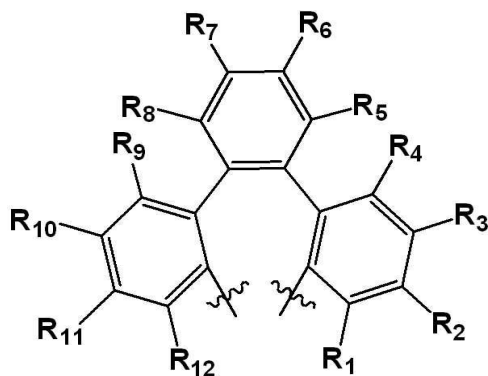
[0094]

[0095] 화학식 1에서, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이거나, 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[0096] 화학식 1에서, A는 탄소수 14 이상의 치환 또는 비치환된 치환기이다. 구체적으로, A는 하기 화학식 2-1 또는 2-2로 표시될 수 있다.

[0097] [화학식 2-1]

[화학식 2-2]

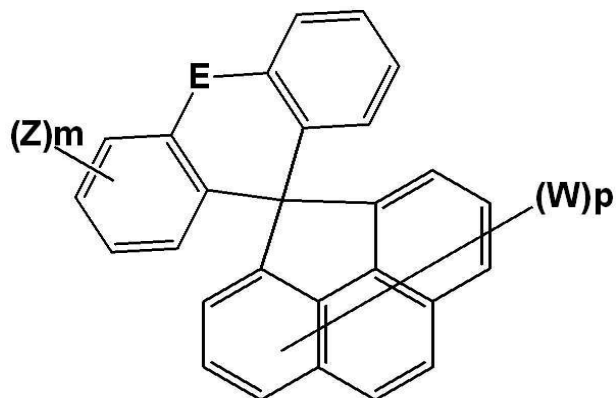


[0098]

[0099] 화학식 2-1에서, R₁ 내지 R₁₂는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이거나, 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고, 화학식 2-2에서, W는 수소, 중수소, 할로젠기, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 60 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 5 이상 60 이하의 헤테로 아릴기이며, p는 0 이상 8 이하의 정수이고, p가 2 이상인 경우, 복수의 W는 서로 동일하거나 상이하다.

[0100] 화학식 1에서 A는 화학식 2-2로 표시될 수 있다. 화학식 1에서 A는 화학식 2-2로 표시되고, Ar₁ 및 Ar₂는 서로 결합하여 헤테로 고리를 형성하는 것일 수 있다. 예를 들어, 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시될 수 있다.

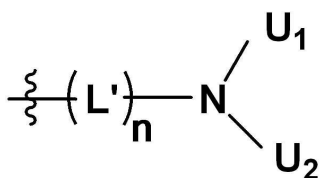
[0101] [화학식 3]



[0102]

[0103] 화학식 3에 있어서, W 및 p는 전술한 바와 동일하며, E는 O, S 또는 NR'이고, m은 0 또는 1이며, Z 및 R'는 각각 독립적으로 하기 화학식 4로 표시되고,

[0104] [화학식 4]



[0105]

[0106] 화학식 4에서, U₁ 및 U₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아틸기이고, L'는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸렌기이며, n은 각각 독립적으로 0 또는 1이고, E가 NR'일 때, m은 0이고, E가 O 또는 S일 때, m은 1이다.

[0107] 화학식 3으로 표시되는 다환 화합물은 질소를 포함하는 아민 화합물이다.

[0108] 화학식 2-2에서, p는 0일 수 있다.

[0109] 화학식 4에서, U₁ 및 U₂는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 터페닐기일 수 있다.

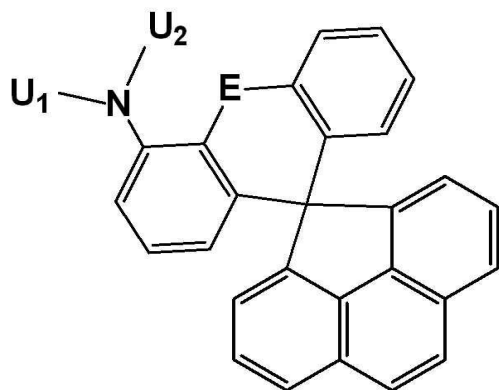
[0110] 화학식 4에서, U₁ 및 U₂는 각각 독립적으로, 나프틸기로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 터페닐기일 수 있다.

[0111] L'는 m-페닐렌기 또는 p-페닐렌기인 것일 수 있다.

[0112] E가 O 또는 S일 때, n은 0 또는 1이다. E가 NR'일 때, n은 0 또는 1이다.

[0113] 화학식 3은 하기 화학식 5로 표시될 수 있다.

[0114] [화학식 5]

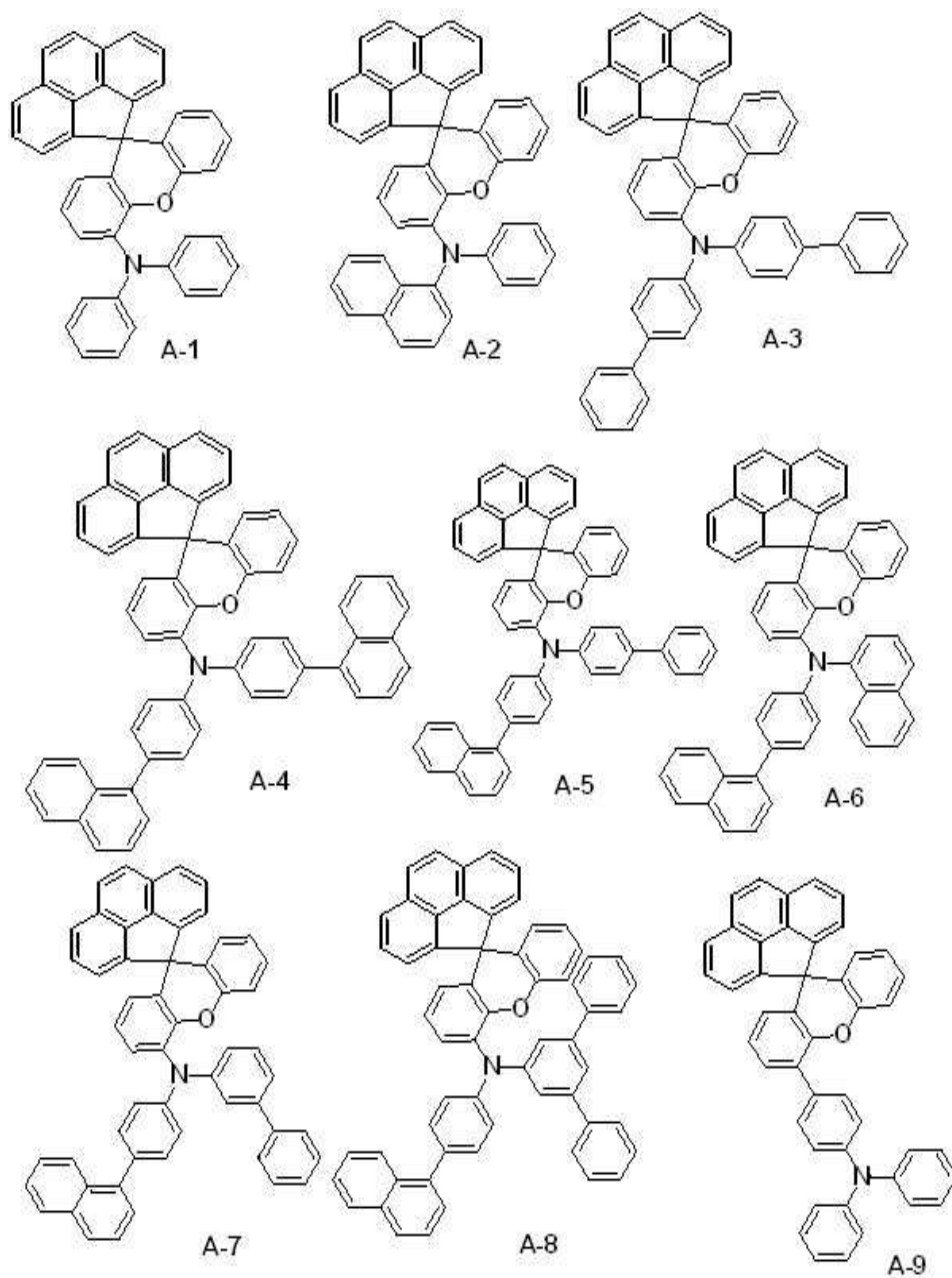


[0115]

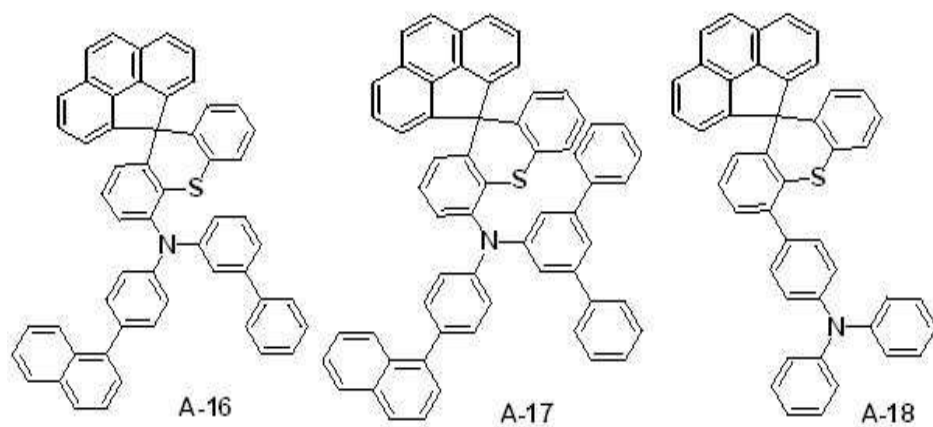
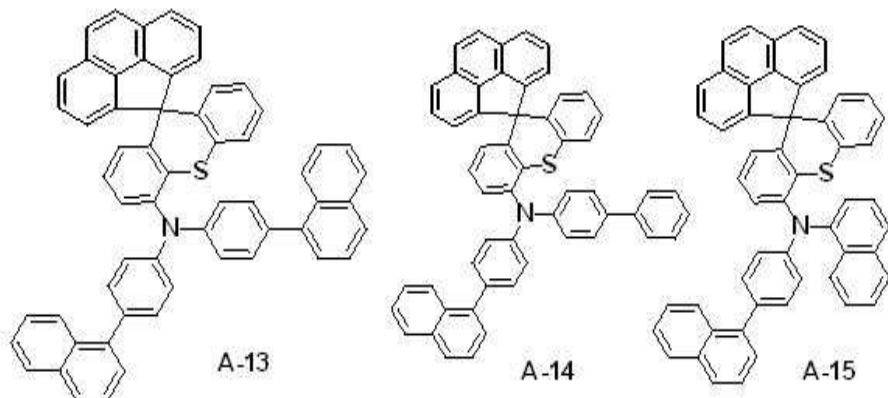
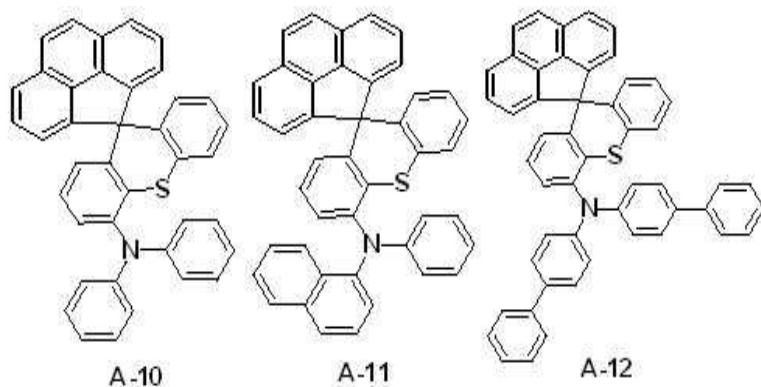
[0116] 화학식 5에서, E, U₁ 및 U₂는 전술한 바와 동일하다.

[0117] 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

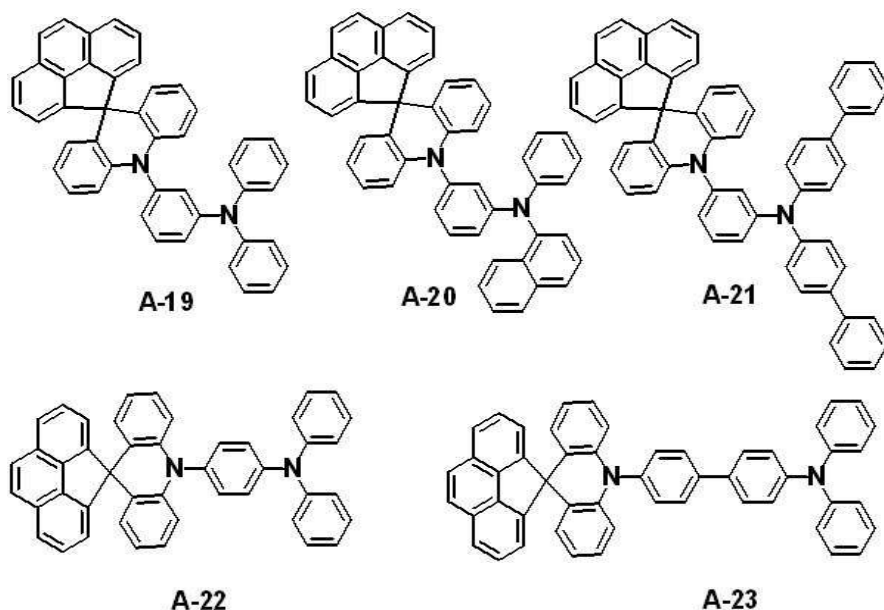
[0118] [화합물군 1]



[0119]



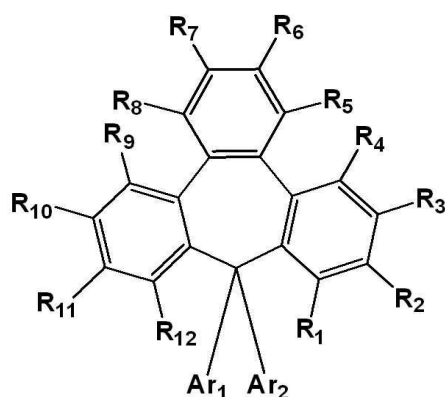
[0120]



[0121]

[0122] 화학식 1에서 A는 화학식 2-1로 표시되는 것일 수 있다. 이 경우, 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시될 수 있다.

[0123] [화학식 1-1]



[0124]

[0125] 화학식 1에서 A는 화학식 2-1로 표시되고, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 3 이상 10 이하의 헤테로 아릴기이거나, 서로 결합하여 고리를 형성하는 것일 수 있다.

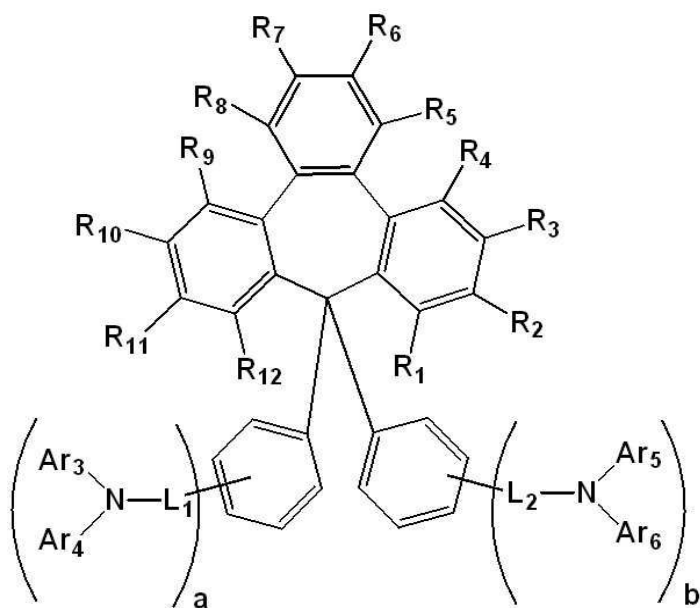
[0126] 화학식 1에서 A는 화학식 2-1로 표시되고, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 카바줄기 또는 치환 또는 비치환된 페리딜기이거나, 서로 결합하여 고리를 형성하는 것일 수 있다.

[0127] 화학식 1에서 A는 화학식 2-1로 표시되고, Ar₁ 및 Ar₂ 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다. Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다. Ar₁ 및 Ar₂가 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 플루오레닐기를 형성할 수 있다. Ar₁ 및 Ar₂ 중 하나는 치환 또는 비치환된 페닐기이고, 나머지 하나는 치환 또는 비치환된 3환 또는 4환의 아릴기일 수 있다.

[0128] 화학식 1에서 A는 화학식 2-1로 표시되고, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페리딜기일 수 있다. 화학식 1에서 A는 화학식 2-1로 표시되고, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 카바줄기일 수 있다. 화학식 1에서 A는 화학식 2-1로 표시되고, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 페닐기로 치환된 카바줄기일 수 있다. 화학식 1에서 A는 화학식 2-1로 표시되고, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 N-페닐카바줄기일 수 있다.

[0129] 화학식 1은 하기 화학식 6으로 표시될 수 있다.

[0130] [화학식 6]



[0131]

[0132] 화학식 6에서, L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 직접 결합(direct linkage), 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴렌기이고, Ar_3 내지 Ar_6 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이며, a 및 b 는 각각 독립적으로 0 또는 1이고, $a+b \neq 0$ 이며, R_1 내지 R_{12} 는 전술한 바와 동일하다.

[0133] 본 명세서에서, 직접 결합(direct linkage)은 예를 들어, 단일 결합을 의미할 수 있다.

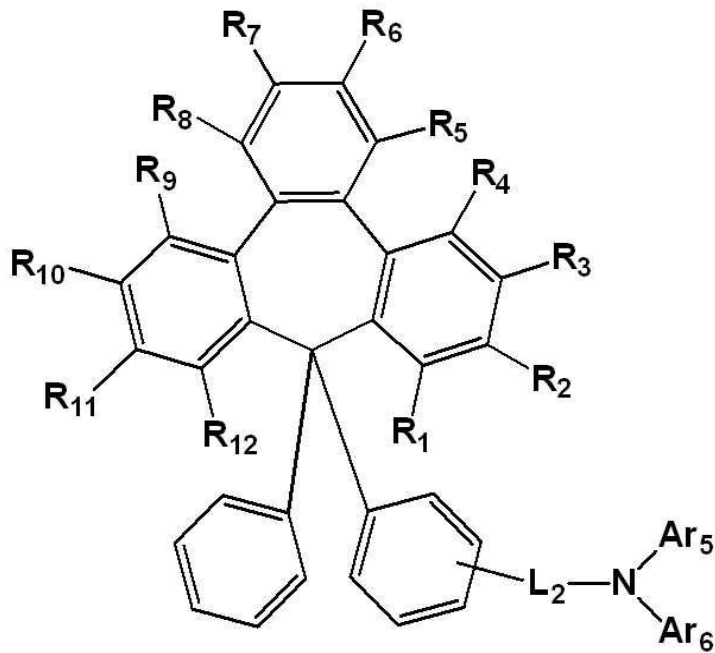
[0134] 화학식 6에서, a 및 b 는 각각 독립적으로 1이고, Ar_3 내지 Ar_6 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있다. 즉, 화학식 1의 Ar_1 및 Ar_2 이 각각 직접 또는 링커(L_1 또는 L_2)를 통해 아릴 아민기로 치환된 페닐기인 것일 수 있다.

[0135] 화학식 6에서, Ar_3 내지 Ar_6 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기일 수 있다. Ar_3 내지 Ar_6 는 각각 독립적으로 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기일 수 있다. Ar_3 내지 Ar_6 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기일 수 있다.

[0136] 화학식 1의 A는 화학식 2-1로 표시되고, 화학식 1의 Ar_1 및 Ar_2 이 서로 동일한 것일 수 있다. 예를 들어, 화학식 6의 Ar_3 내지 Ar_6 는 서로 동일한 것일 수 있다. 또 다른 예로, Ar_3 및 Ar_5 가 서로 동일하고, Ar_4 및 Ar_6 가 서로 동일한 것일 수 있고, 이 경우, Ar_3 및 Ar_4 는 서로 상이하고, Ar_5 및 Ar_6 은 서로 상이한 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 상이한 것일 수도 있다.

[0137] 화학식 6에서, $a+b=1$ 인 것일 수 있다. 예를 들어, 화학식 6은 하기 화학식 6-1로 표시될 수 있다.

[0138] [화학식 6-1]

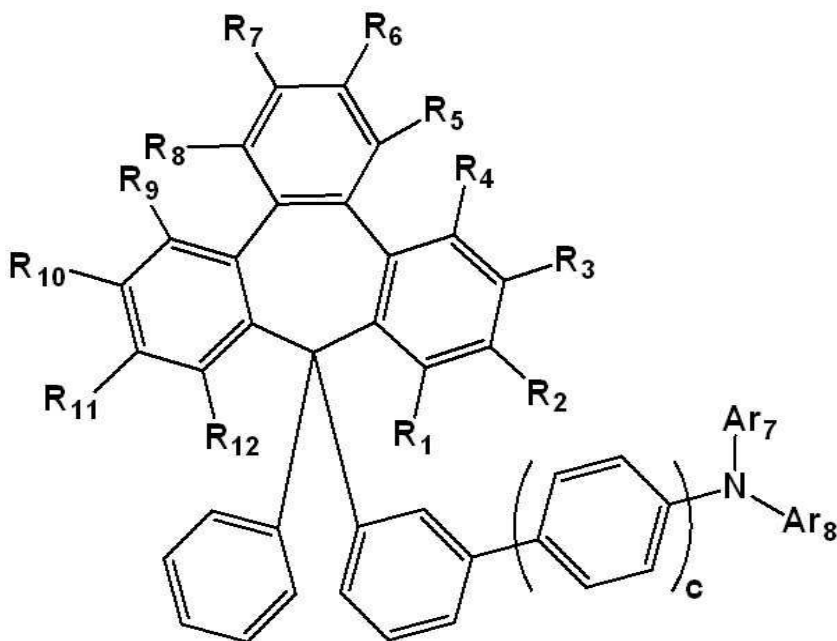


[0139]

[0140] 화학식 6-1에서, R₁ 내지 R₁₂, L₂, Ar₅ 및 Ar₆는 전술한 바와 동일하다.

[0141] 화학식 1은 하기 화학식 7로 표시될 수 있다.

[0142] [화학식 7]



[0143]

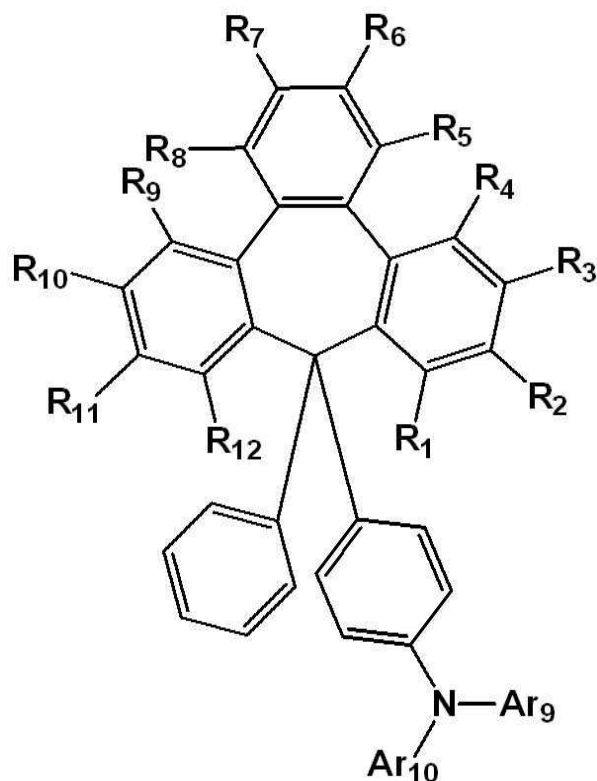
[0144] 화학식 7에서, Ar₇ 및 Ar₈는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아틸기이고, c는 0 또는 1 이며, R₁ 내지 R₁₂는 전술한 바와 동일하다.

[0145] 화학식 7에서, Ar₇ 및 Ar₈는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸기일 수 있다. Ar₇ 및 Ar₈는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아틸기일 수 있다. Ar₇ 및 Ar₈는 각각 독립적으로 각각 독립적으로 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아틸기일 수 있다. 보다 구체적으로, Ar₇ 및 Ar₈는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐

기 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기일 수 있다. Ar_7 및 Ar_8 은 각각 독립적으로 나프틸기로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기일 수 있다.

[0146] 화학식 1은 하기 화학식 8로 표시될 수 있다.

[0147] [화학식 8]



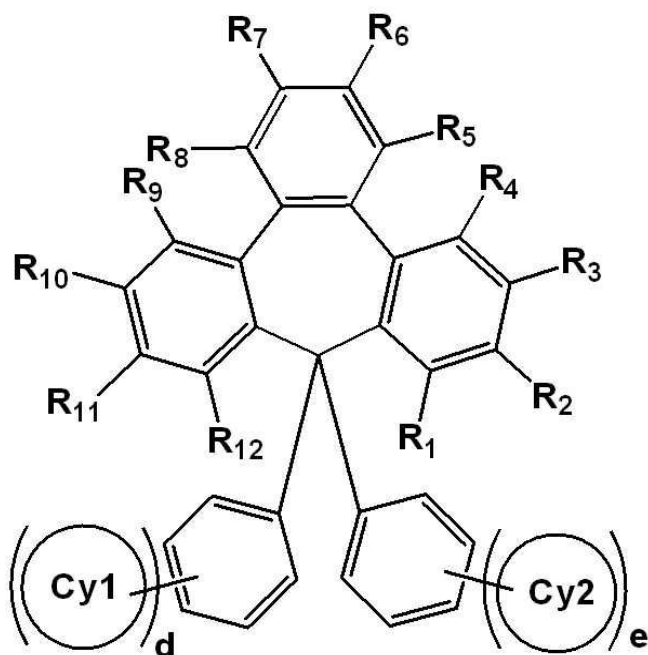
[0148]

[0149] 화학식 8에서, Ar_9 및 Ar_{10} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고, R_1 내지 R_{12} 는 전술한 바와 동일하다.

[0150] 화학식 8에서, Ar_9 및 Ar_{10} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있다. Ar_9 및 Ar_{10} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기일 수 있다. Ar_9 및 Ar_{10} 은 각각 독립적으로 각각 독립적으로 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기일 수 있다. 보다 구체적으로, Ar_9 및 Ar_{10} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기일 수 있다. Ar_9 및 Ar_{10} 은 각각 독립적으로 나프틸기로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기일 수 있다.

[0151] 화학식 1은 하기 화학식 9로 표시될 수 있다.

[0152] [화학식 9]

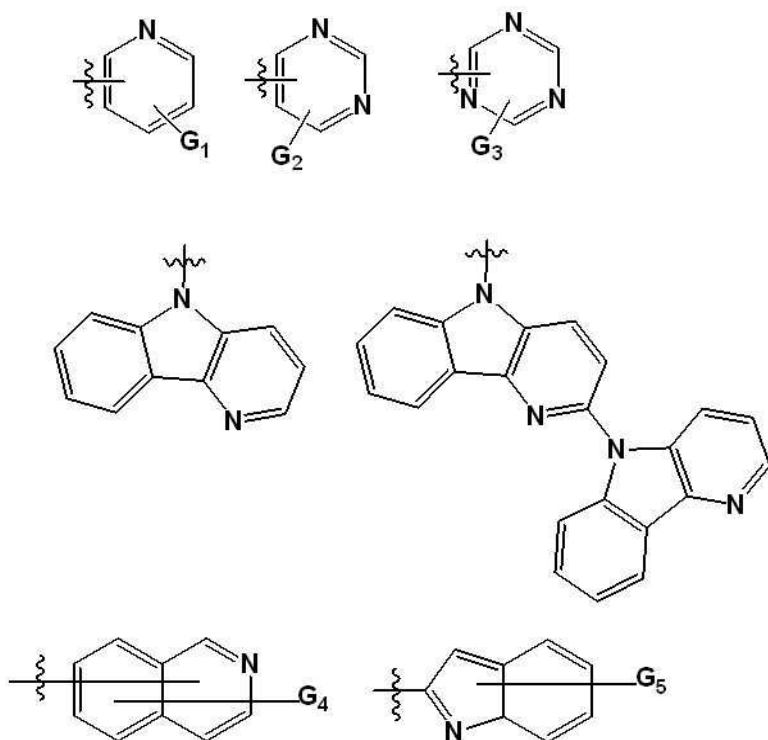


[0153]

[0154] 화학식 9에서, Cy1 및 Cy2는 각각 독립적으로 이종 원소(hetero atom)로 N을 1 이상 3 이하 포함하는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고, d 및 e는 각각 독립적으로 0 또는 1이며, d+e ≠ 0이고, R₁ 내지 R₁₂는 전술한 바와 동일하다.

[0155] 화학식 9에서, Cy1 및 Cy2는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미딜기, 치환 또는 비치환된 트리아진기, 치환 또는 비치환된 카바졸기, 치환 또는 비치환된 피리도 인돌기 또는 치환 또는 비치환된 이소퀴놀린기일 수 있다.

[0156] 화학식 9에서, Cy1 및 Cy2는 각각 독립적으로 하기 구조식들 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.



[0157]

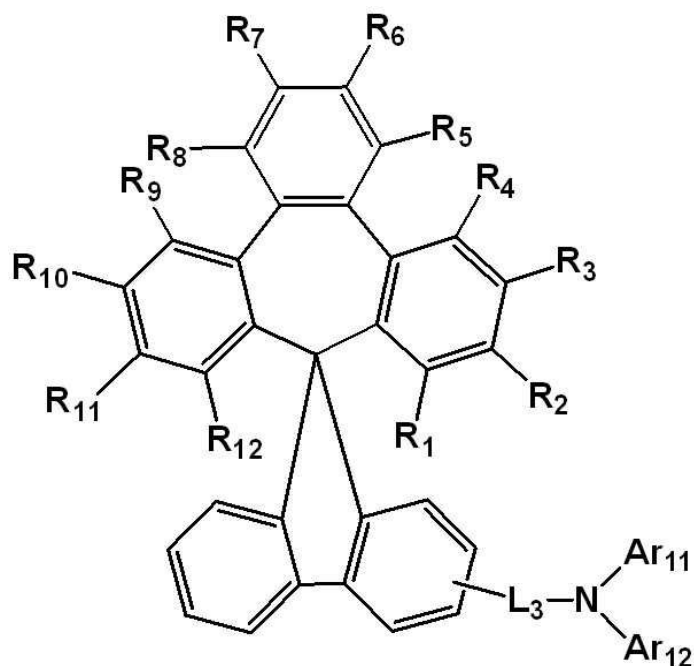
[0158] G_1 내지 G_5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이다. G_1

내지 G_5 는 각각 복수 개일 수 있다. G_1 내지 G_5 는 각각 독립적으로 수소 또는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다.

[0159] 화학식 9에서, d 및 e가 각각 독립적으로 1일 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니고, $d+e=1$ 일 수도 있다.

[0160] 전술한 바와 같이, 화학식 1에서, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 화학식 1에서 A는 2-1로 표시되고, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 탄화수소 방향족 고리를 형성할 수 있다. Ar_1 및 Ar_2 는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 플루오레닐기를 형성할 수 있다. 예를 들어, 화학식 1은 하기 화학식 10으로 표시될 수 있다.

[0161] [화학식 10]



[0162]

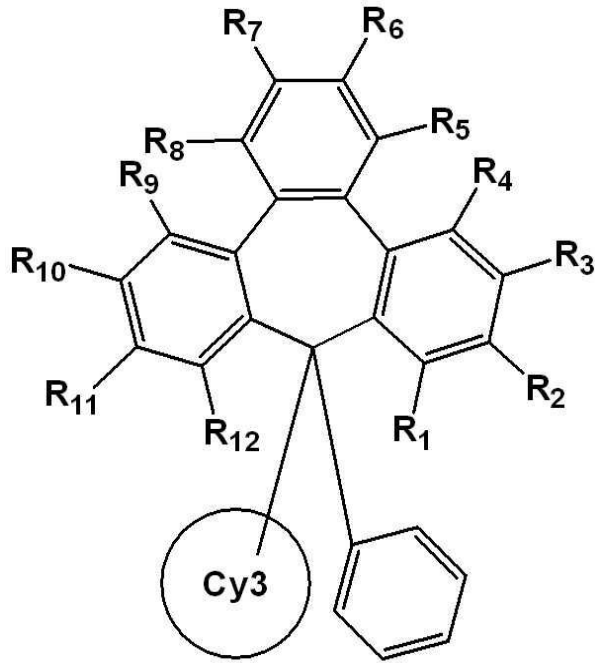
[0163] 화학식 10에서, Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 각각 독립적으로 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이고, L_3 은 직접 결합, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴렌기이며, R_1 내지 R_{12} 는 전술한 바와 동일하다.

[0164] 화학식 10에서, Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기일 수 있다. Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기일 수 있다. Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 각각 독립적으로 각각 독립적으로 각각 독립적으로 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기일 수 있다. 보다 구체적으로, Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기일 수 있다. Ar_{11} 및 Ar_{12} 는 각각 독립적으로 나프틸기로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기일 수 있다.

[0165] 화학식 10에서, L_3 은 직접 결합 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기일 수 있다. L_3 은 직접 결합 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴렌기일 수 있다. L_3 은 직접 결합 또는 치환 또는 비치환된 페닐렌기일 수 있다. L_3 은 직접 결합 또는 치환 또는 비치환된 1,4-페닐렌기일 수 있다.

[0166] 화학식 1은 하기 화학식 11로 표시될 수 있다.

[0167] [화학식 11]



[0168]

[0169] 화학식 11에서, Cy3은 치환 또는 비치환된 3환 또는 4환의 아릴기이고, R₁ 내지 R₁₂는 전술한 바와 동일하다.

[0170]

Cy3은 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기 또는 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기일 수 있다. Cy3은 페닐기, 나프틸기 및 아릴 아민기로 이루어진 군에서 선택된 1 이상의 치환기로 치환된 안트라세닐기일 수 있다. Cy3은 페닐기, 니트릴기 및 아릴 아민기로 이루어진 군에서 선택된 1 이상의 치환기로 치환된 피레닐기일 수 있다. Cy3은 나프틸기 및 니트릴기로 이루어진 군에서 선택된 1 이상의 치환기로 치환된 페난트릴기일 수 있다. Cy3은 페닐기 및 아릴 아민기로 이루어진 군에서 선택된 1 이상의 치환기로 치환된 크리세닐기일 수 있다. Cy3은 니트릴기로 1 이상 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기일 수 있다.

[0171]

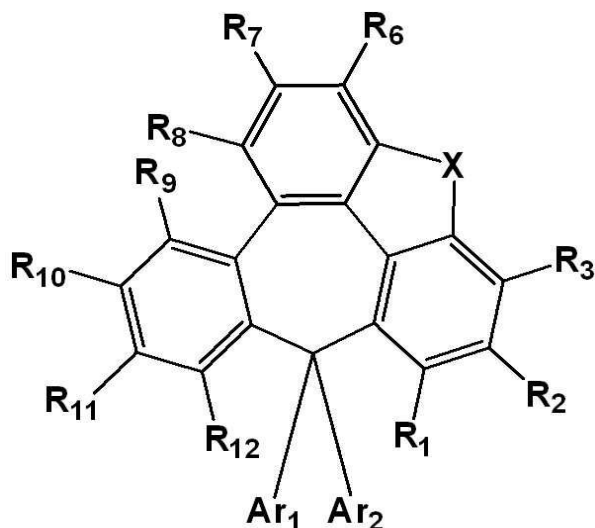
화학식 2-1에서 R₁ 내지 R₁₂는 각각 수소인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, R₁ 내지 R₁₂ 중 적어도 하나는 수소 이외의 치환기인 것 수 있다.

[0172]

전술한 바와 같이, 화학식 2-1에서, R₁ 내지 R₁₂ 중 일부는 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하는 것일 수 있다. 예를 들어, 화학식 1은 하기 화학식 12로 표시될 수 있다.

[0173]

[화학식 12]



[0174]

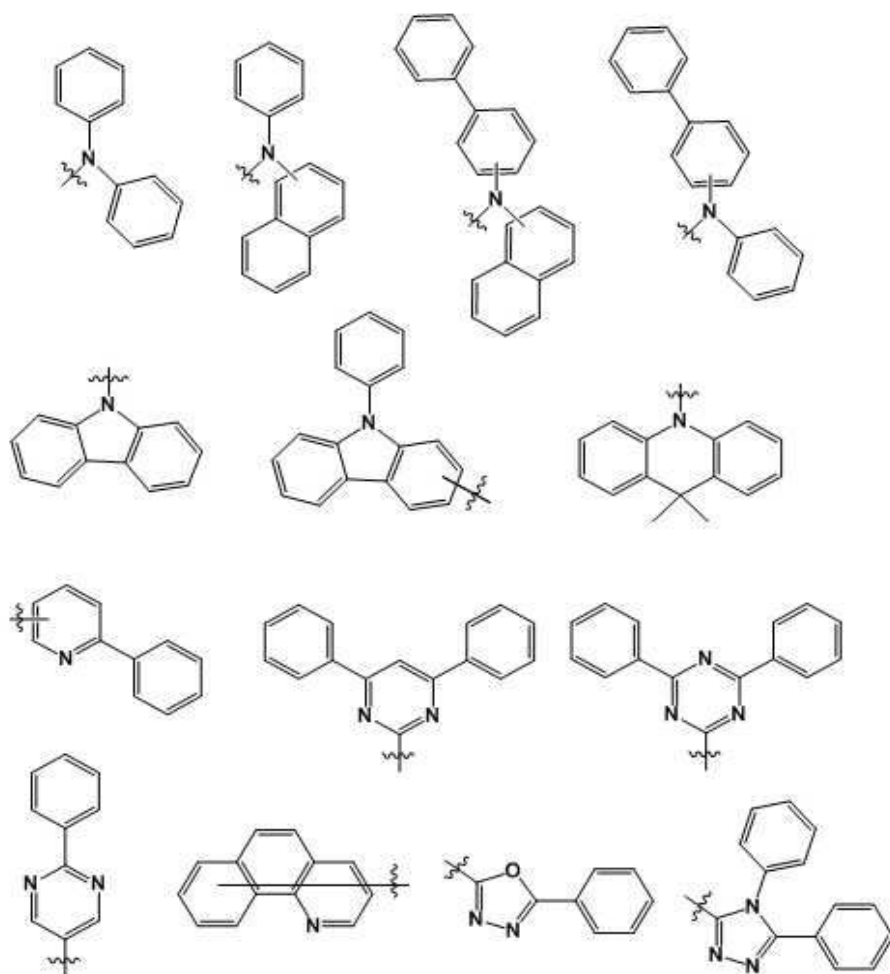
[0175] 화학식 12에서, X는 O, S, NR₁₃, CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고, R₁₃ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이며, Ar₁, Ar₂, R₁ 내지 R₃ 및 R₆ 내지 R₁₂는 전술한 바와 동일하다.

[0176] X는 O 또는 S일 수 있다. X는 O일 수 있다. X는 S일 수 있다.

[0177] X는 CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고, R₁₄ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기인 것일 수 있다. X는 CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고, R₁₄ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기인 것일 수 있다. X는 CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고, R₁₄ 내지 R₁₇은 각각 독립적으로 메틸기 또는 에틸기인 것일 수 있다. X는 CR₁₄R₁₅ 또는 SiR₁₆R₁₇이고, R₁₄ 내지 R₁₇은 메틸기인 것일 수 있다.

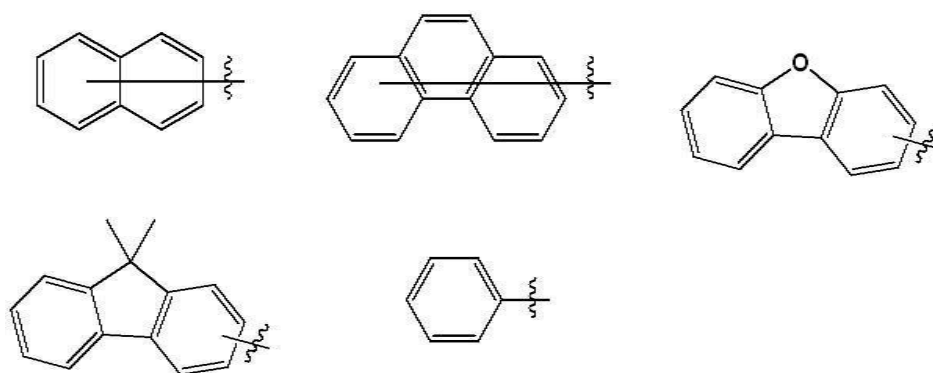
[0178] X는 NR₁₃일 수 있다. X는 NR₁₃이고, R₁₃은 수소 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기인 것일 수 있다. X는 NR₁₃이고, R₁₃은 수소 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 이상 20 이하의 아릴기인 것일 수 있다. X는 NR₁₃이고, R₁₃은 수소 또는 치환 또는 비치환된 페닐기인 것일 수 있다. X는 NR₁₃이고, R₁₃은 수소 또는 비치환된 페닐기인 것일 수 있다.

[0179] 화학식 12에서, R₁ 내지 R₃ 및 R₆ 내지 R₁₂는 각각 독립적으로 수소 또는 함질소 치환기일 수 있다. 예를 들어, 화학식 12에서, R₁ 내지 R₃ 및 R₆ 내지 R₁₂는 각각 독립적으로 수소 또는 하기 구조식들 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.



[0180]

[0181] 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 화학식 12에서, R₁ 내지 R₃ 및 R₆ 내지 R₁₂는 각각 독립적으로 수소 또는 하기 구조식들 중 어느 하나로 표시되는 것일 수도 있다.



[0182]

[0183]

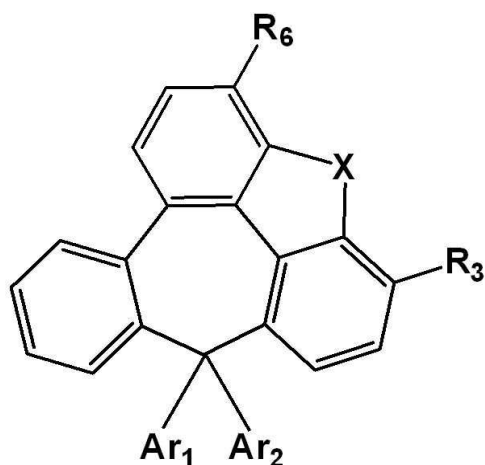
화학식 12에서, R_1 내지 R_3 및 R_6 내지 R_{12} 중 적어도 2개는 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이거나, 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하는 것일 수 있다.

[0184]

R_1 내지 R_3 및 R_6 내지 R_{12} 중 2개는 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이거나, 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하고, R_1 내지 R_3 및 R_6 내지 R_{12} 중 나머지는 수소인 것일 수 있다. 예를 들어, 화학식 12는 하기 화학식 13으로 표시될 수 있다.

[0185]

[화학식 13]



[0186]

[0187]

화학식 13에서, R_3 및 R_6 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이며, X , Ar_1 및 Ar_2 는 화학식 12에서 정의한 바와 동일하다.

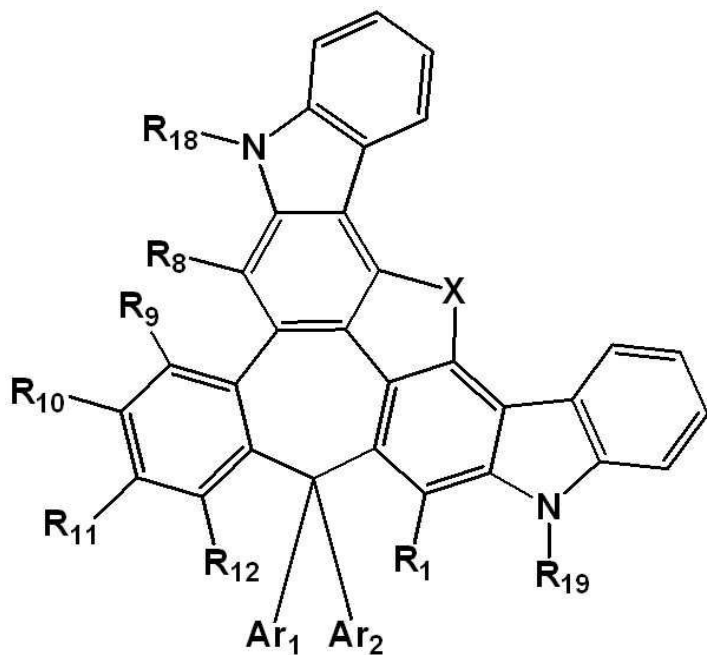
[0188]

다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 예를 들어, R_1 내지 R_3 및 R_6 내지 R_{12} 중 3개가 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기이거나, 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성하고, R_1 내지 R_3 및 R_6 내지 R_{12} 중 나머지는 수소인 것일 수 있다.

[0189]

R_1 내지 R_{12} 중 일부는 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 카바졸을 형성할 수 있다. R_1 내지 R_{12} 중 일부는 인접하는 기와 서로 결합하여 N-아릴 카바졸을 형성할 수 있다. R_1 내지 R_{12} 중 일부는 인접하는 기와 서로 결합하여 N-페닐 카바졸을 형성할 수 있다. 예를 들어, 화학식 12는 하기 화학식 14로 표시될 수 있다.

[0190] [화학식 14]



[0191]

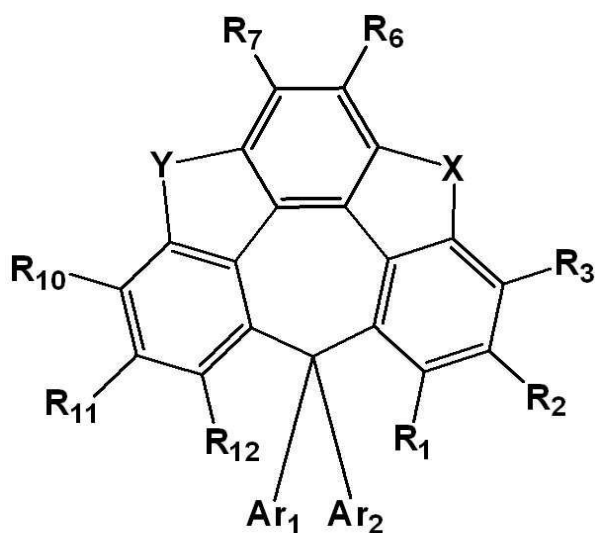
[0192] 화학식 14에서, R₁₈ 및 R₁₉은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아틸기이고, X, Ar₁, Ar₂, R₁ 및 R₈ 내지 R₁₂는 화학식 8에서 정의한 바와 동일하다.

[0193] 화학식 14에서, R₁₈ 및 R₁₉은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸기일 수 있다. 화학식 10에서, R₁₈ 및 R₁₉은 각각 독립적으로 N-아틸 카바졸기일 수 있다. R₁₆ 및 R₁₇은 각각 독립적으로 N-페닐 카바졸기일 수 있다.

[0194] 화학식 14에서, R₁ 및 R₈ 내지 R₁₂는 수소인 것일 수 있다.

[0195] 화학식 12는 하기 화학식 15로 표시될 수 있다.

[0196] [화학식 15]



[0197]

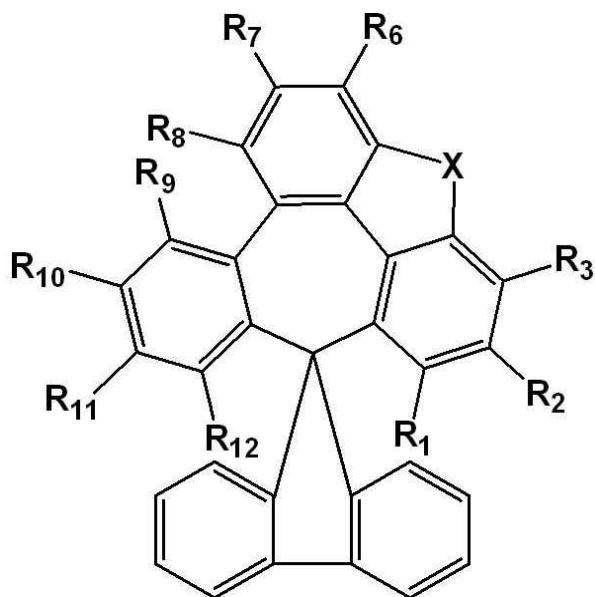
[0198] 화학식 15에서, Y는 O, S, NR₂₀ 또는 치환 또는 비치환된 포스핀 옥사이드기이며, R₂₀은 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아틸기이며, X, Ar₁, Ar₂, R₁ 내지 R₃, R₆, R₇ 및 R₁₀ 내지 R₁₂는 화학식 12에서 정의한 바와 동일

하다.

[0199] 화학식 15에서, Y는 페닐기로 치환된 포스핀 옥사이드기일 수 있다. 화학식 15에서, Y는 NR_{20} 이고, R_{20} 은 페닐기인 것일 수 있다.

[0200] 화학식 12는 하기 화학식 16으로 표시될 수 있다.

[0201] [화학식 16]



[0202]

[0203] 화학식 16에서, X, R_1 내지 R_3 및 R_6 내지 R_{12} 는 화학식 12에서 정의한 바와 동일하다.

[0204] 화학식 16에서, R_3 및 R_6 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴 아민기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로 아릴기일 수 있다.

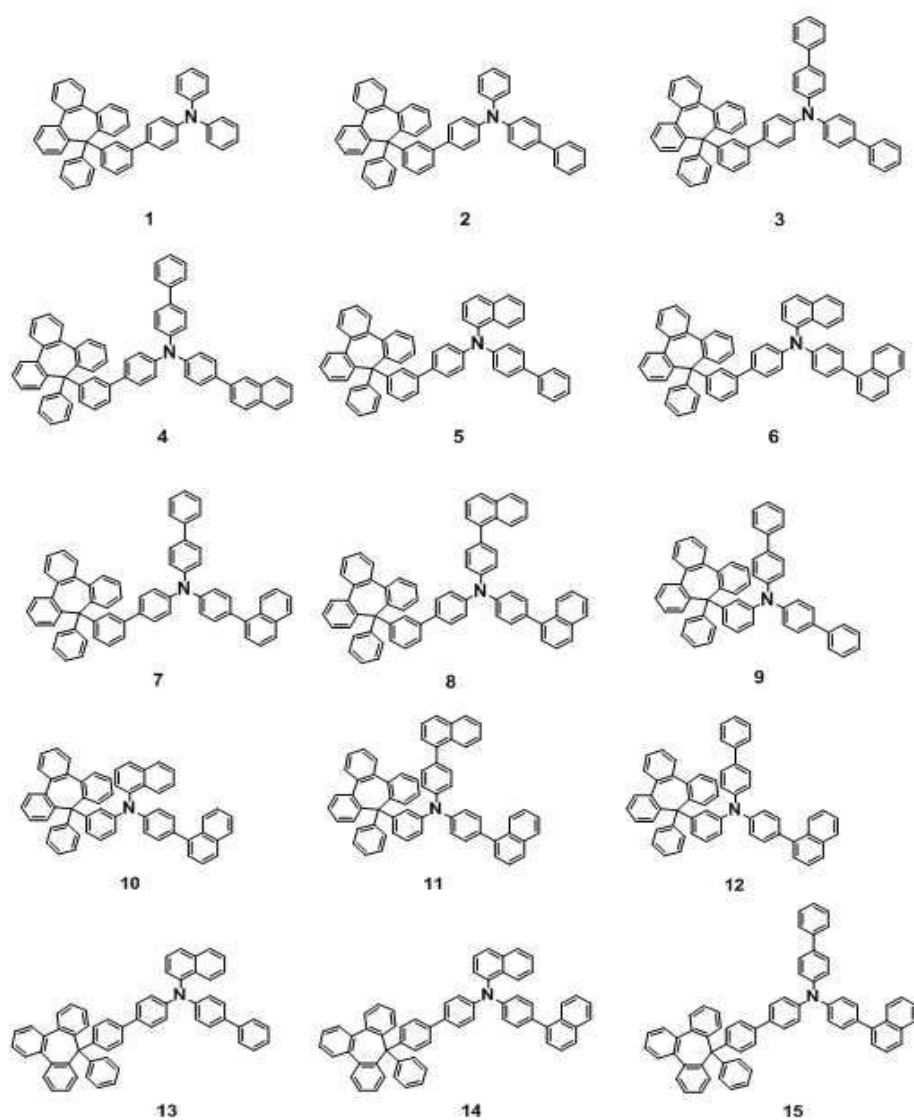
[0205] 화학식 16에서, R_3 및 R_6 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴 아민기일 수 있다.

[0206] 화학식 16에서, R_6 및 R_7 이 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 카바졸을 형성할 수 있다. 화학식 16에서, R_6 및 R_7 이 서로 결합하여 N-아릴 카바졸을 형성할 수 있다. 화학식 16에서, R_6 및 R_7 이 서로 결합하여 N-페닐 카바졸을 형성할 수 있다.

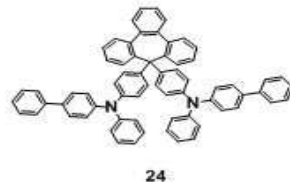
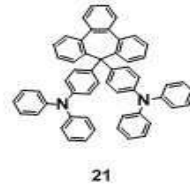
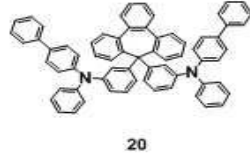
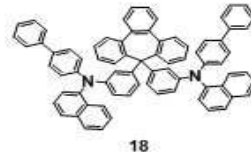
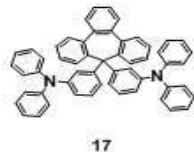
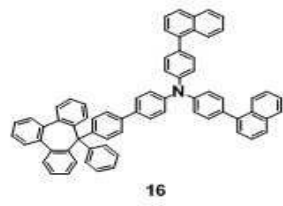
[0207] 화학식 16에서, R_2 및 R_3 가 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 카바졸을 형성할 수 있다. 화학식 16에서, R_2 및 R_3 가 서로 결합하여 N-아릴 카바졸을 형성할 수 있다. 화학식 16에서, R_2 및 R_3 가 서로 결합하여 N-페닐 카바졸을 형성할 수 있다.

[0208] 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 하기 화합물군 2에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

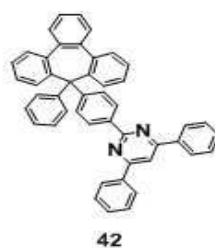
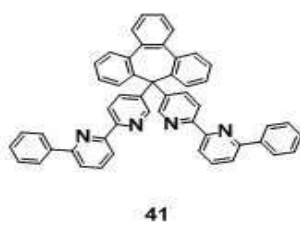
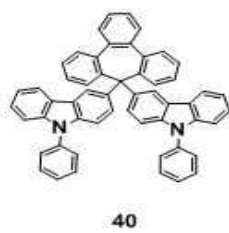
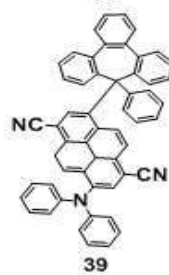
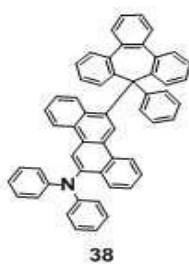
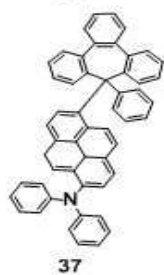
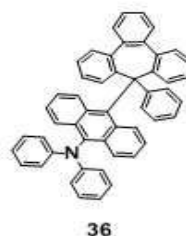
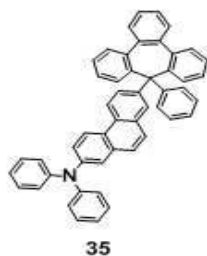
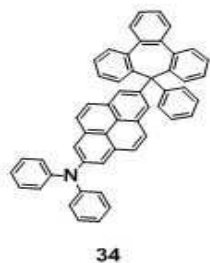
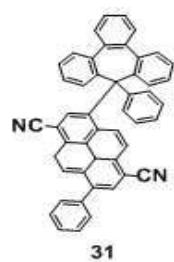
[0209] [화합물군 2]



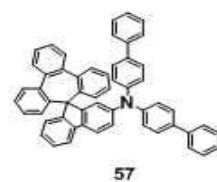
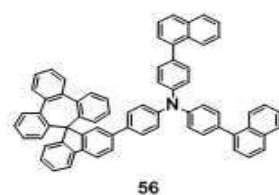
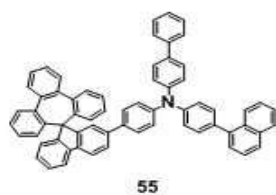
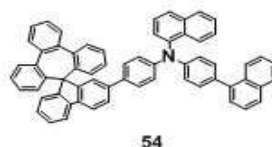
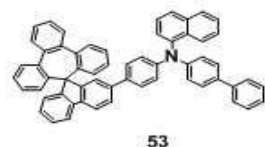
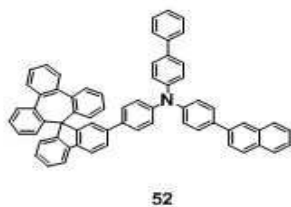
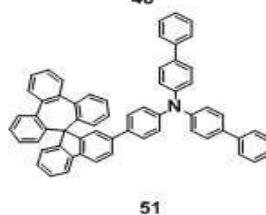
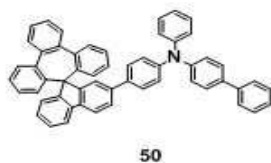
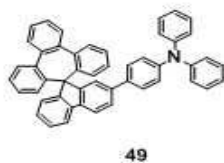
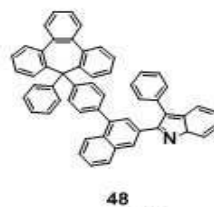
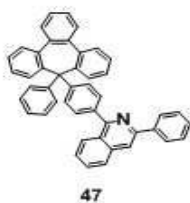
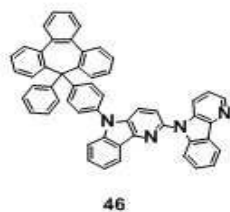
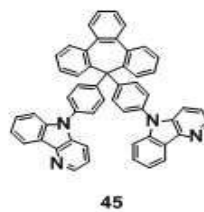
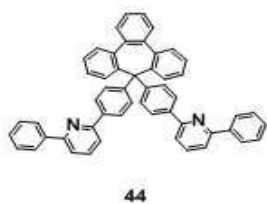
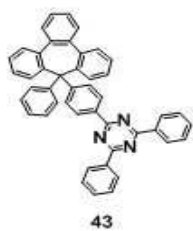
[0210]



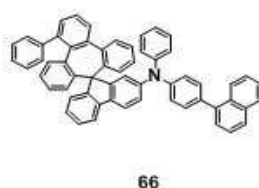
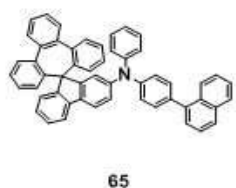
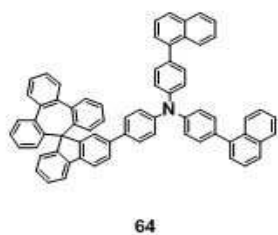
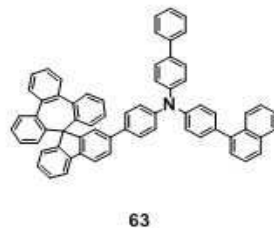
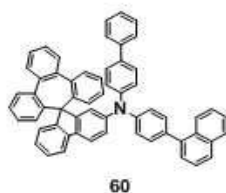
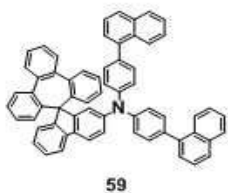
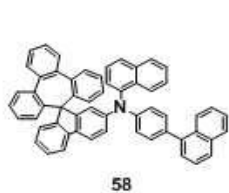
[0211]



[0212]



[0213]

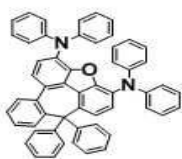


[0214]

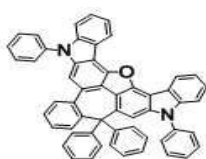
[0215]

화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 하기 화합물군 3에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나인 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

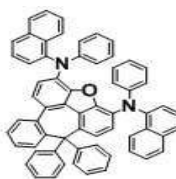
[0216] [화합물군 3]



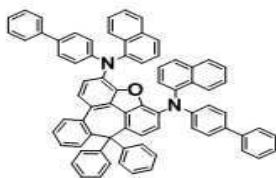
67



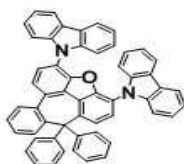
68



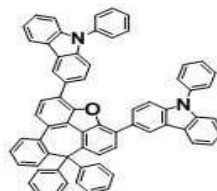
69



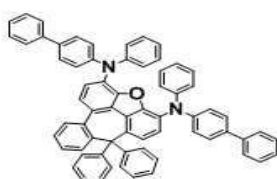
70



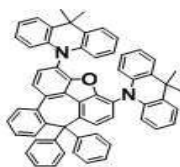
71



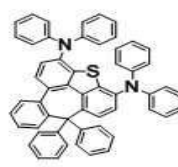
72



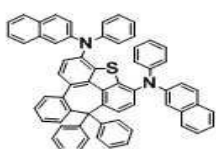
73



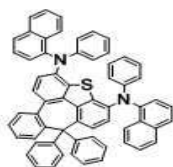
74



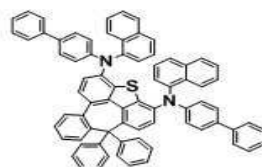
75



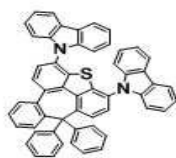
76



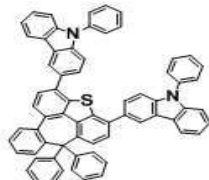
77



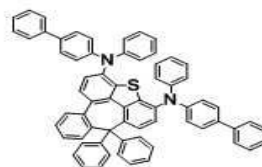
78



79



80

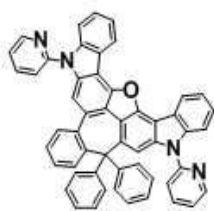


81

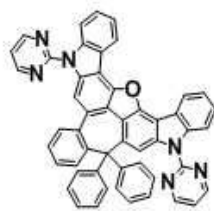
[0217]



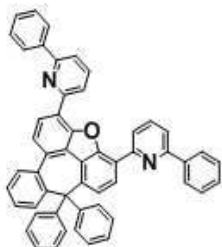
82



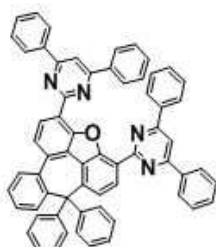
83



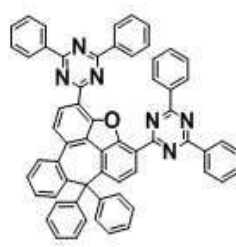
84



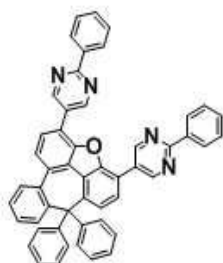
85



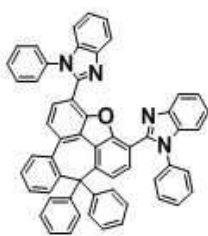
86



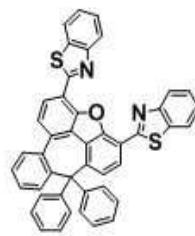
87



88

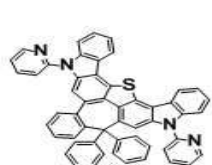


89

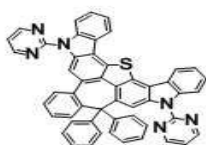


90

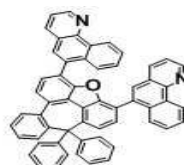
[0218]



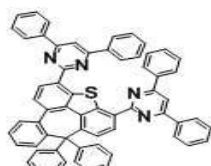
91



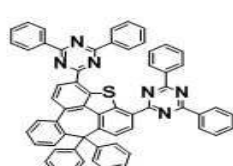
92



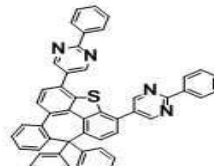
93



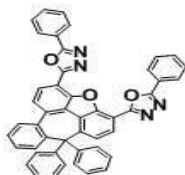
94



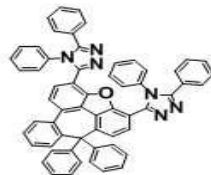
95



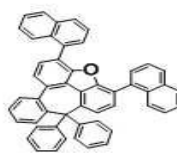
96



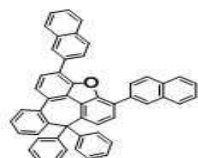
97



98



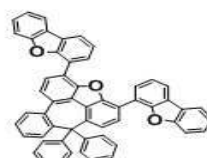
99



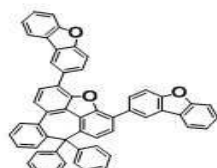
100



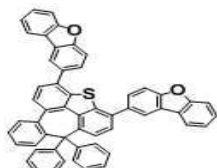
101



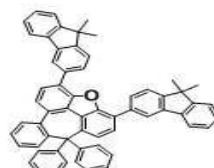
102



103



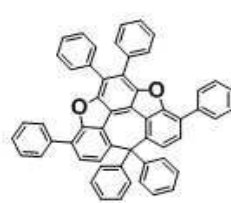
104



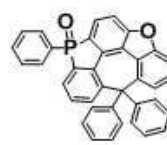
105



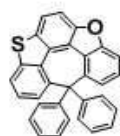
106



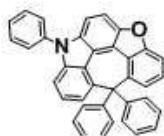
107



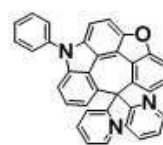
108



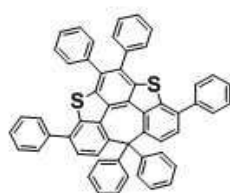
109



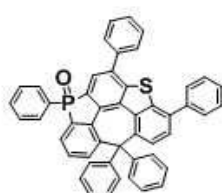
110



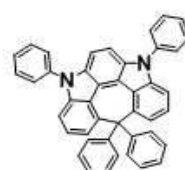
111



112



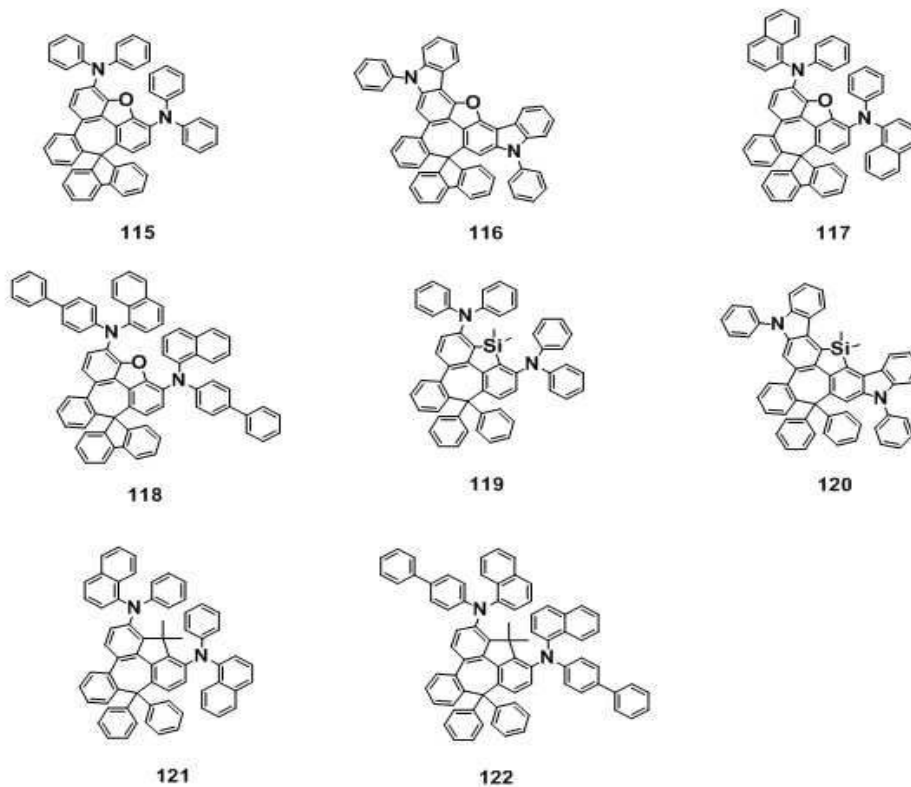
113



114

[0219]

[0220]



[0221]

[0222]

본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 유기 전계 발광 소자용 재료로 사용될 수 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 유기 전계 발광 소자의 효율을 향상시킬 수 있다. 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 유기 전계 발광 소자의 수명을 향상시킬 수 있다.

[0223]

화학식 1의 A가 화학식 2-2로 표시될 경우, 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 아민기를 포함하며, 강한 전자 내성을 가질 수 있다. 아민기와 스피로페난트렌(Spirophenanthrene)계 화합물이 서로 결합하여, 아민기의 HOMO(highest occupied molecular orbital) 궤도 확산을 제어할 수 있고, 분자 대칭성을 무너뜨려 아모포스성을 향상시킬 수 있다. 이에 따라, 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 장수명 및 높은 발광 효율을 얻을 수 있다.

[0224]

화학식 1의 A가 화학식 2-1로 표시될 경우, 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 전하 내성이 높은 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)을 포함함으로써, 유기 전계 발광 소자의 수명 향상을 실현한다. 또한, 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 큰 부피로 인해 분자 대칭성이 무너지고 아모퍼스(amorphous)성이 향상되어 유기 전계 발광 소자의 효율 향상도 실현한다. 또한, 화학식 12 내지 16과 같이, 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene) 중 2개의 벤젠고리가 X를 통해 연결될 경우, 분자가 고정화되어, 전하 내성이 향상되는 효과가 있다.

[0225]

이하에서는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다. 이하에서는 앞서 설명한 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물과의 차이점을 위주로 구체적으로 설명하고, 설명되지 않은 부분은 앞서 설명한 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물에 따른다.

[0226]

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.

[0227]

도 1 및 도 2를 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 전자 수송 영역(ETR) 및 제2 전극(EL2)을 포함한다.

[0228]

제1 전극(EL1)은 도전성을 갖는다. 제1 전극(EL1)은 화소 전극 또는 양극일 수 있다. 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 화합물

이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 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.

[0229] 이하에서는, 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 다환 화합물이 정공 수송 영역(HTR) 및 발광층(EML) 중 적어도 하나에 포함되는 것을 예를 들어 설명한다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물은 제1 전극(EL1) 및 제2 전극(EL2) 사이에 제공된 1층 이상의 유기층 중 적어도 하나의 층에 포함될 수 있다.

[0230] 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 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.

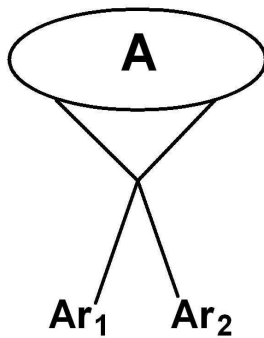
[0231] 정공 수송 영역(HTR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0232] 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(AN)로부터 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 저지층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0233] 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.

[0234] 정공 수송 영역(HTR)은 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물을 포함할 수 있다. 구체적으로, 정공 수송 영역(HTR)은 전술한 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함할 수 있다.

[0235] [화학식 1]

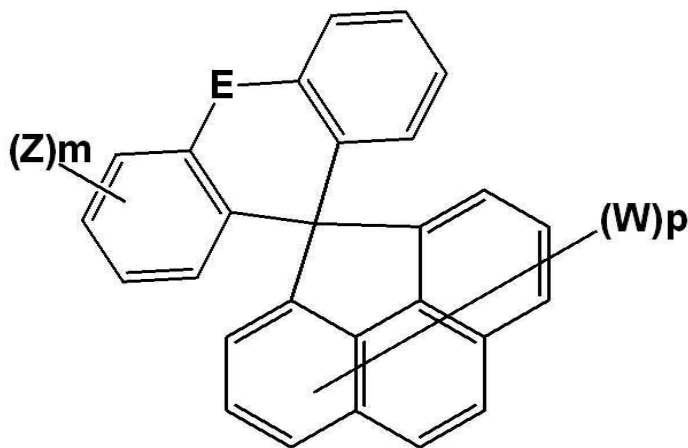


[0236]

[0237] A, Ar₁ 및 Ar₂에 관한 구체적인 설명은 전술한 바와 동일한 바 생략하도록 한다.

[0238] 정공 수송 영역(HTR)은 전술한 화학식 3으로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0239] [화학식 3]

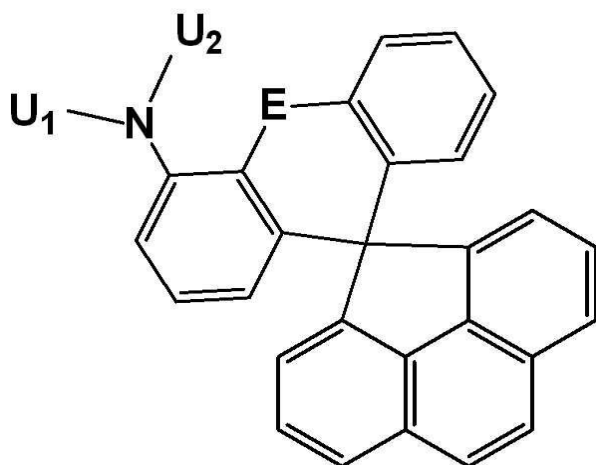


[0240]

[0241] 화학식 3에 관한 구체적인 설명은 전술한 바와 동일한 바 생략하도록 한다.

[0242] 정공 수송 영역(HTR)은 전술한 화학식 5로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0243] [화학식 5]



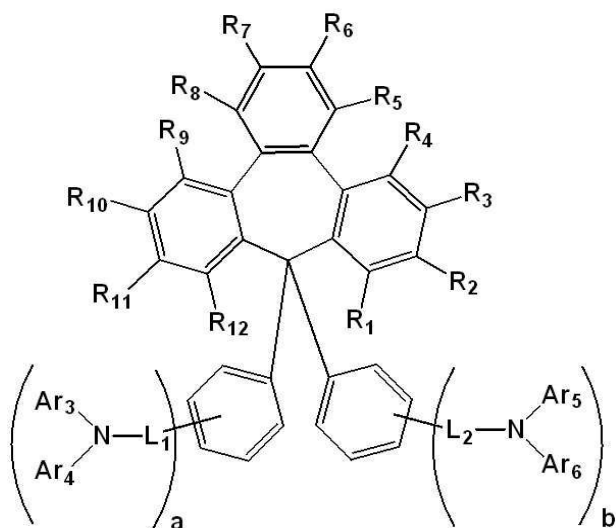
[0244]

[0245] 화학식 5에 관한 구체적인 설명은 전술한 바와 동일한 바 생략하도록 한다.

[0246] 정공 수송 영역(HTR)이 화학식 3 또는 5로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 경우, 다환 화합물이 아민기를 포함하여, 강한 전자 내성을 가질 수 있다. 또한, 아민기와 스피로페난트렌(Spirophenanthrene)계 화합물이 서로 결합하여, 아민기의 HOMO(highest occupied molecular orbital) 궤도 확산을 제어할 수 있고, 분자 대칭성을 무너뜨려 아모포스성을 향상시킬 수 있다. 이에 따라, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 장수명 및 높은 발광 효율을 얻을 수 있다.

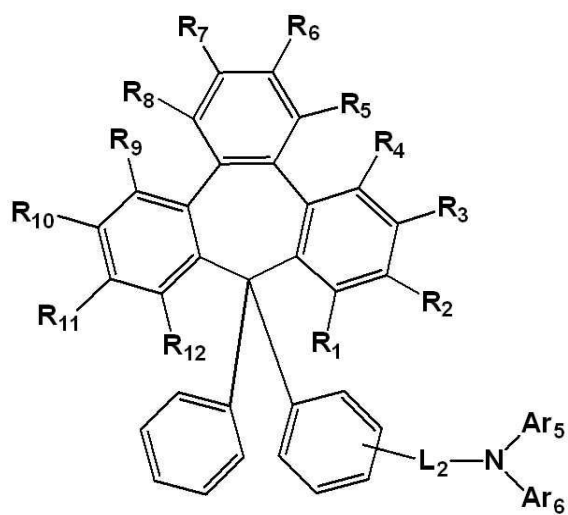
[0247] 정공 수송 영역(HTR)은 전술한 화학식 6, 6-1, 7 및 8 중 하나로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 이 경우, 아민에 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)을 도입하여, 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 높은 전자 내성에 의해 수명이 향상될 수 있으며, 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 큰 부피로 인해 분자 대칭성이 무너지면서 아모퍼스(amorphous)성이 향상하여 효율이 향상될 수 있다.

[0248] [화학식 6]



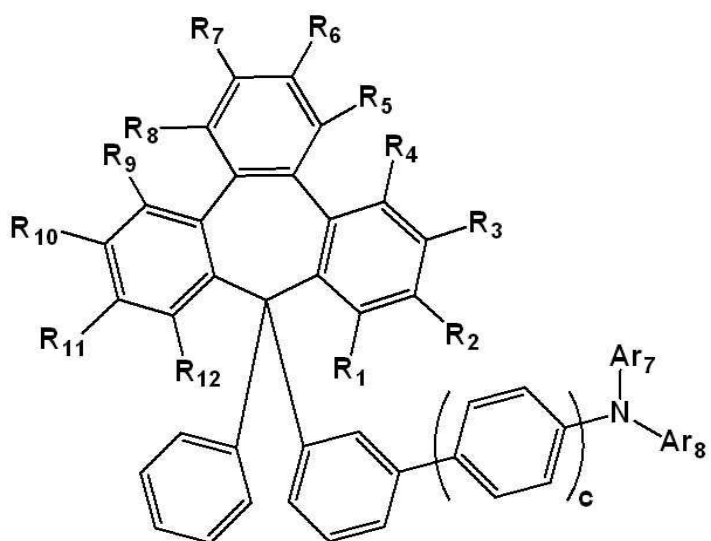
[0249]

[0250] [화학식 6-1]



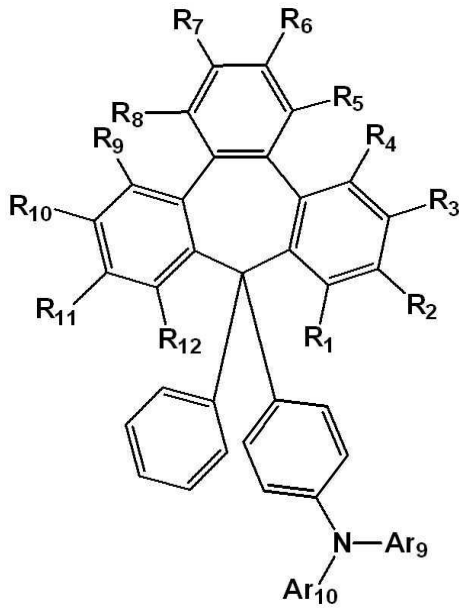
[0251]

[0252] [화학식 7]



[0253]

[0254] [화학식 8]

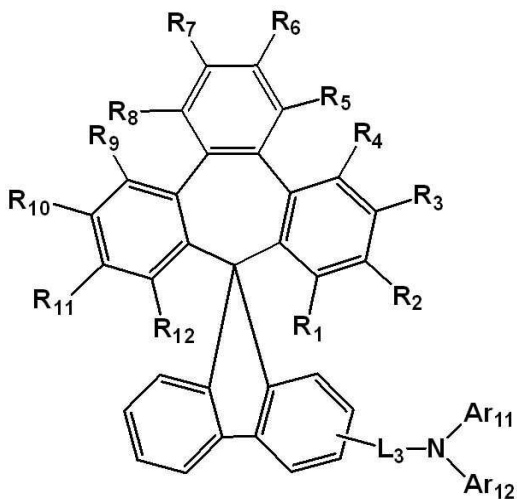


[0255]

[0256] 화학식 6, 6-1, 7 및 8에 관한 구체적인 설명은 전술한 바와 동일한 바 생략하도록 한다.

[0257] 정공 수송 영역(HTR)은 전술한 화학식 10으로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 이 경우, 아민에 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)을 도입하여, 아민의 높은 정공 수송성을 유지함과 동시에 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 높은 전하 내성에 의해 수명이 향상될 수 있으며, 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 큰 부피로 인해 분자 대칭성이 무너지면서 아모퍼스(amorphous)성이 향상하여 효율이 향상될 수 있다.

[0258] [화학식 10]



[0259]

[0260] 화학식 10에 관한 구체적인 설명은 전술한 바와 동일한 바 생략하도록 한다.

[0261] 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 층은 정공 수송층(HTL)일 수 있다. 정공 수송층(HTL)은 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 1종 또는 2종 이상 포함할 수 있다. 정공 수송층(HTL)은 화학식 1로 표시되는 다환 화합물 이외 공지의 재료를 더 포함하는 것일 수 있다.

[0262] 정공 수송층(HTL)이 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물을 포함하는 경우, 정공 주입층(HIL)은 예를 들어, 구리프탈로시아닌(copper phthalocyanine) 등의 프탈로시아닌(phthalocyanine) 화합물; DNTPD(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine), m-MTDATA(4,4',4''-tris(3-methylphenylphenylamino) triphenylamine), TDATA(4,4',4''-Tris(N,N-diphenylamino)triphenylamine), 2-TNATA(4,4',4''-tris(N, -(2-naphthyl)-N-phenylamino)-triphenylamine), PEDOT/PSS(Poly(3,4-

ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate)), PANI/DBSA(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid), PANI/CSA(Polyaniline/Camphor sulfonic acid), PANI/PSS((Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate)), NPB(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine), 트리페닐아민을 포함하는 폴리에테르케톤(TPAPEK), 4-Isopropyl-4'-methyldiphenyliodonium Tetrakis(pentafluorophenyl)borate] 등을 포함할 수도 있다.

[0263] 정공 수송층(HTL)이 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하지 않는 경우, 정공 수송층(HTL)은 공지의 재료를 포함하는 것일 수 있다. 예를 들어, 정공 수송층(HTL)은 N-페닐카바졸, 폴리비닐 카바졸 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, NPB(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTDP(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl) 등을 포함할 수도 있다.

[0264] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)을 모두 포함하면, 정공 주입층(HIL)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1000Å이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 30Å 내지 약 1000Å 일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR), 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0265] 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 퀸론(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 퀸론 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0266] 앞서 언급한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL) 외에, 정공 버퍼층 및 전자 저지층 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. 전자 저지층은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.

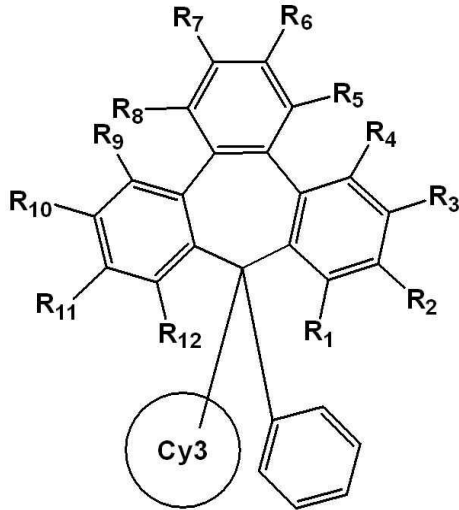
[0267] 발광층(EML)은 정공 수송 영역(HTR) 상에 제공된다. 발광층(EML)의 두께는 예를 들어, 약 100Å 내지 약 300Å 인 것일 수 있다. 발광층(EML)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0268] 발광층(EML)이 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 이 경우, 정공 수송 영역(HTR)은 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하지 않을 수도 있고, 포함할 수도 있다. 발광층(EML)은 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 호스트로서 포함하는 것일 수 있다.

[0269] 발광층(EML)은 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 1종 또는 2종 이상 포함할 수 있다. 발광층(EML)은 화학식 1로 표시되는 다환 화합물 이외 공지의 재료를 더 포함하는 것일 수 있다. 예를 들어, 스피로-DPVBi(spiro-DPVBi), 스피로-6P(spiro-6P), DSB(distyryl-benzene), DSA(distyryl-arylene), PFO(Polyfluorene)계 고분자 및 PPV(poly(p-phenylene vinylene)계 고분자로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나를 포함하는 형광 물질을 더 포함할 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 발광층(EML)은 인광 물질을 포함하는 것일 수도 있다.

[0270] 발광층(EML)은 전술한 화학식 11로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0271] [화학식 11]



[0272]

[0273] 화학식 11에 관한 구체적인 설명은 전술한 바와 동일한 바 생략하도록 한다.

[0274]

안트라세닐기 등 3환 또는 4환의 아릴기에 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)을 도입하여, 안트라세닐기 등의 우수한 발광 특성을 유지함과 동시에 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 높은 전하 내성에 의해 수명이 더욱 향상될 수 있으며, 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 큰 부피로 인해 분자 대칭성이 무너지면서 아포퍼스(amorphous)성이 향상하여 효율이 향상될 수 있다.

[0275]

본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 다환 화합물이 발광층(EML)에 포함되는 경우, 발광층(EML)은 공지의 재료를 포함하는 것일 수 있다. 예를 들어, 발광층(EML)은 카바졸 유도체, 트리아릴아민 유도체, 함질소 다환 유도체, 티오펜 유도체, 플란 유도체, 아자카바졸 유도체, 디아자카바졸(diazacarbazole) 유도체 등을 포함할 수 있고, 도펀트로 축합 다환 방향족 화합물을 포함할 수 있다. 예를 들어, 도펀트로 안트라센 유도체, 나프탈렌 유도체, 페난트렌 유도체, 피렌 유도체, 테트라센 유도체, 펜타센 유도체, 크리센 유도체, 페틸렌 유도체, 루브렌 유도체, 비닐안트라센 유도체 또는 디아미노카바졸 유도체 등을 포함할 수 있다. 도펀트 재료가 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 도펀트 재료로 구리 착물, 백금 착물 또는 이리듐 착물 등을 포함하는 것일 수도 있다.

[0276]

발광층(EML)은 예를 들어 10 nm 이상 60 nm 이하의 두께를 갖는 것일 수 있다.

[0277]

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.

[0278]

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.

[0279]

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(AN)로부터 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 1000Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.

[0280]

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.

[0281]

전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 Alq3(Tris(8-hydroxyquinolinato)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-phenylbenzoimidazolyl-1-yl)phenyl)-9,10-dinaphthylanthracene, TPBi(1,3,5-Tri(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl), 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, 이에 한정되는 것은 아니다. 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 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0282] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함할 경우, Al, Ag, Li, Mg 및 Ca 등의 금속 및 이들의 혼합물을 포함할 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 전자 주입층(EIL)에는 LiF, LiQ(Lithium quinolate), Li₂O, BaO, NaCl, CsF, Yb와 같은 란타넘족 금속, 또는 RbCl, RbI와 같은 할로겐화 금속 등이 사용될 수 있으나 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. 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.

[0283] 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.

[0284] 제2 전극(EL2)은 전자 수송 영역(ETR) 상에 제공된다. 제2 전극(EL2)은 공통 전극 또는 음극일 수 있다. 제2 전극(EL2)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제2 전극(EL2)이 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.

[0285] 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 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.

[0286] 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.

[0287] 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)로부터 주입된 전자가 전자 수송 영역(ETR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동된다. 전자와 정공은 발광층(EML)에서 재결합하여 여기자(exciton)를 생성하며, 여기자가 여기 상태에서 바닥 상태로 떨어지면서 발광하게 된다.

[0288] 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.

[0289] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하여 발광 효율 및 수명을 향상시킬 수 있다. 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)를 코어구조로 포함하며, 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 높은 전하 내성으로 인해 수명을 향상시킬 수 있으며, 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 큰 부피로 인해 분자 구조의 아모퍼스(amorphous)성을 향상시켜 고효율화를 실현할 수 있다.

[0290] 이하, 구체적인 제조 방법, 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.

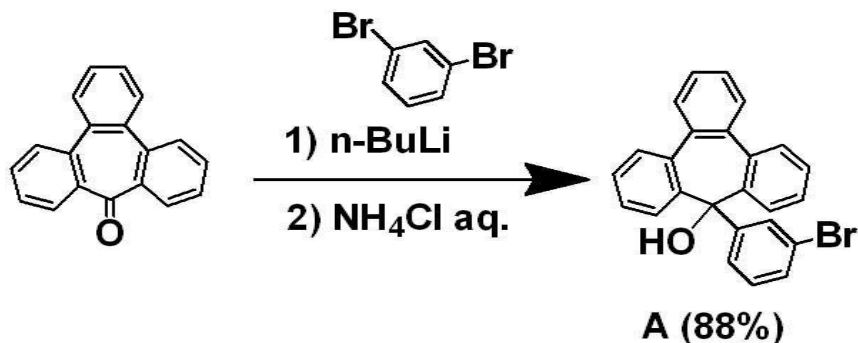
[0291] 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 예를 들어 하기와 같이 합성할 수 있다. 다만,

이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0292] (제조 방법)

[0293] 1. 화합물 9의 합성

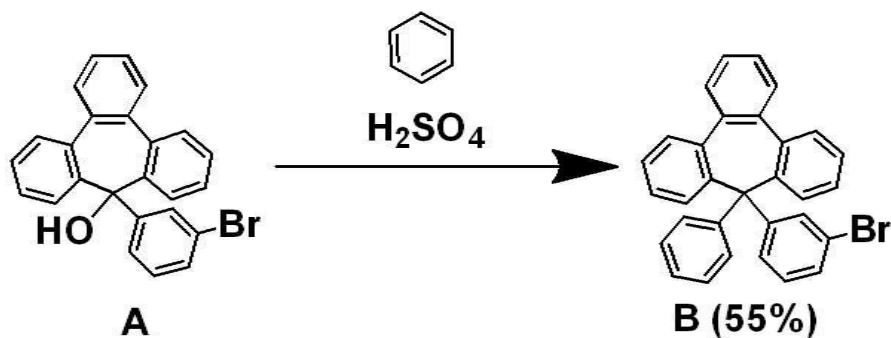
[0294] (화합물 A의 합성)



[0295]

[0296] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 1,3-디브로모벤젠(1,3-dibromobenzene) 5.00g을 넣고 40 mL THF 용매 중에서 -78°C 로 설정하였다. 그 후, n-BuLi의 헥센(hexane) 용액 (1.60M) 13.3mL을 서서히 가하면서 -78°C 에서 1시간 교반하였다. 그 후, 9H-트리벤조[a,c,e]-시클로헵텐-9-논(9H-Tribenzo[a,c,e]cycloheptane-9-one) 5.43g의 50mL THF 용액을 적하하고 실온으로 되돌려서 2시간 교반하였다. 그 후, 유기층을 분리하고, 용매 증류하였다. 얻어진 조생성물(Crude product)을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(톨루엔과 헥산 혼합 용매를 사용)로 정제 후, 톨루엔/헥산 혼합 용매로 재결정을 행하고, 흰색 고체의 화합물 A를 7.70g (수율 88 %) 얻었다.

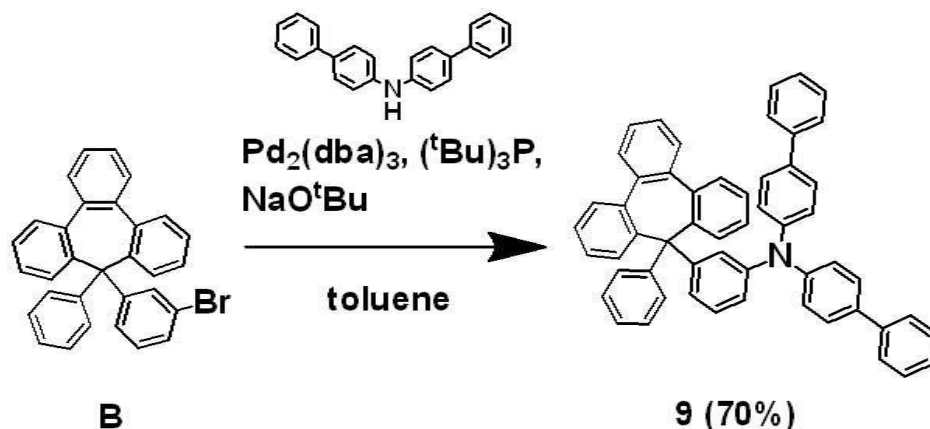
[0297] FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 A의 분자량은 345이었다.(화합물 B의 합성)



[0298]

[0299] 아르곤(Ar) 분위기 하, 100 mL의 삼구 플라스크에 화합물 A 4.13g을 25mL 벤젠(benzene) 용매에 녹이고 황산(H_2SO_4) 0.8mL을 용해시킨 벤젠(benzene) 3mL를 추가한 후, 5시간 80°C 에서 교반하였다. 공냉 후, NaHCO_3 수용액을 첨가하여 pH7로 조절한 후, 유기층을 분리하고, 용매 증류하였다. 얻어진 조생성물(Crude product)을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(톨루엔과 헥산 혼합 용매를 사용)로 정제 후, 톨루엔/헥산 혼합 용매로 재결정을 행하고, 흰색 고체의 화합물 B를 2.60g (수율 55 %) 얻었다.

[0300] FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 B의 분자량은 473이었다.(화합물 9의 합성)



[0301]

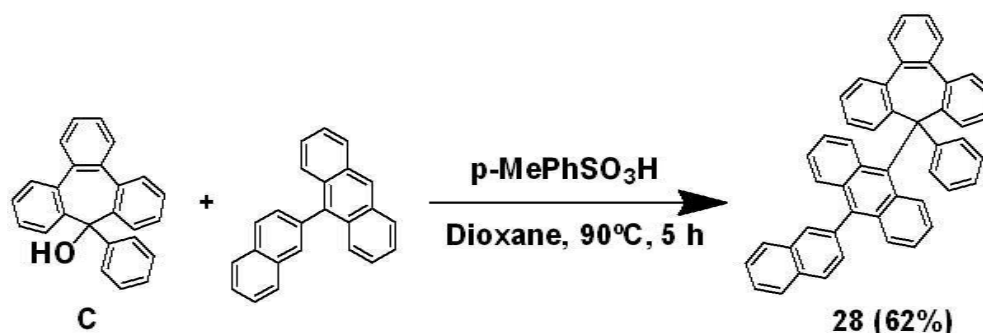
[0302] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 화합물 B 2.37g과 비스(4-비페닐릴)아민 (Bis (4-biphenyl) amine) 1.61g, 비스(디벤질리덴아세톤)팔라듐(0)(Pd(dba)₂) 0.264g, 트리-tert-부틸포스핀 ((t-Bu)₃P) 0.33g, 나트륨tert-부톡사이드(NaOt-Bu) 1.93g을 넣고 60mL 톨루엔(toluene) 용매 중에서 8 시간 가열 환류 교반하였다. 공냉 후, 물을 첨가해 유기 층을 분리하고, 용매 증류하였다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(디클로로메탄과 헥산과의 혼합 용매를 사용)로 정제 후, 톨루엔/헥산 혼합 용매로 재결정을 행하고, 흰색 고체의 화합물 9을 2.50g (수율 70 %) 얻었다.

[0303] FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 9의 분자량은 714이었다. 또한, ¹H-NMR (CDCl₃) 측정으로 측정된 화합물 9의 케미컬 시프트 값(δ)은 8.12(d, 2H, J = 7.20Hz), 7.93 d, 1H, J = 8.10Hz), 7.89-7.82(m, 5H), 7.80-7.74(m, 4H), 7.72(s, 1H), 7.71-7.63(m, 4H), 7.48-7.41(m, 12H)이었다.

[0304] 2. 화합물 10의 합성

[0305] 화합물 10은 화합물 9의 합성에서 비스(4-비페닐릴)아민(Bis(4-biphenyl)amine) 대신 N-[4-(1-나프탈레닐)페닐]-1-나프탈렌아민(N-[4-(1-naphthalenyl)phenyl]-1-naphthalenamine)을 사용한 것을 제외하고, 동일한 방법으로 합성하였다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 10의 분자량은 738이었다. 또한, ¹H-NMR (CDCl₃) 측정으로 측정된 화합물 10의 케미컬 시프트 값(δ)은 8.09(d, 2H, J = 7.10Hz), 7.96(d, 1H, J = 8.10Hz) 7.89-7.85(m, 9H), 7.80-7.74(m, 5H), 7.73(s, 1H), 7.71-7.66(m, 3H), 7.48-7.21(m, 18H)이었다.

[0306] 3. 화합물 28의 합성



[0307]

[0308] 아르곤(Ar) 분위기 하, 100 mL의 삼구 플라스크에 화합물 C 3.41g과 9-(2-나프탈레닐)-안트라센(9-(2-naphthalenyl)-anthracene) 3.05g와 p-MePhSO₃H 0.51g, 디옥세인(Dioxane) 45mL를 추가한 후, 5 시간 90 °C로 교반하였다. 공냉 후, NaHCO₃ 수용 액을 넣고 pH7로 조절한 후, 유기층을 분리하고, 용매 증류하였다. 얻어진 조생성물(Crude product)을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(톨루엔과 헥산 혼합 용매를 사용)로 정제 후, 톨루엔/헥산 혼합 용매로 재결정을 행하고, 흰색 고체의 화합물 28을 3.85g (수율 62 %) 얻었다.FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 28의 분자량은 621이었다. 또한, ¹H-NMR (CDCl₃) 측정으로 측정된 화합물 28의 케미컬 시프트 값

(δ)은 8.22-8.10(m, 9H), 8.02(d, 2H, $J = 7.20\text{Hz}$) 7.95(d, 1H, $J = 8.10\text{Hz}$), 7.92(s, 1H), 7.89-7.82(m, 9H), 7.80-7.74(m, 10H) 이었다.

[0309] 4. 화합물 30의 합성

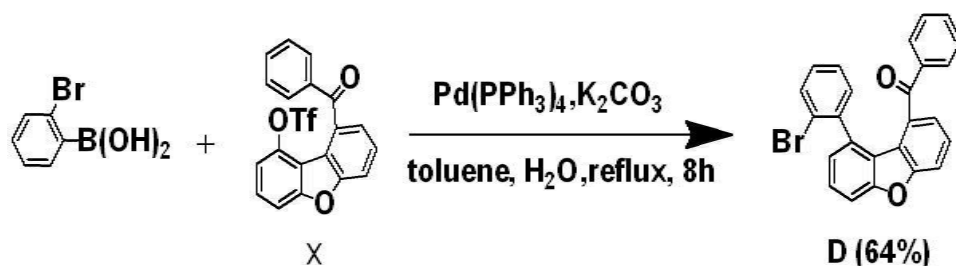
[0310] 화합물 30은 화합물 28의 합성에서 9-(2-나프탈레닐)-안트라센(9-(2-naphthalenyl)-anthracene) 대신 6-페닐-크리센(6-phenyl-chrysene)을 사용한 것을 제외하고, 동일한 방법으로 합성하였다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 30의 분자량은 621이었다. 또한, $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 측정으로 측정된 화합물 30의 케미컬 시프트 값(δ)은 8.20-8.10(m, 9H), 8.02(d, 2H, $J = 7.20\text{Hz}$) 7.90(d, 1H, $J = 8.10\text{Hz}$), 7.87(s, 1H), 7.82-7.77(m, 10H), 7.70-7.54(m, 9H)이었다.

[0311] 5. 화합물 36의 합성

[0312] 화합물 36은 화합물 28의 합성에서 9-(2-나프탈레닐)-안트라센(9-(2-naphthalenyl)-anthracene) 대신 N,N-디페닐-9-안트라센아민(N,N-diphenyl-9-anthracenamine)을 사용한 것을 제외하고, 동일한 방법으로 합성하였다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 30의 분자량은 662이었다. 또한, $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 측정에서 측정된 화합물 30의 chemical shift 값(δ)은 8.32 (s, 1H), 8.22-8.10 (m, 9H), 8.02 (d, 2H, $J = 7.20\text{Hz}$), 7.95 (d, 1H, $J = 8.10\text{Hz}$), 7.93 (d, 2H, $J = 8.10\text{Hz}$), 7.92 (s, 1H) 7.89-7.82 (m, 9H), 7.80-7.74 (m, 10H)이었다.

[0313] 6. 화합물 67의 합성

[0314] (화합물 D의 합성)

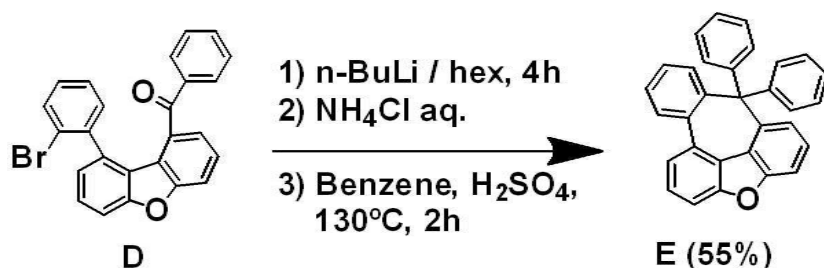


[0315]

[0316] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 2-브로모보론산(2-Bromoboronic acid 2.00g, 화합물 X 4.20g, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$)0.263g, 탄산칼륨(K_2CO_3) 3.86g을 첨가하여 톨루엔 50 mL, 물 20mL 혼합 용매 중에서 8 시간 가열 환류 교반 하였다. 공냉 후, 물을 첨가하여 유기층을 분리하고 용매 증류했다. 얻어진 조생성물(Crude product)을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(톨루엔과 헥산 혼합 용매를 사용)로 정제 후, 톨루엔/헥산 혼합 용매로 재결정을 행하여, 흰색 고체 화합물 D를 2.73g (수율 64 %) 얻었다.

[0317] FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 D의 분자량은 427이었다.

[0318] (화합물 E의 합성)



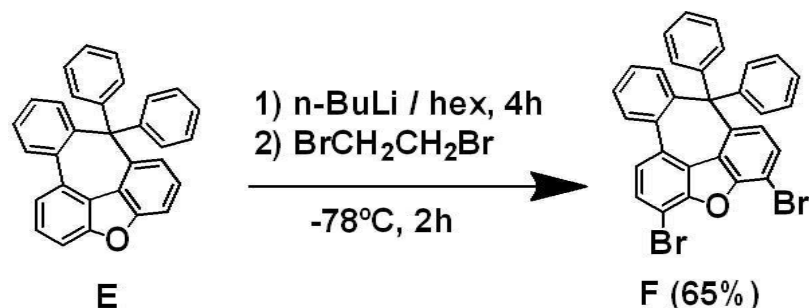
[0319]

[0320] 500mL의 삼구 플라스크에, 화합물 D 4.27g의 탈수 THF 용액 70mL를 첨가하여 -78 °C에서 교반 하였다. 여기에 1.58M의 n-BuLi의 헥산 용액을 6.75 mL를 적하하고, 2.5 시간 교반 하였다. 그 후, 실온에서 3 시간 교반 하였다. 반응 후, 이 혼합액에 포화 NH_4Cl 수용액을 첨가하고, 1 시간 교반 하였다. 이것을 물로 세척했다. 얻어진 유기상(organic phase)을 농축하여 백색 고체를 얻었다. 500mL 나스형 플라스크에, 이 물엿(candy-like) 상태의 물질과 벤젠(benzene) 100mL와 황산 2.4mL를 넣고 질소 분위기 하, 130 °C에서 2 시간 가열 교반하여 반응시켰다. 반응 후, 이 반응 혼합물을 빙랭한 350mL의 물에 적하했다. 백색 결정을 석출한 후, 생성된 고체를 여과 제

거하고 메탄올로 세척 후 건조시켰다. 백색 분말의 화합물 E를 2.24g(수율 55 %) 얻었다.

[0321] FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 E의 분자량은 408이었다.

[0322] (화합물 F의 합성)

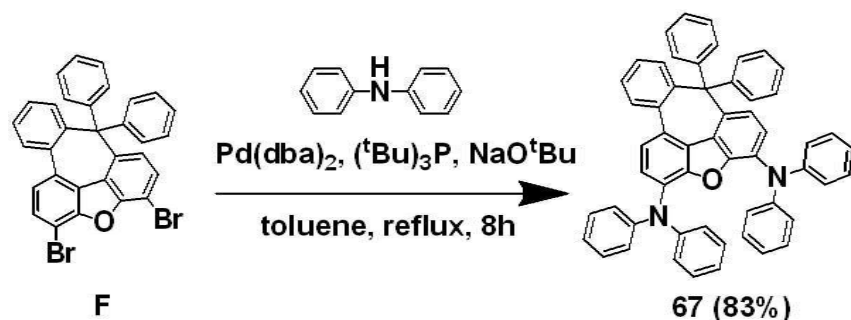


[0323]

[0324] 500mL의 삼구 플라스크에 화합물 E 4.08g 탈수 THF 용액 70mL를 첨가하여 -78 °C에서 교반 하였다. 여기에 1.58M의 n-BuLi의 헥센(hexane) 용액을 6.98mL를 적하하고 2.5 시간 교반 하였다. 여기에 1,2-디브로보에테인(1,2-dibromoethane) 1.20g의 탈수 THF 용액 85mL를 적하하여 2 시간 교반 한 후 실온에서 3 시간 교반 하였다. 반응 후, 이 혼합액에 1N 염산 수용액을 첨가하고, 1 시간 교반 하였다. 이것을 물로 세척했다. 얻어진 유기상을 농축하여 백색 고체를 얻었다. 생성된 고체를 여과하고, 에탄올(EtOH)/헥센(Hexane)으로 세척 후 건조시켰다. 백색 분말의 화합물 F를 3.68g(수율 65 %) 얻었다.

[0325] FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 F의 분자량은 566이었다.

[0326] (화합물 67의 합성)



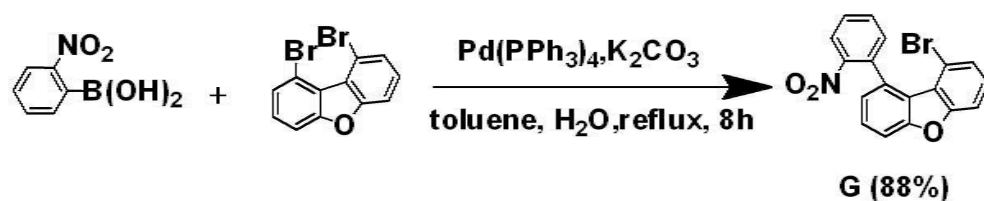
[0327]

[0328] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 화합물 F 5.66g, 디페닐아민(diphenylamine) 3.40 g, 비스(디벤질리덴아세톤)팔라듐(0)(Pd(dba)₂) 0.11g 및 나트륨tert-부톡시드(NaOt-Bu) 4.11g을 첨가하여 70mL 톨루엔(toluene) 용매 중에서 8 시간 가열 환류 교반 하였다. 냉각 후 물을 첨가하여 유기층을 분리하고 용매 증류했다. 얻어진 조생성물(Crude product)을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(톨루엔과 헥산 혼합 용매를 사용)로 정제 후, 톨루엔/헥산 혼합 용매로 재결정을 행하여, 백색 고체의 화합물 67을 6.17 g (수율 83 %) 얻었다.

[0329] FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 67의 분자량은 743이었다.

[0330] 7. 화합물 110의 합성

[0331] (화합물 G의 합성)



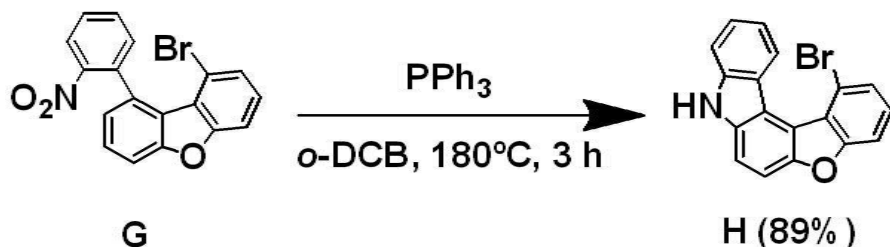
[0332]

[0333] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 2-니트로페닐보론산(2-nitrophenylboronic acid) 1.67g, 1,8-디브로모벤조퓨란(1,8-dibromodibenzofuran) 3.26g, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(Pd(PPh₃)₄)

0.263g, 및 탄산칼륨(K_2CO_3) 3.86g을 넣고 톨루엔(toluene) 50 mL, 물 20mL의 혼합 용매 중 8 시간 가열 환류 교반했다. 공냉 후, 물을 첨가하여 유기층을 분리하고 용매 증류했다 얻어진 조생성물(Crude product)을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(톨루엔과 헥산 혼합 용매를 사용)로 정제 후, 톨루엔/헥산 혼합 용매로 재결정을 행하여, 흰색 고체의 화합물 G를 3.24g (수율 88 %) 얻었다.

[0334] FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 G의 분자량은 368이었다.

[0335] (화합물 H의 합성)

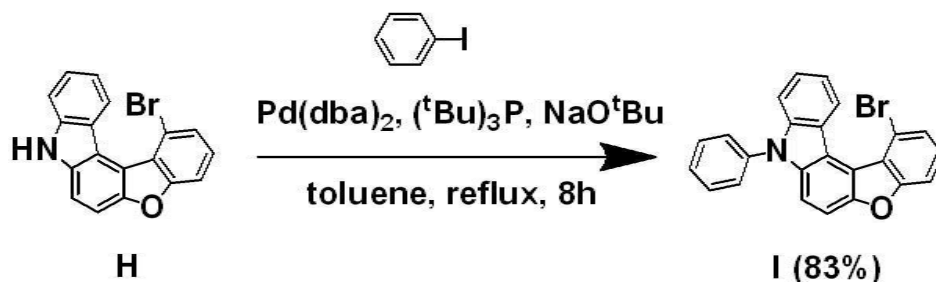


[0336]

[0337] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 화합물 G 1.84g 및 PPh_3 2.51g을 넣고 80 mL o-DCB 용매 중 180 °C에서 3 시간 가열 교반했다. 공냉 후, 물을 첨가하여 유기층을 분리하고 용매 증류했다 얻어진 조생성물(Crude product)을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(톨루엔과 헥산 혼합 용매를 사용)로 정제 후, 톨루엔/헥산 혼합 용매로 재결정을 행하여, 흰색 고체의 화합물 H를 1.50g (수율 89 %) 얻었다.

[0338] FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 H의 분자량은 336이었다.

[0339] (화합물 I의 합성)

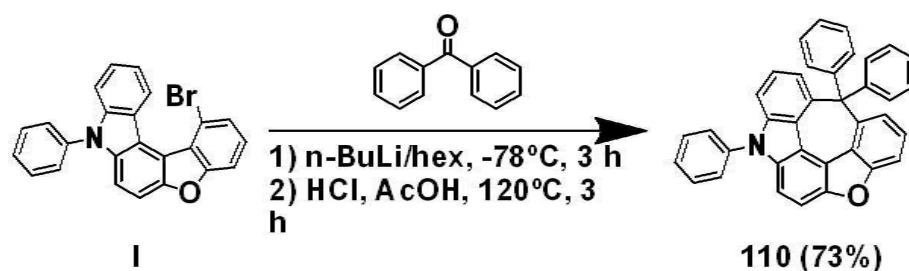


[0340]

[0341] 아르곤(Ar) 분위기 하, 200 mL의 삼구 플라스크에 화합물 H 3.36g, 요오드벤젠(Iodobenzene) 1.00g, 비스(디벤질리덴아세톤)파라듐(0)($Pd(dba)_2$) 0.243g, (t-Bu)₃P 0.13g 및 나트륨tert-부톡시드($NaOt\text{-Bu}$) 2.13g을 넣고 70mL 톨루엔(toluene) 용매 중 8 시간 가열 환류 교반했다. 공냉 후, 물을 첨가하여 유기층을 분리하고 용매 증류했다 얻어진 조생성물(Crude product)을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(톨루엔과 헥산 혼합 용매를 사용)로 정제 후, 톨루엔/헥산 혼합 용매로 재결정을 행하여, 흰색 고체의 화합물 I를 3.42g (수율 83 %) 얻었다.

[0342] FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 I의 분자량은 412이었다.

[0343] (화합물 110의 합성)



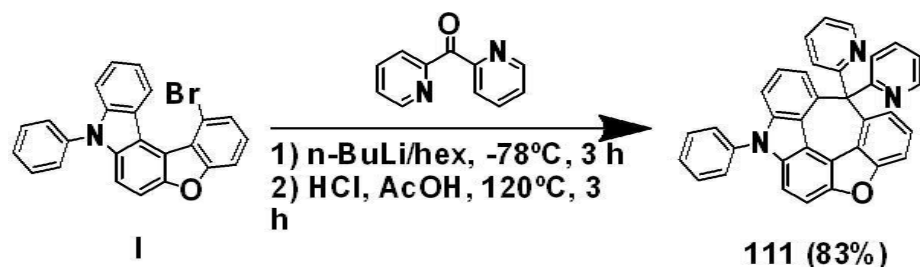
[0344]

[0345] 300mL의 삼구 플라스크에 화합물 I 4.12g의 탈수 THF 용액을 30mL를 -78 °C에서 교반했다. 여기에 1.58M의 n-BuLi의 헥센(hexane) 용액을 6.3mL 적하하고 2.5 시간 교반했다. 여기에 벤조페논(benzophenone) 1.60 g의 탈수 THF 용액 45mL를 적하 하고 2 시간 교반 한 후, 실온에서 3 시간 교반했다. 반응 후, 혼합액에 1N 염산 수용

액을 첨가하고 1 시간 교반했다. 이를 물로 세정했다. 얻어진 유기상을 농축하여, 점성 고체를 얻었다. 300mL의 플라스크에 상기 점성 고체와 빙초산 30mL 및 염산 1.4mL를 넣어 질소 분위기 하, 130 °C에서 2 시간 가열 교반하고 반응시켰다. 반응 후, 이 반응 혼합액을 빙랭한 150mL의 물에 적하 했다. 백색 결정을 석출한 후, 생성된 고체를 여과 제거하고 메탄올로 세척 후 건조시켰다. 최종적으로, 화합물 110의 백색 분말 3.64g(수율 73 %)을 얻었다.

[0346] FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 110의 분자량은 498이었다.

[0347] 8. 화합물 111의 합성



[0348]

[0349] 300mL의 삼구 플라스크에 화합물 I 4.12g의 탈수 THF 용액을 30mL 첨가하여 -78 °C에서 교반했다. 여기에 1.58M의 n-BuLi의 헥센(hexane) 용액을 6.3mL 적하하고 2.5 시간 교반했다. 여기에 디-2-피리디닐-메탄온(di-2-pyridinyl-methanone) 1.64g의 탈수 THF 용액 45mL를 적하 하고 2 시간 교반 한 후, 실온에서 3 시간 교반했다. 반응 후, 이 혼합액에 1N 염산 수용액을 첨가하고 1 시간 교반 했다. 이를 물로 세정했다. 얻어진 유기상을 농축한 뒤 점성 고체를 얻었다. 300mL의 플라스크에, 이 점성 고체와 빙초산 30mL 및 염산 1.4mL를 넣어 질소 분위기하, 130 °C에서 2 시간 가열 교반하고 반응시켰다. 반응 후, 이 반응 혼합액을 빙랭한 150mL의 물에 적하했다. 백색 결정을 석출한 후, 생성된 고체를 여과 제거하고 메탄올로 세척 후 건조시켰다. 최종적으로, 화합물 111의 백색 분말을 4.15g(수율 83 %)을 얻었다.

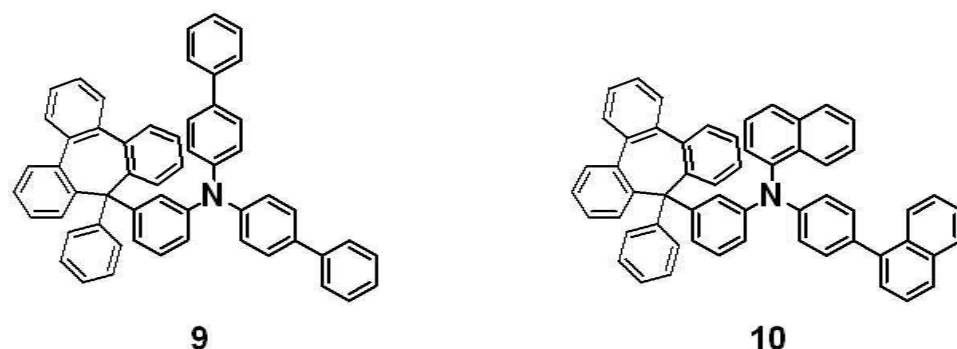
[0350] FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 111의 분자량은 500이었다.

[0351] (실험예)

[0352] 1. 실험예 1

[0353] 상술한 화합물 9 및 화합물 10을 정공 수송 재료로 사용하여 실시예 1 및 실시예 2의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

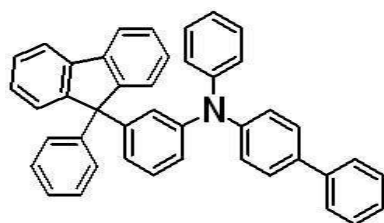
[0354] [실시예 화합물]



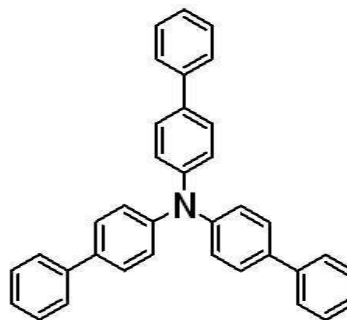
[0355]

[0356] 하기 비교예 화합물 X-1 및 X-2를 정공 수송 재료로 사용하여 비교예 1 및 비교예 2의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0357] [비교예 화합물]



X-1



X-2

[0358]

[0359] 실시예 1, 2 및 비교예 1, 2의 유기 전계 발광 소자는 ITO로 150nm 두께의 제1 전극을 형성하고, TNANA로 60nm 두께의 정공 주입층을 형성하고, 30nm 두께의 정공 수송층을 형성하고, ADN에 TBP를 3% 도프한 25nm 두께의 발광층을 형성하고, Alq3로 25nm 두께의 전자 수송층을 형성하고, LiF로 1nm 두께의 전자 주입층을 형성하고, Al로 100nm 두께의 제2 전극을 형성하였다. 각 층은 진공 분위기 하에서 증착법에 의해 형성하였다.

[0360] 다음으로 제작한 유기 전계 발광 소자의 구동 전압, 발광 효율 및 반감 수명을 평가하였다. 평가 결과를 하기 표 1에 나타낸다. 각 실시예 및 비교예의 구동 전압, 및 발광 효율은 10 mA/cm²의 전류 밀도에서의 측정값이다. 또한, 반감 수명은 1000 cd/m²를 초기 휘도로 하여 측정한 결과이다.

[0361] 또한, 측정은 Keithley Instruments 사의 2400 시리즈의 소스 메타(source meter), 색채 휘도계 CS-200(주식회사 코니카미놀타 홀딩스(Konica Minolta Holdings), 측정각 1°), 측정용 PC 프로그램 LabVIEW8. 2(주식회사 일본 내셔널 인스트루먼트즈(National Instruments))를 사용하여 암실 내에서 행하였다.

표 1

[0362]

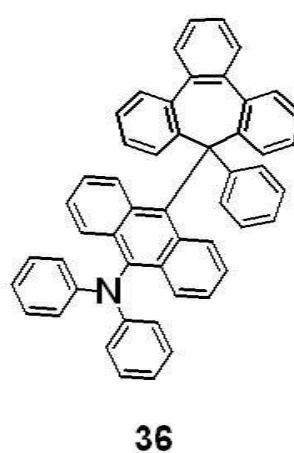
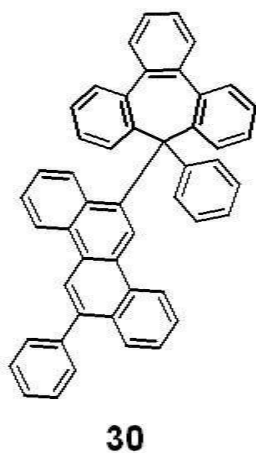
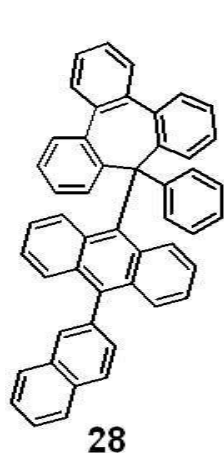
	정공 수송층	구동 전압 (V)	발광 효율 (cd/A)	수명 LT50(h)
실시예 1	실시예 화합물 9	5.4	6.5	2,100
실시예 2	실시예 화합물 10	5.5	6.5	2,050
비교예 1	비교예 화합물 X-1	6.3	5.2	1,500
비교예 2	비교예 화합물 X-2	6.5	5.0	1,450

[0363] 상기 표 1의 결과를 참조하면, 실시예 1 및 실시예 2는 비교예 1 및 비교예 2에 비하여 수명 및 효율이 향상되었음을 알 수 있다. 실시예 1에 사용된 실시예 화합물 9 및 실시예 2에 사용된 실시예 화합물 10은 각각 아민에 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)이 도입된 구조를 가지며, 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 높은 전하 내성으로 인해 아민의 우수한 정공 수송 능력을 유지함과 동시에 수명이 향상된다. 또한, 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 큰 부피로 인해 분자 대칭성이 무너지면서 아모퍼스(amorphous)성이 향상되어 높은 소자 효율을 나타내게 된다. 비교예 1에 사용된 비교예 화합물 X-1은 아민에 플루오레닐(fluorenyl)기가 도입된 구조를 가지며, 플루오레닐기의 부피가 충분히 크지 않아, 결정성이 높고 아모퍼스(amorphous) 성이 부족하여 저효율 및 짧은 수명을 보이게 된다. 비교예 2에 사용된 비교예 화합물 X-2는 분자 전체의 평면성이 높아 결정성이 높고, 아모퍼스(amorphous) 성이 부족하기 때문에 저효율 및 짧은 수명을 보이게 된다.

[0364] 2. 실험예 2

[0365] 상술한 화합물 28, 화합물 30 및 화합물 36을 발광층 호스트 재료로 사용하여 실시예 3 내지 실시예 5의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

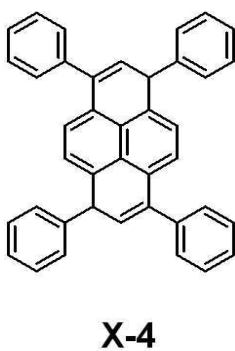
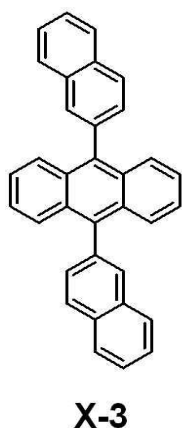
[0366] [실시에 화합물]



[0368]

[0369] 하기 비교예 화합물 B-1 및 B-2를 발광층 호스트 재료로 사용하여 비교예 3 및 비교예 4의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0370] [비교예 화합물]



[0371]

[0372] 실시예 3 내지 5 및 비교예 3, 4의 유기 전계 발광 소자는 ITO로 150nm 두께의 제1 전극을 형성하고, TNANA로 60nm 두께의 정공 주입층을 형성하고, α -NPD로 30nm 두께의 정공 수송층을 형성하고, TBP를 3% 도프한 25nm 두께의 발광층을 형성하고, Alq3로 25nm 두께의 전자 수송층을 형성하고, LiF로 1nm 두께의 전자 주입층을 형성하고, Al로 100nm 두께의 제2 전극을 형성하였다. 각 층은 진공 분위기 하에서 증착법에 의해 형성하였다.

[0373] 다음으로 제작한 유기 전계 발광 소자의 구동 전압, 발광 효율 및 반감 수명을 평가하였다. 평가 결과를 하기 표 2에 나타낸다. 각 실시예 및 비교예의 구동 전압, 및 발광 효율은 10 mA/cm²의 전류 밀도에서의 측정값이다. 또한, 반감 수명은 1000 cd/m²를 초기 휘도로 하여 측정한 결과이다.

[0374] 또한, 측정은 Keithley Instruments 사의 2400 시리즈의 소스 메타(source meter), 색채 휘도계 CS-200(주식회사 코니카미놀타 홀딩스(Konica Minolta Holdings), 측정각 1°), 측정용 PC 프로그램 LabVIEW8. 2(주식회사 일본 내셔널 인스트루먼트(National Instruments))를 사용하여 암실 내에서 행하였다.

표 2

[0375]

	발광층 호스트 재료	구동 전압 (V)	발광 효율 (cd/A)	수명 LT50(h)
실시예 3	실시예 화합물 28	5.7	6.2	2,000
실시예 4	실시예 화합물 30	5.6	6.3	2,050
실시예 5	실시예 화합물 36	5.7	6.2	1,950
비교예 3	비교예 화합물 X-3	6.5	5.2	1,600

비교예 4	비교예 화합물 X-4	6.6	4.8	1,650
-------	-------------	-----	-----	-------

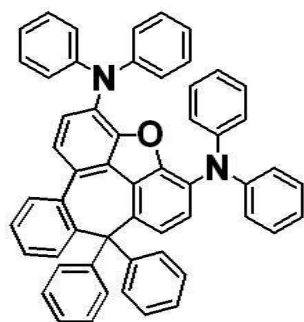
[0376] 상기 표 2의 결과를 참조하면, 실시예 3 내지 실시예 5는 비교예 3 및 4에 비하여 수명 및 효율이 향상되었음을 알 수 있다. 실시예 3에 사용된 실시예 화합물 28, 실시예 4에 사용된 실시예 화합물 30 및 실시예 5에 사용된 화합물 36은 각각 3환 또는 4환의 아릴기에 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)이 도입된 구조를 가지며, 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 높은 전하 내성으로 인해 다환 아릴기의 우수한 발광 특성을 유지함과 동시에 수명이 향상된다. 또한, 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 큰 부피로 인해 분자 대칭성이 무너지면서 아모퍼스(amorphous)성이 향상되어 높은 소자 효율을 나타내게 된다. 비교예 3에 사용된 비교예 화합물 X-3은 안트라센의 9, 10번 부위에 나프탈렌이 치환되어 있어, 평면성 및 대칭성이 높다. 이로 인해, 결정성이 높고, 아모퍼스(amorphous)성이 부족하여 저효율 및 짧은 수명을 보이게 된다. 비교예 4에 사용된 비교예 화합물 X-4는 평면성 및 대칭성이 높은 분자 구조를 가져, 결정성이 높고 아모퍼스(amorphous)성이 부족하여 저효율 및 짧은 수명을 보이게 된다.

[0377] 상기 표 1 및 상기 표 2의 결과로부터 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물을 유기 전계 발광 소자에 이용한 경우, 효율 및 수명 향상 효과가 나타남을 알 수 있다.

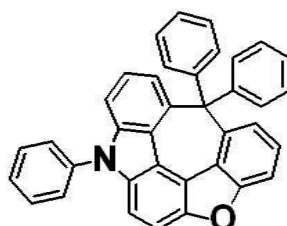
[0378] 3. 실험예 3

[0379] 상술한 화합물 67 및 화합물 110을 정공 수송 재료로 사용하여 실시예 6 및 실시예 7의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0380] [실시예 화합물]



67

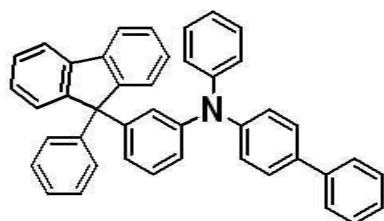


110

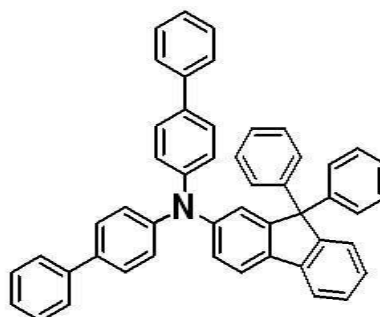
[0381]

[0382] 하기 비교예 화합물 X-5 및 X-6를 정공 수송 재료로 사용하여 비교예 1 및 비교예 2의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0383] [비교예 화합물]



X-5



X-6

[0384]

[0385] 실시예 6, 7 및 비교예 5, 6의 유기 전계 발광 소자는 ITO로 150nm 두께의 제1 전극을 형성하고, TNANA로 60nm 두께의 정공 주입층을 형성하고, 30nm 두께의 정공 수송층을 형성하고, ADN에 TBP를 3% 도프한 25nm 두께의 발광층을 형성하고, Alq3로 25nm 두께의 전자 수송층을 형성하고, LiF로 1nm 두께의 전자 주입층을 형성하고, Al

로 100nm 두께의 제2 전극을 형성하였다. 각 층은 진공 분위기 하에서 증착법에 의해 형성하였다.

[0386] 다음으로 제작한 유기 전계 발광 소자의 구동 전압, 발광 효율 및 반감 수명을 평가하였다. 평가 결과를 하기 표 3에 나타낸다. 각 실시예 및 비교예의 구동 전압, 및 발광 효율은 10 mA/cm²의 전류 밀도에서의 측정값이다. 또한, 반감 수명은 1000 cd/m²를 초기 휘도로 하여 측정한 결과이다.

[0387] 또한, 측정은 Keithley Instruments 사의 2400 시리즈의 소스 메타(source meter), 색채 휘도계 CS-200(주식회사 코니카미놀타 홀딩스(Konica Minolta Holdings), 측정각 1°), 측정용 PC 프로그램 LabVIEW8. 2(주식회사 일본 내셔널 인스트루먼트즈(National Instruments))를 사용하여 암실 내에서 행하였다.

표 3

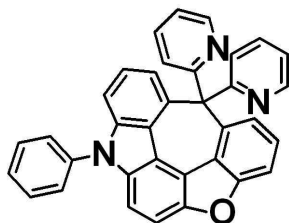
	정공 수송층	구동 전압 (V)	발광 효율 (cd/A)	수명 LT50(h)
실시예 6	실시예 화합물 67	5.4	6.5	2,100
실시예 7	실시예 화합물 110	5.5	6.5	2,050
비교예 5	비교예 화합물 X-5	6.3	5.2	1,500
비교예 6	비교예 화합물 X-6	6.5	5.0	1,550

[0389] 상기 표 3의 결과를 참조하면, 실시예 6 및 실시예 7은 비교예 5 및 비교예 6에 비하여 수명 및 효율이 향상되었음을 알 수 있다. 실시예 6에 사용된 실시예 화합물 67 및 실시예 7에 사용된 화합물 110은 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 높은 전하 내성으로 인해 다환 아릴기의 우수한 발광 특성을 유지함과 동시에 수명이 향상된다. 또한, 트리벤조시클로헵텐(tribenzocycloheptene)의 큰 부피로 인해 분자 대칭성이 무너지면서 아모퍼스(amorphous)성이 향상되어 높은 소자 효율을 나타내게 된다. 비교예 5에 사용된 비교예 화합물 X-5 및 비교예 6에 사용된 비교예 화합물 X-6은 아모퍼스(amorphous)성이 부족하여 저효율 및 짧은 수명을 보이게 된다.

[0390] 4. 실험예 4

[0391] 상술한 화합물 111을 발광층 호스트 재료로 사용하여 실시예 8의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0392] [실시예 화합물]

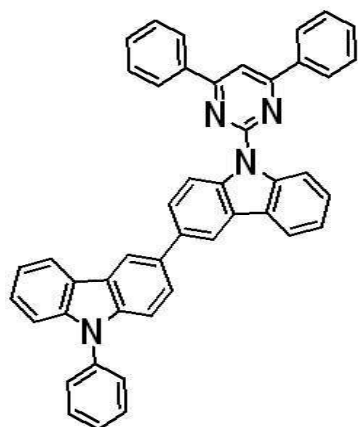


111

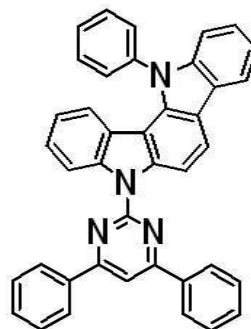
[0393]

[0394] 하기 비교예 화합물 X-7 및 X-8을 발광층 호스트 재료로 사용하여 비교예 7 및 8의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0395] [비교예 화합물]



X-7



X-8

[0396]

[0397] 실시예 8, 비교예 7 및 8의 유기 전계 발광 소자는 ITO로 150nm 두께의 제1 전극을 형성하고, TNANA로 60nm 두께의 정공 주입층을 형성하고, HMTPD(4, 4'-Bis(N,N'-(3-tolyl)amino)-3,3'-dimethylbiphenyl)로 30nm 두께의 정공 수송층을 형성하고, Ir(ppy)₃를 20% 도프한 25nm 두께의 발광층을 형성하고, Alq3로 25nm 두께의 전자 수송층을 형성하고, LiF로 1nm 두께의 전자 주입층을 형성하고, Al로 100nm 두께의 제2 전극을 형성하였다. 각 층은 진공 분위기 하에서 증착법에 의해 형성하였다.

[0398] 다음으로 제작한 유기 전계 발광 소자의 구동 전압, 발광 효율 및 반감 수명을 평가하였다. 평가 결과를 하기 표 4에 나타낸다. 각 실시예 및 비교예의 구동 전압, 및 발광 효율은 10 mA/cm²의 전류 밀도에서의 측정값이다. 또한, 반감 수명은 1000 cd/m²를 초기 휘도로 하여 측정한 결과이다.

[0399] 또한, 측정은 Keithley Instruments 사의 2400 시리즈의 소스 메타(source meter), 색채 휘도계 CS-200(주식회사 코니카미놀타 홀딩스(Konica Minolta Holdings), 측정각 1°), 측정용 PC 프로그램 LabVIEW8. 2(주식회사 일본 내셔널 인스트루먼트(National Instruments))를 사용하여 암실 내에서 행하였다.

표 4

[0400]

	발광층 호스트 재료	구동 전압 (V)	발광 효율 (cd/A)	수명 LT50(h)
실시예 8	실시예 화합물 111	4.0	35.3	2,300
비교예 7	비교예 화합물 X-7	4.9	29.2	1,500
비교예 8	비교예 화합물 X-8	5.5	28.8	1,450

[0401] 상기 표 4의 결과를 참조하면, 실시예 8은 비교예 7 및 8에 비하여 수명 및 효율이 향상되었음을 알 수 있다.

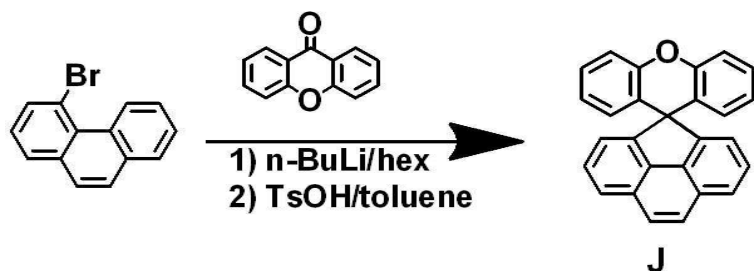
[0402] 상기 표 1 내지 표 4의 결과로부터 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 유기 전계 발광 소자에 이용한 경우, 효율 및 수명 향상 효과가 나타남을 알 수 있다.

[0403] 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 예를 들어 하기와 같이 합성할 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0404] (제조 방법)

[0405] 9. 화합물 A-3의 합성

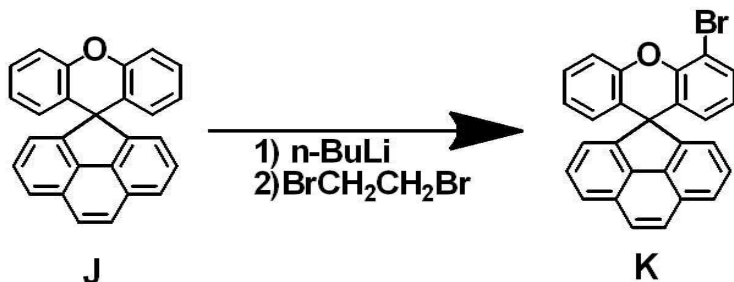
[0406] (화합물 J의 합성)



[0407]

[0408] 아르곤(Ar) 분위기 하에서, 200mL의 삼구 플라스크에 4-브로모나프탈렌 1.3g을 넣고, 30mL의 THF(Tetrahydrofuran)에 용해하고, 0℃에 냉각하고 여기에 1.6M n-부틸리튬 및 핵산용액 3.1mL를 적하하였다. 여기에 9H-xanthene-9-one 0.98g을 포함한 THF 용액 30mL를 첨가하여 2시간 교반하였다. 반응액에 물을 첨가하여 유기층을 선별하고 용매증류하였다. 얻어진 생성물에 p-톨루엔 sulfonic acid 0.86g을 포함한 톨루엔 30mL 첨가하고 110℃에서 1시간 가열하였다. 공냉 후 반응액에 물을 첨가하여 유기층을 선별하는 용매증류하였다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토 그래피(톨루엔 및 핵산)에서 정제하고 흰색 고체의 화합물 J를 0.71g(수율 40%) 얻었다. 얻어진 화합물 J의 분자량을 FAB-MS 측정 결과 356(C₂₇H₁₆O)라는 값을 얻었다.

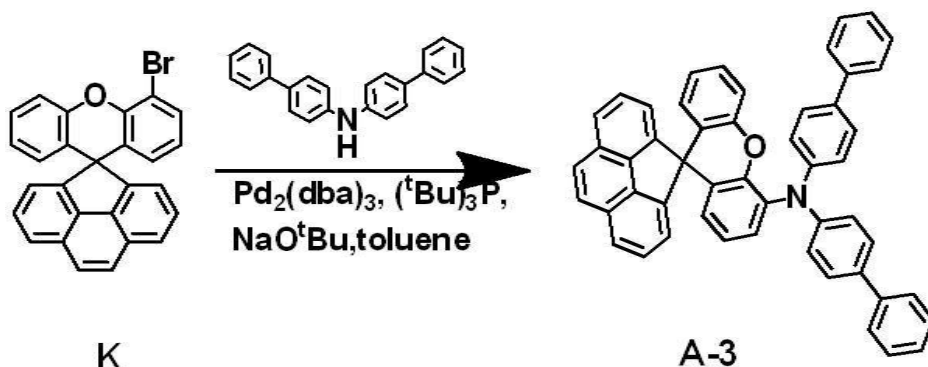
[0409] (화합물 K의 합성)



[0410]

[0411] 아르곤(Ar) 분위기 하에서 200mL의 삼구 플라스크에 화합물 J 1.78g을 제공하여 30mL의 THF에 용해하고, 0℃로 냉각하고 여기에 1.6M n-부틸리튬 및 핵산 용액 3.1mL를 적하하였다. 여기에 1,2-다이브로모메탄 1.00g을 포함한 THF 용액 30mL를 넣고 5시간 동안 교반하였다. 반응액에 물을 가하여 유기층을 선별하여 용매 증류하였다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토 그래피(톨루엔 및 핵산)로 정제하여 백색 고체의 화합물 K를 1.30g(수율 60%) 얻었다. 얻어진 화합물 K의 분자량을 FAB-MS 측정 한 결과, 434(C₂₇H₁₅OBr)라는 값을 얻었다.

[0412] (화합물 A-3의 합성)



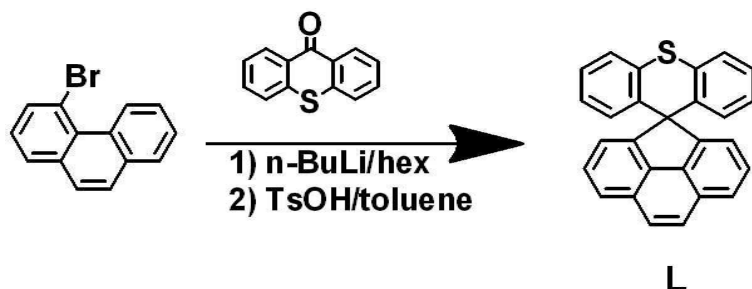
[0413]

[0414] 아르곤(Ar) 분위기 하에서 200mL의 삼구 플라스크에 화합물 K 2.18g, bis(1,1'-biphenyl)-4-ylamine 1.61g, tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0) 0.46g, tri-tert-butylphosphine 0.16g 및 sodium tert-butoxide 1.93g을 가하여 60mL의 톨루엔 용매중에서 7시간 가열 환류하였다. 공랭 후 반응액에 물을 가하여 유기층을 선별하여 용매 증류하였다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토 그래피(톨루엔 및 핵산)로 정제하여 백색 고체의 화합물 A-3을 2.36g(수율 70%) 얻었다. 얻어진 화합물 A-3의 분자량을 FAB-MS 측정 한 결과,

675(C₅₁H₃₃NO)라는 값을 얻었다. FAB-MS는 JEOL제 JMS-700을 사용하여 측정하였다.

[0415] 10. 화합물 A-12의 합성

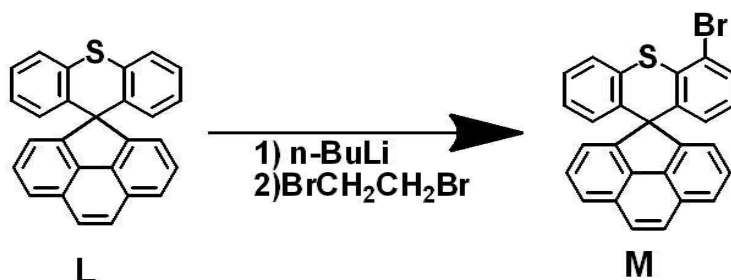
[0416] (화합물 L의 합성)



[0417]

[0418] 아르곤(Ar) 분위기 하에서 200mL의 3구 플라스크에 4-브로모페난트렌(4-bromophenanthrene) 1.3g을 제공하여 30ml의 THF에 용해하고, 0℃로 냉각 하고, 여기에 1.6M n-부틸리튬 및 헥산 용액 3.1ml를 적하하였다. 여기에 9H-thioxanthene-9-one 1.06g을 포함하는 THF 용액 30ml를 첨가하여 2시간 교반하였다. 반응액에 물을 첨가하여 유기층을 분리하고 용매 증류하였다. 얻어진 생성물에 p-톨루엔 sulfonic acid 0.86g을 포함하는 톨루엔 30ml 첨가해 110℃에서 1시간 가열 하였다. 공랭 후 반응액에 물을 첨가하여 유기층을 분리하고 용매 증류하였다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토 그래피(톨루엔 및 헥산)로 정제하여 백색 고체의 화합물 L을 0.73g(수율 39%) 얻었다. 얻어진 화합물 L의 분자량을 FAB-MS 측정 한 결과, 372(C₂₇H₁₆S)라는 값을 얻었다. FAB-MS는 JEOL제 JMS-700을 사용하여 측정하였다.

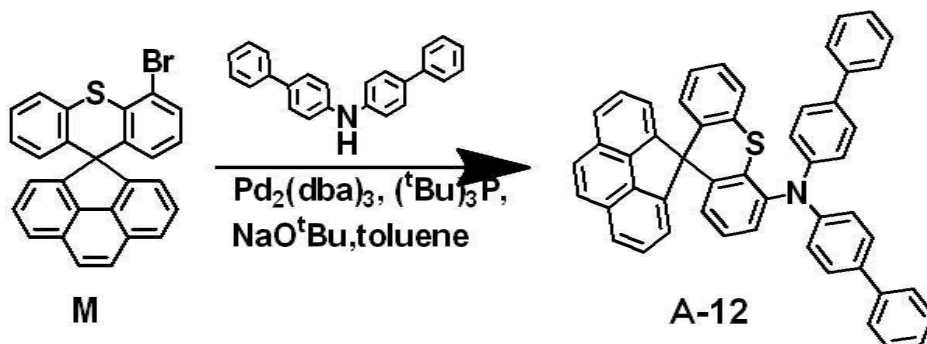
[0419] (화합물 M의 합성)



[0420]

[0421] 아르곤(Ar) 분위기 하에서 200mL의 삼구 플라스크에 화합물 C 1.86g을 제공하여 30ml의 THF에 용해하고, 0℃로 냉각하여 여기에 1.6M n-부틸리튬 및 헥산 용액 3.1ml를 적하하였다. 여기에 1,2-디브로모에탄 1.00g을 포함하는 THF 용액 30ml를 넣고 5시간 교반하였다. 반응액에 물을 첨가하여 유기층을 분리하고 용매 증류하였다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토 그래피(톨루엔 및 헥산)로 정제하여 백색 고체의 화합물 M을 1.24g(수율 55%) 얻었다. 얻어진 화합물 M의 분자량을 FAB-MS 측정 한 결과, 450(C₂₇H₁₅SBr)라는 값을 얻었다. FAB-MS는 JEOL제 JMS-700을 사용하여 측정하였다.

[0422] (화합물 A-12의 합성)



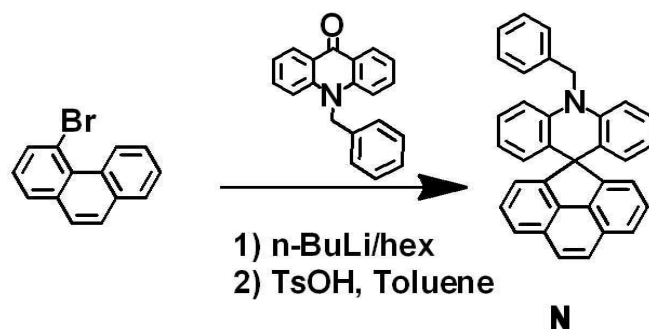
[0423]

[0424] 아르곤(Ar) 분위기 하에서 200mL의 삼구 플라스크에 화합물 M 2.26g, bis(1,1'-biphenyl)4-ylamine 1.61g,

tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0)0.46g, tri-tert-butylphosphine0.16g 및 sodium tert-butoxide1.93g을 첨가하여 60mL의 톨루엔 용매에서 7시간 가열 환류하였다. 공냉 후 반응액에 물을 첨가하여 유기층을 분리하고 용매 증류하였다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토 그래피(톨루엔 및 헥산)로 정제하여 흰색 고체 화합물 A-12를 2.30g(수율 66%) 얻었다. 얻어진 화합물 A-12의 분자량을 FAB-MS 측정 한 결과, 691(C₅₁H₃₃NS)라는 값을 얻었다. FAB-MS는 JEOL제 JMS-700을 사용하여 측정하였다.

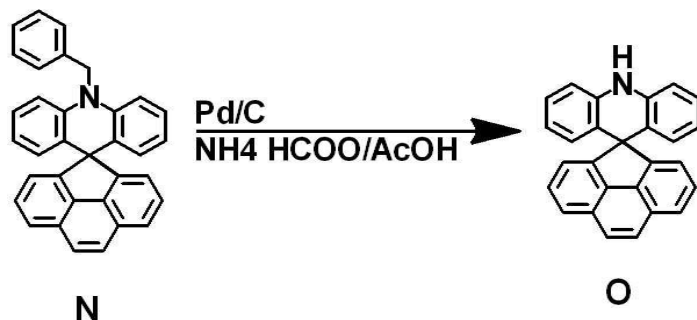
11. 화합물 A-21의 합성

(화합물 N의 합성)



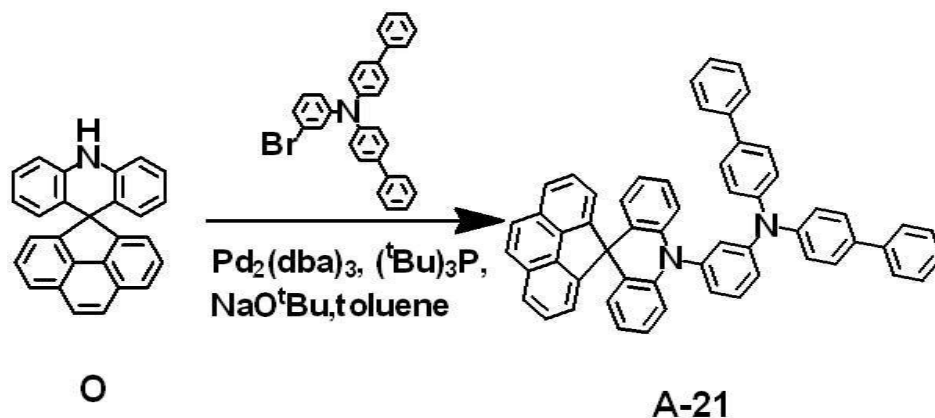
아르곤(Ar) 분위기 하에서 200mL의 삼구 플라스크에 4-브로모나프탈렌 1.3g을 제공하여 30mL의 THF에 용해하고, 0℃로 냉각 이에 1.6M n-부틸리튬 및 헥산 용액 3.1mL를 적하하였다. 여기에 10-benzylacridine-9(10H)-one 1.42g을 포함한 THF 용액 30mL를 가하여 2시간 동안 교반하였다. 반응액에 물을 가하여 유기층을 선별하고, 용매 증류하였다. 얻어진 생성물에 p-톨루엔 sulfonic acid0.86g를 포함하는 톨루엔 30mL 가하여 110℃에서 1시간 가열 하였다. 공냉 후 반응액에 물을 가하여 유기층을 선별하고 용매 증류하였다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토 그래피(톨루엔 및 헥산)로 정제하여 흰색 고체 화합물 N을 0.78g(수율 35%) 얻었다. 얻어진 화합물 N의 분자량을 FAB-MS 측정 한 결과, 445(C₃₄H₂₃N)라는 값을 얻었다. FAB-MS는 JEOL제 JMS-700을 사용하여 측정하였다.

(화합물 O의 합성)



200mL의 삼구 플라스크에 화합물 N 2.22g 및 Pd/C 2.2g을 제공하여 초산 60mL와 Ammonium formate 2g을 가하여 48 시간 환류하였다. 공냉한 반응액을 여과하고 클로로포름으로 세척 하였다. 여기에 물을 가하고 2M NaOH 수용액으로 중화하고 유기층을 선별하고 농축 하였다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토 그래피(톨루엔 및 헥산)로 정제하여 흰색 고체 화합물 O를 1.33g(수율 75%) 얻었다. 얻어진 화합물 O의 분자량을 FAB-MS 측정 한 결과, 355(C₂₇H₁₇N)라는 값을 얻었다. FAB-MS는 JEOL제 JMS-700을 사용하여 측정하였다.

[0432] (화합물 A-21의 합성)



[0433]

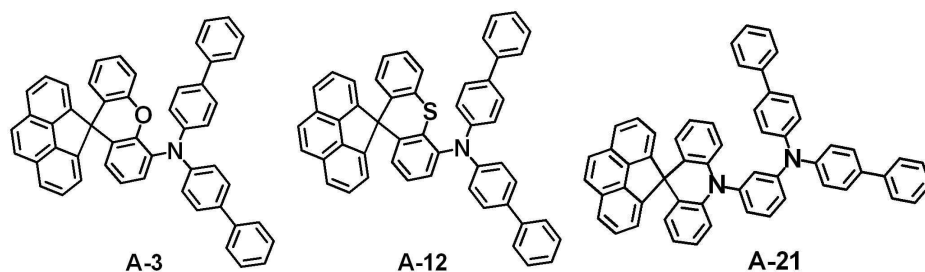
[0434] 아르곤(Ar) 분위기 하에서 200mL의 삼구 플라스크에 화합물 O 1.78g, N-(1,1'-biphenyl)-4-yl)-N-(3-bromophenyl)-[1,1'-biphenyl]-4-amine 2.34g, tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0) 0.46g, tri-tert-butylphosphine 0.16g 및 sodium tert-butoxide 1.93g을 가하여 60mL의 톨루엔 용매 중에서 7시간 가열 환류하였다. 공랭 후 반응액에 물을 가하여 유기층을 선별하고 용매 증류하였다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토 그래피(톨루엔 및 헥산)로 정제하여 흰색 고체 화합물 A-21을 2.82g(수율 75%) 얻었다. 얻어진 화합물 A-21의 분자량을 FAB-MS 측정 한 결과, 750(C₅₇H₃₈N₂)을 얻었다. FAB-MS는 JEOL제 JMS-700을 사용하여 측정하였다.

[0435] (실험예)

[0436] 5. 실험예 5

[0437] 상술한 화합물 A-3, A-12 및 A-21을 정공 수송 재료로 사용하여 실시예 9 내지 11의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

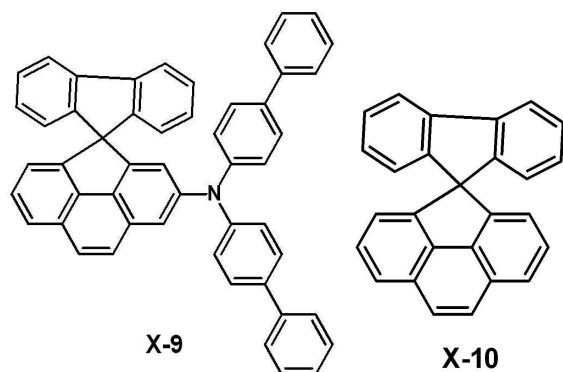
[0438] [실시예 화합물]



[0439]

[0440] 하기 비교예 화합물 X-9 및 X-10을 정공 수송 재료로 사용하여 비교예 9 및 비교예 10의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0441] [비교예 화합물]



[0442]

[0443] ITO로 150nm 두께의 양극을 형성하고, 2-TNATA로 60nm 두께의 정공 주입층을 형성하고, 30nm 두께의 정공 수송

층을 형성하고, 25nm 두께의 발광층을 형성하고, Alq3로 25nm 두께의 전자 수송층을 형성하고, LiF로 1nm 두께의 전자 주입층을 형성하고, Al으로 100nm 두께의 음극을 형성하였다.

[0444] 다음으로 제작한 유기 전계 발광 소자의 발광 효율을 평가하였다. 평가 결과를 하기 표 5에 나타낸다. 발광 효율은 10 mA/cm^2 의 전류 밀도에서의 측정값이다.

[0445] 소자의 전류 밀도는 Keithley Instruments 사의 2400 Series의 Source Meter, 전압은 주식회사 Konica Minolta Holdings사의 색채 회도계 CS-200, 발광 효율은 주식회사 일본 national Instruments 사의 측정용 PC Program LabVIEW8.2을 사용하여 측정하였다.

표 5

소자 작성 예	정공 수송층	전류 밀도(mA/cm^2)	발광 효율(cd/A)
실시예 9	실시예 화합물 A-3	10	6.6
실시예 10	실시예 화합물 A-12	10	6.5
실시예 11	실시예 화합물 A-21	10	6.4
비교예 9	비교예 화합물 X-9	10	5.4
비교예 10	비교예 화합물 X-10	10	0.4

[0447] 상기 표 5의 결과를 참조하면, 실시예 9 내지 11의 유기 전계 발광 소자가 비교예 9 및 10의 유기 전계 발광 소자보다 발광 효율이 우수함을 확인할 수 있다. 실시예 9 내지 11에 각각 사용된 실시예 화합물 A-3, A-12 및 A-21은 비교예 9 및 10에 각각 사용된 비교예 화합물 X-9 및 X-10과 비교하였을 때, 정공 수송 능력이 있는 헤테로 원자를 포함하는 바, 정공 수송성이 향상되어 우수한 발광 효율을 나타낸다.

[0448] 이상, 첨부된 도면을 참조하여 본 발명의 실시예를 설명하였지만, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명이 그 기술적 사상이나 필수적인 특징으로 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예는 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

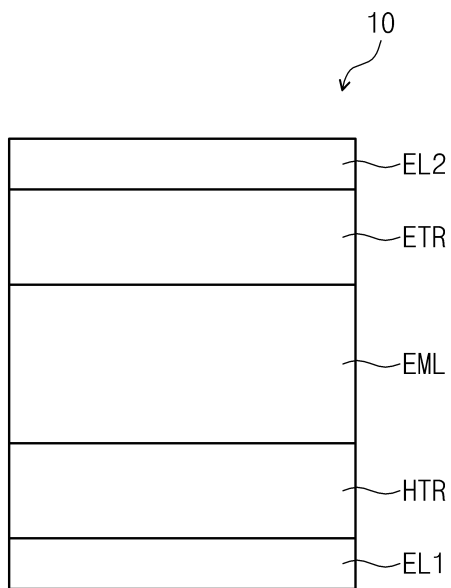
[0449] 10: 유기 전계 발광 소자 EL1: 제1 전극

HTR: 정공 수송 영역 EML: 발광층

ETR: 전자 수송 영역 EL2: 제2 전극

도면

도면1



도면2

