



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0114778
(43) 공개일자 2019년10월10일

- | | |
|--|--|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/0071 (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2019-0031140</p> <p>(22) 출원일자 2019년03월19일
심사청구일자 없음</p> <p>(30) 우선권주장
1020180036243 2018년03월29일 대한민국(KR)</p> | <p>(71) 출원인
룸엔드하스전자재료코리아유한회사
충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)</p> <p>(72) 발명자
이가원
경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
전지송
경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
(뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인
장훈</p> |
|--|--|

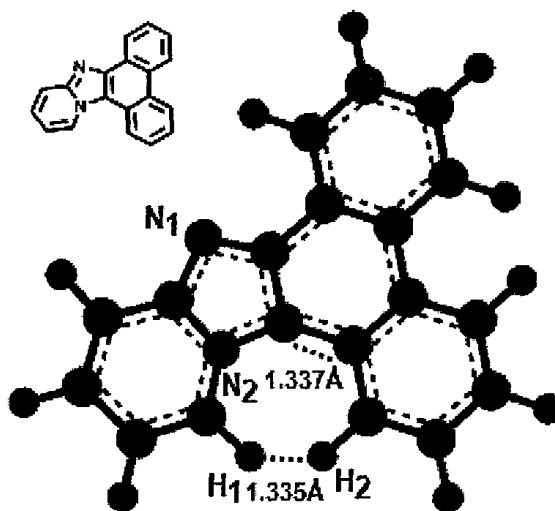
전체 청구항 수 : 총 8 항

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

(57) 요약

본원은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써 낮은 구동전압 및/또는 높은 발광효율을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

H01L 51/0072 (2013.01)

H01L 51/50 (2013.01)

C09K 2211/1044 (2013.01)

C09K 2211/1048 (2013.01)

C09K 2211/1051 (2013.01)

C09K 2211/1059 (2013.01)

C09K 2211/1062 (2013.01)

(72) 발명자

양정은

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

박정진

경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

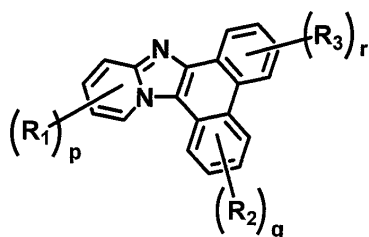
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물:

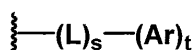
[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

R_1 , R_2 및 R_3 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되고;

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이며;

Ar은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이고;

R_1 내지 R_3 은 각각 독립적으로 화학식 2로 표시되거나, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환체끼리 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

p 내지 r는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이며;

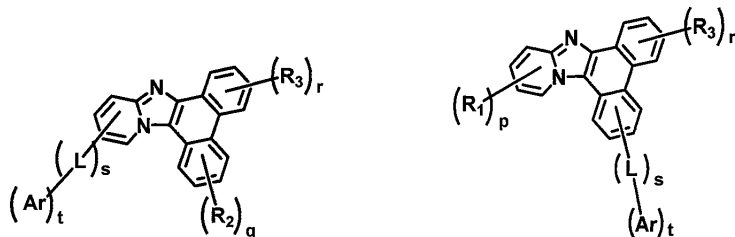
s 및 t는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고;

p 내지 t가 2 이상인 경우, 각각의 R_1 , 각각의 R_2 , 각각의 R_3 , 각각의 L 및 각각의 Ar은 서로 같거나 상이할 수 있다.

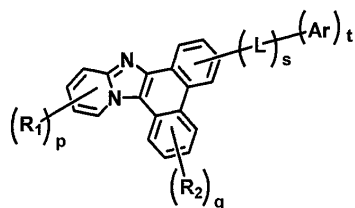
청구항 2

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

[화학식 1-1] [화학식 1-2]



[화학식 1-3]



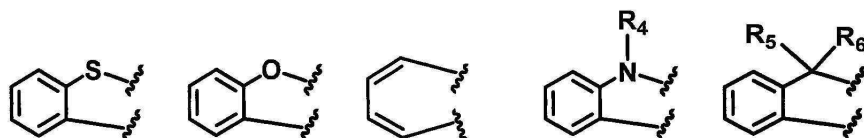
상기 화학식 1-1 내지 1-3에서,

L, Ar, R₁ 내지 R₃ 및 p 내지 t는 제1항에서의 정의와 같다.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 화학식 1에서, R₁ 내지 R₃ 중 하나 이상이 인접한 치환체끼리 서로 연결되어 고리를 형성하는 경우, 하기 화학식 3 내지 7 중 적어도 하나의 고리를 형성하는, 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 3] [화학식 4] [화학식 5] [화학식 6] [화학식 7]



상기 화학식 6 및 7에서,

R₄ 내지 R₆은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고; R₅ 및 R₆은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

청구항 4

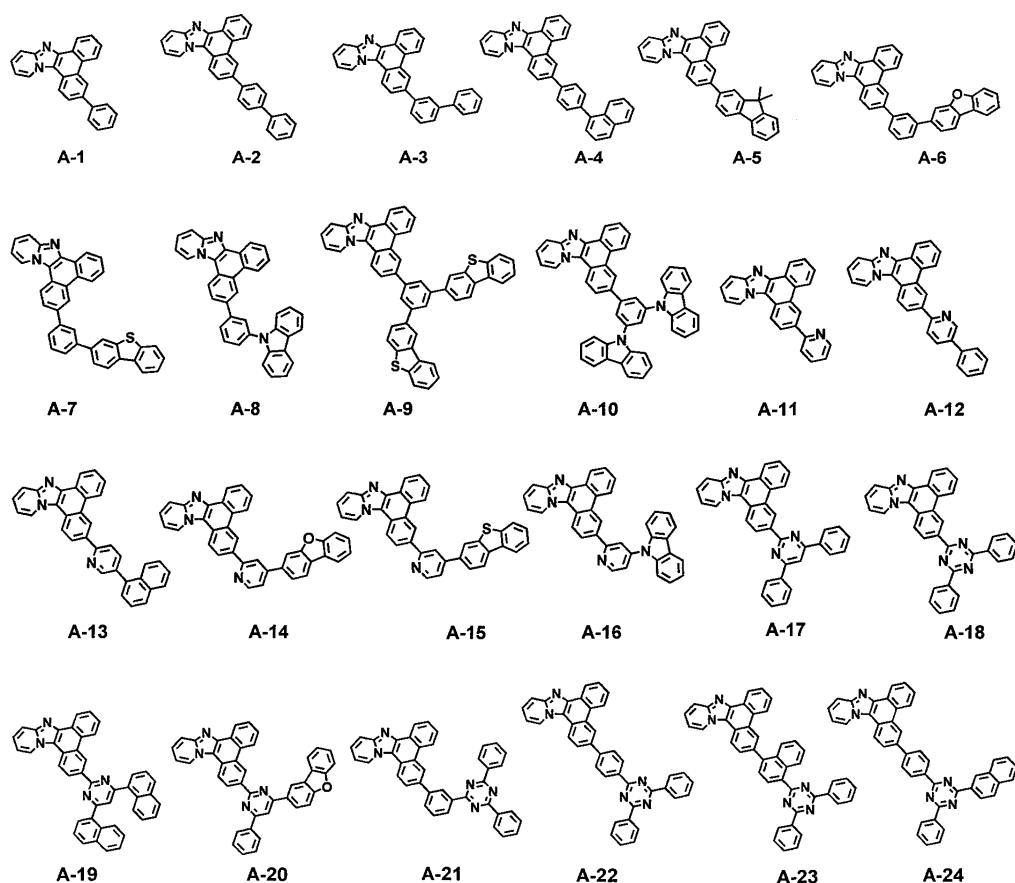
제1항에 있어서, Ar이 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 터페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸페닐, 치환 또는 비치환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐, 치환 또는 비치환된 트리아진일, 치환 또는 비치환된 피리딜, 치환 또는 비치환된 피리미딘일, 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리미딘일, 치환 또는 비치환된 아세나프토피리미딘일, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 벤조퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 디벤조퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조티에노퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조푸로퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴, 치환 또는 비치환된 피라졸릴, 치환 또는 비치환된 카바졸릴, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란일, 치환 또는 비치환된 벤조푸란일, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸리닐, 치환 또는 비치환된 페난트로이미다졸릴, 치환 또는 비치환된 디페닐아미노, 치환 또는 비치환된 페닐비페닐아미노, 치환 또는 비치환된 플루오렌페닐아미노, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일페닐아미노, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조푸란일페닐아미노인, 유기 전계 발광 화합물.

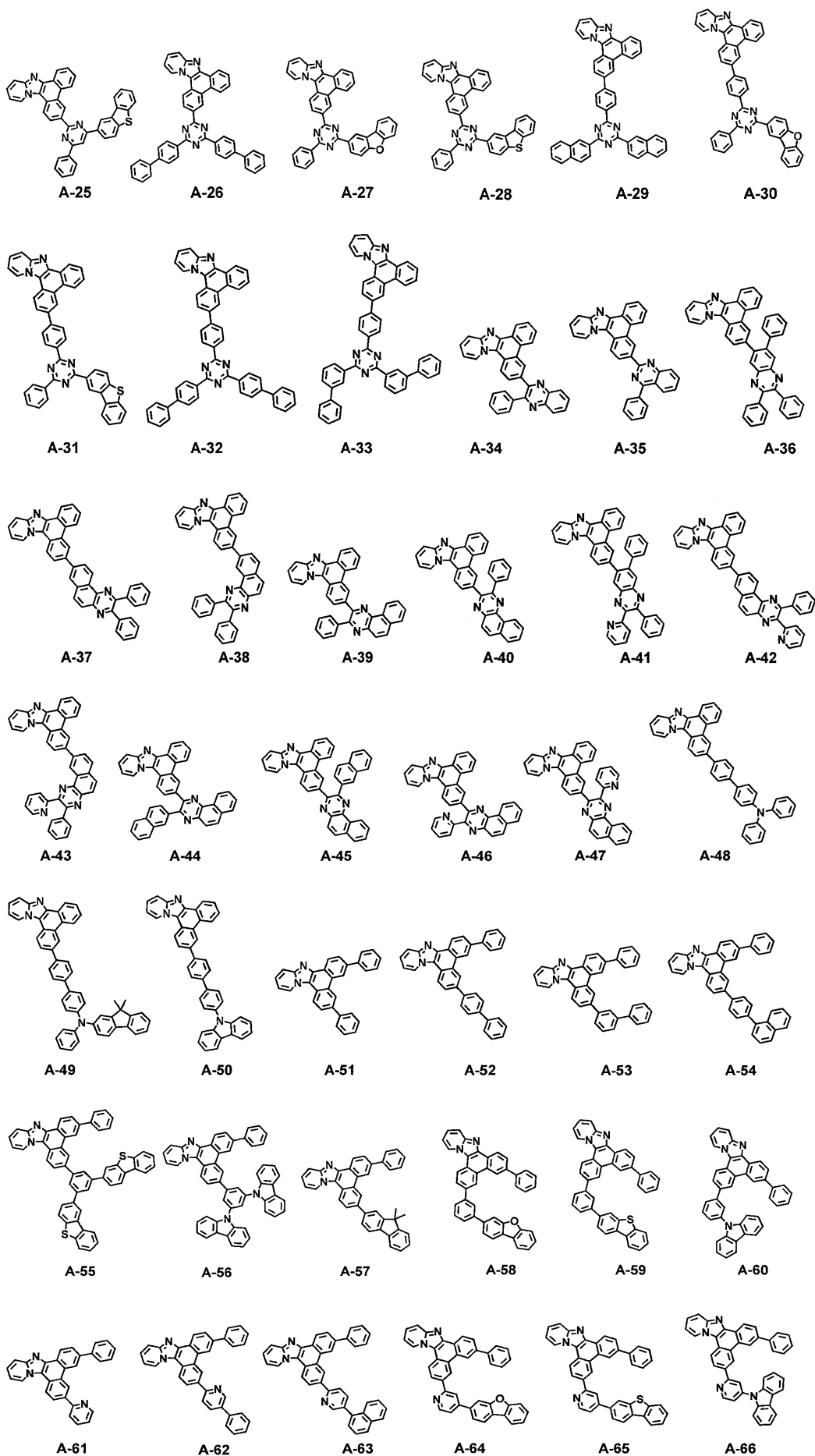
청구항 5

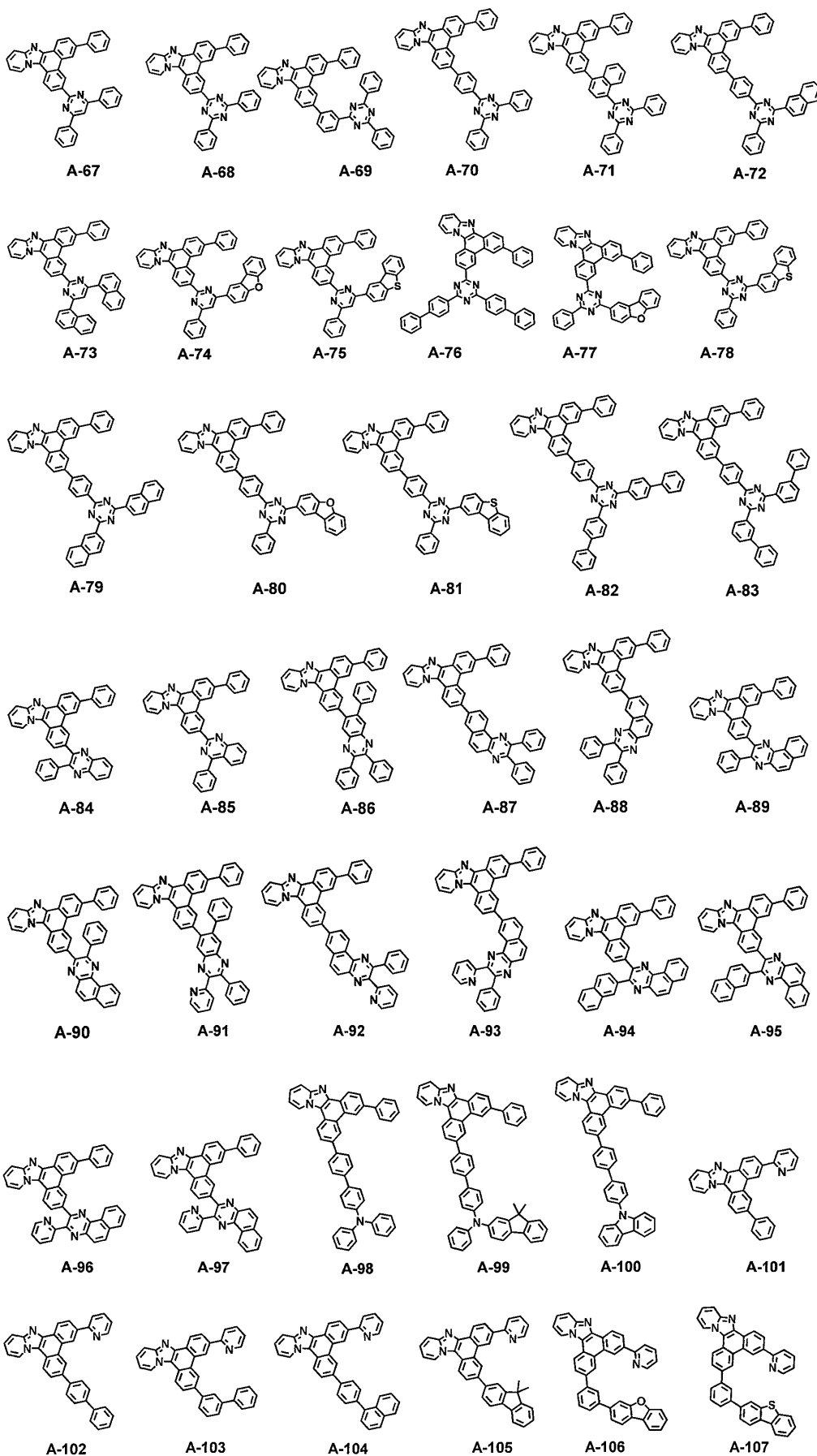
제1항에 있어서, 상기 L, Ar, R₁ 내지 R₃에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (3-30원)헥테로아릴(렌), 치환된 (C3-C30)시클로알킬(렌), 치환된 (C1-C30)알콕시, 치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 및 치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헥테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30원)헥테로아릴, (3-30원)헥테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인, 유기 전계 발광 화합물.

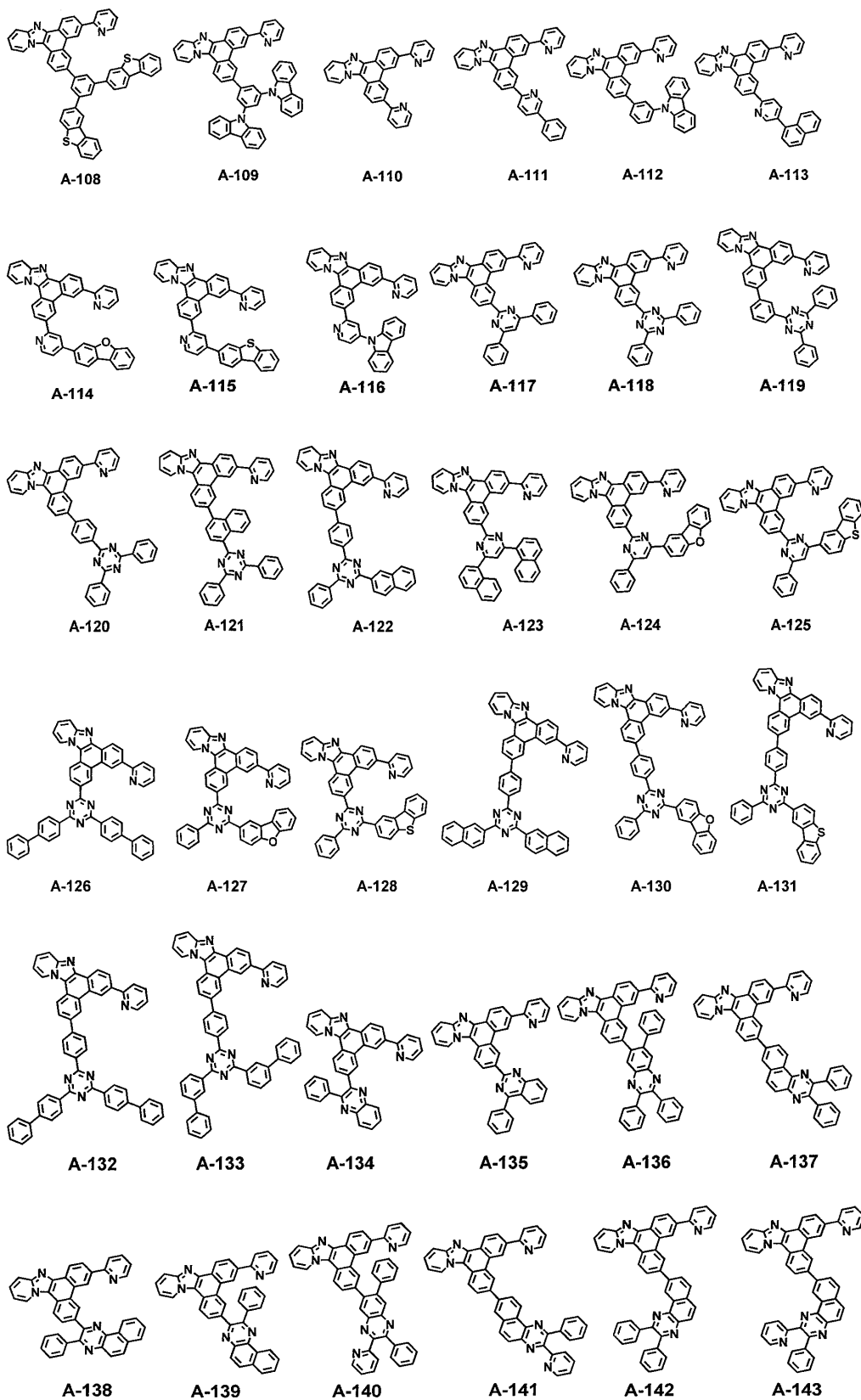
청구항 6

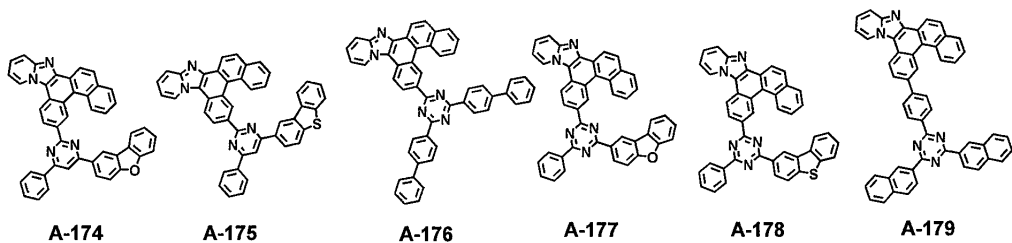
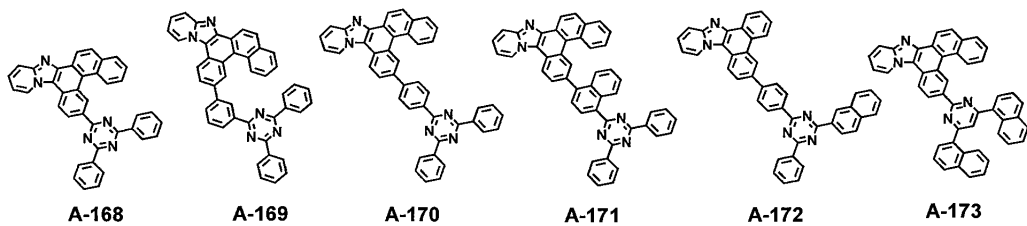
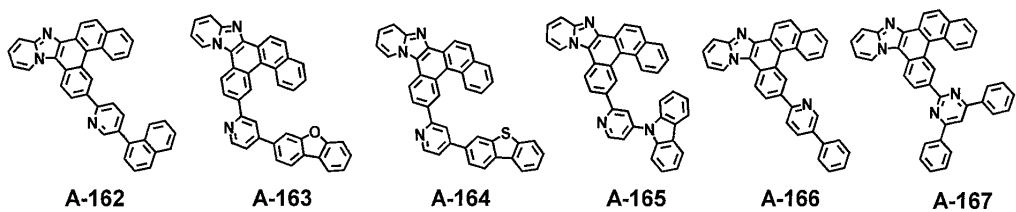
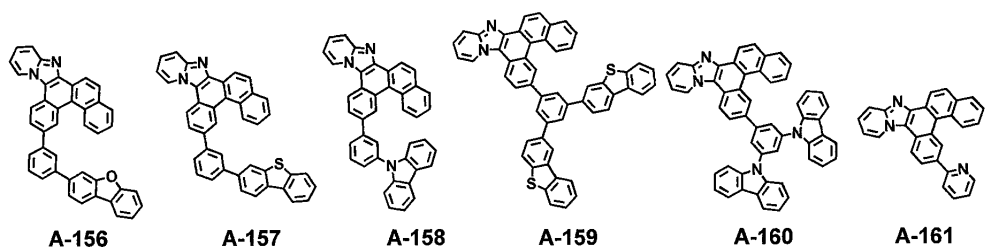
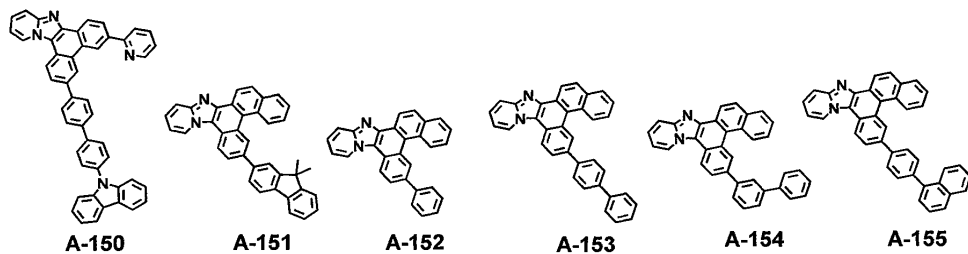
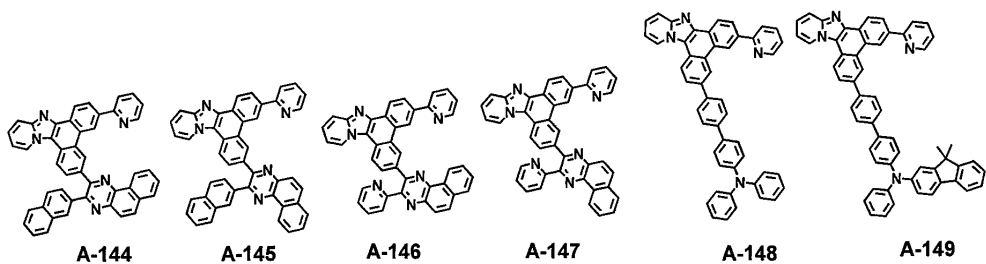
제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물들로부터 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

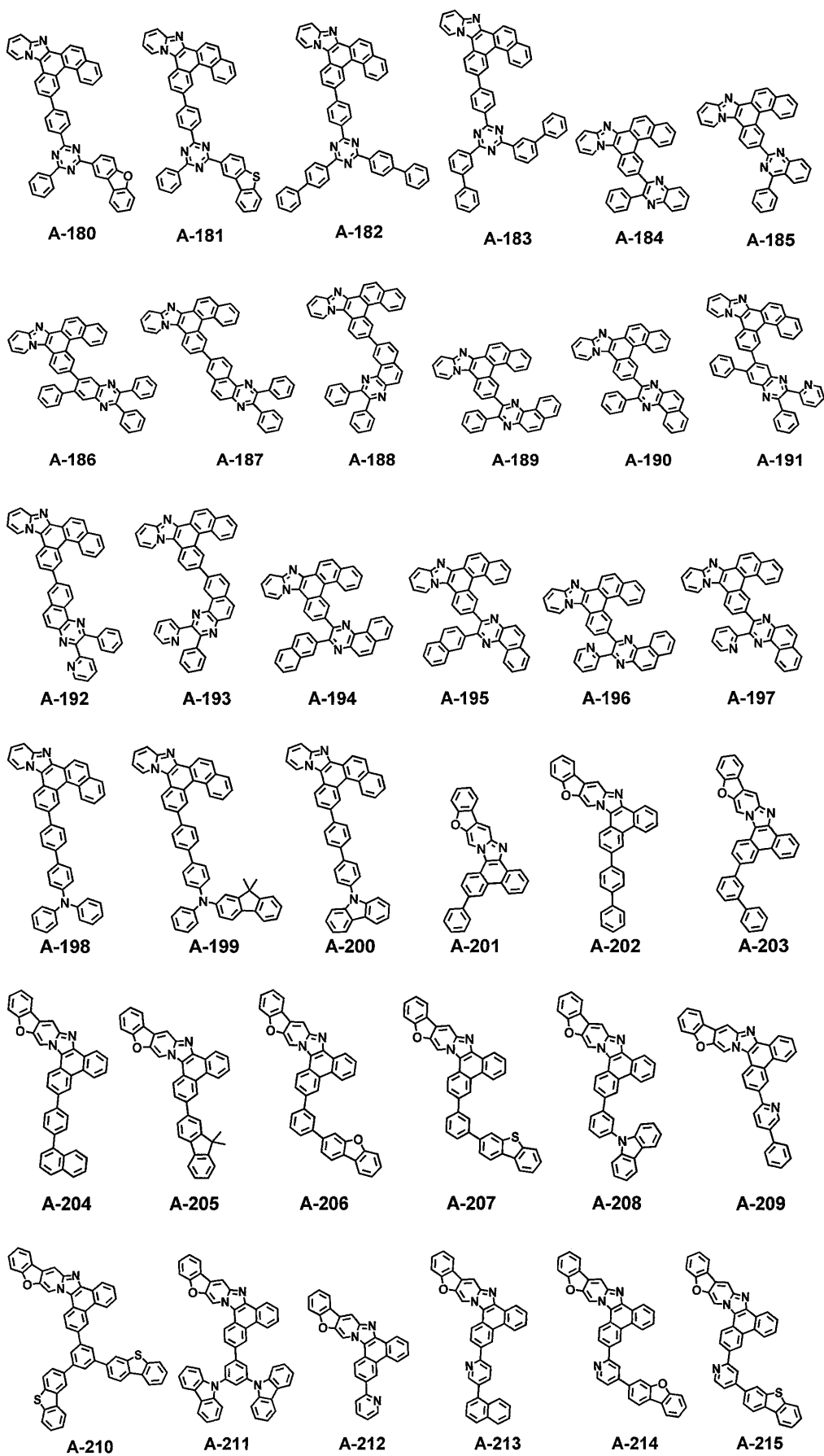


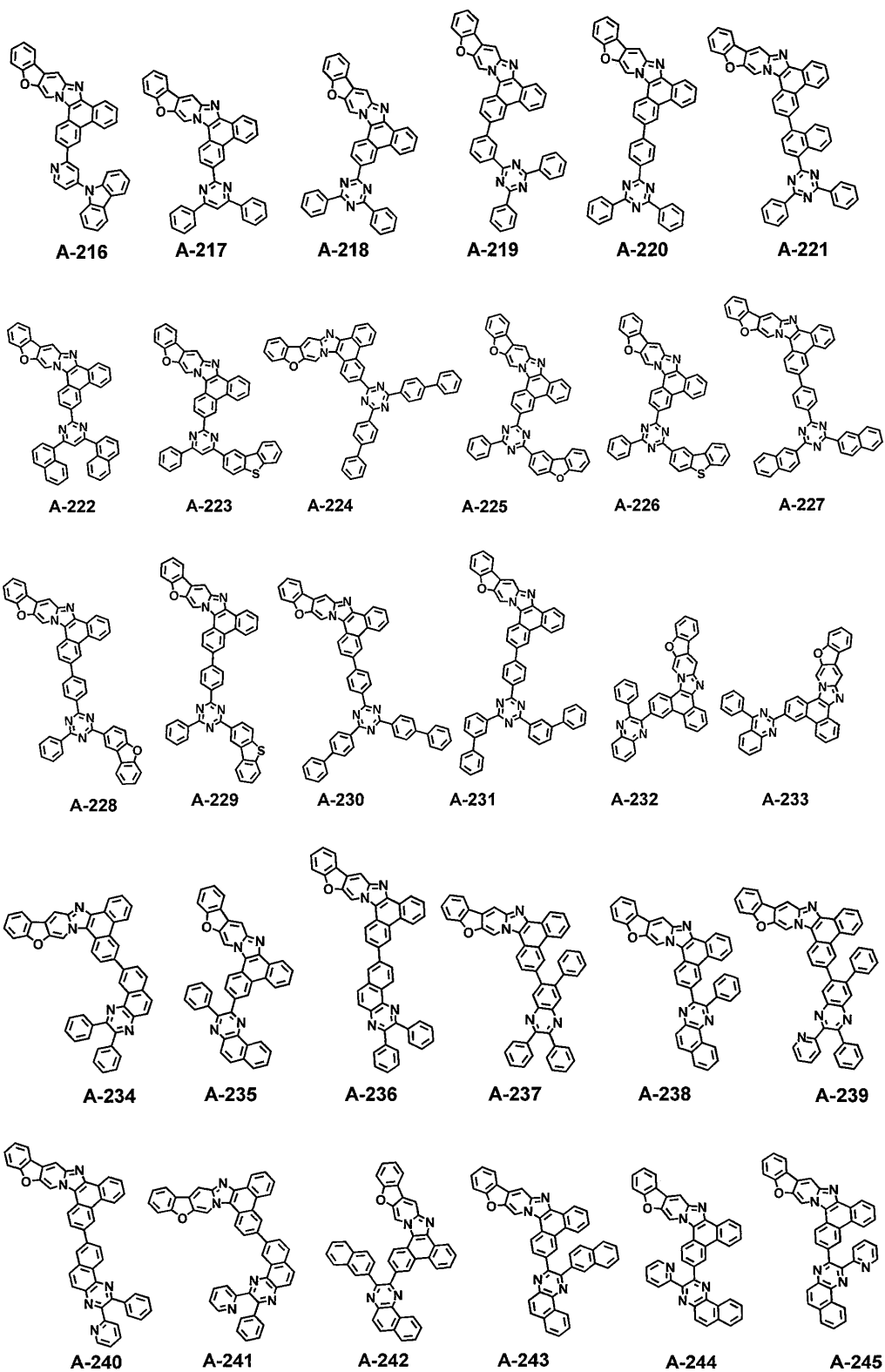


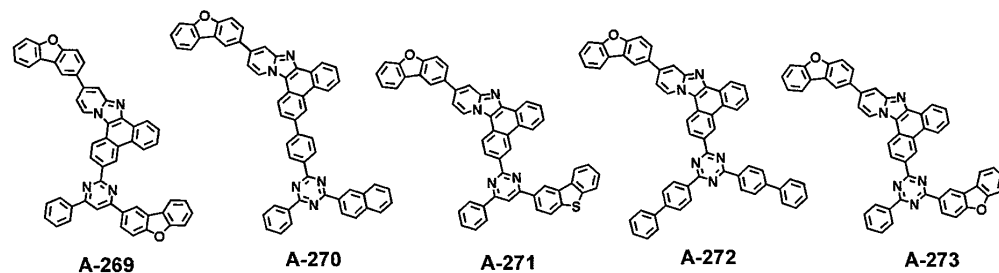
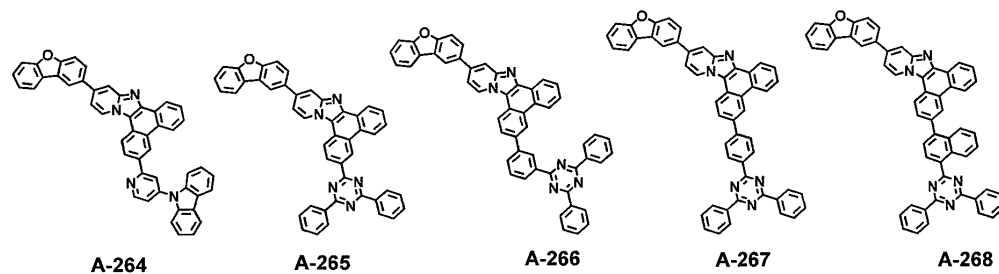
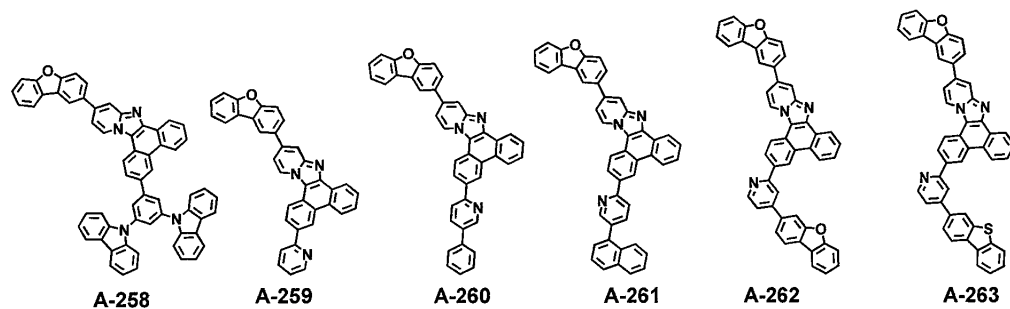
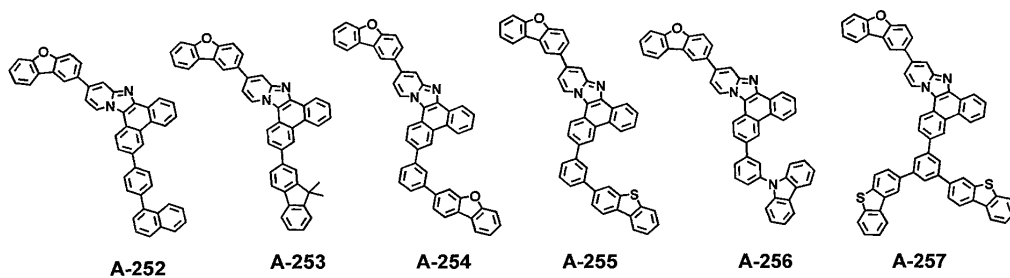
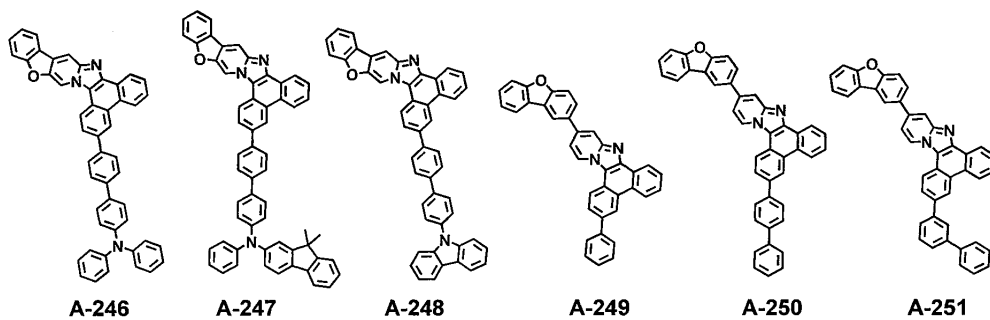


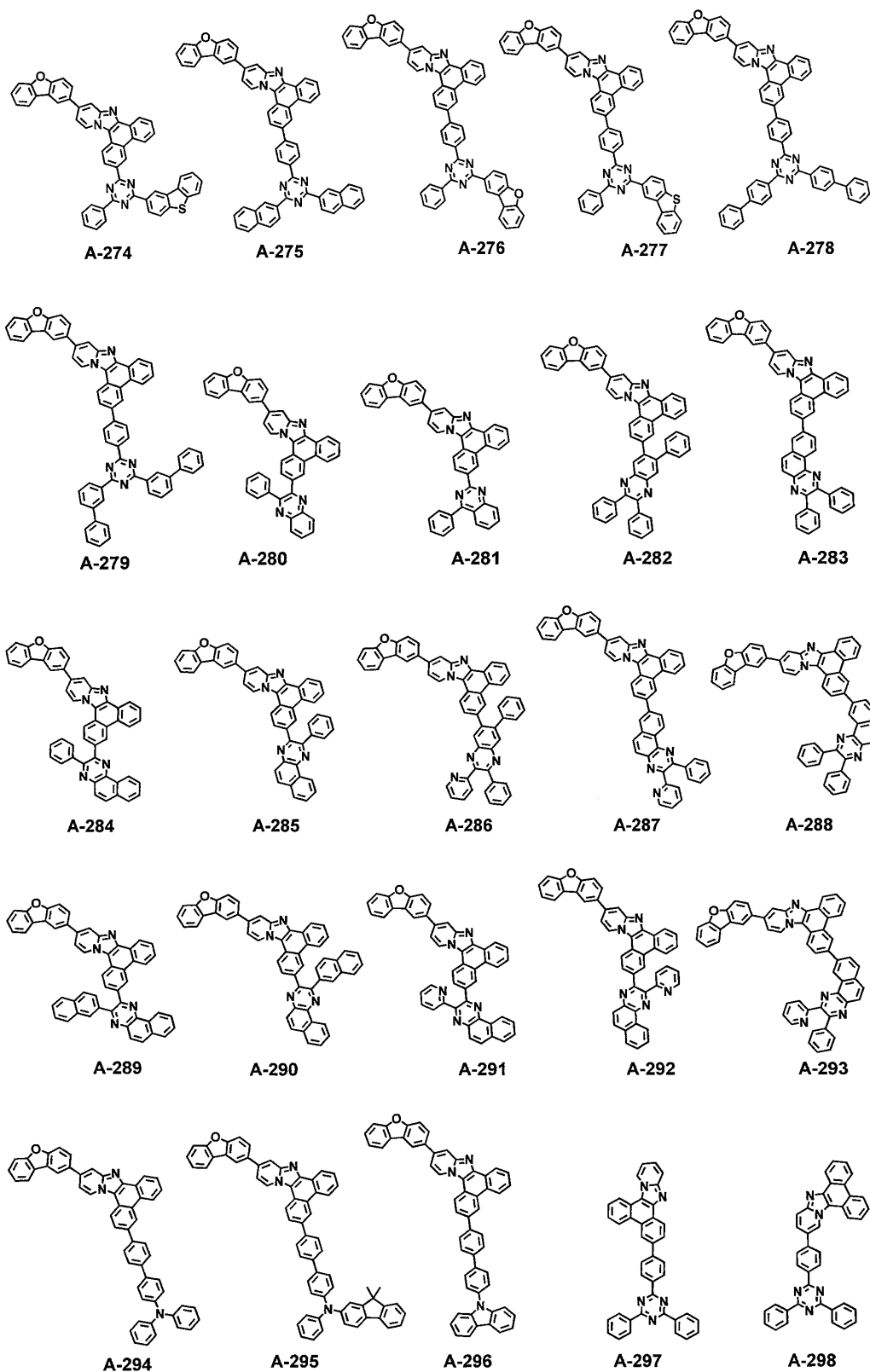












청구항 7

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

청구항 8

제7항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 화합물을 발광층 및 전자 전달층 중 하나 이상의 층에 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

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

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

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

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

[0006] 또한, 전자 전달 재료는 캐소드로부터 전자를 발광층으로 원활히 전달하고 발광층에서 결합하지 못한 정공의 이동을 억제하여 발광층 내의 정공과 전자의 재결합 기회를 증가시키는 역할을 하는 것으로, 전자 친화성이 우수한 재료가 사용된다. 종래에는 Alq₃와 같은 발광 기능을 가진 유기 금속 착체가 전자 이동 능력이 우수하여 전자 전달 재료로서 사용되었다. 그러나, Alq₃는 다른 층으로 이동한다는 것이 문제가 되었고 청색 발광 소자에 사용되는 경우 색순도가 저하되는 문제점이 있었다. 따라서, 상기한 문제점이 없으면서도 전자 친화도가 높아 유기 전계 발광 소자에 사용되는 경우 빠른 전자 이동특성을 보여 발광 소자가 높은 발광 효율을 나타낼 수 있는 새로운 전자 전달 재료가 요구되고 있다.

[0007] 발광 효율, 구동 전압 및/또는 수명을 개선시키기 위하여 유기 전계 발광 소자의 유기층에 여러 재료들 또는 컨셉들이 제안되어 왔으나, 현실적으로 사용하기에는 만족스럽지 못하였다.

[0008] 대한민국 등록특허공보 KR 1052973 B1은 융합된 벤즈이미다졸 유도체를 유기 전계 발광 화합물로서 개시하고 있다. 그러나, 상기 문헌은 융합된 아자인돌리진 유도체를 개시하지 못한다. 나아가, 상기 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 구체적으로 개시하지 못한다.

선행기술문헌

특허문헌

[0009] (특허문헌 0001) 대한민국 등록특허공보 KR 1052973 B1 (2011. 07. 29 공고)

발명의 내용

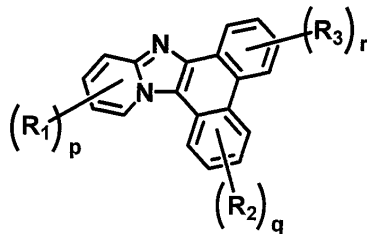
해결하려는 과제

[0010] 본원의 목적은, 첫째로 낮은 구동전압 및/또는 높은 발광효율을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조하는데 효과적인 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며, 둘째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

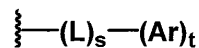
[0011] 낮은 유리 전이 온도를 갖는 물질로 구성된 박막은 소자 구동 시 발생하는 열에 의해서 낮은 온도에서도 형태학적 변형이 발생할 수 있으며, 박막 내에서의 전하 이동성을 감소시켜 OLED 소자의 성능을 저하시킬 수 있다. 이에, 본 발명자들은 예의 연구한 결과, 본원의 유기 전계 발광 화합물이 내부 입체 장애(steric hindrance)를 감소시킴으로써 우수한 구조적 및 열적 안정성(thermal stability)을 제공할 수 있음을 발견하였다. 본원에 따른 화합물은 고도의 융합 고리 구조를 가짐으로 인해 분자량 대비 높은 유리 전이 온도(Tg)를 갖는다. OLED 소자에서 높은 유리 전이 온도를 갖는 물질은 양호한 형태학의 안정성으로 인해 유리할 수 있다. 구체적으로, 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본원을 완성하였다.

[0012] [화학식 1]



[0013]
[0014] 상기 화학식 1에서,
[0015] R₁, R₂ 및 R₃ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되고;

[0016] [화학식 2]



[0017]
[0018] 상기 화학식 2에서,
[0019] L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이며;
[0020] Ar은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이고;
[0021] R₁ 내지 R₃은 각각 독립적으로 화학식 2로 표시되거나, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한

치환체끼리 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

[0022] p 내지 r는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이며;

[0023] s 및 t는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고;

[0024] p 내지 t가 2 이상인 경우, 각각의 R_1 , 각각의 R_2 , 각각의 R_3 , 각각의 L 및 각각의 Ar은 서로 같거나 상이할 수 있다.

발명의 효과

[0025] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 사용함으로써 낮은 구동전압 및/또는 높은 발광효율을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0026] 도 1은 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물 메인 코어의 분자 구조를 3D 형태로 도시한 것이다.

도 2는 종래 화합물 메인 코어의 분자 구조를 3D 형태로 도시한 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0027] 이하에서 본원을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본원의 범위를 제한하도록 해석되어서는 안 된다.

[0028] 본원에서 "유기 전계 발광 화합물"은 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 화합물을 의미하며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다.

[0029] 본원에서 "유기 전계 발광 재료"는 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 재료를 의미하고, 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있으며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 층에 포함될 수 있다. 예를 들면, 상기 유기 전계 발광 재료는 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료, 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료일 수 있다.

[0030] 본원의 유기 전계 발광 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 이에 한정되는 것은 아니지만, 상기 화학식 1의 화합물은 발광층 및/또는 전자 전달층에 포함될 수 있으며, 발광층에 포함되는 경우 화학식 1의 화합물은 호스트로 포함될 수 있고, 전자 전달층에 포함되는 경우 화학식 1의 화합물은 전자 전달 재료로 포함될 수 있다.

[0031] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은쇄를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 1 내지 20개, 더 바람직하게는 1 내지 10개이다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 tert-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알케닐"은쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 2 내지 20개, 더 바람직하게는 2 내지 10개이다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알키닐"은쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알키닐을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 2 내지 20개, 더 바람직하게는 2 내지 10개이다. 상기 알키닐의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬(렌)"은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 상기 탄소수는 바람직하게는 3 내지 20개, 더 바람직하게는 3 내지 7개이다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(3-7원)헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 3 내지 7개, 바람직하게는 5 내지 7개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군, 바람직하게는 O, S 및 N로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라하이드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라하이드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴(렌)"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일환 또는 융합환계 라디칼을 의미하고, 부분적으로 포화될 수도 있다. 상기 환 골격 탄소수는 바람직하게는 6 내지 25개, 더 바람직하게는 6 내지 18개이다. 상기 아릴은 스피로 구조를 가진 것을 포함한다. 상기 아릴의 예로서, 구체적으로는, 페닐, 비페닐, 터페닐, 쿼터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 디메틸플루오레닐, 디페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디페닐벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 벤조페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 벤즈안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피

레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크리세닐, 벤조크리세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 벤조플루오란테닐, 톨릴 (toylly), 자일릴(xylyl), 메시틸(mesityl), 쿠메닐(cumenyl), 스피로[플루오렌-플루오렌]일, 스피로[플루오렌-벤조플루오렌]일, 아줄레닐 등이 있다. 더욱 구체적으로, 상기 아릴의 예로는 o-톨릴, m-톨릴, p-톨릴, 2,3-자일릴, 3,4-자일릴, 2,5-자일릴, 메시틸, o-쿠메닐, m-쿠메닐, p-쿠메닐, p-t-부틸페닐, p-(2-페닐프로필)페닐, 4'-메틸비페닐, 4"-t-부틸-p-터페닐-4-일, o-비페닐, m-비페닐, p-비페닐, o-터페닐, m-터페닐-4-일, m-터페닐-3-일, m-터페닐-2-일, p-터페닐-4-일, p-터페닐-3-일, p-터페닐-2-일, m-퀴터페닐, 1-나프틸, 2-나프틸, 1-플루오레닐, 2-플루오레닐, 3-플루오레닐, 4-플루오레닐, 9-플루오레닐, 9,9-디메틸-1-플루오레닐, 9,9-디메틸-2-플루오레닐, 9,9-디메틸-3-플루오레닐, 9,9-디메틸-4-플루오레닐, 9,9-디페닐-1-플루오레닐, 9,9-디페닐-2-플루오레닐, 9,9-디페닐-3-플루오레닐, 9,9-디페닐-4-플루오레닐, 1-안트릴, 2-안트릴, 9-안트릴, 1-페난트릴, 2-페난트릴, 3-페난트릴, 4-페난트릴, 9-페난트릴, 1-크리세닐, 2-크리세닐, 3-크리세닐, 4-크리세닐, 5-크리세닐, 6-크리세닐, 벤조[c]페난트릴, 벤조[g]크리세닐, 1-트리페닐레닐, 2-트리페닐레닐, 3-트리페닐레닐, 4-트리페닐레닐, 3-플루오란테닐, 4-플루오란테닐, 8-플루오란테닐, 9-플루오란테닐, 벤조플루오란테닐 등을 들 수 있다. 본원에서 "(3-30원)헤테로아릴(렌)"은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, Si, P, 및 Ge로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미하고, 여기서 환 골격 원자수가 5 내지 25개인 것이 바람직하다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 상기 헤테로원자는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 및 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-30)아릴아미노로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기가 결합될 수 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함하며, 스피로 구조를 가진 것도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 구체적으로는, 푸릴, 티오펜, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아지닐, 테트라지닐, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라자닐, 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다진일 등의 단일환계 헤테로아릴, 벤조푸라닐, 벤조티오펜, 이소벤조푸라닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오펜, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이미다조피리디닐, 이소인돌릴, 인돌릴, 벤조인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 아자카바졸릴, 벤조카바졸릴, 디벤조카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리디닐, 벤조디옥솔릴, 인돌리지디닐, 아크리디닐, 실라플루오레닐, 게르마플루오레닐 등의 융합환계 헤테로아릴 등을 들 수 있다. 더욱 구체적으로, 상기 헤테로아릴의 예로는, 1-피롤릴, 2-피롤릴, 3-피롤릴, 2-피리디닐, 3-피리디닐, 4-피리디닐, 2-피리미디닐, 4-피리미디닐, 5-피리미디닐, 6-피리미디닐, 1,2,3-트리아진-4-일, 1,2,4-트리아진-3-일, 1,3,5-트리아진-2-일, 1-이미다졸릴, 2-이미다졸릴, 1-피라졸릴, 1-인돌리지디닐, 2-인돌리지디닐, 3-인돌리지디닐, 5-인돌리지디닐, 6-인돌리지디닐, 7-인돌리지디닐, 8-인돌리지디닐, 2-이미다조피리디닐, 3-이미다조피리디닐, 5-이미다조피리디닐, 6-이미다조피리디닐, 7-이미다조피리디닐, 8-이미다조피리디닐, 1-인돌릴, 2-인돌릴, 3-인돌릴, 4-인돌릴, 5-인돌릴, 6-인돌릴, 7-인돌릴, 1-이소인돌릴, 2-이소인돌릴, 3-이소인돌릴, 4-이소인돌릴, 5-이소인돌릴, 6-이소인돌릴, 7-이소인돌릴, 2-푸릴, 3-푸릴, 2-벤조푸라닐, 3-벤조푸라닐, 4-벤조푸라닐, 5-벤조푸라닐, 6-벤조푸라닐, 7-벤조푸라닐, 1-이소벤조푸라닐, 3-이소벤조푸라닐, 4-이소벤조푸라닐, 5-이소벤조푸라닐, 6-이소벤조푸라닐, 7-이소벤조푸라닐, 2-퀴놀릴, 3-퀴놀릴, 4-퀴놀릴, 5-퀴놀릴, 6-퀴놀릴, 7-퀴놀릴, 8-퀴놀릴, 1-이소퀴놀릴, 3-이소퀴놀릴, 4-이소퀴놀릴, 5-이소퀴놀릴, 6-이소퀴놀릴, 7-이소퀴놀릴, 8-이소퀴놀릴, 2-퀴녹살리닐, 5-퀴녹살리닐, 6-퀴녹살리닐, 1-카바졸릴, 2-카바졸릴, 3-카바졸릴, 4-카바졸릴, 9-카바졸릴, 아자카바졸-1-일, 아자카바졸-2-일, 아자카바졸-3-일, 아자카바졸-4-일, 아자카바졸-5-일, 아자카바졸-6-일, 아자카바졸-7-일, 아자카바졸-8-일, 아자카바졸-9-일, 1-페난트리디닐, 2-페난트리디닐, 3-페난트리디닐, 4-페난트리디닐, 6-페난트리디닐, 7-페난트리디닐, 8-페난트리디닐, 9-페난트리디닐, 10-페난트리디닐, 1-아크리디닐, 2-아크리디닐, 3-아크리디닐, 4-아크리디닐, 9-아크리디닐, 2-옥사졸릴, 4-옥사졸릴, 5-옥사졸릴, 2-옥사디아졸릴, 5-옥사디아졸릴, 3-푸라자닐, 2-티에닐, 3-티에닐, 2-메틸피롤-1-일, 2-메틸피롤-3-일, 2-메틸피롤-4-일, 2-메틸피롤-5-일, 3-메틸피롤-1-일, 3-메틸피롤-2-일, 3-메틸피롤-4-일, 3-메틸피롤-5-일, 2-t-부틸피롤-4-일, 3-(2-페닐프로필)피롤-1-일, 2-메틸-1-인돌릴, 4-메틸-1-인돌릴, 2-메틸-3-인돌릴, 4-메틸-3-인돌릴, 2-t-부틸-1-인돌릴, 4-t-부틸-1-인돌릴, 2-t-부틸-3-인돌릴, 4-t-부틸-3-인돌릴, 1-디벤조푸라닐, 2-디벤조푸라닐, 3-디벤조푸라닐, 4-디벤조푸라닐, 1-디벤조티오펜, 2-디벤조티오펜, 3-디벤조티오펜, 4-디벤조티오펜,

1-실라플루오레닐, 2-실라플루오레닐, 3-실라플루오레닐, 4-실라플루오레닐, 1-게르마플루오레닐, 2-게르마플루오레닐, 3-게르마플루오레닐, 4-게르마플루오레닐 등을 들 수 있다.

[0032] 본원에서 "할로젠"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

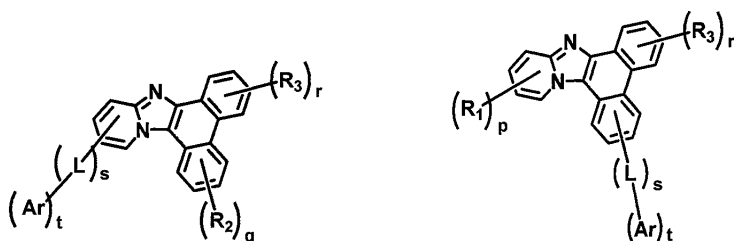
[0033] 또한, "오르토(ortho; o)", "메타(meta; m)", 및 "파라(para; p)"는 각각 치환기의 상대적인 위치를 나타내는 접두어이다. 오르토(ortho) 위치란 2개의 치환기가 서로 이웃하는 것을 나타내고, 일 예로 벤젠 치환체에서 1, 2 자리를 뜻하고, 메타(meta) 위치란 2개의 치환기가 1, 3 위치에 있는 것을 나타내며, 일 예로 벤젠 치환체에서 1, 3 자리를 뜻하며, 파라(para) 위치란 2개의 치환기가 1,4 위치에 있는 것을 나타내며, 일 예로 벤젠 치환체에서 1, 4 자리를 뜻한다.

[0034] 본원에서 "인접한 치환기와 연결되어 형성된 고리"는 인접한 두 개 이상의 치환체가 연결 또는 융합되어 형성된 치환 또는 비치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 의미하고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (3-26원)의 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리일 수 있다. 또한, 형성된 고리는 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, 상기 인접한 치환기와 연결되어 형성된 고리는 (5-20원)의 다환의 방향족 고리로, N, O 및 S로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다.

[0035] 또한, 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 본원의 L, Ar, R₁ 내지 R₆에서 치환된 (C1-C30)알킬, 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (3-30원)헤테로아릴(렌), 치환된 (C3-C30)시클로알킬(렌), 치환된 (C1-C30)알콕시, 치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환된 (C1-C30)알킬 디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 및 치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴, (3-30 원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이고, 본원의 일양태에 따르면, 상기 치환체는 각각 독립적으로 (C1-C6)알킬, (C6-C15)아릴, 및 (5-15원)헤테로아릴 중 하나 이상이다. 구체적으로, 상기 치환체는 각각 독립적으로 메틸, 페닐, 나프틸, 비페닐, 디벤조티오펜일, 및 디벤조푸란일 중 하나 이상일 수 있다.

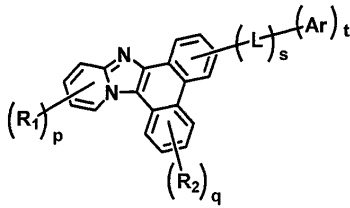
[0036] 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0037] [화학식 1-1] [화학식 1-2]



[0038]

[0039] [화학식 1-3]



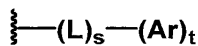
[0040]

[0041] 상기 화학식 1-1 내지 1-3에서,

[0042] L, Ar, R₁ 내지 R₃ 및 p 내지 t는 화학식 1에서의 정의와 같다.

[0043] 상기 화학식 1에서, R₁, R₂ 및 R₃ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시된다.

[0044] [화학식 2]



[0045]

[0046] 상기 화학식 2에서, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이다. 본원의 일양태에 있어서는, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이고, 본원의 다른 일양태에 있어서는, L은 단일결합, 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이다. 구체적으로, L은 단일결합, 페닐렌, 나프틸렌, 비페닐렌, 피리딜렌, 피리미딘일렌, 트리아진일렌, 퀴나졸리닐렌, 퀴녹살리닐렌, 벤조퀴녹살리닐렌 등일 수 있다.

[0047]

상기 화학식 2에서, Ar은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이다. 본원의 일양태에 있어서는, Ar은 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노이고, 본원의 다른 일양태에 있어서는, Ar은 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 또는 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노이다. 구체적으로, Ar은 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 터페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸페닐, 치환 또는 비치환된 플루오레닐, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐, 치환 또는 비치환된 트리아진일, 치환 또는 비치환된 피리딜, 치환 또는 비치환된 피리미딘일, 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리미딘일, 치환 또는 비치환된 아세나프토피리미딘일, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 벤조퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 디벤조퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조이소퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조티에노퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 벤조푸로퀴놀릴, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴, 치환 또는 비치환된 피라졸릴, 치환 또는 비치환된 카바졸릴, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란일, 치환 또는 비치환된 벤조푸란일, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐, 치환 또는 비치환된 벤조티아졸리닐, 치환 또는 비치환된 페난트로이미다졸릴, 치환 또는 비치환된 디페닐아미노, 치환 또는 비치환된 페닐비페닐아미노, 치환 또는 비치환된 플루오레닐페닐아미노, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일페닐아미노, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란일페닐아미노 등일 수 있다.

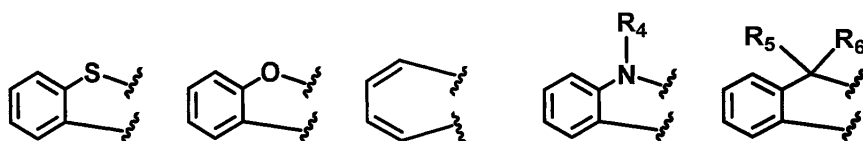
[0048]

상기 화학식 1에서, R₁ 내지 R₃은 각각 독립적으로 화학식 2로 표시되거나, 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환

또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노 이거나; 인접한 치환체끼리 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다. 본원의 일양태에 있어서는, R_1 내지 R_3 은 각각 독립적으로 화학식 2로 표시되거나, 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체끼리 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 본원의 다른 일양태에 있어서는, R_1 내지 R_3 은 각각 독립적으로 화학식 2로 표시되거나, 수소, 비치환된 (C6-C15)아릴, 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환체끼리 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다. 구체적으로, R_1 내지 R_3 은 각각 독립적으로 수소, 페닐, 피리딜, 또는 디벤조푸란일이거나, 인접한 치환체끼리 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다. 예를 들어, 두개의 인접한 R_1 끼리, 두개의 인접한 R_2 끼리, 두개의 인접한 R_3 끼리, R_1 과 R_2 가, R_2 와 R_3 가, 및/또는 R_1 과 R_3 가 서로 연결되어, 인접한 치환체와 융합고리를 형성할 수 있다.

[0049] 상기 R_1 내지 R_3 중 하나 이상이 인접한 치환체끼리 서로 연결되어 고리를 형성하는 경우, 하기 화학식 3 내지 7 중 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있다.

[0050] [화학식 3] [화학식 4] [화학식 5] [화학식 6] [화학식 7]



[0051]

[0052] 상기 화학식 6 및 7에서,

[0053] R_4 내지 R_6 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고; R_5 및 R_6 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

[0054] 상기 화학식 1에서, p 내지 r는 각각 독립적으로 1 내지 4의 정수이고, 상기 화학식 2에서, s 및 t는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이다. p 내지 t가 2 이상인 경우, 각각의 R_1 , 각각의 R_2 , 각각의 R_3 , 각각의 L 및 각각의 Ar은 서로 같거나 상이할 수 있다. 본원의 일양태에 있어서는, p 내지 s는 각각 독립적으로 1 또는 2이고, t는 1 내지 3이다.

[0055] 본원의 일양태에 따르면, 상기 화학식 1 및 2에서, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이고; Ar은 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노이며; R_1 내지 R_3 은 각각 독립적으로 화학식 2로 표시되거나, 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이거나, 인접한 치환체끼리 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

[0056] 본원의 다른 일양태에 따르면, 상기 화학식 1 및 2에서, L은 단일결합, 비치환된 (C6-C15)아릴렌, 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴렌이고; Ar은 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 (C6-C20)아릴, 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 또는 (C1-C6)알킬로 치환 또는 비치환된 디(C6-C15)아릴아미노이며; R_1 내지 R_3 은 각각 독립적으로 화학식 2로 표시되거나, 수소, 비치환된 (C6-C15)아릴, 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이거나, 인접한 치환체끼리 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

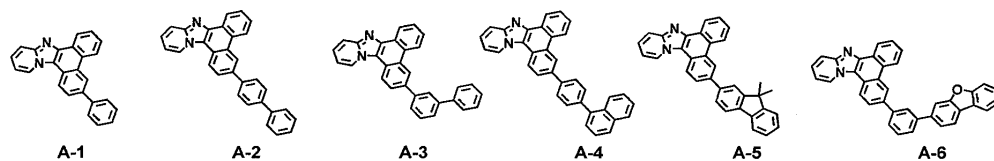
[0057] 본원 화학식에서, 인접한 치환체끼리 서로 연결되어 고리를 형성하는 경우, 상기 고리는 치환 또는 비치환된 (3-30원) 단일환 또는 다환의 치환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리일 수 있다. 또한, 형성된 고리는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다.

[0058] 본원 화학식에서, 헤테로아릴(렌)은 각각 독립적으로, B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다. 또한, 상기 헤테로원자는 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 및 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-30)아릴아미노로 이루어진 군으로

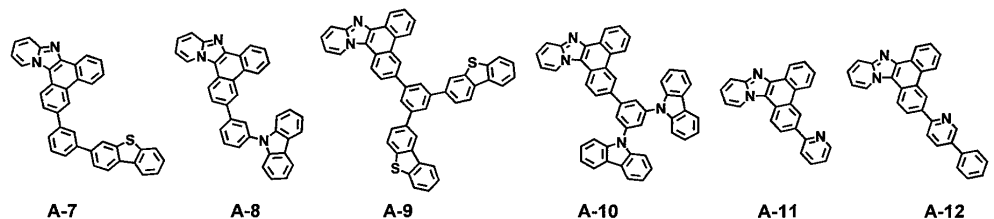
부터 선택되는 하나 이상의 치환기가 결합될 수 있다.

[0059] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

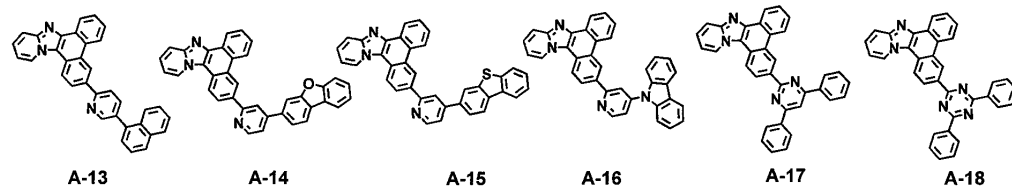
[0060]



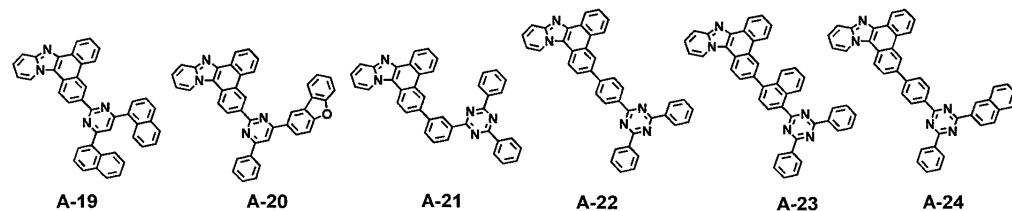
[0061]



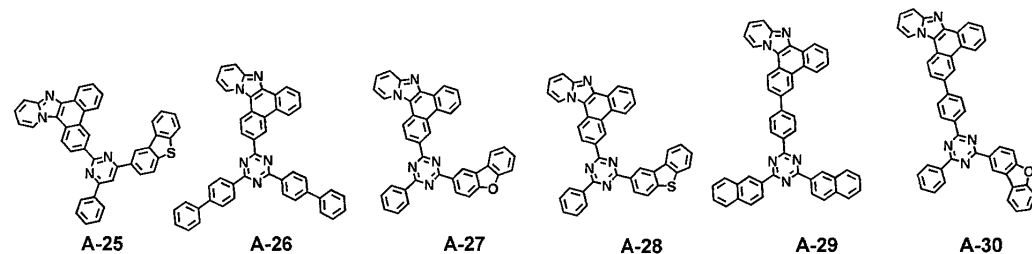
[0062]



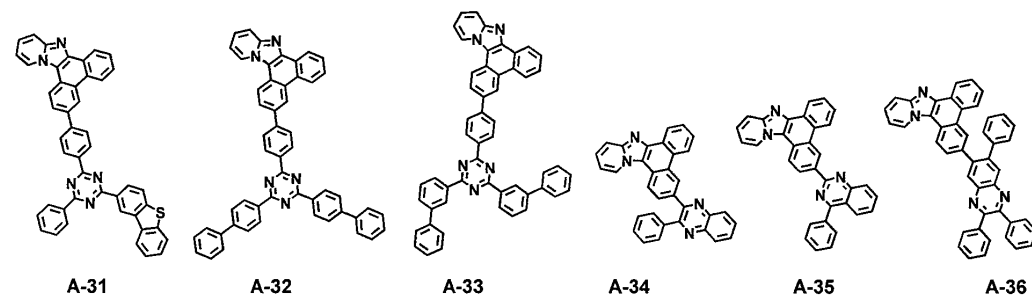
[0063]



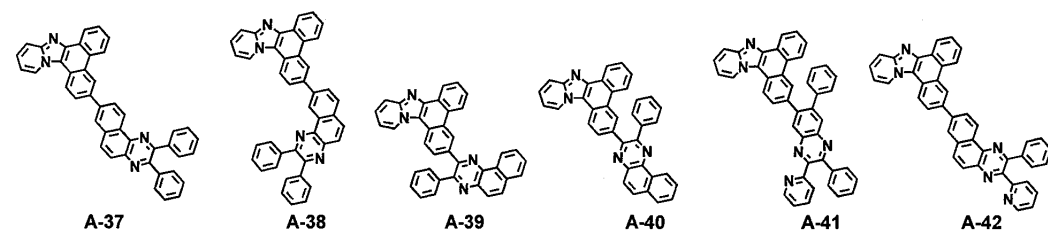
[0064]

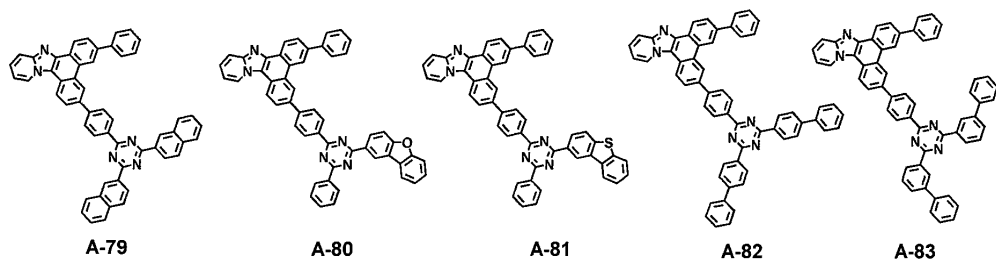
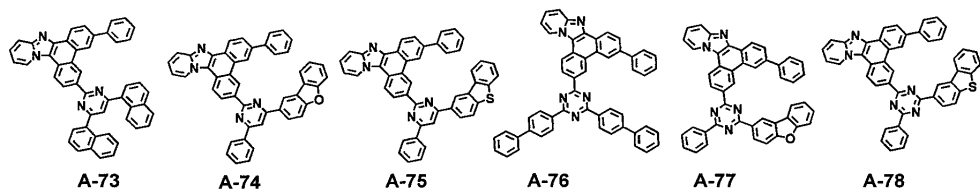
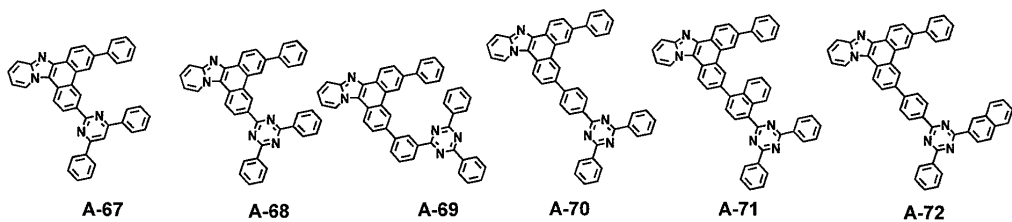
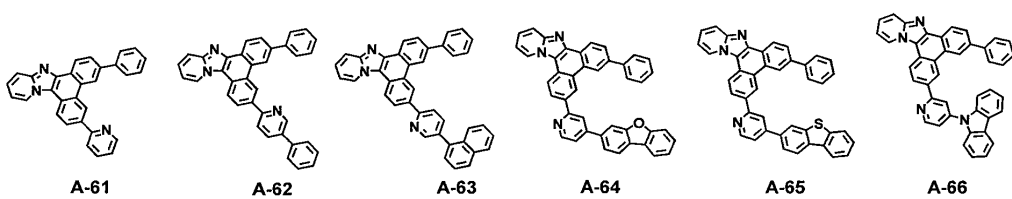
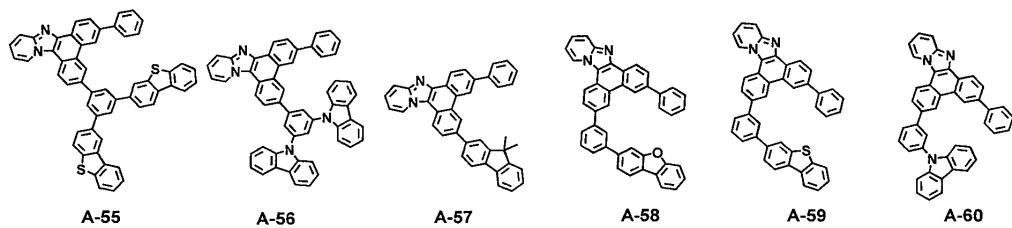
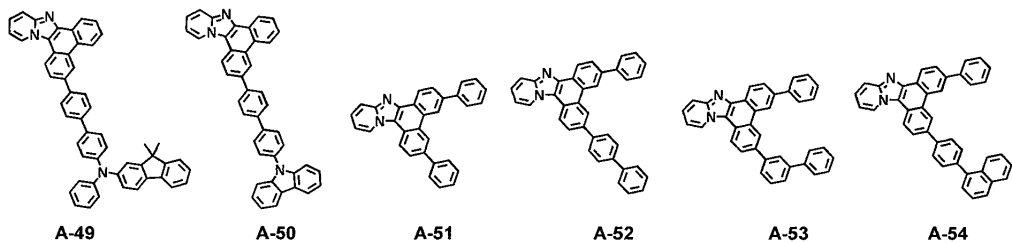
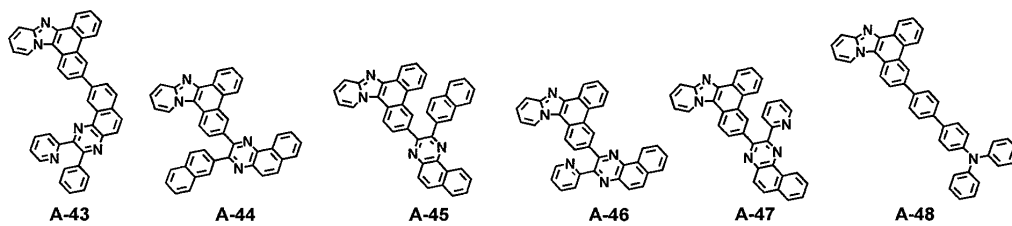


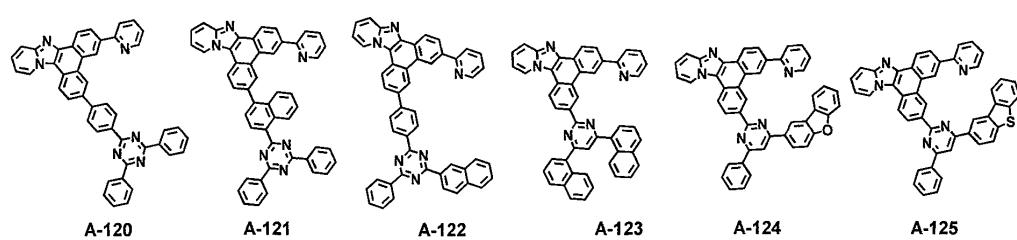
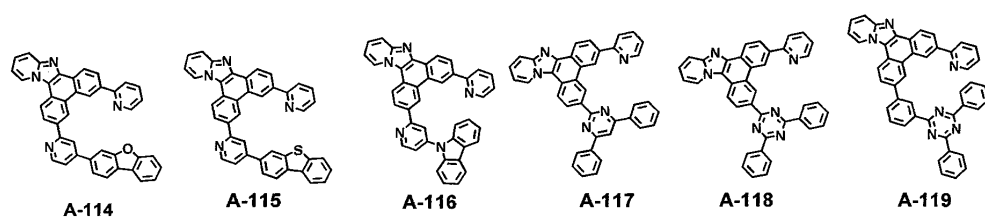
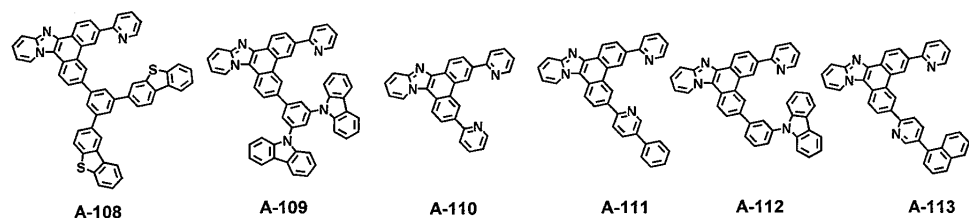
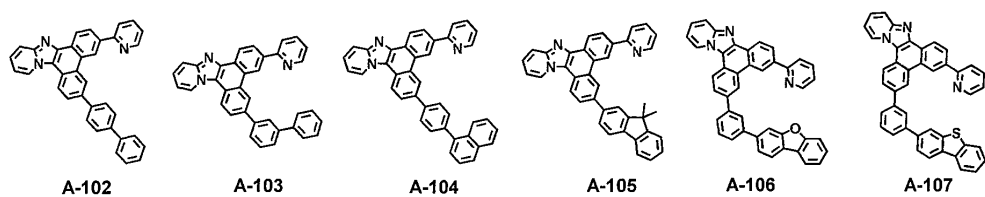
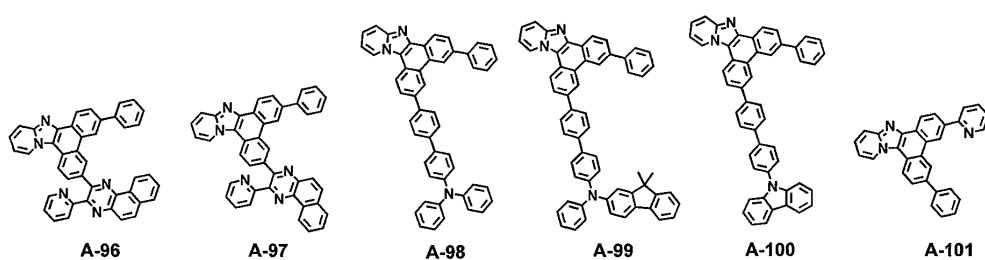
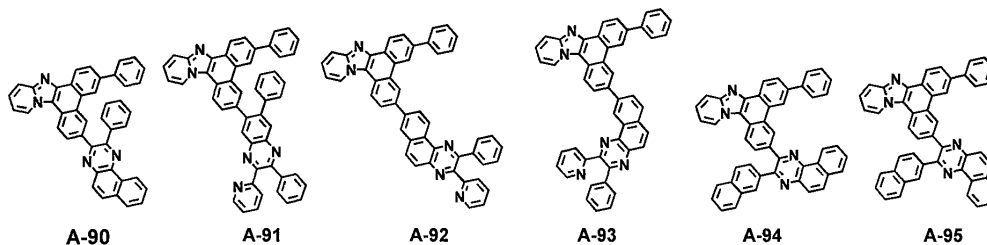
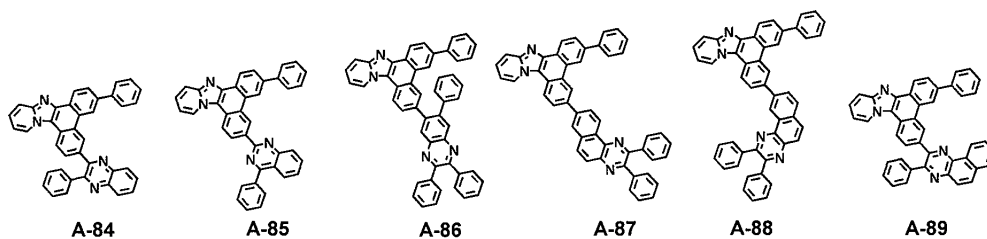
[0065]



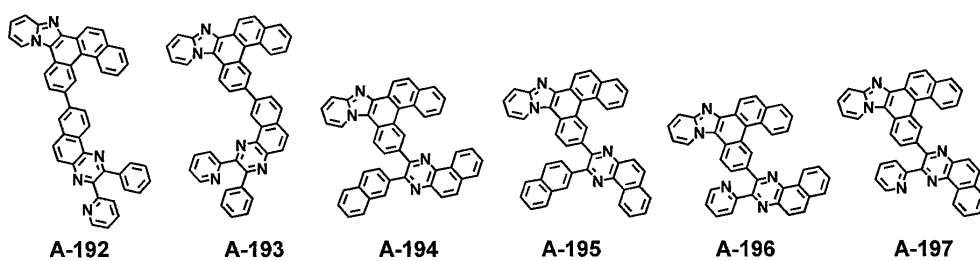
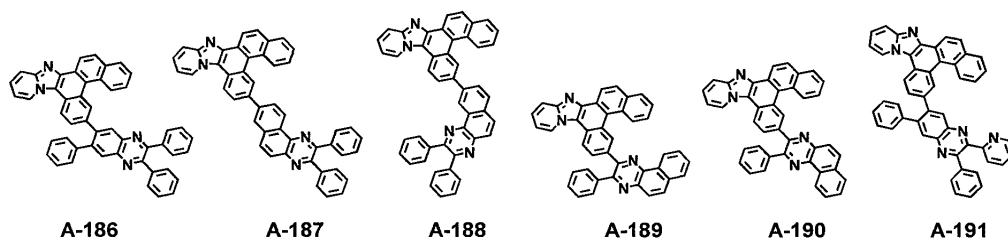
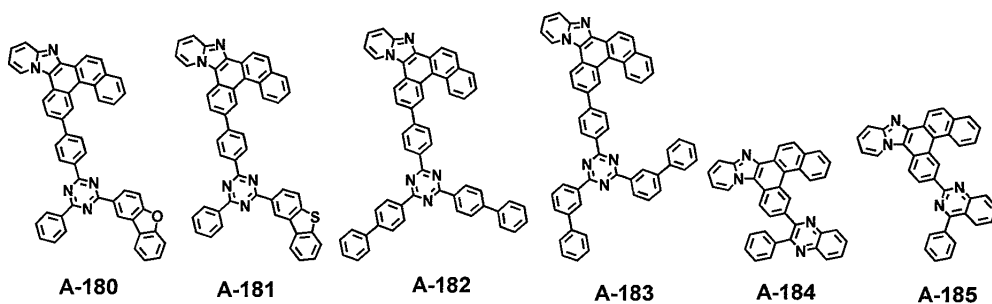
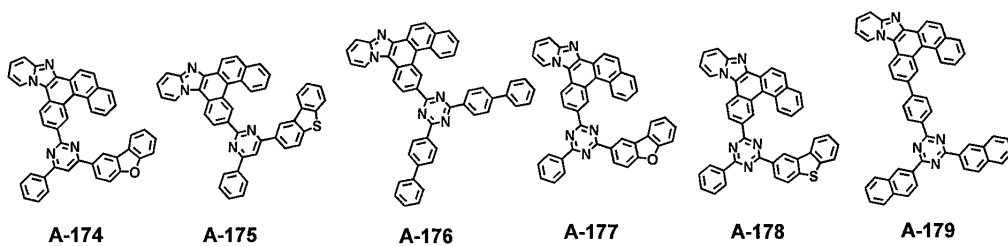
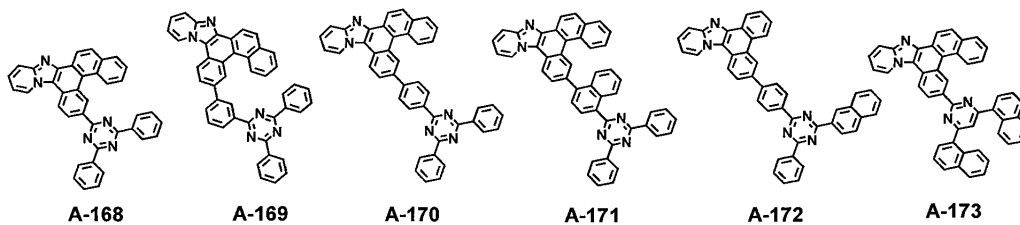
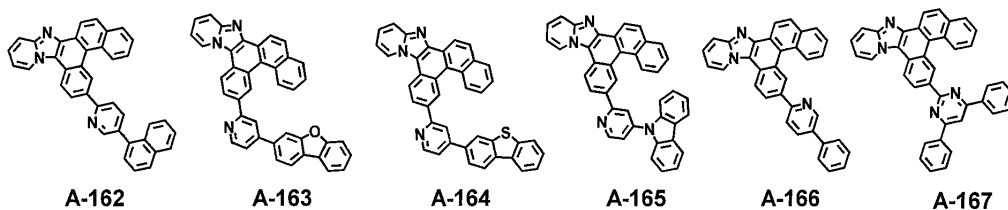
[0066]

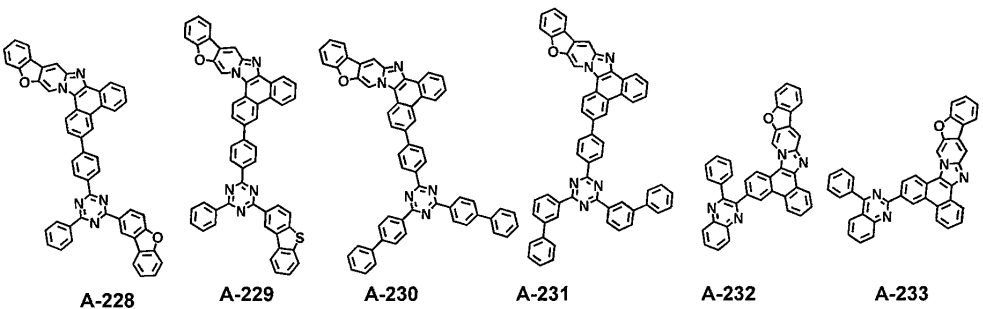
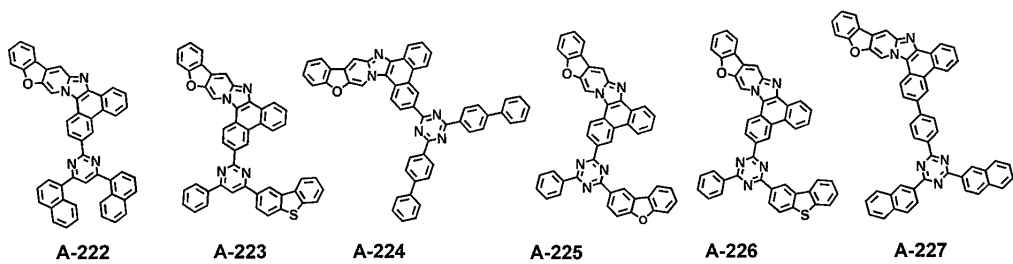
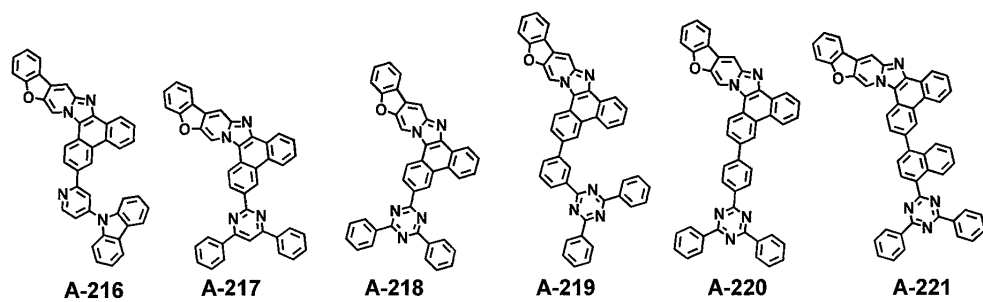
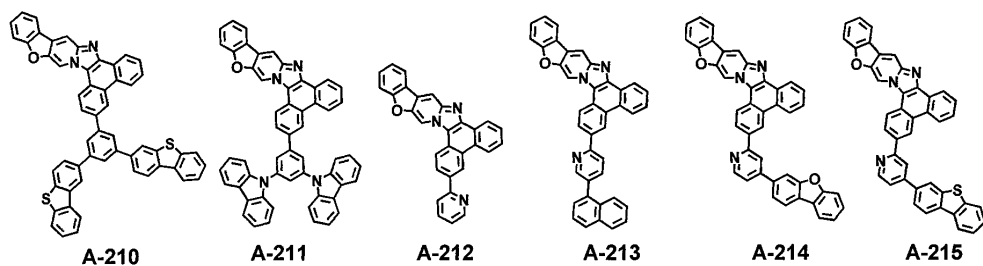
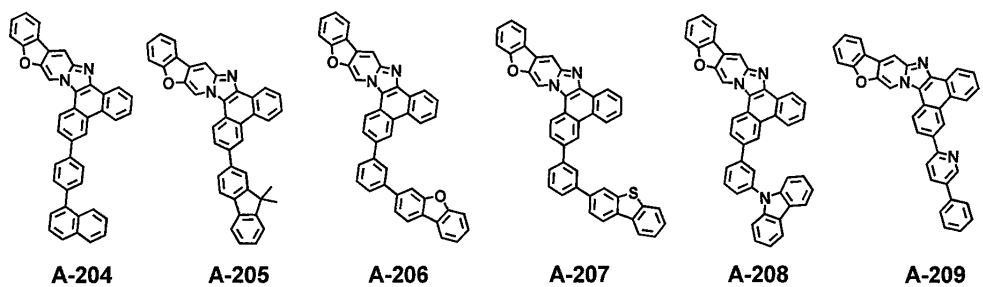
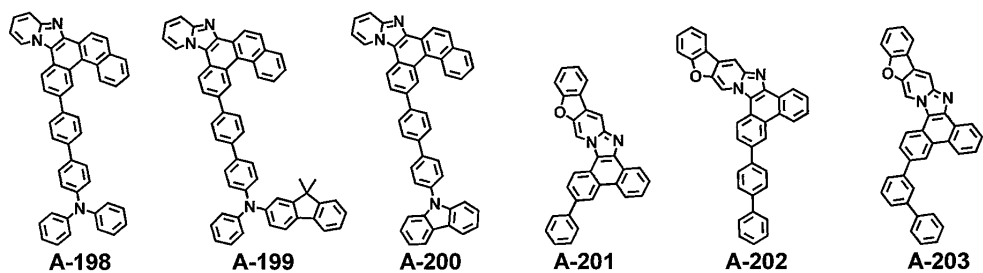


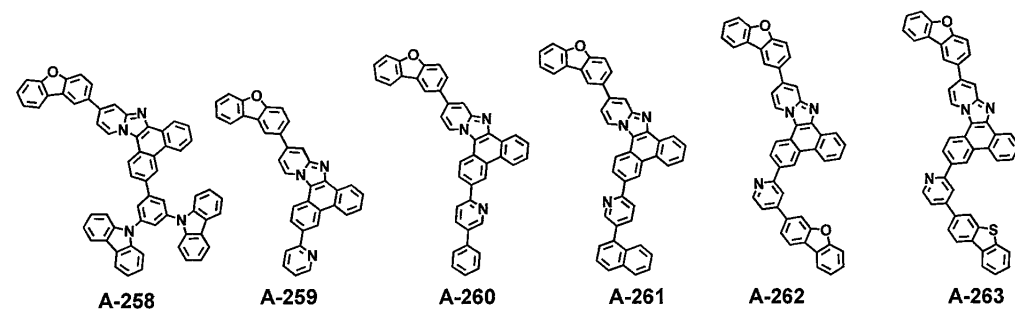
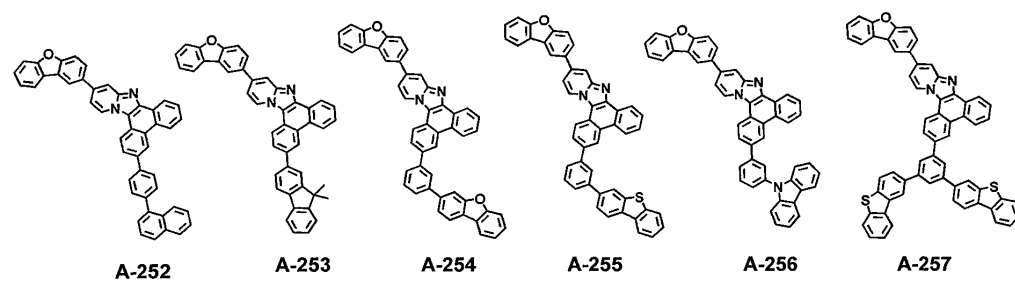
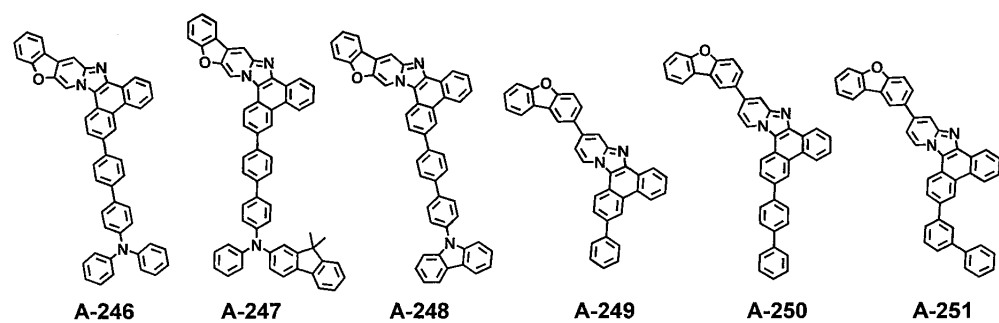
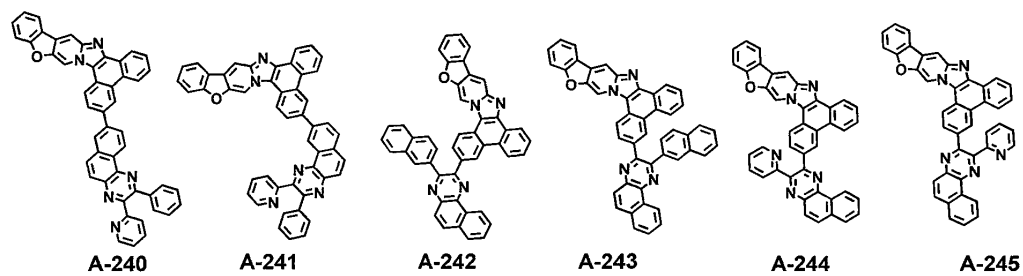
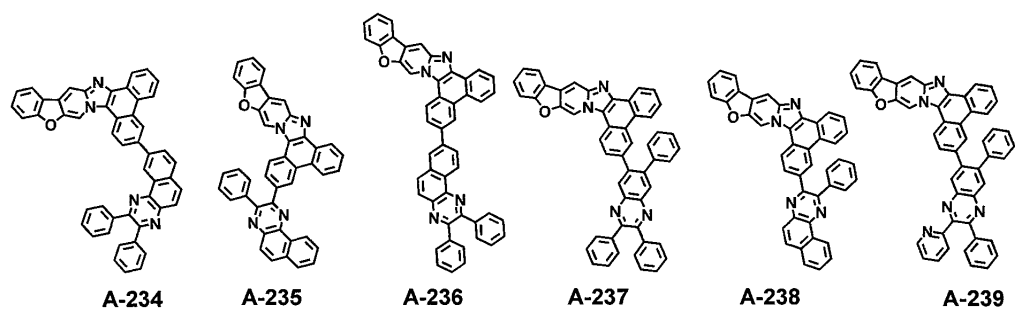


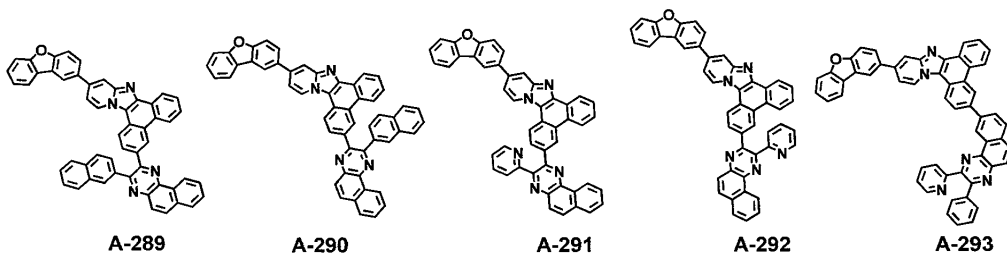
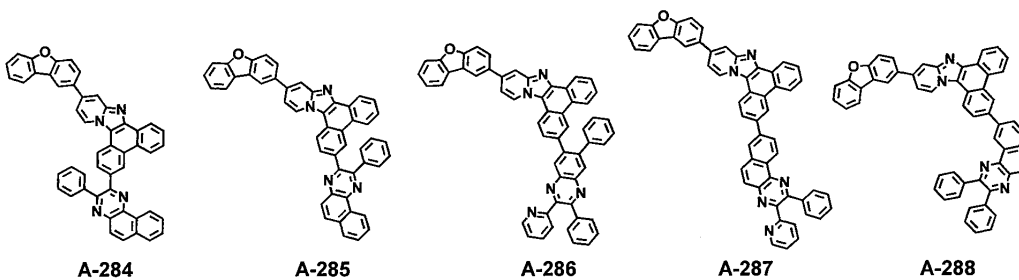
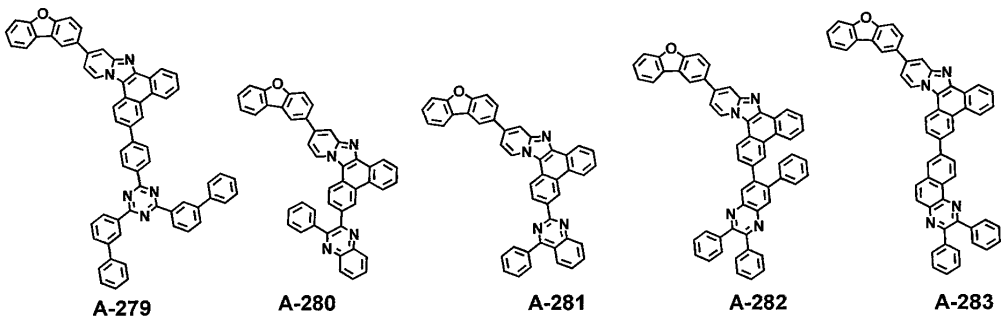
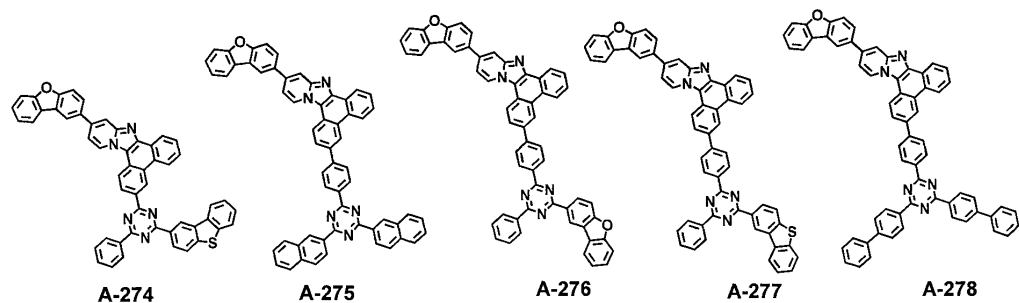
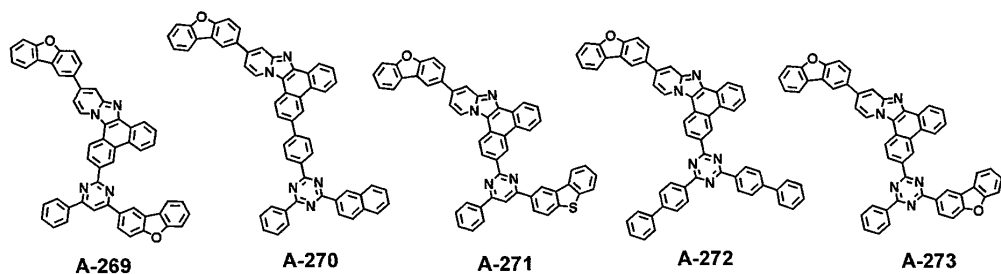
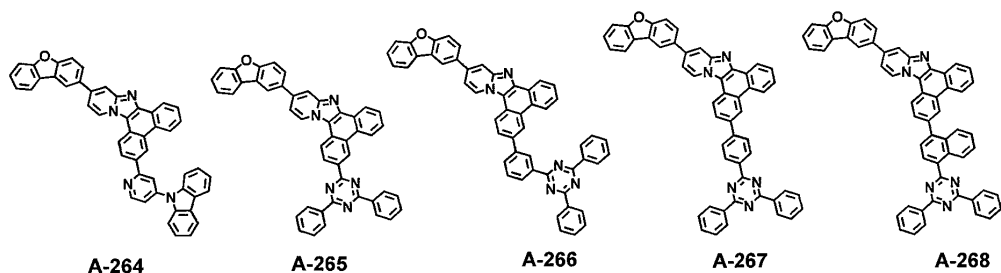












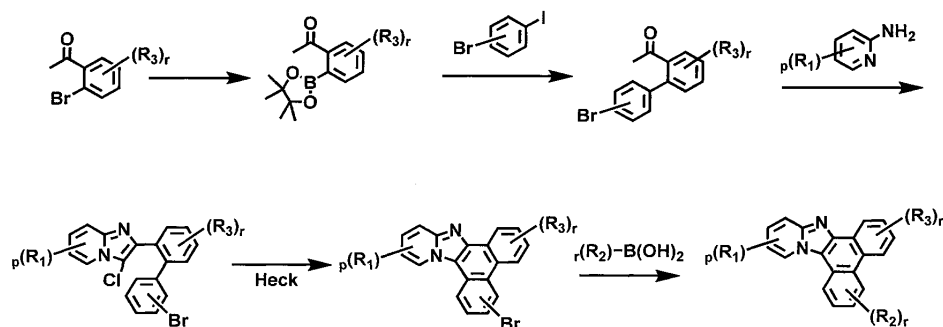


[0112]

[0113]

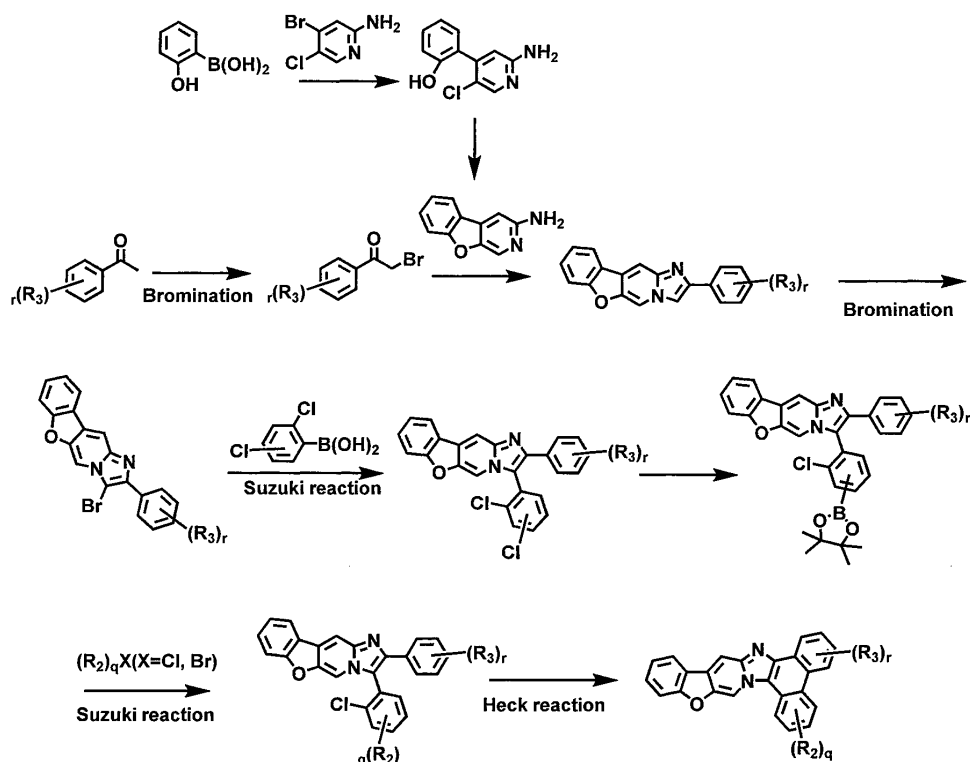
[0115]

[0116] [반응식 3]



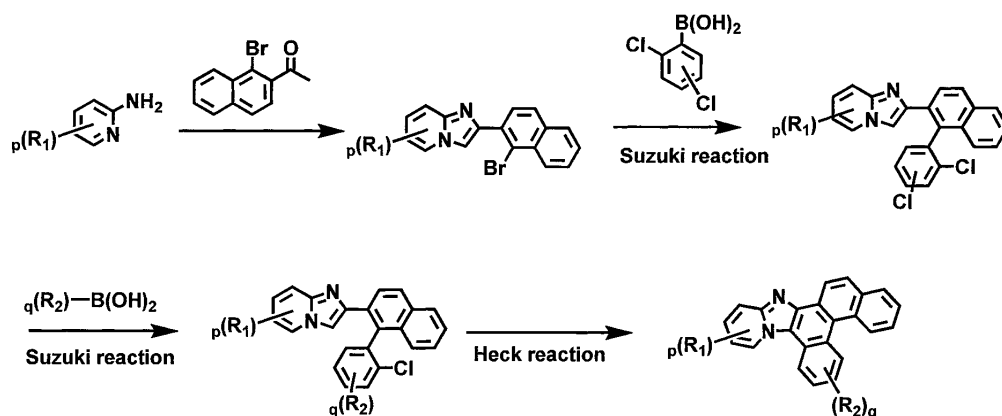
[0117]

[0118] [반응식 4]



[0119]

[0120] [반응식 5]



[0121]

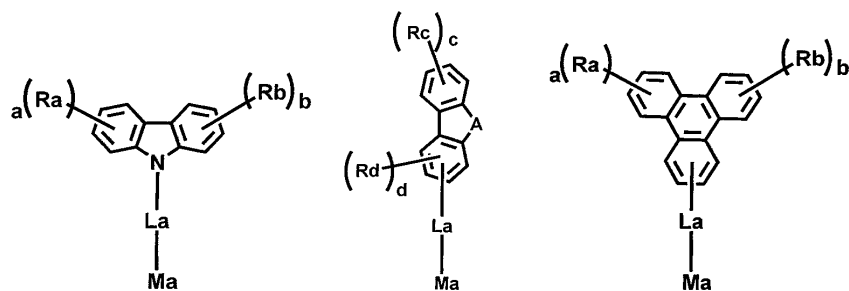
[0122] 상기 반응식 1 내지 5에서 R_1 내지 R_3 및 p 내지 r 은 화학식 1에서의 정의와 동일하다.

[0123] 상기와 같이 일 예에 따른 화학식 1로 표시될 수 있는 화합물의 예시적 합성예를 설명하였지만, 이들은 모두 Buchwald-Hartwig cross coupling 반응, N-arylation 반응, H-mont-mediated etherification 반응, Miyaura

borylation 반응, Suzuki cross-coupling 반응, Intramolecular acid-induced cyclization 반응, Pd(II)-catalyzed oxidative cyclization 반응, Grignard 반응, Heck reaction, Cyclic Dehydration 반응, SN₁ 치환 반응, SN₂ 치환 반응, 및 Phosphine-mediated reductive cyclization 반응 등에 기초한 것으로 구체적 합성예에 명시된 치환기 이외에 화학식 1에 정의된 다른 치환기가 결합되더라도 상기 반응이 진행된다는 것을 당업자라면 쉽게 이해할 수 있을 것이다.

- [0124] 본원은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다. 상기 재료는 본원의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.
- [0125] 또한, 본원은 화학식 1의 화합물 및 1종 이상의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자용 복합 재료를 제공한다.
- [0126] 본원에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖고, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다. 상기 유기물층에 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 추가로 포함할 수도 있다. 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층은 1층, 2층, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란타넘계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속, 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체화합물을 추가로 포함할 수도 있다.
- [0127] 일 예에 따른 유기 전계 발광 재료는 백색 유기 전계 발광 소자(White Organic Light Emitting Device)를 위한 발광 재료로서 사용될 수 있다. 상기 백색 유기 전계 발광 소자는 R(적색), G(녹색) 또는 YG(황녹색), B(청색) 발광부들의 배열 형태에 따라 병렬 배치(side-by-side) 방식, 적층(stack) 방식, 또는 색 변환 물질(color conversion material, CCM) 방식 등 다양한 구조들이 제안되고 있다. 또한 일 예에 따른 유기 전계 발광 재료는 양자점(QD)을 포함하는 유기 전계 발광 소자에도 사용될 수 있다.
- [0128] 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 이 때, 상기 제1 전극 및 제2 전극은 각각 투명한 도전성 물질로 형성되거나 반투과형 또는 반사형 도전성 물질로 형성될 수 있다. 상기 제1 전극 및 제2 전극을 형성하는 물질의 종류에 따라, 유기 전계 발광 소자는 전면 발광형, 매면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 버퍼층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.
- [0129] 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 버퍼층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층 및 전자 차단층 중 어느 하나의 층 이상에 포함될 수 있다. 경우에 따라 바람직하게는, 발광층 및 전자 전달층 중 어느 하나의 층 이상에 포함될 수 있다. 발광층에 사용될 경우, 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다. 전자 전달층에 사용될 경우, 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 전자 전달 재료로서 포함될 수 있다. 바람직하게는, 상기 발광층은 하나 이상의 도판트를 추가로 더 포함할 수 있다. 필요한 경우, 본원의 유기 전계 발광 화합물은 코호스트(co-host) 재료로 사용될 수 있다. 즉, 발광층은 본원의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물(제1 호스트 재료) 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 추가로 포함할 수 있다. 이 때, 제1 호스트 재료와 제2 호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.
- [0130] 상기 제2 호스트 재료는 공지된 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하며, 하기 화학식 21 내지 23 중 어느 하나로 표시되는 화합물인 것이 바람직할 수 있다.

[0131] [화학식 21] [화학식 22] [화학식 23]



[0132]

[0133] 상기 화학식 21 내지 23에서,

[0134] Ma는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이고;

[0135] La는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이며;

[0136] A는 S, O, NR₇ 또는 CR₈R₉이고;

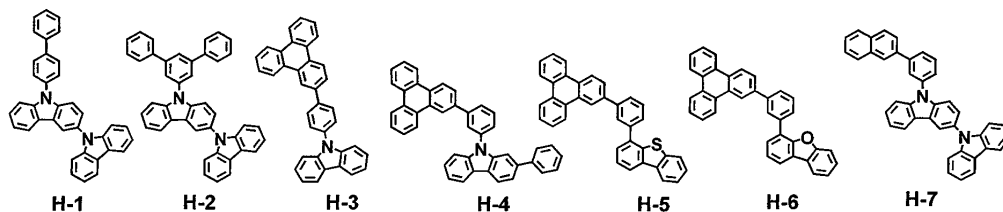
[0137] Ra 내지 Rd는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C60)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노이거나; 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있으며;

[0138] R₇ 내지 R₉는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이며; R₈ 및 R₉는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

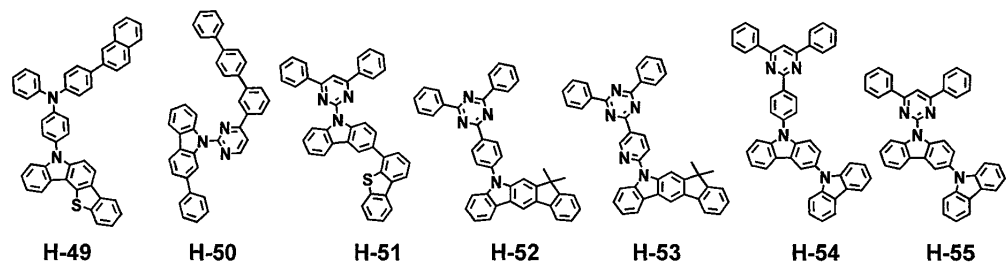
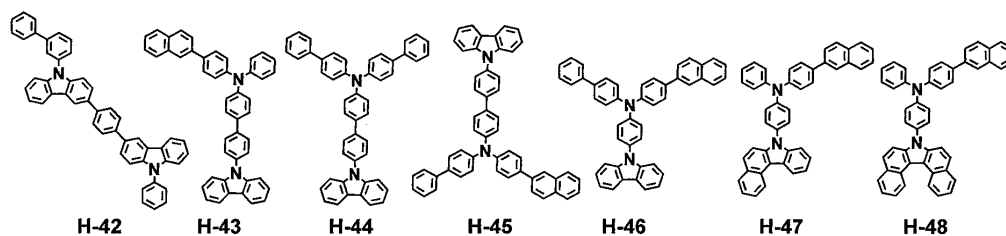
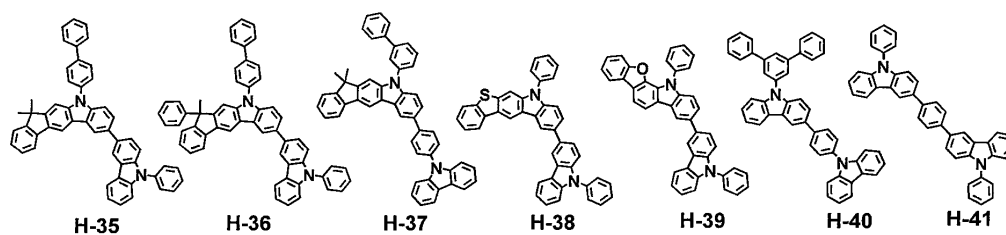
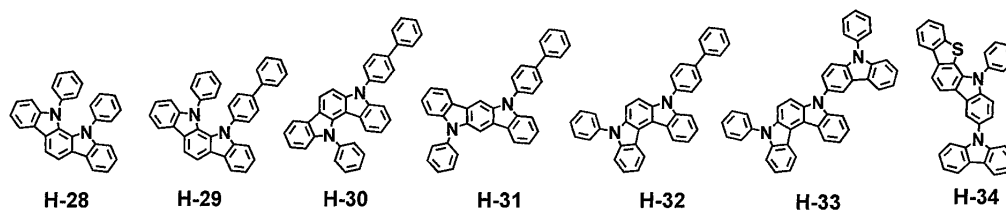
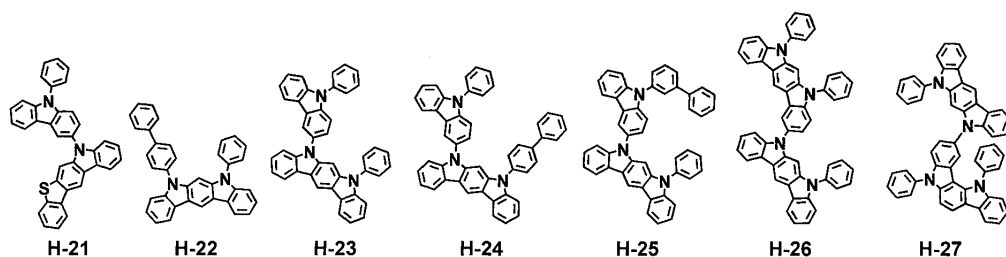
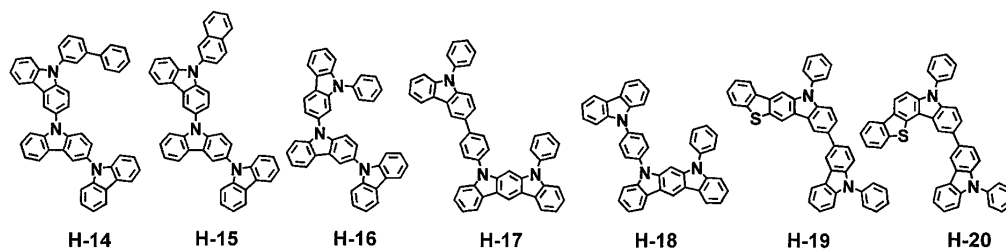
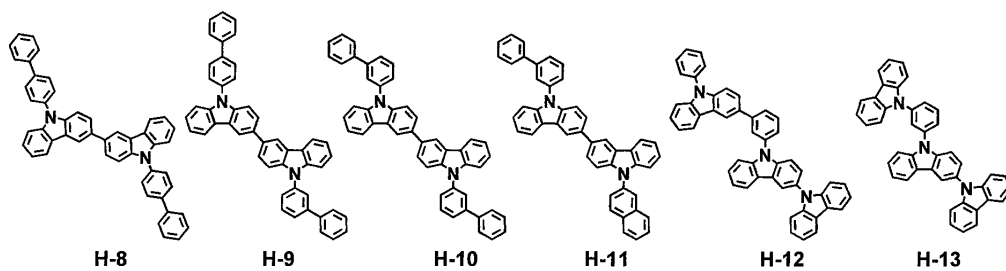
[0139] a 내지 c는 1 내지 4의 정수이고, d는 1 내지 3의 정수이며;

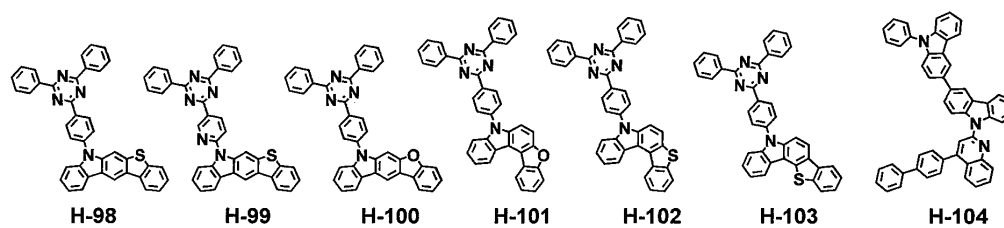
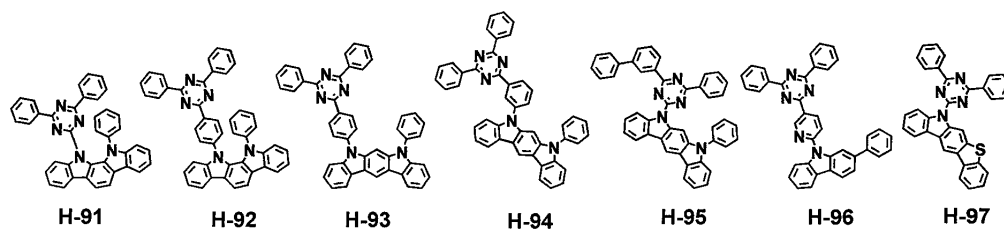
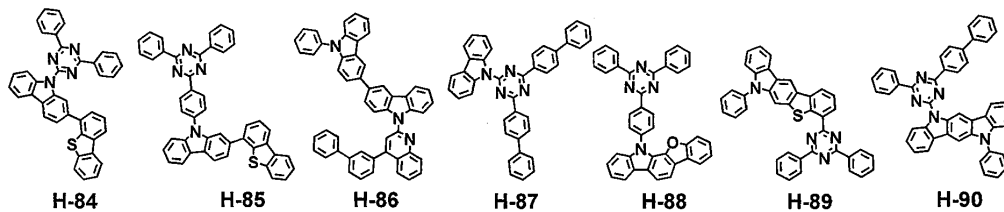
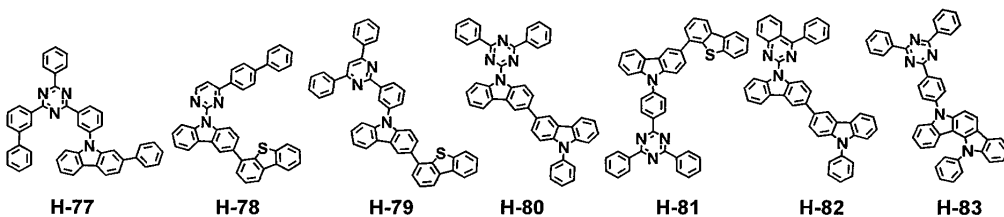
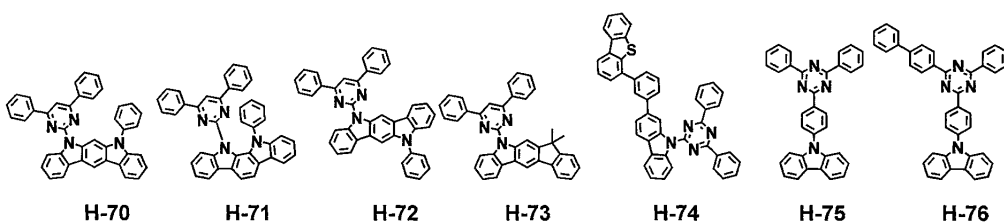
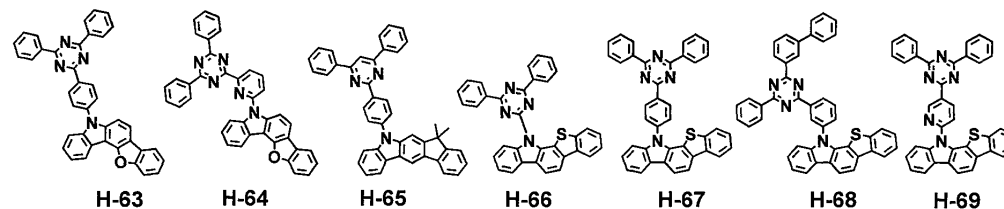
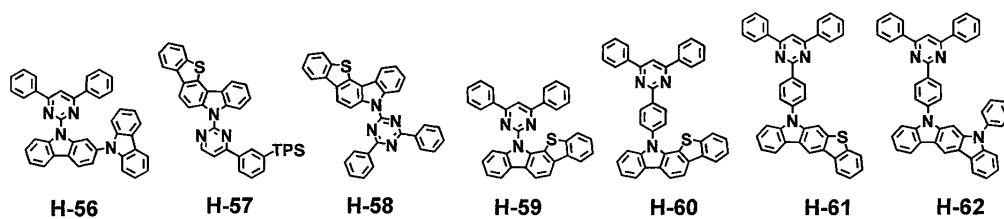
[0140] 상기 헤테로아릴은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

[0141] 구체적으로, 상기 화학식 21 내지 23 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

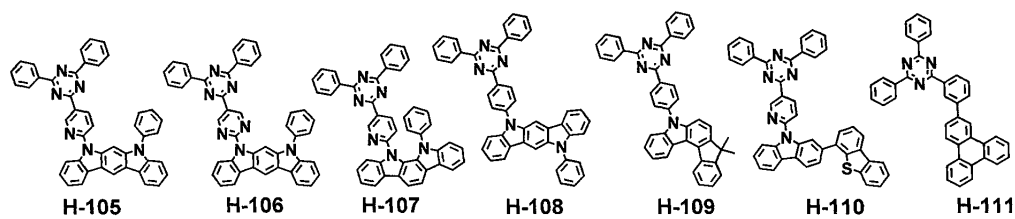


[0142]

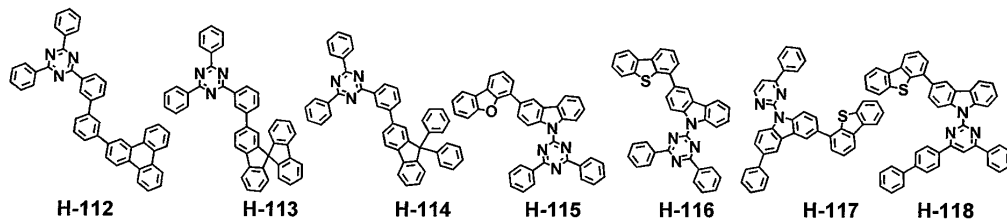




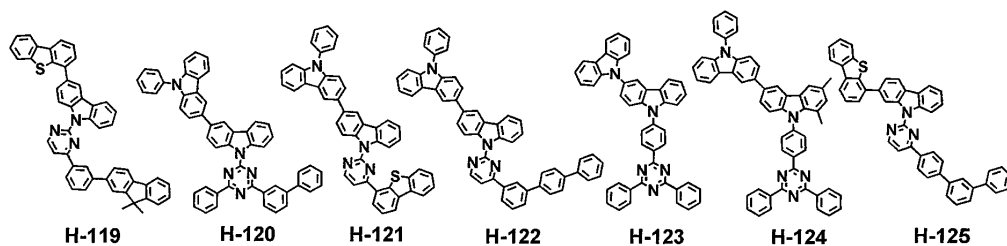
[0157]



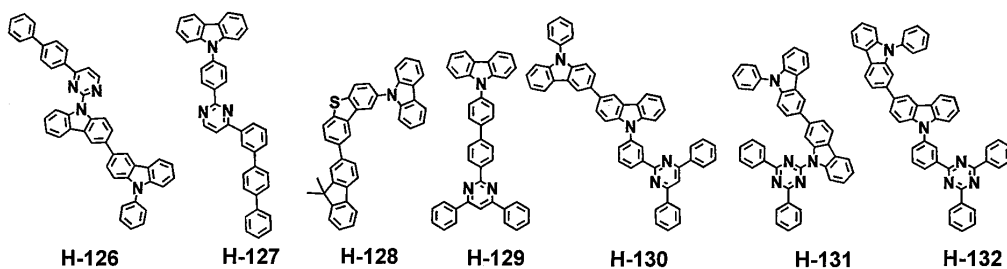
[0158]



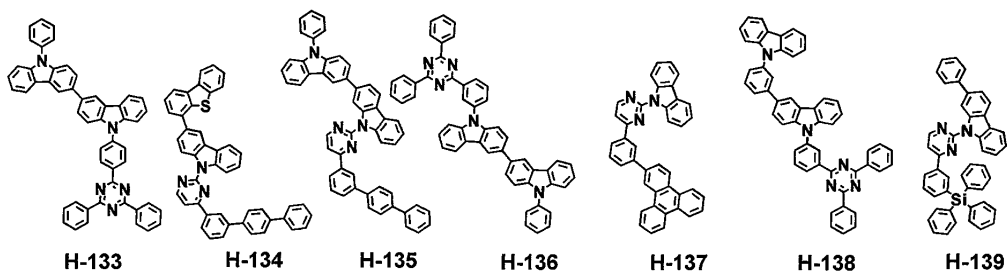
[0159]



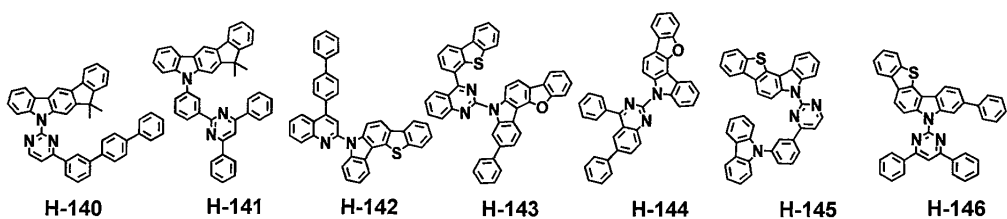
[0160]



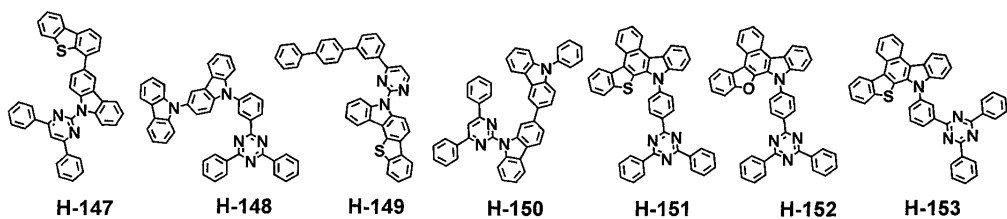
[0161]

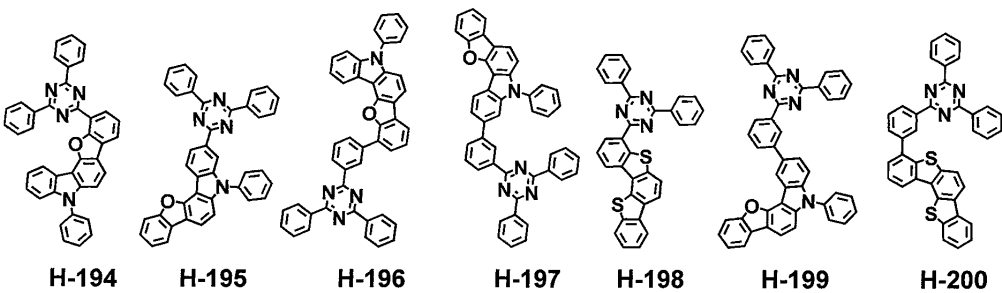
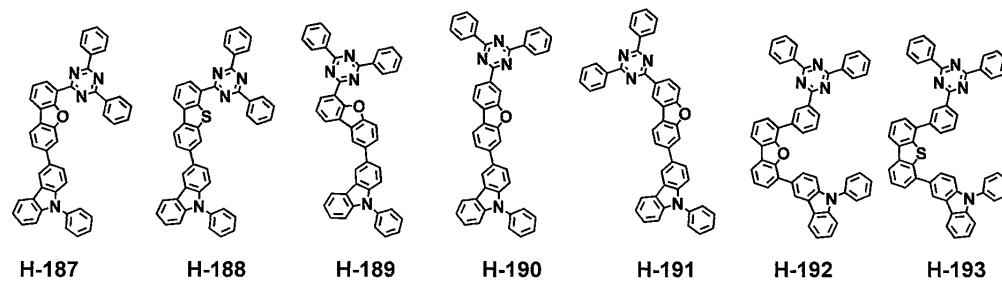
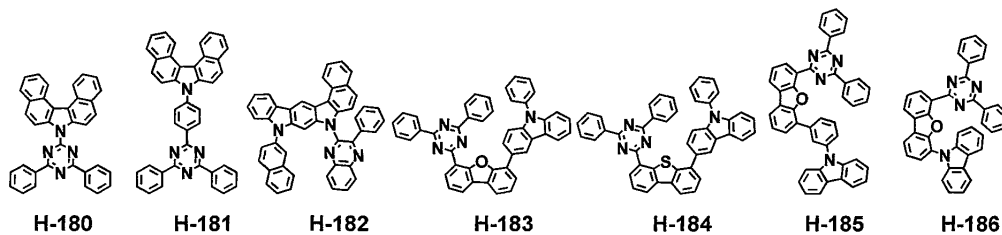
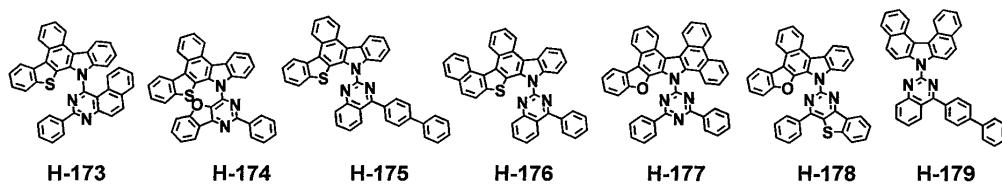
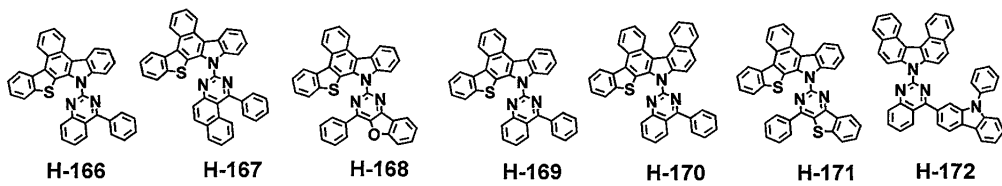
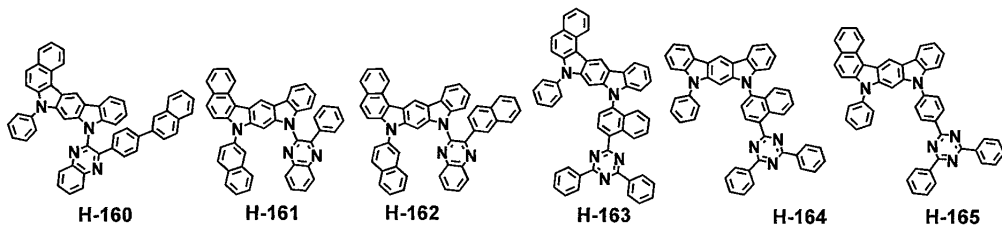
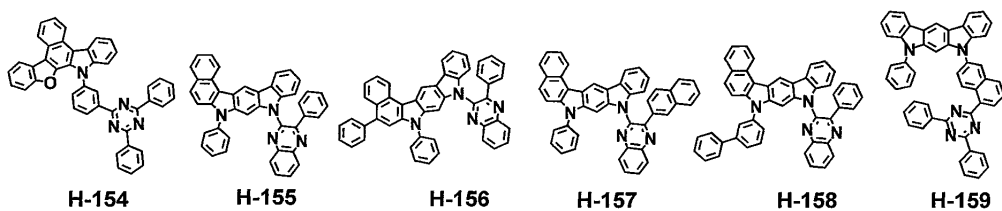


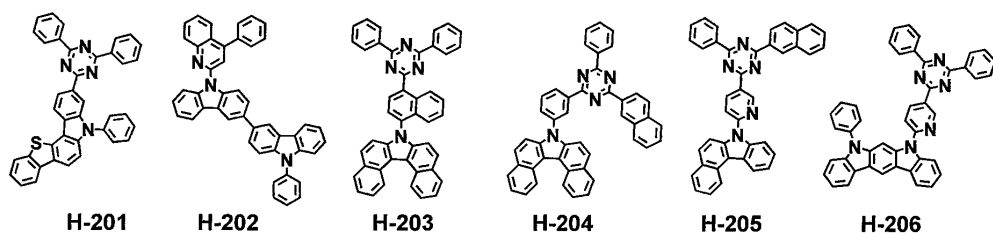
[0162]



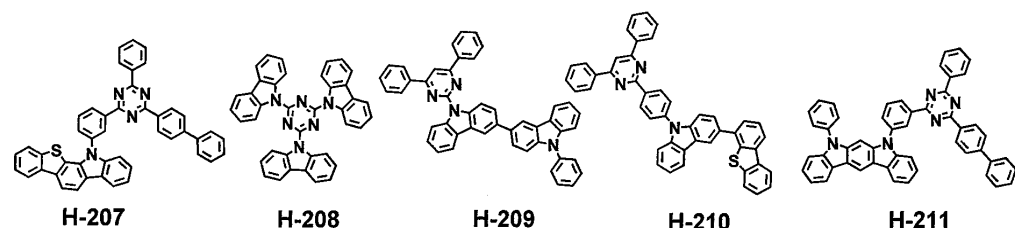
[0163]







[0171]



[0172]

[0173]

[여기서, TPS는 트리페닐실릴(triphenylsilyl)기이다]

[0174]

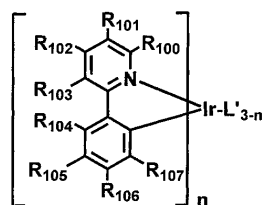
본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로는 하나 이상의 인광 또는 형광 도판트를 사용할 수 있고, 인광 도판트가 바람직할 수 있다. 본원의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물일 수 있고, 경우에 따라 바람직하게는, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물일 수 있으며, 경우에 따라 더 바람직하게는, 오르토 메탈화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

[0175]

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

[0176]

[화학식 101]



[0177]

[0178]

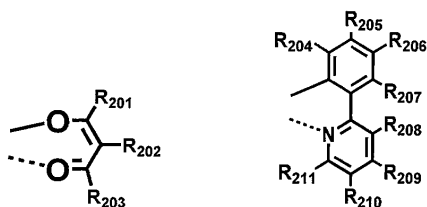
상기 화학식 101에서,

[0179]

L'은 하기 구조 1 또는 2에서 선택되고;

[0180]

[구조 1] [구조 2]



[0181]

[0182]

R₁₀₀ 내지 R₁₀₃은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이거나; R₁₀₀ 내지 R₁₀₃은 인접 치환기가 서로 연결되어 피리딘과 함께 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 퀴놀린, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조프로피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조프로퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조티에노퀴놀린, 또는 치환

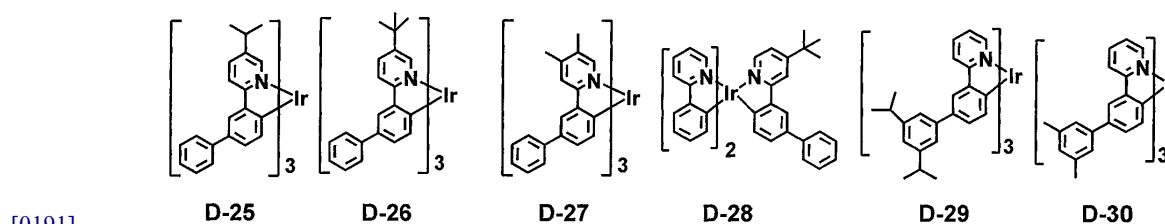
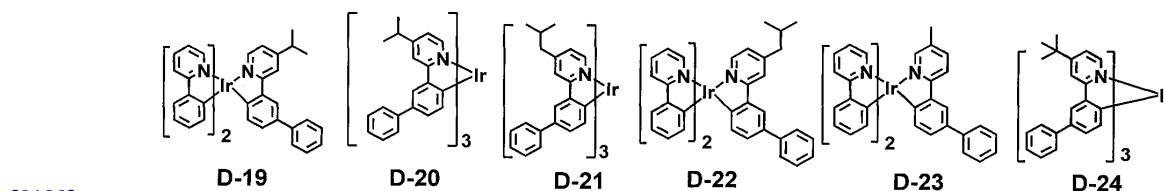
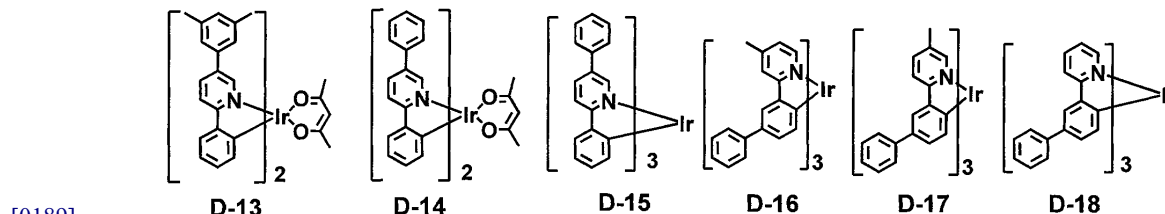
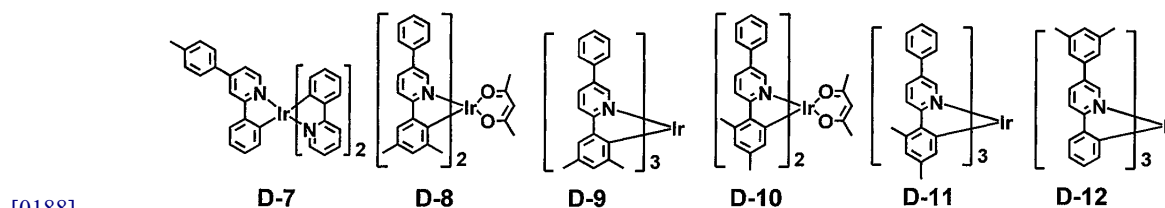
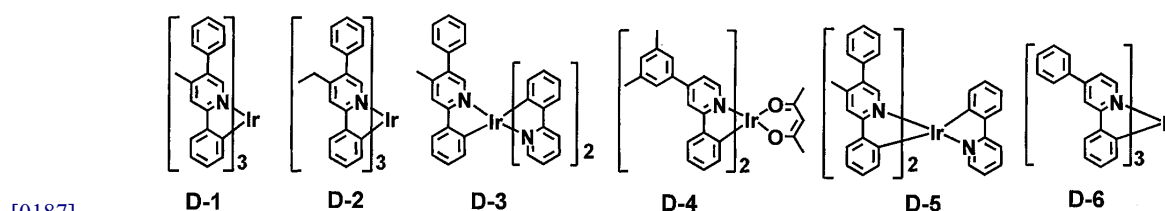
또는 비치환된 인데노퀴놀린 형성이 가능하며;

[0183] R_{104} 내지 R_{107} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이거나; R_{104} 내지 R_{107} 은 인접 치환기가 서로 연결되어 벤젠과 함께 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 나프탈렌, 치환 또는 비치환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조푸로피리딘, 또는 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘 형성이 가능하며;

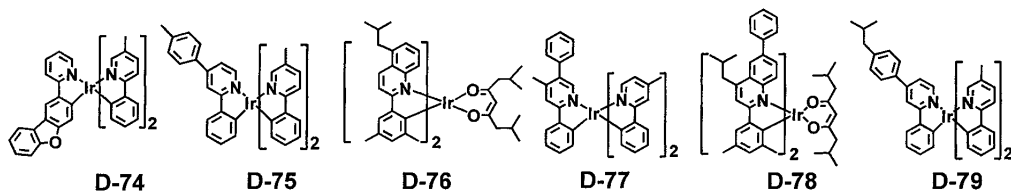
[0184] R_{201} 내지 R_{211} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이거나; R_{201} 내지 R_{211} 은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있으며;

[0185] n 은 1 내지 3의 정수이다.

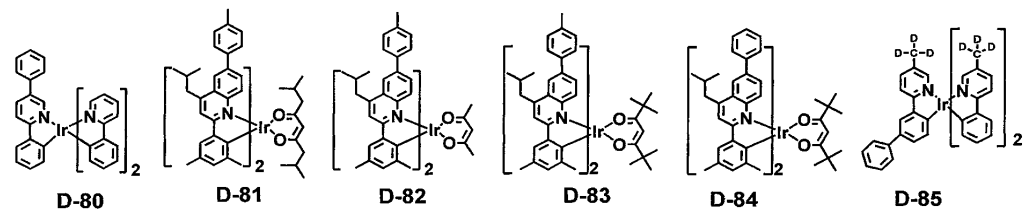
[0186] 구체적으로, 상기 도판트 화합물의 구체적인 예는 다음과 같으나, 이에 한정되지는 않는다.



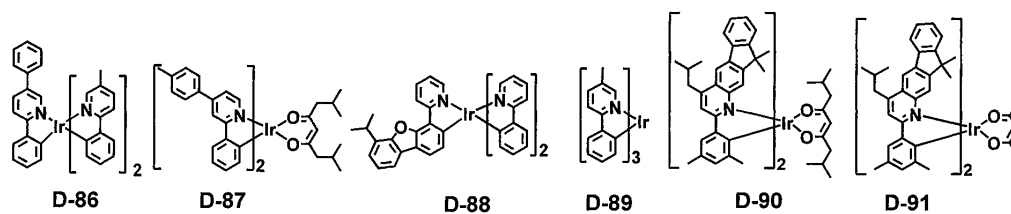




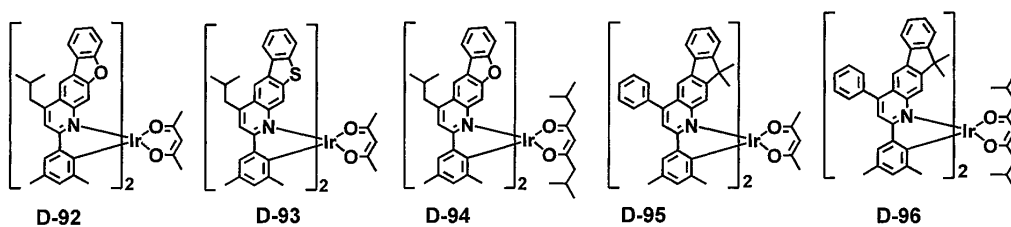
[0200]



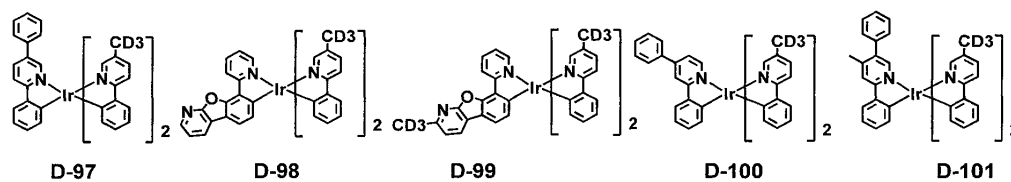
[0201]



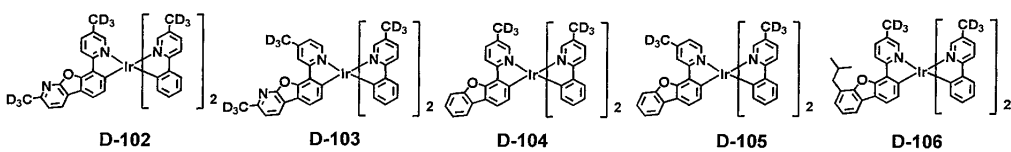
[0202]



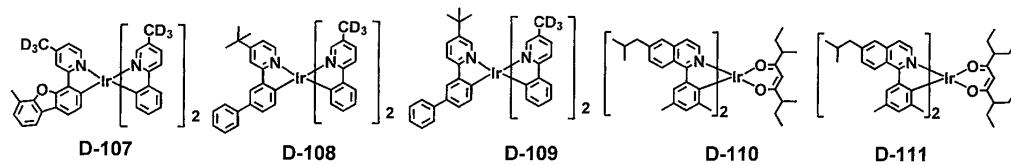
[0203]



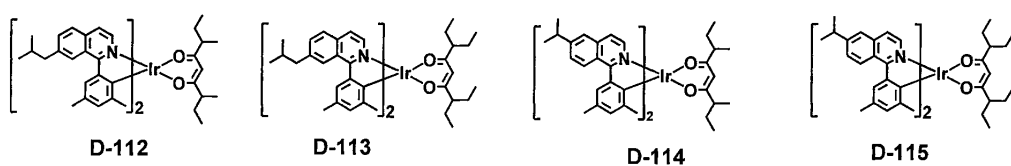
[0204]



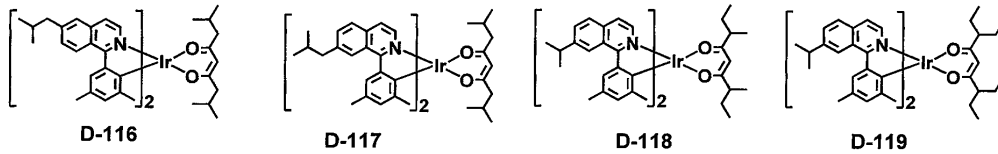
[0205]



[0206]



[0207]



[0208]

[0209]

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

[0210]

본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenid e)층, 할로젠화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 하나 이상의 층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭 함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 애노드 표면에 규소 및 알루미늄의 칼코제 나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 캐소드 표면에 할로젠화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 유기 전계 발광 소자의 구동 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼 코제나이드의 바람직한 예로는 SiO_x ($1 \leq x \leq 2$), AlO_x ($1 \leq x \leq 1.5$), SiON , SiAlON 등이 있고, 할로젠화 금속의 바 람직한 예로는 LiF , MgF_2 , CaF_2 , 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등이 있다.

[0211]

애노드와 발광층 사이에 정공 주입층, 정공 전달층 또는 전자 차단층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 정 공 주입층은 애노드에서 정공 전달층 또는 전자 차단층으로의 정공 주입 장벽(또는 정공 주입 전압)을 낮출 목 적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공 전달층 또는 전 자 차단층도 복수의 층이 사용될 수 있다. 또한 상기 정공 주입층은 p-도판트로 도핑될 수 있다.

[0212]

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

[0213]

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

[0214]

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

[0215]

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

[0216]

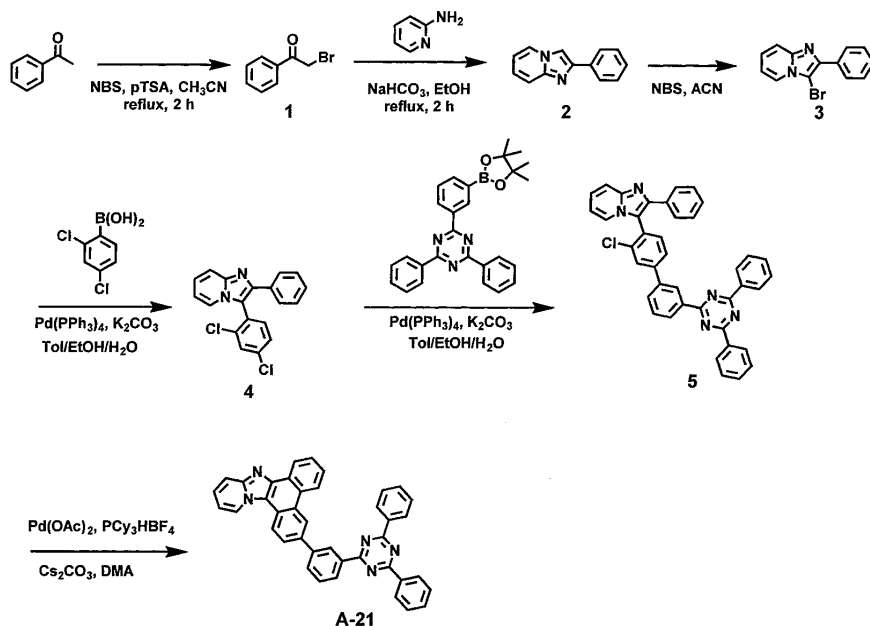
습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로푸란, 디옥산 등의 적절한

용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 각 층을 형성하는 재료가 용해 또는 분산될 수 있고, 성막성에 문제가 없는 것이라면 어느 것이어도 된다.

[0217] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 디스플레이 장치, 예를 들면, 스마트폰, 태블릿, 노트북, PC, TV 또는 차량용의 디스플레이 장치, 또는 조명 장치, 예를 들면, 옥외 또는 옥내용 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

[0218] 이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 대표 화합물을 들어 본원에 따른 화합물의 제조방법 및 이의 물성, 그리고 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자의 발광특성을 설명한다. 그러나, 본 발명은 하기의 예들에 한정되는 것은 아니다.

[0219] [실시예 1] 화합물 A-21의 제조



[0220]

[0221] 1) 화합물 1의 합성

[0222] 플라스크에 벤즈알데히드 (80 g, 666 mmol), N-브로모숙신이미드 (118.5 g, 666 mmol), 파라 톨루엔설폰산 모노수화물 (190 g, 999 mmol) 및 아세트니트릴 1000 mL를 넣어 녹인 후, 130℃에서 2시간 동안 환류교반시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 1 (120 g, 수율: 91%)을 얻었다.

[0223] 2) 화합물 2의 합성

[0224] 플라스크에 화합물 1 (120 g, 603 mmol), 2-아미노피리딘 (58 g, 904 mmol), 탄산수소나트륨 (50 g, 603 mmol) 및 에탄올 2000 mL를 넣어 녹인 후, 2시간 동안 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 2 (81.3 g, 수율: 56%)을 얻었다.

[0225] 3) 화합물 3의 합성

[0226] 플라스크에 화합물 2 (81.3 g, 419 mmol), N-브로모숙신이미드 (89.4 g, 502 mmol) 및 아세트니트릴 1100 mL를 넣어 녹인 후, 실온에서 3시간 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 3 (110 g, 수율: 96%)을 얻었다.

[0227] 4) 화합물 4의 합성

[0228] 플라스크에 화합물 3 (110 g, 403 mmol), 2,4-디클로로페닐보론산 (92 g, 483 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (23 g, 20 mmol), 탄산칼륨 (139 g, 1007 mmol), 톨루엔 1800 mL, 에탄올 710 mL 및 물 710 mL를 넣어 녹인 후, 120℃에서 12시간 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘

설레이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 4 (109.5 g, 수율: 56%)을 얻었다.

5) 화합물 5의 합성

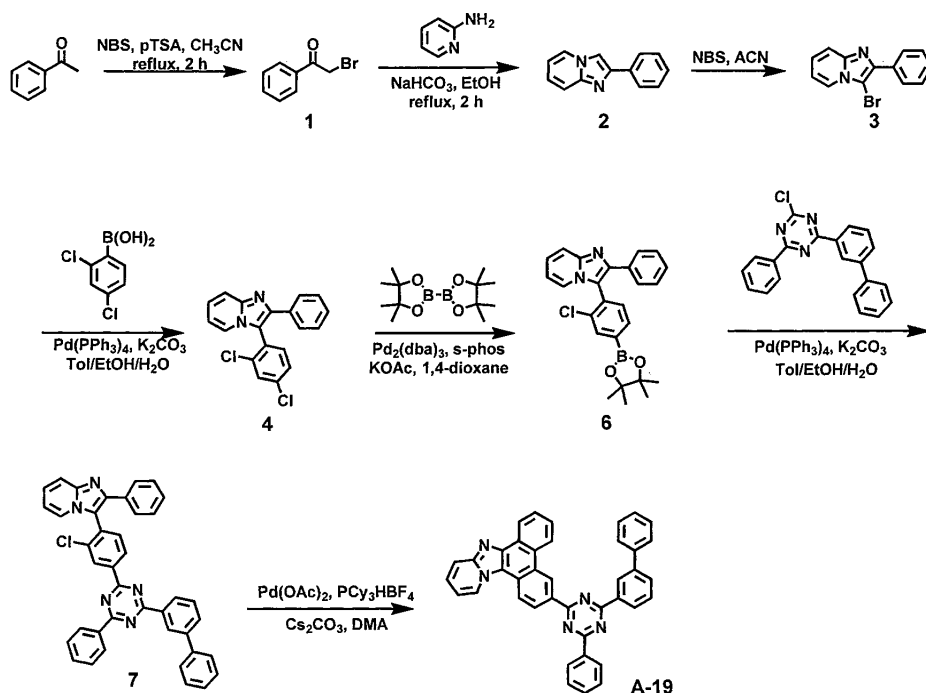
플라스크에 화합물 4 (30 g, 88 mmol), 2,4-디메틸-6-[3-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)페닐]1,3,5-트리아진 (46 g, 106 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (5 g, 4 mmol), 탄산칼륨 (31 g, 138 mmol), 톨루엔 440 mL, 에탄올 110 mL 및 물 110 mL를 넣어 녹인 후, 120°C에서 12시간 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설레이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 5 (7.8 g, 수율: 14%)을 얻었다.

6) 화합물 A-21의 합성

플라스크에 화합물 5 (7.6 g, 12 mmol), 아세트산 팔라듐(II) (0.56 g, 2 mmol), 트리스클로헥실포스핀테트라플루오로보레이트 (1.8 g, 5 mmol), 탄산세슘 (12 g, 37 mmol) 및 디메틸아세트아미드(DMA) 60 mL를 넣어 녹인 후 130°C에서 12시간 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면, 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 A-21 (3.5 g, 수율: 49%)을 얻었다.

화합물	MW	M.P.
A-21	575.68	298°C

[실시예 2] 화합물 A-19의 제조



1) 화합물 1 내지 4의 합성

상기 실시예 1과 같다.

2) 화합물 6의 합성

플라스크에 화합물 4 (30 g, 88 mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-옥타메틸-2,2-비(1,3,2-디옥사보로란) (27 g, 106 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (4 g, 4 mmol), 2-디시클로헥실 포스피노-2',6'-디메톡시비페닐 (s-phos) (3.6 g, 9 mmol), 아세트산칼륨 (22 g, 221 mmol) 및 1,4-디옥산 440 mL를 넣고, 120°C에서 12시간 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설레이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 6 (36.1 g, 수율: 95%)을 얻었다.

3) 화합물 7의 합성

[0241] 플라스크에 화합물 6 (35.5 g, 82 mmol), 1-([1,1'-비페닐]3-일)4-클로로-6-페닐-1,3,5-트리아진 (23.6 g, 69 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (4 g, 3.4 mmol), 탄산칼륨 (24 g, 172 mmol), 톨루엔 340 mL, 에탄올 86 mL 및 물 86 mL를 넣고, 120℃에서 12시간 환류시켰다. 반응이 끝나면, 에틸 아세테이트로 유기층을 추출하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 7 (10.3 g, 수율: 25%)을 얻었다.

[0242] 4) 화합물 A-19의 합성

[0243] 플라스크에 화합물 7 (9.8 g, 16 mmol), 아세트산 팔라듐(II) (0.72 g, 3 mmol), 트리시클로헥실포스핀테트라플루오로보레이트 (2.4 g, 6 mmol), 탄산세슘 (15.7 g, 48 mmol) 및 DMA 80 mL를 넣어 녹인 후 130℃에서 12시간 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면, 용매를 제거하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 A-19 (1.7 g, 수율: 18%)을 얻었다.

화합물	MW	M.P.
A-19	575.68	275℃

[0244]

[0245] [소자 실시예 1] 본원에 따른 청색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조

[0246] 본원 화합물을 포함하는 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED 용 글래스 (지오마텍사 제조) 기판 상의 투명 전극 ITO 박막(10Ω/□)을 아세톤 및 이소프로필알코올을 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 HI-1을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-7} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 60 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HI-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HT-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 20 nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HT-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착하였다. 정공 주입층과 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 화합물 BH-1을 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 BD-1을 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 2 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 20 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 전자 전달 재료로서 한쪽 셀에 화합물 A-21을 넣고 다른 한쪽 셀에 화합물 EIL-1을 1:1의 중량비로 증발시켜 발광층 위에 35 nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서, 전자 주입층으로 화합물 EIL-1을 전자 전달층 위에 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 캐소드를 상기 전자 주입층 위에 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다. 재료 별로 각 화합물은 10^{-6} torr 하에서 진공 승화 정제하여 사용하였다.

[0247] 이상과 같이 제조된 유기 전계 발광 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 구동 전압, 효율, 및 색좌표의 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[0248] [비교예 1] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 청색 발광 유기 전계 발광 소자의 제조

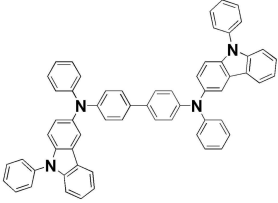
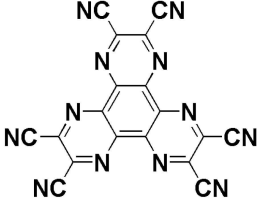
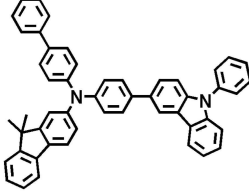
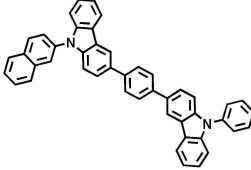
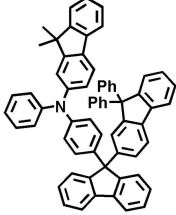
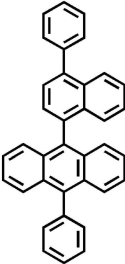
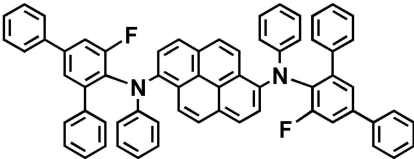
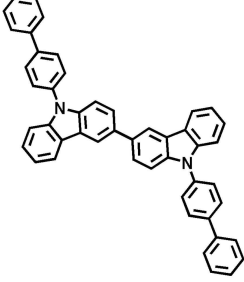
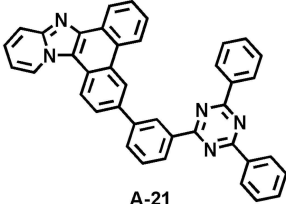
[0249] 비교예 1에서는, 전자 전달 재료로서 화합물 A-21 대신에 하기 표 1의 전자 전달 재료를 사용한 것 외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다. 비교예 1의 유기 전계 발광 소자의 평가 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

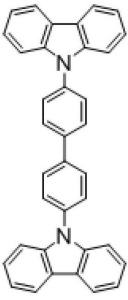
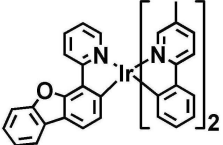
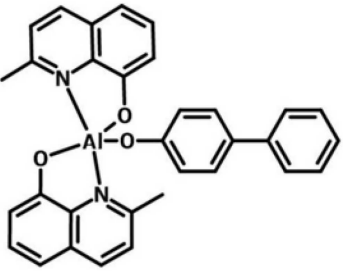
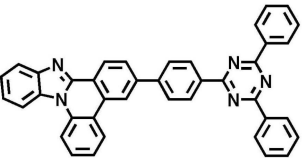
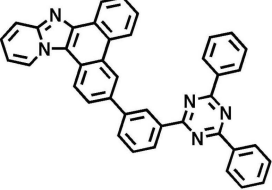
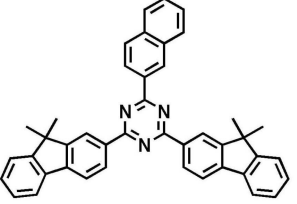
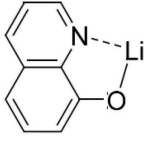
	전자 전달 재료	구동전압 (V)	효율 (cd/A)	색좌표 (x)	색좌표 (y)
소자 실시예 1	A-21	4.1	5.5	0.140	0.090
비교예 1	Ref.	4.7	3.6	0.140	0.087

- [0251] 비교예 1에 비하여 소자 제조예 1의 소자의 성능이 좋다는 것을 확인할 수 있다. 본원 화합물이 종래 화합물(대한민국 등록특허공보 KR 1052973 B1에 개시)에 비하여 메인 코어의 분극률(polarizability)이 크다. 메인 코어의 분극률은 진공 증착층에서 파이-파이 스택킹을 도와줄 수 있고, 이로 인해 전하 이동도가 빨라질 수 있다(이론으로써 한정하는 것은 아님).
- [0252] 도 2를 보면 종래 화합물 메인 코어의 경우 두 개의 질소 원자 중 하나(N₂)가 페난트렌에 포함되어 H₁과 H₂의 수소 원자 간 입체 장애로 인하여 뒤틀림이 생긴다(컴퓨터로 계산된 분극률: 240.030). 이에 비하여 본원 화합물 메인 코어의 경우 도 1에서 볼 수 있듯이 융합된 아자인돌리진 구조를 가져 이러한 입체 장애를 감소시킨다(컴퓨터로 계산된 분극률: 247.080). 따라서, 구조적 및 열적 안정성을 가질 수 있다.
- [0253] **[소자 실시예 2] 호스트로서 본 발명에 따른 화합물을 공증착한 유기 전계 발광 소자의 제조**
- [0254] 본원 화합물을 포함하는 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조) 기판 상의 투명 전극 ITO 박막(10Ω/□)을 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO 기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 HI-1을 넣고 챔버 내의 진공도가 10⁻⁶ torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 80 nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HI-2를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5 nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HT-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10 nm 두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 HT-3을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 30 nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착하였다. 정공 주입층과 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀 두 군데에 호스트로서 각각 화합물 H-8 및 화합물 A-21를 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-50을 넣은 후, 두 호스트 물질을 2:1의 다른 속도로 증발시키고 동시에 도판트 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 10 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ETL-1과 화합물 EIL-1을 4:6의 속도로 증발시켜 발광층 위에 35 nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서, 전자 주입층으로 화합물 EIL-1을 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 캐소드를 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다.
- [0255] 그 결과, 2.9 V의 구동전압에서 60.7 cd/A의 효율을 보였으며, 1000 nits의 녹색 발광이 확인되었다.
- [0256] **[비교예 2] 호스트로서 종래의 화합물을 증착한 유기 전계 발광 소자의 제조**
- [0257] 발광 재료로서 호스트에는 CBP, 도판트로는 화합물 D-50을 사용하여 제2 정공 전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하고, 정공 저지층으로 BAlq를 10 nm 두께로 증착한 후, 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 ETL-1과 화합물 EIL-1을 4:6의 속도로 증발시켜 정공저지층 위에 25 nm 두께의 전자 전달층을 증착한 것 외에는 소자 실시예 2와 동일한 방법으로 OLED 소자를 제조하였다.
- [0258] 그 결과, 5.5 V의 전압에서 43.2 cd/A의 효율을 보였으며, 1000 nits의 녹색 발광이 확인되었다.
- [0259] 소자 실시예 및 비교예에서 사용된 화합물들을 하기 표 2에 나타내었다.

표 2

정공 주입층/ 정공 전달층	 HI-1  HI-2  HT-1  HT-2  HT-3
발광층	 BH-1  BD-1  H-8  A-21

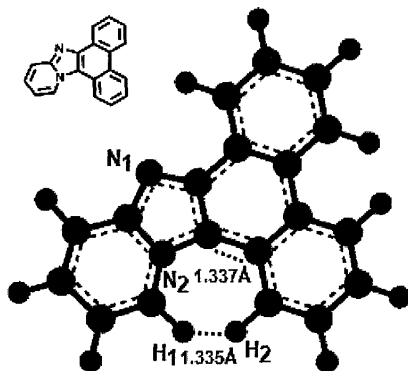
[0260]

	 CBP  D-50
정공저지층	 BAlq
전자 전달층/ 전자 주입층	 Ref.  A-21  ETL-1  EIL-1

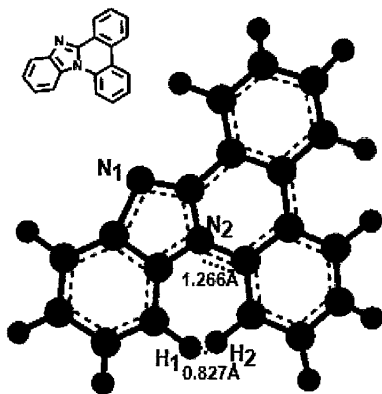
[0261]

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	有机电致发光化合物和包括该化合物的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020190114778A	公开(公告)日	2019-10-10
申请号	KR1020190031140	申请日	2019-03-19
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	이가원 전지송 양정은 박경진		
发明人	이가원 전지송 양정은 박경진		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/50 C09K2211/1044 C09K2211/1048 C09K2211/1051 C09K2211/1059 C09K2211/1062		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020180036243 2018-03-29 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及有机电致发光化合物和包括该有机电致发光化合物的有机电致发光器件。通过包含根据本发明的有机电致发光化合物，可以提供具有低驱动电压和/或高发光效率的有机电致发光器件。

