(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0020061
(43) 공개일자 2020년02월26일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/0085 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2018-0095303
(22) 출원일자 2018년08월16일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
롬엔드하스전자재료코리아유한회사
충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)
(72) 발명자
김현
경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
전정환
경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
장훈

전체 청구항 수 : 총 10 항

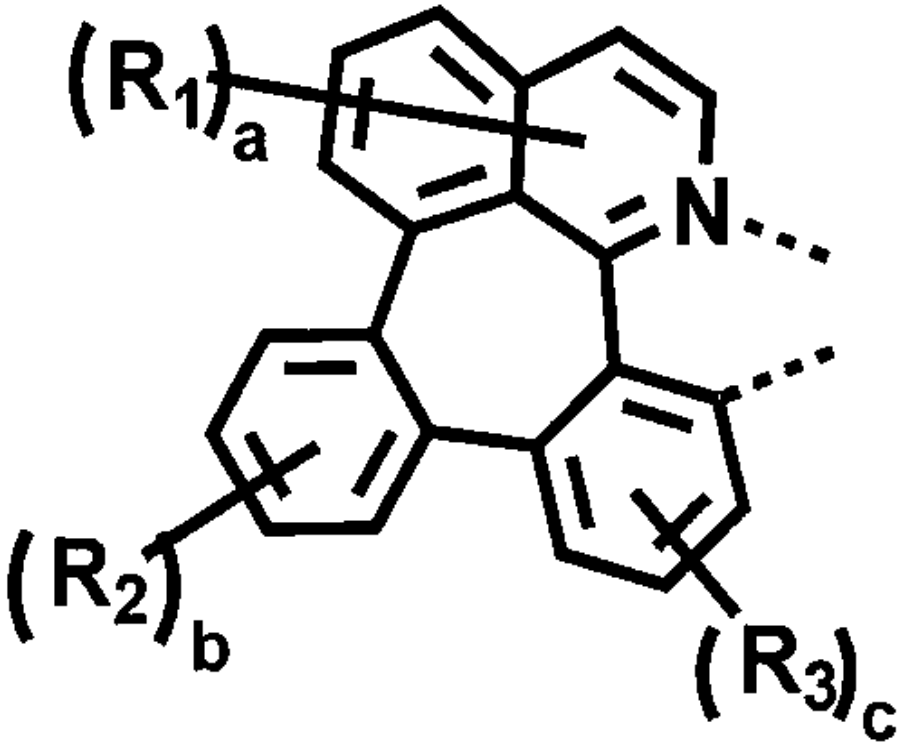
(54) 발명의 명칭 **유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자**

(57) 요 약

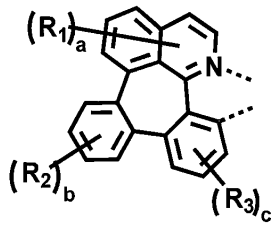
본원은 하기 화학식 1로 표시되는 리간드를 포함하는 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써 종래의 유기 전계 발광 소자에 비해 높은 발광 효율 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

(뒷면에 계속)

대 표 도 - 도1



[화학식 1]



상기 화학식 1에서 치환기들의 정의는 명세서에서 정의한 바와 같다.

(52) CPC특허분류
H01L 51/0087 (2013.01)
H01L 51/5012 (2013.01)
C09K 2211/185 (2013.01)

(72) 발명자
황선진
경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
이가원
경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
오홍세
경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

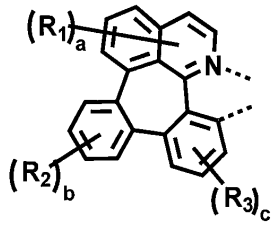
명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 리간드 L_1을 포함하고, 상기 리간드 L_1은 40 초과의 원자 번호를 가진 금속에 배위 결합되는, 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; 각각의 R_1 내지 R_3은 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

a는 1 내지 5의 정수이며, b는 1 내지 4의 정수이고, c 는 1 내지 3의 정수이며, a 내지 c가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R_1 내지 R_3은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 화합물은 하기 화학식 2로 표시되는 것인, 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 2]

$M(L_1)x(L_2)y(L_3)z$

상기 화학식 2에서,

M은 상기 40 초과의 원자 번호를 가진 금속이고,

x는 1, 2, 또는 3이며,

y는 0, 1, 또는 2이고,

z는 0, 1, 또는 2이며,

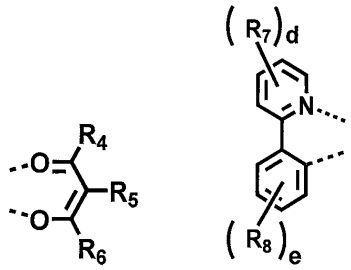
x, y 및 z의 합은 상기 M의 산화수이고,

L_1는 상기 화학식 1로 표시되는 리간드이며,

L_2는 하기 화학식 3으로 표시되는 리간드이고,

L_3는 하기 화학식 4로 표시되는 리간드이며,

[화학식 3] [화학식 4]



상기 화학식 3 및 4에서,

R_4 내지 R_8은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; R_4와 R_5, R_5와 R_6, 인접한 R_7들, 및 인접한 R_8들은 각각 독립적으로 연결되어 고리를 형성할 수 있으며,

d 및 e는 1 내지 4의 정수이며, d 및 e가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R_7 및 R_8은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

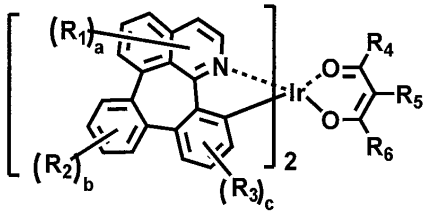
청구항 3

제1항에 있어서, 상기 40 초과의 원자 번호를 가진 금속은 Ir 또는 Pt인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 화합물은 하기 화학식 5로 표시되는 것인, 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 5]



상기 화학식 5에서,

R_4 내지 R_6은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; R_4와 R_5, 및 R_5와 R_6은 각각 독립적으로 연결되어 고리를 형성할 수 있으며,

R_1 내지 R_3, 및 a 내지 c는 제1항에서 정의된 바와 같다.

청구항 5

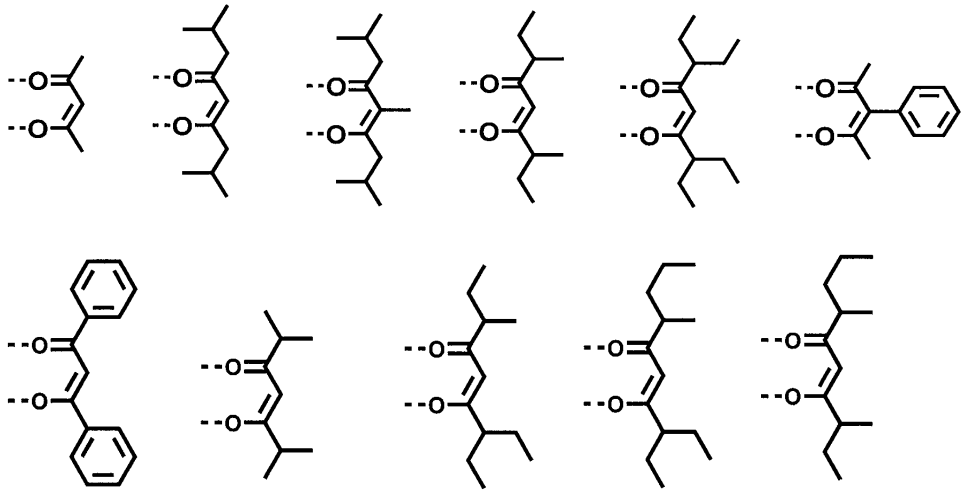
제2항에 있어서, R_1 내지 R_8이 각각 독립적으로 수소, 중수소, 중수소로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 비치환된 (C6-C25)아릴인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 6

제2항에 있어서, R_1 내지 R_8이 각각 독립적으로 수소, 중수소, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, *sec*-부틸, *tert*-부틸, n-펜틸, *tert*-펜틸, 네오펜틸, 이소펜틸, *sec*-펜틸 3-펜틸, 및 페닐로 이루어진 그룹에서 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

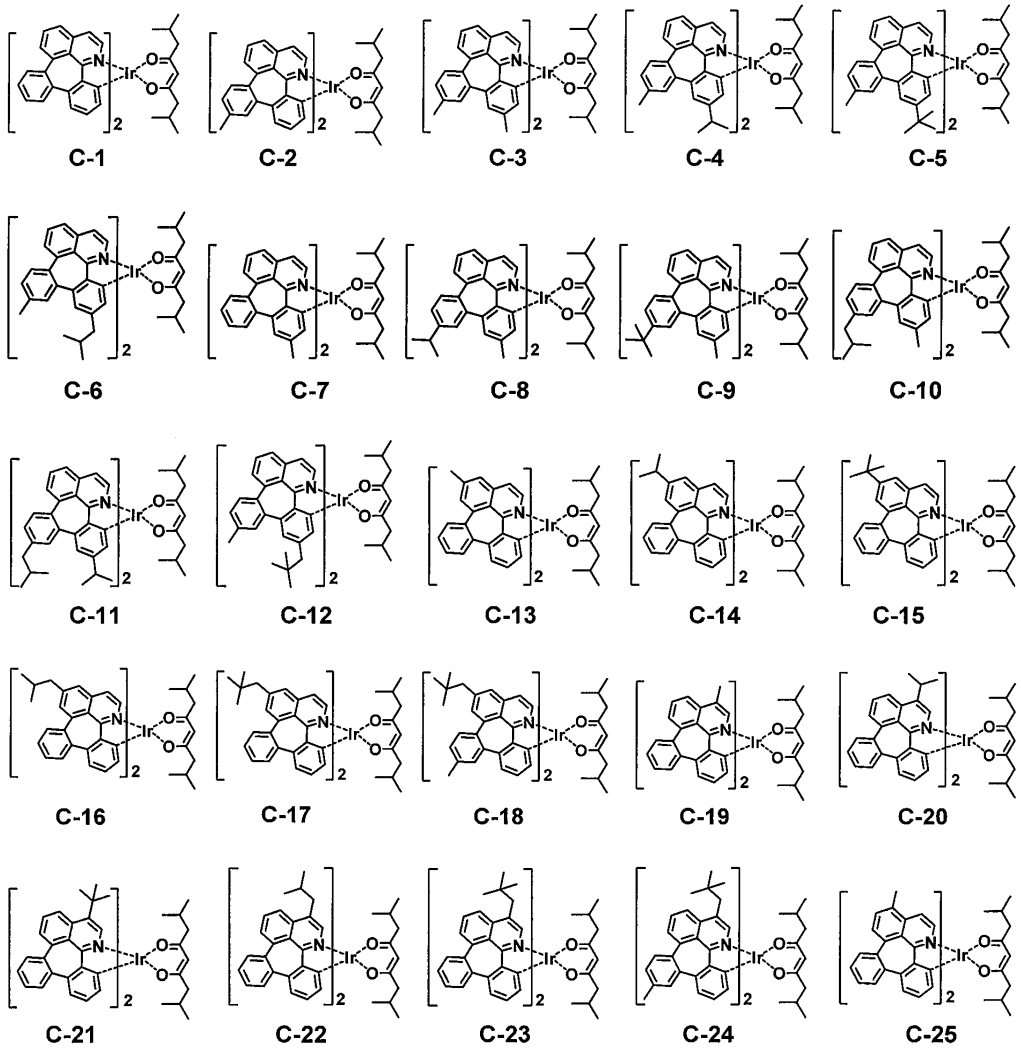
청구항 7

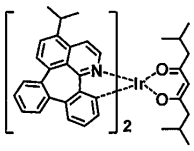
제2항에 있어서, 상기 화학식 3은 하기로 이루어진 그룹에서 선택되는 어느 하나로 표시되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.



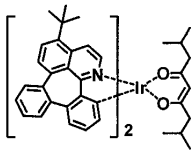
청구항 8

제1항에 있어서, 상기 유기 전계 발광 화합물은 하기에서 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

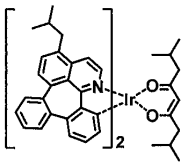




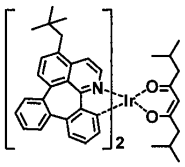
C-26



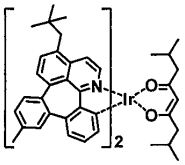
C-27



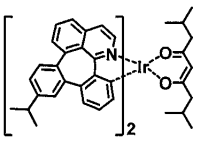
C-28



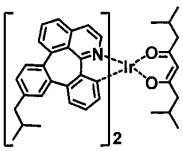
C-29



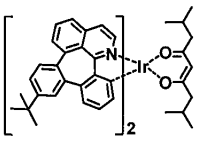
C-30



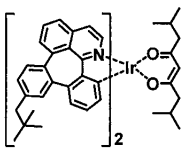
C-31



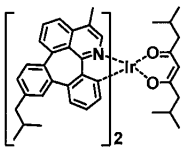
C-32



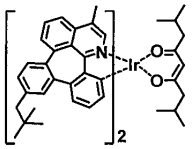
C-33



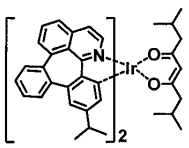
C-34



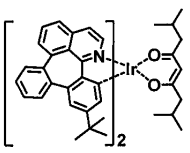
C-35



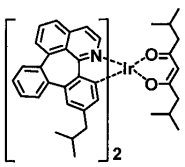
C-36



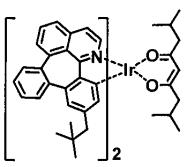
C-37



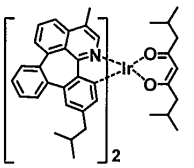
C-38



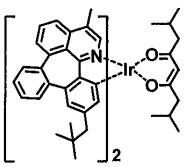
C-39



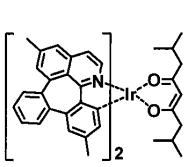
C-40



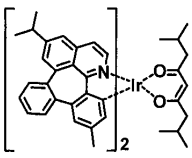
C-41



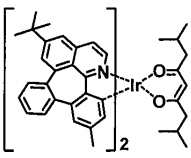
C-42



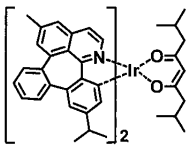
C-43



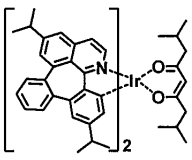
C-44



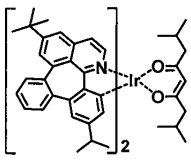
C-45



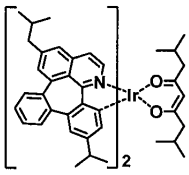
C-46



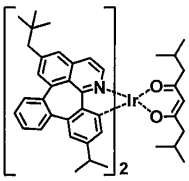
C-47



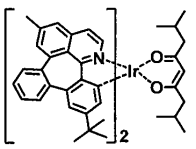
C-48



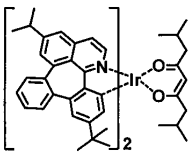
C-49



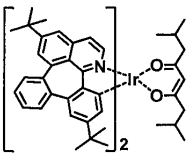
C-50



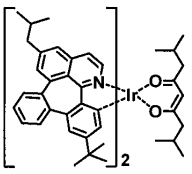
C-51



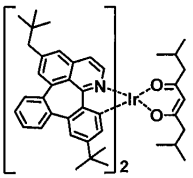
C-52



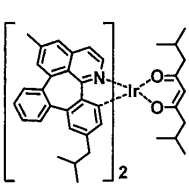
C-53



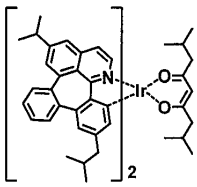
C-54



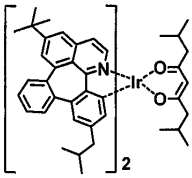
C-55



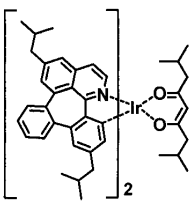
C-56



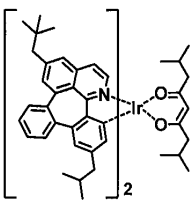
C-57



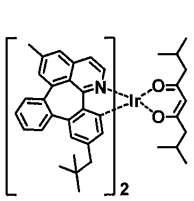
C-58



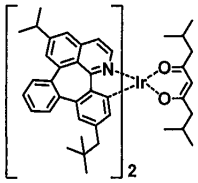
C-59



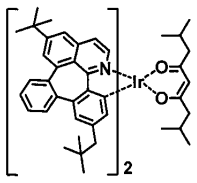
C-60



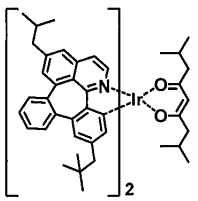
C-61



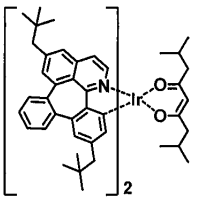
C-62



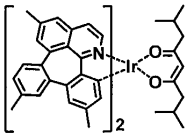
C-63



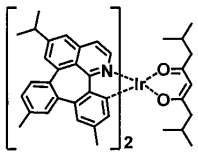
C-64



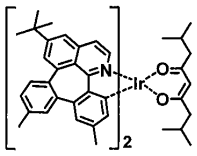
C-65



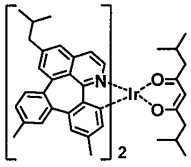
C-66



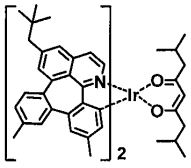
C-67



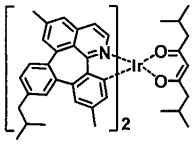
C-68



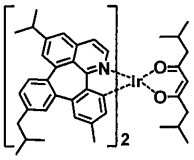
C-69



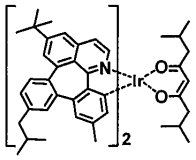
C-70



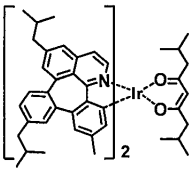
C-71



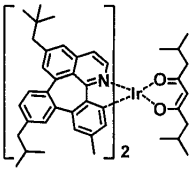
C-72



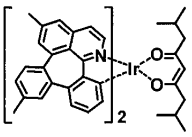
C-73



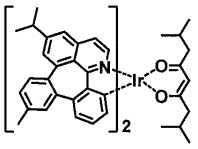
C-74



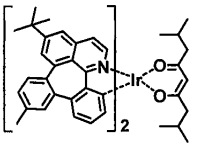
C-75



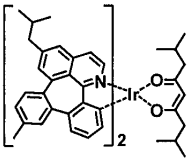
C-76



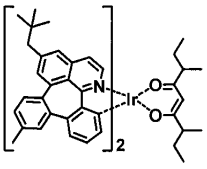
C-77



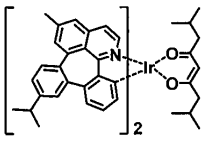
C-78



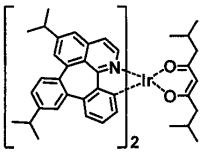
C-79



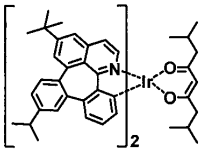
C-80



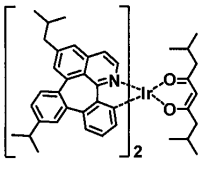
C-81



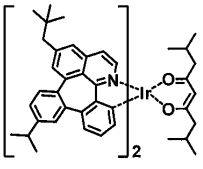
C-82



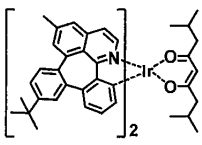
C-83



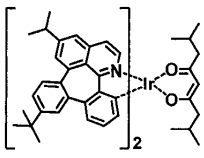
C-84



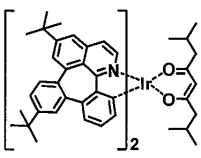
C-85



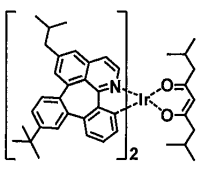
C-86



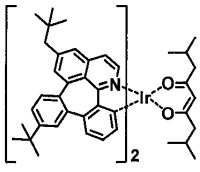
C-87



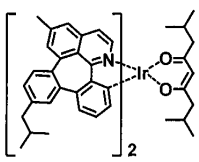
C-88



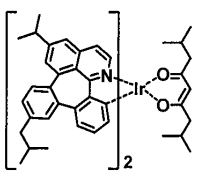
C-89



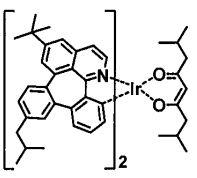
C-90



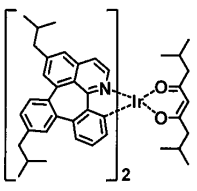
C-91



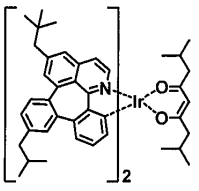
C-92



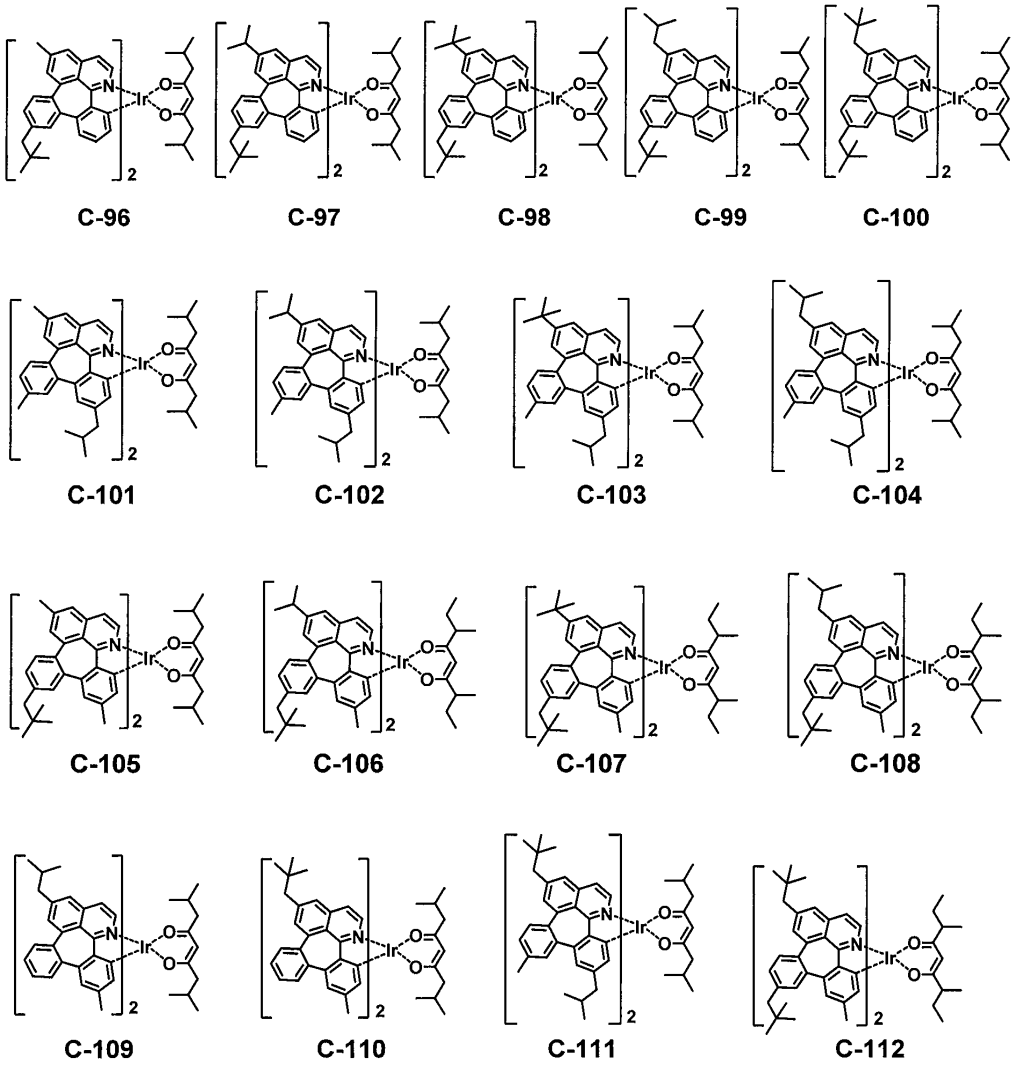
C-93



C-94



C-95



청구항 9

제1항의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 재료.

청구항 10

음극, 양극, 및 상기 음극과 상기 양극 사이에 배치된 발광층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 발광층은 제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는, 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기 술 분 야

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

배 경 기 술

[0002] 전계 발광 소자(electroluminescent device; EL device)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 다이아민과 알루미늄 착물을 이용하는 유기 전계 발광 소자를 처음으로 개발하였다[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

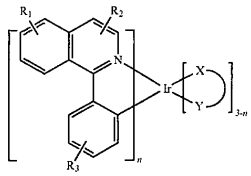
[0003] 유기 전계 발광 소자(organic electroluminescent device; OLED)는 유기 발광 재료에 전기를 가해 전기 에너지를 빛으로 바꾸는 소자로서, 통상 양극(애노드) 및 음극(캐소드)과 이들 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 유기 전계 발광 소자의 유기물층은 필요에 따라, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층,

전자 차단층, 발광층, 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층, 전자 주입층 등을 포함할 수 있다. 상기 유기물층에 사용되는 재료는 기능에 따라 정공 주입 재료, 정공 전달 재료, 정공 보조 재료, 발광 보조 재료, 전자 차단 재료, 발광 재료(호스트 및 도판트 재료 포함), 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료 등으로 나뉠 수 있다. 이러한 유기 전계 발광 소자에서는 전압 인가에 의해 양극에서 정공이, 음극에서 전자가 발광층에 주입되고, 정공과 전자의 재결합에 의해 에너지가 높은 엑시톤이 형성된다. 이 에너지에 의해 발광 유기 화합물이 여기 상태로 되며, 발광 유기 화합물의 여기 상태가 기저 상태로 돌아가면서 에너지를 빛으로 방출하여 발광하게 된다.

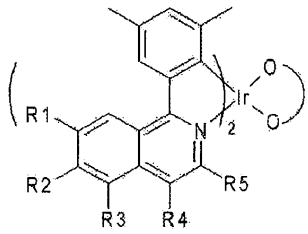
[0004] 유기 전계 발광 소자의 발광 재료는 소자의 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인으로서, 발광 재료는 양자 효율이 높고 전자와 정공의 이동도가 커야 하고, 형성된 발광 재료 층은 균일하고 안정해야 한다. 이러한 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색 또는 적색 발광 재료로 나뉘고, 추가로 황색 또는 주황색 발광 재료도 있다. 또한, 발광 재료는 기능적인 측면에서 호스트 재료와 도판트 재료로 구분될 수 있다. 일반적으로, EL 특성이 우수한 소자는 호스트에 도판트를 도핑하여 만들어진 발광층을 포함하는 구조이다.

[0005] 현재까지 이리듐(III)착물 계열이 인광 발광 재료의 도판트로 널리 알려져 있으며, 각각의 적색, 녹색 및 청색 발광별로 (비스(2-(2'-벤조티에닐)-피리디네이토-N,C-3')이리듐(아세틸아세토네이트)) [(acac)Ir(btp)$_2$], (트리스(2-페닐피리딘)이리듐) [Ir(ppy)$_3$] 및 (비스(4,6-디플루오로페닐피리디네이토-N,C2)피콜리네이토이리듐) (Firpic) 등의 재료가 알려져 있다.

[0006] 한편, 미국 특허공개공보 제2015/357588호는 하기의 화합물을 인광 발광 재료로 개시하고 있다.

[0007] 

[0008] 한국 특허공개공보 제2011-0077350호는 하기의 화합물을 적색 인광 발광 재료로 개시하고 있다.

[0009] 

[0010] 그러나, 여전히 OLED의 성능 향상을 위한 인광 발광 재료의 개발이 요구되고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0011] (특허문헌 0001) 미국 특허공개공보 제2015/0357588호 (2015. 12. 10. 공개)

(특허문헌 0002) 한국 특허공개공보 제2011-0077350호 (2011. 7. 7. 공개)

발명의 내용

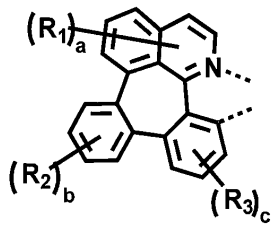
해결하려는 과제

[0012] 본 발명의 목적은, 첫째로 높은 발광 효율 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있는 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며, 둘째로 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0013] 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 리간드 L_1을 포함하고, 상기 리간드 L_1은 40 초과의 원자 번호를 가진 금속에 배위 결합되는, 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성할 수 있음을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0014] [화학식 1]

[0015] 

[0016] 상기 화학식 1에서,

[0017] R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나, 각각의 R_1 내지 R_3은 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

[0018] a는 1 내지 5의 정수이며, b는 1 내지 4의 정수이고, c 는 1 내지 3의 정수이며, a 내지 c가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R_1 내지 R_3은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

발명의 효과

[0019] 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물은 높은 발광 효율을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0020] 도 1은, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물의 대표적인 화학식이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0021] 이하에서 본원을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안 된다.

[0022] 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.

[0023] 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(호스트 재료 및 도판트 재료 포함), 전자 버퍼 재료, 정공 차단 재료, 전자 전달 재료, 전자 주입 재료 등 일 수 있다.

[0024] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은 쇄를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수는 바람직하게는 1 내지 20개, 더 바람직하게는 1 내지 10개이다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, *n*-프로필, 이소프로필, *n*-부틸, 이소부틸, *sec*-부틸, *tert*-부틸, n-펜틸, *tert*-펜틸, 네오펜틸, 이소펜틸, *sec*-펜틸 및 3-펜틸 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환의 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 N으로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 테트라히드로푸란, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 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 아릴(렌)은 스피로 구조를 가진 것을 포함한다. 상기 아릴의 예로서 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 비나프틸, 페닐나프틸, 나프틸페닐, 플루오레닐, 페닐플루오레닐, 벤조플루오레닐, 디벤조플루오레닐, 페난트레닐, 페닐페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 스피로비플루오레닐 등이 있다. 본원에서 "(3-30원) 헤테로아릴(렌)"은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함하며, 스피로 구조를 가진 것도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오페닐, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 벤조인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 나프티리디닐, 카바졸릴, 벤조카바졸릴, 디벤조카바졸릴, 페녹사진일, 페노티아진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 디하이드로아크리디닐 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로겐"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0025] 또한, 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환기)로 대체되는 것을 뜻한다. 본원 화학식들에서 치환된 알킬, 치환된 시클로알킬, 치환된 아릴, 치환된 아릴렌, 치환된 헤테로아릴, 치환된 헤테로아릴렌, 치환된 알케닐, 치환된 알키닐, 치환된 알콕시, 치환된 트리알킬실릴, 치환된 트리아릴실릴, 치환된 디알킬아릴실릴, 치환된 알킬디아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- 알킬아미노, 치환된 알킬아릴아미노, 및 치환된 모노- 또는 디- 아릴아미노의 치환기는 각각 독립적으로, 중수소; 할로겐; 시아노; 카르복실; 니트로; 히드록시; (C1-C30)알킬; 할로(C1-C30)알킬; (C2-C30)알케닐; (C2-C30)알키닐; (C1-C30)알콕시; (C1-C30)알킬티오; (C3-C30)시클로알킬; (C3-C30)시클로알케닐; (3-7원)헤테로시클로알킬; (C6-C30)아릴옥시; (C6-C30)아릴티오; 트리(C6-C30)아릴실릴, (C6-C30)아릴, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴, 및 트리(C6-C30)아릴실릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴; (C1-C30)알킬, 할로겐, 시아노, 트리(C6-C30)아릴실릴 및 (3-30원)헤테로아릴 중 하나 이상으로 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; 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 이상일 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, 상기 치환기는 중수소; (C1-C20)알킬; (C6-C25)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴; (C1-C20)알킬, (5-18원)헤테로아릴 및 트리(C6-C25)아릴실릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴; 트리(C6-C25)아릴실릴; 및 (C1-C20)알킬(C6-C25)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있다. 본원의 다른 일 양태에 따르면, 상기 치환기는 중수소; 비치환된 (C1-C10)알킬; 하나 이상의 (C6-C12)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴; (C1-C10)알킬, (5-18원)헤테로아릴 및 트리(C6-C18)아릴실릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴; 트리(C6-C18)아릴실릴; 및 (C1-C10)알킬(C6-C18)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있다. 예를 들면, 상기 치환기는 중수소; 메틸; 디페닐트리아진일 및 트리페닐실릴 중 하나 이상으로 치환 또는 비치환된 페닐; 나프틸; 비페닐; 하나 이상의 메틸로 치환된 플루오레닐; 나프틸페닐; 트리페닐레닐; 터페닐; 하나 이상의 페닐로 치환된 피리미디닐; 하나 이상의 페닐로 치환된 트리아진일; 하나 이상의 페닐로 치환 또는 비치환된 카바졸릴; 디벤조티오페닐; 및 트리페닐실릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있다.

[0026] 본원에서, 인접한 치환기와 연결되어 형성된 고리는 인접한 두 개 이상의 치환기가 연결 또는 융합되어 형성된 치환 또는 비치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 의미하고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (5-25원)의 단일환 또는 다환의 지환족, 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.

[0027] 본원에서, 헤테로아릴은 각각 독립적으로, B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다. 또한, 상기 헤테로원자는 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또

는 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, 및 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상이 결합될 수 있다.

[0028] 본원의 유기 전계 발광 화합물은, 화학식 1로 표시되는 리간드 L_1을 포함하고, 상기 리간드 L_1은 40 초과의 원자 번호를 가진 금속에 배위결합된다.

[0029] 상기 40 초과의 원자 번호를 가진 금속은, 본원의 일 양태에 따르면, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 또는 백금(Pt)일 수 있으며, 본원의 다른 일 양태에 따르면, Ir 또는 Pt일 수 있다. 예를 들면, 상기 40 초과의 원자 번호를 가진 금속은 Ir일 수 있다.

[0030] 상기 화학식 1에서, R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나, 각각의 R_1 내지 R_3은 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴일 수 있다. 본원의 다른 일 양태에 따르면, R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 중수소로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 비치환된 (C6-C25)아릴일 수 있다. 구체적으로, R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 메틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, *sec*-부틸, *tert*-부틸, n-펜틸, *tert*-펜틸, 네오펜틸, 이소펜틸, *sec*-펜틸, 3-펜틸, 및 페닐로 이루어진 그룹에서 선택될 수 있다. 예를 들면, R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 메틸, 이소프로필, 이소부틸, *tert*-부틸, 네오펜틸, 또는 페닐일 수 있다.

[0031] 상기 화학식 1에서, a는 1 내지 5의 정수이며, b는 1 내지 4의 정수이고, c 는 1 내지 3의 정수이며, a 내지 c가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R_1 내지 R_3은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, a 내지 c는 1일 수 있다.

[0032] 본원의 일 양태에 따르면, 본원의 유기 전계 발광 화합물은 하기 화학식 2로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0033] [화학식 2]

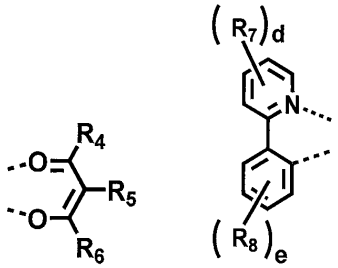
[0034] $M(L_1)x(L_2)y(L_3)z$

[0035] 상기 화학식 2에서, M은 40 초과의 원자 번호를 가진 금속이다. 본원의 일 양태에 따르면, M은 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 또는 백금(Pt)일 수 있다. 본원의 다른 일 양태에 따르면, M은 Ir 또는 Pt일 수 있다. 예를 들면, M은 Ir일 수 있다.

[0036] 상기 화학식 2에서, x는 1, 2, 또는 3이고, y는 0, 1, 또는 2이며, z는 0, 1, 또는 2이고, x, y 및 z의 합은 상기 M의 산화수이다. 본원의 일 양태에 따르면, x는 2이고, y는 1이고, z는 0일 수 있다.

[0037] 상기 화학식 2에서, L_1는 상기 화학식 1로 표시되는 리간드이며, L_2는 하기 화학식 3으로 표시되는 리간드이고, L_3는 하기 화학식 4로 표시되는 리간드이다.

[0038] [화학식 3] [화학식 4]

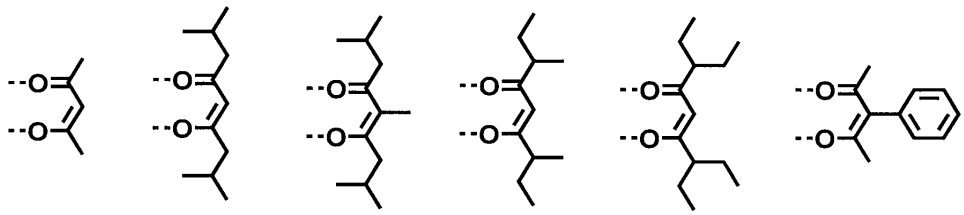


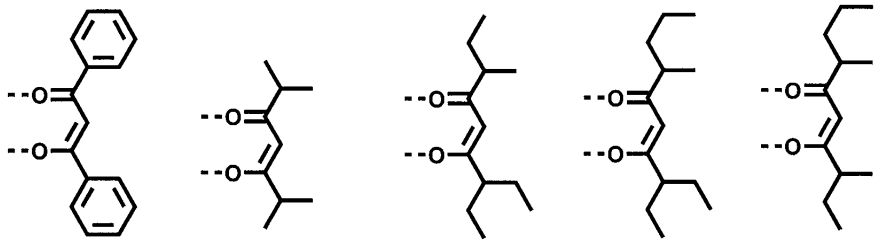
[0039]

[0040] 상기 화학식 3 및 4에서, R_4 내지 R_8은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환기와 연결되어 고리를 형성할 수 있다. 예를 들면, R_4와 R_5, R_5와 R_6, 인접한 R_7들, 및 인접한 R_8들은, 각각 독립적으로, 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다. 본원의 일 양태에 따르면, R_4 내지 R_8은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C20)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴일 수 있다. 본원의 다른 일 양태에 따르면, R_4 내지 R_8은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 중수소로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 비치환된 (C6-C25)아릴일 수 있다. 구체적으로, R_4 내지 R_8은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 메틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, *sec*-부틸, *tert*-부틸, n-펜틸, *tert*-펜틸, 네오펜틸, 이소펜틸, *sec*-펜틸, 3-펜틸, 및 페닐로 이루어진 그룹에서 선택될 수 있다. 예를 들면, R_4 내지 R_8은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 메틸, 이소프로필, *sec*-부틸, 이소부틸, *tert*-부틸, *sec*-펜틸, 3-펜틸, 네오펜틸, 또는 페닐일 수 있다. R_4 및 R_6은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며, 본원의 일 양태에 따르면, R_4 및 R_6은 서로 동일할 수 있다.

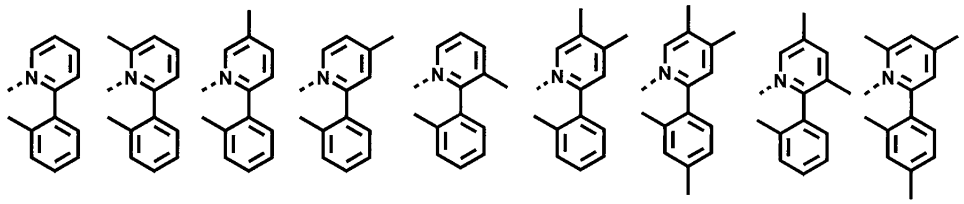
[0041] 상기 화학식 4에서, d 및 e는 1 내지 4의 정수이며, d 및 e가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R_7 및 R_8은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

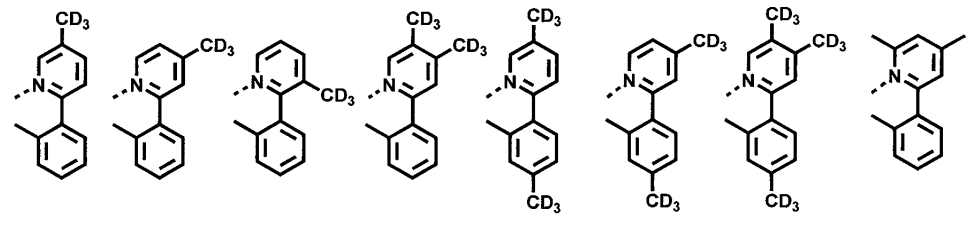
[0042] 상기 화학식 3은 하기로 이루어진 그룹에서 선택되는 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

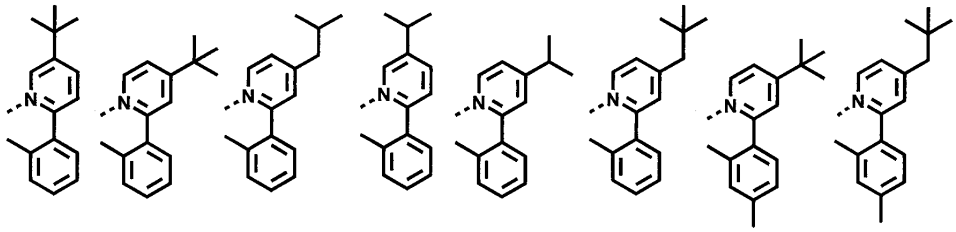
[0043] 

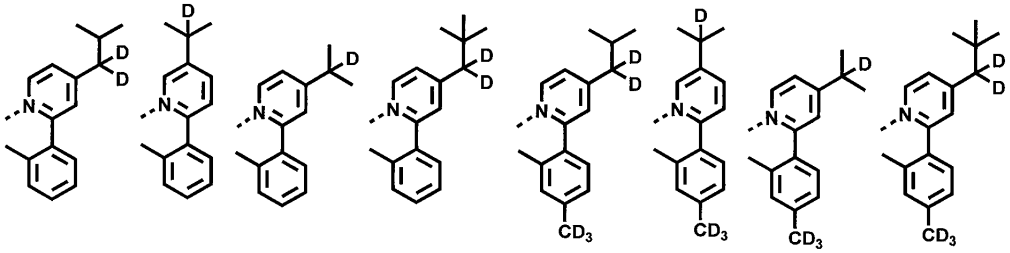
[0044] 

[0045] 상기 화학식 4는 하기로 이루어진 그룹에서 선택되는 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[0046] 

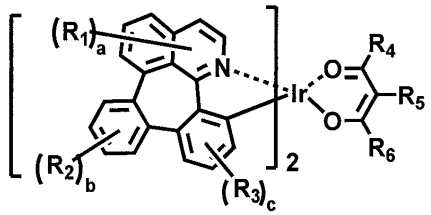
[0047] 

[0048] 

[0049] 

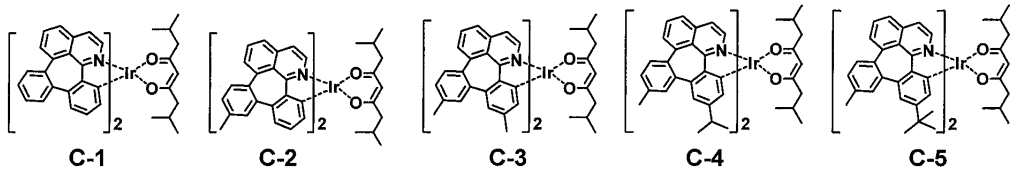
[0050] 본원의 일 양태에 따르면, 본원의 유기 전계 발광 화합물은 하기 화학식 5로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

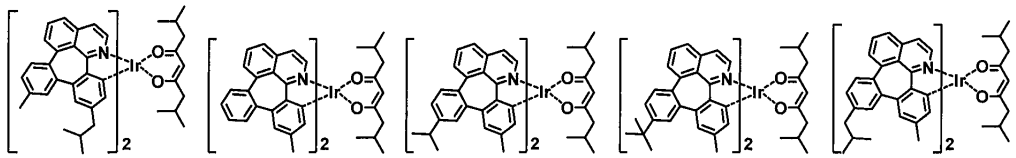
[0051] [화학식 5]

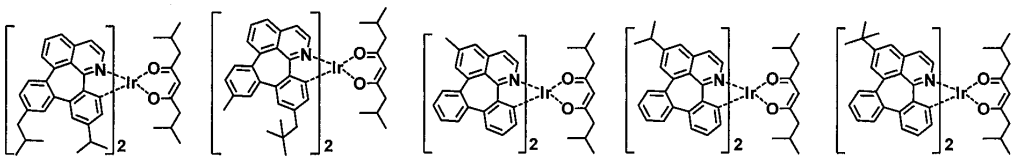
[0052] 

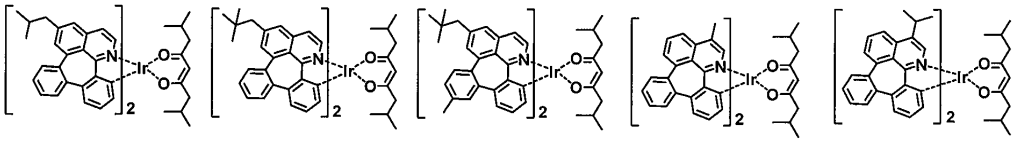
[0053] 상기 화학식 5에서, R_4 내지 R_6은 상기 화학식 3에서 정의된 바와 같고, R_1 내지 R_3, 및 a 내지 c는 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다. 본원의 일 양태에 따르면, R_1 내지 R_6은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 중수소로 치환 또는 비치환된 수소, 중수소, 중수소로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이다. 본원의 다른 일 양태에 따르면, R_1 내지 R_6은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, *sec*-부틸, *tert*-부틸, n-펜틸, *tert*-펜틸, 네오펜틸, 이소펜틸, *sec*-펜틸 3-펜틸, 및 페닐로 이루어진 그룹에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

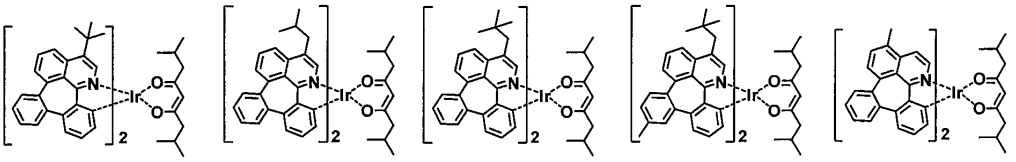
[0054] 본원의 유기 전계 발광 화합물은 하기 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

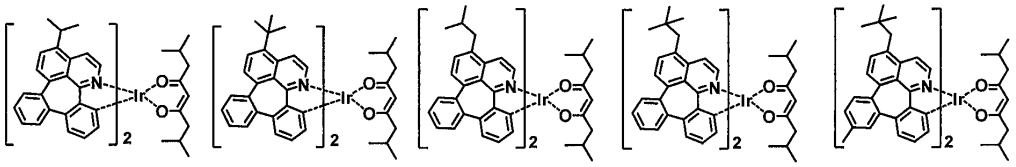
[0055] 
C-1 C-2 C-3 C-4 C-5

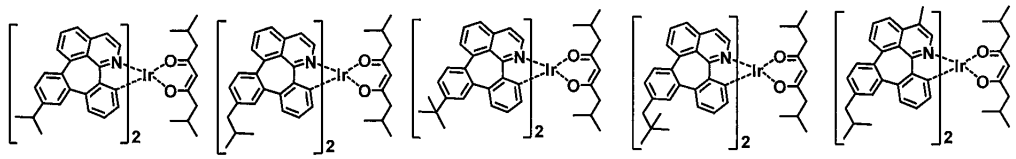
[0056] 
C-6 C-7 C-8 C-9 C-10

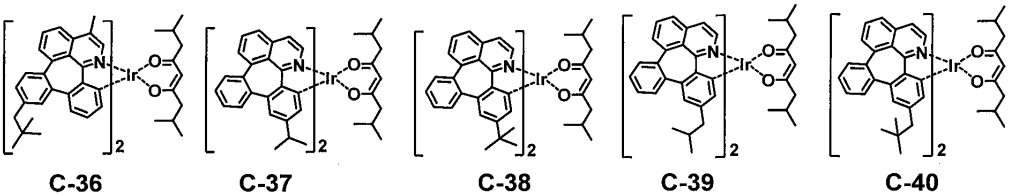
[0057] 
C-11 C-12 C-13 C-14 C-15

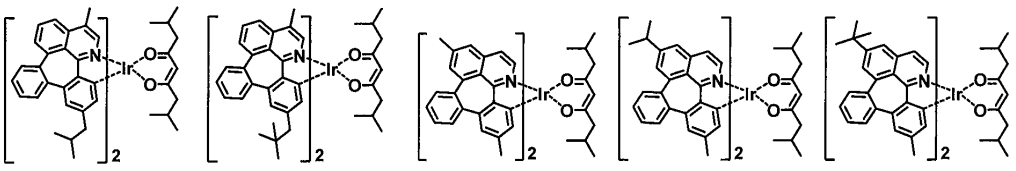
[0058] 
C-16 C-17 C-18 C-19 C-20

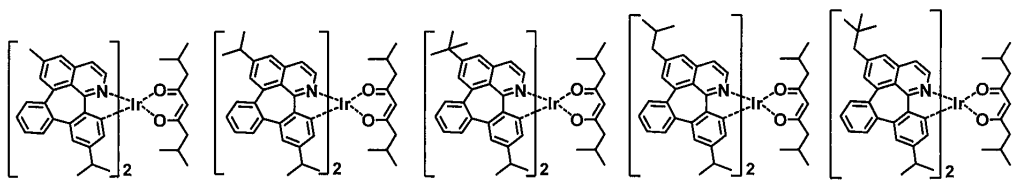
[0059] 
C-21 C-22 C-23 C-24 C-25

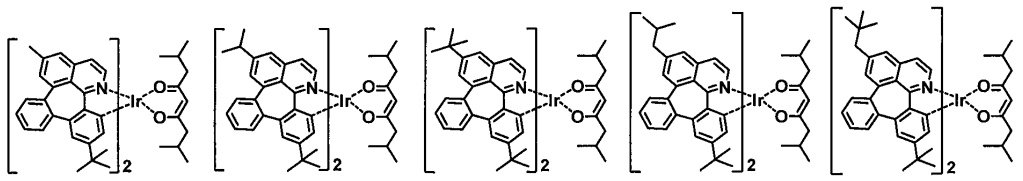
[0060] 
C-26 C-27 C-28 C-29 C-30

[0061] 
C-31 C-32 C-33 C-34 C-35

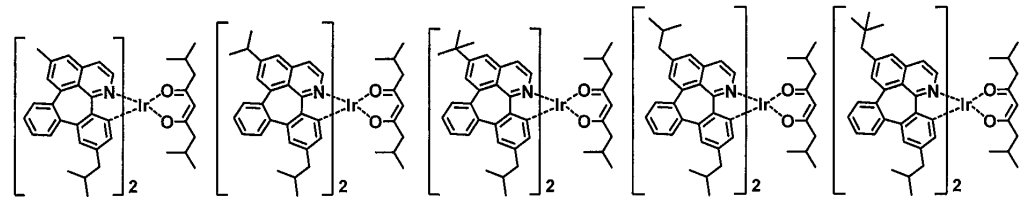
[0062] 
C-36 C-37 C-38 C-39 C-40

[0063] 
C-41 C-42 C-43 C-44 C-45

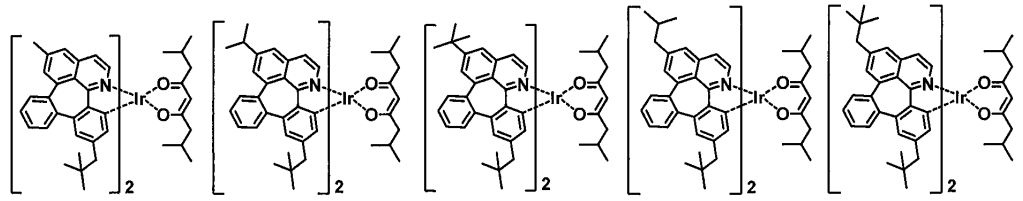
[0064] 
C-46 C-47 C-48 C-49 C-50

[0065] 

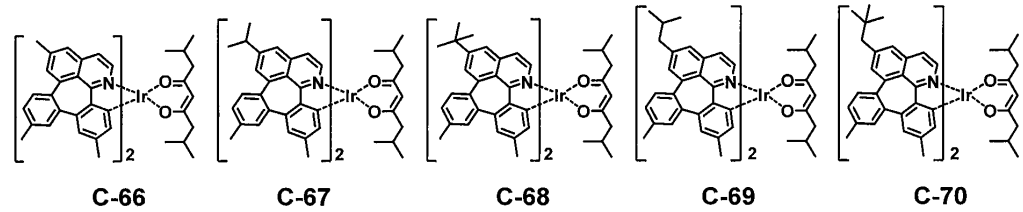
C-51 C-52 C-53 C-54 C-55

[0066] 

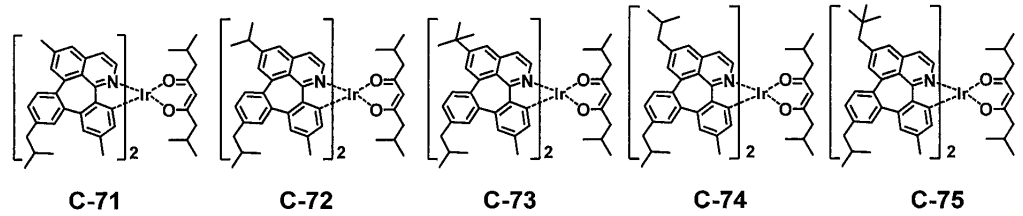
C-56 C-57 C-58 C-59 C-60

[0067] 

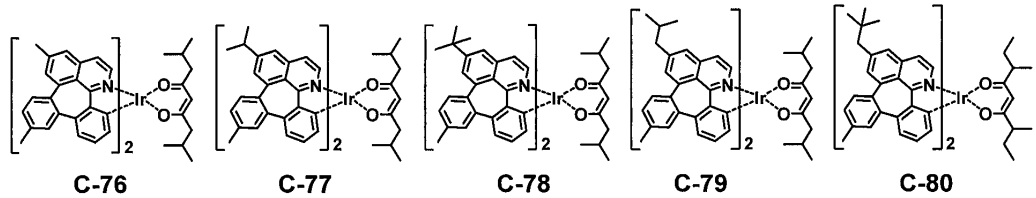
C-61 C-62 C-63 C-64 C-65

[0068] 

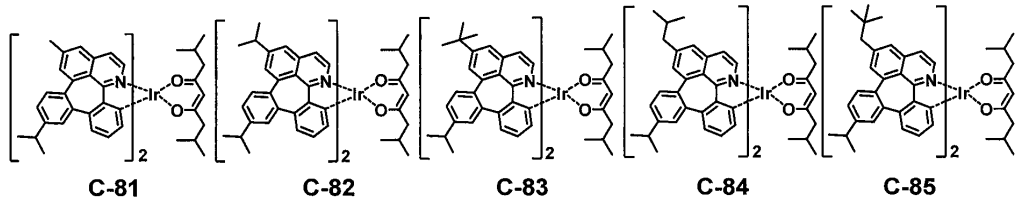
C-66 C-67 C-68 C-69 C-70

[0069] 

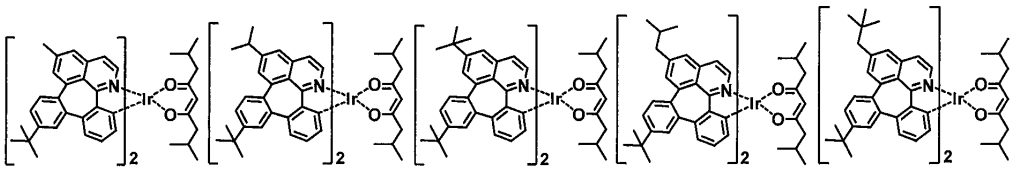
C-71 C-72 C-73 C-74 C-75

[0070] 

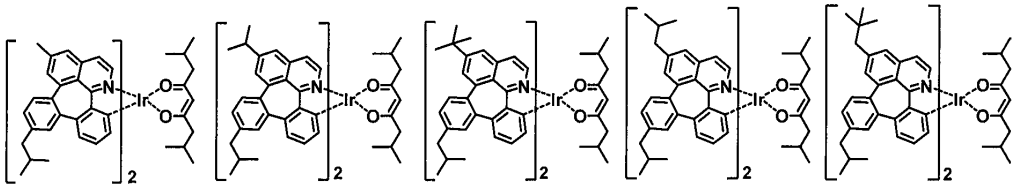
C-76 C-77 C-78 C-79 C-80

[0071] 

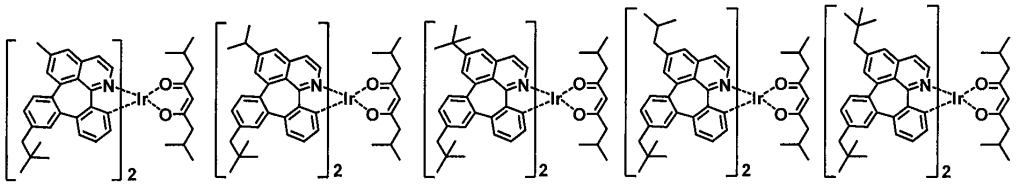
C-81 C-82 C-83 C-84 C-85

[0072] 

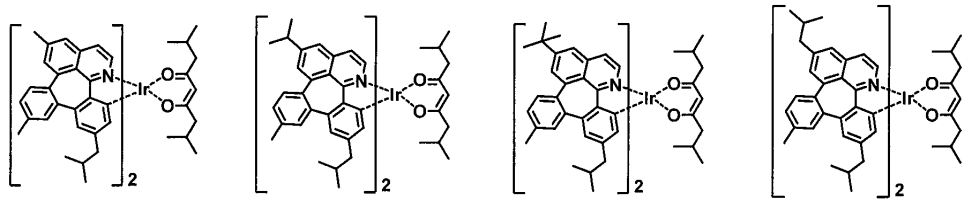
C-86 C-87 C-88 C-89 C-90

[0073] 

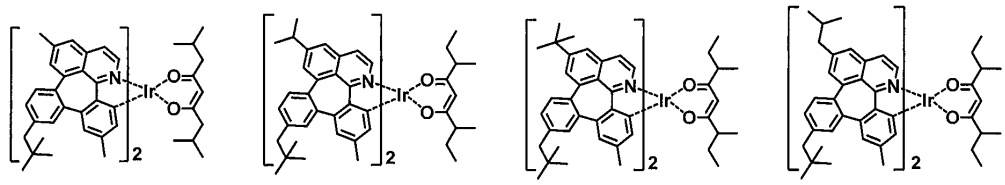
C-91 C-92 C-93 C-94 C-95

[0074] 

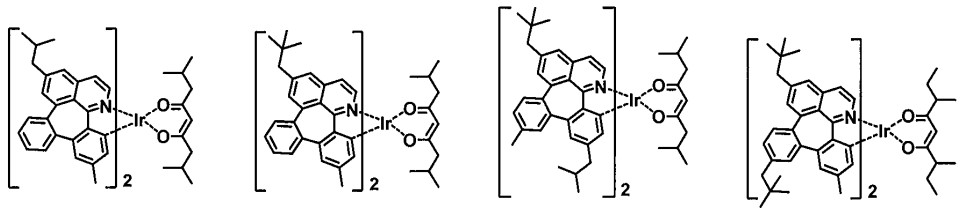
C-96 C-97 C-98 C-99 C-100

[0075] 

C-101 C-102 C-103 C-104

[0076] 

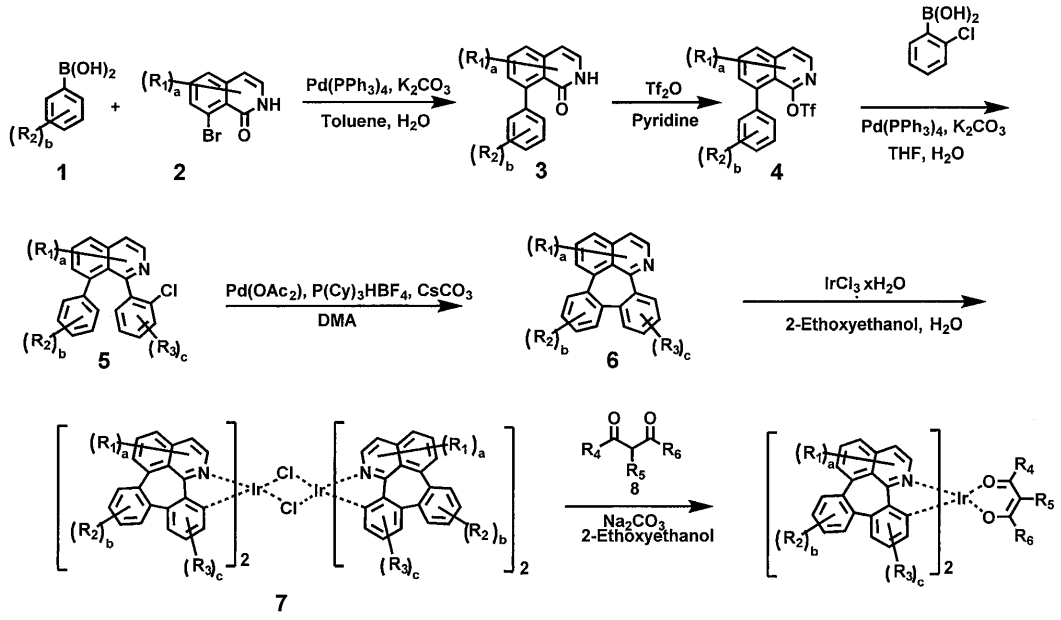
C-105 C-106 C-107 C-108

[0077] 

C-109 C-110 C-111 C-112

[0078] 본원의 유기 전계 발광 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있다. 예를 들면, 본원의 유기 전계 발광 화합물은 하기 반응식 1에 나타난 바와 같이 합성될 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0079] [반응식 1]

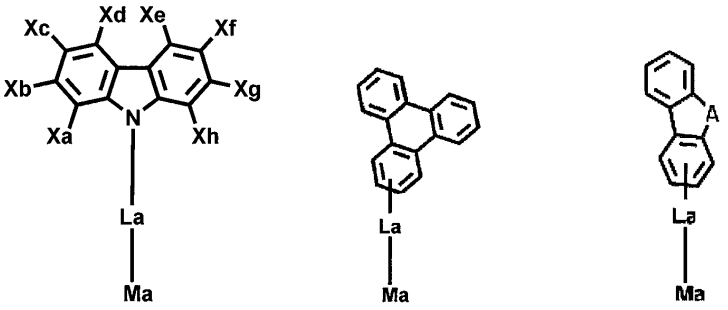


[0080]

[0081] 상기 반응식 1에서, R_1 내지 R_6 및 a 내지 c는 화학식 1 및 3에서 정의된 바와 같다.

[0082] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물과 함께 조합되어 사용할 수 있는 호스트 화합물로는 하기 화학식 11 내지 13 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0083] [화학식 11] [화학식 12] [화학식 13]



[0084]

[0085] 상기 화학식 11 내지 13에서,

[0086] Ma는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (6-30원)헤테로아릴이고;

[0087] La는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (6-30원)헤테로아릴렌이고;

[0088] A는 S, O, NR_9 또는 $CR_{10}R_{11}$이고;

[0089] Xa 내지 Xh는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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 치환기와 연결되어 고리를 형성할 수 있으며,

[0090] R_9 내지 R_{11}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 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; R_9 및 R_{10}는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고,

[0091] 상기 화학식 11 내지 13에서, La는 바람직하게 단일 결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (6-25원)헤테로아릴렌일 수 있고; 더 바람직하게는, 단일 결합, 비치환된 (C6-C18)아릴렌, 또는 페닐, 비페닐 및/또는 카바졸릴으로 치환 또는 비치환된 (6-20원)헤테로아릴렌일 수 있다. 예를 들면, La는 단일 결합; 비치환된 페닐렌; 비치환된 나프틸렌; 비치환된 비페닐렌; 페닐로 치환 또는 비치환된 피리디닐렌; 페닐, 비페닐 및/또는 카바졸릴로 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌; 페닐, 비페닐 및/또는 카바졸릴로 치환 또는 비치환된 트리아진일렌; 비치환된 퀴놀리닐렌; 페닐로 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐렌; 비치환된 퀴녹살리닐렌; 비치환된 카바졸릴렌; 비치환된 디벤조티오페닐렌; 비치환된 벤조푸로피리미디닐렌; 비치환된 벤조티에노피리미디닐렌; 비치환된 벤조퀴나졸리닐렌; 또는 비치환된 질소 및/또는 황 함유 20원 헤테로아릴렌일 수 있다.

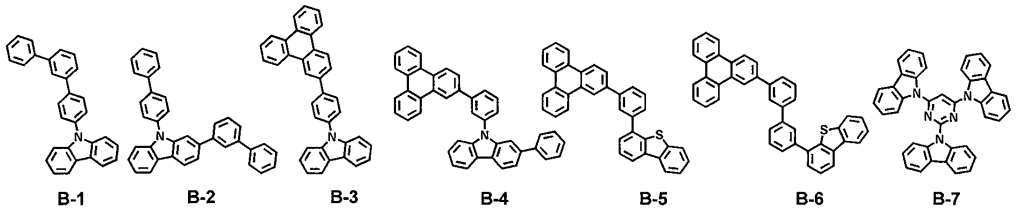
[0092] 상기 화학식 11 내지 13에서, Ma는 바람직하게 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (6-25원)헤테로아릴일 수 있고, 더욱 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (6-20원)헤테로아릴일 수 있다. 예를 들면, Ma는 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸페닐, 비치환된 나프틸, 비치환된 비페닐, 하나 이상의 메틸로 치환된 플루오레닐, 비치환된 터페닐, 비치환된 트리페닐레닐, 치환된 피리미디닐, 치환된 트리아진일, 치환된 퀴녹살리닐, 치환된 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 카바졸릴, 비치환된 디벤조티오페닐, 페닐로 치환된 벤조푸로피리미디닐, 페닐로 치환된 벤조티에노피리미디닐, 페닐로 치환된 벤조퀴나졸리닐, 또는 하나 이상의 페닐로 치환된 인돌로카바졸릴일 수 있다. 여기서, 상기 치환된 페닐의 치환체는 페닐로 치환 또는 비치환된 카바졸릴, 하나 이상의 페닐로 치환된 피리미디닐, 트리페닐실릴, 디벤조티오페닐, 디메틸플루오레닐 및 트리페닐레닐로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있고; 상기 치환된 피리미디닐의 치환체는 페닐, 비페닐 및 터페닐로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있고; 상기 치환된 트리아진일의 치환체는 트리페닐실릴로 치환 또는 비치환된 페닐, 비페닐, 나프틸 및 터페닐로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있고; 상기 치환된 퀴녹살리닐의 치환체는 페닐, 나프틸, 비페닐 및 나프틸페닐로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있고; 상기 치환된 퀴나졸리닐의 치환체는 페닐 및 비페닐로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있고; 상기 치환된 카바졸릴의 치환체는 디페닐트리아진일로 치환 또는 비치환된 페닐, 비페닐, 나프틸 및 터페닐로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있다.

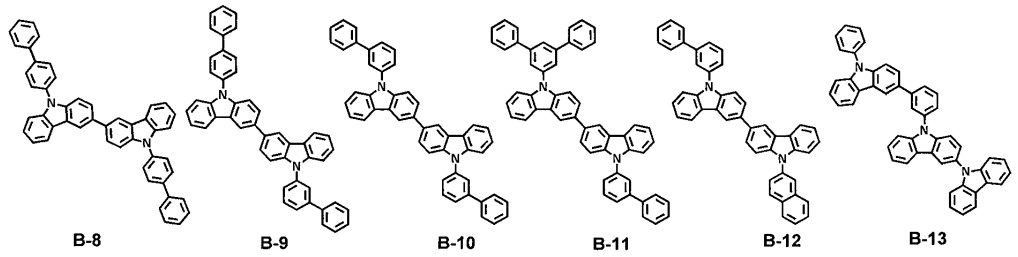
[0093] 상기 화학식 11에서, Xa 내지 Xh는 바람직하게 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (6-20원)헤테로아릴이거나; 인접한 치환기와 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C6-C20) 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있고, 상기 형성된 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소, 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고; 더 바람직하게는, 각각 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 (C6-C15)아릴, 또는 (C6-C18)아릴로 치환 또는 비치환된 (10-20원)헤테로아릴이거나, 인접한 치환기끼리 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 벤젠 고리, 치환 또는 비치환된 인돌 고리, 치환 또는 비치환된 벤조인돌 고리, 치환 또는 비치환된 인덴 고리, 치환 또는 비치환된 벤조푸란 고리, 또는 치환 또는 비치환된 벤조티오펜 고리를 형성할 수 있다. 예를 들면, Xa 내지 Xh는 각각 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 페닐, 비치환된 비페닐, 치환 또는 비치환된 카바졸릴, 비치환된 디벤조푸란일, 또는 비치환된 디벤조티오페닐이거나, 인접한 치환기끼리 서로 연결되어, 비치환된 벤젠 고리, 치환된 인덴 고리, 치환된 인돌 고리, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜 고리, 비치환된 벤조푸란 고리, 또는 치환된 벤조인돌 고리를 형성할 수 있다. 여기서, 상기 치환된 페닐의 치환체는 페닐로 치환 또는 비치환된 카바졸릴, 및 디벤조티오페닐로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있고; 상기 치환된 카바졸릴의 치환체는 페닐, 비페닐, 나프틸 및 터페닐로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있고; 상기 치환된 인덴 고리의 치환체는 메틸 및 페닐로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있고; 상기 치환된 인돌 고리의 치환체는 페닐, 나프틸 및 비페닐로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있고; 상기 벤조티오펜 고리의 치환체는 하나 이상의 페닐로 치환된 트리아진일일 수 있고; 상기 치환된 벤조인돌 고리의 치환체는 페닐 및 나프틸로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있다.

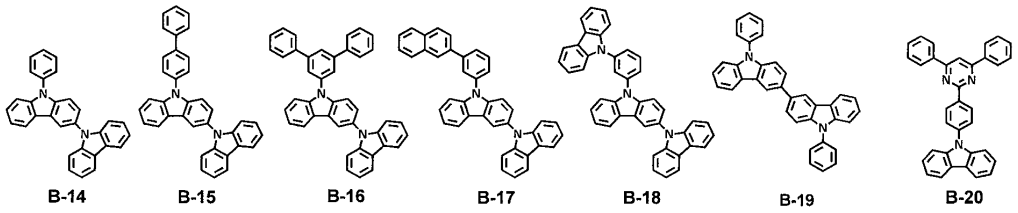
[0094] 상기 화학식 13에서, A는 바람직하게 S 또는 $CR_{12}R_{13}$이다. 여기서, R_{12} 및 R_{13}은 바람직하게는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴이거나, 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C25)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있고, 더욱 바

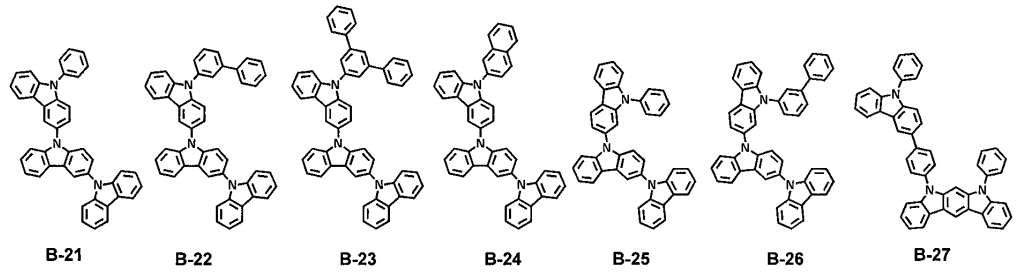
람직하게는 각각 독립적으로 비치환된 (C6-C18)아릴이거나, 서로 연결되어 비치환된 (C3-C18)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족, 또는 이들의 조합의 고리를 형성할 수 있고, 예를 들면, 각각 독립적으로 페닐이거나, 서로 연결되어 스피로 구조의 플루오렌 고리를 형성할 수 있다.

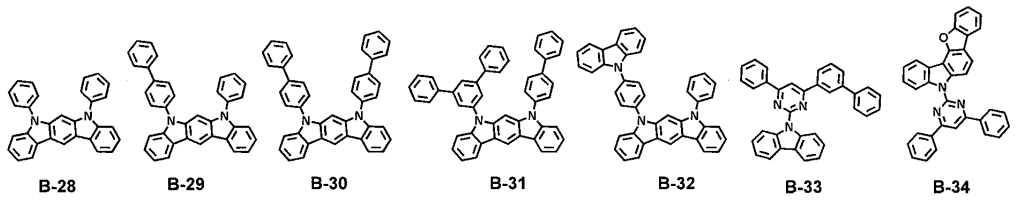
[0095] 상기 화학식 11 내지 13 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

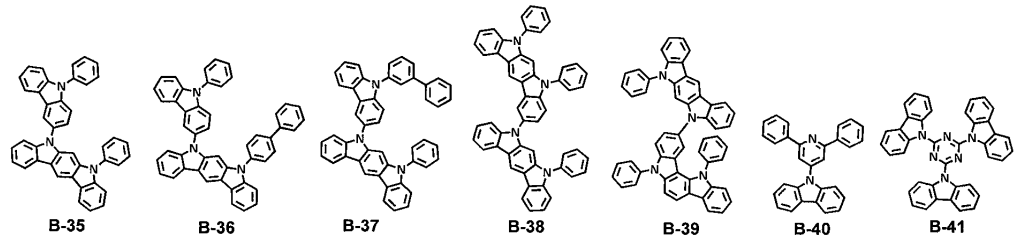
[0096] 

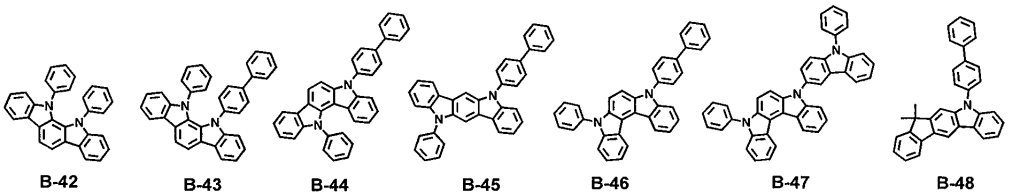
[0097] 

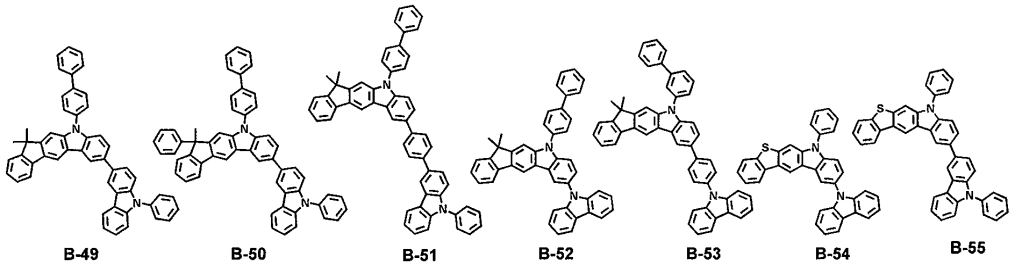
[0098] 

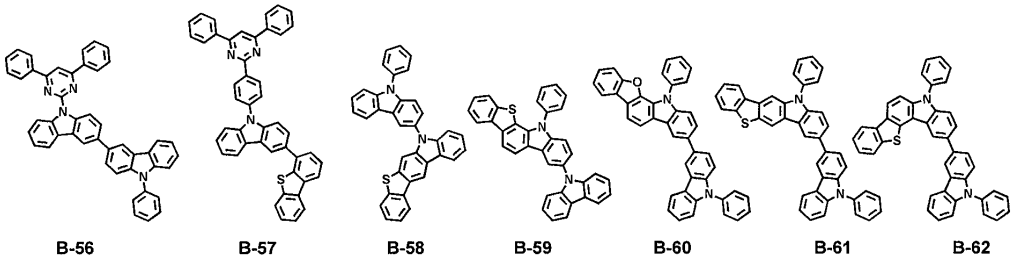
[0099] 

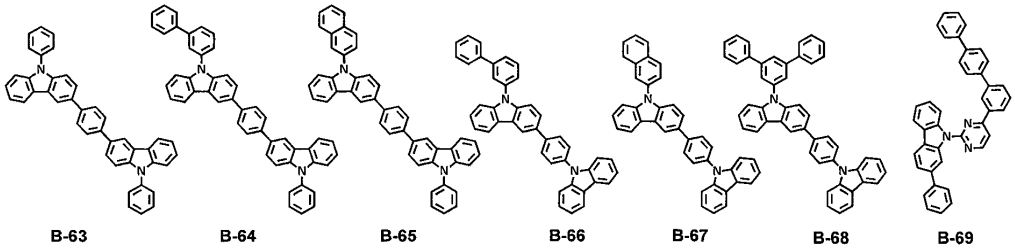
[0100] 

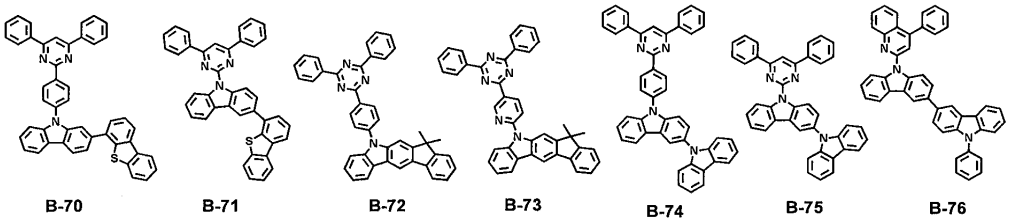
[0101] 

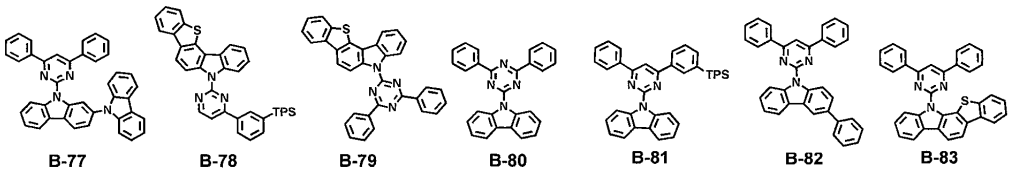
[0102] 

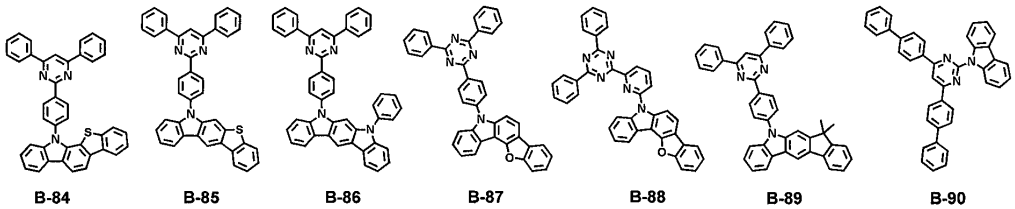
[0103] 

[0104] 

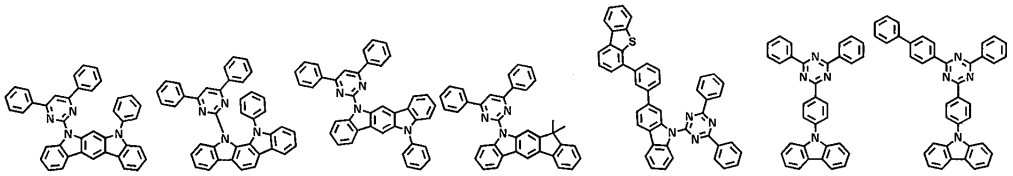
[0105] 

[0106] 

[0107] 

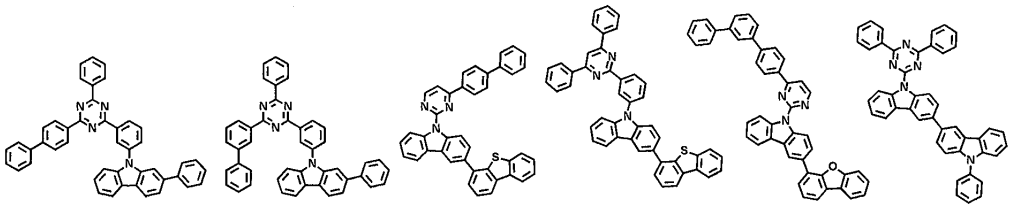
[0108] 

[0109]



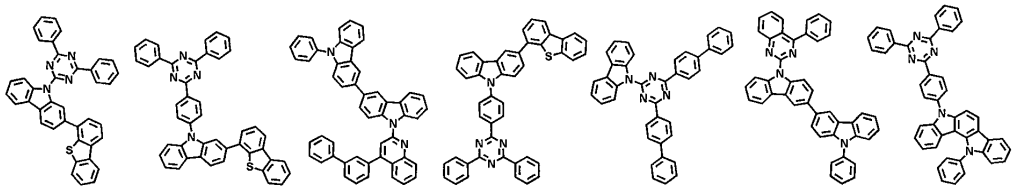
B-91 B-92 B-93 B-94 B-95 B-96 B-97

[0110]



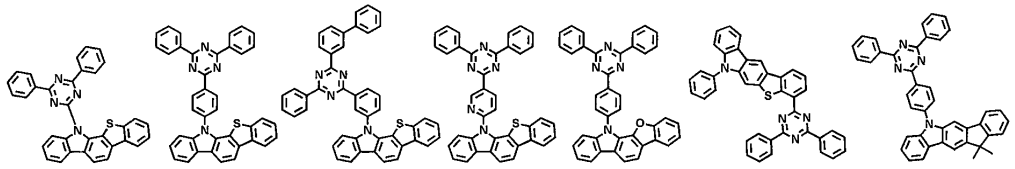
B-98 B-99 B-100 B-101 B-102 B-103

[0111]



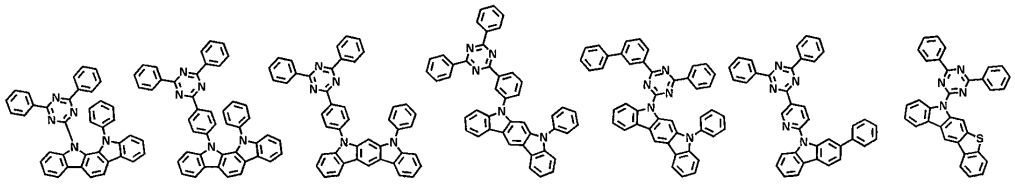
B-104 B-105 B-106 B-107 B-108 B-109 B-110

[0112]



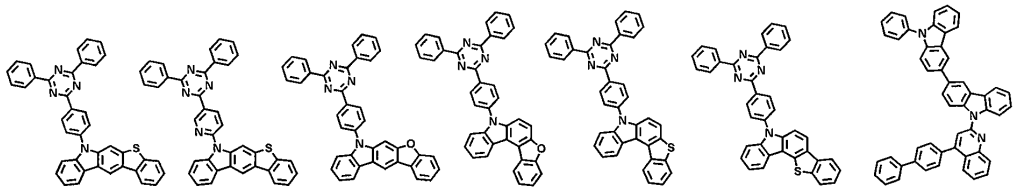
B-111 B-112 B-113 B-114 B-115 B-116 B-117

[0113]



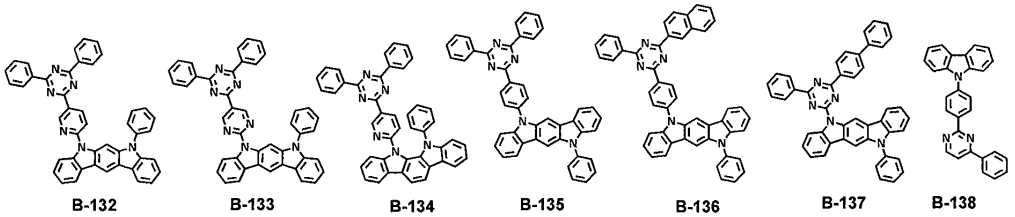
B-118 B-119 B-120 B-121 B-122 B-123 B-124

[0114]



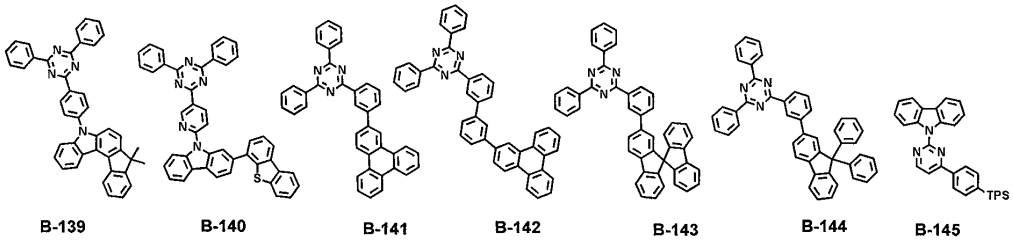
B-125 B-126 B-127 B-128 B-129 B-130 B-131

[0115]

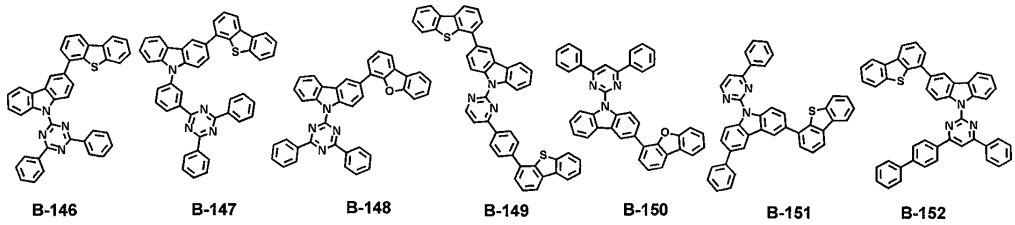


B-132 B-133 B-134 B-135 B-136 B-137 B-138

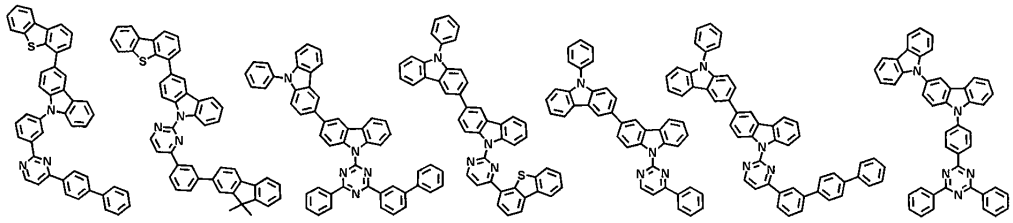
[0116]



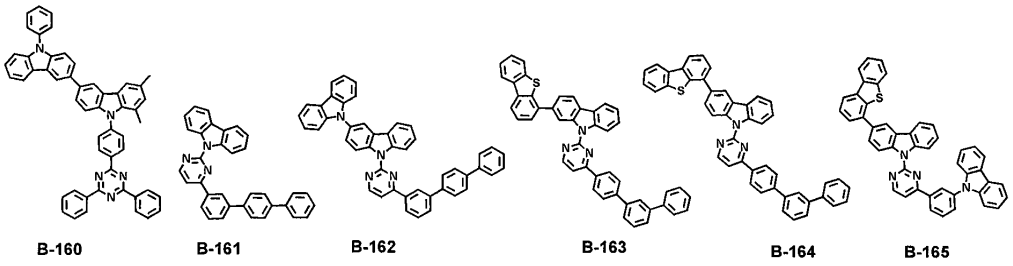
[0117]



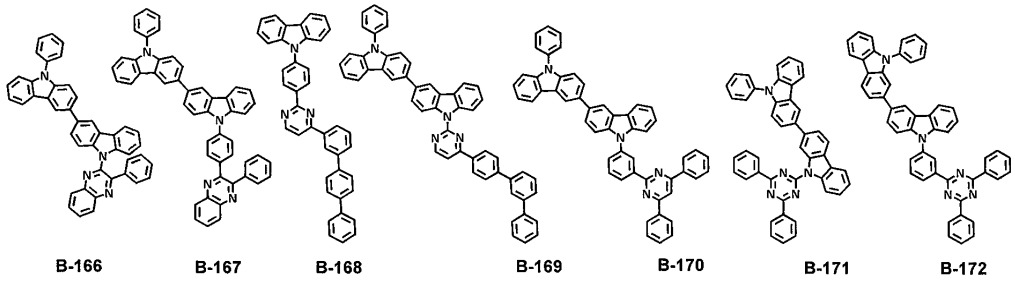
[0118]



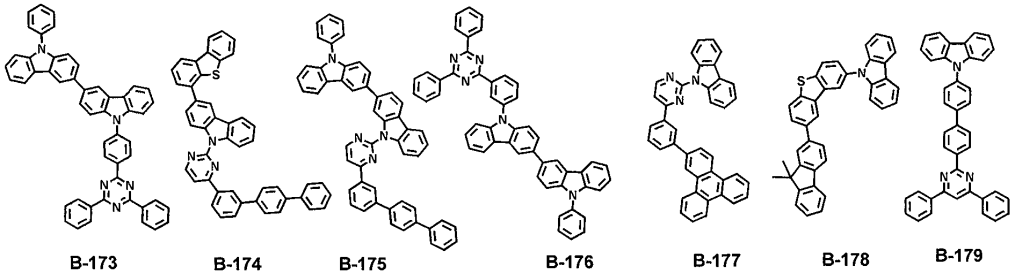
[0119]



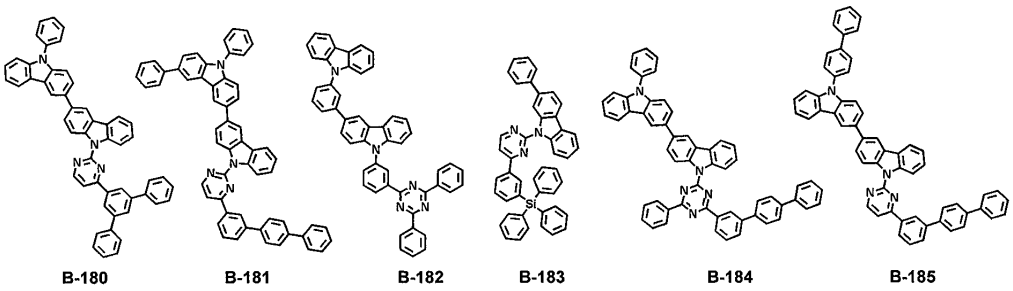
[0120]



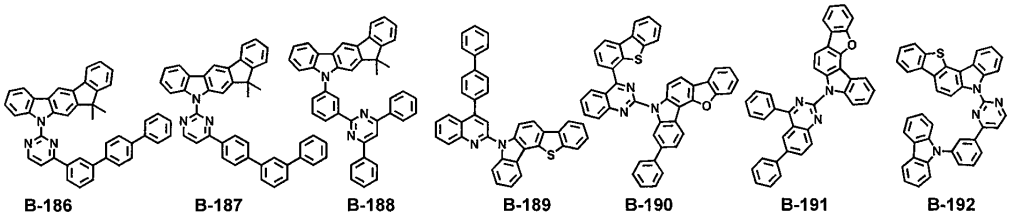
[0121]



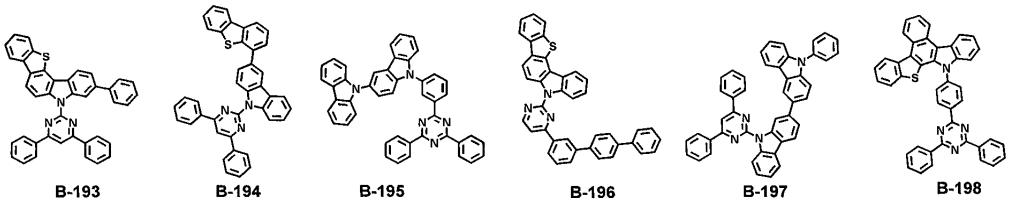
[0122]



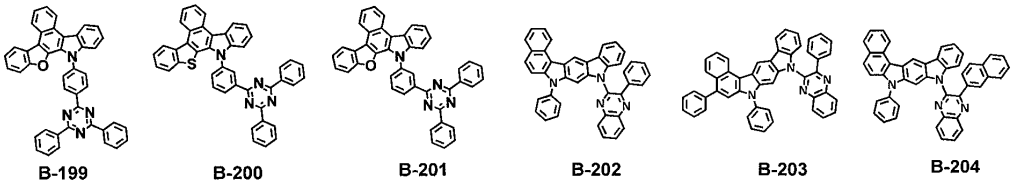
[0123]



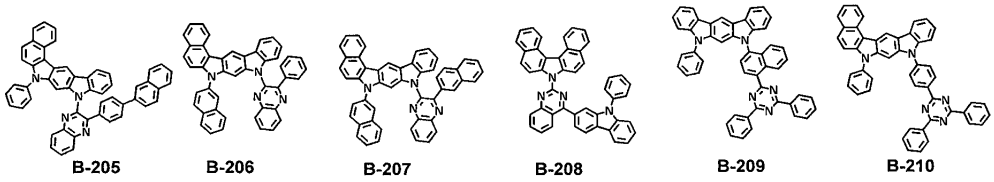
[0124]



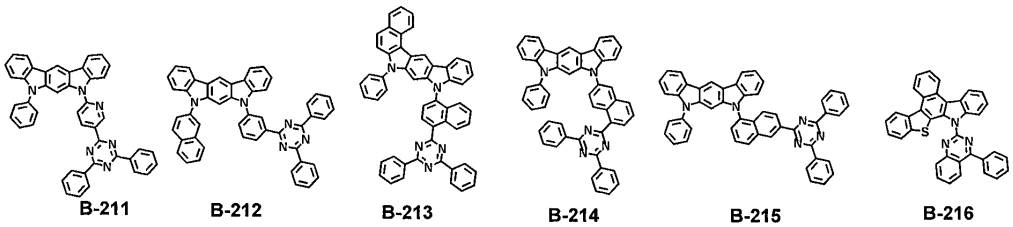
[0125]



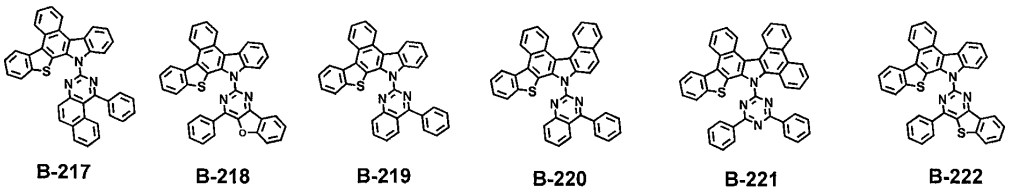
[0126]



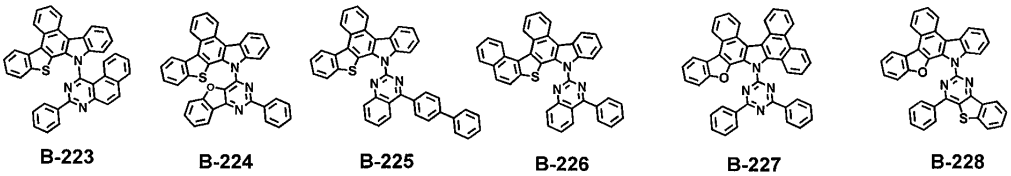
[0127]



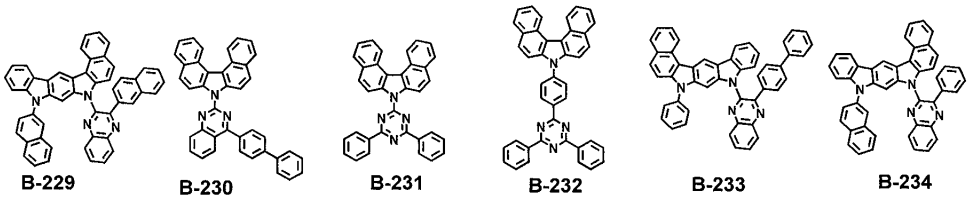
[0128]



[0129]



[0130]



[0131] 본원의 화학식 11 내지 13 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0132] 본원의 유기 전계 발광 소자는 양극, 음극, 및 상기 음극과 상기 양극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함한다. 상기 유기물층은 1층 이상의 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.

[0133] 상기 발광층은 발광이 이루어지는 층으로서, 단일층일 수 있거나, 또는 2개 이상의 층이 적층된 복수의 층일 수 있다. 상기 발광층의 호스트 화합물에 대한 도판트 화합물의 도핑농도는 20중량% 미만인 것이 바람직하다.

[0134] 상기 발광 보조층은 애노드와 발광층 사이에 위치하거나, 캐소드와 발광층 사이에 위치하는 층으로서, 발광 보조층이 상기 애노드와 발광층 사이에 위치할 경우, 정공의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 전자의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있고, 발광 보조층이 캐소드와 발광층 사이에 위치할 경우, 전자의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 정공의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있다. 또한, 상기 정공 보조층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 정공의 전달 속도(또는 주입 속도)를 원활하게 하거나 블록킹하는 효과를 나타낼 수 있으며, 이에 따라 전하 밸런스(charge balance)를 조절할 수 있다. 또한, 상기 전자 차단층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 발광층으로부터의 전자의 오버플로우를 차단하여 엑시톤을 발광층 내에 가두어 발광 누수를 방지할 수 있다. 유기 전계 발광 소자가 정공 전달층을 2 층 이상 포함할 경우, 추가로 포함되는 정공 전달층은 정공 보조층 또는 전자 차단층의 용도로 사용될 수 있다. 상기 발광 보조층, 상기 정공 보조층, 또는 상기 전자 차단층은 유기 전계 발광 소자의 효율 및/또는 수명의 개선 효과를 가질 수 있다.

[0135] 본원의 일 양태에 따르면, 상기 화학식 1을 갖는 리간드 L_1을 포함하는 1종 이상의 화합물, 및 상기 화학식 11 내지 13 중 어느 하나로 표시되는 1종 이상의 화합물의 조합을 함유하는 유기물층을 제공한다. 상기 유기물층은 단수 또는 복수의 층일 수 있으며, 상기 화학식 1을 갖는 리간드 L_1을 포함하는 화합물과 상기 화학식 11 내지 13 중 어느 하나로 표시되는 화합물은 동일한 층에 포함될 수도 있고, 각각 서로 다른 층에 포함될 수도 있다. 또한, 본원은 상기 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0136] 본원의 다른 양태에 따르면, 본원은 상기 화학식 1을 갖는 리간드 L_1을 포함하는 1종 이상의 도판트 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0137] 본원은 추가의 양태에 따르면, 상기 화학식 1을 갖는 리간드 L_1을 포함하는 로 표시되는 1종 이상의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료, 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다. 상기 재료는 화학식 1을 갖는 리간드 L_1을 포함하는 화합물만으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0138] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자는 상기 화학식 1을 갖는 리간드 L_1을 포함하는 화합물을 포함하고, 이와 동시에 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 추가로 포함할 수 있다.

[0139] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층은 상기 화학식 1을 갖는 리간드 L_1을 포함하는 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란탄계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속, 또는 이러한 금속을 포함하는 하나 이상의 착체 화합물을 더 포함할 수도 있고, 나아가 상기 유기물층은 발광층 및 전하 생성층을 더 포함할 수 있다.

[0140] 또한, 본원의 상기 유기 전계 발광 소자는 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.

[0141] 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 하나 이상의 층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 음극 표면에 할로겐화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 유기 전계 발광 소자의 구동의 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 $SiO_X(1\leq X\leq 2)$, $AlO_X(1\leq X\leq 1.5)$, SiON 또는 SiAlON 등이 있고, 할로겐화 금속의 바람직한 예로는 LiF, MgF_2, CaF_2, 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O, Li_2O, MgO, SrO, BaO, CaO 등이 있다.

[0142] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도판트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하 생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진, 백색 발광을 하는 유기 전계 발광소자를 제조할 수 있다.

[0143] 본원의 유기 전계 발광 소자의 각 층의 형성은 진공 증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온 플레이팅 등의 건식 성막법이나, 잉크 젯 프린팅(ink jet printing), 노즐 프린팅(nozzle printing), 슬롯 코팅(slot coating), 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다. 본원의 도판트 화합물과 호스트 화합물을 성막할 때, 공증착 또는 혼합증착으로 공정한다.

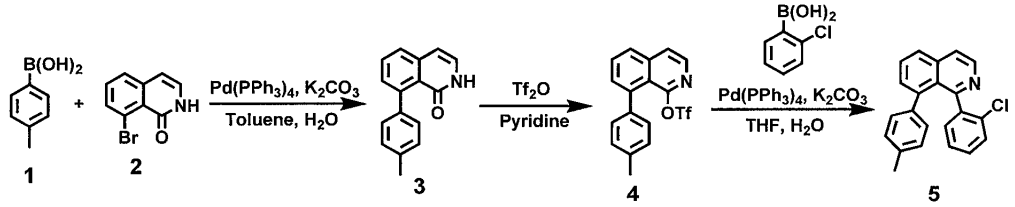
[0144] 습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로푸란, 디옥산 등의 적절한 용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 각 층을 형성하는 재료가 용해 또는 분산될 수 있고, 성막성에 문제가 없는 것이라면 어느 것이어도 된다.

[0145] 상기 공증착이란 두가지 이상의 이성질체 재료를 각각의 개별 도가니 소스에 넣고, 두 셀을 동시에 전류를 인가하여 재료를 증발시켜 혼합 증착하는 방식이고, 상기 혼합증착이란 증착 전 두가지 이상의 이성질체 재료를 하나의 도가니 소스에 혼합한 후, 하나의 셀에 전류를 인가하여 재료를 증발시켜 혼합 증착하는 방식이다.

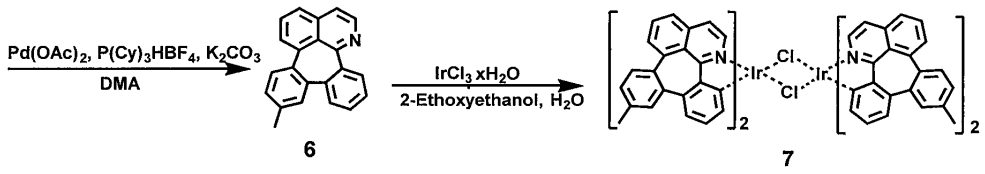
[0146] 또한, 본원 발명의 유기 전계 발광 소자를 이용하여 표시 장치 또는 조명 장치를 제조하는 것이 가능하다.

[0147] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본원에 따른 화합물의 합성 방법을 나타내었다. 그러나, 본 발명은 하기의 예들에 한정되는 것은 아니다.

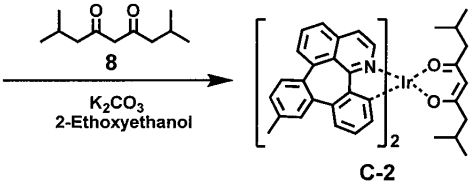
[0148] **[합성 실시예 1] 화합물 C-2의 제조**

[0149] 

[0150]



[0151]



[0152] 화합물 3의 합성

[0153] 화합물 **1** (60 g, 267 mmol), 화합물 **2** (65 g, 242 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (16 g, 13 mmol), K_2CO_3 (56 g, 669 mmol), 톨루엔 (1.3 L, 0.2 M), 및 H_2O (330 mL, 2 M)를 넣고, 130℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 EA로 추출하고 $MgSO_4$로 수분을 제거 후, 감압증류하였다. 이 후, EA/Hx = 1/1로 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **3** (46 g, 73%)을 얻었다.

[0154] 화합물 4의 합성

[0155] 화합물 **3** (46 g, 196 mmol) 및 피리딘 (402 mL, 0.5 M)를 가하고, 0℃로 냉각한 후 Tf_2O (69 g, 245 mmol)을 천천히 가하였다. 반응 혼합물을 12시간 동안 교반한 후 물(500 mL)에 가하여 고체를 만들고 $CHCl_3$로 녹이고 추출하여 물을 제거한다. MC/Hx=1/1으로 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **4** (64 g, 88%)을 얻었다.

[0156] 화합물 5의 합성

[0157] 화합물 **4** (64 g, 172 mmol), 2-클로로페닐보론산 (55 g, 225 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (10 g, 8.6 mmol), K_2CO_3 (36 g, 432 mmol), 톨루엔 (866 mL, 0.2 M), 및 H_2O (216 mL, 2 M)를 넣고, 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 EA로 추출하고 $MgSO_4$로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 이 후, MC/Hx = 1/1로 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **5** (33 g, 57%)을 얻었다.

[0158] 화합물 6의 합성

[0159] 화합물 **5** (33 g, 98 mmol), K_2CO_3 (98 g, 254 mmol), $Pd(OAC)_2$ (4.4 g, 196 mmol), $P(Cy)_3HBF_4$ (11 g, 29 mmol), 및 DMA (492 mL, 0.2 M)를 넣고, 195℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 EA로 추출하고 $MgSO_4$로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 이 후, MC/Hx = 1/1로 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **6** (13 g, 43%)을 얻었다.

[0160] 화합물 7의 합성

[0161] 화합물 **6** (9.8 g, 33 mmol), $IrCl_3 \cdot xH_2O$ (4.5 g, 30 mmol), 2-에톡시에탄올 (116 mL), 및 H_2O(39 mL)을 140℃에서 24시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 식히고 물, MeOH로 씻은후 건조하여 화합물 **7** (10.1 g, 80%)를 얻었다.

[0162] 화합물 C-2의 합성

[0163] 질소하에서 화합물 **7** (10.1 g, 6.2 mmol), 화합물 **8** (12 g, 62 mmol), K_2CO_3 (8.6 g, 62 mmol) 및 2-에톡시에탄올 (78 mL, 0.08 M)을 250 mL RBF에 넣고 실온에서 1일 동안 교반하였다. 반응 후 200 mL의 물을 가하고 30분간 교반한 후 필터하였다. 필터 후 얻은 반응 혼합물을 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 **C-2** (4.4 g, 74%)를 얻었다.

[0164] 이상과 같이 제조된 화합물 C-2의 물성은 다음과 같다. 하기 표에서, 화합물 C-2의 PL 값은 메틸렌클로라이드(MC) 중에서 측정한 것이다.

[0165] ^{1}H NMR (600 MHz,CDCl3,δ):8.24(d, J=6 Hz, 2H), 7.78(dd, J=1.2 Hz, 2H), 7.73-7.69(m, 4H), 7.31(bs, 2H), 7.25-7.22(m, 6H), 7.19(dd, J=0.6 Hz, 2H), 6.67(t, J=7.2 Hz, 2H), 5.30(s, 2H), 5.09(s, 1H), 2.42(s, 6H), 1.88(m, 2H), 1.78(m, 2H), 1.70(m, 2H), 0.54(d, J=6.6Hz, 6H), 0.38(d, J=4.2 Hz, 6H)

[0166]

화합물	MW	PL	M.P.
C-2	667.85	621 nm	360℃

[0167] **광 발광 양자 수율 (Photoluminescence Quantum Yield; PLQY) 측정 실시예 1 및 비교예 1**

[0168] 본원의 일 양태에 따른 화합물 **C-2** 및 비교예 화합물 **A**의 광 발광 양자 수율 (PLQY)을 측정하기 위해 하기와 같은 조건으로 시험하였다.

[0169] · 사용 장비 및 측정 조건: JASCO사(社) FP8300 (적분구 포함), 77 K (액체 질소)

[0170] · 시료 조건: 2-메틸-THF 중 10^{-4}M 에 용해시킨 후 N_2 퍼지 (purging)

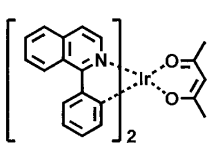
[0171] 해당 장비를 통해 얻어진 측정 결과는 하기 표 1과 같다.

[0172] **[표 1]**

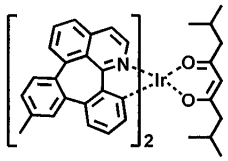
[0173]

	비교예 1	**실시예 1**
화합물	**화합물 A**	**화합물 C-2**
PLQY (%)	**30.62**	**49.81**

[0174]



A



C-2

[0175] 통상 OLED에서 사용되는 발광효율은 단위 전류당 휘도의 크기를 나타내는 전류효율 $\eta_c[cd/A]\eta_c[cd/A]$을 사용한다. 전류효율은 전력 효율과 마찬가지로 시감효율이기 때문에 눈에 의한 분광 감도를 포함하고 있어서 옐로우 (Y) 내지 그린 (G) 영역에서 최대가 되고 블루 (B) 및 레드 (R) 영역에서 급격히 저하된다. 정확히 일치하는 시감을 가진 경우라면 전류효율을 비교하여 발광효율의 우위를 가릴 수 있으나 해당 물질들은 서로 다른 파장을 가지고 있기 때문에 시감효율이 아닌 양자효율로 비교를 하는 것이 정확하다. 이 경우는 외부 양자효율 (external quantum efficiency, EQE)을 비교하는 것이 적절한데, 외부 양자효율은 하기 식 1과 같이 표현될 수 있다.

[0176] [식 1]

[0177] $$\eta_{EQE} = \eta_{out} \times \eta_{IQE}$$

[0178] 상기 식 1에서, η_{EQE}는 외부 양자효율, η_{out}은 광추출 효율 (out-coupling efficiency), η_{IQE}는 내부 양자효율 (internal quantum efficiency)을 의미한다. 상기 내부 양자효율(η_{IQE})은 하기 식 2로 표현될 수 있다.

[0179] [식 2]

[0180] $\eta_{IQE} = \gamma \times \eta_r \times \eta_f \times \eta_r$

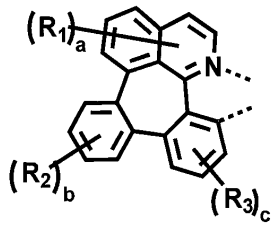
[0181] 상기 식 2에서, η_{IQE}는 내부 양자효율, γ은 재결합 효율(recombination efficiency) 또는 (전하 밸런스; charge balance), η_r은 여기자 형성효율 (exciton formation efficiency) (일중항(singlet): 0.25, 삼중항(triplet): 0.75), η_f는 PLQY 을 의미한다.

[0182] 즉, 내부 양자효율 및 외부 양자효율은 물질의 PLQY 에 비례한다.

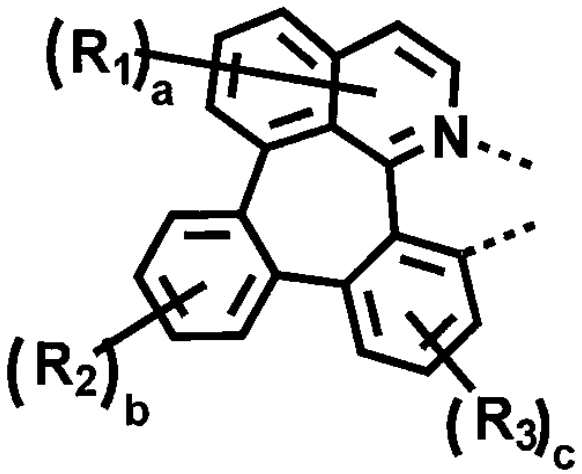
[0183] 상기 표 1로부터, 실시예 화합물 **C-2** 의 PLQY 값은 비교예 화합물 **A**의 PLQY값 보다 큼을 확인할 수 있다. 따라서, 본원에 따른 화합물의 양자효율이 비교예 화합물의 양자효율보다 상대적으로 높음을 알 수 있다. 그러므로, 본원의 유기 전계 발광 화합물은 기존의 물질에 비해 발광 특성이 우수함을 확인할 수 있다.

도면

도면1



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	KR1020200020061A	公开(公告)日	2020-02-26
申请号	KR1020180095303	申请日	2018-08-16
[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)	롬엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	김현 전정환 황선진 이가원 오홍세		
发明人	김현 전정환 황선진 이가원 오홍세		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/0085 H01L51/0087 H01L51/5012 C09K2211/185 C07F15/0033 C09K2211/182 H01L51/0072 H01L51/5016		
代理人(译)	张本勋		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及包含化学式1表示的配体的有机电致发光化合物，并且涉及包含该化学式1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，与常规有机电致发光装置相比，有机电致发光装置具有高的发光效率特性。 在化学式1中，取代基的定义与说明书中定义的相同。