(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0049635
(43) 공개일자 2020년05월08일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *C07D 307/91* (2006.01)
C07D 307/93 (2006.01) *C07D 333/76* (2006.01)
C07D 333/80 (2006.01) *C07D 401/04* (2006.01)
C07D 401/14 (2006.01) *C07D 403/04* (2006.01)
C07D 403/10 (2006.01) *C07D 407/04* (2006.01)
C07D 407/14 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
C07D 307/91 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2019-0135292
(22) 출원일자 2019년10월29일
심사청구일자 없음
(30) 우선권주장
1020180131609 2018년10월31일 대한민국(KR)

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

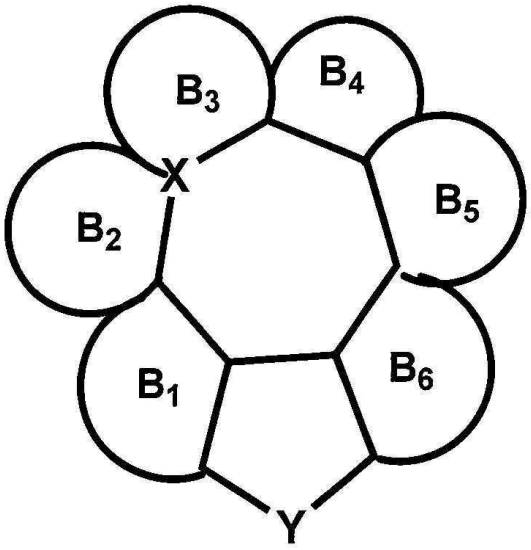
전체 청구항 수 : 총 11 항

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

(57) 요 약

본원은 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다. 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써 낮은 구동 전압 및/또는 높은 발광 효율 및/또는 긴 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

대 표 도 - 도1



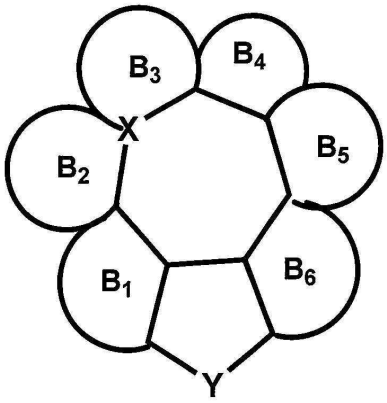
(52) CPC특허분류
C07D 307/93 (2013.01)
C07D 333/76 (2013.01)
C07D 333/80 (2013.01)
C07D 401/04 (2013.01)
C07D 401/14 (2013.01)
C07D 403/04 (2013.01)
C07D 403/10 (2013.01)
C07D 407/04 (2013.01)
C07D 407/14 (2013.01)
(72) 발명자
이효정
경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20
강현주
경기도 화성시 석우동 삼성1로 5길 20

명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물:



상기 화학식 1에서,

B_1 내지 B_6은 각각 독립적으로 존재하지 않거나, 또는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C5-C10) 방향족 고리이고, 상기 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자로 대체될 수 있고, 단, 상기 B_1 내지 B_6 중 5개 이상은 존재하고, 상기 B_1 내지 B_6 중 이웃한 고리는 서로 융합될 수 있으며;

X는 C 또는 N이고;

Y는 $-N-L_1-Ar_1$, -O-, -S-, 또는 $-CR_1R_2$이고;

L_1은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이며;

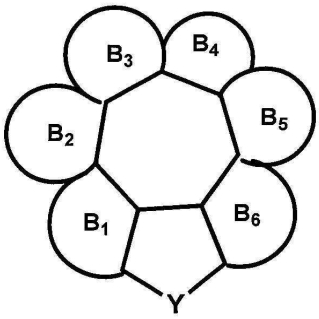
Ar_1은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 $-NR_3R_4$ 이고,

R_1 내지 R_4 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나, 인접한 치환기와 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있다.

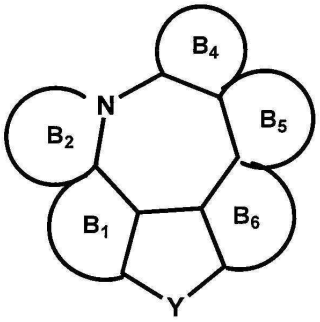
청구항 2

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 또는 화학식 1-2로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물:

[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



상기 화학식 1-1 및 1-2에서,

B_1 내지 B_6 및 Y는 제1항에서의 정의와 같다.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 X가 C이고; 상기 B_1 내지 B_6은 각각 독립적으로 존재하지 않거나, 또는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 벤젠 고리, 치환 또는 비치환된 나프탈렌 고리, 치환 또는 비치환된 피롤 고리, 치환 또는 비치환된 퓨란 고리, 또는 치환 또는 비치환된 티오펜 고리인, 유기 전계 발광 화합물.

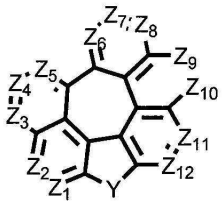
청구항 4

제1항에 있어서, 상기 X가 N이고; 상기 B_2 또는 B_3은 존재하지 않거나, 또는 X와 융합되어 치환 또는 비치환된 피리딘 고리 또는 치환 또는 비치환된 인돌 고리를 형성하는, 유기 전계 발광 화합물.

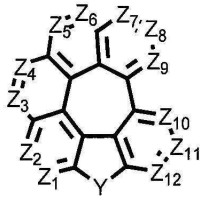
청구항 5

제1항에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 7 중 어느 하나로 표시되는, 유기 전계 발광 화합물:

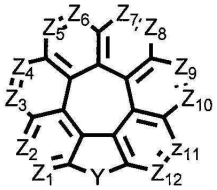
[화학식 2]



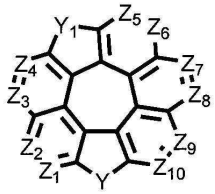
[화학식 3]



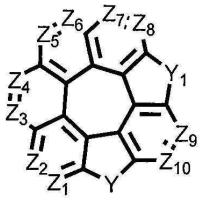
[화학식 4]



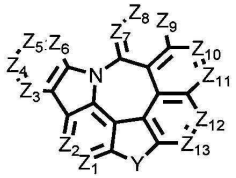
[화학식 5]



[화학식 6]



[화학식 7]



상기 화학식 2 내지 7에서,

Y_1은 Y의 정의와 같고,

Z_1 내지 Z_{13}은 각각 독립적으로, N 또는 CR_a이고,

R_a는 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, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-30)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (3-30원)헤테로아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴(3-30원)헤테로아릴아미노이거나; 서로 융합되어 고리를 형성할 수 있다.

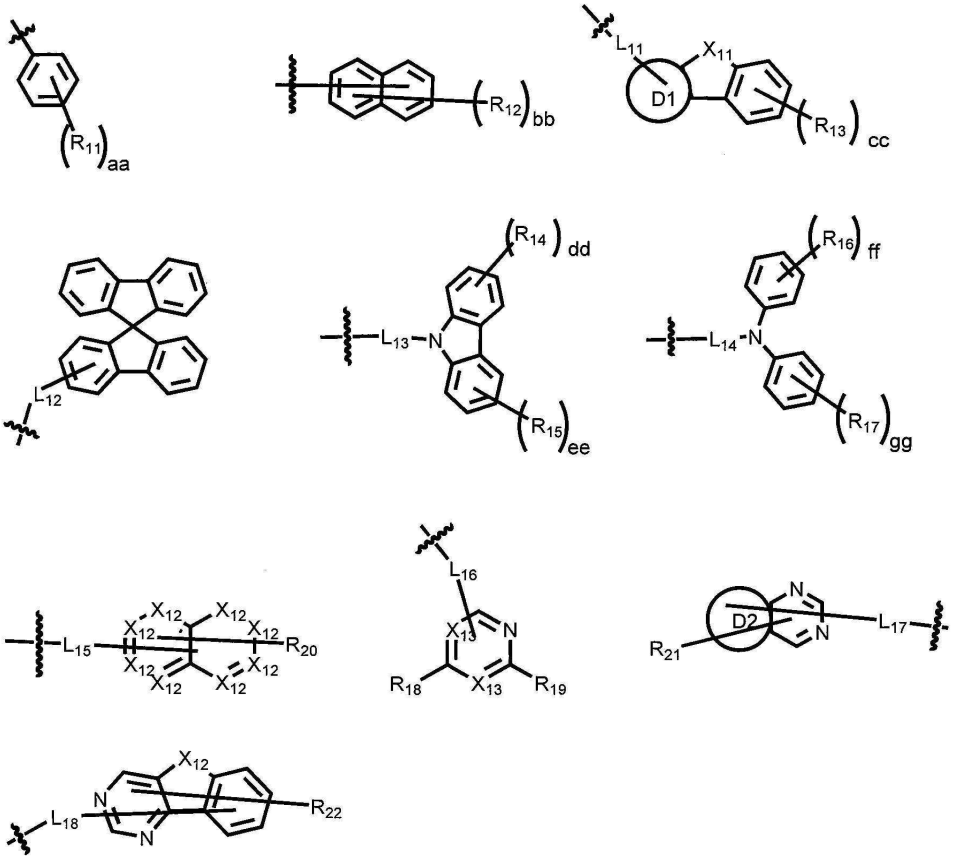
청구항 6

제5항에 있어서, 상기 Ar_1, L_1, R_1 내지 R_4, 및 R_a에서 치환된 (C1-C30)알킬(렌), 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)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환된 (C1-C30)알킬(C6-30)아릴아미노, 및 치환된 고리의 치환체는 각각 독립적으로, 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴, (3-30원)헤테로아릴, 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 7

제5항에 있어서, 상기 Ar_1, R_1 내지 R_4, 및 R_a가 하기 그룹 1에 나열된 치환기 중 어느 하나에서 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물:

[그룹 1]



상기 그룹 1에서,

D1 및 D2는 각각 독립적으로, 벤젠 고리 또는 나프탈렌 고리이고;

X_{11}은 O, S, NR_{11}, 또는 $CR_{12}R_{13}$이고;

X_{12}는 각각 독립적으로, CR_{31} 또는 N 이고, 단 X_{12} 중 적어도 하나는 N이며;

X_{13}은 각각 독립적으로, CR_{32} 또는 N이고;

L_{11} 내지 L_{18}은 각각 독립적으로, 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고;

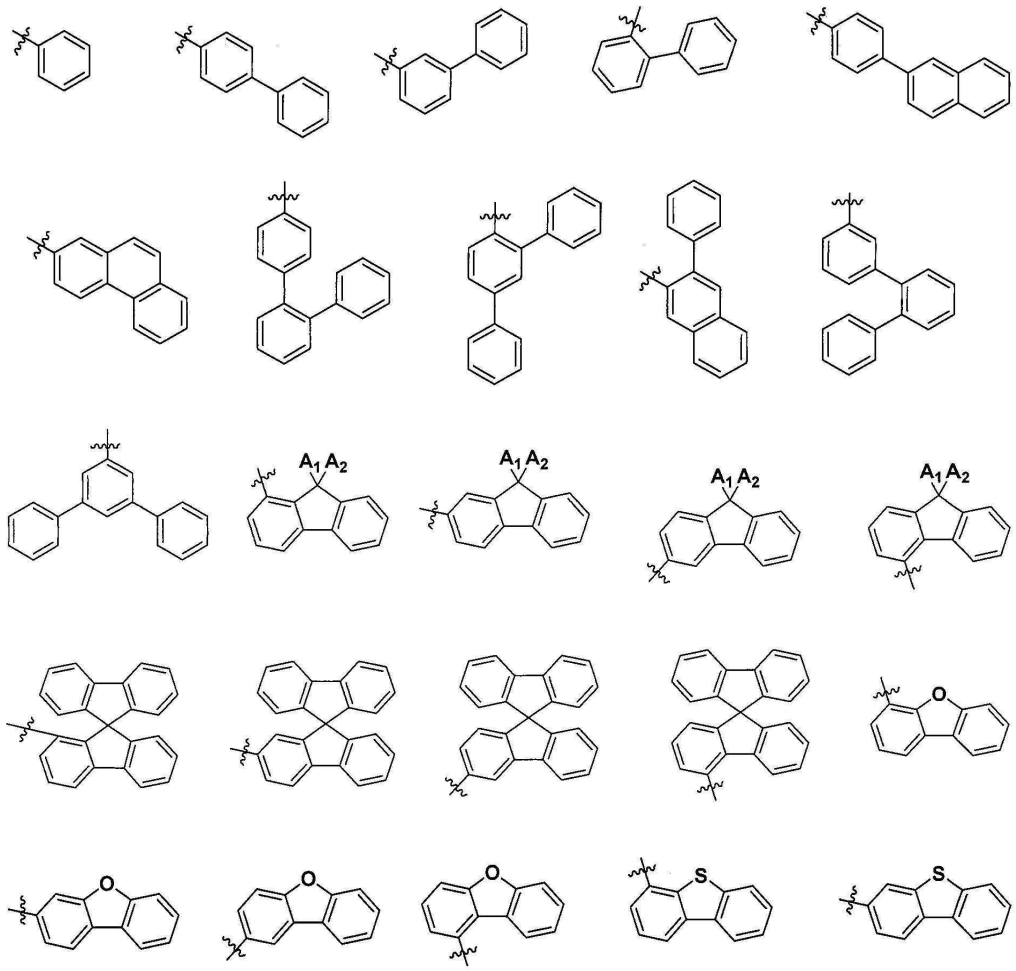
R_{11} 내지 R_{22}, R_{31}, 및 R_{32}는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나, 인접한 치환기와 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있으며;

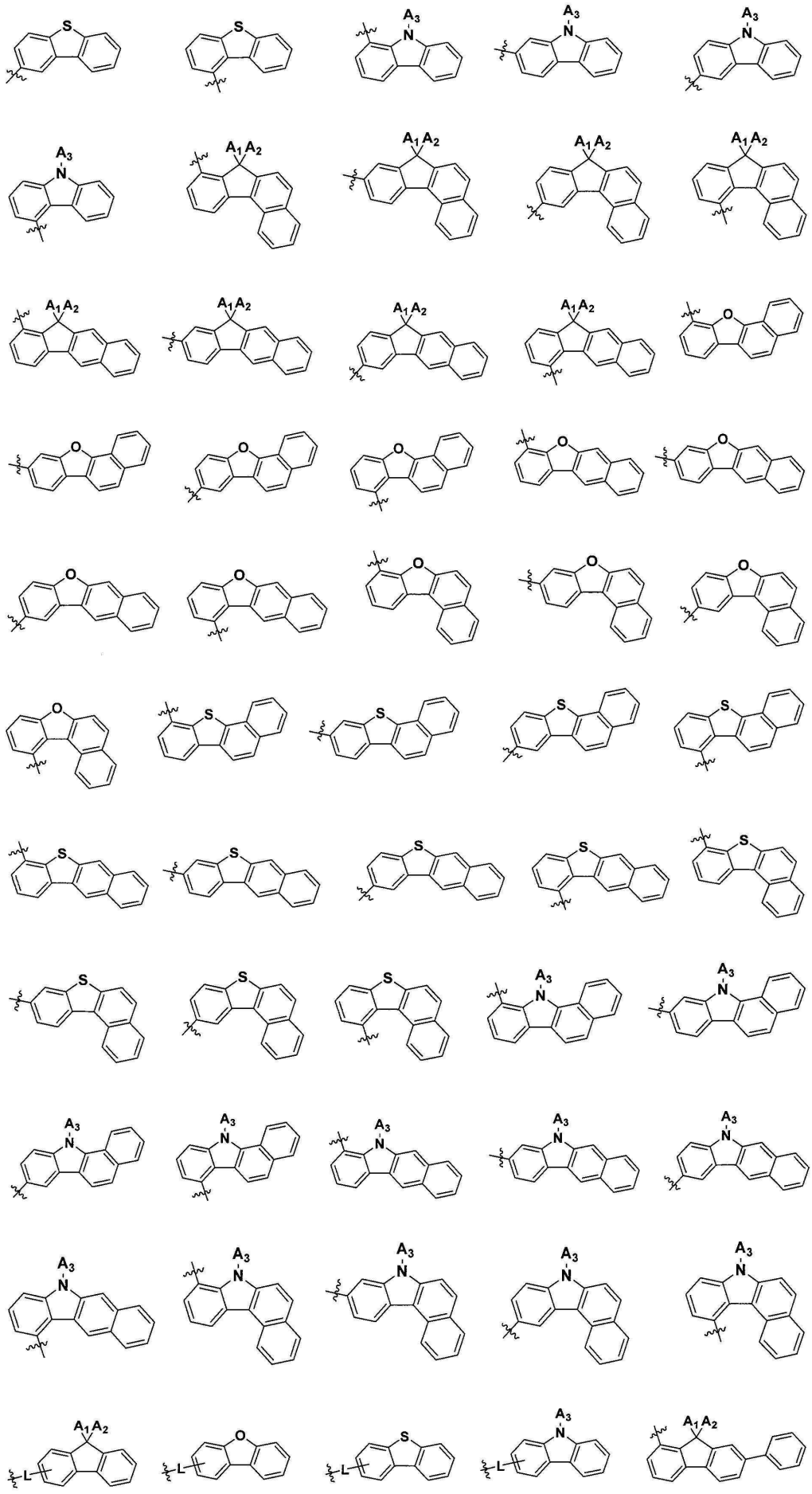
aa, ff, 및 gg는 각각 독립적으로, 1 내지 5의 정수이고, bb는 1 내지 7의 정수이며, cc 내지 ee는 각각 독립적으로, 1 내지 4의 정수이고;

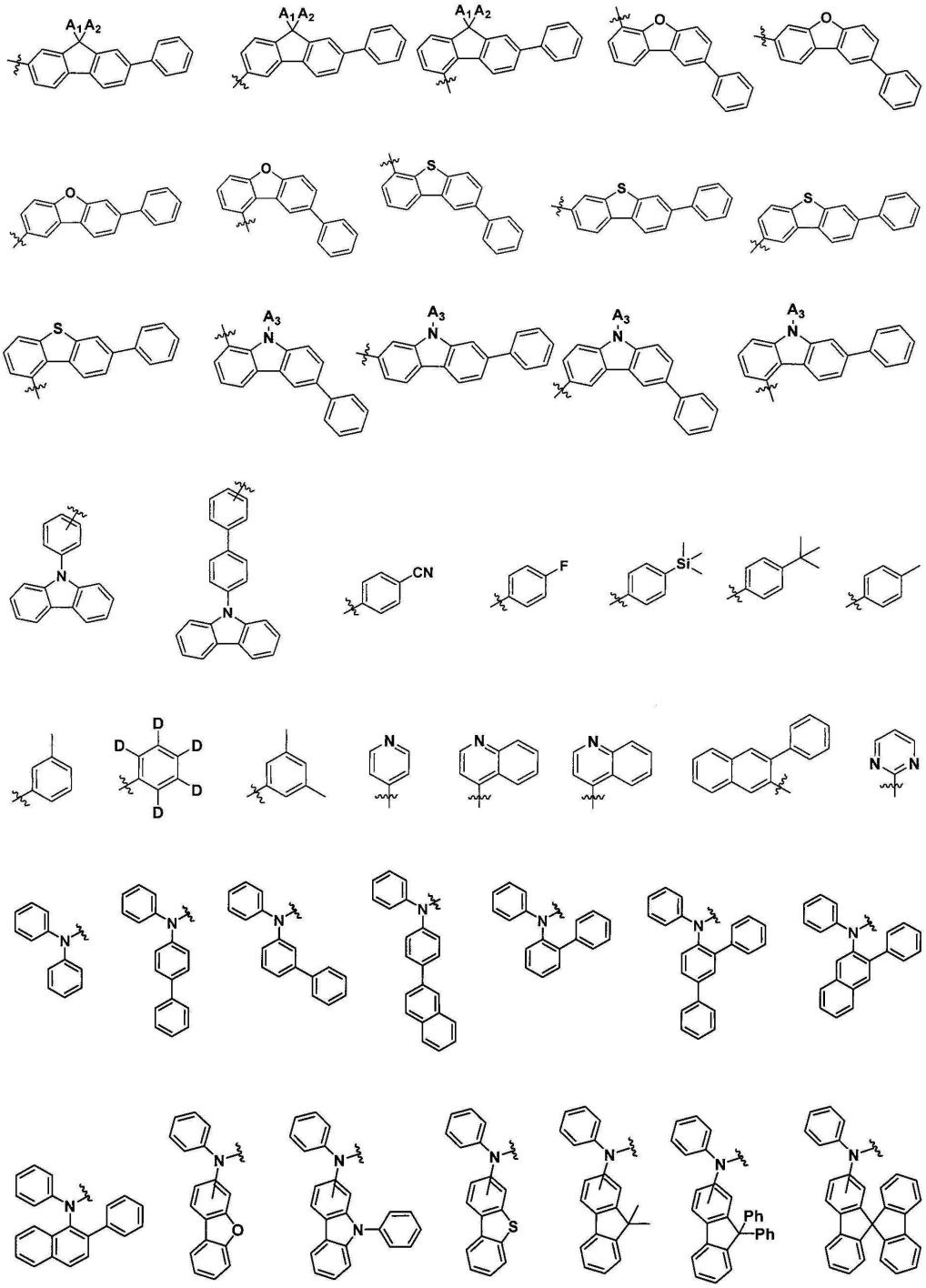
상기 aa 내지 gg가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R_{11} 내지 R_{17}은 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 8

제5항에 있어서, 상기 Ar_1, R_1 내지 R_4, 및 R_a는 각각 독립적으로, 하기 그룹 2에 나열된 치환기 중 어느 하나에서 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물:







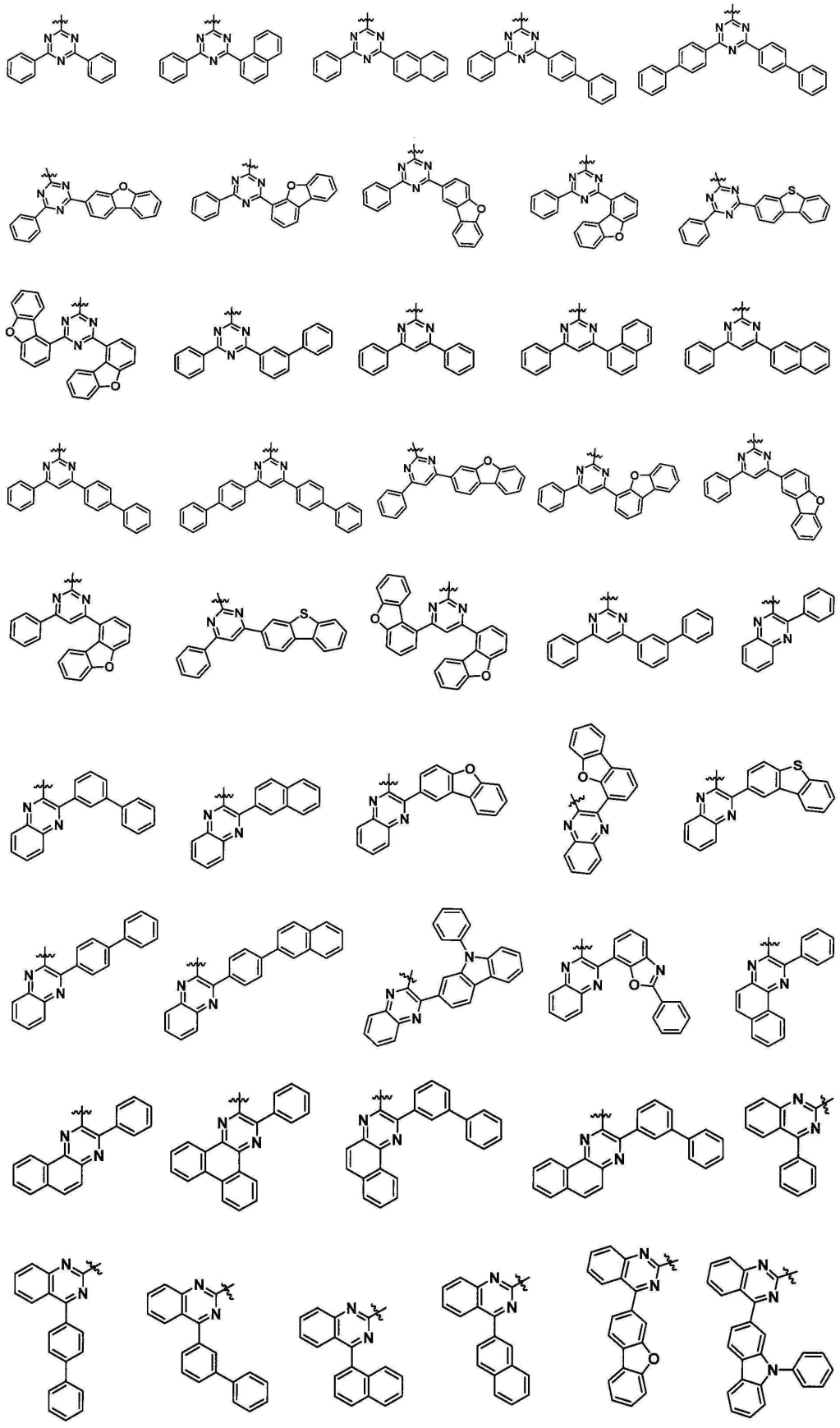
상기 그룹 2에서,

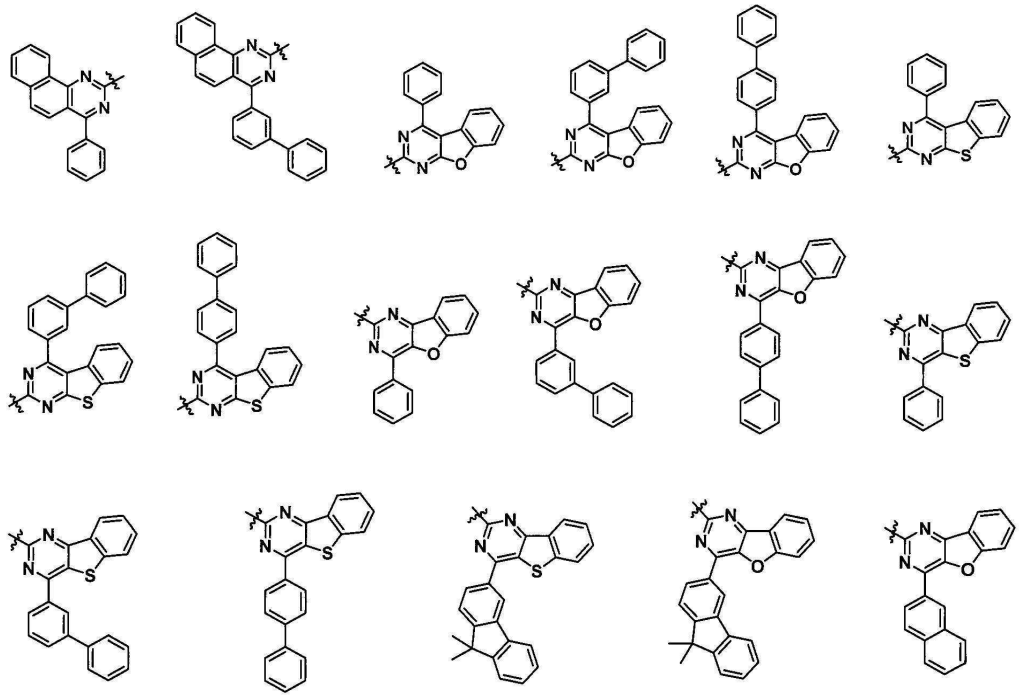
L은 제1항에서의 L_1의 정의와 같고,

A_1 내지 A_3은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이다.

청구항 9

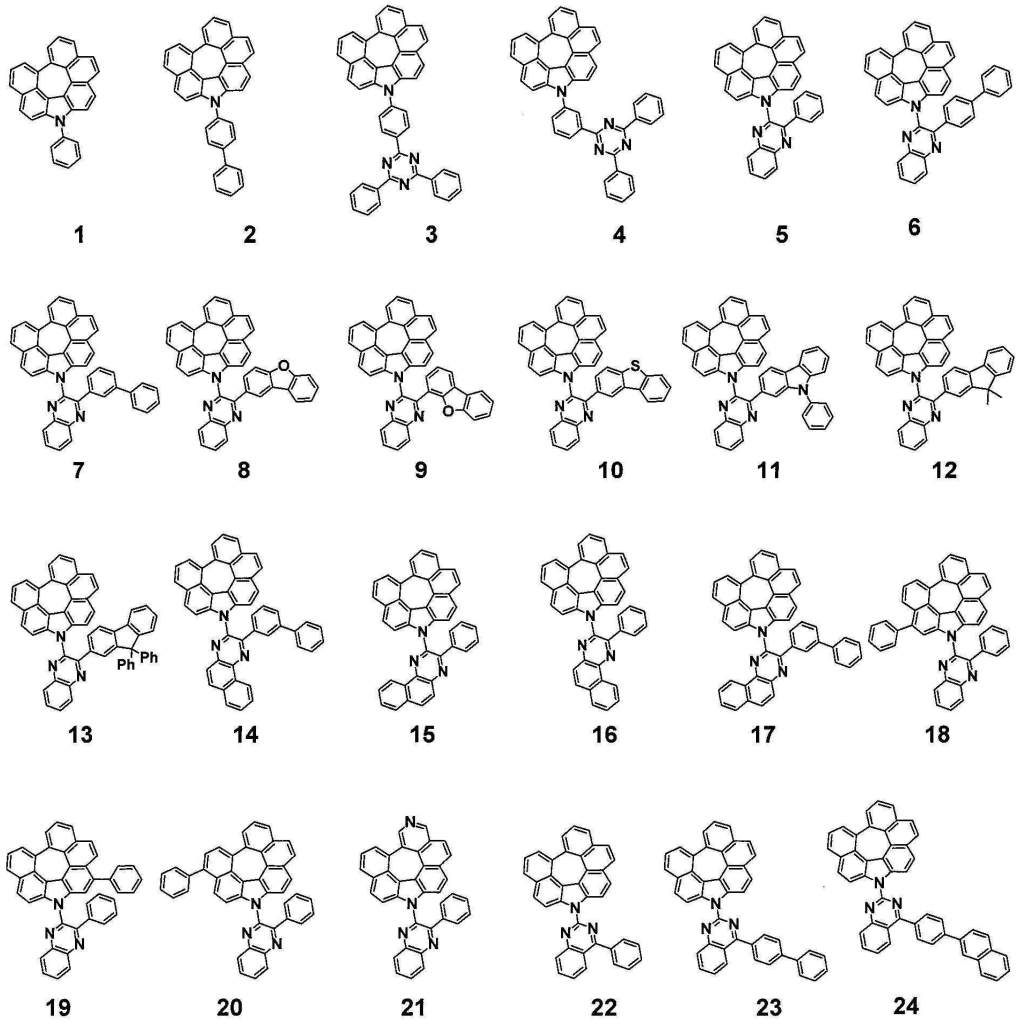
제5항에 있어서, 상기 Ar_1, R_1 내지 R_4, 및 R_a는 각각 독립적으로, 하기 그룹 3에 나열된 치환기 중 어느 하나에서 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.

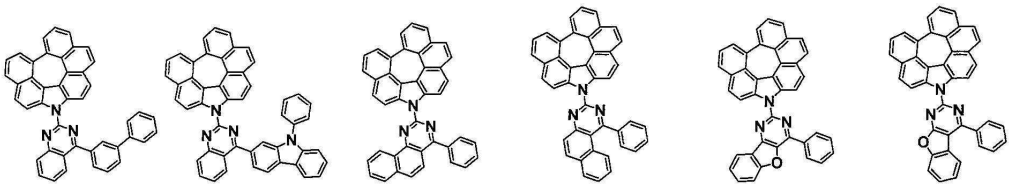




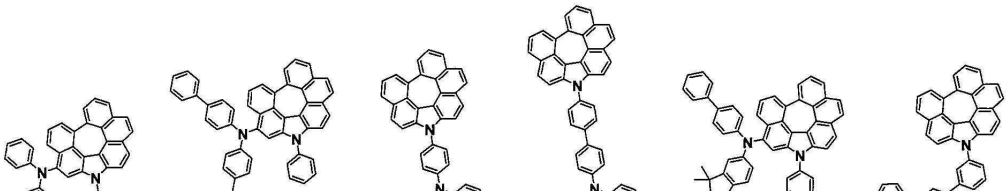
청구항 10

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

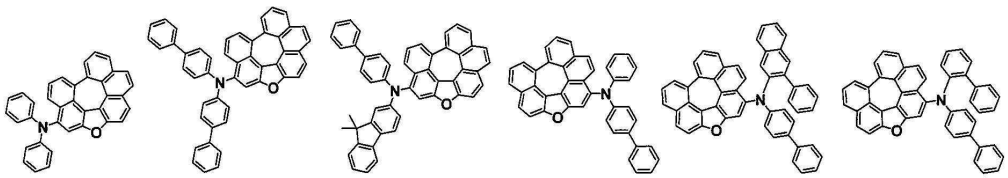




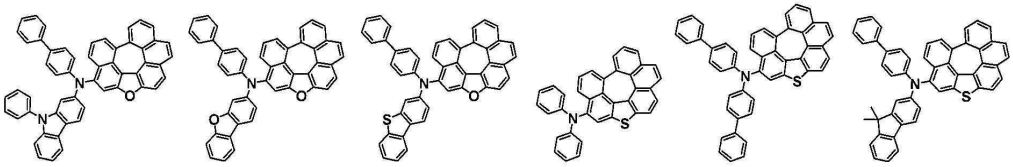
25 26 27 28 29 30



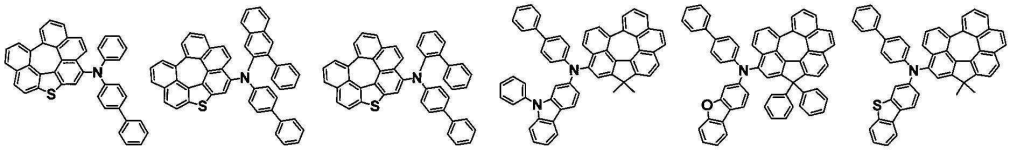
31 32 33 34 35 36



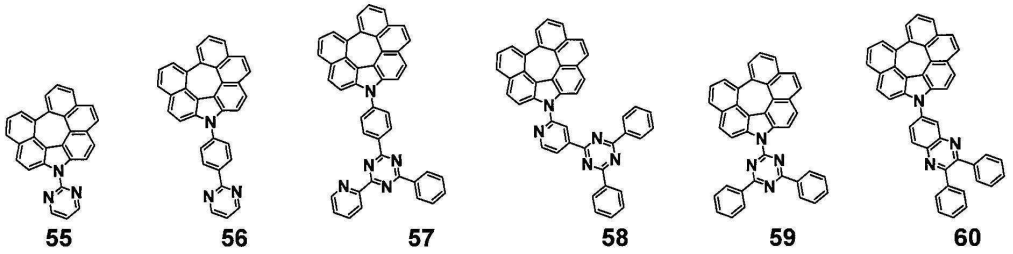
37 38 39 40 41 42



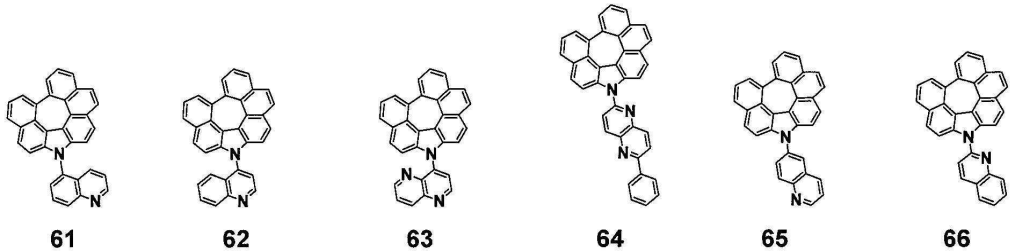
43 44 45 46 47 48



49 50 51 52 53 54

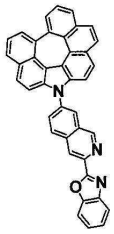


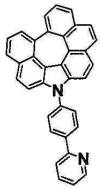
55 56 57 58 59 60

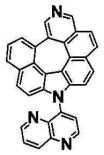


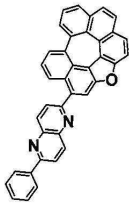
61 62 63 64 65 66

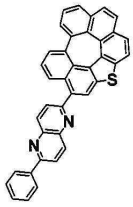

67

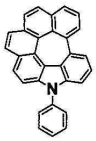

68

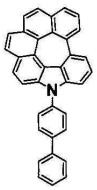

69

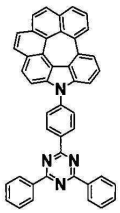

70

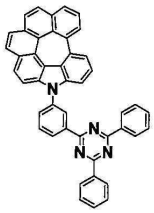

71

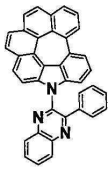

72

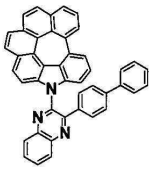

73

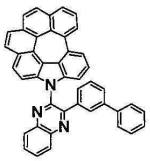

74

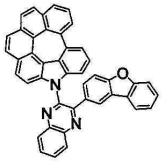

75

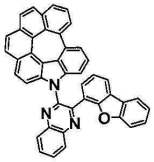

76

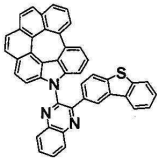

77

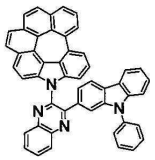

78

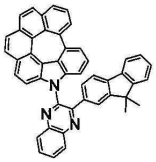

79

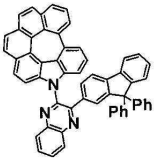

80

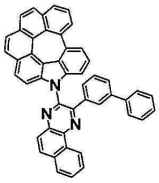

81

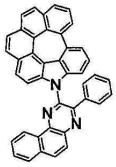

82

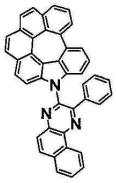

83

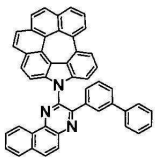

84

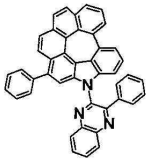

85

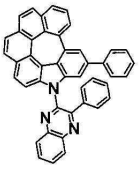

86

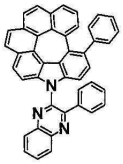

87

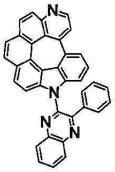

88

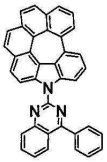

89

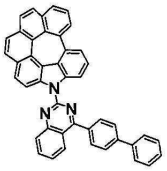

90

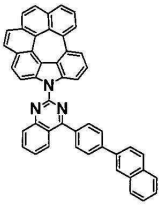

91

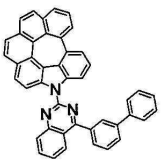

92

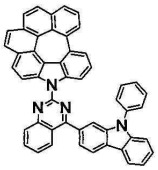

93

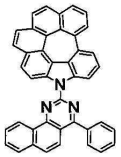

94

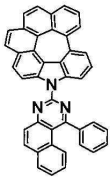

95

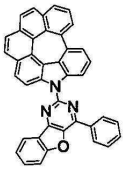

96

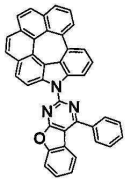

97

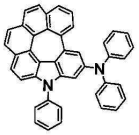

98

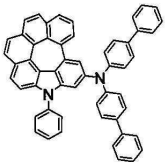

99

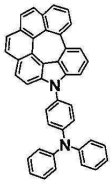

100

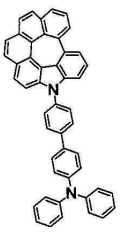

101


102


103

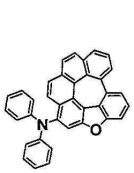

104

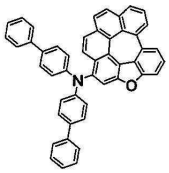

105

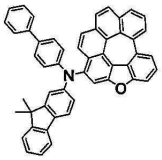

106

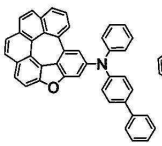
107

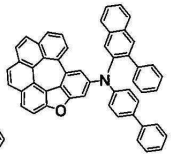
108

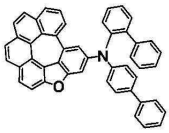

109

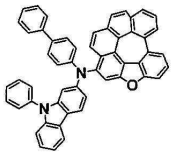

110

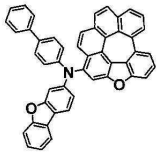

111

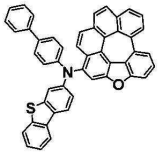

112

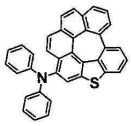

113

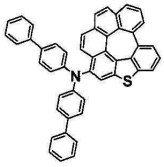

114

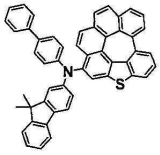

115

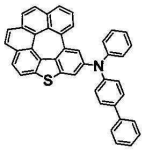

116

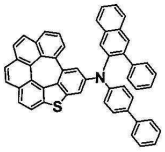

117

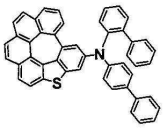

118

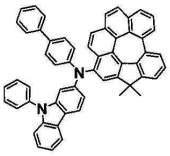

119

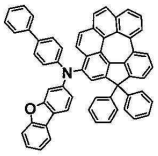

120

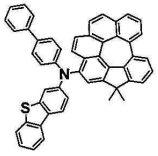

121

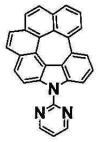

122

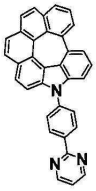

123

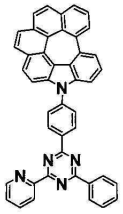

124

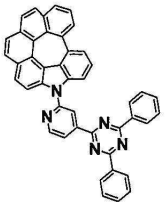

125

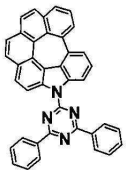

126

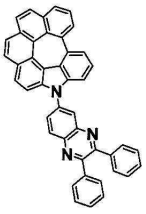

127

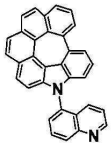

128

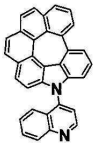

129

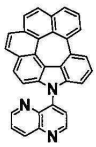

130

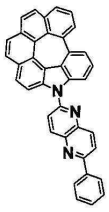

131

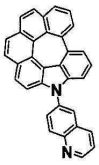

132

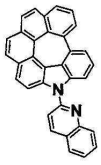

133

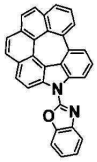

134

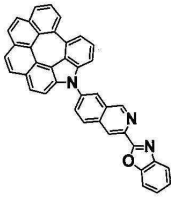

135

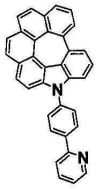

136

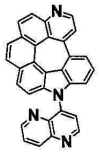

137

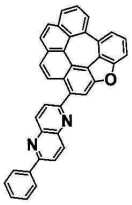

138

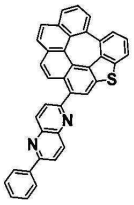

139

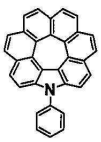

140

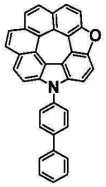

141

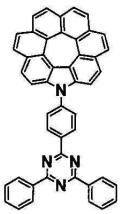

142

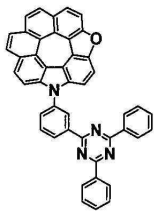

143


144


145

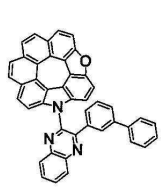

146

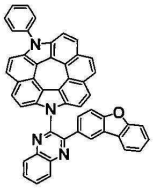

147

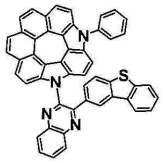

148

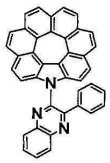
149

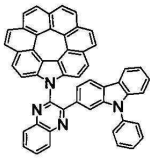
150

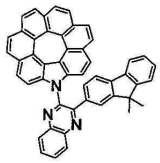

151

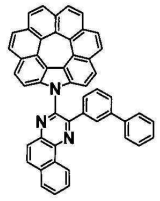

152

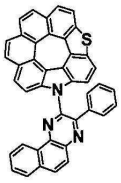

153

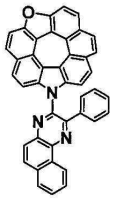

154

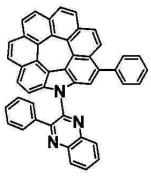

155

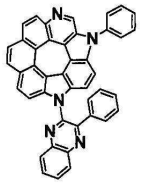

156

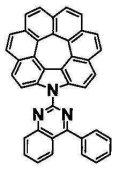

157

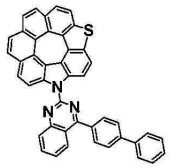

158

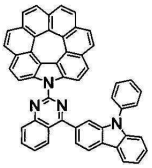

159

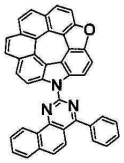

160

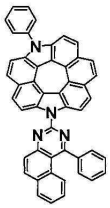

161

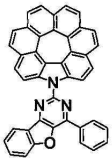

162

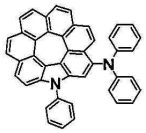

163

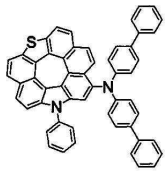

164

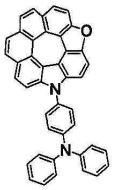

165

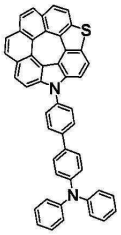

166

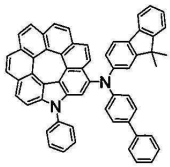

167

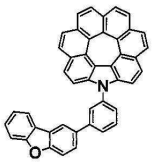

168

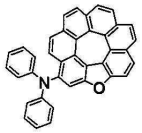

169

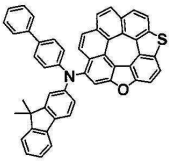

170

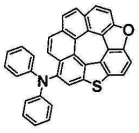

171

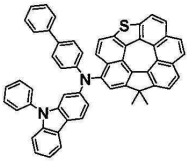

172

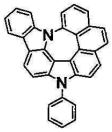

173

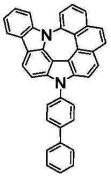

174

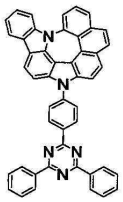

175

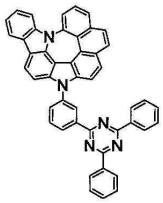

176

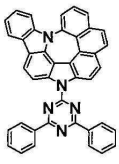

177

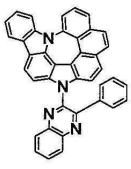

178

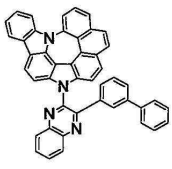

179

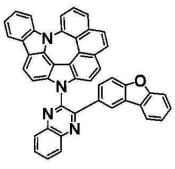

180

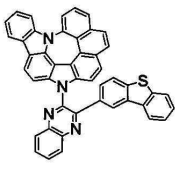

181

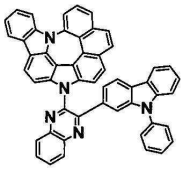

182

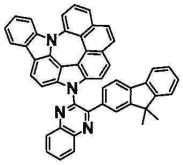

183

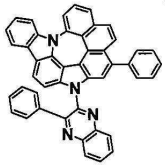

184

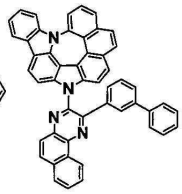

185

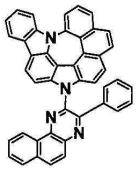

186

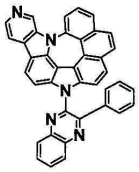

187

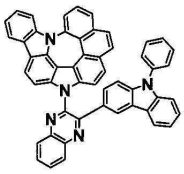

188

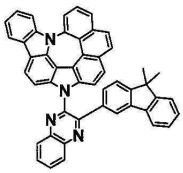

189

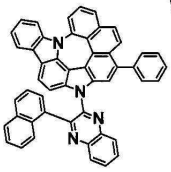

190

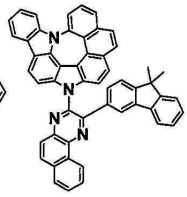

191

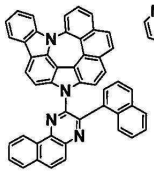

192

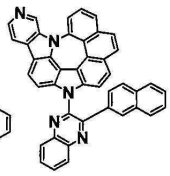

193

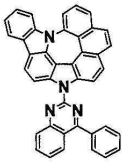

194

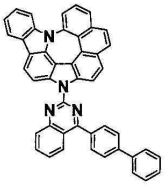

195

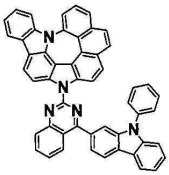

196

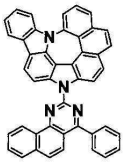

197

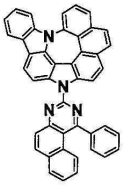

198

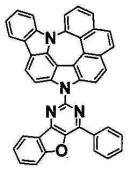

199

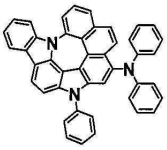

200

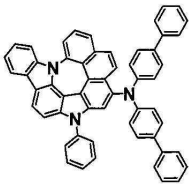

201

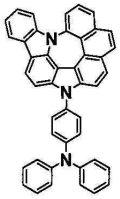

202

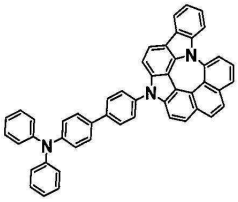

203

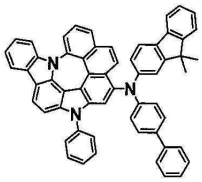

204

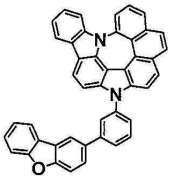

205

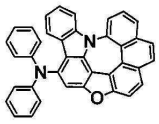

206

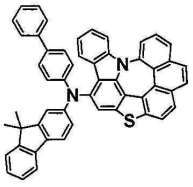

207

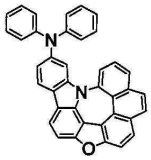

208

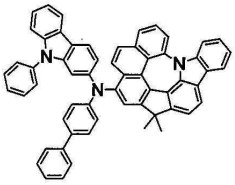

209

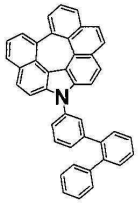

210

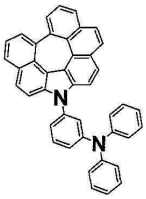

211

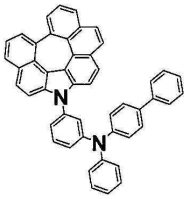

212

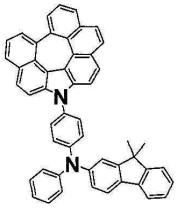

213

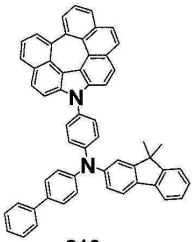

214

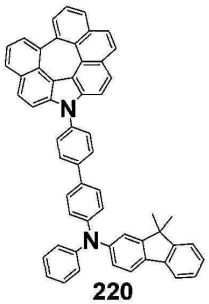

215


216

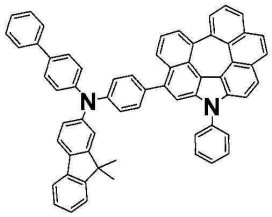

217


218

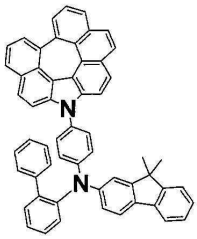

219



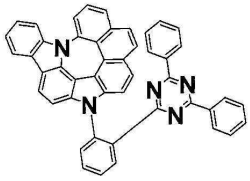
220



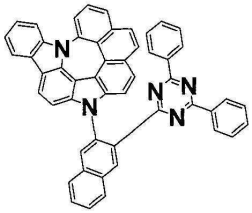
221



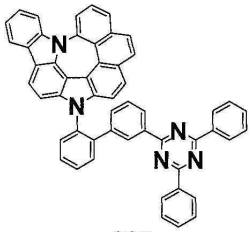
222



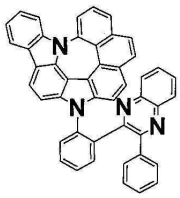
223



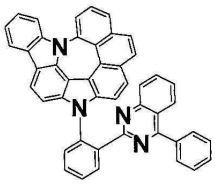
224



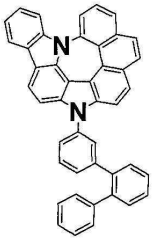
225



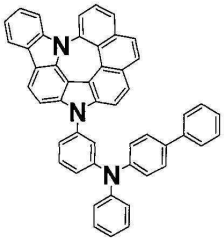
226



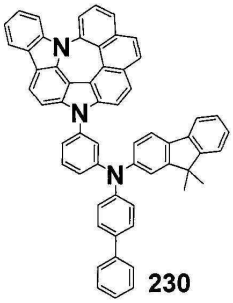
227



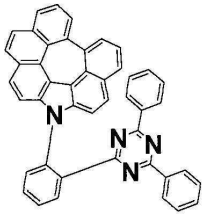
228



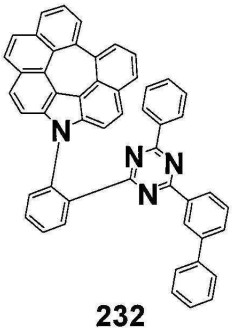
229



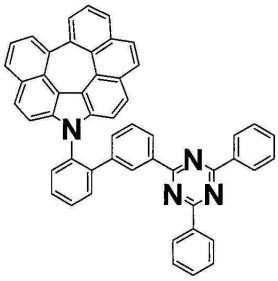
230



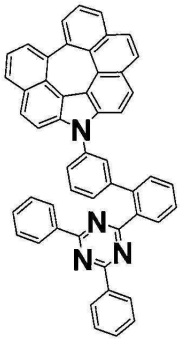
231



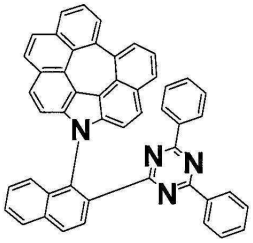
232



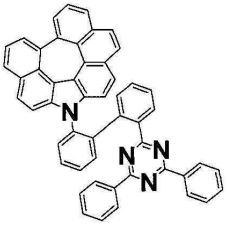
233



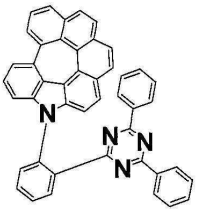
234



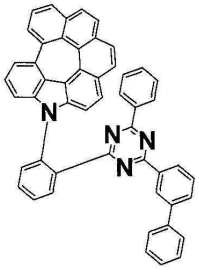
235



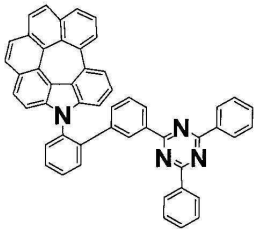
236



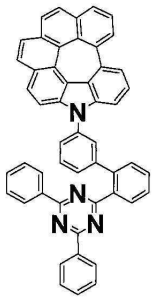
237

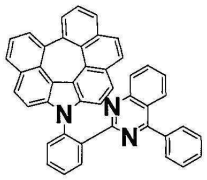


238

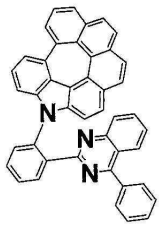


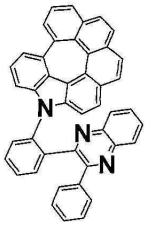
239

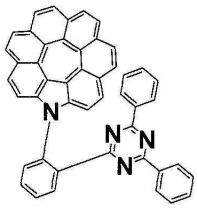

240

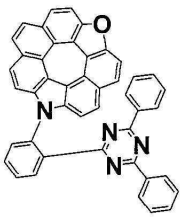

241

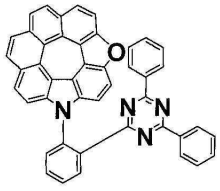

242

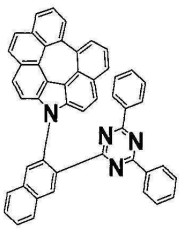

243

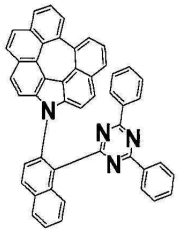

244

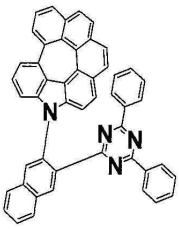

245

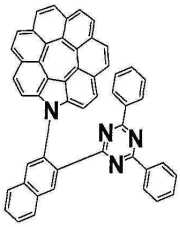

246

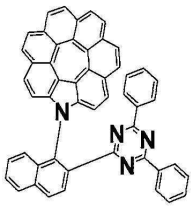

247


248


249


250


251


252

청구항 11

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

발명의 설명

기 술 분 야

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

배 경 기 술

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

[0003] 유기 전계 발광 소자(organic electroluminescent device)는 유기 발광재료에 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 정공주입층, 정공전달층, 정공보조층, 발광보조층, 전자차단층, 발광층(호스트 및 도판트 재료 포함), 전자버퍼층, 정공차단층, 전자전달층, 전자주입층 등을 포함할 수 있다. 상기 유기물층에 사용되는 재료는 기능에 따라 정공주입재료, 정공전달재료, 정공보조재료, 발광보조재료, 전자차단재료, 발광재료, 전자버퍼재료, 정공차단재료, 전자전달재료, 전자주입재료 등으로 나뉠 수 있다. 이러한 유기 전계 발광 소자에서는 전압 인가에 의해 양극에서 정공이, 음극에서 전자가 발광층에 주입되고, 정공과 전자의 재결

합에 의해 에너지가 높은 엑시톤이 형성된다. 이 에너지에 의해 유기 발광 화합물이 여기 상태로 되며, 유기 발광 화합물의 여기 상태가 기저 상태로 돌아가면서 에너지를 빛으로 방출하여 발광하게 된다.

[0004] 유기 전계 발광 소자의 발광재료는 소자의 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인으로서, 발광재료는 양자 효율이 높고 전자와 정공의 이동도가 커야 하고, 형성된 발광재료층은 균일하고 안정해야 한다. 이러한 발광재료는 발광색에 따라 청색, 녹색 또는 적색 발광재료로 나뉘고, 추가로 황색 또는 주황색 발광재료도 있다. 또한, 발광재료는 기능적인 측면에서 호스트 재료와 도판트 재료로 구분될 수 있다. 최근에 고효율 및 장수명의 유기 전계 발광 소자의 개발이 시급한 과제로 대두되고 있는데, 특히 중대형 OLED 패널에서 요구하고 있는 EL 특성 수준을 고려해 볼 때 기존의 발광재료에 비해 매우 우수한 재료의 개발이 시급한 실정이다. 이를 위하여 고체 상태의 용매 및 에너지 전달자 역할을 하는 호스트 물질의 바람직한 특성은 순도가 높아야 하며, 진공증착이 가능하도록 적당한 분자량을 가져야 한다. 또한 유리전이온도와 열분해온도가 높아 열적 안정성을 확보해야 하며, 장수명화를 위해 높은 전기화학적 안정성이 요구되며, 무정형 박막을 형성하기 용이해야 하며, 인접한 다른 층의 재료들과는 접착력이 좋은 반면 층간 이동은 하지 않아야 한다.

[0005] 그 밖에, 정공 전달층, 버퍼층, 전자 전달층 등에 있어서도 열적 안정성이 양호하고, 유기 전계 발광 소자의 성능, 예컨대 구동 전압, 발광 효율, 수명 특성을 개선할 수 있는 재료의 개발이 요구된다.

발명의 내용

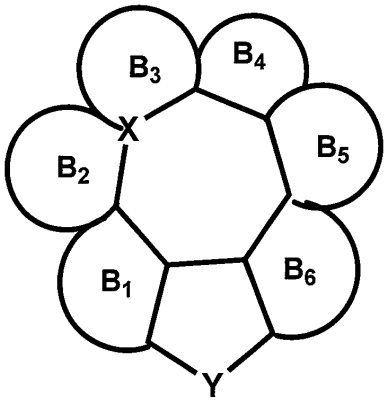
해결하려는 과제

[0006] 본 발명의 목적은, 첫째로 낮은 구동 전압 및/또는 높은 발광 효율 및/또는 긴 수명 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

[0007] 상기의 기술적 과제를 해결하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0008] [화학식 1]



[0009]

[0010] 상기 화학식 1에서,

[0011] B_1 내지 B_6은 각각 독립적으로 존재하지 않거나, 또는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C5-C10) 방향족 고리이고, 상기 방향족 고리의 탄소원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자로 대체될 수 있고, 단, 상기 B_1 내지 B_6 중 5개 이상은 존재하고, 상기 B_1 내지 B_6 중 이웃한 고리는 서로 융합될 수 있으며;

[0012] X는 C 또는 N이고;

[0013] Y는 $-N-L_1-Ar_1$, -O-, -S-, 또는 $-CR_1R_2$이고;

[0014] L_1은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된

(3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이며;

[0015] Ar_1은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 $-NR_3R_4$ 이고,

[0016] R_1 내지 R_4 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 인접한 치환기와 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있다.

발명의 효과

[0017] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함함으로써, 낮은 구동 전압 및/또는 높은 발광 효율 및/또는 긴 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0018] 도 1은 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물의 대표적인 화학식이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0019] 이하에서 본원을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본원의 범위를 제한하는 방법으로 해석되어서는 안된다.

[0020] 본원은 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물, 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

[0021] 본원에서 "유기 전계 발광 화합물"은 유기 전계 발광 소자에 사용될 수 있는 화합물을 의미하며, 필요에 따라 유기 전계 발광 소자를 구성하는 임의의 재료층에 포함될 수 있다.

[0022] 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 등일 수 있다.

[0023] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은 쇄를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 20개인 것이 바람직하고, 1 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 *tert*-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 여기에서 탄소수가 3 내지 20개인 것이 바람직하고, 3 내지 7개인 것이 더 바람직하다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 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 있으며, 스피로 구조를 포함한다. 상기 환 골격 탄소수는 6 내지 20개인 것이 바람직하고, 6 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 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, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐, 벤조플루오란테닐, 톨릴(tolyl), 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-쿼터페닐, 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, 여기에서 환 골격 원자수가 5 내지 25개인 것이 바람직하다. 헤테로원자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 상기 헤테로원자는 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (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 헤테로아릴기 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함하며, 스피로 구조를 가진 것도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 구체적으로 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미디닐, 피리다진일 등의 단일환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이미다조피리디닐, 이소인돌릴, 인돌릴, 벤조인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 아자카바졸릴, 벤조카바졸릴, 디벤조카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴, 인돌리지디닐, 아크리디닐, 실라플루오레닐, 게르마플로우레닐 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-디벤조티오페닐, 2-디벤조티오페닐, 3-디벤조티오페닐, 4-디벤조티오페닐, 1-실라플루오레닐, 2-실라플루오레닐, 3-실라플루오레닐, 4-실라플루오레닐, 1-게르마플루오레닐, 2-게르마플루오레닐, 3-게르마플루오레닐, 4-게르마플루오레닐 등을 들 수 있다. 본원에서 "할로겐"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0024] 또한, 본원에서 "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.

[0025] 본원에서, "방향족 고리"는 단일환 또는 다환의 불포화 탄화수소기로, 일부 방향족 특성 또는 π-결합을 나타내는 임의의 시클릭 모이어티를 의미하고, 여기에서 상기 고리 내에 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택

된 적어도 하나의 헤테로 원자로 대체될 수 있다. 예를 들어, 본원에서 상기 방향족 고리는 (C5-C30)아릴, (5-30원)헤테로아릴, 또는 이들이 융합된 고리도 포함한다. 일 예에 따른 방향족 고리는 예를 들어, (C5-C25)아릴 또는 (5-25원)헤테로아릴, 예를 들어, (C5-C18)아릴, (5-18원)헤테로아릴, 또는 이들의 조합일 수 있다.

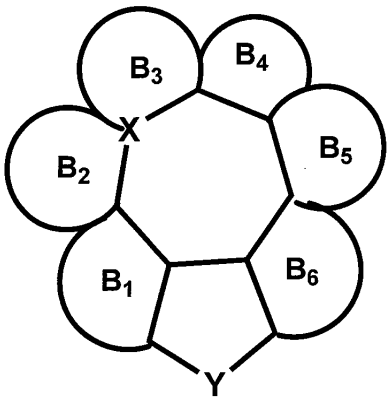
[0026] 본원에서 "인접한 치환기와 연결되어 형성된 고리"는 인접한 두 개 이상의 치환체가 연결 또는 융합되어 형성된 치환 또는 비치환된 (3-30원)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리를 의미하고, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (3-26원)의 단일환 또는 다환의 지환족, 방향족 또는 이들의 조합의 고리일 수 있다. 또한, 형성된 고리는 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다. 본원의 일 예에 따르면, 상기 환 골격 원자수는 (5-20원)이고, 본원의 다른 일 예에 따르면, 상기 환 골격 원자수는 (5-15원)이다.

[0027] 또한 본원의 "치환 또는 비치환" 기재에서 “치환”은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기 (즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 본원의 Ar_1, L_1, R_1 내지 R_4, 및 R_a에서 치환된 (C1-C30)알킬(렌), 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)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환된 (C1-C30)알킬(C6-30)아릴아미노, 및 치환된 고리의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30 원)헤테로아릴, (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 것이 바람직하며, 예를 들면, 상기 치환기(체)는, 치환 또는 비치환된 메틸, 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 m-비페닐, 치환 또는 비치환된 p-비페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 플루오레닐, 치환 또는 비치환된 피리디닐, 치환 또는 비치환된 카바졸릴, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐, 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐, 또는 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸릴 등일 수 있다.

[0028] 이하, 일 구현예에 따른 유기 전계 발광 화합물을 설명한다.

[0029] 일 구현예에 따른 유기 전계 발광 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0030] [화학식 1]



[0031]

[0032] 상기 화학식 1에서,

[0033] B_1 내지 B_6은 각각 독립적으로 존재하지 않거나, 또는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C5-C10)방향족 고리이고, 상기 방향족 고리의 탄소원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자로 대체될 수 있고, 단, 상기 B_1 내지 B_6 중 5개 이상은 존재하고, 상기 B_1 내지 B_6 중 이웃한 고리는 서로 융합될 수 있으

며;

[0034] X는 C 또는 N이고;

[0035] Y는 -N-L_1-Ar_1, -O-, -S-, 또는 -CR_1R_2이고;

[0036] L_1은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이며;

[0037] Ar_1은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 -NR_3R_4 이고,

[0038] R_1 내지 R_4 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 인접한 치환기와 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있다.

[0039] 일 예로, B_1 내지 B_6은 각각 독립적으로 존재하지 않거나, 또는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C5-C10)방향족 고리이고, 상기 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로 원자로 대체될 수 있고, 단, 상기 B_1 내지 B_6 중 5개 이상은 존재하고, 상기 B_1 내지 B_6 중 바로 이웃한 고리는 서로 융합하여 존재할 수 있다. 여기서, B_1 내지 B_6 중 바로 이웃한 고리가 서로 융합된다는 것은, B_1 고리와 B_2 고리, B_2 고리와 B_3 고리, B_3 고리와 B_4 고리, B_4 고리와 B_5 고리, 또는 B_5 고리와 B_6 고리가 서로 융합되는 것을 의미한다. 구체적으로, B_1 내지 B_6은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C5-C10)방향족 고리이고, 예컨대, 치환 또는 비치환된 (C5-C10)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C5-C10)헤테로아릴일 수 있다.

[0040] 일 예로, Y는 -N-L_1-Ar_1, -O-, -S-, 또는 -CR_1R_2이다.

[0041] 일 예로, L_1은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌이며, 바람직하게는, 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌일 수 있고, 보다 바람직하게는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴렌일 수 있다. 예를 들어, L_1은 단일결합이거나 치환 또는 비치환된 페닐렌, 치환 또는 비치환된 비페닐렌, 치환 또는 비치환된 피리디닐렌, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐렌, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐렌, 치환 또는 비치환된 벤조퀴녹살리닐렌, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐렌, 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐렌, 치환 또는 비치환된 벤조푸로피리미디닐렌, 또는 치환 또는 비치환된 나프티리디닐렌일 수 있다.

[0042] 일 예로, Ar_1은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 -NR_3R_4 이고, 바람직하게는, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-25원)헤테로아릴, 또는 -NR_3R_4 일 수 있고, 보다 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-18원)헤테로아릴, 또는 -NR_3R_4 수 있다. 이 때, R_3 및 R_4는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 인접한 치환기와 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고, 바람직하게는, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 보다 바람직하게는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴일 수 있다.

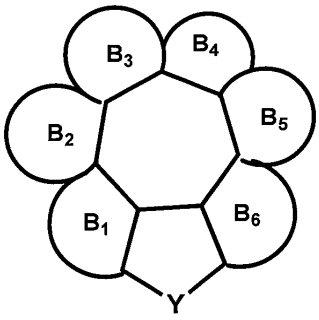
[0043] 예를 들어, Ar_1은 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 m-비페닐, 치환 또는 비치환된 p-비페닐, 치환 또는 비치환된 플루오레닐, 치환 또는 비치환된 피리미디닐, 치환 또는 비치환된 트리아지닐, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 벤조퀴녹살리닐, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 벤조퀴나졸리닐, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐, 치환 또는 비치환된 벤조푸로피리미디닐, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐, 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐, 치환 또는 비치환된 카바졸릴, 또는 디페닐아미노일 수 있다.

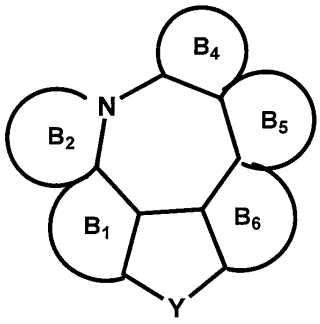
[0044] 일 예로, R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나, 인접한 치환기와 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고, 바람직하게는, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴일 수 있고, 보다 바람직하게는 치환 또는 비치환

된 (C1-C10)알킬 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴일 수 있다. 예를 들어, R_1 및 R_2는 각각 독립적으로, 메틸 또는 페닐일 수 있다.

[0045] 일 예로, X는 C 또는 N일 수 있고, 바람직하게는, X가 C일 때 화학식 1은 하기 화학식 1-1로 표시될 수 있고, X가 N일 때 화학식 1은 하기 화학식 1-2로 표시될 수 있다.

[0046] [화학식 1-1] [화학식 1-2]





[0047]

[0048] 상기 화학식 1-1 및 1-2에서,

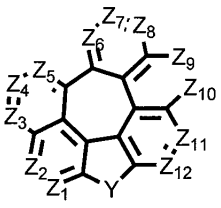
[0049] B_1 내지 B_6 및 Y는 화학식 1에서의 정의와 같다.

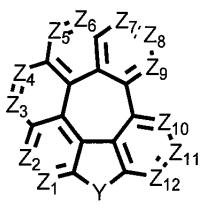
[0050] 일 예에 따른 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은, 상기 X가 C이고; 상기 B_1 내지 B_6은 각각 독립적으로 존재하지 않거나, 또는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 벤젠 고리, 치환 또는 비치환된 나프탈렌 고리, 치환 또는 비치환된 피롤 고리, 치환 또는 비치환된 퓨란 고리, 또는 치환 또는 비치환된 티오펜 고리일 수 있다.

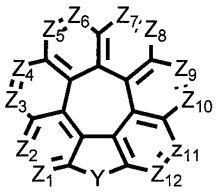
[0051] 일 예에 따른 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은, 상기 X가 N이고; 상기 B_2 또는 B_3은 존재하지 않거나, 또는 X와 융합되어 치환 또는 비치환된 피리딘 고리 또는 치환 또는 비치환된 인돌 고리를 형성할 수 있다. 일 예로, 화학식 1은 상기 X가 N이고; B_2는 존재하지 않고; B_3은 X와 융합되어 치환 또는 비치환된 피리딘 고리 또는 치환 또는 비치환된 인돌 고리를 형성하는 유기 전계 발광 화합물일 수 있다. 일 예로, 화학식 1은 상기 X가 N이고; B_3은 존재하지 않고; B_2는 X와 융합되어 치환 또는 비치환된 피리딘 고리 또는 치환 또는 비치환된 인돌 고리를 형성하는 유기 전계 발광 화합물일 수 있다.

[0052] 일 예에 따른 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 하기 화학식 2 내지 7 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0053] [화학식 2] [화학식 3] [화학식 4]

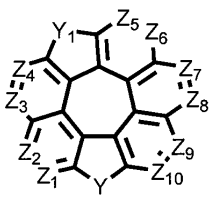


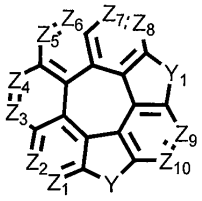


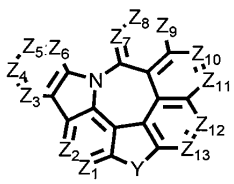


[0054]

[0055] [화학식 5] [화학식 6] [화학식 7]







[0056]

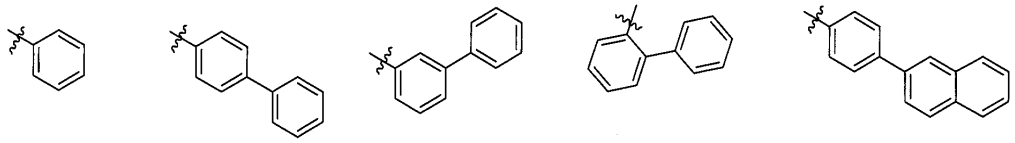
[0057] 상기 화학식 2 내지 7에서,

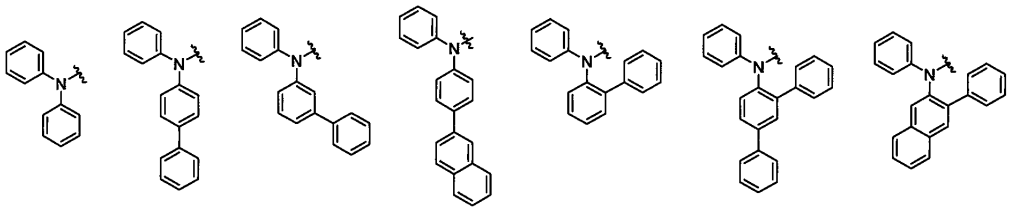
[0058] Y_1은 화학식 1에서의 Y의 정의와 같고,

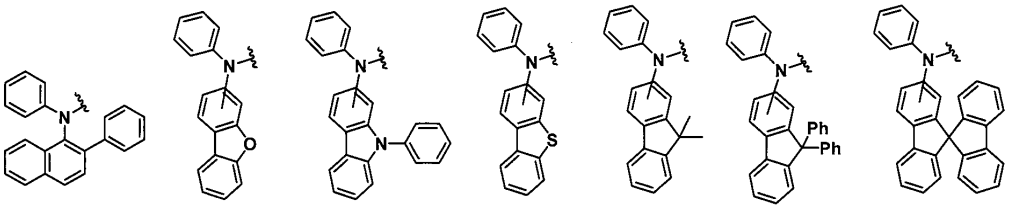
[0059] Z_1 내지 Z_{13}은 각각 독립적으로, N 또는 CR_a이고,

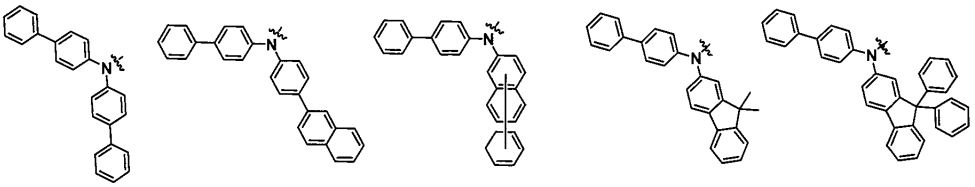
[0060] R_a는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-30)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (3-30원)헤테로아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴(3-30원)헤테로아릴아미노이거나; 서로 융합되어 고리를 형성할 수 있다.

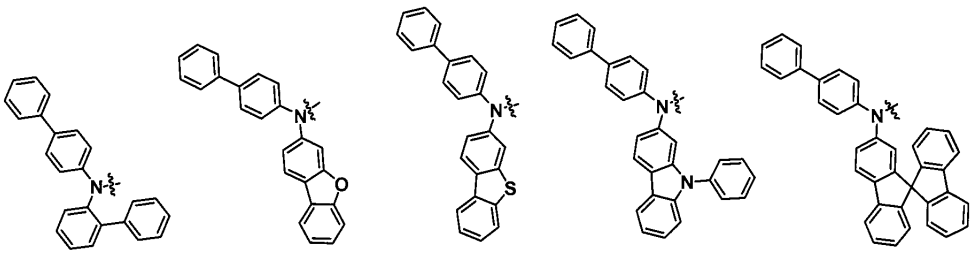
[0061] 일 예로, R_a는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴(3-30원)헤테로아릴아미노일 수 있고, 바람직하게는, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴, 치환 또는 비치환된 디(C6-C25)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 (C6-C25)아릴(5-25원)헤테로아릴아미노일 수 있고, 보다 바람직하게는, 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 치환 또는 비치환된 디(C6-C18)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴(5-18원)헤테로아릴아미노일 수 있다. 예를 들어, R_a는 하기 나열된 치환기 중 어느 하나에서 선택될 수 있다.

[0062] 

[0063] 

[0064] 

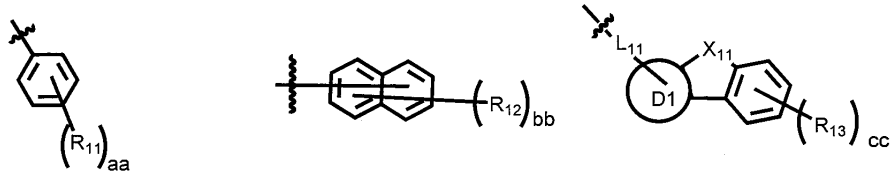
[0065] 

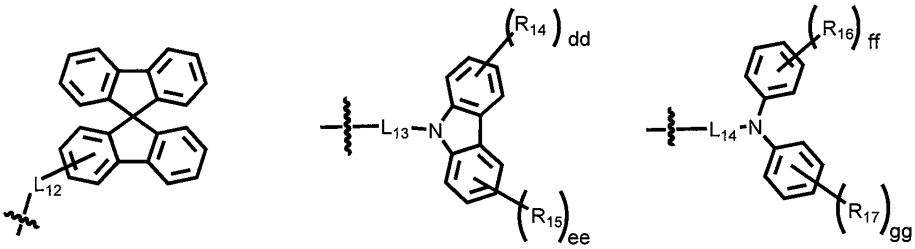
[0066] 

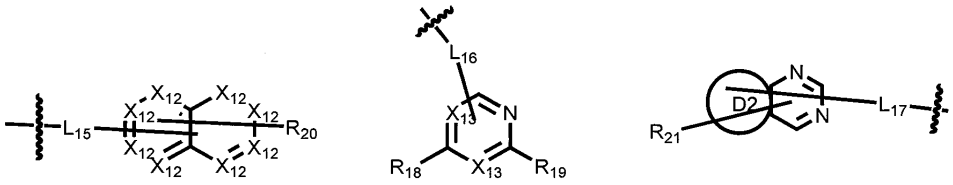
[0067] 일 예에 따른 Ar_1, R_1 내지 R_4, 및 R_a는 각각 독립적으로, 하기 그룹 1에 나열된 치환기 중 어느 하나에서 선택

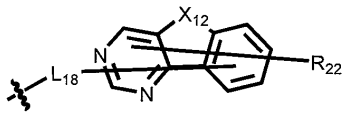
될 수 있다.

[0068] [그룹 1]

[0069] 

[0070] 

[0071] 

[0072] 

[0073] 상기 그룹 1에서,

[0074] D1 및 D2는 각각 독립적으로, 벤젠 고리 또는 나프탈렌 고리이고;

[0075] X_{11}은 O, S, NR_{11}, 또는 $CR_{12}R_{13}$이고;

[0076] X_{12}는 각각 독립적으로, CR_{31} 또는 N 이고, 단 X_{12} 중 적어도 하나는 N이며;

[0077] X_{13}은 각각 독립적으로, CR_{32} 또는 N이고;

[0078] L_{11} 내지 L_{18}은 각각 독립적으로, 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴렌이고;

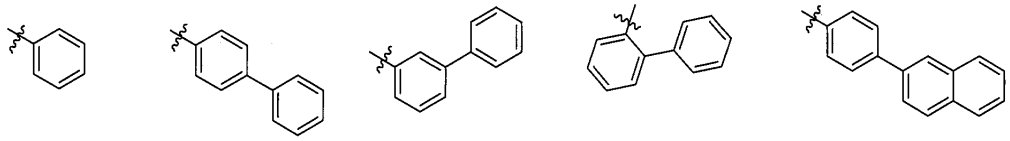
[0079] R_{11} 내지 R_{22}, R_{31}, 및 R_{32}는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (3-30원)헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나; 인접한 치환기와 연결되어 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있으며;

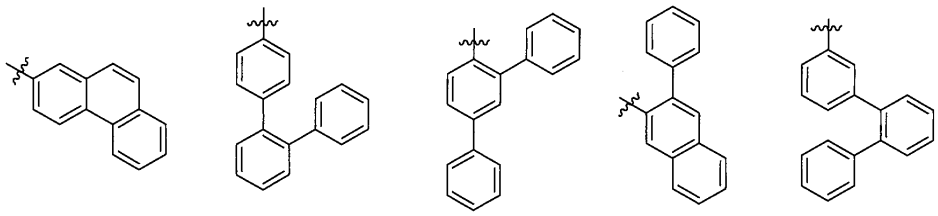
[0080] aa, ff, 및 gg는 각각 독립적으로, 1 내지 5의 정수이고, bb는 1 내지 7의 정수이며, cc 내지 ee는 각각 독립적으로, 1 내지 4의 정수이고;

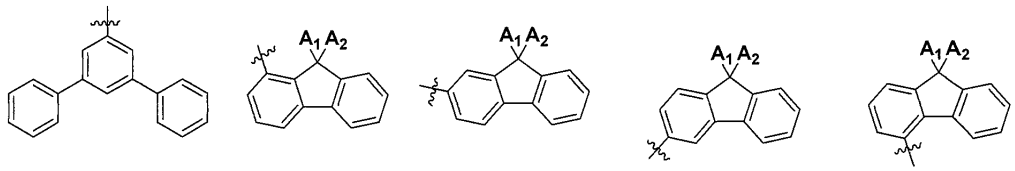
[0081] 상기 aa 내지 gg가 2 이상의 정수인 경우, 각각의 R_{11} 내지 R_{17}은 동일하거나 상이할 수 있다.

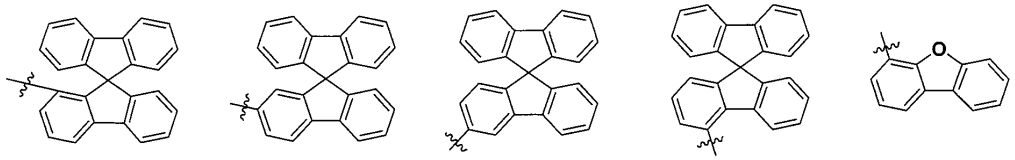
[0082] 일 예에 따른 Ar_1, R_1 내지 R_4, 및 R_a는 각각 독립적으로, 하기 그룹 2에 나열된 치환기 중 어느 하나에서 선택될 수 있다.

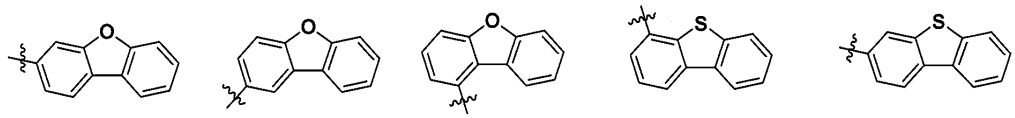
[0083] [그룹 2]

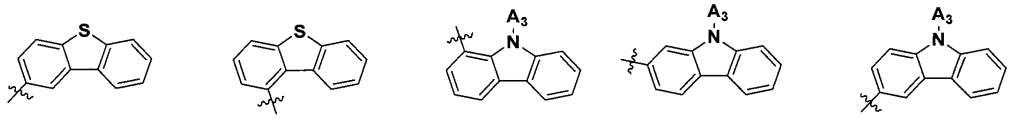
[0084] 

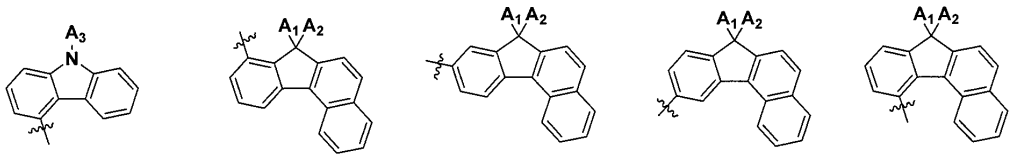
[0085] 

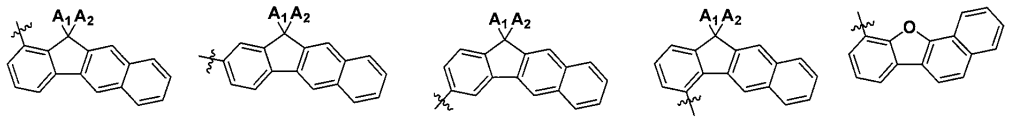
[0086] 

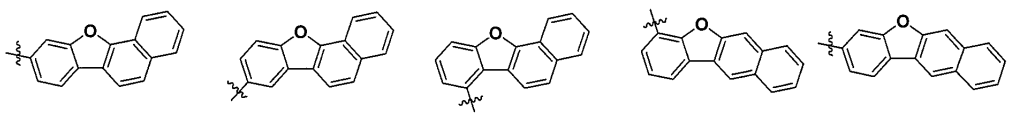
[0087] 

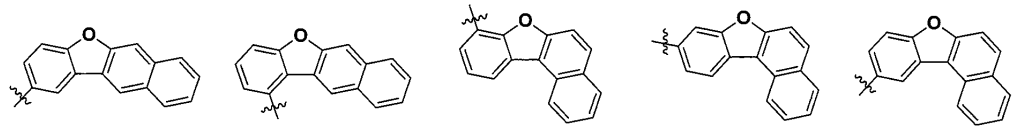
[0088] 

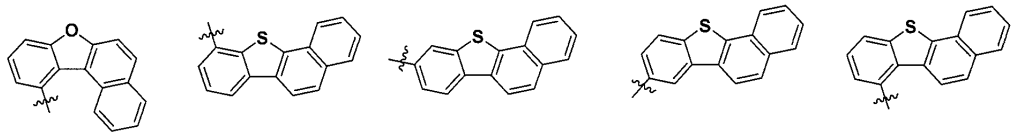
[0089] 

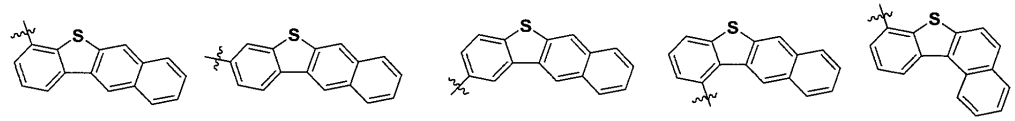
[0090] 

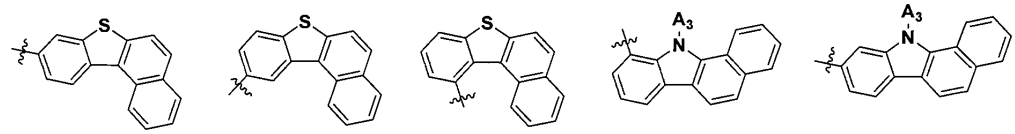
[0091] 

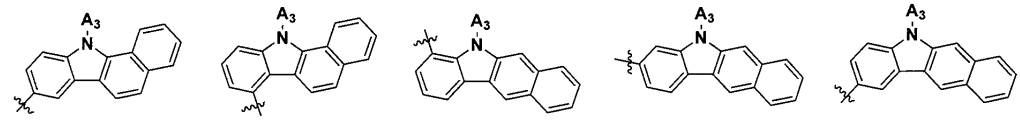
[0092] 

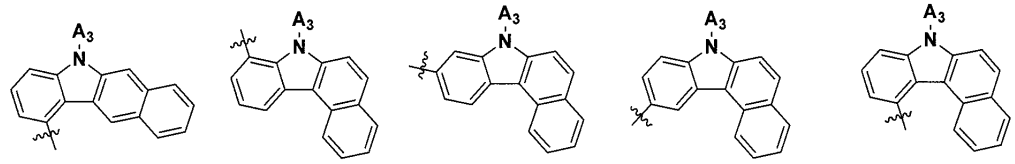
[0093] 

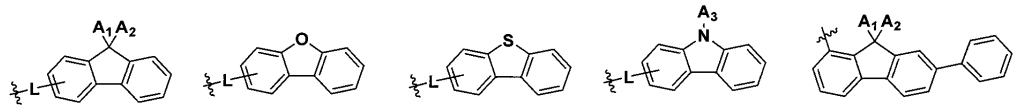
[0094] 

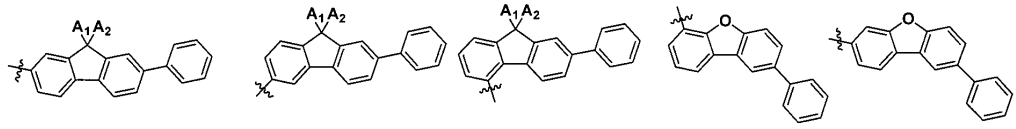
[0095] 

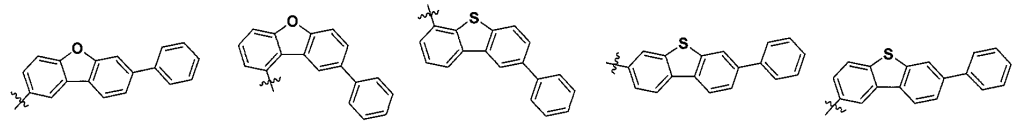
[0096] 

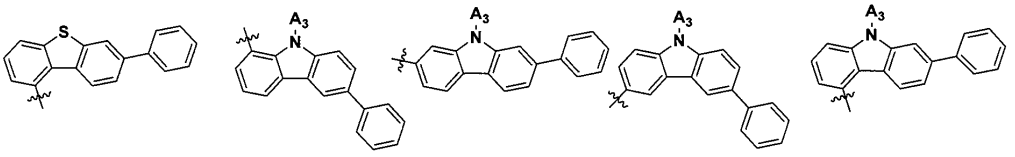
[0097] 

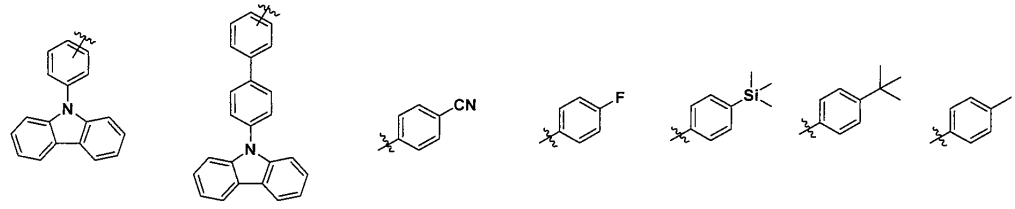
[0098] 

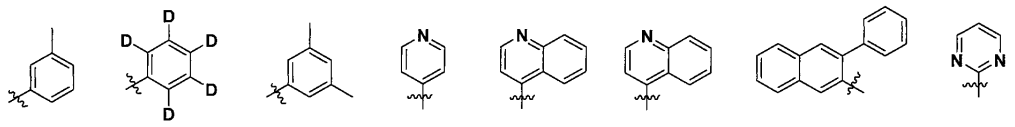
[0099] 

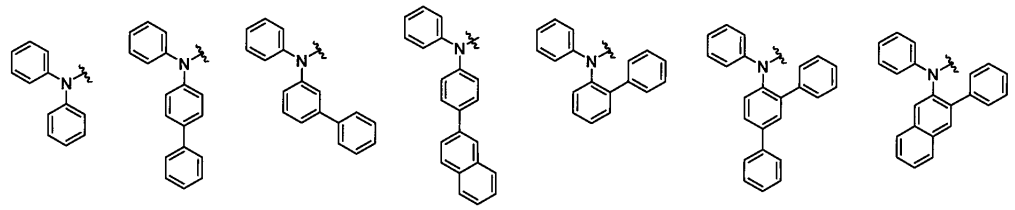
[0100] 

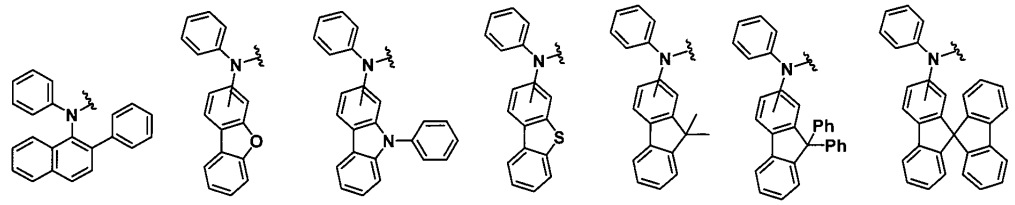
[0101] 

[0102] 

[0103] 

[0104] 

[0105] 

[0106] 

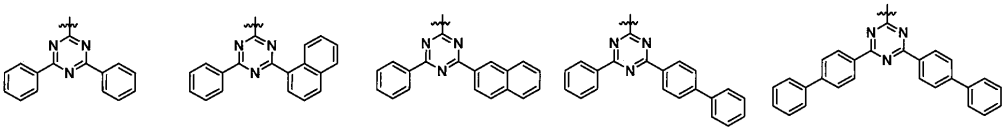
[0107] 상기 그룹 2에서,

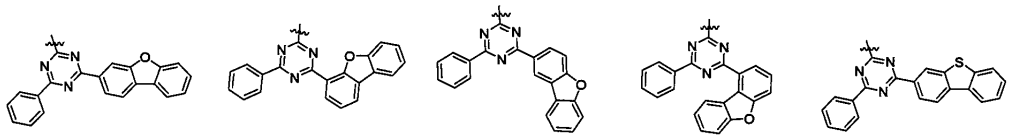
[0108] L은 화학식 1에서의 L_1의 정의와 같고,

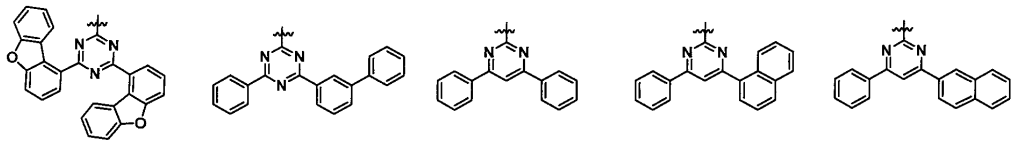
[0109] A_1 내지 A_3은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이다.

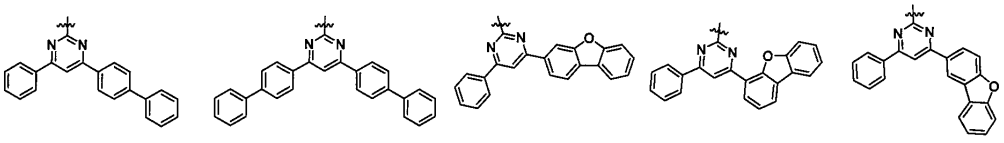
[0110] 또 다른 일 예에 따른 Ar_1, R_1 내지 R_4, 및 R_a는 각각 독립적으로, 하기 그룹 3에 나열된 치환기 중 어느 하나에서 선택될 수 있다.

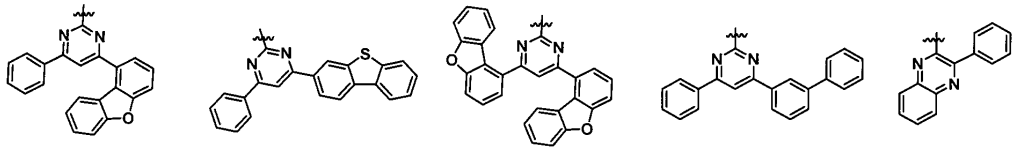
[0111] [그룹 3]

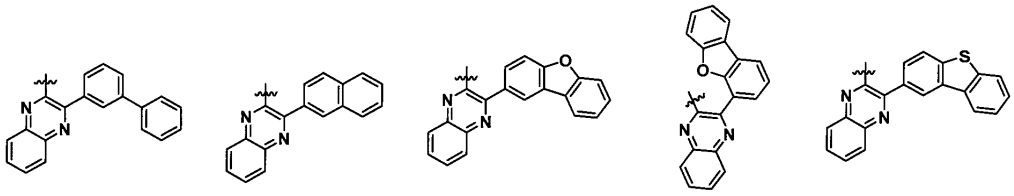
[0112] 

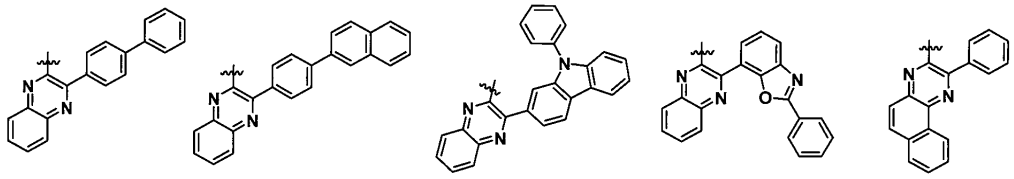
[0113] 

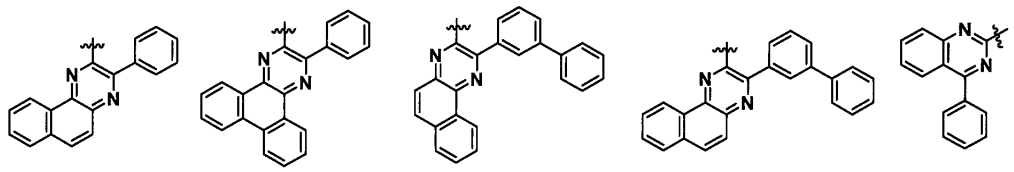
[0114] 

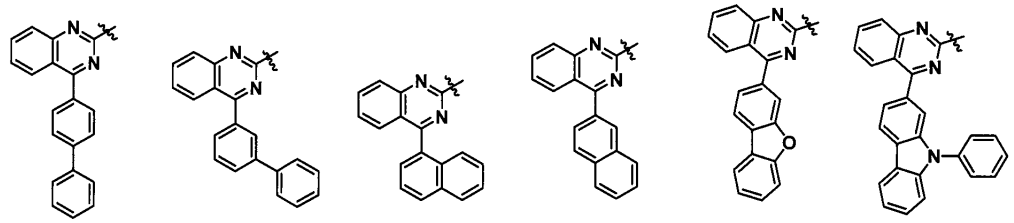
[0115] 

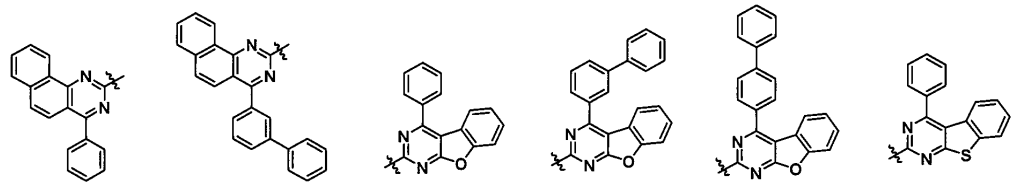
[0116] 

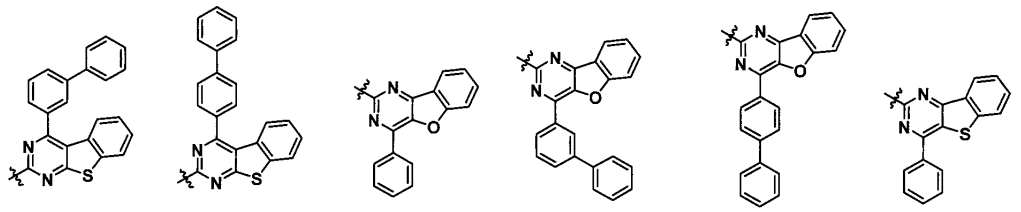
[0117] 

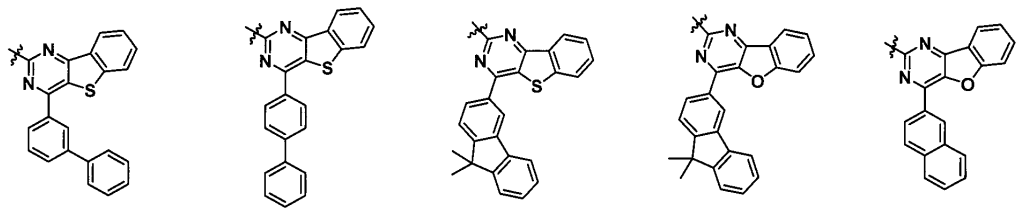
[0118] 

[0119] 

[0120] 

[0121] 

[0122] 

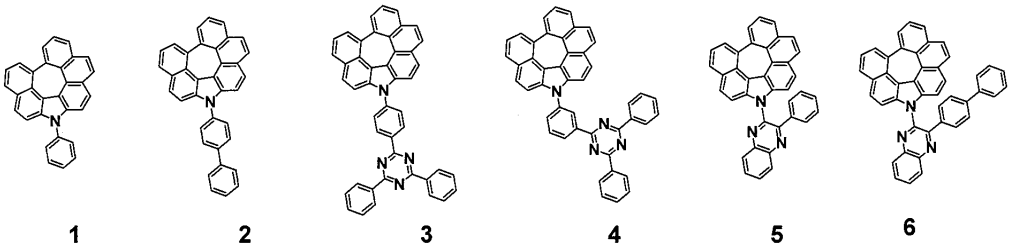
[0123] 

[0124] 일 예로, Ar_1, L_1, R_1 내지 R_4, 및 R_a에서 치환된 (C1-C30)알킬(렌), 치환된 (C6-C30)아릴(렌), 치환된 (3-30 원)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)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 치환된 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, 치환된 모노- 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, 치환된 (C1-C30)알킬(C6-30)아릴아미노, 및 치환된 고리의 치환기(체)는 각각 독립적으로, 중수소, 할로겐, 시아노, 카르복실, 니트로, 히드록시, (C1-C30)알킬, 할로(C1-C30)알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (3-30 원)헤테로아릴,

(3-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, 모노- 또는 디- (C1-C30)알킬아미노, (C1-C30)알킬로 치환 또는 비치환된 모노- 또는 디- (C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상일 수 있다. 바람직하게는 상기 치환기(체)는 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, 또는 (3-30원)헤테로아릴일 수 있고, 보다 바람직하게는 (C1-C10)알킬, (C6-C25)아릴, 또는 (5-25원)헤테로아릴일 수 있다. 예를 들어, 상기 치환기(체)는 메틸, 페닐, m-비페닐, p-비페닐, 나프틸, 플루오레닐, 피리디닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오페닐, 카바졸릴, 또는 벤조옥사졸릴 등일 수 있다.

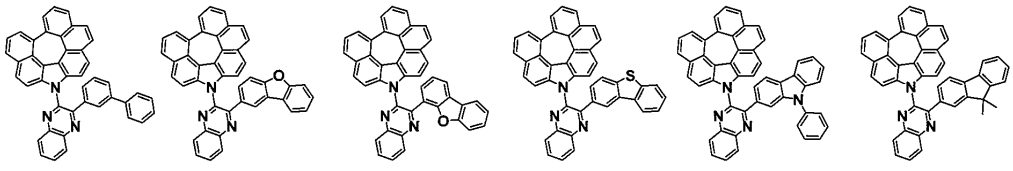
[0125] 일 예에 따르면, 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[0126]



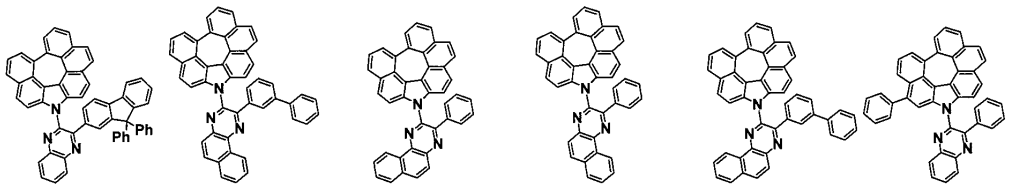
1 2 3 4 5 6

[0127]



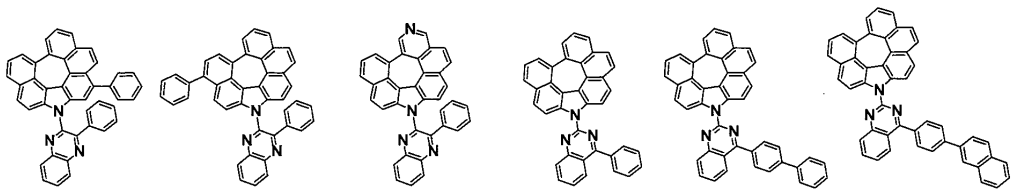
7 8 9 10 11 12

[0128]



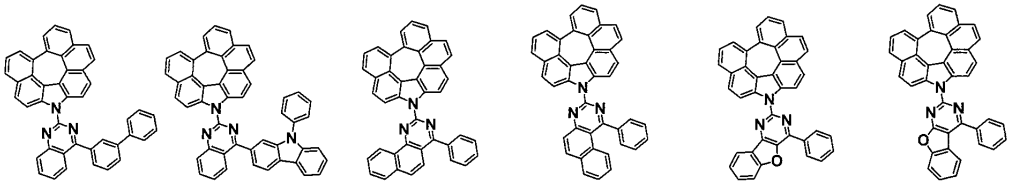
13 14 15 16 17 18

[0129]

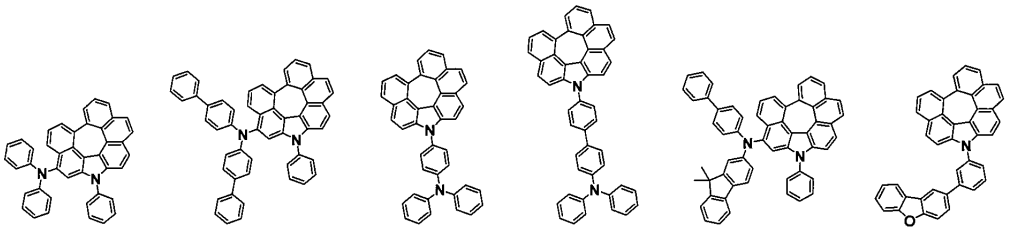


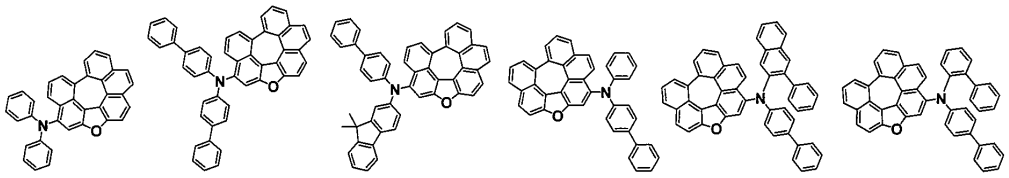
19 20 21 22 23 24

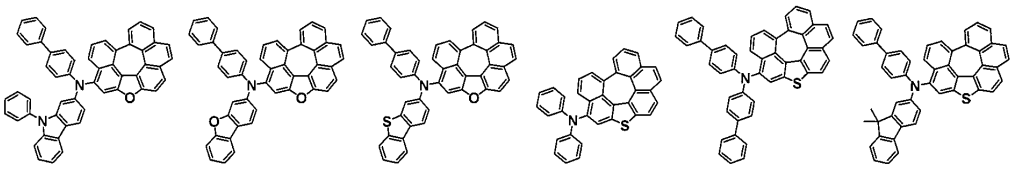
[0130]

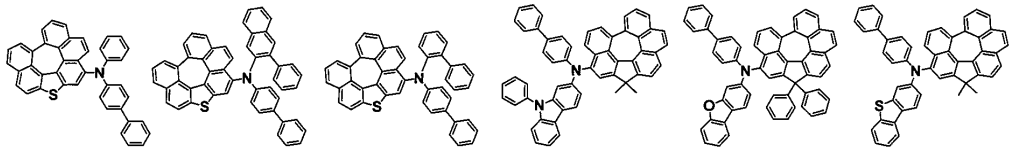


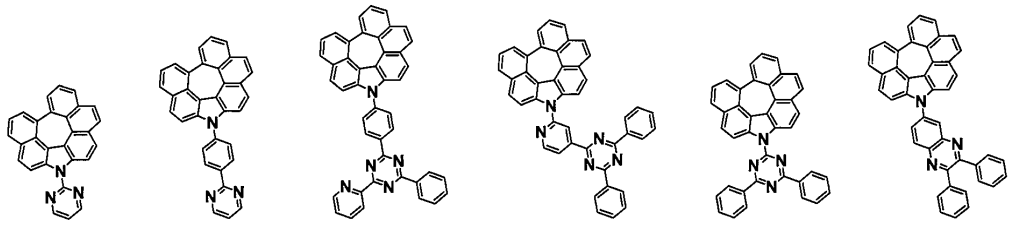
25 26 27 28 29 30

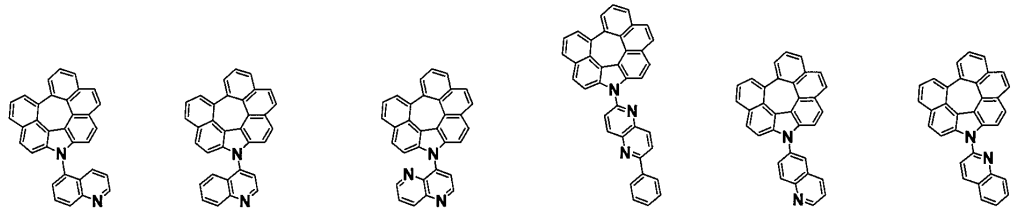
[0131] 
31 32 33 34 35 36

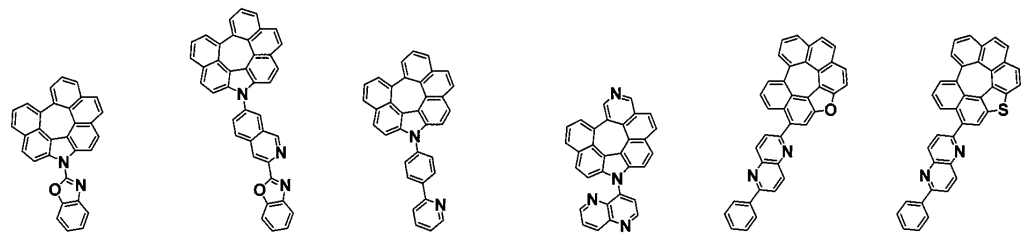
[0132] 
37 38 39 40 41 42

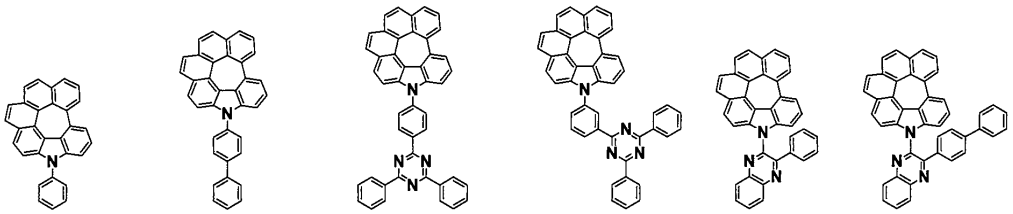
[0133] 
43 44 45 46 47 48

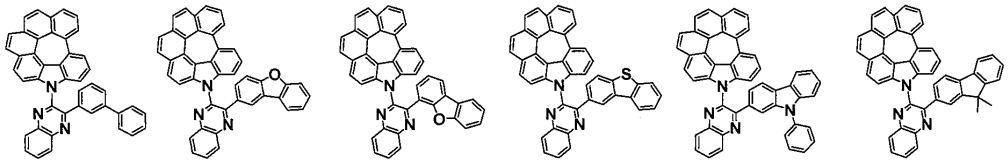
[0134] 
49 50 51 52 53 54

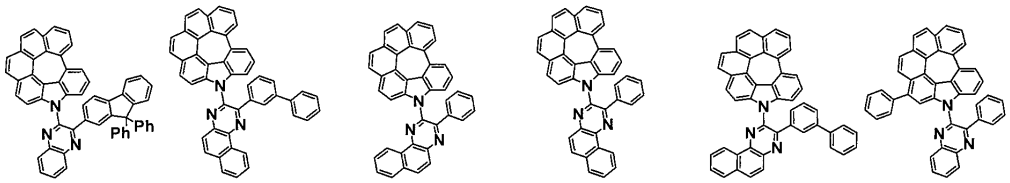
[0135] 
55 56 57 58 59 60

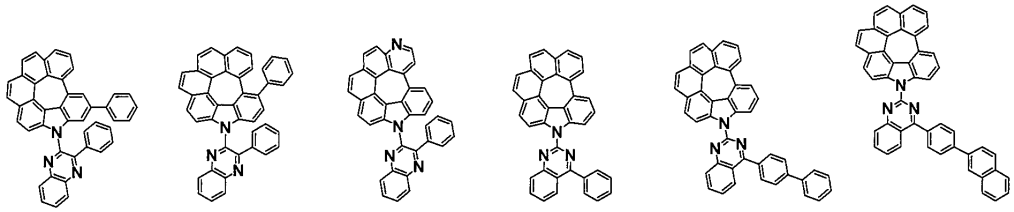
[0136] 
61 62 63 64 65 66

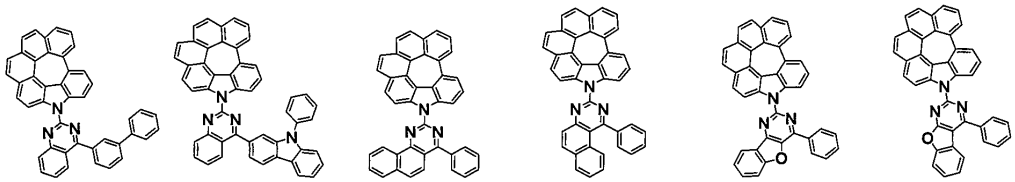
[0137] 
67 68 69 70 71 72

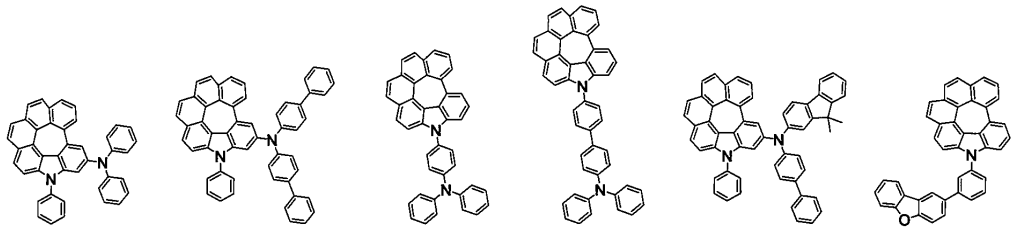
[0138] 
73 74 75 76 77 78

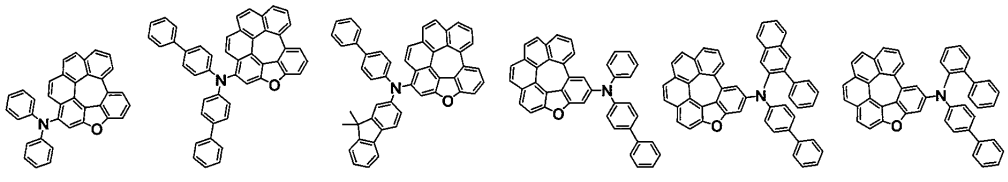
[0139] 
79 80 81 82 83 84

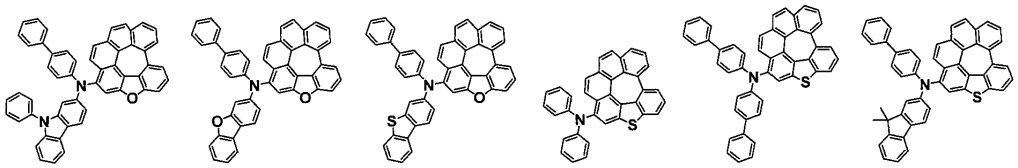
[0140] 
85 86 87 88 89 90

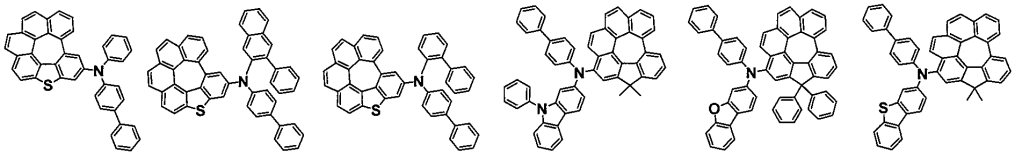
[0141] 
91 92 93 94 95 96

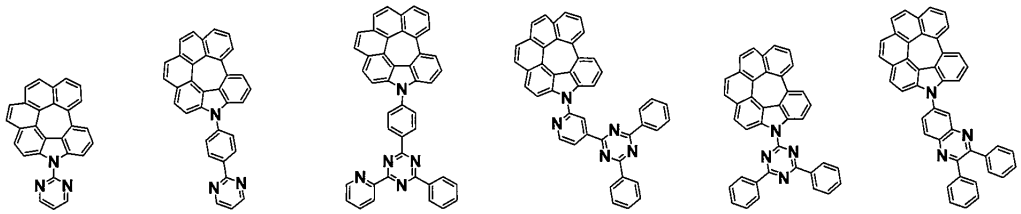
[0142] 
97 98 99 100 101 102

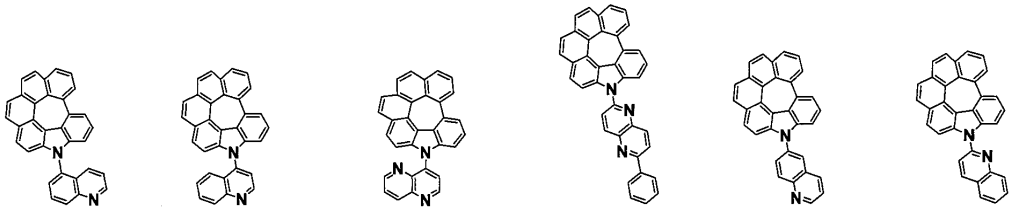
[0143] 
103 104 105 106 107 108

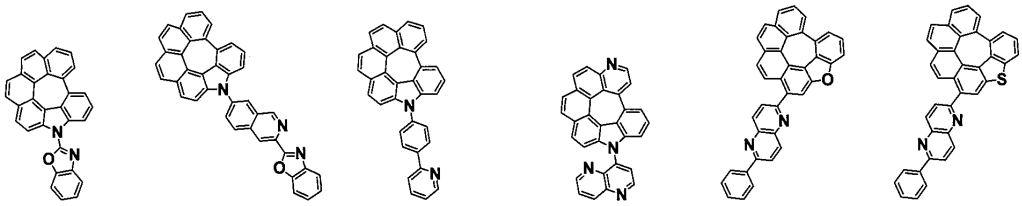
[0144] 
109 110 111 112 113 114

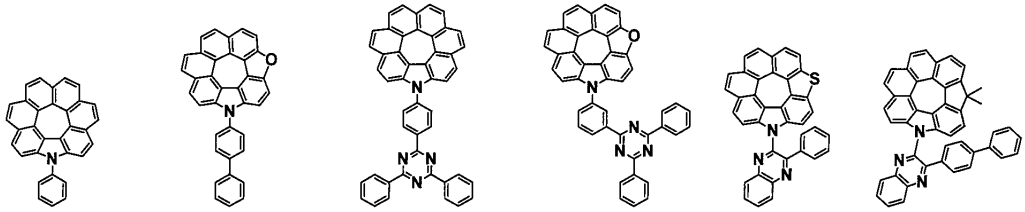
[0145] 
115 116 117 118 119 120

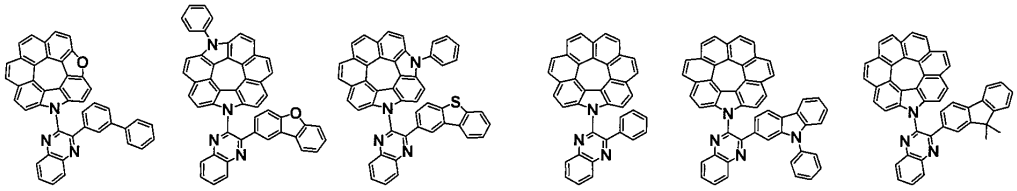
[0146] 
121 122 123 124 125 126

[0147] 
127 128 129 130 131 132

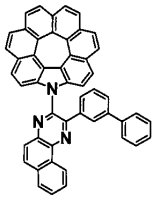
[0148] 
133 134 135 136 137 138

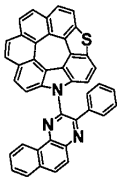
[0149] 
139 140 141 142 143 144

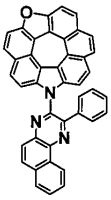
[0150] 
145 146 147 148 149 150

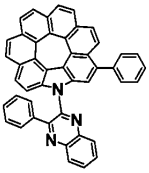
[0151] 
151 152 153 154 155 156

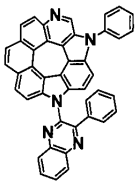
[0152]

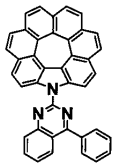

157


158

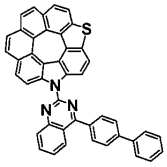

159

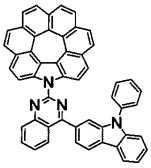

160

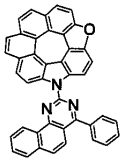

161

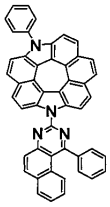

162

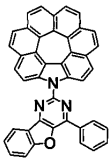
[0153]

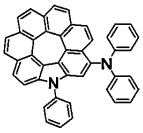

163


164

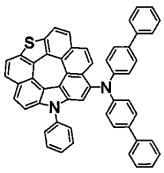

165

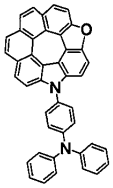

166

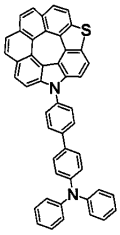

167

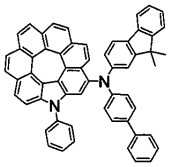

168

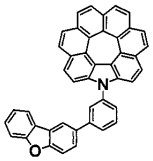
[0154]

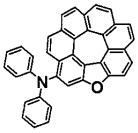

169


170

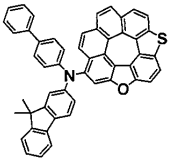

171

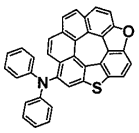

172

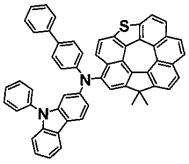

173

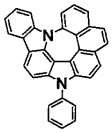

174

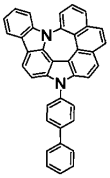
[0155]

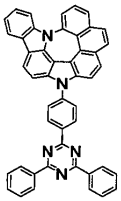

175


176

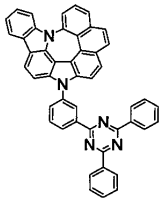

177

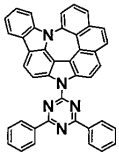

178

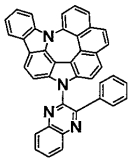

179

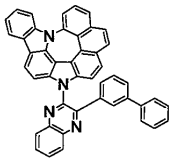

180

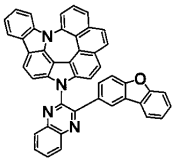
[0156]

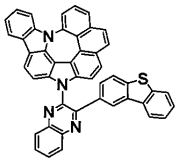

181


182

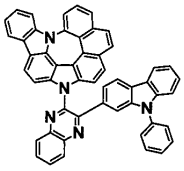

183

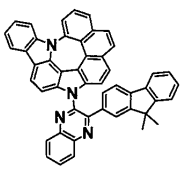

184

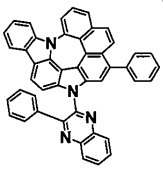

185

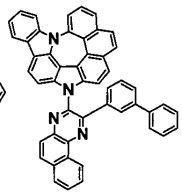

186

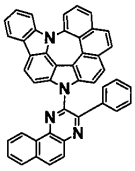
[0157]

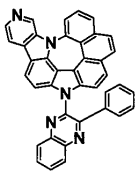

187


188

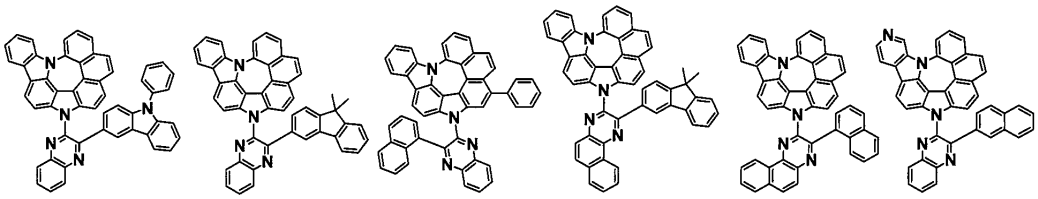

189


190


191

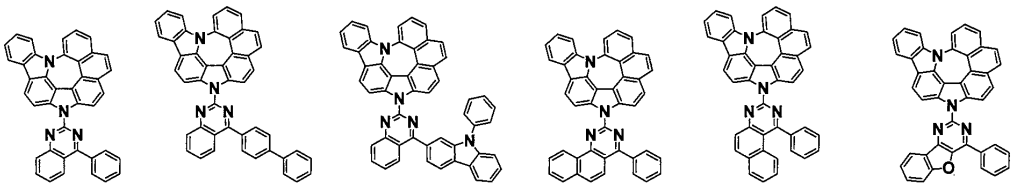

192

[0158]



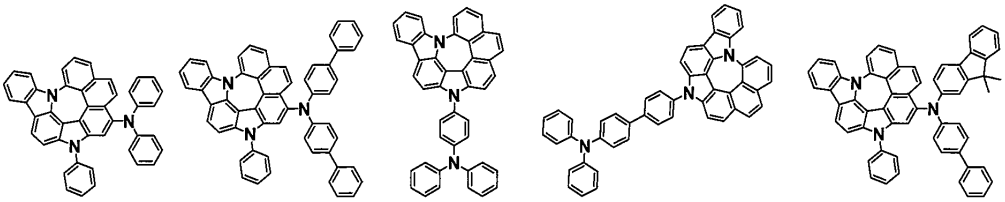
193 194 195 196 197 198

[0159]



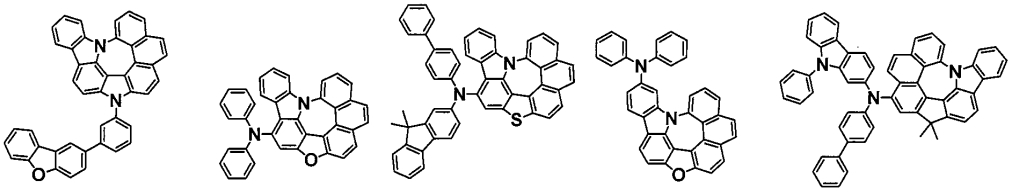
199 200 201 202 203 204

[0160]



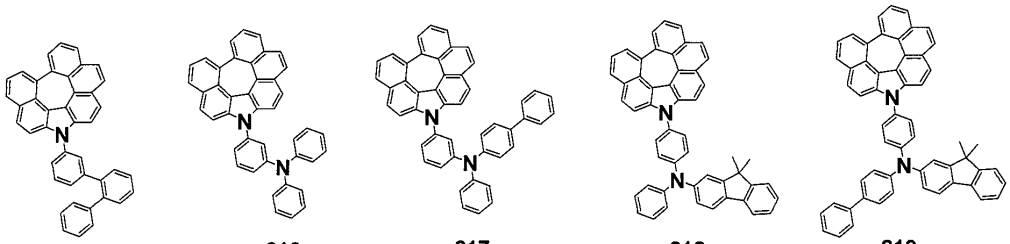
205 206 207 208 209

[0161]



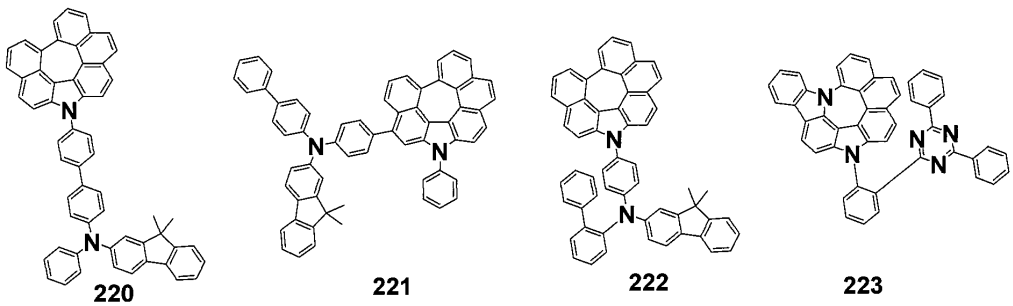
210 211 212 213 214

[0162]



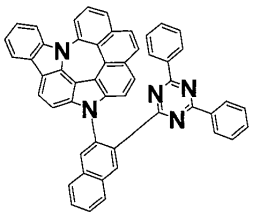
215 216 217 218 219

[0163]

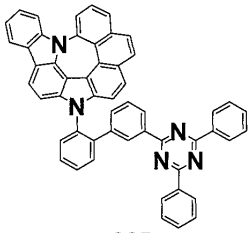


220 221 222 223

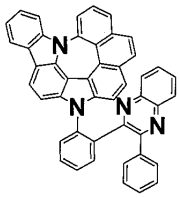
[0164]



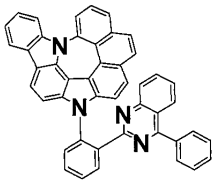
224



225

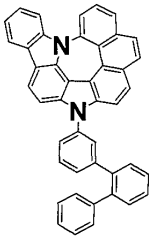


226

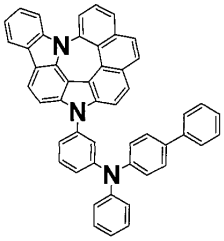


227

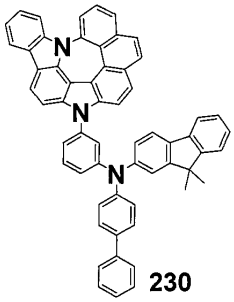
[0165]



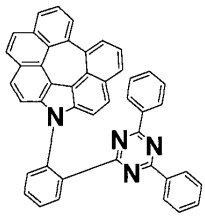
228



229

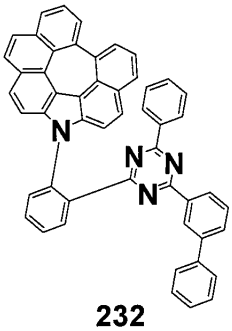


230

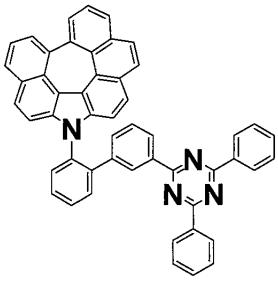


231

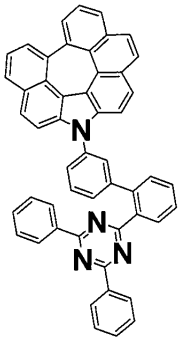
[0166]



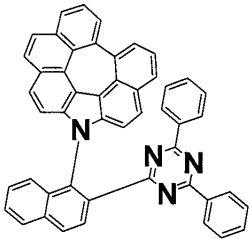
232



233

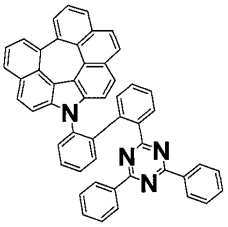


234

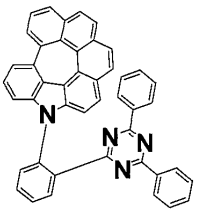


235

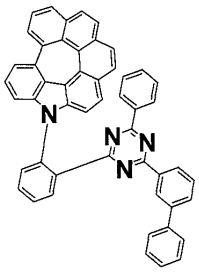
[0167]



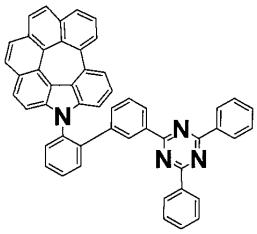
236



237

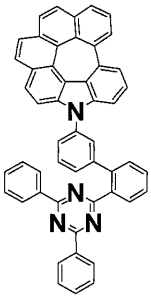


238

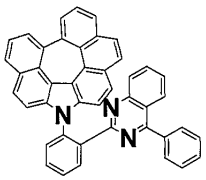


239

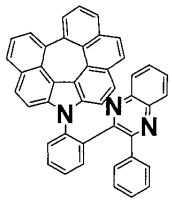
[0168]



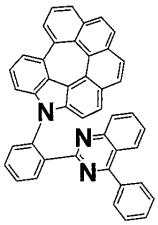
240



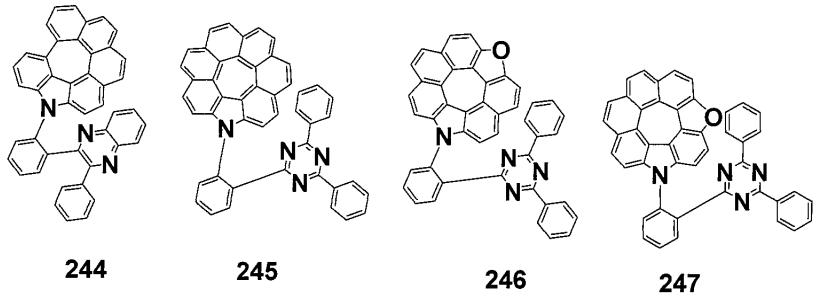
241

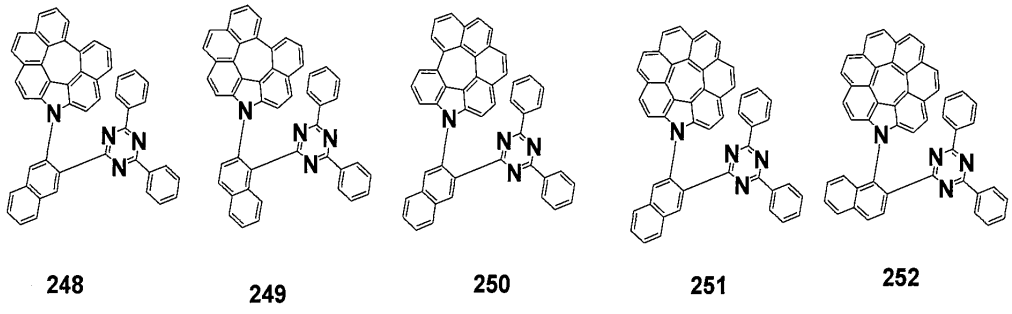


242



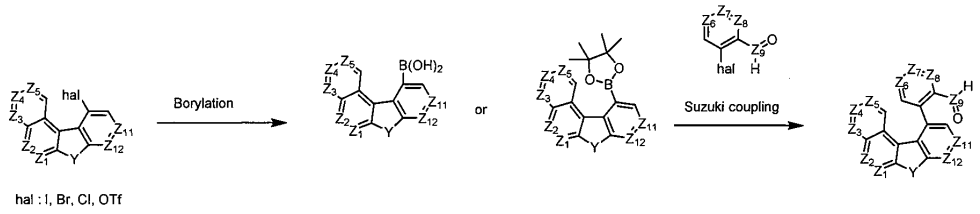
243

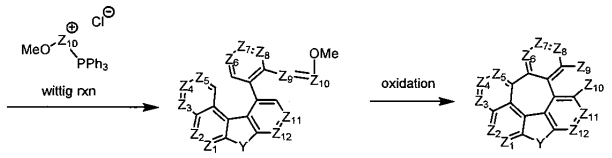
[0169] 

[0170] 

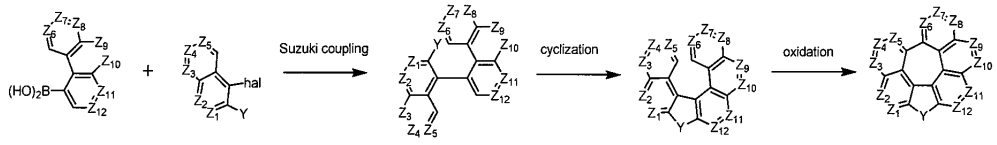
[0171] 본원에 따른 화학식 1의 화합물은 하기 반응식 1 내지 6 에 나타난 바와 같이 제조될 수 있으나, 이에 한정되지 않으며, 당업자에게 공지된 합성 방법으로도 제조될 수 있다.

[0172] [반응식 1]

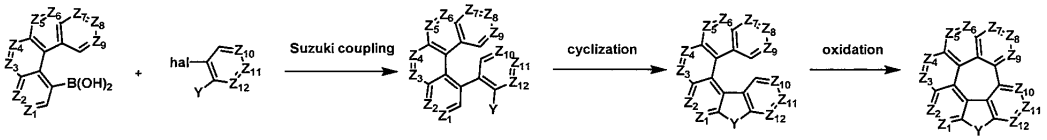
[0173] 

[0174] 

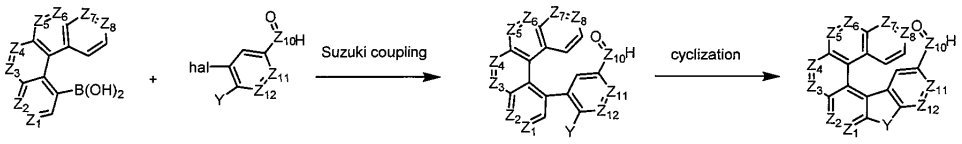
[0175] [반응식 2]

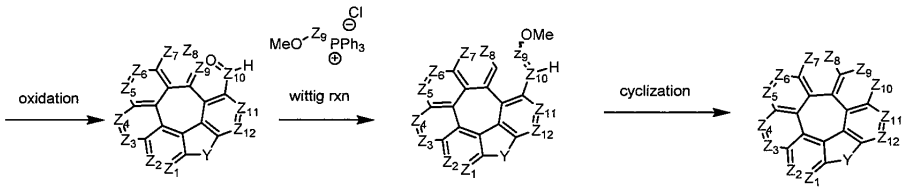
[0176] 

[0177] [반응식 3]

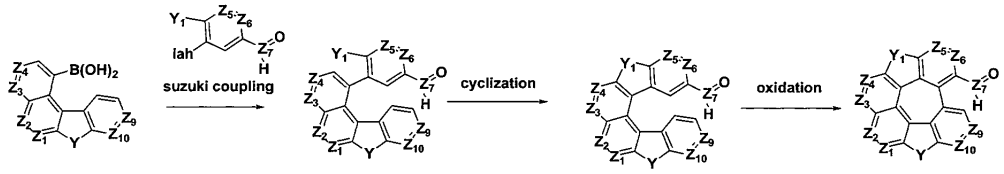
[0178] 

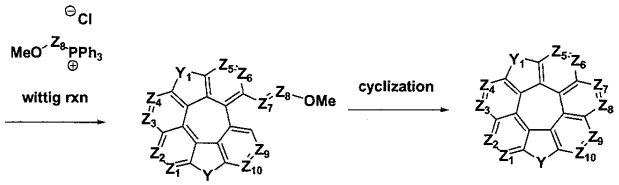
[0179] [반응식 4]

[0180] 

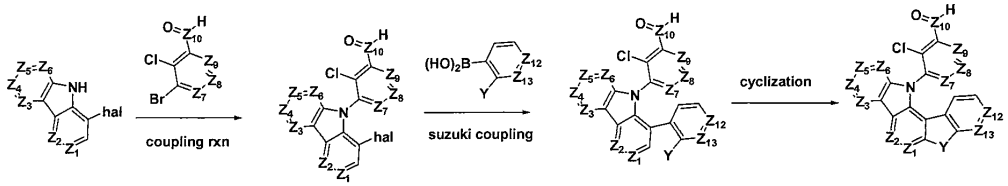
[0181] 

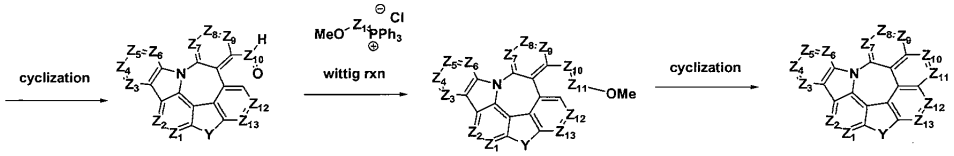
[0182] [반응식 5]

[0183] 

[0184] 

[0185] [반응식 6]

[0186] 

[0187] 

[0188] 상기 반응식 1 내지 6에서, Y 및 Z_1 내지 Z_{13}은 화학식 2 내지 7에서의 정의와 같다.

[0189] 상기와 같이 일 예에 따른 화학식 2 내지 7로 표시될 수 있는 화합물의 예시적 합성예를 설명하였지만, 이들은 모두 Wittig 반응, Suzuki cross-coupling 반응, Ullmann-coupling 반응, Buchwald-Hartwig cross coupling 반응, N-arylation 반응, H-mont-mediated etherification 반응, Miyaura borylation 반응, Intramolecular acid-induced cyclization 반응, Pd(II)-catalyzed oxidative cyclization 반응, Grignard 반응, Heck reaction, Cyclic Dehydration 반응, SN_1 치환 반응, SN_2 치환 반응, 및 Phosphine-mediated reductive cyclization 반응 등에 기초한 것으로 구체적 합성예에 명시된 치환기 이외에 화학식 2 내지 7에 정의된 다른 치환기가 결합되더라도 상기 반응이 진행된다는 것을 당업자라면 쉽게 이해할 수 있을 것이다.

[0190] 이하, 전술한 유기 전계 발광 화합물을 적용한 유기 전계 발광 소자에 대해 설명한다.

[0191] 본원은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료, 및 상기 유기 전계 발광 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다.

[0192] 상기 유기 전계 발광 재료는 본원의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0193] 일 예에 따른 유기 전계 발광 재료는 백색 유기 전계 발광 소자(White Organic Light Emitting Device)를 위한 유기 전계 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(stacking) 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.

[0194] 일 예에 따른 유기 전계 발광 재료는 상기 화학식 1로 표시되는 1종 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1의 화합물은 발광층에 포함될 수 있으며, 발광층에 포함되는 경우 화학식 1의 화합물은 호스트로 포함될 수 있다.

[0195] 일 구현예에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 포함한다.

[0196] 일 예에 따르면, 상기 유기물층은 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 발광층을 포함한다. 발광층은 예컨대 본원의 유기 전계 발광 화합물을 단독으로 포함하거나 유기 전계 발광 화합물 중 적어도 2종을 혼합하여 포함할 수도 있으며, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

[0197] 또한, 상기 유기물층은 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 추가로 포함할 수 있으며, 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 추가로 더 포함할 수도 있다.

[0198] 상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 양극(애노드)이고 다른 하나는 음극(캐소드)일 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, 배면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층 외에, 정공 주입층, 정공 전달층, 정공 보조층, 발광 보조층, 전자 전달층, 전자 주입층, 계면층(interlayer), 정공 차단층, 전자 차단층 및 전자 버퍼층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

[0199] 양극과 발광층 사이에 정공 주입층, 정공 전달층, 전자 차단층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 정공 주입층은 양극에서 정공 전달층 또는 전자 차단층으로의 정공 주입 장벽(또는 정공 주입 전압)을 낮출 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 또한 상기 정공 주입층은 p-도판트로 도핑될 수 있다. 전자 차단층은 정공 전달층(또는 정공 주입층)과 발광층 사이에 위치하고, 발광층으로부터의 전자의 오버플로우를 차단하여 엑시톤을 발광층 내에 가두어 발광 누수를 방지할 수 있다. 정공 전달층 또는 전자 차단층은 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다.

[0200] 발광층과 음극 사이에 전자 버퍼층, 정공 차단층, 전자 전달층, 전자 주입층, 또는 이들의 조합이 사용될 수 있다. 전자 버퍼층은 전자주입을 조절하고 발광층과 전자 주입층 사이의 계면 특성을 향상시킬 목적으로 복수의 층이 사용될 수 있으며, 각 층은 2개의 화합물이 동시에 사용될 수 있다. 정공 차단층 또는 전자 전달층도 복수의 층이 사용될 수 있고, 각 층에 복수의 화합물이 사용될 수 있다. 또한, 상기 전자 주입층은 n-도판트로 도핑될 수 있다.

[0201] 상기 발광 보조층은 양극과 발광층 사이에 위치하거나, 음극과 발광층 사이에 위치하는 층으로서, 발광 보조층이 상기 양극과 발광층 사이에 위치할 경우, 정공의 주입 및/또는 전달을 원활하게 하거나 전자의 오버플로우를 차단하는 용도로 사용될 수 있고, 발광 보조층이 음극과 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. 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.

[0202] 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측 표면에, 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 구동 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 SiO_X ($1 \leq X \leq 2$), AlO_X ($1 \leq X \leq 1.5$), SiON, SiAlON 등이 있고, 할로겐화 금속의 바람직한 예로는 LiF, MgF_2, CaF_2, 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O, Li_2O, MgO, SrO, BaO, CaO 등이 있다.

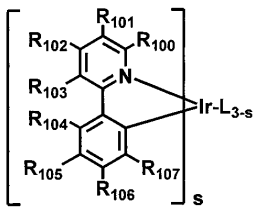
[0203] 또한, 본원의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 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 발광 소자를 제조할 수 있다.

[0204] 본원의 유기 전계 발광 소자에는 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외에 하나 이상의 호스트 화합물을 포함할 수 있다. 바람직하게는, 상기 발광층은 하나 이상의 도판트를 추가로 더 포함할 수 있다.

[0205] 본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로는 하나 이상의 인광 또는 형광 도판트를 사용할 수 있고, 인광 도판트가 바람직하다. 본원의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물일 수 있고, 경우에 따라 바람직하게는, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물일 수 있으며, 경우에 따라 더 바람직하게는, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물일 수 있다.

[0206] 본원의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로 하기 화학식 101로 표시되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

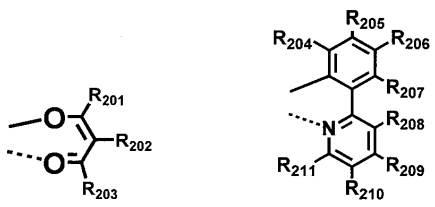
[0207] [화학식 101]

[0208] 

[0209] 상기 화학식 101에서,

[0210] L은 하기 구조 1 또는 2에서 선택되고;

[0211] [구조 1] [구조 2]

[0212] 

[0213] R_{100} 내지 R_{103}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 헤테로아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이거나; R_{100} 내지 R_{103}은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조푸로피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조

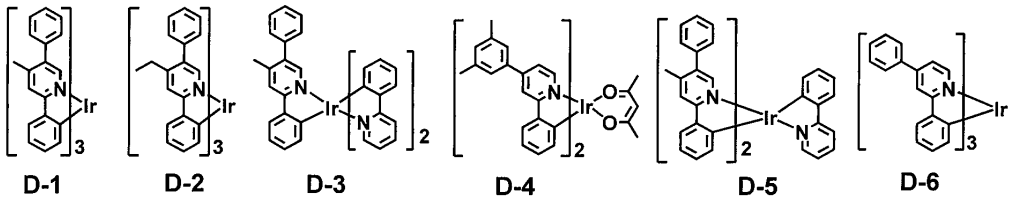
푸로퀴놀린, 치환 또는 비치환된 벤조티에노퀴놀린, 또는 치환 또는 비치환된 인데노퀴놀린 형성이 가능하며;

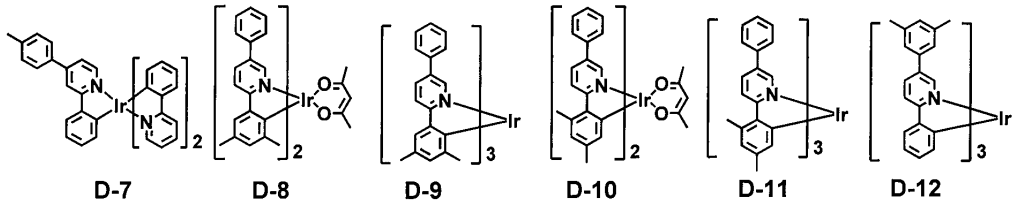
[0214] R_{104} 내지 R_{107}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴, 시아노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시이거나; R_{104} 내지 R_{107}은 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있고, 예를 들면 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 플루오렌, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란, 치환 또는 비치환된 인데노피리딘, 치환 또는 비치환된 벤조푸로피리딘, 또는 치환 또는 비치환된 벤조티에노피리딘 형성이 가능하며;

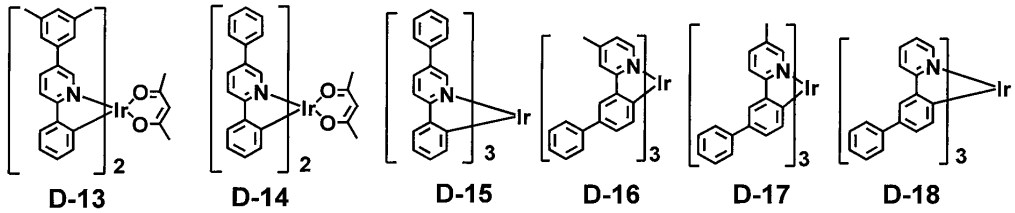
[0215] R_{201} 내지 R_{211}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 할로겐으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이거나; 인접 치환기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 융합고리를 형성할 수 있으며;

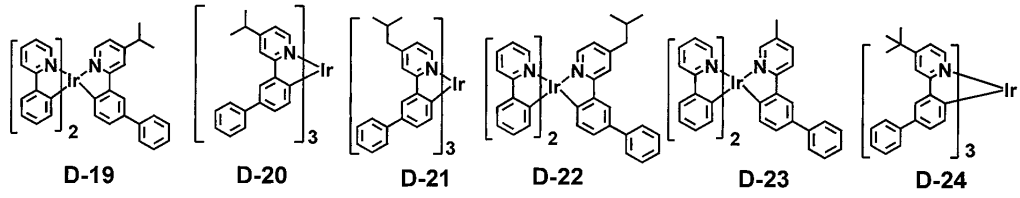
[0216] s는 1 내지 3의 정수이다.

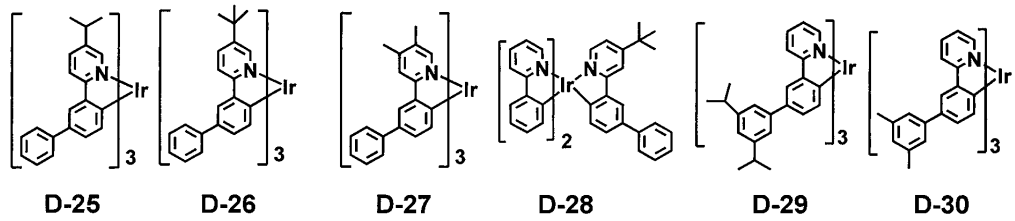
[0217] 구체적으로, 상기 도판트 화합물의 구체적인 예는 다음과 같으나, 이에 한정되지는 않는다.

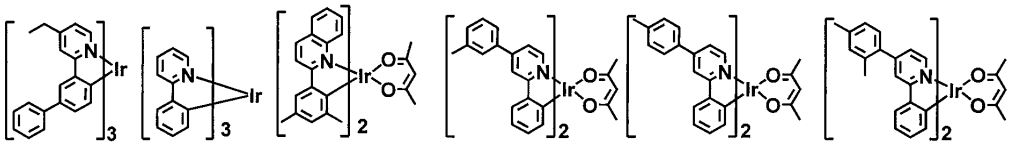
[0218] 

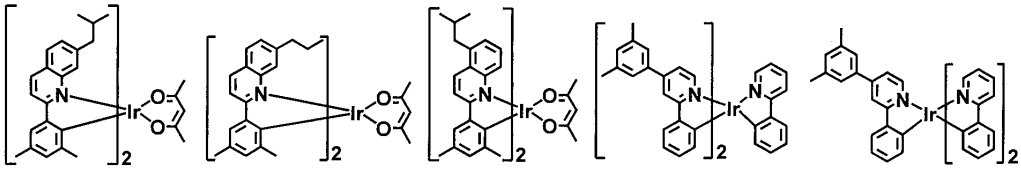
[0219] 

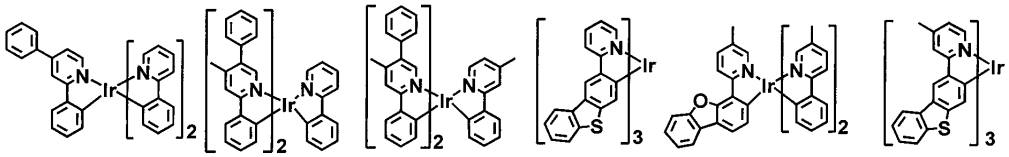
[0220] 

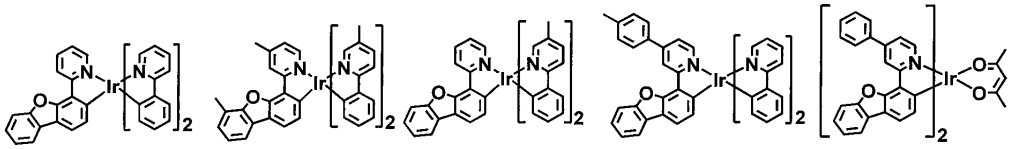
[0221] 

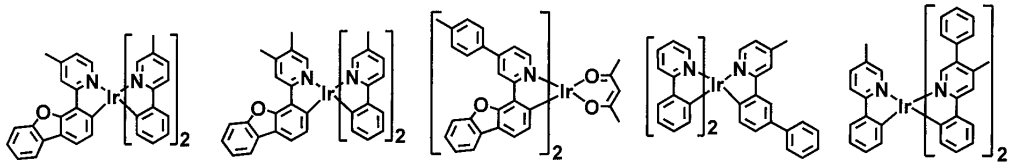
[0222] 

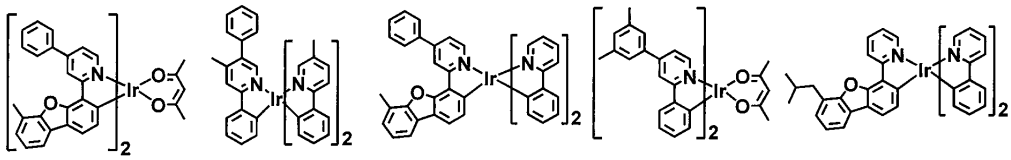
[0223] 
D-31 D-32 D-33 D-34 D-35 D-36

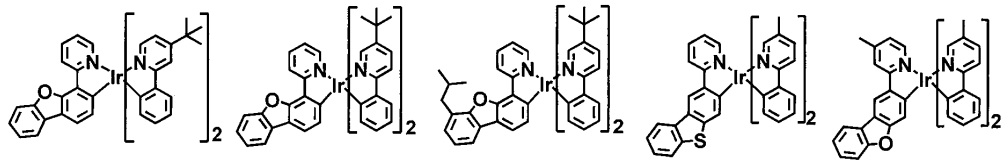
[0224] 
D-37 D-38 D-39 D-40 D-41

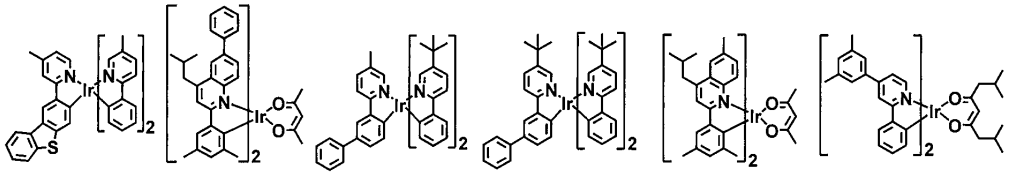
[0225] 
D-42 D-43 D-44 D-45 D-46 D-47

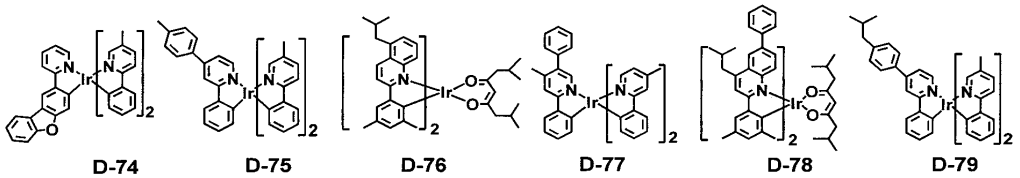
[0226] 
D-48 D-49 D-50 D-51 D-52

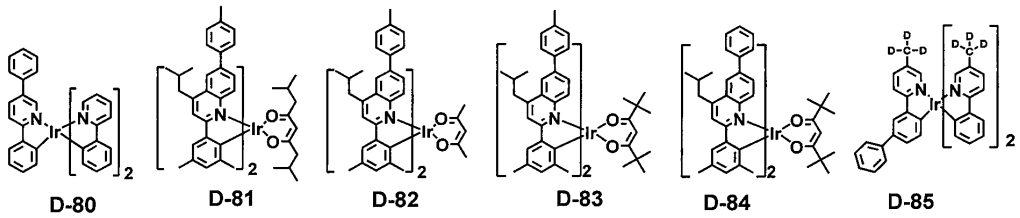
[0227] 
D-53 D-54 D-55 D-56 D-57

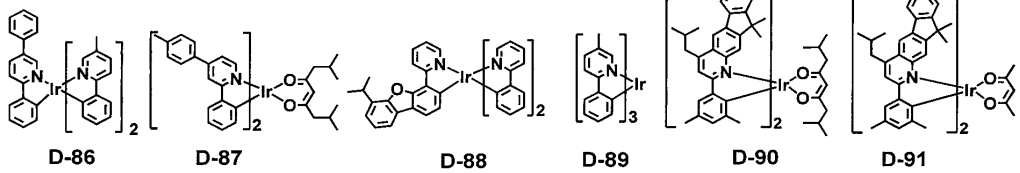
[0228] 
D-58 D-59 D-60 D-61 D-62

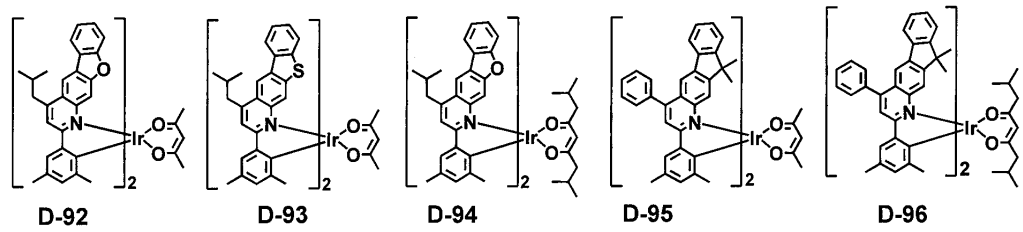
[0229] 
D-63 D-64 D-65 D-66 D-67

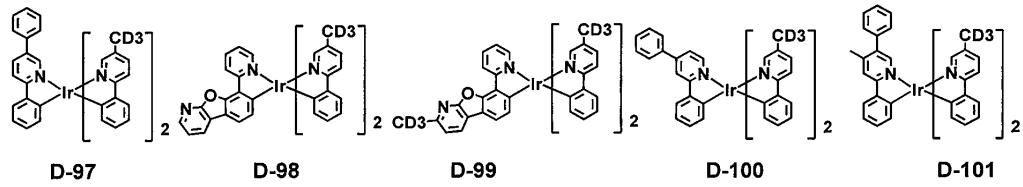
[0230] 
D-68 D-69 D-70 D-71 D-72 D-73

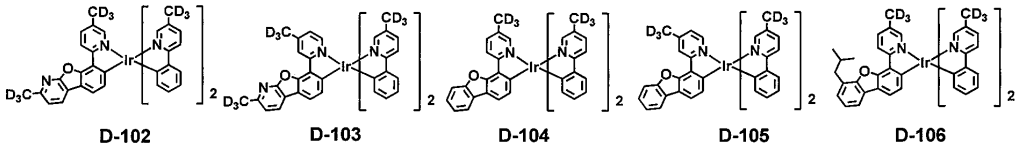
[0231] 

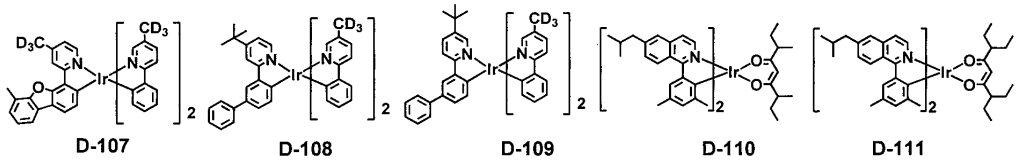
[0232] 

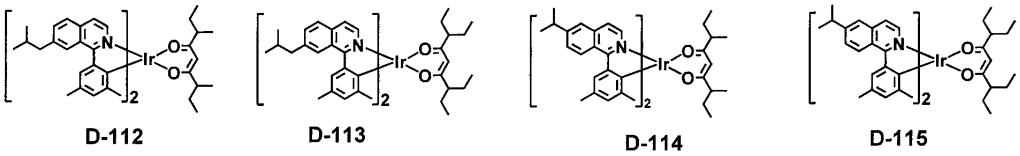
[0233] 

[0234] 

[0235] 

[0236] 

[0237] 

[0238] 

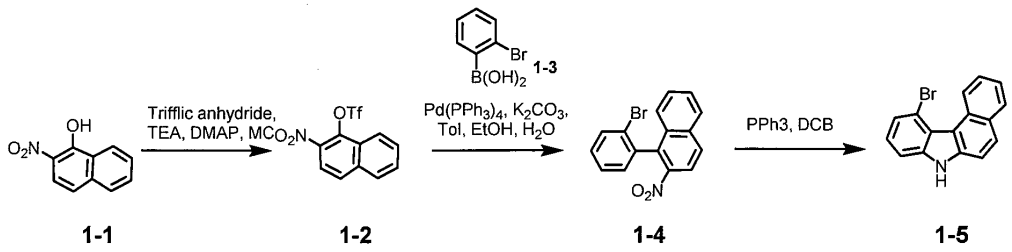
[0239] 본원의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막법이나, 잉크젯 프린팅(ink jet printing), 노즐 프린팅(nozzle printing), 슬롯 코팅(slot coating), 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

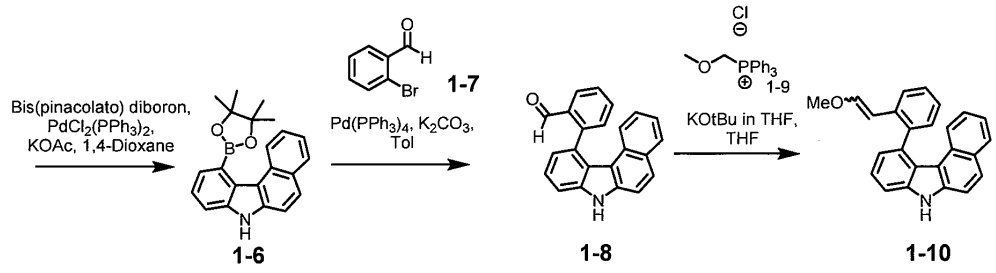
[0240] 습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로푸란, 디옥산 등의 적절한

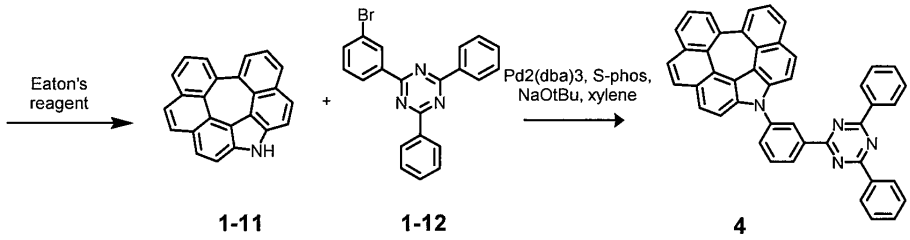
용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 각 층을 형성하는 재료가 용해 또는 분산될 수 있고, 성막성에 문제가 없는 것이라면 어느 것이어도 된다.

[0241] 이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 대표 화합물 또는 중간체 화합물의 합성 방법을 예로 들어 본원에 따른 화합물의 제조방법을 설명한다.

[0242] **[실시예 1] 화합물 4의 제조**

[0243] 

[0244] 

[0245] 

[0246] **1) 화합물 1-2의 합성**

[0247] 플라스크에 화합물 **1-1** (100.0 g, 528.6 mmol) 및 4-(다이메틸아미노)피리딘(DMAP) (6.5 g, 52.9 mmol) 을 메틸렌 클로라이드(MC) 1,000 mL 에 용해한 후, 0℃ 에서 트리플루오로메탄술폰산 무수물(Triflic anhydride) (107.0 mL, 634.4 mmol)와 트리에틸아민(TEA) (89.0 mL, 634.4 mmol)을 천천히 적가한 뒤, 상온에서 1시간 반 동안 교반하였다. 이후, 증류수를 넣어 반응을 종결한 후 MC/H_2O로 유기층을 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-2** (115.4 g, 수율: 68%)를 얻었다.

[0248] **2) 화합물 1-4의 합성**

[0249] 플라스크에 화합물 **1-2** (114.0 g, 354.9 mmol), 화합물 **1-3** (65.0 g, 346.5 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)($Pd(PPh_3)_4$) (18.6 g, 16.1 mmol), 탄산칼륨(K_2CO_3) (89.2 g, 645.2 mmol), 톨루엔(Tol) 1,600 mL, 에탄올(EtOH) 300 mL, 및 증류수(H_2O) 400 mL 를 넣어 녹인 후 1시간 동안 환류 교반시켰다. 반응이 끝나면 에틸아세테이트(EA)/H_2O로 유기층을 추출한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-4** (104 g, 수율: 97%)를 얻었다.

[0250] **3) 화합물 1-5의 합성**

[0251] 플라스크에 화합물 **1-4** (104.0 g, 316.8 mmol), 트리페닐포스핀(PPh_3) (208.0 g, 792.1 mmol), 및 1,2-디클로로벤젠(DCB) 1000 mL 를 넣은 후 200℃ 로 19시간 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 증류한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-5** (22.0 g, 수율: 29%)를 얻었다.

[0252] **4) 화합물 1-6의 합성**

[0253] 플라스크에 화합물 **1-5** (21.0 g, 70.9 mmol), 비스(피나콜라토)디보론(bis(pinacolato) diboron) (36.0 g, 141.8 mmol), 비스(트리페닐포스핀)팔라듐디클로라이드(Ⅱ)($PdCl_2(PPh_3)_2$) (1.5 g, 2.13 mmol), 아세트산칼륨(KOAc) (20.9 g, 212.7 mmol), 및 1,4-디옥산(1,4-Dioxane) 350 mL 를 넣어 녹인 후 1시간 40분 동안 환류교반시켰다. 반응이 끝나면 EA/H_2O로 유기층을 추출한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-6** (18.9 g, 수율: 74%)을 얻었다.

[0254] **5) 화합물1-8의 합성**

[0255] 플라스크에 화합물 **1-6** (18.9 g, 55.1 mmol), 화합물 **1-7** (10.5 g, 56.7 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (3.2 g, 2.76 mmol), K_2CO_3 (19.0 g, 137.8 mmol), 및 Tol 280 mL 를 넣어 녹인 후 24시간 동안 환류교반시켰다. 반응이 끝나면 EA/H_2O로 유기층을 추출한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-8** (13.2 g, 수율: 77%)을 얻었다.

[0256] **6) 화합물 1-10의 합성**

[0257] 플라스크에 화합물 **1-8** (13.2 g, 41.0 mmol) 및 화합물 **1-9** (21.1 g, 61.6 mmol)를 테트라히드로푸란(THF) 200 mL 에 용해한 후, 포타슘 *tert*-부톡사이드(KOtBu, in THF) (62.0 mL, 61.6 mmol)을 적가하여 2시간 동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 EA/H_2O로 유기층을 추출한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-10** (14.3 g, 수율: 100%)을 얻었다.

[0258] **7) 화합물 1-11의 합성**

[0259] 플라스크에 화합물 **1-10** (14.3 g, 41.0 mmol)을 클로로벤젠(chlorobenzene) 200 mL 에 용해한 뒤, 이튼 시약(Eaton's reagent) 7.0 mL 적가하고, 7시간 동안 환류교반시켰다. 반응이 끝나면 EA/H_2O로 유기층을 추출한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **1-11** (4.3 g, 수율: 33%)을 얻었다.

[0260] **8) 화합물 4의 합성**

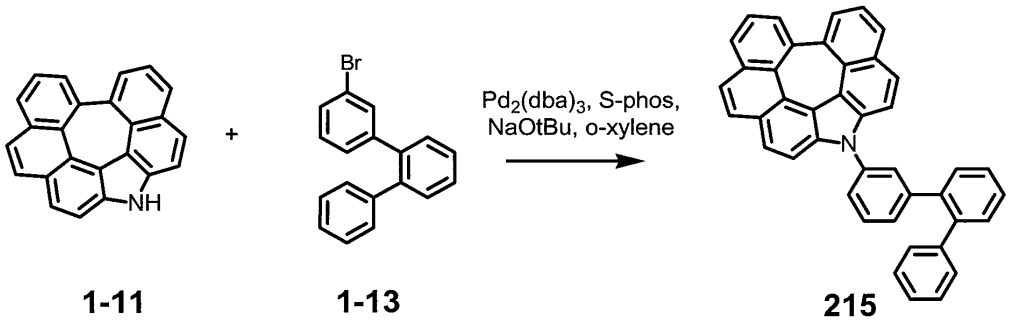
[0261] 플라스크에 화합물 **1-11** (4.2 g, 13.3 mmol), 화합물 **1-12** (5.0 g, 13.0 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)($Pd_2(dba)_3$) (609 mg, 0.67 mmol), 2-디사이클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시바이페닐 (S-phos) (546 mg, 1.33 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드(NaOtBu) (3.2 g, 33.3 mmol), 및 o-자일렌(o-xylene) 89 mL을 넣어준 후 3시간 동안 환류교반시켰다. 반응 완료 후 EA/H_2O로 유기층을 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **4** (3.8 g, 수율: 46%)를 얻었다.

[0262]

	MW	M.P
4	622.17	305℃

[0263] **[실시예 2] 화합물 215의 제조**

[0264]



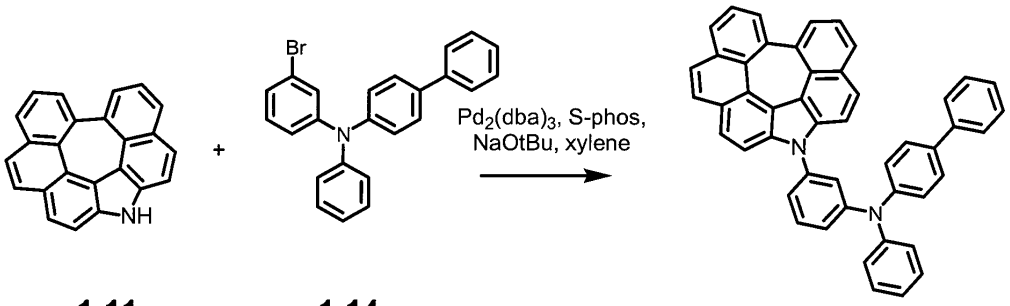
1-11 **1-13** **215**

[0265] 플라스크에 화합물 **1-11** (4.0 g, 12.7 mmol), 화합물 **1-13** (4.3 g, 13.9 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)($Pd_2(dba)_3$) (581 mg, 0.63 mmol), 2-디사이클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시바이페닐 (S-phos) (520 mg, 1.26 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드(NaOtBu) (3.0 g, 31.7 mmol), 및 o-자일렌(o-xylene) 63 mL을 넣어준 후 5시간 동안 환류교반시켰다. 반응 완료 후 EA/H_2O로 유기층을 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **215** (2.2 g, 수율: 32 %)를 얻었다.

	MW	M.P
215	543.65	154℃

[0266]

[0267] **[실시예 3] 화합물 217 의 제조**



1-11 **1-14** **217**

[0268]

[0269] 플라스크에 화합물 **1-11** (4.7 g, 14.9 mmol), 화합물 **1-14** (6.6 g, 16.4 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)($Pd_2(dba)_3$) (682 mg, 0.75 mmol), 2-디사이클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시바이페닐 (S-phos) (612 mg, 1.50 mmol), 소듐 *tert*-부톡사이드(NaOtBu) (3.6 g, 37.3 mmol), 및 o-자일렌(o-xylene) 75 mL을 넣어준 후 7시간 동안 환류교반시켰다. 반응 완료 후 EA/H_2O로 유기층을 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 화합물 **217** (4.3 g, 수율: 45%)를 얻었다.

	MW	M.P
217	634.77	139℃

[0270]

[0271] 이하에서, 본원의 상세한 이해를 위하여 본원의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 발광 특성을 설명한다.

[0272] **[소자 제조예 1] 호스트로서 본원에 따른 화합물을 증착한 OLED 제조**

[0273] 본원에 따른 화합물을 포함하는 OLED를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조)로부터 얻어진 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 ITO기판을 장착한 후, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물 **HI-1**을 넣고 챔버 내의 진공도가 10^{-6} torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 80nm 두께의 제1 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HI-2**를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5nm 두께의 제2 정공 주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 셀에 화합물**HT-1**을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10nm두께의 제1 정공 전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 화합물 **HT-2**를 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 전달층 위에 60nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착 하였다. 정공 주입층과 정공 전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 셀에 호스트로서 **화합물 4**를 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 **D-39**을 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 각각 3중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 정공전달층 위에 40nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 화합물 **ET-1** 과 화합물 **EI-1**을 1:1의 속도로 증발시켜 발광층 위에 35nm 두께의 전자 전달층을 증착하였다. 이어서, 전자주입층으로 화합물 **EI-1**을 상기 전자 전달층 위에 2nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 상기 전자 주입층 위에 80nm의 두께로 증착하여 OLED를 제조하였다.

[0274] **[비교예 1] 호스트로서 비교 화합물을 포함하는 OLED 제조**

[0275] 발광층의 호스트로서 화합물 CBP를 사용한 것 외에는, 소자 제조예 1과 동일한 방법으로 OLED를 제조하였다.

[0276] 이상과 같이 제조된 소자 제조예 1 및 비교예 1의 유기 전계 발광 소자의 1,000 nits 휘도 기준의 구동 전압, 효율, 및 5,000 nits 휘도 기준 빛의 세기가 100%에서 95%로 떨어지는 데까지의 시간(수명; T95)을 하기 표 1에

나타내었다.

[0277] **[표 1]**

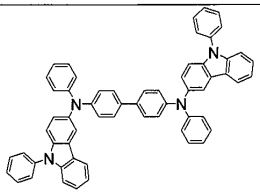
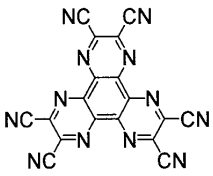
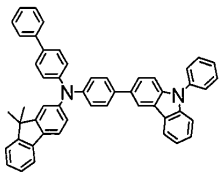
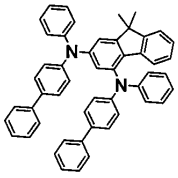
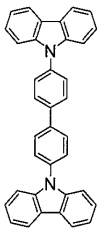
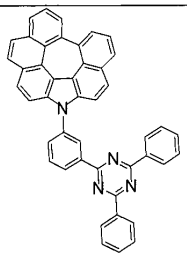
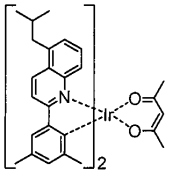
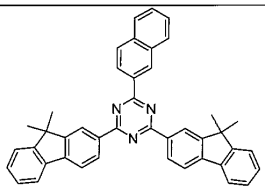
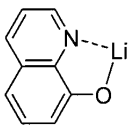
	호스트 재료	구동 전압 (V)	효율 (cd/A)	수명 (T95, hr)
비교예 1	CBP	9.2	9.2	0.25
소자 제조예 1	4	2.8	23.4	142.0

[0278]

[0279] 상기 표 1로부터, 본원에 따른 유기 전계 발광 화합물을 호스트 재료로 포함하는 유기 전계 발광 소자는, 종래의 호스트 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 비하여 구동전압을 현저히 낮출 수 있고, 효율과 수명이 상당히 개선됨을 확인할 수 있다.

[0280] 상기 소자 제조예 및 비교예에 사용되는 화합물을 하기 표 2에 나타내었다.

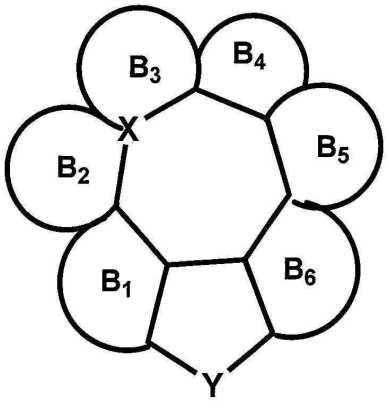
[0281] **[표 2]**

정공 주입층/ 정공 전달층	 HI-1	 HI-2
	 HT-1	 HT-2
발광층	 CBP	 4
	 D-39	
전자 전달층/ 전자 주입층	 ET-1	 EI-1

[0282]

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	KR1020200049635A	公开(公告)日	2020-05-08
申请号	KR1020190135292	申请日	2019-10-29
[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	홍진리 박효순 이효정 강현주		
发明人	홍진리 박효순 이효정 강현주		
IPC分类号	C09K11/06 C07D307/91 C07D307/93 C07D333/76 C07D333/80 C07D401/04 C07D401/14 C07D403/04 C07D403/10 C07D407/04 C07D407/14		
CPC分类号	C09K11/06 C07D307/91 C07D307/93 C07D333/76 C07D333/80 C07D401/04 C07D401/14 C07D403/04 C07D403/10 C07D407/04 C07D407/14		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020180131609 2018-10-31 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化合物的有机电致发光器件。通过包含根据本申请的有机电致发光化合物，可以制造具有低驱动电压和/或高发光效率和/或长寿命特性的有机电致发光器件。

