



# (19) 대한민국특허청(KR)

(12) 공개특허공보(A)

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

**H01L 51/00** (2006.01) **C07F 5/02** (2006.01) COTF 7/08 (2006.01) HO1L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류 **H01L 51/008** (2013.01) **CO7F 5/027** (2013.01)

(21) 출원번호 10-2019-0003819

(22) 출원일자 2019년01월11일

심사청구일자 없음

(11) 공개번호 10-2020-0087906 (43) 공개일자 2020년07월22일

(71) 출원인

삼성디스플레이 주식회사

경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)

(72) 발명자

야마타니, 아키노리

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

(74) 대리인

특허법인 고려

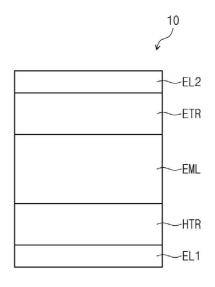
전체 청구항 수 : 총 22 항

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

### (57) 요 약

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

#### 대 표 도 - 도1



### (52) CPC특허분류

*CO7F* 7/0816 (2013.01) *HO1L* 51/0094 (2013.01)

**H01L 51/5024** (2013.01)

#### 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 배치된 정공 수송 영역;

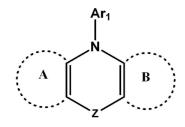
상기 정공 수송 영역 상에 배치된 발광층;

상기 발광층 상에 배치된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 배치된 제2 전극; 을 포함하고,

상기 발광층은 하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자:

#### [화학식 1]



상기 화학식 1에서,

고리 A 및 고리 B는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴고리, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴고리이고, 고리 A 및 고리 B 중 적어도 어느 하나는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴고리이고,

Z는 BAr<sub>2</sub>, POAr<sub>3</sub>, PSAr<sub>4</sub>, SiAr<sub>5</sub>Ar<sub>6</sub>, 또는 GeAr<sub>7</sub>Ar<sub>8</sub> 이고,

 $Ar_1$ 은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

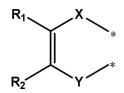
 $Ar_2$  내지  $Ar_8$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 10 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 10 이상 10 이하의 해테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성한다.

#### 청구항 2

제 1항에 있어서,

고리 A 및 고리 B 중 적어도 어느 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

#### [화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X 및 Y는 각각 독립적으로 직접 결합, O, S, SO,  $SO_2$ , Se,  $NR_3$ ,  $PR_4$ ,  $POR_5$ ,  $PSR_6$ ,  $SiR_7R_8$ ,  $GeR_9R_{10}$ , 또는  $BR_{11}$ 이고, X 및 Y는 동시에 직접 결합은 아니며,

 $R_1$  내지  $R_{11}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 타올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보 닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 10 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 1 이상 10 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 1 이상 10 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 1 이상 10 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 10 이상 10 이하의 해테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성한다.

#### 청구항 3

제 1항에 있어서,

상기 발광층은 지연 형광을 방출하는 유기 전계 발광 소자.

### 청구항 4

제 1항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하는 지연 형광 발광층이고,

상기 도펀트는 상기 다환 화합물인 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 5

제 1항에 있어서,

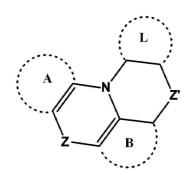
상기 발광층은 청색광을 방출하는 열활성 지연 형광 발광층인 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 6

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

#### [화학식 3]



상기 화학식 3에서,

Z'는 BAr<sub>2</sub>, POAr<sub>3</sub>, PSAr<sub>4</sub>, SiAr<sub>5</sub>Ar<sub>6</sub>, 또는 GeAr<sub>7</sub>Ar<sub>8</sub> 이고,

고리 L은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고.

고리 A, 고리 B, 및 Z는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

### 청구항 7

제 6항에 있어서,

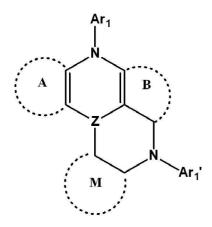
상기 Z 및 Z'은 서로 동일한 것인 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 8

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 4로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 4]



상기 화학식 4에서,

Z는 B, PO, PS, SiAr<sub>5</sub>, 또는 GeAr<sub>7</sub> 이고,

고리 M은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

 $Ar_1$ '은 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

고리 A, 고리 B, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>5</sub>, 및 Ar<sub>7</sub>은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

### 청구항 9

제 1항에 있어서,

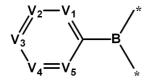
상기 Z는 BAr<sub>2</sub>인 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 10

제 9항에 있어서,

상기 Z는 하기 화학식 5로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

[화학식 5]



상기 화학식 5에서,

 $V_1$  내지  $V_5$ 는 각각 독립적으로  $CR_{12}$  또는 N이고,

 $R_{12}$ 는 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 티올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르

알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성한다.

#### 청구항 11

제 10항에 있어서,

 $V_1$  내지  $V_5$ 는 각각 독립적으로  $CR_{12}$ 이고,

 $R_{12}$ 는 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 10 이하의 알킬기인 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 12

제 1항에 있어서,

고리 A 및 고리 B 중 적어도 어느 하나는 치환 또는 비치환된 피롤, 치환 또는 비치환된 티오펜, 치환 또는 비 치환된 옥사진 또는 치환 또는 비치환된 퓨란인 유기 전계 발광 소자.

#### 청구항 13

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 6으로 표시되는 유기 전계 발광 소자:

#### [화학식 6]

$$R_1$$
 $X$ 
 $N$ 
 $R_2$ 
 $Y$ 
 $R_3$ 
 $(A_1)_n$ 

상기 화학식 6에서,

A<sub>1</sub>은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 티올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성하고,

n은 0 이상 5 이하의 정수이며,

X 및 Y는 각각 독립적으로 직접 결합, O, S, SO, SO<sub>2</sub>, Se, NR<sub>3</sub>, PR<sub>4</sub>, POR<sub>5</sub>, PSR<sub>6</sub>, SiR<sub>7</sub>R<sub>8</sub>, GeR<sub>9</sub>R<sub>10</sub>, 또는 BR<sub>11</sub>이고,

 $R_1$  내지  $R_{11}$ 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 티올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보 닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 1 이상 10 이하의 하를 하여 고리를 형성하고,

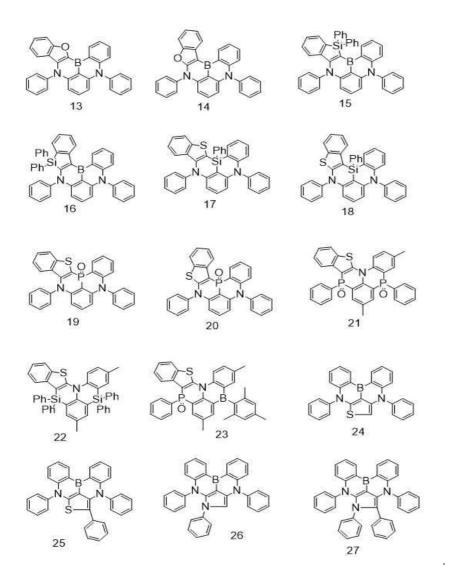
 $Ar_1$ 은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

### 청구항 14

제 1항에 있어서,

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

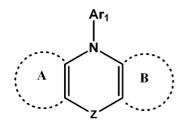
### [화합물군 1]



### 청구항 15

하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물:

#### [화학식 1]



상기 화학식 1에서,

고리 A 및 고리 B는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴고리, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴고리이고, 고리 A 및 고리 B 중 적어도 어느 하나는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴고리이고,

Z는 BAr<sub>2</sub>, POAr<sub>3</sub>, PSAr<sub>4</sub>, SiAr<sub>5</sub>Ar<sub>6</sub>, 또는 GeAr<sub>7</sub>Ar<sub>8</sub> 이고,

 $Ar_1$ 은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

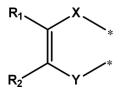
 $Ar_2$  내지  $Ar_8$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성한다.

#### 청구항 16

제 15항에 있어서,

고리 A 및 고리 B 중 적어도 어느 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 다환 화합물:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X 및 Y는 각각 독립적으로 직접 결합, O, S, SO,  $SO_2$ , Se,  $NR_3$ ,  $PR_4$ ,  $POR_5$ ,  $PSR_6$ ,  $SiR_7R_8$ ,  $GeR_9R_{10}$ , 또는  $BR_{11}$ 이고, X 및 Y는 동시에 직접 결합은 아니며,

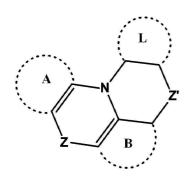
R<sub>1</sub> 내지 R<sub>11</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 타올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보 닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성한다.

#### 청구항 17

제 15항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시되는 다환 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

Z'는 BAr<sub>2</sub>, POAr<sub>3</sub>, PSAr<sub>4</sub>, SiAr<sub>5</sub>Ar<sub>6</sub>, 또는 GeAr<sub>7</sub>Ar<sub>8</sub> 이고,

고리 L은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

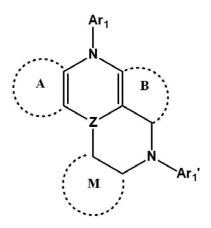
고리 A, 고리 B, 및 Z는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

#### 청구항 18

제 15항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 4로 표시되는 다환 화합물:

#### [화학식 4]



상기 화학식 4에서,

Z는 B, PO, PS, SiAr<sub>5</sub>, 또는 GeAr<sub>7</sub> 이고,

고리 M은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

Ar<sub>1</sub>'은 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

고리 A, 고리 B, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>5</sub>, 및 Ar<sub>7</sub>은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

### 청구항 19

제 15항에 있어서,

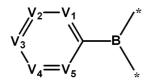
상기 Z는 BAr<sub>2</sub>인 다환 화합물.

#### 청구항 20

제 19항에 있어서,

상기 Z는 하기 화학식 5로 표시되는 다환 화합물:

### [화학식 5]



상기 화학식 5에서.

 $V_1$  내지  $V_5$ 는 각각 독립적으로  $CR_{12}$  또는 N이고,

 $R_{12}$ 는 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 티올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성한다.

### 청구항 21

제 20항에 있어서,

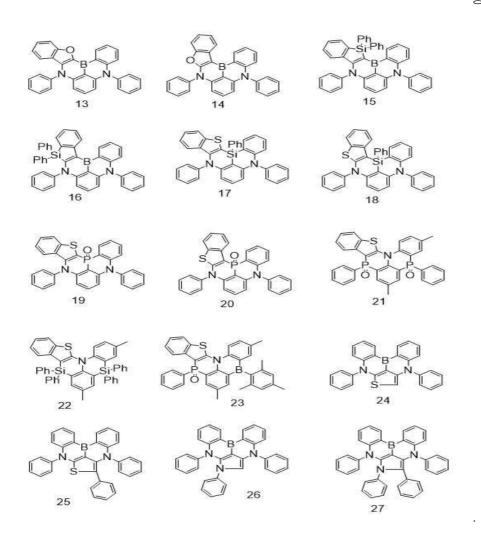
 $V_1$  내지  $V_5$ 는 각각 독립적으로  $CR_{12}$ 이고,

 $R_{12}$ 는 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 10 이하의 알킬기인 다환 화합물.

### 청구항 22

제 15항에 있어서,

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



### 발명의 설명

### 기술분야

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

#### 배경기술

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

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

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

### 발명의 내용

### 해결하려는 과제

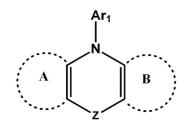
[0005] 본 발명의 목적은 장수명, 고효율의 유기 전계 발광 소자 및 이에 사용되는 다환 화합물을 제공하는 것이다.

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

#### 과제의 해결 수단

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

[0008] [화학식 1]

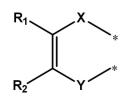


[0009] [0010]

상기 화학식 1에서, 고리 A 및 고리 B는 각각 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴고리, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴고리이고, 고리 A 및 고리 B 중 적어도 어느 하나는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴고리이고, Z는 BAr<sub>2</sub>, POAr<sub>3</sub>, PSAr<sub>4</sub>, SiAr<sub>5</sub>Ar<sub>6</sub>, 또는 GeAr<sub>7</sub>Ar<sub>8</sub> 이고, Ar<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, Ar<sub>2</sub> 내지 Ar<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여고리를 형성한다.

[0011] 화학식 1의 고리 A 및 고리 B 중 적어도 어느 하나는 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[0012] [화학식 2]



[0013] [0014]

상기 화학식 2에서, X 및 Y는 각각 독립적으로 직접 결합, 0, S, SO, SO<sub>2</sub>, Se, NR<sub>3</sub>, PR<sub>4</sub>, POR<sub>5</sub>, PSR<sub>6</sub>, SiR<sub>7</sub>R<sub>8</sub>, GeR<sub>9</sub>R<sub>10</sub>, 또는 BR<sub>11</sub>이고, X 및 Y는 동시에 직접 결합은 아니며, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>11</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 타올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴 기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성한다.

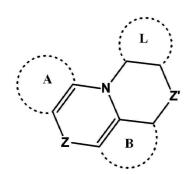
[0015] 발광층은 지연 형광을 방출하는 유기 전계 발광 소자일 수 있다.

[0016] 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하는 지연 형광 발광층이고, 상기 도펀트는 상기 다환 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자일 수 있다.

[0017] 발광층은 청색광을 방출하는 열활성 지연 형광 발광층인 유기 전계 발광 소자일 수 있다.

[0018] 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시될 수 있다.

[0019] [화학식 3]



[0020] [0021]

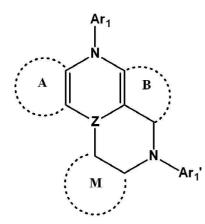
[0023]

상기 화학식 3에서, Z'는  $BAr_2$ ,  $POAr_3$ ,  $PSAr_4$ ,  $SiAr_5Ar_6$ , 또는  $GeAr_7Ar_8$  이고, 고리 L은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, 고리 A, 고리 B, 및 Z는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0022] 화학식 3에서, 상기 Z 및 Z'은 서로 동일한 것일 수 있다.

화학식 1은 하기 화학식 4로 표시될 수 있다.

[0024] [화학식 4]



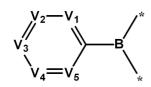
[0025] [0026]

상기 화학식 4에서, Z는 B, PO, PS, SiAr<sub>5</sub>, 또는 GeAr<sub>7</sub> 이고, 고리 M은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, Ar<sub>1</sub>'은 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, 고리 A, 고리 B, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>5</sub>, 및 Ar<sub>7</sub>은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0027] 화학식 1에서 Z는 BAr<sub>2</sub>일 수 있다.

[0028] 화학식 1에서 Z는 하기 화학식 5로 표시될 수 있다.

[0029] [화학식 5]



[0030]

[0031] 상기 화학식 5에서,  $V_1$  내지  $V_5$ 는 각각 독립적으로  $CR_{12}$  또는 N이고,  $R_{12}$ 는 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 타올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬

기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성한다.

- [0032] 화학식 5의  $V_1$  내지  $V_5$ 는 각각 독립적으로  $CR_{12}$ 이고,  $R_{12}$ 는 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 10 이하의 알킬기일 수 있다.
- [0033] 화학식 1의 고리 A 및 고리 B 중 적어도 어느 하나는 치환 또는 비치환된 피롤, 치환 또는 비치환된 티오펜, 치환 또는 비치환된 옥사진 또는 치환 또는 비치환된 퓨란일 수 있다.
- [0034] 화학식 1은 하기 화학식 6으로 표시될 수 있다.
- [0035] [화학식 6]

$$R_1$$
 $X$ 
 $N$ 
 $R_2$ 
 $Y$ 
 $R_3$ 
 $R_4$ 
 $R_4$ 
 $R_5$ 
 $R_4$ 
 $R_5$ 
 $R_4$ 
 $R_5$ 
 $R_5$ 
 $R_6$ 
 $R_7$ 
 $R_7$ 

[0036] [0037]

상기 화학식 6에서,  $A_1$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 티올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성하고, n은 0 이상 5 이하의 정수이며, X 및 Y는 각각 독립적으로 직접 결합, O, S, SO, SO,

- [0038] 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나일 수 있다.
- [0039] 본 발명의 일 실시예는 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 제공한다.

### 도면의 간단한 설명

[0040] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

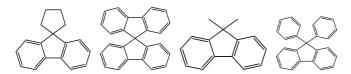
#### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0041] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 본문에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.

- [0042] 각 도면을 설명하면서 유사한 참조부호를 유사한 구성요소에 대해 사용하였다. 첨부된 도면에 있어서, 구조물들의 치수는 본 발명의 명확성을 위하여 실제보다 확대하여 도시한 것이다. 제1, 제2 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.
- [0043] 본 출원에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해 되어야 한다. 또한, 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "상에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다.
- [0044] 이하, 도 1 내지 도 3을 참조하여 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다.
- [0045] 도 1 내지 도 3을 참조하면, 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 순차적으로 적충된 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광충(EML), 전자 수송 영역(ETR) 및 제2 전극(EL2)을 포함할 수 있다.
- [0046] 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)은 서로 마주하고 배치되며, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2) 사이에는 복수의 유기층들이 배치될 수 있다. 복수의 유기층들은 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 및 전자 수송 영역(ETR)을 포함할 수 있다. 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)는 발광층(EML)에 상술한 일 실시예의 다환 화합물을 포함할 수 있다
- [0047] 한편, 도 2는 도 1과 비교하여, 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL) 및 전자 수송층(ETL)을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다. 또한, 도 3은 도 1과 비교하여 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 및 전자 저지층(EBL)을 포함하고, 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL), 전자 수송층(ETL), 및 정공 저지층(HBL)을 포함하는 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 단면도를 나타낸 것이다.
- [0048] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 제1 전극(EL1)은 도전성을 갖는다. 제1 전극(EL1)은 금속 합금 또는 도전성 화합물로 형성될 수 있다. 제1 전극(EL1)은 애노드(anode)일 수 있다.
- [0049] 제1 전극(EL1)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제1 전극(EL1)이 투과형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 이루어질 수 있다. 제1 전극(EL1)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들의 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 예시된 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다. 예를 들어, 제1 전극(EL1)은 ITO/Ag/ITO의 복수의 층을 포함하는 것일 수 있다.
- [0050] 정공 수송 영역(HTR)은 제1 전극(EL1) 상에 제공된다. 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL), 정공 수송층 (HTL), 정공 버퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0051] 정공 수송 영역(HTR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0052] 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 또는 정공 수송층(HTL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 정공 주입 물질과 정공 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 정공 수송 영역(HT R)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1 전극(EL1)으로부터 차례로 적층된 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/정공 여송층(HIL)/정공 버퍼층, 정공 주입층(HIL)/정공 버퍼층, 정공 주입층(HIL)/정공 버퍼층, 정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층, 장공 수송층(HTL)/정공 버퍼층, 또는 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/전자 저지층(EBL)의 구조를 가질 수 있으나, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0053] 정공 수송 영역(HTR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

- [0054] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 정공 주입층(HIL)은 공지의 정공 주입 재료를 포함할 수 있다. 예를 들어, 정공 주입층(HIL)은 트리페닐아민 함유 폴리에테르케톤(TPAPEK), 4-이소프로필-4'-메틸디페닐요오드늄테트라키스(펜타플루오로페닐)붕산염(PPBI), N, N'-디페닐-N, N'-비스-[4-(페닐-m-톨릴-아미노)-페닐]-페닐-4, 4'-디아민(DNTPD), 구리 프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물, 4, 4', 4''-트리스(3-메틸 페닐 페닐아미노)트리페닐아민(m-MTDATA), N, N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(NPB), N,N'-비스(1-나프틸)-N,N'-디페닐-4,4'-디아민(α-NPD), 4,4',4''-트리스{N,N 디페닐 아미노} 트리페닐아민(TDATA), 4,4',4''-트리스(N,N-2-나프틸 페닐아미노)트리페닐아민(2-TNATA), 폴리아닐린/도데실 벤젠 설폰산(PANI/DBSA), 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트)(PEDOT/PSS), 폴리아닐린/캄퍼설폰산(PANI/CSA), 폴리아닐린/폴리(4-스티렌설포네이트)(PANI/PSS), 또는 HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile) 등을 포함할 수 있다. 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0055] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 정공 수송층(HTL)은 공지의 정공 수송 재료를 포함할 수 있다. 예를 들어, 정공 수송층(HTL)은 1,1-비스[(디-4-트릴아미노)페닐]시클로헥산(TAPC), N-페닐카르바졸(N-Phenyl carbazole), 폴리비닐카르바졸(Polyvinyl carbazole) 등의 카르바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), 4,4',4''-트리스(N-카르바졸릴)트리페닐아민(TCTA), 또는 N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(NPB), N,N'-비스(1-나프틸)-N,N'-디페닐-4,4'-디아민(α-NPD) 등을 포함할 수 있다. 하지만, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0056] 한편, 정공 수송 영역(HTR)은 전자 저지층(EBL)을 더 포함하고, 전자 저지층(EBL)은 정공 수송층(HTL)과 발광층 (EML) 사이에 배치될 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.
- 전자 저지층(EBL)은 당 기술분야에 알려진 일반적인 재료를 포함할 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸계 유도체, 플루오렌(fluorine)계 유도체, TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine) 등과 같은 트리페닐아민계 유도체, NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diplienyl-benzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl) 또는 mCP 등을 포함할 수 있다. 또한, 전술한 바와 같이, 전자 저지층(EBL)은 본 발명의 일 실시예에 따른 다환 화합물을 포함할 수 있다.
- [0058] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 5000Å일 수 있다. 정공 주입층(HIL)의 두께는, 예를 들어, 약 30Å 내지 약 1000Å이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 30Å 내지 약 1000Å 일 수 있다. 예를 들어, 전자 저지층(EBL)의 두께는 약 10Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR), 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL) 및 전자 저지층(EBL)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.
- [0059] 정공 수송 영역(HTR)은 앞서 언급한 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 정공 수송 영역(HTR) 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 전하 생성 물질은 예를 들어, p-도펀트(dopant)일 수 있다. p-도펀트는 퀴논(quinone) 유도체, 금속 산화물 및 시아노(cyano)기 함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, p-도펀트의 비제한적인 예로는, TCNQ(Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0060] 앞서 언급한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL) 외에, 정공 버퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 정공 버퍼층은 발광층(EML)에서 방출되는 광의 파장에 따른 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시킬 수 있다. 정공 버퍼층에 포함되는 물질로는 정공 수송 영역(HTR)에 포함될 수 있는 물질을 사용할 수 있다.
- [0061] 발광충(EML)은 정공 수송 영역(HTR) 상에 제공된다. 발광충(EML)의 두께는 예를 들어, 약 100 Å 이상 600 Å 이하일 수 있다. 발광충(EML)은 단일 물질로 이루어진 단일충, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일충 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 충을 갖는 다충 구조를 가질 수 있다.
- [0062] 발광층(EML)은 적색광, 녹색광, 청색광, 백색광, 황색광, 시안광 중 하나를 발광하는 것일 수 있다. 발광층 (EML)은 형광 발광 물질 또는 인광 발광 물질을 포함할 수 있다.

- [0063] 일 실시예에서, 발광충(EML)은 형광 발광충일 수 있다. 예를 들어, 발광충(EML)에서 방출된 광 중 일부는 열활성 지연 형광 발광(Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF)에 의한 것일 수 있다. 구체적으로, 발광충(EML)은 열활성 지연 형광 발광하는 발광 성분을 포함하는 것일 수 있으며, 일 실시예에서, 발광충(EML)은 청색광을 방출하는 열활성 지연 형광 발광하는 발광충일 수 있다.
- [0064] 본 명세서에서, -\* 는 연결되는 위치를 의미한다.
- [0065] 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 아민기, 실릴기, 붕소기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 알킬기, 알케닐기, 아릴기 및 헤테로 고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미할 수 있다. 또한, 상기 예시된 치환기 각각은 치환 또는 비치환된 것일 수 있다. 예를 들어, 바이페닐기는 아릴기로 해석될 수도 있고, 페닐기로 치환된 페닐기로 해석될 수도 있다.
- [0066] 본 명세서에서, "인접하는 기와 결합하여 고리를 형성"한다는 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리를 형성하는 것을 의미할 수 있다. 탄화수소 고리는 지방 족 탄화수소 고리 및 방향족 탄화수소 고리를 포함한다. 헤테로 고리는 지방족 헤테로 고리 및 방향족 헤테로 고리를 포함한다. 탄화수소 고리 및 헤테로 고리는 단환 또는 다환일 수 있다. 또한, 인접하는 기와 결합하여 형성된 고리는 다른 고리와 연결되어 스피로 구조를 형성하는 것일 수도 있다.
- [0067] 본 명세서에서, "인접하는 기"는 해당 치환기가 치환된 원자와 직접 연결된 원자에 치환된 치환기, 해당 치환기가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기 또는 해당 치환기와 입체구조적으로 가장 인접한 치환기를 의미할 수 있다. 예컨대, 1,2-디메틸벤젠(1,2-dimethylbenzene)에서 2개의 메틸기는 서로 "인접하는 기"로 해석될 수 있고, 1,1-디에틸시클로펜테인(1,1-diethylcyclopentene)에서 2개의 에틸기는 서로 "인접하는 기"로 해석될 수 있다.
- [0068] 본 명세서에서, 할로겐 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.
- [0069] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 50 이하, 1 이상 30 이하, 1 이상 20 이하, 1 이상 10 이하 또는 1 이상 6 이하이다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, i-부틸기, 2- 에틸부틸기, 3, 3-디메틸부틸기, n-펜틸기, i-펜틸 기, 네오펜틸기, t-펜틸기, 시클로펜틸기, 1-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-에틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, n-헥 실기, 1-메틸헥실기, 2-에틸헥실기, 2-부틸헥실기, 시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 4-t-부틸시클로헥실기, n-헵틸기, 1-메틸헵틸기, 2,2-디메틸헵틸기, 2-에틸헵틸기, 2-부틸헵틸기, n-옥틸기, t-옥틸기, 2-에틸옥틸기, 2-부틸옥틸기, 2-헥실옥틸기, 3,7-디메틸옥틸기, 시클로옥틸기, n-노닐기, n-데실기. 아다만틸기. 2-에틸데실기, 2-부틸데실기, 2-헥실데실기, 2-옥틸데실기, n-운데실기, n-도데실기, 2-에틸도데실기, 2-부틸도 데실기, 2-헥실도데실기, 2-옥틸도데실기, n-트리데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, 2-에틸 헥사데실기, 2-부틸헥사데실기, 2-헥실헥사데실기, 2-옥틸헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, n-노나데실 기, n-이코실기, 2-에틸이코실기, 2-부틸이코실기, 2-헥실이코실기, 2-옥틸이코실기, n-헨이코실기, n-도코실기, n-트리코실기, n-테트라코실기, n-펜타코실기, n-헥사코실기, n-헵타코실기, n-옥타코실기, n-노나 코실기, 및 n-트리아콘틸기 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.
- [0070] 본 명세서에서, 아릴기는 방향족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기를 의미한다. 아릴기는 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 아릴기의 고리 형성 탄소수는 6 이상 30 이하, 6 이상 20 이하, 또는 6 이상 15 이하일 수 있다. 아릴기의 예로는 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기, 퀸크페닐기, 섹시페닐기, 트리페닐에닐기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.
- [0071] 본 명세서에서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수도 있다. 플루오레닐기가 치환되는 경우의 예시는 하기와 같다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

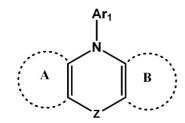


[0072]

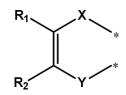
[0073] 본 명세서에서, 헤테로아릴기는 이종 원소로 0, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴기일 수 있다. 헤테로아릴기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하 또는 2 이상 20 이하이다. 헤테로아릴기는 단환식 헤

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

- [0074] 본 명세서에서, 실릴기는 알킬 실릴기 및 아릴 실릴기를 포함한다. 실릴기의 예로는 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0075] 본 명세서에서, 아민기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 이상 30 이하일 수 있다. 아민기는 알킬 아민기 및 아릴 아민기를 포함할 수 있다. 아민기의 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 트리페닐아민기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0076] 일 실시예에서, 발광층(EML)은 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 포함한다.
- [0077] [화학식 1]



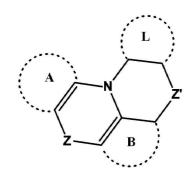
- [0078]
- [0079] 화학식 1에서, 고리 A 및 고리 B는 각각 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴고리, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴고리이다.
- [0080] 한편, 화학식 1에서, 고리 A 및 고리 B 중 적어도 어느 하나는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴고리이며, 고리 A 및 고리 B가 모두 헤테로아릴고리가 아닌 경우 분자 안정성이 낮아져 유기 전계 발광 소자에 적용 시 발광 효율 또는 수명이 저하될 수 있다.
- [0081] 화학식 1에서, Z는 BAr<sub>2</sub>, POAr<sub>3</sub>, PSAr<sub>4</sub>, SiAr<sub>5</sub>Ar<sub>6</sub>, 또는 GeAr<sub>7</sub>Ar<sub>8</sub> 이다.
- [0082] 화학식 1에서, Ar<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테 로아릴기이다.
- [0083] 화학식 1에서, Ar<sub>2</sub> 내지 Ar<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴 기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성한다.
- [0084] 일 실시예에서, 화학식 1의 고리 A 및 고리 B 중 적어도 어느 하나는 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.
- [0085] [화학식 2]



- [0086]
- [0087] 화학식 2에서, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 화학식 2에서, X 및 Y는 각각 독

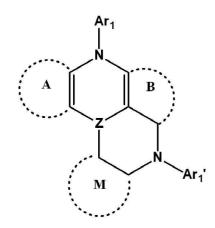
립적으로 직접 결합, O, S, SO, SO<sub>2</sub>, Se, NR<sub>3</sub>, PR<sub>4</sub>, POR<sub>5</sub>, PSR<sub>6</sub>, SiR<sub>7</sub>R<sub>8</sub>, GeR<sub>9</sub>R<sub>10</sub>, 또는 BR<sub>11</sub>일 수 있다.

- [0088] 화학식 2에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>11</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 티올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 1 이상 30 이하의 하릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성한다.
- [0089] 한편, 화학식 2는 화학식 1의 고리 A 및 고리 B 중 어느 하나가 헤테로 아릴고리인 경우의 일 실시예를 나타내며, 화학식 2의 X 및 Y가 동시에 직접 결합인 경우는 제외한다.
- [0090] 일 실시예에서, 화학식 1의 Ar<sub>1</sub>이 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있다.
- [0091] 일 실시예에서, 화학식 1의 Ar<sub>1</sub>이 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성하는 아릴기 또는 헤테로아릴기인 경우, 화학식 1은 하기 화학식 3으로 표시될 수 있다.
- [0092] [화학식 3]



- [0093]
- [0094] 화학식 3에서, Z'는 BAr<sub>2</sub>, POAr<sub>3</sub>, PSAr<sub>4</sub>, SiAr<sub>5</sub>Ar<sub>6</sub>, 또는 GeAr<sub>7</sub>Ar<sub>8</sub> 일 수 있다.
- [0095] 화학식 3에서, 고리 L는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.
- [0096] 화학식 3에서, 고리 A, 고리 B, 및 Z는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.
- [0097] 일 실시예에서, 화학식 3의 Z 및 Z'은 서로 동일한 것일 수 있다.
- [0098] 일 실시예에서, 화학식 1의 Ar<sub>2</sub> 내지 Ar<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있다.
- [0099] 일 실시예에서, 화학식 1의 Ar<sub>2</sub> 내지 Ar<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성하는 아릴기 또는 헤테로아릴기인 경우, 화학식 1은 하기 화학식 4로 표시될 수 있다.

[0100] [화학식 4]



[0101]

[0102]

[0105]

[0106]

[0107]

화학식 4에서, Z는 B, PO, PS, SiAr<sub>5</sub>, 또는 GeAr<sub>7</sub> 일 수 있다.

[0103] 화학식 4에서, 고리 M은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

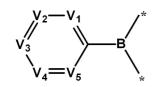
[0104] 화학식 4에서, Ar<sub>1</sub>'은 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

화학식 4에서, 고리 A, 고리 B, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>5</sub>, 및 Ar<sub>7</sub>은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

일 실시예에서, 화학식 1의 Z는 BAr<sub>2</sub>일 수 있다.

일 실시예에서, 화학식 1의 Z가 BAr<sub>2</sub>인 경우, Z는 하기 화학식 5로 표시될 수 있다.

[0108] [화학식 5]



[0109]

[0110] 화학식 5에서,  $V_1$  내지  $V_5$ 는 각각 독립적으로  $CR_{12}$  또는 N일 수 있다. 한편,  $V_1$  내지  $V_5$  중 적어도 어느 하나는  $CR_{12}$  일 수 있다.

[0111] 화학식 5에서,  $R_{12}$ 는 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 타올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[0112] 일 실시예에서, 화학식 5의  $V_1$  내지  $V_5$ 는 각각 독립적으로  $CR_{12}$ 이고,  $R_{12}$ 는 수소 원자, 중수소 원자, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 이상 10 이하의 알킬기일 수 있다.

[0113] 일 실시예에서, 화학식 1의 고리 A 및 고리 B 중 적어도 어느 하나는 치환 또는 비치환된 피롤, 치환 또는 비치환된 티오펜, 치환 또는 비치환된 옥사진 또는 치환 또는 비치환된 퓨란일 수 있다.

[0114] 일 실시예에서, 화학식 1은 하기 화학식 6으로 표시될 수 있다.

[0115] [화학식 6]

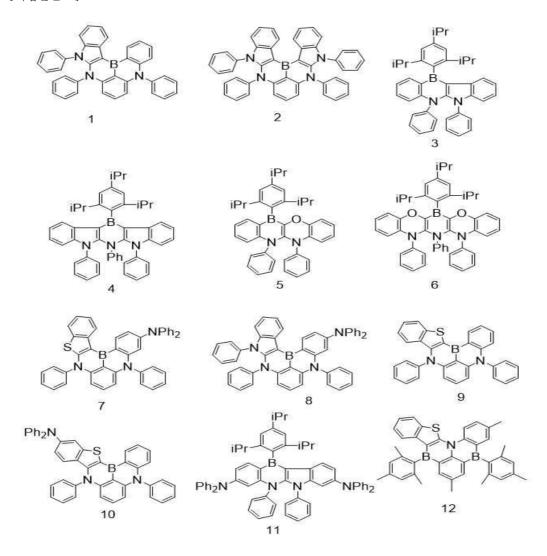
$$R_1$$
 $X$ 
 $N$ 
 $R_2$ 
 $Y$ 
 $R_3$ 
 $(A_1)_n$ 

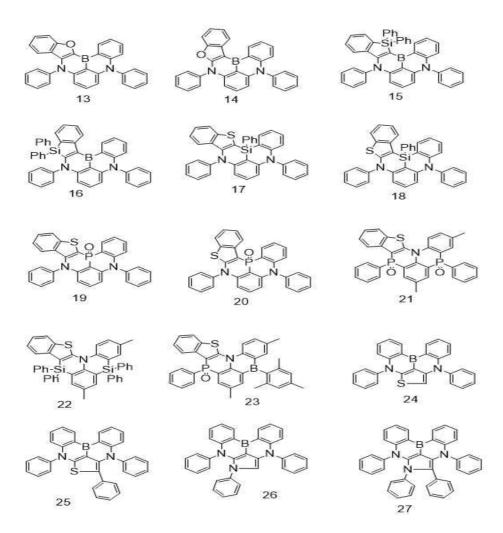
[0116]

- [0117] 화학식 6에서,  $A_1$ 은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 티올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있다.
- [0118] 화학식 6에서, n은 0 이상 5 이하의 정수일 수 있다. 한편, n이 2 이상일 경우, 복수의 A<sub>1</sub>은 서로 동일하거나 상이하다.
- [0119] 화학식 6에서, X 및 Y는 각각 독립적으로 직접 결합, O, S, SO, SO<sub>2</sub>, Se, NR<sub>3</sub>, PR<sub>4</sub>, POR<sub>5</sub>, PSR<sub>6</sub>, SiR<sub>7</sub>R<sub>8</sub>, GeR<sub>9</sub>R<sub>10</sub>, 또는 BR<sub>11</sub>일 수 있다.
- [0120] 화학식 6에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>11</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치 환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 티올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성할 수 있다.
- [0121] 화학식 6에서, Ar<sub>1</sub>은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.
- [0122] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물은 지연 형광 발광 재료일 수 있다. 일 실시예의 다환 화합물은 열활성 지연 형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence) 재료일 수 있다.
- [0123] 예를 들어, 화학식 1로 표시되는 다환 화합물은 일중항 에너지 준위(S1)와 삼중항 에너지 준위(T1) 차이가 작아 열활성 지연 형광 발광 재료로 사용될 수 있다. 구체적으로,
- [0124] 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

# [0125] [화합물군 1]

[0126]





[0127]

[0128] 상술한 화학식 1로 표시된 다환 화합물은 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에 사용되어 유기 전계 발광 소자의 효율 및 수명을 개선시킬 수 있다. 구체적으로, 상술한 화학식 1로 표시된 다환 화합물은 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)의 발광층(EML)에 사용되어 유기 전계 발광 소자의 발광 효율 및 수명을 개선시킬 수 있다.

[0129] 일 실시예에서, 발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함하며, 호스트는 지연 형광 발광용 호스트이고, 도펀트는 지연 형광 발광용 도펀트일 수 있다. 한편, 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물은 발광층(EML)의 도 펀트 재료로 포함될 수 있다. 예를 들어, 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물은 TADF 도펀트로 사용되는 것일 수 있다.

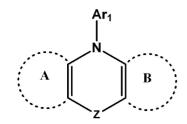
한편, 일 실시예에서 발광층(EML)은 공지의 호스트 재료를 포함할 수 있다. 예를 들어, 일 실시예에서 발광층 [0130] (EML)은 호스트 재료로, Alq<sub>3</sub>(tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), CBP(4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'biphenvl). PVK(poly(n-vinylcabazole). ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene), Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine), tert-butyl-9,10-di(naphth-2-yl)anthracene), DSA(distyrylarylene), CDBP(4,4'-bis(9-carbazolyl)-2,2'dimethyl-biphenyl), MADN(2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), DPEPO (bis[2oxide), CP1 (diphenylphosphino)phenyl] ether (Hexaphenyl cyclotriphosphazene), UGH2 (1.4-Bis(triphenylsilyl)benzene), DPSiO<sub>3</sub> (Hexaphenylcyclotrisiloxane),  $DPSiO_4$ (Octaphenylcyclotetra siloxane), 또는 PPF (2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran) 등을 포함할 수 있다. 하지만, 실시예가 이 에 한정되는 것은 아니며, 제시된 호스트 재료 이외에 공지의 지연 형광 발광 호스트 재료가 포함될 수 있다.

[0131] 한편, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 발광층(EML)은 공지의 도편트 재료를 더 포함할 수 있다. 일 실시예에서 발광층(EML)은 도편트로 스티릴 유도체(예를 들어, 1, 4-bis[2-(3-N-ethylcarbazoryl)vinyl]benzene(BCzVB), 4-(di-p-tolylamino)-4'-[(di-p-tolylamino)styryl]stilbene(DPAVB), N-(4-((E)-2-(6-((E)-4-(diphenylamino)styryl)naphthalen-2-yl)vinyl)phenyl)-N-phenylbenzenamine(N-

BDAVBi), 페릴렌 및 그 유도체(예를 들어, 2, 5, 8, 11-Tetra-t-butylperylene(TBP)), 피렌 및 그 유도체(예를 들어, 1, 1-dipyrene, 1, 4-dipyrenylbenzene, 1, 4-Bis(N, N-Diphenylamino)pyrene) 등의 2,5,8,11-Tetra-t-butylperylene(TBP)) 등을 포함할 수 있다.

- [0132] 다시 도 1 내지 도 3을 참조하면, 일 실시예의 유기 전계 발광 소자(10)에서 전자 수송 영역(ETR)은 발광층 (EML) 상에 제공된다. 전자 수송 영역(ETR)은, 전자 저지층, 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층(EIL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0133] 전자 수송 영역(ETR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0134] 예를 들어, 전자 수송 영역(ETR)은 전자 주입층(EIL) 또는 전자 수송층(ETL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 전자 주입 물질과 전자 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 전자 수송 영역(ETR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1 전극(EL1)으로부터 차례로 적층된 전자수송층(ETL)/전자 주입층(EIL), 정공 저지층/전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL) 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송 영역(ETR)의 두께는 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.
- [0135] 전자 수송 영역(ETR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 예를 들어 전자 수송 영역(ETR)은 Alq3(Tris(8-hydroxyquinolinato)aluminum), 1,3,5-tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene, 2,4,6-tris(3'-(pyridin-3-yl)biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine, 2-(4-(N-phenylbenzoimidazolyl-1-ylphenyl)-9,10-dinaphthylanthracene, TPBi(1,3,5-tri(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)benzene), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), TAZ(3-(4-Biphenylyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole), tBu-PBD(2-(4-Biphenylyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole), BAlq(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,08)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), Bebq2(berylliumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 및 이들의 혼합물을 포함할 수 있으나, 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0137] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함하는 경우 전자 수송층(ETL)들의 두께는 약 100Å 내지 약 1000 Å, 예를 들어 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족 할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.
- [0138] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 예를 들어, LiF, LiQ (Lithium quinolate), Li<sub>2</sub>O, BaO, NaCl, CsF, Yb와 같은 란타넘족 금속, 또는 RbCl, RbI, KI와 같은 할로겐화 금속 등이 사용될 수 있으나 실시예가 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 주입층(EIL)은 또한 전자 수송 물질과 절연성의 유기 금속염(organo metal salt)이 혼합된 물질로 이루어질 수 있다. 유기 금속염은 에너지 밴드 갭 (energy band gap)이 대략 4eV 이상의 물질이 될 수 있다. 구체적으로 예를 들어, 유기 금속염은 금속 아세테이트(metal acetate), 금속 벤조에이트(metal benzoate), 금속 아세토아세테이트(metal acetoacetate), 금속 아세탈아세토네이트(metal acetylacetonate) 또는 금속 스테아레이트(stearate)를 포함할 수 있다.
- [0139] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함하는 경우 전자 주입층(EIL)들의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.
- [0140] 전자 수송 영역(ETR)은 앞서 언급한 바와 같이, 정공 저지층을 포함할 수 있다. 정공 저지층은 예를 들어, BCP(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 및 Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0141] 제2 전극(EL2)은 전자 수송 영역(ETR) 상에 제공된다. 제2 전극(EL2)은 도전성을 갖는다. 제2 전극(EL2)은 금속합금 또는 도전성 화합물로 형성될 수 있다. 제2 전극(EL2)은 캐소드(cathode)일 수 있다. 제2 전극(EL2)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제2 전극(EL2)DL 투과형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 이루어질 수 있다.

- [0142] 제2 전극(EL2)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들의 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 예시된 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다.
- [0143] 도시하지는 않았으나, 제2 전극(EL2)은 보조 전극과 연결될 수 있다. 제2 전극(EL2)이 보조 전극과 연결되면, 제2 전극(EL2)의 저항을 감소 시킬 수 있다.
- [0144] 유기 전계 발광 소자(10)에서, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)에 각각 전압이 인가됨에 따라 제1 전극(EL1)으로 부터 주입된 정공(hole)은 정공 수송 영역(HTR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동되고, 제2 전극(EL2)으로부터 주입된 전자가 전자 수송 영역(ETR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동된다. 전자와 정공은 발광층(EML)에서 재결합하여 여기자(exciton)을 생성하며, 여기자가 여기 상태에서 바닥 상태로 떨어지면서 발광하게 된다.
- [0145] 유기 전계 발광 소자(10)가 전면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 반사형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 투과형 전 극 또는 반투과형 전극일 수 있다. 유기 전계 발광 소자(10)가 배면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 투과형 전 극 또는 반투과형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 반사형 전극일 수 있다.
- [0146] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 전술한 다환 화합물을 발광충 재료로 사용하여, 개선된 발광 효율 및 수명 특성을 나타낼 수 있다.
- [0147] 본 발명의 일 실시예는 하기 화학식 1로 표시되는 다환 화합물을 제공한다.
- [0148] [화학식 1]



- [0149]
- [0150] 화학식 1에서, 고리 A 및 고리 B는 각각 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴고리, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴고리이다.
- [0151] 한편, 화학식 1에서, 고리 A 및 고리 B 중 적어도 어느 하나는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴고리이며, 고리 A 및 고리 B가 모두 헤테로아릴고리가 아닌 경우 분자 안정성이 낮아져 유기 전계 발광 소자에 적용 시 발광 효율 또는 수명이 저하될 수 있다.
- [0152] 화학식 1에서, Z는 BAr<sub>2</sub>, POAr<sub>3</sub>, PSAr<sub>4</sub>, SiAr<sub>5</sub>Ar<sub>6</sub>, 또는 GeAr<sub>7</sub>Ar<sub>8</sub> 이다.
- [0153] 화학식 1에서, Ar<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테 로아릴기이다.
- [0154] 화학식 1에서, Ar<sub>2</sub> 내지 Ar<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴 기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성한다.
- [0155] 일 실시예에서, 화학식 1의 고리 A 및 고리 B 중 적어도 어느 하나는 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[0156] [화학식 2]

$$R_1$$
  $X$   $*$   $R_2$   $Y$ 

[0157]

[0158] 화학식 2에서, X 및 Y는 각각 독립적으로 직접 결합, O, S, SO, SO<sub>2</sub>, Se, NR<sub>3</sub>, PR<sub>4</sub>, POR<sub>5</sub>, PSR<sub>6</sub>, SiR<sub>7</sub>R<sub>8</sub>, GeR<sub>9</sub>R<sub>10</sub>, 또는 BR<sub>11</sub>일 수 있다.

[0159] 화학식 2에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>11</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 옥시기, 치환 또는 비치환된 티올기, 치환 또는 비치환된 아민기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 실릴기, 카보닐기, 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 7 이상 30 이하의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 1 이상 30 이하의 아릴기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 고리를 형성한다.

[0160] 한편, 화학식 2는 화학식 1의 고리 A 및 고리 B 중 어느 하나가 헤테로 아릴고리인 경우의 일 실시예를 나타내며, 화학식 2의 X 및 Y가 동시에 직접 결합인 경우는 제외한다.

[0161] 상기 화학식 1로 표시되는 일 실시예의 다환 화합물에 대하여는 상술한 일 실시예의 유기 전계 발광 소자에서 설명한 다환 화합물에 대한 설명이 동일하게 적용될 수 있다.

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

[0163] 이하, 구체적인 실시예 및 비교예를 통해 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다. 하기 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 예시에 불과하며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.

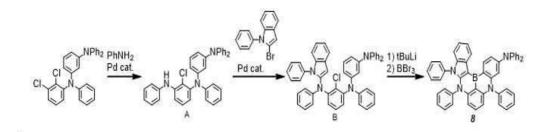
[0164] (합성예)

[0162]

[0165] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물은 예를 들어, 하기와 같이 합성할 수 있다. 다만, 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물의 합성 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.

[0166] 1. 화합물 8의 합성

[0167] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 8은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.



[0168] [0169]

(중간체 화합물 A의 합성)

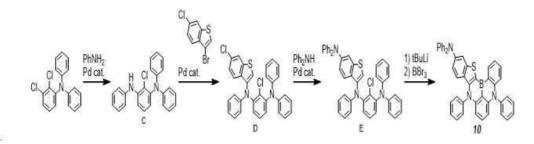
[0170] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 Flask에 N¹-(2,3-dichlorophenyl)-N¹,N³,N³-triphenyl-1,3-Benzenediamine 9.63 g(20 mmol)과 aniline 2.0 mL(22 mmol), (Amphos)PdCl₂ 0.71 g(1.0 mmol), NaOtBu 2.11 g(22 mmol)을 더해서, 100 mL xylene 용매 중에서 120℃로 1시간 교반하였다. 공랭 후, 물을 더해서 유기층을 분취하여 용매 유거하였다. 획득한 조생성물을 Column chromatography(Silica gel)로 정제 후, 백색 고체의 화합물 A를 7.40 g(수율 69%) 얻었다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 A의 분자량은, 537이었다.

[0171] (중간체 화합물 B의 합성)

[0172] Ar 분위기하, 200 mL의 3구 Flask에 화합물 A 7.37 g(13.7 mmol)과 2-bromo-1-phenyl-1H-Indole 4.08 g(15.0 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> 0.13 g(0.14 mmol), Ruphos 0.26 g(0.55 mmol), NaOtBu 1.44 g(15.0 mmol)을 더해서, 70 mL

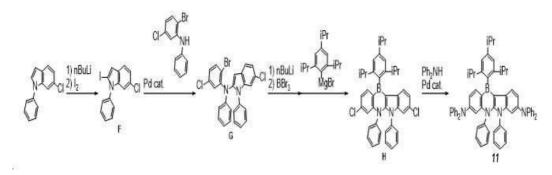
toluene용매 중에서 100℃로 3시간 교반하였다. 공랭 후, 물을 더해서 유기층을 분취하여 용매 유거하였다. 획득한 조생성물을 Column chromatography(Silica gel)로 정제 후, 백색 고체의 화합물 B를 6.79 g(수율 68%) 얻었다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 B의 분자량은, 728이었다.

- [0173] (화합물 8의 합성)
- [0174] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 Flask에 화합물 B 6.78 g(9.3 mmol)의 탈수 t-Buthylbenzene 용액 50 mL를 더해 -78 ℃에서 교반하였다. 여기에, 1.9 M의 t-BuLi의 pentane 용액 19.5 mL(37 mmol)를 적하하였다. 적하 종료후, 60 ℃까지 온도를 상승시켜 2시간 교반한 후, t-Buthylbenzene보다 저비점인 성분을 감압 유거하였다. -30 ℃까지 냉각하여 BBr₃ 1.8 mL(19 mmol)를 적하하였다. 적하 종료후, 실온까지 온도를 상승시켜 2시간 교반하였다. 그후, 다시 0 ℃까지 냉각하여 N,N-diisopropylethylamine 1.7 mL(9.8 mmol)를 적하하였다. 적하 종료후, 실온까지 온도를 상승시켜 1시간 교반한 후, 120 ℃까지 온도를 상승시켜 8시간 가열 교반하였다. 반응액을실온까지 냉각하여, 얼음 조(ice bath)로 냉각한 NaOAc 수용액, toluene을 더해서 분액하였다. 이어서, Short Column chromatography(Silica gel)로 정제후, toluene/hexane 용매로 재결정을 실시하여, 황색 고체의 화합물 8을 5.09 g(수율 78%) 얻었다.
- [0175] FAB-MS 및 NMR를 측정해 화합물 8을 확인했다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 8의 분자량은 702였다. 또한, <sup>1</sup>H-NMR(CDCl<sub>3</sub>) 측정으로 측정된 화합물 8의 Chemical Shift값 δ는 8.43 (1H), 7.94 (1H), 7.69-7.48 (6H), 7.37-7.22 (11H), 7.10-6.98 (12H), 6.86-6.81 (4H) 였다.
- [0176] 2. 화합물 10의 합성
- [0177] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 10은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.



- [0178]
- [0179] (중간체 화합물 C의 합성)
- [0180] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 Flask에 2,3-dichloro-N,N-diphenyl-1,3-Benzenediamine 6.28 g(20 mmol)과 aniline 2.0 mL(22 mmol), (Amphos)PdCl₂ 0.71 g(1.0 mmol), NaOtBu 2.11 g(22 mmol)을 더해서, 100 mL xylene 용매 중에서 120℃로 1시간 교반하였다. 공랭 후, 물을 더해서 유기층을 분취하여 용매 유거하였다. 획득한 조생성물을 Column chromatography(Silica gel)로 정제 후, 백색 고체의 화합물 C를 6.00 g(수율 81%) 얻었다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 C의 분자량은, 370이었다.
- [0181] (중간체 화합물 D의 합성)
- [0182] Ar 분위기하, 200 mL의 3구 Flask에 화합물 C 5.97 g(16.1 mmol)과 3-bromo-6-chloro-benzo[b]thiophene 4.38 g(17.7 mmol), Pd2(dba)3 0.15 g(0.16 mmol), Ruphos 0.30 g(0.64 mmol), NaOtBu 1.70 g(17.7 mmol)을 더해서, 80 mL toluene용매 중에서 100℃로 3시간 교반하였다. 공랭 후, 물을 더해서 유기층을 분취하여 용매 유거하였다. 획득한 조생성물을 Column chromatography(Silica gel)로 정제 후, 백색 고체의 화합물 D를 5.27 g(수율 61%) 얻었다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 D의 분자량은, 536이었다.
- [0183] (중간체 화합물 E의 합성)
- [0184] Ar 분위기하, 200 mL의 3구 Flask에 화합물 D 5.26 g(9.8 mmol)과 diphenylamine 1.66 g(9.8 mmol), Pd2(dba)₃ 0.18 g(0.20 mmol), Ruphos 0.36 g(0.78 mmol), NaOtBu 1.04 g(10.8 mmol)을 더해서, 50 mL toluene용매 중에서 110℃로 8시간 교반하였다. 공랭 후, 물을 더해서 유기층을 분취하여 용매 유거하였다. 획득한 조생성물을 Column chromatography(Silica gel)로 정제 후, 백색 고체의 화합물 E를 5.05 g(수율 77%) 얻었다.
- [0185] FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 E의 분자량은, 669였다.

- [0186] (화합물 10의 합성)
- [0187] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 Flask에 화합물 E 5.03 g(7.5 mmol)의 탈수 t-Buthylbenzene 용액 40 mL를 더해 -78 ℃에서 교반하였다. 여기에, 1.9 M의 t-BuLi의 pentane 용액 15.8 mL(30 mmol)를 적하하였다. 적하 종료 후, 60 ℃까지 온도를 상승시켜 2시간 교반한 후, t-Buthylbenzene보다 저비점인 성분을 감압 유거하였다. -30 ℃까지 냉각하여 BBr₃ 1.4 mL(15 mmol)를 적하하였다. 적하 종료 후, 실온까지 온도를 상승시켜 2시간 교반하였다. 그 후, 다시 0 ℃까지 냉각하여 N,N-diisopropylethylamine 1.4 mL(8.0 mmol)를 적하하였다. 적하 종료 후, 실온까지 온도를 상승시켜 1시간 교반한 후, 120 ℃까지 온도를 상승시켜 8시간 가열 교반하였다. 반응액을 실온까지 냉각하여, 얼음 조(ice bath)로 냉각한 NaOAc 수용액, toluene을 더해서 분액하였다. 이어서, Short Column chromatography(Silica gel)로 정제 후, toluene/hexane 용매로 재결정을 실시하여, 황색 고체의 화합물 10을 4.00 g(수율 83%) 얻었다.
- [0188] FAB-MS 및 NMR를 측정해 화합물 10을 확인했다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 10의 분자량은 643이었다. 또한, <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>) 측정으로 측정된 화합물 10의 Chemical Shift값 δ는 8.01 (1H), 7.77 (1H), 7.71 (1H), 7.43 (1H), 7.31-7.16 (11H), 7.10-6.98 (13H), 6.86-6.82 (2H) 였다.
- [0189] 3. 화합물 11의 합성
- [0190] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 11은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.



- [0191]
- [0192] (중간체 화합물 F의 합성)
- [0193] Ar 분위기하, 500 mL 3구 Flask에, 6-chloro-1-phenyl-1H-Indole 4.55 g(20 mmol)의 탈수 THF 용액 100 mL를 더해 -78 ℃에서 교반하였다. 여기에, 1.6 M의 n-BuLi의 Hexane용액 13 mL(21 mmol)를 적하하여, 2시간 교반하였다. 여기에 아이오딘 5.33 g(21 mmol)의 탈수 THF 용액 20 mL를 적하하여 -78 ℃에서 2시간 교반한 후, 실온에서 3시간 교반하였다. 반응 후, 이 혼합액을 물로 세정하였다. 획득한 유기상을 농축하여, 점성의 물질을 얻었다. 획득한 조생성물을 Column chromatography(Silica gel)로 정제 후, 백색 고체의 화합물 F를 6.00 g(수율 85%) 얻었다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 F의 분자량은, 353이었다.
- [0194] (중간체 화합물 G의 합성)
- [0195] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 Flask에 화합물 F 5.98 g(16.9 mmol)과 2-bromo-5-chloro-N-phenyl-Benzenamine 4.78 g(16.9 mmol), Pd₂(dba)₃ 0.16 g(0.17 mmol), dppf 0.25 g(0.34 mmol), NaOtBu 1.79 g(18.6 mmol)을 더해서, 85 mL toluene용매 중에서 80℃로 6시간 교반하였다. 공랭 후, 물을 더해서 유기층을 분취하여 용매 유거하였다. 획득한 조생성물을 Column chromatography(Silica gel)로 정제 후, 백색 고체의 화합물 G를 4.96 g(수율 58%) 얻었다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 G의 분자량은 506이었다.
- [0196] (중간체 화합물 H의 합성)
- [0197] Ar 분위기하, 500 mL3구 Flask에, 화합물 G 4.93 g(9.7 mmol)의 탈수 THF 용액 100 mL를 더해 -78 ℃에서 교반하였다. 여기에, 1.6 M의 n-BuLi의 Hexane 용액 12.5 mL(20 mmol)를 적하해 2시간 교반한 후, BBr₃ 1.0 mL(10 mmol)를 적하하여, -78 ℃에서 1시간 교반하고, 실온에서 3시간 교반하였다. 이를 0℃까지 냉각한 후, 1.0 M 의 2,4,6-triisopropylphenylmagnesium bromide의 THF 용액 10 mL(10 mmol)를 적하하여 0 ℃에서 2시간 교반한후, 실온에서 3시간 교반하였다. 반응 후, 이 혼합액을 물로 세정하였다. 획득한 유기상을 농축하여, 점성의 물질을 얻었다. 획득한 조생성물을 Column chromatography(Silica gel)로 정제 후, 황색 고체의 화합물 H를 4.36

g(수율 70%) 얻었다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 H의 분자량은 640이었다.

- [0198] (화합물 11의 합성)
- [0199] Ar 분위기하, 200 mL의 3구 Flask에 화합물 H 4.35 g(6.8 mmol)과 diphenylamine 2.30 g(13.6 mmol), Pd₂(dba)₃ 0.31 g(0.34 mmol), Ruphos 0.63 g(1.36 mmol), NaOtBu 1.44 g(15.0 mmol)을 더해서, 70 mL toluene 용매 중에서 110℃로 8시간 교반하였다. 공랭 후, 물을 더해서 유기층을 분취하여 용매 유거하였다. 획득한 조생성물을 Column chromatography(Silica gel)로 정제 후, 황색 고체의 화합물 11을 3.20 g(수율 52%) 얻었다.
- [0200] FAB-MS 및 NMR를 측정해 화합물 11을 확인했다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 11의 분자량은 906이었다. 또한, <sup>1</sup>H-NMR(CDC13) 측정으로 측정된 화합물 11의 Chemical Shift값 δ는 8.39 (1H), 7.69-7.56 (5H), 7.31-7.22 (12H), 7.10-6.98 (15H), 6.86-6.81 (2H), 6.40 (1H), 2.90-2.85 (3H), 1.22-1.16 (18H) 였다.
- [0201] 4. 화합물 12의 합성
- [0202] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 B20은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

- [0203]
- [0204] (중간체 화합물 I의 합성)
- [0205] Ar 분위기하, 500 mL의 3구 Flask에 p,p'-ditolylamine 9.86 g(50 mmol)과 2-bromo-benzo[b]thiophene 10.65 g(50 mmol), Pd₂(dba)₃ 0.46 g(0.50 mmol), Ruphos 0.93 g(2.0 mmol), NaOtBu 5.29 g(55 mmol)을 더해서, 250 mL toluene용매 중에서 100℃로 2시간 교반하였다. 공랭 후, 물을 더해서 유기층을 분취하여 용매 유거하였다. 획득한 조생성물을 Column chromatography(Silica gel)로 정제 후, 백색 고체의 화합물 I를 15.15 g(수율 92%) 얻었다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 I의 분자량은, 329였다.
- [0206] (중간체 화합물 K의 합성)
- [0207] 1000 mL 등근바닥 Flask에 화합물 I 15.13 g(46 mmol)과 N-bromosuccinimide 25.45 g(143 mmol)을 더해서, 아 세트산 30 mL를 첨가해, 300 mL chloroform 용매 중에서 2시간 0℃로 교반하였다. 공랭 후, sodium thiosulfate 수용액을 더해서 유기층을 분취하여 용매 유거하였다. Column chromatography(Silica gel)로 정제 후, 백색 고체의 화합물 K를 23.16 g(수율 89%) 얻었다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 K의 분자량은 562였다.
- [0208] (화합물 12의 합성)
- [0209] Ar 분위기하, 1000 mL의 3구 Flask에 화합물 A 23.13 g(40.9 mmol)의 탈수 t-Buthylbenzene 용액 160 mL를 더해 -78 ℃에서 교반하였다. 여기에, 1.9 M의 t-BuLi의 pentane 용액 129 mL(245 mmol)를 적하하였다. 적하 종료 후, 실온까지 온도를 상승시켜 2시간 교반하였다. 그 후, -30℃까지 냉각하여 BBr₃ 7.8 mL(82 mmol)를 적하 하였다. 적하 종료 후, 실온까지 온도를 상승시켜 1시간 교반하였다. 그 후, 다시 0 ℃까지 냉각하여 1,2,2,6,6-pentamethylpyperidine 14.9 mL(82 mmol)를 적하하였다. 적하 종료 후, 실온까지 온도를 상승시켜 1시간 교반한 후, 160 ℃까지 온도를 상승시켜 10시간 가열 교반하였다. 반응액을 0 ℃까지 냉각하여, 1.0 M 의 2,4,6-triisopropylphenylmagnesium bromide의 THF 용액 164 mL(164 mmol)를 적하하여 0 ℃에서 2시간 교반한 후, 실온에서 3시간 교반하였다. 반응 후, 인산 완충 용액(pH6), toluene을 더해서 분액하였다. 이어서, Column chromatography(Silica gel)로 정제 후, toluene/hexane 용매로 재결정을 실시하여 황색 고체의 화합물 4를 4.55 g(수율 19%) 얻었다.
- [0210] FAB-MS 및 NMR를 측정해 화합물 12를 확인했다. FAB-MS 측정에 의해 측정된 화합물 12의 분자량은, 585였다. 또

한, H-NMR(CDCl<sub>3</sub>) 측정으로 측정된 화합물 12의 Chemical Shift값 δ는 8.05 (1H), 7.93 (1H), 7.51-7.40 (2H), 7.19-7.11 (5H), 6.99-6.95 (4H), 2.38-2.31 (18H), 2.20-2.16 (6H) 였다.

#### [0211] (소자 작성예)

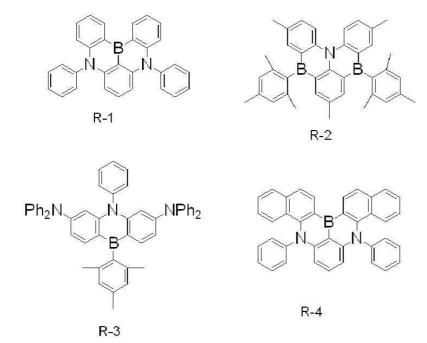
[0212] 상술한 화합물 8, 10, 11 및 12의 다환 화합물을 발광층 재료로 사용하여 실시예 1 내지 실시예 4의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다. 하기에서는 실시예 1 내지 실시예 4 및 비교예 1 내지 비교예 4에서 발광층에 사용된 화합물을 나타내었다.

### [0213] [실시예 화합물]

# [0214] [0215]

하기 비교예 화합물 R-1 내지 R-4를 발광층 재료로 사용하여 비교예 1 내지 4의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

### [0216] [비교예 화합물]



[0217]

- [0218] 실시예 1 내지 4 및 비교예 1 내지 4의 유기 전계 발광 소자는 유리 기판 상에 두꼐 1500Å의 ITO를 패터닝한 후, 초순수로 세척하고 UV 오존 처리를 10분간 실시하였다. 그 후, 100Å 두께로 HAT-CN을 증착하고, α-NPD를 두께 800Å로 증착하고, mCP를 50Å 두께로 증착하여 정공 수송 영역을 형성하였다.
- [0219] 다음으로, 발광층 형성시 일 실시예의 다환 화합물 또는 비교예 화합물과 DPEPO를 20:80의 비율로 공증착하여 두께 200Å의 충을 형성하였다. 다음으로 DPEPO를 이용하여 100Å 두께의 충을 형성하였다. 즉, 공증착하여 형성된 발광층은 실시예 1 내지 실시예 4에서는 각각 화합물 8, 10, 11, 및 12를 DPEPO와 혼합하여 증착하였고, 비교예 1 내지 비교예 4에서는 비교예 화합물 R-1, R-2, R-3, 및 R-4를 DPEPO와 혼합하여 증착하였다.
- [0220] 발광층 상에 TPBi로 두께 300Å의 층을 형성하고, LiF로 두께 5Å의 층을 형성하여 전자 수송 영역을 형성하였다. 다음으로, 알루미늄(Al)으로 두께 1000Å의 제2 전극을 형성하였다.
- [0221] 실시예에서, 정공 수송 영역, 발광층, 전자 수송 영역, 및 제2 전극은 진공 증착 장치를 이용하여 형성하였다.
- [0222] (유기 전계 발광 소자의 특성 평가)

[0224]

[0223] 실시예 및 비교예에 따른 유기 전계 발광 소자의 특성을 평가하기 위하여 최대 발광 파장(nm) 및 외부 외부 양자 수율(%)을 측정하였다. 하마마츠 포토닉스 제 C9920-11 휘도 배향 특성 측정 장치를 이용하여 측정하였다. 수명은 초기 휘도 100 cd/m<sup>2</sup>에서부터의 휘도 반감 시간을 나타내며, EQE는 10 mA/cm<sup>2</sup>에서의 값을 의미한다.

### 丑 1

31. 1						
구분	발광층 도펀트	외부 양자 수율	수명			
		(%)	LT <sub>50</sub> (h)			
실시예 1	화합물 8	15.3	19.4			
실시예 2	화합물 10	19.8	33.4			
실시예 3	화합물 11	16.3	10.8			
실시예 4	화합물 12	21.2	11.4			
비교예 1	비교예 화합물 R-1	12.8	2.9			
비교예 2	비교예 화합물 R-2	14.4	3.8			
비교예 3	비교예 화합물 R-3	6.9	9.8			
비교예 4	비교예 화합물 R-4	7.2	8.5			

- [0225] 표 1을 참조하면, 일 실시예의 다환 화합물을 발광층의 도펀트 물질로 사용한 실시예 1 내지 실시예 4의 유기 전계 발광 소자는 비교예 1 내지 비교예 4와 비교하여 높은 외부 양자 효율을 나타내는 것을 알 수 있다. 또한, 일 실시예의 다환 화합물을 발광층의 도펀트 물질로 사용한 실시예 1 내지 실시예 4의 유기 전계 발광 소자는 비교예 1 내지 비교예 4와 비교하여 장수명을 제공하는 것을 알 수 있다.
- [0226] 표 1의 결과를 참조하면, 실시예 화합물들은 고효율, 장수명의 열활성 지연 형광 재료로 사용될 수 있음을 확인 할 수 있다.
- [0227] 일 실시예의 유기 전계 발광 소자의 경우 상술한 일 실시예의 다환 화합물을 발광층에 포함하여 높은 발광 효율을 나타낼 수 있다.
- [0228] 실시예와 비교하여, 비교예 화합물 R-1 내지 R-4는 안정된 헤테로아릴고리를 코어분자 내에 포함하지 않으므로 비교예 1 내지 4의 유기 전계 발광 소자는 실시예들에 비하여 낮은 외부 양자 효율 및 낮은 소자의 수명을 나타 내었다.
- [0229] 이상에서는 본 발명의 바람직한 실시예를 참조하여 설명하였지만, 해당 기술 분야의 숙련된 당업자 또는 해당 기술 분야에 통상의 지식을 갖는 자라면, 후술될 특허청구범위에 기재된 본 발명의 사상 및 기술 영역으로부터 벗어나지 않는 범위 내에서 본 발명을 다양하게 수정 및 변경시킬 수 있음을 이해할 수 있을 것이다.
- [0230] 따라서, 본 발명의 기술적 범위는 명세서의 상세한 설명에 기재된 내용으로 한정되는 것이 아니라 특허청구범위에 의해 정하여져야만 할 것이다.

### 부호의 설명

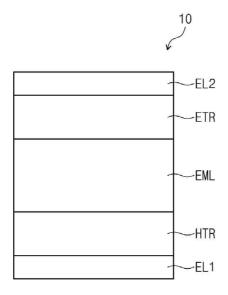
[0232] 10 : 유기 전계 발광 소자 EL1 : 제1 전극

EL2 : 제2 전국 HTR : 정공 수송 영역

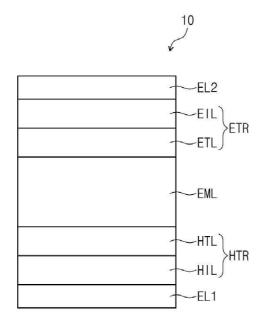
EML : 발광층 ETR : 전자 수송 영역

### 도면

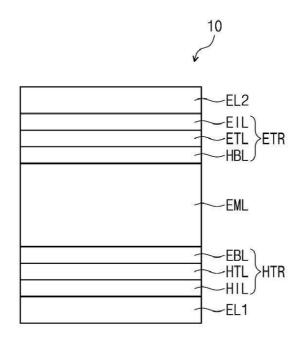
### 도면1



### 도면2



### 도면3





专利名称(译)	可机电致发光元件和用于有机电致发光元件的多环化合物			
公开(公告)号	KR1020200087906A	公开(公告)日	2020-07-22	
申请号	KR1020190003819	申请日	2019-01-11	
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司			
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司			
发明人	야마타니, 아키노리			
IPC分类号	H01L51/00 C07F5/02 C07F7/08 H	01L51/50		
CPC分类号	H01L51/008 C07F5/027 C07F7/08	316 H01L51/0094 H01L51/5024		

### 摘要(译)

一个实施方案的有机电致发光器件包括第一电极,设置在第一电极上的空穴传输区域,设置在空穴传输区域上的发光层,设置在发光层上的电子传输区域以及设置在电子传输区域上的第二电极。 它包括电极,并且发光层可以包括由化学式1表示的多环化合物以表现出高的发光效率。

