



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0005698
(43) 공개일자 2020년01월16일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
H01L 51/52 (2006.01)
(52) CPC특허분류
H01L 51/0071 (2013.01)
H01L 51/0072 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2018-0078747
(22) 출원일자 2018년07월06일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
(72) 발명자
사카모토, 나오히
일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와초
2-7 주식회사 삼성 일본 연구소내
(74) 대리인
특허법인 고려

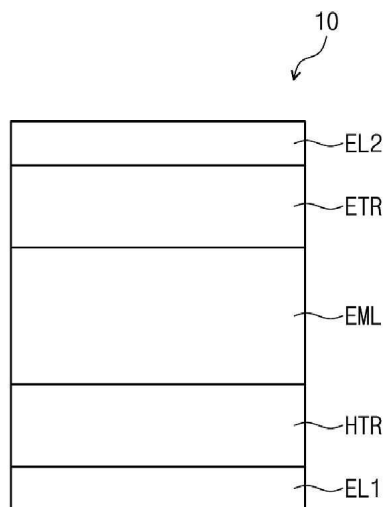
전체 청구항 수 : 총 20 항

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

(57) 요약

본 발명은 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, 발광층이 합질소 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다. 합질소 화합물은 치환된 피리딘, 치환된 피리미딘 또는 치환된 1,3,5-트리아진 중 하나인 헤테로고리 모이어티 및 두 개의 카바졸 모이어티들을 포함하고, 헤테로고리 모이어티의 2번, 4번 및 6번 탄소 중 두 개의 탄소에 각각 페닐렌기들이 치환되고, 나머지 하나의 탄소에 치환 또는 비치환된 방향족 화합물이 치환되고, 페닐렌기들 각각의 오르쏘(ortho) 탄소와 카바졸 모이어티들 각각의 9번 질소가 결합되고, 카바졸 모이어티들은 하나의 링커에 결합되어 서로 연결된다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 51/5024 (2013.01)

H01L 51/52 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역;

상기 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층;

상기 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고,

상기 발광층은 헤테로고리 모이어티 및 두 개의 카바졸 모이어티들을 포함하는 함질소 화합물을 포함하고,

상기 헤테로고리 모이어티는 치환된 피리딘, 치환된 피리미딘 또는 치환된 1,3,5-트리아진이고,

상기 치환된 피리딘, 상기 치환된 피리미딘 또는 상기 치환된 1,3,5-트리아진의 2번, 4번 및 6번 탄소 중 두 개의 탄소에 각각 페닐렌기들이 치환되고, 나머지 하나의 탄소에 치환 또는 비치환된 방향족 화합물이 치환되고,

상기 페닐렌기들 각각의 오르쏘(ortho) 탄소와 상기 카바졸 모이어티들 각각의 9번 질소가 결합되고,

상기 카바졸 모이어티들은 하나의 링커에 결합되어 서로 연결되는 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 2

제1 항에 있어서,

상기 방향족 화합물은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

상기 링커는 직접결합, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 3

제1 항에 있어서,

상기 방향족 화합물은 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이고,

상기 링커는 직접결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜닐렌기인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 4

제1 항에 있어서,

상기 헤테로고리 모이어티는 치환된 피리미딘 또는 치환된 1,3,5-트리아진인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 5

제1 항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고,

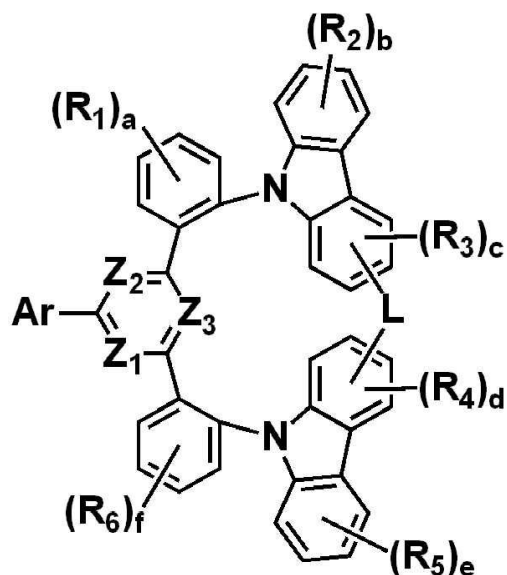
상기 도펀트가 상기 함질소 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 6

제1 항에 있어서,

상기 합질소 화합물은 하기 화학식 1로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Z_1 내지 Z_3 은 각각 독립적으로 C- R_7 또는 N 이며, Z_1 내지 Z_3 중 적어도 하나는 N이고,

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

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

R_1 내지 R_7 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 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.

a, b, e 및 f는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

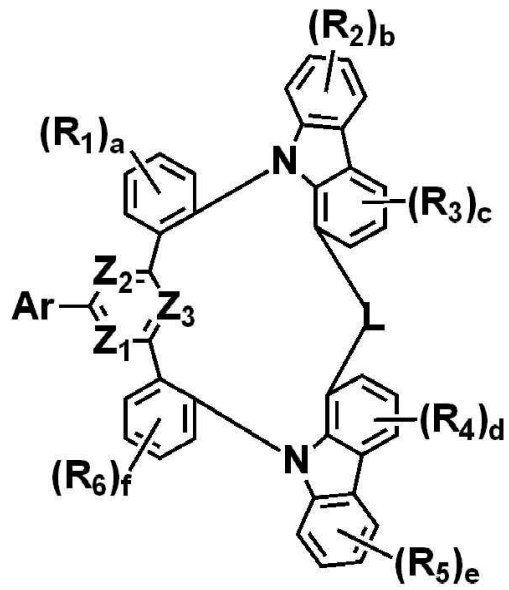
c 및 d는 각각 독립적으로 0 이상 3 이하의 정수이다.

청구항 7

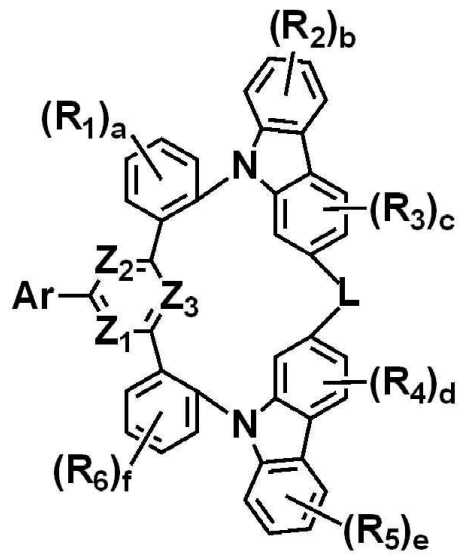
제6 항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

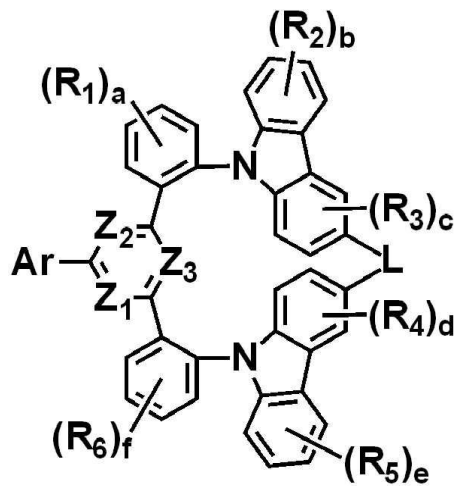
[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



[화학식 1-3]



상기 화학식 1-1 내지 1-3에서,

Z₁ 내지 Z₃, Ar, L, R₁ 내지 R₇ 및 a 내지 f는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 8

제6 항에 있어서,

Ar은 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이고,

L은 직접결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜닐렌기인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 9

제6 항에 있어서,

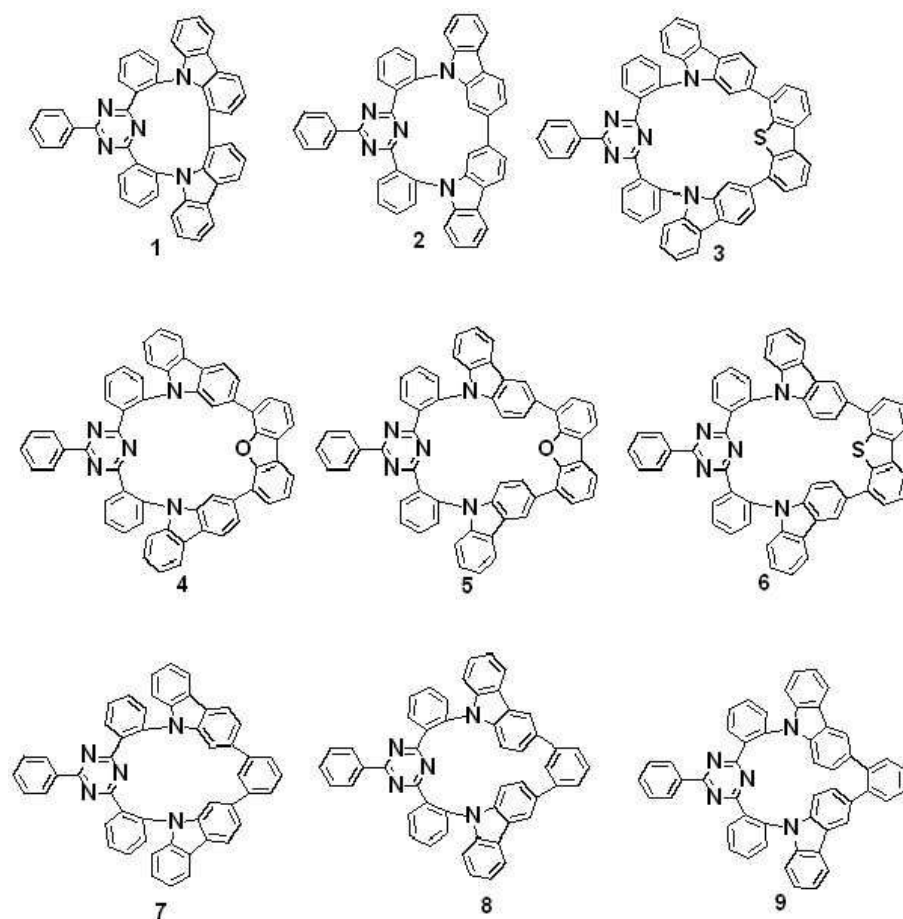
Z₁ 내지 Z₃ 중 적어도 두 개는 N인 것인 유기 전계 발광 소자.

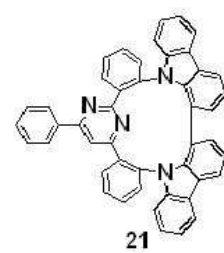
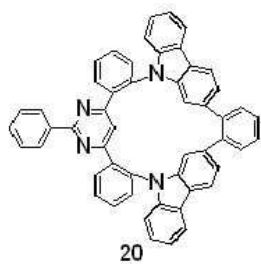
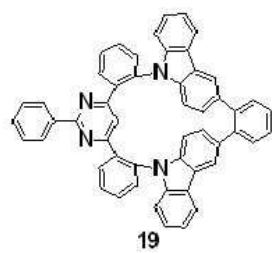
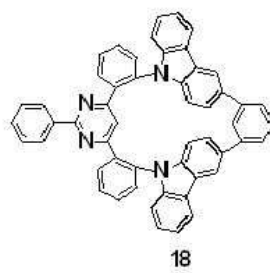
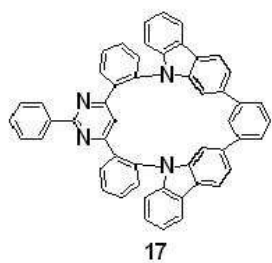
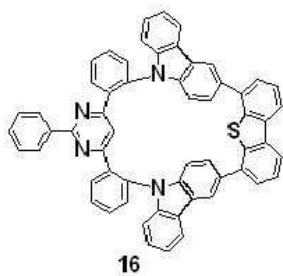
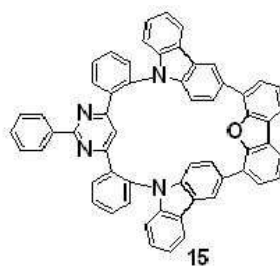
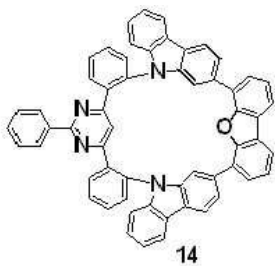
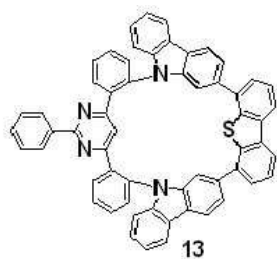
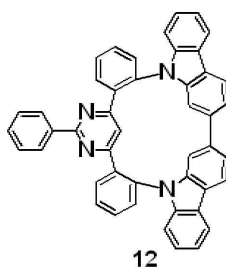
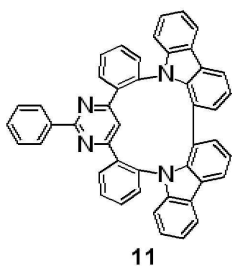
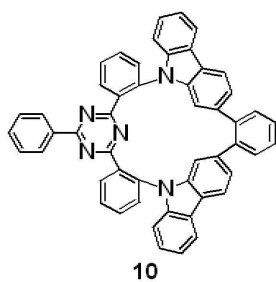
청구항 10

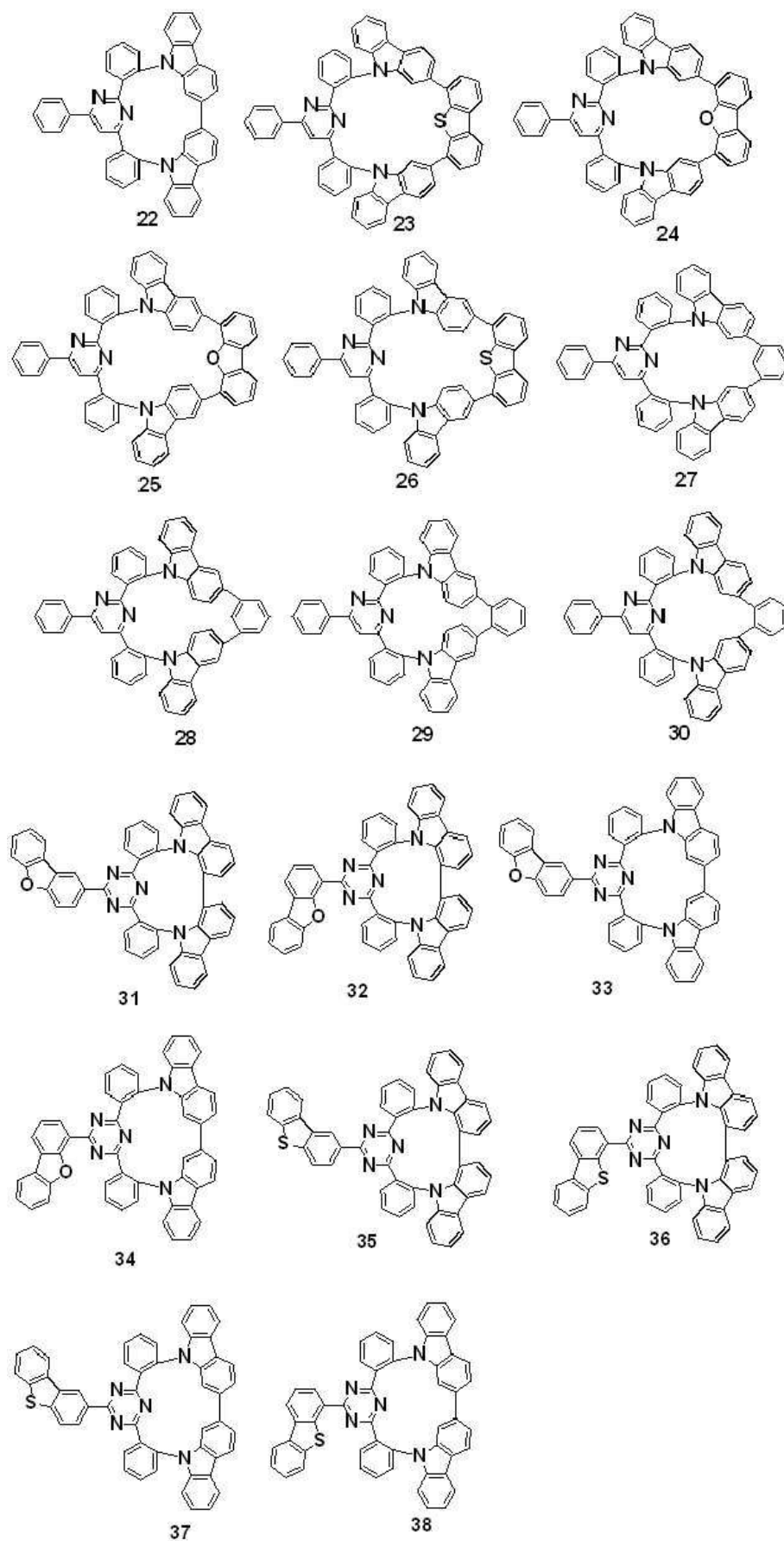
제1 항에 있어서,

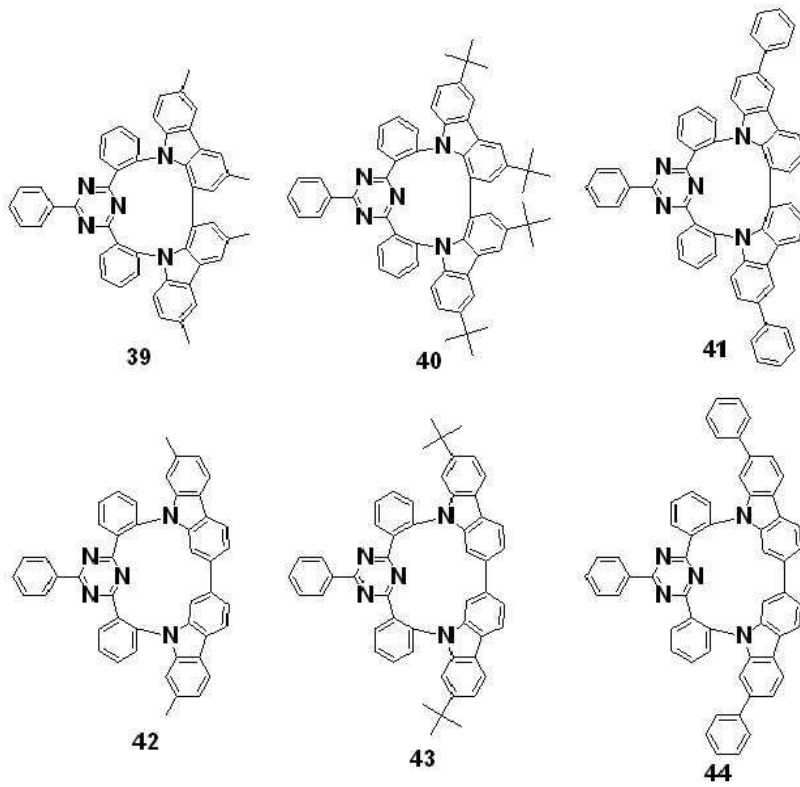
상기 함질소 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 적어도 하나인 것인 유기 전계 발광 소자:

[화합물군 1]









청구항 11

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역;

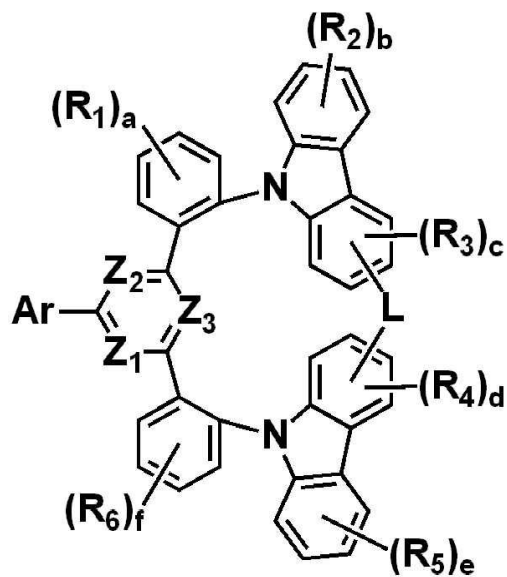
상기 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층;

상기 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고,

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

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Z_1 내지 Z_3 은 각각 독립적으로 C- R_7 또는 N 이며, Z_1 내지 Z_3 중 적어도 하나는 N이고,

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

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

R_1 내지 R_7 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

a, b, e 및 f는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

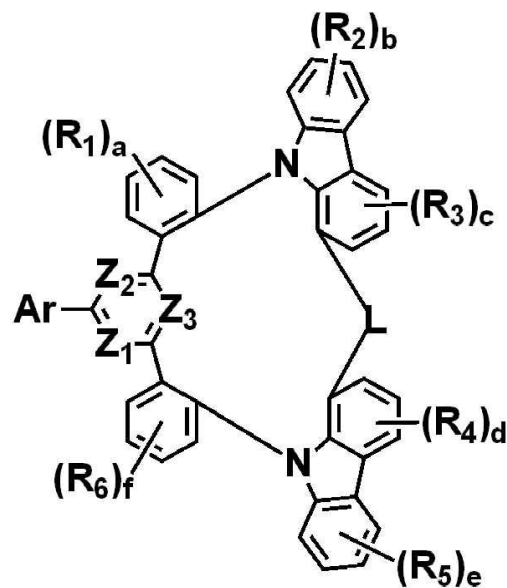
c 및 d는 각각 독립적으로 0 이상 3 이하의 정수이다.

청구항 12

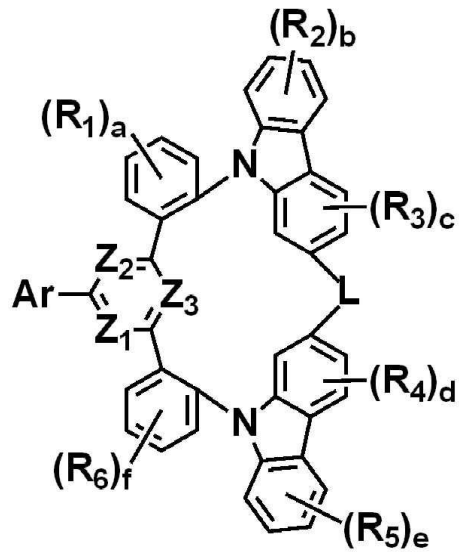
제11 항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

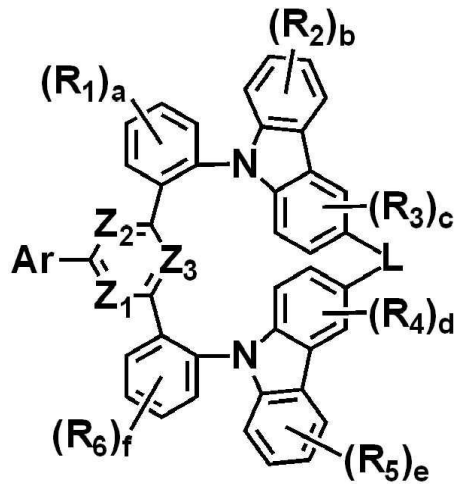
[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



[화학식 1-3]



상기 화학식 1-1 내지 1-3에서,

Z_1 내지 Z_3 , Ar, L, R_1 내지 R_7 및 a 내지 f는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 13

제11 항에 있어서,

Ar은 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이고,

L은 직접결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜닐렌기인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 14

제11 항에 있어서,

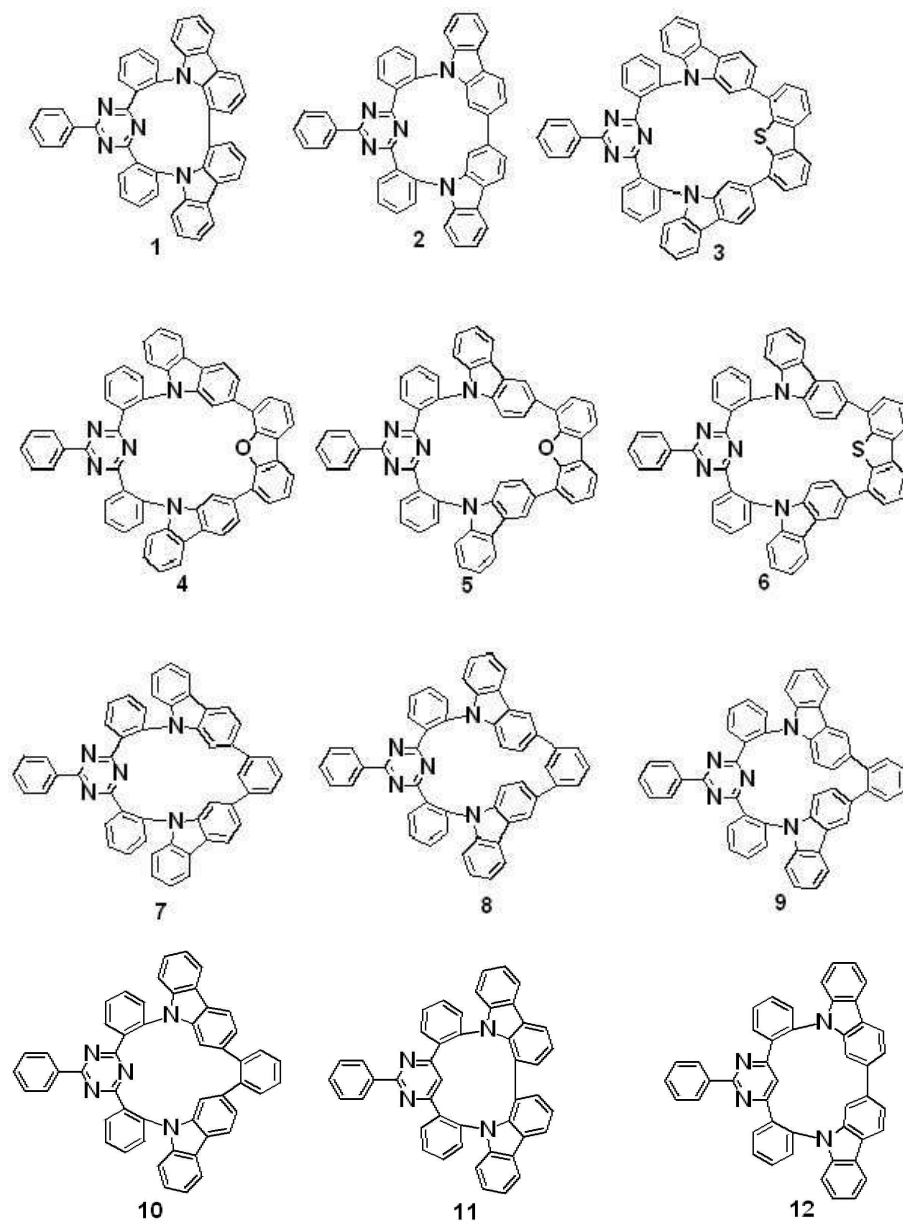
Z_1 내지 Z_3 중 적어도 두 개는 N인 것인 유기 전계 발광 소자.

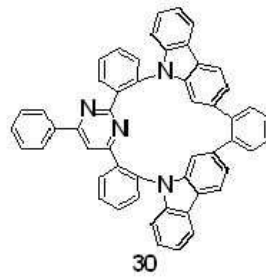
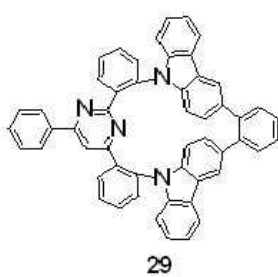
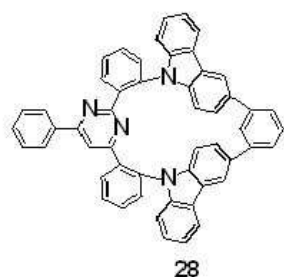
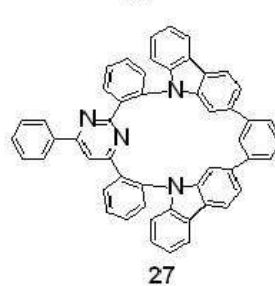
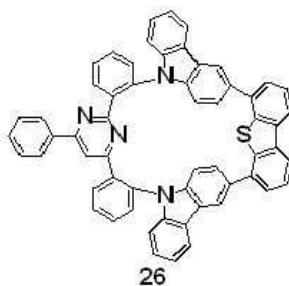
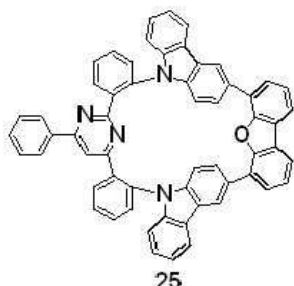
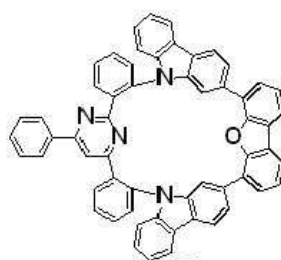
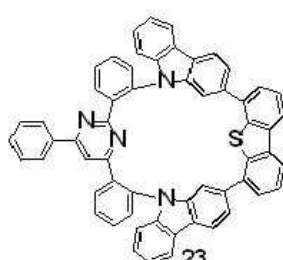
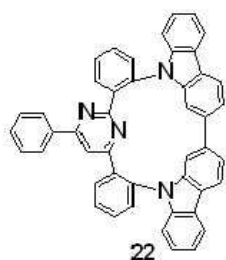
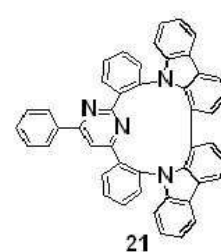
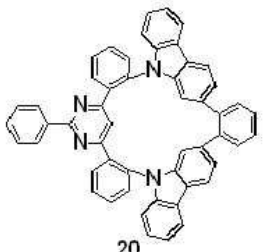
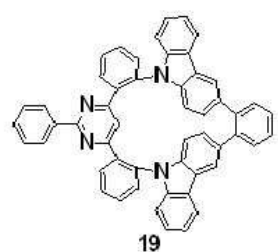
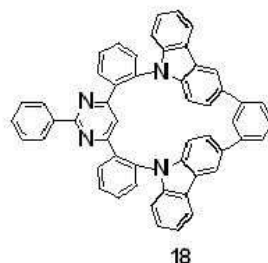
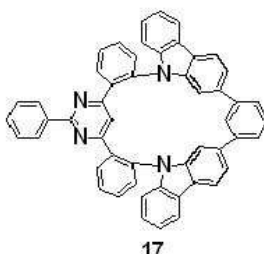
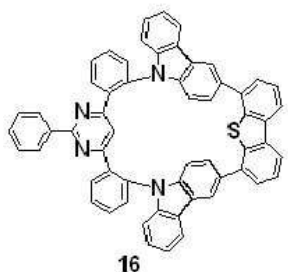
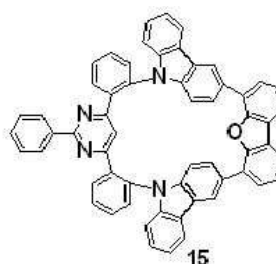
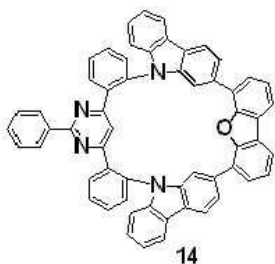
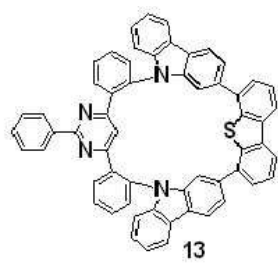
청구항 15

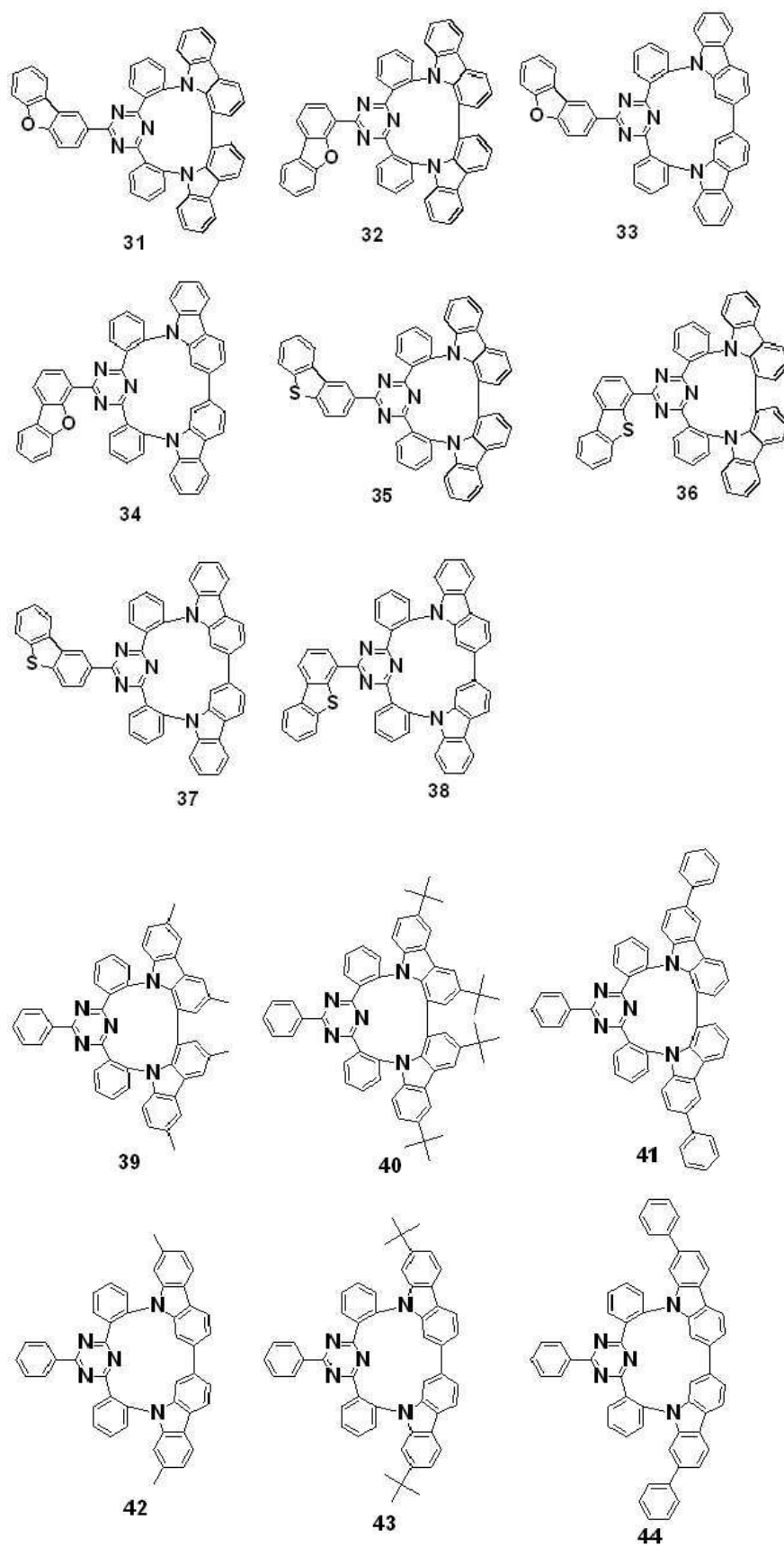
제11 항에 있어서,

상기 합질소 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 적어도 하나인 것인 유기 전계 발광 소자:

[화합물군 1]



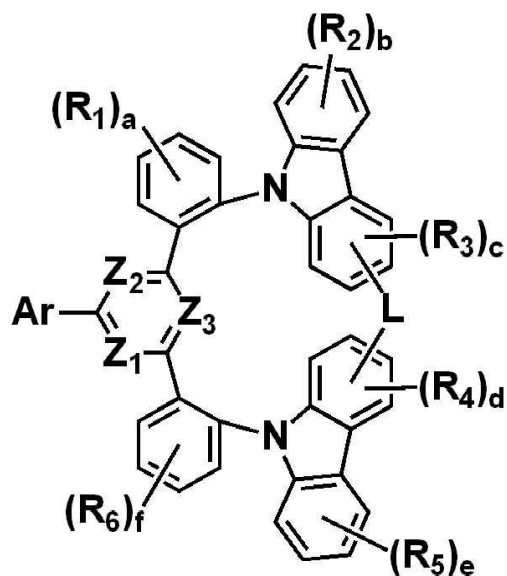




청구항 16

하기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Z_1 내지 Z_3 은 각각 독립적으로 C- R_7 또는 N 이며, Z_1 내지 Z_3 중 적어도 하나는 N이고,

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

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

R_1 내지 R_7 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 할로겐 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고,

a, b, e 및 f는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고,

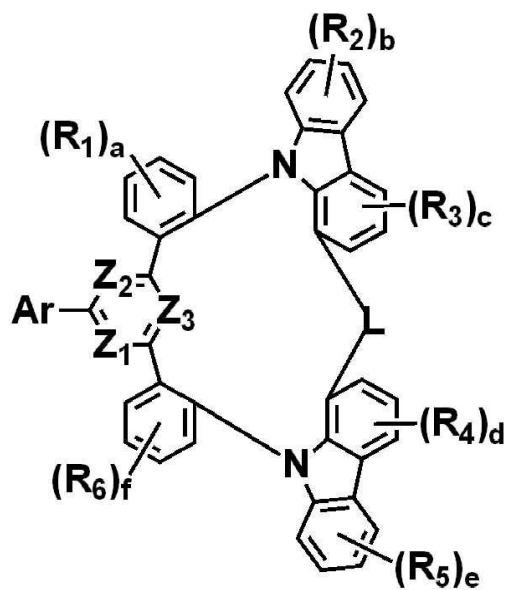
c 및 d는 각각 독립적으로 0 이상 3 이하의 정수이다.

청구항 17

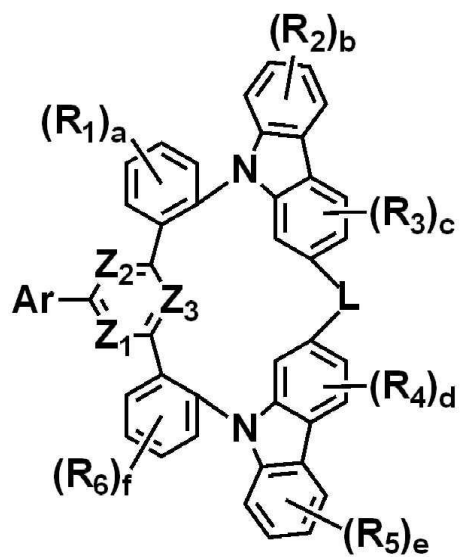
제16 항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시되는 것인 함질소 화합물:

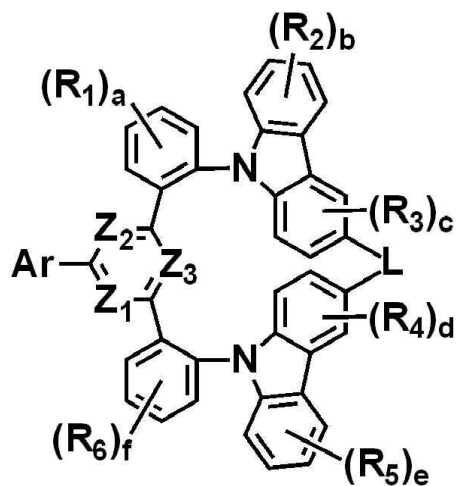
[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



[화학식 1-3]



상기 화학식 1-1 내지 1-3에서,

Z₁ 내지 Z₃, Ar, L, R₁ 내지 R₇ 및 a 내지 f는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 18

제16 항에 있어서,

Ar은 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이고,

L은 직접결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜닐렌기인 것인 함질소 화합물.

청구항 19

제16 항에 있어서,

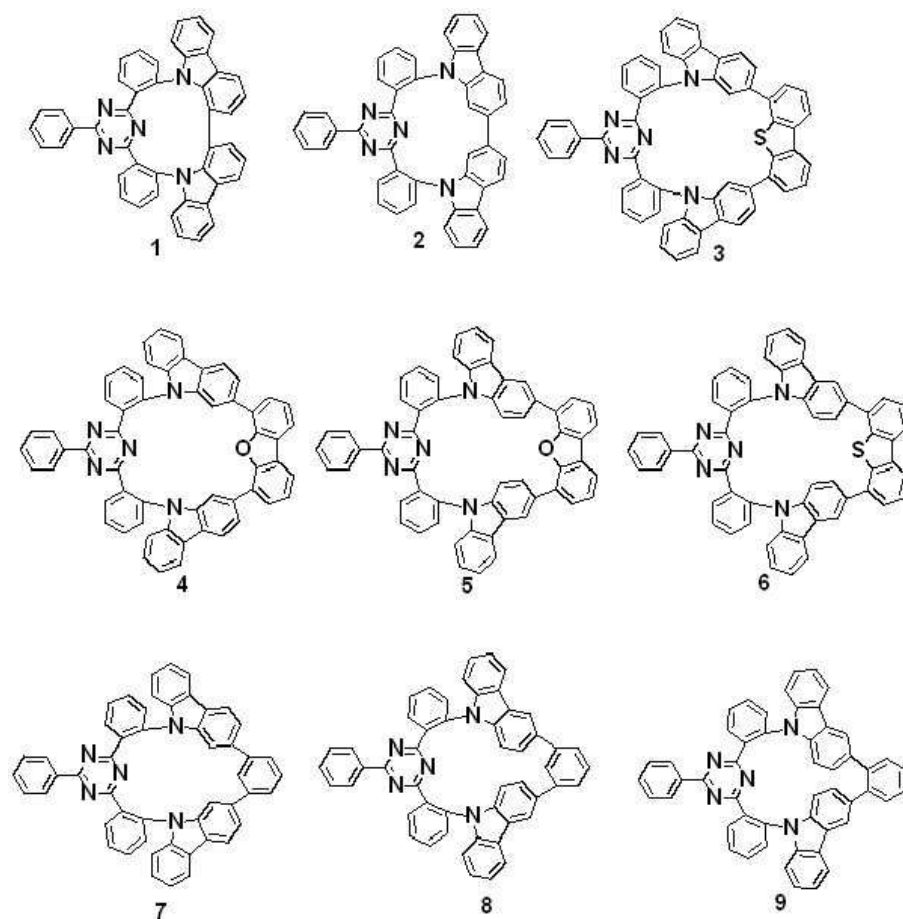
Z₁ 내지 Z₃ 중 적어도 두 개는 N인 함질소 화합물.

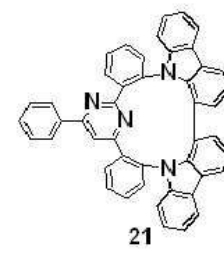
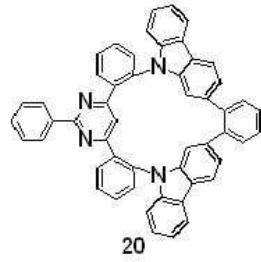
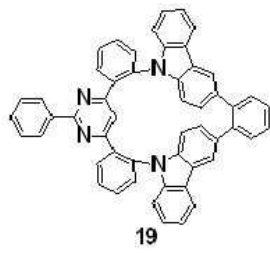
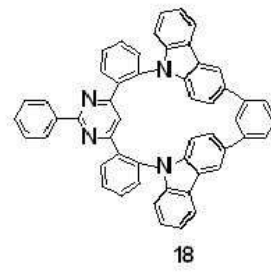
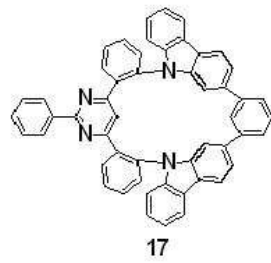
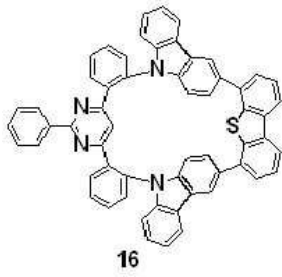
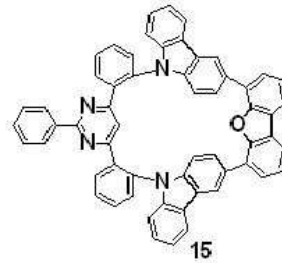
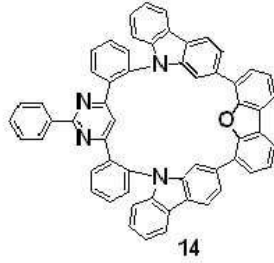
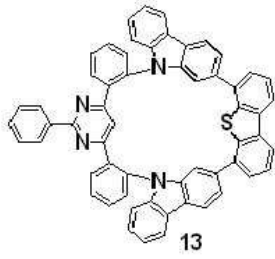
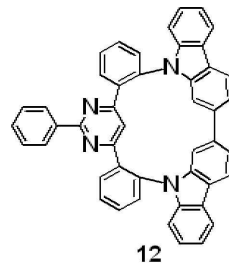
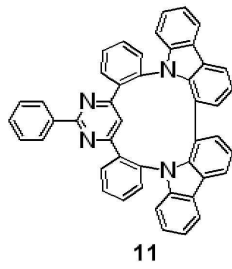
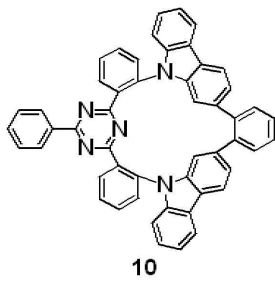
청구항 20

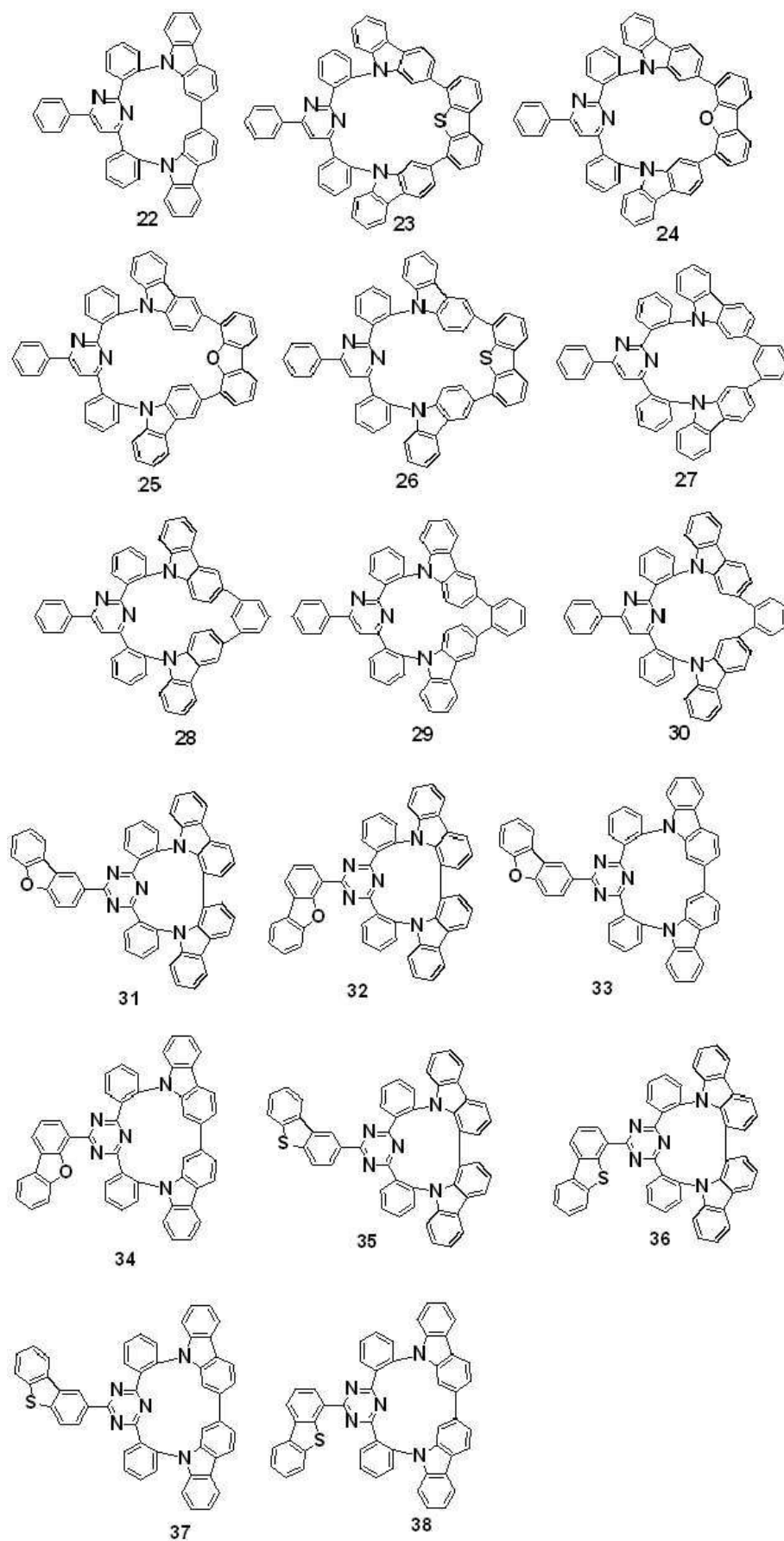
제16 항에 있어서,

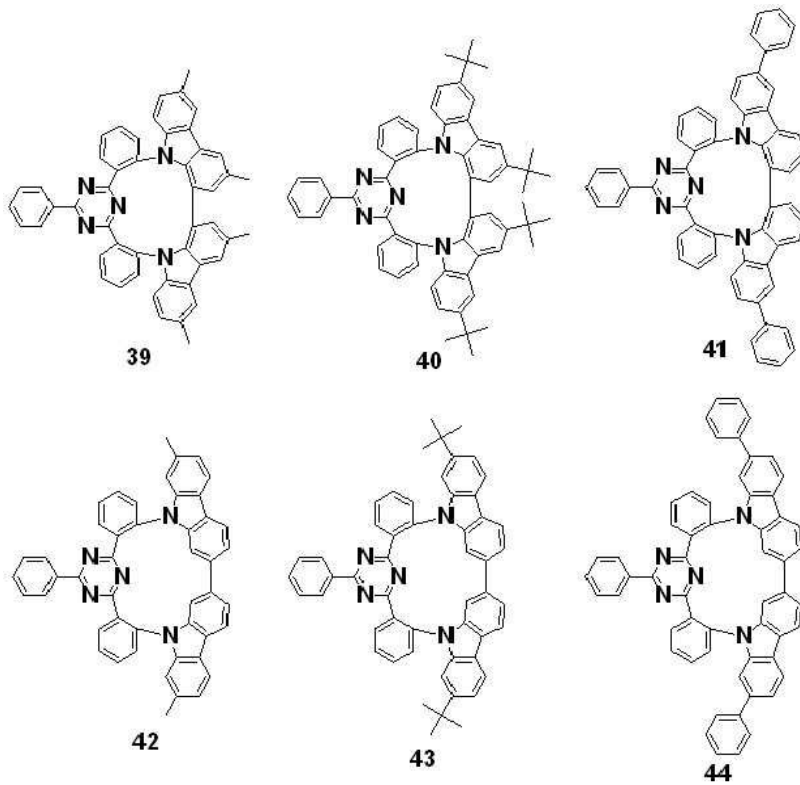
상기 함질소 화합물은 하기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나인 것인 함질소 화합물:

[화합물군 1]









발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

[0002] 영상 표시 장치로서, 유기 전계 발광 소자(Organic Electroluminescence Display)의 개발이 활발히 이루어지고 있다. 유기 전계 발광 소자는 액정 표시 장치 등과 는 다르 고, 제1 전극 및 제2 전극으로부터 주입된 정공 및 전자를 발광층에서 재결합시킴으로써, 발광층에 포함되는 유기 화합물인 발광 재료를 발광시켜서 표시를 실현하는 소위 자발광형의 표시 장치이다.

[0003] 유기 전계 발광 소자로서는, 예를 들어, 제1 전극, 제1 전극 상에 배치된 정공 수송층, 정공 수송층 상에 배치된 발광층, 발광층 상에 배치된 전자 수송층 및 전자 수송층 상에 배치된 제2 전극으로 구성된 유기 소자가 알려져 있다. 제1 전극으로부터는 정공이 주입되고, 주입된 정공은 정공 수송층을 이동하여 발광층으로 주입된다. 한편, 제2 전극으로부터는 전자가 주입되고, 주입된 전자는 전자 수송층을 이동하여 발광층으로 주입된다. 발광층으로 주입된 정공과 전자가 재결합함으로써, 발광층 내에서 여기자가 생성된다. 유기 전계 발광 소자는 그 여기자가 다시 바닥상태로 떨어질 때 발생하는 광을 이용하여 발광한다.

[0004] 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.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0005] 본 발명은 유기 전계 발광 소자 및 이에 사용되는 합질소 화합물을 제공하는 것을 일 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0006] 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 헤테로고리 모이어티 및 두 개의 카바졸 모이어티들을 포함하는 합질소 화합물을 포함하고, 헤테로고리 모이어티는 치환된 피리딘, 치환된 피리미딘 또는 치환된 1,3,5-트리아진이고, 치환된 피리딘, 치환된 피리미딘 또는 치환된 1,3,5-트리아진의 2번, 4번 및 6번 탄소 중 두 개의 탄소에 각각 페닐렌기들이 치환되고, 나머지 하나의 탄소에 치환 또는 비치환된 방향족 화합물이 치환되고, 페닐렌기들 각각의 오르쏘(ortho) 탄소와 카바졸 모이어티들 각각의 9번 질소가 결합되고, 카바졸 모이어티들은 하나의 링커에 결합되어 서로 연결되는 것인 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0007] 방향족 화합물은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기일 수 있고, 링커는 직접결합, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기일 수 있다.

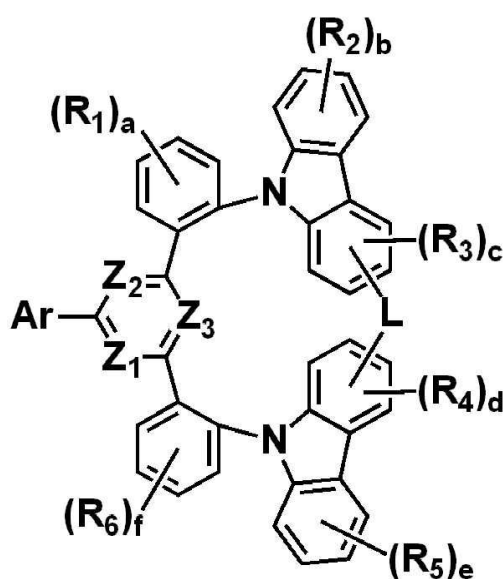
[0008] 방향족 화합물은 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이고, 링커는 직접결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜닐렌기일 수 있다.

[0009] 헤테로고리 모이어티는 치환된 피리미딘 또는 치환된 1,3,5-트리아진일 수 있다.

[0010] 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함하고, 도펀트가 상기 합질소 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0011] 합질소 화합물은 하기 화학식 1로 표시되는 것일 수 있다.

[0012] [화학식 1]

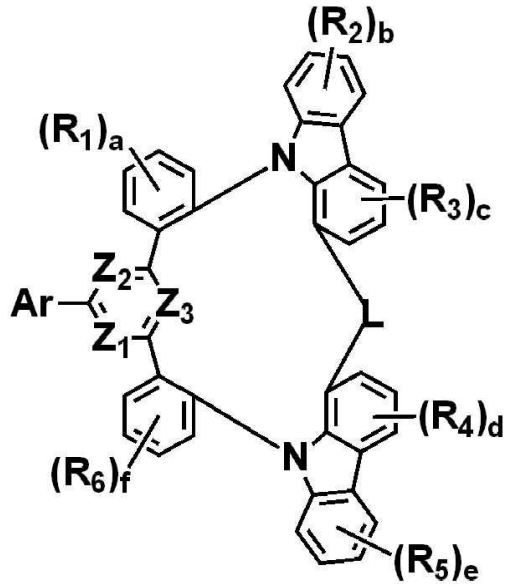


[0013]

[0014] 화학식 1에서, Z_1 내지 Z_3 은 각각 독립적으로 C- R_7 또는 N이며, Z_1 내지 Z_3 중 적어도 하나는 N이고, Ar은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, L은 직접결합, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이고, R_1 내지 R_7 은 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 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. a, b, e 및 f는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, c 및 d는 각각 독립적으로 0 이상 3 이하의 정수일 수 있다.

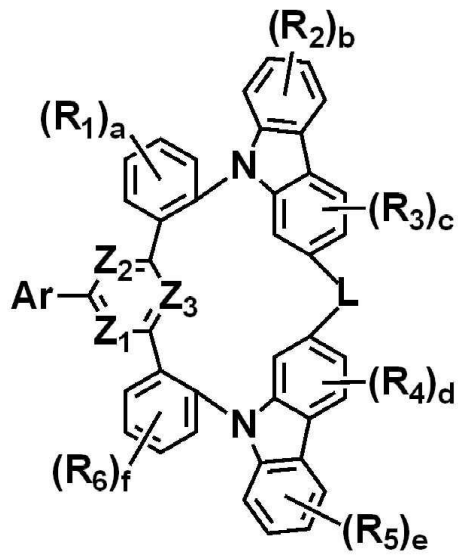
[0015] 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

[0016] [화학식 1-1]



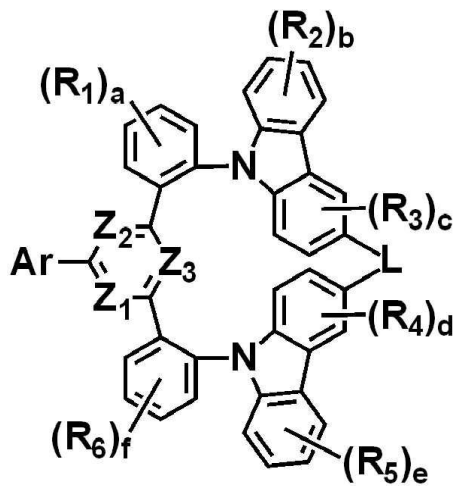
[0017]

[0018] [화학식 1-2]



[0019]

[0020] [화학식 1-3]



[0021]

[0022] 화학식 1-1 내지 1-3에서, Z₁ 내지 Z₃, Ar, L, R₁ 내지 R₇ 및 a 내지 f는 화학식 1에서 정의한 바와 동일할 수

있다.

[0023] Ar은 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이고, L은 직접결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜닐렌기일 수 있다.

[0024] Z_1 내지 Z_3 중 적어도 두 개는 N인 것일 수 있다.

[0025] 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 상기 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0026] 본 발명의 일 실시예는 전술한 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물을 제공한다.

발명의 효과

[0027] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 효율이 우수하다.

[0028] 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 유기 전계 발광 소자에 적용되어 고효율화에 기여할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0029] 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

[0030] 이상의 본 발명의 목적들, 다른 목적들, 특징들 및 이점들은 첨부된 도면 및 이하의 바람직한 실시예들을 통해서 쉽게 이해될 것이다. 그러나 본 발명은 여기서 설명되는 실시예들에 한정되지 않고 다른 형태로 구체화될 수도 있다. 오히려, 여기서 소개되는 실시예들은 개시된 내용이 철저하고 완전해질 수 있도록 그리고 통상의 기술자에게 본 발명의 사상이 충분히 전달될 수 있도록 하기 위해 제공되는 것이다.

[0031] 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.

[0032] 본 명세서에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다. 또한, 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "상에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다. 반대로 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "하부에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 아래에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다.

[0033] 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 별도의 정의가 없는 한, 중수소 원자, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 실릴기, 붕소기, 포스핀 옥사이드기, 포스핀 설파이드기, 알킬기, 알케닐기, 아릴기 및 헤테로고리기로 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. 헤테로고리기는 지방족 헤테로고리 및 방향족 헤테로고리(헤테로아릴기)를 포함한다.

[0034] 본 명세서에서, 할로젠 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.

[0035] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 30 이하, 1 이상 20

이하, 1 이상 10 이하 또는 1 이상 5 이하이다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, i-부틸기, 2-에틸부틸기, 3, 3-디메틸부틸기, n-펜틸기, i-펜틸기, 네오펜틸기, t-펜틸기, 시클로펜틸기, 1-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-에틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, n-헥실기, 1-메틸헥실기, 2-에틸헥실기, 2-부틸헥실기, 시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 4-t-부틸시클로헥실기, n-헵틸기, 1-메틸헵틸기, 2,2-디메틸헵틸기, 2-에틸헵틸기, 2-부틸헵틸기, n-옥틸기, t-옥틸기, 2-에틸옥틸기, 2-부틸옥틸기, 2-헥실옥틸기, 3,7-디메틸옥틸기, 시클로옥틸기, n-노닐기, n-데실기, 아다만틸기, 2-에틸데실기, 2-부틸데실기, 2-헥실데실기, 2-옥틸데실기, n-운데실기, n-도데실기, 2-에틸도데실기, 2-부틸도데실기, 2-헥실도데실기, 2-옥틸도데실기, n-트리데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, 2-에틸헥사데실기, 2-부틸헥사데실기, 2-헥실헥사데실기, 2-옥틸헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, n-노나데실기, n-이코실기, 2-에틸이코실기, 2-부틸이코실기, 2-헥실이코실기, 2-옥틸이코실기, n-헨이코실기, n-도코실기, n-트리코실기, n-테트라코실기, n-펜타코실기, n-헥사코실기, n-헵타코실기, n-옥타코실기, n-노나코실기, 및 n-트리아콘틸기 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0036] 본 명세서에서, 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하 또는 2 이상 10 이하이다. 알케닐기의 예로는 비닐기, 1-부테닐기, 1-펜테닐기, 1,3-부타디에닐아릴기, 스티레닐기, 스티릴비닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0037] 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 60 이하, 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, 퀴크페닐기, 섹시페닐기, 바이페닐렌기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0038] 본 명세서에서, 헤테로아릴기는 헤테로 원자로 B, O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 것일 수 있다. 헤테로아릴기가 헤테로 원자를 2개 이상 포함할 경우, 2개 이상의 헤테로 원자는 서로 동일할 수도 있고, 상이할 수도 있다. 헤테로아릴기는 단환식 헤테로고리기 또는 다환식 헤테로고리기일 수 있다. 헤테로아릴기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하, 또는 2 이상 10 이하일 수 있다. 헤테로아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딜기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀린기, 퀴나졸린기, 퀴녹살린기, 페녹사진기, 프탈라진기, 피리도 피리미딘기, 피리도 피라진기, 피라지노 피라진기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, N-아릴카바졸기, N-헤테로아릴카바졸기, N-알킬카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 티에노티오펜기, 벤조퓨란기, 페난트롤린기, 티아졸기, 이소옥사졸기, 옥사디아졸기, 티아디아졸기, 페노티아진기, 디벤조실롤기 및 디벤조퓨란기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0039] 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.

[0040] 본 명세서에서, 붕소기는 알킬 붕소기 및 아릴 붕소기를 포함한다. 붕소기의 예로는 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 디페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0041] 본 명세서에서, 아미노기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 이상 30 이하일 수 있다. 아미노기는 알킬 아미노기 및 아릴 아미노기를 포함할 수 있다. 아미노기의 예로는 메틸아미노기, 디메틸아미노기, 페닐아미노기, 디페닐아미노기, 나프틸아미노기, 9-메틸-안트라세닐아미노기, 트리페닐아미노기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0042] 본 명세서에서, 포스핀 옥사이드기는 예를 들어 알킬기 및 아릴기 중 적어도 하나로 치환될 수 있다. 포스핀 옥사이드기의 예로는 페닐 포스핀 옥사이드기, 디페닐 포스핀 옥사이드기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0043] 본 명세서에서, 포스핀 설파이드기는 알킬기 및 아릴기 중 적어도 하나로 치환될 수 있다.

[0044] 본 명세서에서, 아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용된다.

- [0045] 본 명세서에서, 헤테로아릴렌기는 2가인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴기에 관한 설명이 적용된다.
- [0046] 본 명세서에서, 직접결합은 원자간 단일결합을 의미하는 것일 수 있다.
- [0047] 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.
- [0048] 먼저, 도 1 내지 도 3을 참조하여 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다.
- [0049] 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.
- [0050] 도 1 내지 도 3을 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 전자 수송 영역(ETR) 및 제2 전극(EL2)을 포함한다.
- [0051] 제1 전극(EL1)은 도전성을 갖는다. 제1 전극(EL1)은 화소 전극 또는 양극일 수 있다. 제1 전극(EL1)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제1 전극(EL1)이 투과형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등을 포함할 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 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 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0052] 제1 전극(EL1)의 두께는 약 1000Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 3000Å일 수 있다.
- [0053] 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. 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.
- [0054] 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.
- [0055] 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 또는 정공 수송층(HTL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 정공 주입 물질과 정공 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 정공 수송 영역(HTR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1 전극(EL1)로부터 차례로 적층된 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL), 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층, 정공 주입층(HIL)/정공 버퍼층, 정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층 또는 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/전자 저지층(EBL)의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0056] 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.
- [0057] 정공 주입층(HIL)은 예를 들어, 구리프탈로시아닌(copper phthalocyanine) 등의 프탈로시아닌(phthalocyanine) 화합물; DNTPD(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine), m-MTDATA(4,4',4"-tris(3-methylphenylphenylamino) triphenylamine), TDATA(4,4',4"-Tris(N,N-diphenylamino)triphenylamine), 2-TNATA(4,4',4"-tris{N,-(2-naphthyl)-N-phenylamino}-triphenylamine), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate)), PANI/DBSA(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid), PANI/CSA(Polyaniline/Camphor sulfonic acid), PANI/PSS((Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate)), NPB(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine), 트리페닐아민을 포함하는 폴리테트라케톤(TPAPEK), 4-Isopropyl-4'-methyldiphenyliodonium

Tetrakis(pentafluorophenyl)borate], HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile) 등을 포함할 수도 있다.

[0058] 정공 수송층(HTL)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, NPB(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenyl-benzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl), α -NPD, mCP(1,3-Bis(N-carbazolyl)benzene) 등을 포함할 수도 있다.

[0059] 상기 정공 수송 영역(HTR)이 전자 저지층(EBL)을 포함할 경우, 상기 전자 저지층(EBL) 재료는, 상술한 바와 같은 정공 수송 영역(HTR)에 사용될 수 있는 물질 및 후술하는 호스트 물질 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)이 전자 저지층(EBL)을 포함할 경우, 전자 저지층(EBL) 재료로서 mCP를 사용할 수 있다.

[0060] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR)이 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)을 모두 포함하면, 정공 주입층(HIL)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 1000Å이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 30Å 내지 약 1000Å 일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR), 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송층(HTL)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0061] 정공 수송 영역(HTR)은 앞서 언급한 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 정공 수송 영역(HTR) 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 전하 생성 물질은 예를 들어, p-도펀트(dopant)일 수 있다. p-도펀트는 퀸론(quinone) 유도체, 금속 산화물 및 시아노(cyano)기 함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, p-도펀트의 비제한적인 예로는, TCNQ(Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀸론 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0062] 전술한 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. 전자 저지층(EBL)은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.

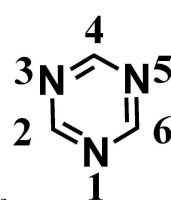
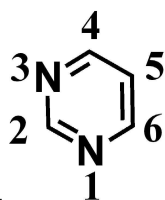
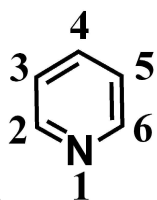
[0063] 발광층(EML)은 정공 수송 영역(HTR) 상에 제공된다. 발광층(EML)은 예를 들어 약 100Å 내지 약 1000Å 또는, 약 100Å 내지 약 300Å의 두께를 갖는 것일 수 있다. 발광층(EML)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0064] 발광층(EML)은 헤테로고리 모이어티 및 두 개의 카바졸 모이어티들을 포함하는 함질소 화합물을 포함한다.

[0065] 헤테로고리 모이어티는 치환된 피리딘, 치환된 피리미딘 또는 치환된 1,3,5-트리아진 이다. 치환된 피리딘, 치환된 피리미딘 또는 치환된 1,3,5-트리아진의 2번, 4번 및 6번 탄소 중 두 개의 탄소에 각각 페닐렌기들이 치환되고, 나머지 하나의 탄소에 치환 또는 비치환된 방향족 화합물이 치환된다. 예를 들어, 2번 및 4번 탄소에 치환 또는 비치환된 페닐렌기가 치환되는 경우 6번 탄소에는 치환 또는 비치환된 방향족 화합물이 치환되고, 4번 및 6번 탄소에 치환 또는 비치환된 페닐렌기가 치환되는 경우 2번 탄소에는 치환 또는 비치환된 방향족 화합물이 치환되고, 2번 및 6번 탄소에 치환 또는 비치환된 페닐렌기가 치환되는 경우 4번 탄소에는 치환 또는 비치환된 방향족 화합물이 치환된다.

[0066] 이에 한정되는 것은 아니나, 헤테로고리 모이어티는 치환된 1,3,5-트리아진일 수 있다.

[0068] 치환된 피리딘, 치환된 피리미딘 또는 치환된 1,3,5-트리아진의 치환위치 넘버링(numbering)은 하기와 같다.



[0069] [피리딘] [피리미딘] [1,3,5-트리아진]

[0070] 헤테로고리 모이어티에 치환되는 방향족 화합물은 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이다.

[0071] 치환 또는 비치환된 아릴기는 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하 또는 6 이상 15 이하의 아릴기일 수 있다.

[0072] 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기는 고리형성 2 이상 30 이하 또는 2 이상 20 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0073] 치환 또는 비치환된 아릴기는 단환식 아릴기일 수 있다.

[0074] 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기는 다환식 헤테로아릴기일 수 있다.

[0075] 예를 들어, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기일 수 있다. 그러나 이에 한정되지 않는다.

[0076] 페닐렌기들 각각의 오르쏘(ortho) 탄소와 카바졸 모이어티들 각각의 9번 질소가 결합되고, 카바졸 모이어티들은 하나의 링커에 결합되어 서로 연결된다.

[0077] 링커는 직접결합, 치환 또는 비치환된 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이다.

[0078] 치환 또는 비치환된 아릴렌기는 6 이상 30 이하 또는 6 이상 15 이하의 고리형성 아릴렌기일 수 있다.

[0079] 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기는 고리형성 2 이상 30 이하 또는 2 이상 20 이하의 헤테로아릴렌기일 수 있다.

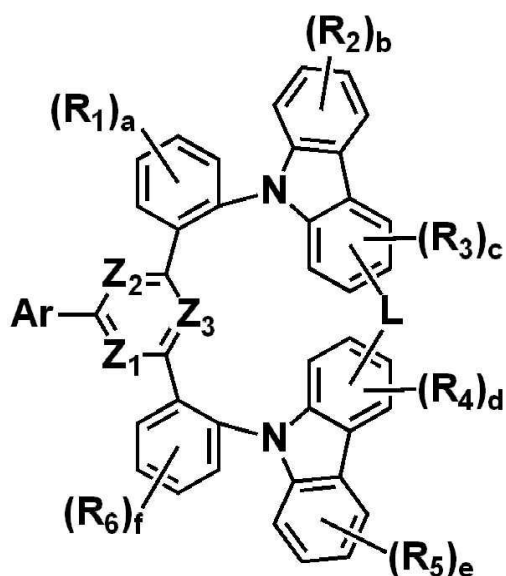
[0080] 치환 또는 비치환된 아릴렌기는 단환식 아릴렌기일 수 있다.

[0081] 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기는 다환식 헤테로아릴렌기일 수 있다.

[0082] 예를 들어, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜닐렌기일 수 있다. 그러나 이에 한정되지 않는다.

[0083] 함질소 화합물은 예를 들어 하기의 화학식 1로 표시되는 것일 수 있다.

[0084] [화학식 1]



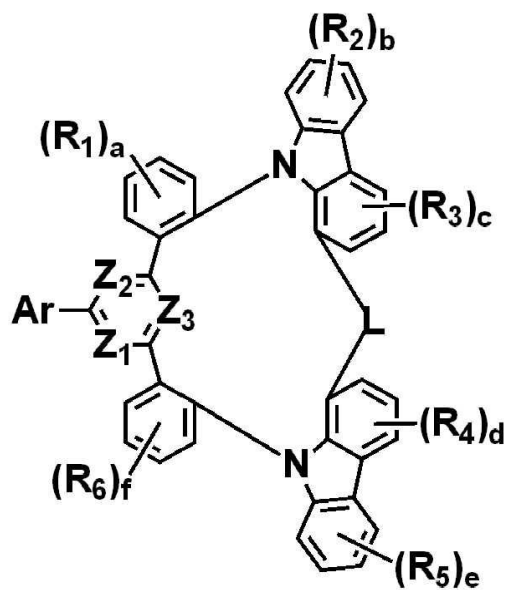
[0085]

[0086] 화학식 1에서, Z_1 내지 Z_3 은 각각 독립적으로 C-R₇ 또는 N이며, Z_1 내지 Z_3 중 적어도 하나는 N이다. 또한 Z_1 내

지 Z_3 중 적어도 두 개는 N일 수 있다.

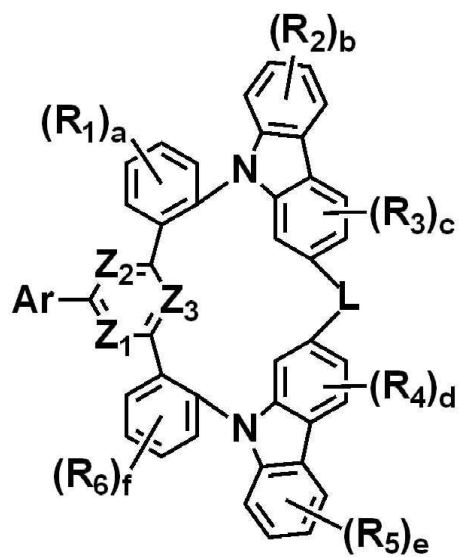
- [0087] 또한 Z_1 내지 Z_3 이 모두 N일 수 있다. 즉, 1,3,5-트리아진일 수 있다.
- [0088] 화학식 1에서 Ar은 치환 또는 비치환된 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이다
- [0089] 치환 또는 비치환된 아릴기는 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하 또는 6 이상 15 이하의 아릴기일 수 있다.
- [0090] 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기는 고리형성 2 이상 30 이하 또는 2이상 20 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.
- [0091] 치환 또는 비치환된 아릴기는 단환식 아릴기일 수 있다.
- [0092] 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기는 다환식 헤테로아릴기일 수 있다.
- [0093] 예를 들어, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기일 수 있다. 그러나 이에 한정되지 않는다.
- [0094] 화학식 1에서, 페닐렌기들 각각의 오르쏘(ortho) 위치의 탄소는 카바졸 모이어티들 각각의 9번 질소와 직접결합하고, 두 개의 카바졸 모이어티들은 링커인 L과의 결합에 의해 연결되고, 고리를 형성한다.
- [0095] L은 직접결합, 치환 또는 비치환된 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이다
- [0096] 치환 또는 비치환된 아릴렌기는 6 이상 30 이하 또는 6 이상 15 이하의 고리형성 아릴렌기일 수 있다.
- [0097] 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기는 고리형성 2 이상 30 이하 또는 2 이상 20 이하의 헤테로아릴렌기일 수 있다.
- [0098] 치환 또는 비치환된 아릴렌기는 단환식 아릴렌기일 수 있다.
- [0099] 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기는 다환식 헤테로아릴렌기일 수 있다.
- [0100] 예를 들어, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜닐렌기일 수 있다. 그러나 이에 한정되지 않는다.
- [0101] R_1 내지 R_7 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 할로젠 원자, 시아노기, 치환 또는 비치환된 아미노기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 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.
- [0102] 예를 들어, 메틸기, t-부틸기 또는 비치환된 페닐기 일 수 있다. 그러나 실시예가 이에 한정되지 않는다. a, b, e, 및 f는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이고, c 및 d는 각각 독립적으로 0 이상 3 이하의 정수이다. 이에 한정되는 것은 아니나 예를 들어, a 내지 f 중 적어도 하나는 1일 수 있고, a 내지 f는 모두 0일 수 있다. a 내지 f가 1일 경우에는 a 내지 f는 수소가 아닐 수 있다. a가 2 이상일 경우 복수의 R_1 은 서로 동일하거나 상이하고, b가 2 이상일 경우 복수의 R_2 는 서로 동일하거나 상이하고, c가 2 이상일 경우 복수의 R_3 은 서로 동일하거나 상이하고, d가 2 이상일 경우 복수의 R_4 는 서로 동일하거나 상이하고, e가 2 이상일 경우 복수의 R_5 는 서로 동일하거나 상이하고, f가 2 이상일 경우 복수의 R_6 은 서로 동일하거나 상이하다.
- [0103] 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다. 그러나 이에 한정되지 않는다.

[0104] [화학식 1-1]



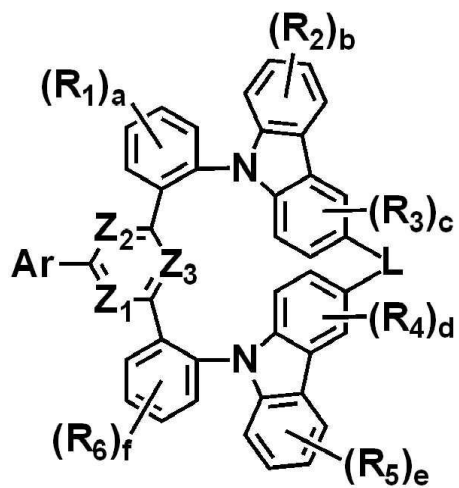
[0105]

[0106] [화학식 1-2]



[0107]

[0108] [화학식 1-3]

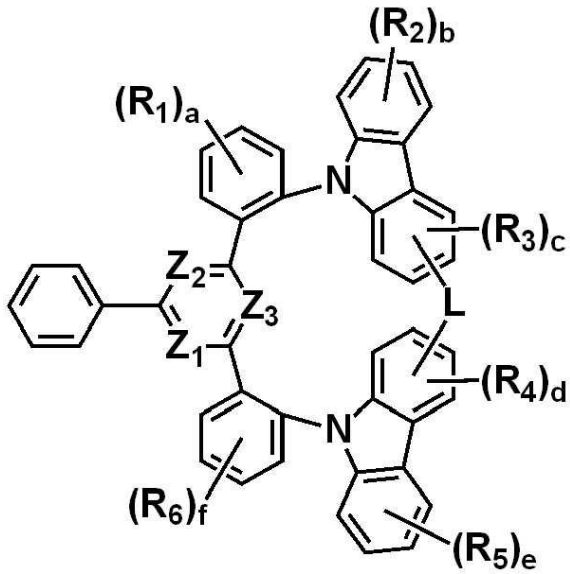


[0109]

[0110] 화학식 1-1 내지 1-3에서 Z_1 내지 Z_3 , Ar, L, R_1 내지 R_7 및 a 내지 f는 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

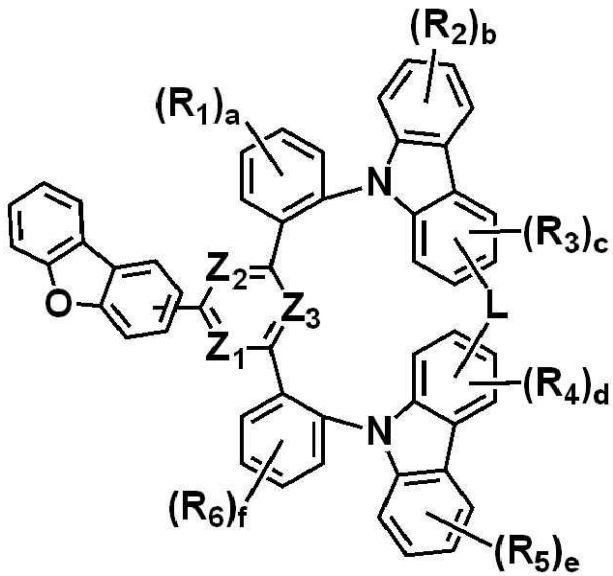
[0111] 화학식 1은 하기 화학식 2-1 내지 2-3 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다. 그러나 이에 한정되지 않는다.

[0112] [화학식 2-1]



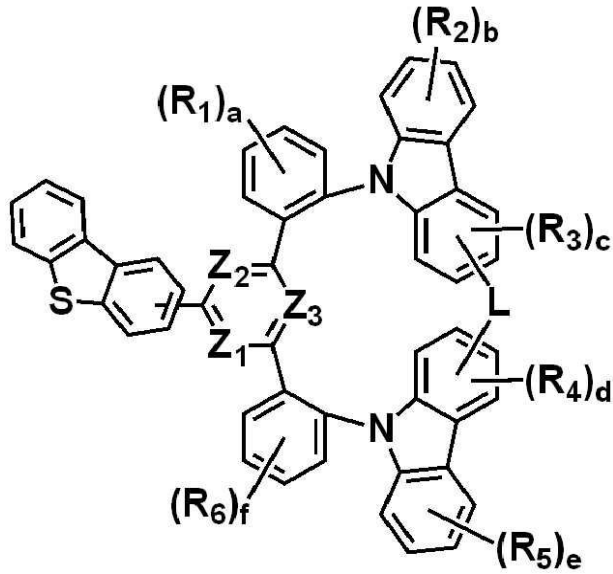
[0113]

[0114] [화학식 2-2]



[0115]

[0116] [화학식 2-3]

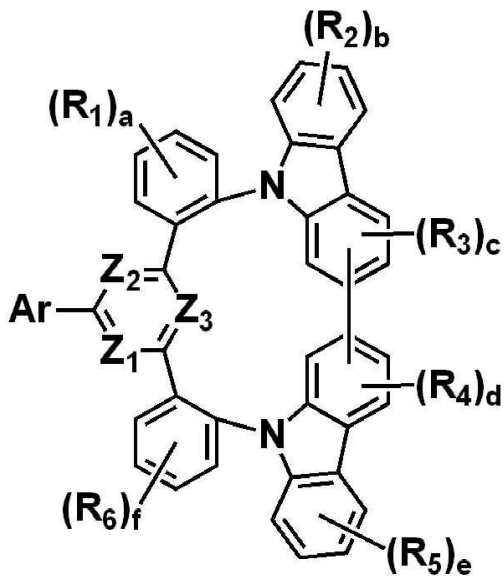


[0117]

[0118] 화학식 2-1 내지 2-3에서 Z_1 내지 Z_3 은 CR_7 또는 N이며, Z_1 내지 Z_3 중 적어도 두 개는 N일 수 있다. Z_1 내지 Z_3 은 모두 N일 수 있다. a 내지 f 중 적어도 하나는 1 일 수 있고, a 내지 f는 모두 0일 수 있다. L 및 R_1 내지 R_7 은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

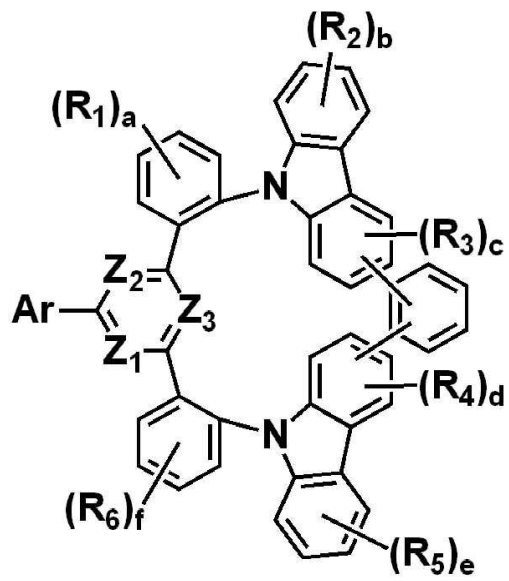
[0119] 화학식 1은 하기 화학식 3-1 내지 3-4 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다. 그러나 이에 한정되지 않는다.

[0120] [화학식 3-1]



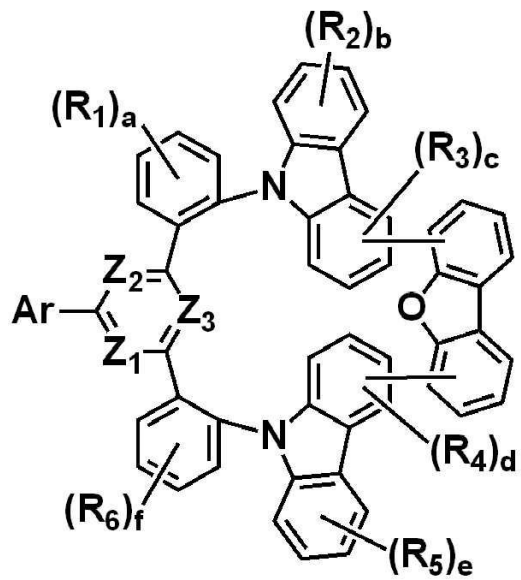
[0121]

[0122] [화학식 3-2]



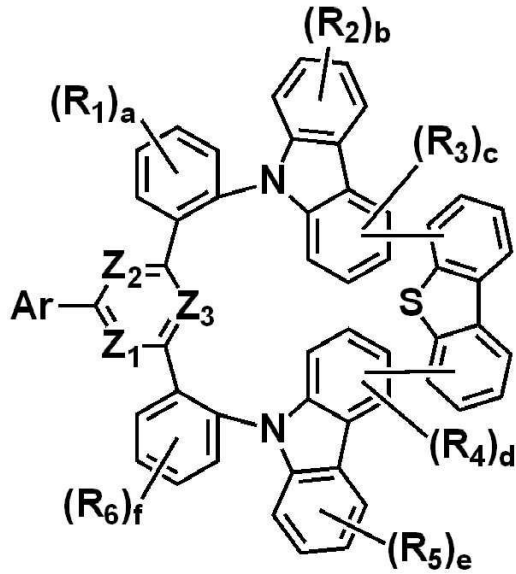
[0123]

[0124] [화학식 3-3]



[0125]

[0126] [화학식 3-4]

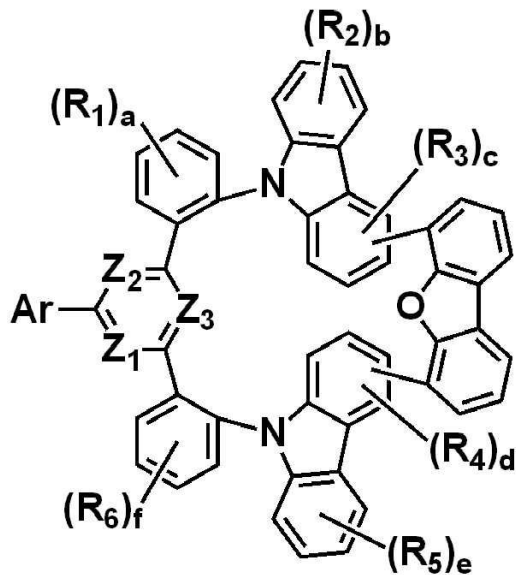


[0127]

[0128] 화학식 3-1 내지 3-4에서 Z_1 내지 Z_3 은 CR_7 또는 N이며, Z_1 내지 Z_3 중 적어도 두 개는 N일 수 있다. Z_1 내지 Z_3 은 모두 N일 수 있다. a 내지 f 중 적어도 하나는 1 일 수 있고, a 내지 f는 모두 0일 수 있다. Ar 및 R_1 내지 R_7 은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

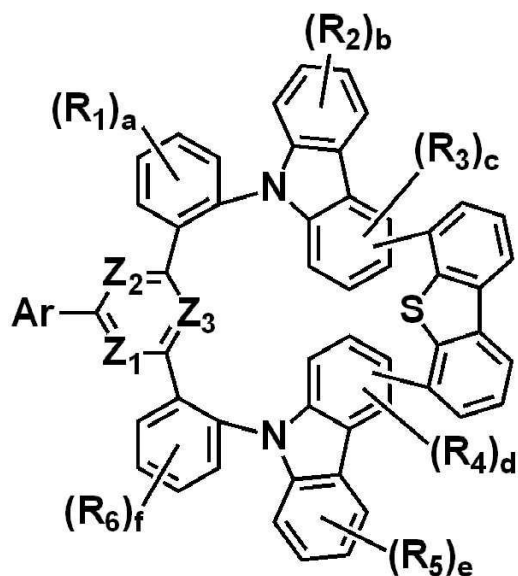
[0129] 화학식 3-3은 하기 화학식 4-1로, 화학식 3-4는 하기 화학식 4-2로 표시되는 것일 수 있다. 그러나 이에 한정되지 않는다.

[0130] [화학식 4-1]



[0131]

[0132] [화학식 4-2]

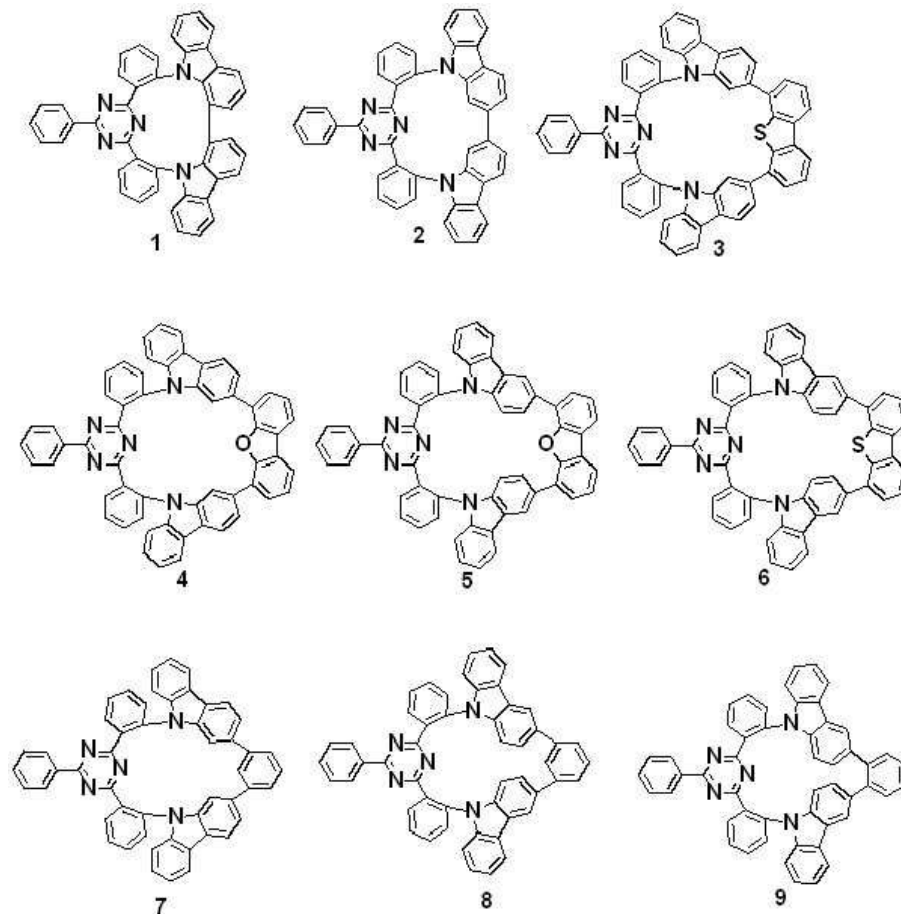


[0133]

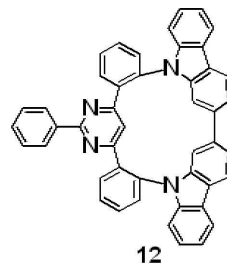
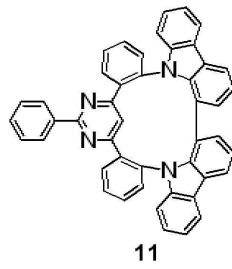
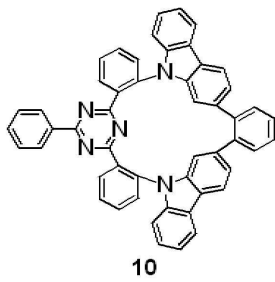
[0134] 화학식 4-1 및 4-2에서 Z_1 내지 Z_3 은 CR_7 또는 N이며, Z_1 내지 Z_3 중 적어도 두 개는 N일 수 있다. Z_1 내지 Z_3 은 모두 N일 수 있다. a 내지 f 중 적어도 하나는 1 일 수 있고, a 내지 f는 모두 0일 수 있다. Ar 및 R_1 내지 R_7 은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0135] 합질소 화합물은 하기 화합물군 1 에 표시된 화합물들 중 선택되는 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

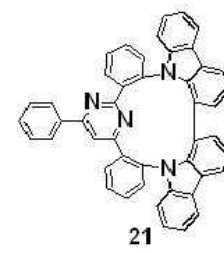
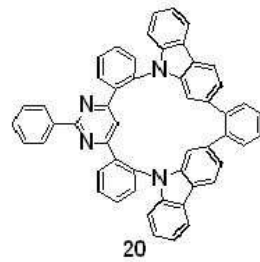
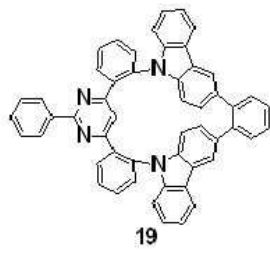
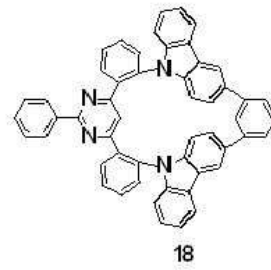
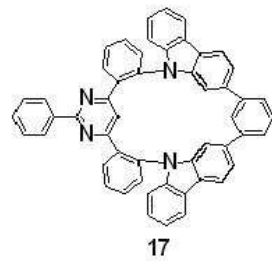
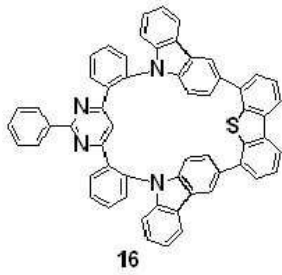
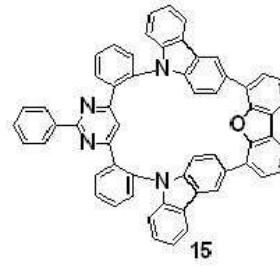
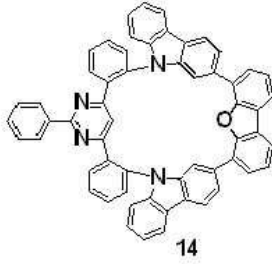
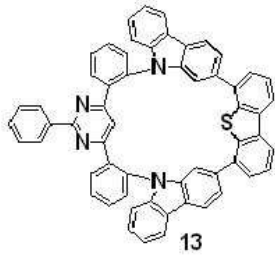
[0136] [화합물군 1]



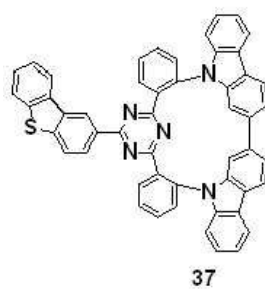
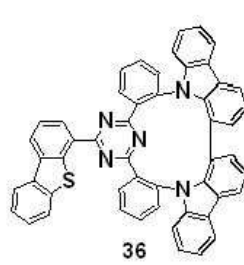
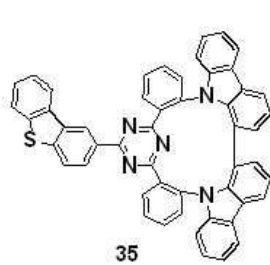
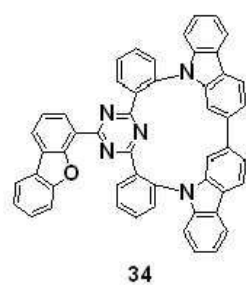
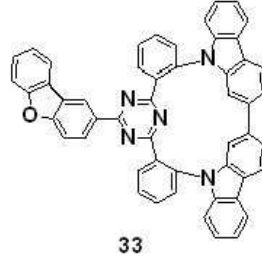
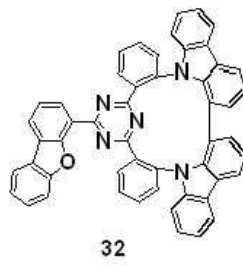
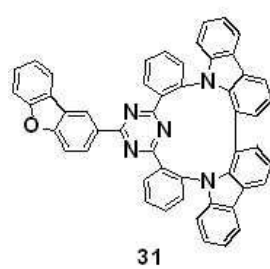
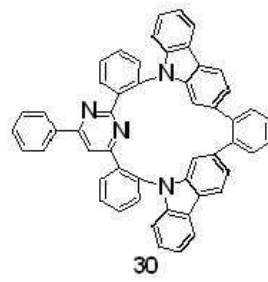
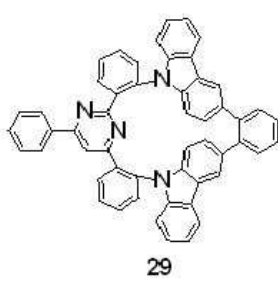
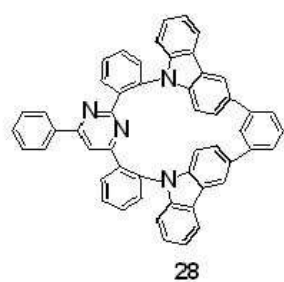
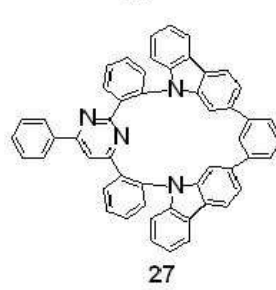
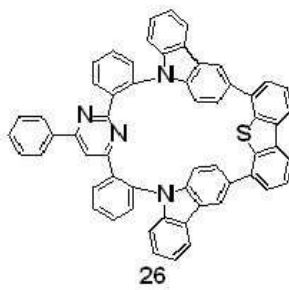
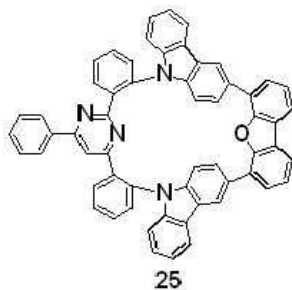
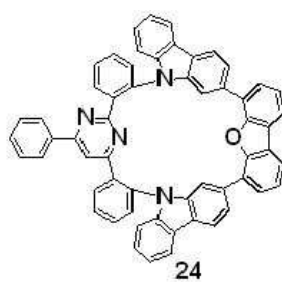
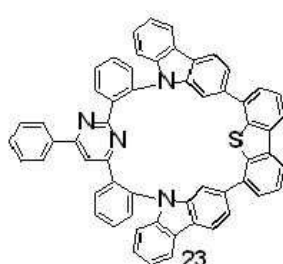
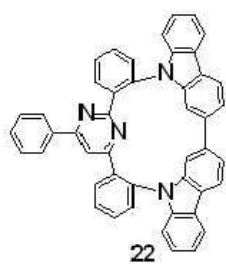
[0137]



[0138]

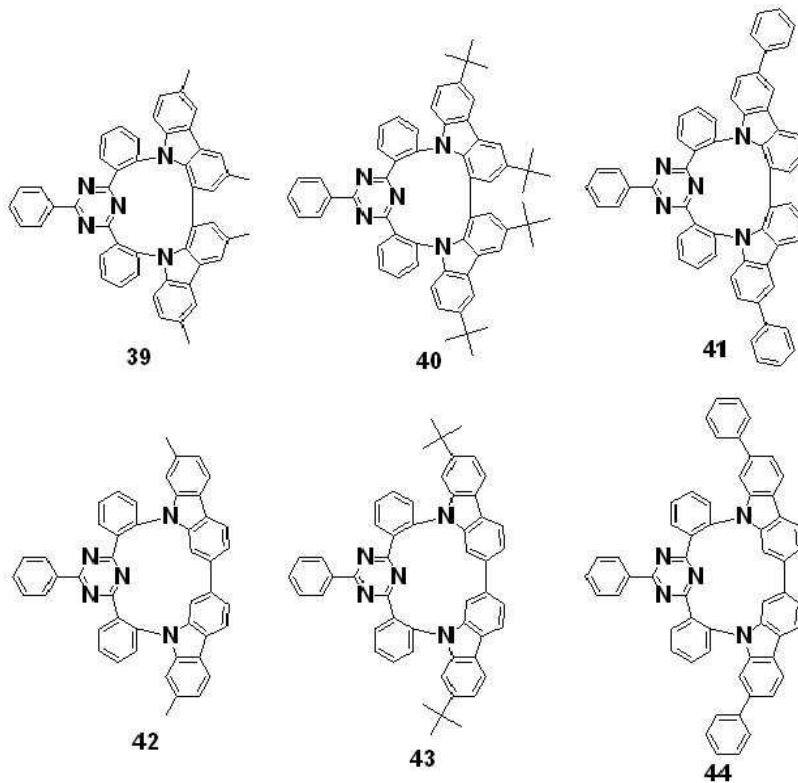


[0139]



[0140]

[0141]



[0142]

[0143]

발광층(EML)은 함질소 화합물을 1종 또는 2종 이상 포함할 수 있다. 발광층(EML)은 함질소 화합물 외에 공지의 물질을 더 포함할 수 있다.

[0144]

발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있고, 도펀트가 함질소 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물이 도펀트로서 발광층(EML)에 포함될 수 있다. 화학식 1로 표시되는 함질소 화합물이 열 활성 지연 형광용 도펀트로서 발광층(EML)에 포함될 수 있다. 발광층(EML)은 함질소 화합물을 포함함으로써 490nm 미만의 파장 영역을 갖는 청색 광을 발광하는 청색 발광층일 수 있다. 예를 들어, 함질소 화합물은 약 440nm 내지 약 490nm, 또는 약 465nm 내지 약 485nm의 파장 영역을 갖는 청색(blue)광 도펀트로서 발광층(EML)에 포함될 수 있다.

[0145]

발광층(EML)은 호스트 및 도펀트를 포함하고, 호스트가 함질소 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0146]

호스트 물질로 당 기술분야에 알려진 일반적인 재료를 제한 없이 채용할 수 있다. 예를 들어, DPEPO(Bis[2-(diphenylphosphino)phenyl] ether oxide), CBP(4,4'-Bis(carbazol-9-yl)biphenyl), mCP(1,3-Bis(carbazol-9-yl)benzene), PPF (2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzo[b,d]furan), TcTa(4,4',4''-Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine) 및 TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene) 중 적어도 하나를 포함하는 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 예를 들어, Alq₃(tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), CBP(4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl), PVK(poly(n-vinylcarbazole), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene), TCTA(4,4',4''-Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene), TBADN(3-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[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide), CP1(Hexaphenylcyclotriphosphazene), UGH2 (1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene), DPSiO₃ (Hexaphenylcyclotrisiloxane), DPSiO₄ (Octaphenylcyclotetrasiloxane), PPF(2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran) 등을 호스트 재료로 사용할 수 있다.

[0147]

예를 들어, 발광층(EML)은 도펀트로 TPD(N,N,N',N'-tetraphenyl-pyrene-1,6-diamine), BCzVBi(4,4'-Bis(2-(9-ethyl-9H-carbazol-3-yl)vinyl)-1,1'-biphenyl; 4,4'-Bis(9-ethyl-3-carbazovinylen)-1,1'-biphenyl), ACRSA(10-phenyl-10H, 10' H-spiro[acridine-9,9' -anthracene]-10' -one), 4CzPN(3,4,5,6-Tetra-9H-carbazol-9-yl-1,2-benzenedicarbonitrile), 4CzIPN(2,4,5,6-Tetra-9H-carbazol-9-yl-isophthalonitrile),

DMAC-DPS(Bis[4-9,9-dimethyl-9,10-dihydroacridine]phenyl)sulfone), 및 PSZ-TRZ(2-phenoxazine-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 또한, 발광층(EML)은 공지의 도펀트 재료로, 스티릴 유도체(예를 들어, 1, 4-bis[2-(3-N-ethylcarbazoyl)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-BDAVB), 페렌 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 더 포함할 수 있다.

[0148] 발광층(EML)은 청색 광을 발광하는 청색 발광층일 수 있다. 발광층(EML)은 형광 발광을 방사하는 형광 발광층일 수 있다. 발광층(EML)은 지연 형광 발광을 방사하는 지연 형광 발광층일 수 있다.

[0149] 전자 수송 영역(ETR)은 발광층(EML) 상에 제공된다. 전자 수송 영역(ETR)은, 정공 저지층(HBL), 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층(EIL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0150] 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.

[0151] 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, 발광층(EML)으로부터 차례로 적층된 전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL), 정공 저지층(HBL)/전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL) 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송 영역(ETR)의 두께는 예를 들어, 약 300Å 내지 약 1500Å 또는 약 350Å 내지 약 500Å인 것일 수 있다.

[0152] 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.

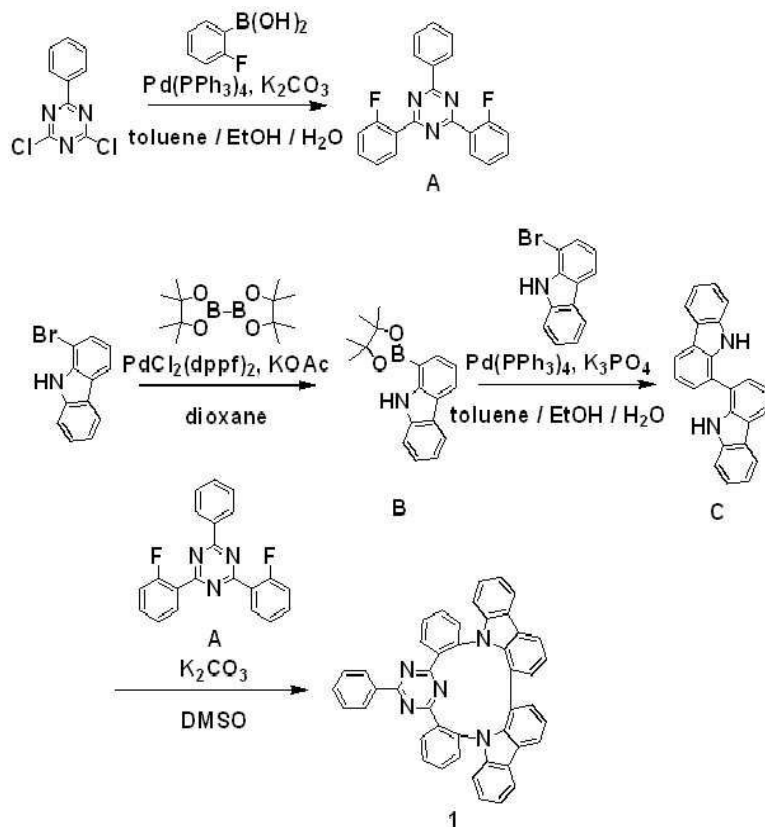
[0153] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 안트라센계 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니며, 전자 수송 영역은 예를 들어, Alq₃(Tris(8-hydroxyquinolinato)aluminum), 1,3,5-tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene, 2,4,6-tris(3'-(pyridin-3-yl)biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine, 2-(4-(N-phenylbenzimidazolyl-1-yl)phenyl)-9,10-dinaphthylanthracene, TPBi(1,3,5-Tri(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), TAZ(3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole), tBu-PBD(2-(4-Biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole), BA1q(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), Bebq₂(berylliumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 및 이들의 혼합물을 포함하는 것일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께는 예를 들어 약 100Å 내지 약 1000Å, 또는 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0154] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 LiF, LiQ(Lithium quinolate), Li₂O, BaO, NaCl, CsF, Yb와 같은 란타넘족 금속, 또는 RbCl, RbI와 같은 할로젠화 금속 등이 사용될 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 주입층(EIL)은 또한 전자 수송 물질과 절연성의 유기 금속염(organo metal salt)이 혼합된 물질로 이루어질 수 있다. 유기 금속염은 에너지 밴드 갭(energy band gap)이 대략 4eV 이상의 물질이 될 수 있다. 구체적으로 예를 들어, 유기 금속염은 금속 아세테이트(metal acetate), 금속 벤조에이트(metal benzoate), 금속 아세토아세테이트(metal acetoacetate), 금속 아세틸아세토네이트(metal acetylacetonate) 또는 금속 스테아레이트(stearate)를 포함할 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0155] 전자 수송 영역(ETR)은 앞서 언급한 바와 같이, 정공 저지층(HBL)을 포함할 수 있다. 정공 저지층(HBL)은 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.

- [0156] 제2 전극(EL2)은 전자 수송 영역(ETR) 상에 제공된다. 제2 전극(EL2)은 공통 전극 또는 음극일 수 있다. 제2 전극(EL2)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제2 전극(EL2)이 투과형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 이루어질 수 있다.
- [0157] 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 이들을 포함하는 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다.
- [0158] 도시하지는 않았으나, 제2 전극(EL2)은 보조 전극과 연결될 수 있다. 제2 전극(EL2)이 보조 전극과 연결되면, 제2 전극(EL2)의 저항을 감소시킬 수 있다.
- [0159] 유기 전계 발광 소자(10)에서, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)에 각각 전압이 인가됨에 따라 제1 전극(EL1)으로부터 주입된 정공(hole)은 정공 수송 영역(HTR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동되고, 제2 전극(EL2)로부터 주입된 전자가 전자 수송 영역(ETR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동된다. 전자와 정공은 발광층(EML)에서 재결합하여 여기자(exciton)를 생성하며, 여기자가 여기 상태에서 바닥 상태로 떨어지면서 발광하게 된다.
- [0160] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 합질소 화합물을 발광층 재료로 포함함으로써 효율이 우수하다.
- [0161] 본 발명의 일 실시예는 상기 화학식 1로 표시되는 합질소 화합물을 제공한다. 합질소 화합물은 유기 전계 발광 소자의 재료로 활용될 수 있다.
- [0162] 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물에 대한 구체적인 설명은 전술한 바와 동일한 바, 생략하도록 한다. 예를 들어, 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 상기 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나일 수 있다.
- [0163] 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 일중항 에너지 준위 및 삼중항 에너지 준위 차이가 0.2 eV 이하, 0.1 eV 이하 또는 0.05 eV 이하인 것일 수 있으며, 결과적으로 열 활성화 지연 형광용 재료로 활용 가능하다. 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 유기 전계 발광 소자용 재료로 적용되어 효율 향상에 기여할 수 있다.
- [0164] 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.
- [0165] (합성예)
- [0166] 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물은 예를 들어, 하기와 같이 합성할 수 있다. 다만, 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물의 합성 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0167] 1. 화합물 1의 합성

[0168] 본 발명의 일 실시예에 따른 합질소 화합물 1은 예를 들어 하기와 같이 합성할 수 있다.



[0169]

[0170] (중간체 A의 합성)

[0171] 아르곤(Ar) 분위기 하, 1L의 3구 플라스크에 2,4-Dichloro-6-phenyl-1,3,5-triazine 10.00g, 2-Fluorophenylboronic acid 12.38g, Pd(PPh₃)₄ 2.56g, Potassium carbonate 24.46g을 탈기한 Toluene/Ethanol/물의 혼합용매(10:1:2) 250mL에 용해하여 80° C에서 10시간 가열 교반했다. 반응 후, 물을 더하고 CH₂Cl₂로 추출하여 유기층을 모아 MsSO₄로 건조시킨 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제하여, 중간체 A를 10.69g(수율 70%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 A의 분자량은 345였다.

[0172] (중간체 B의 합성)

[0173] 아르곤(Ar) 분위기하, 500mL의 3구 플라스크에 1-Bromo-9H-carbazole 5.00g, Bis(pinacolato)diboron 5.16g, PdCl₂(dppf) 1.66g, Potassium acetate 3.99g을 탈기한 1,4-Dioxane 100 mL에 용해하여 90° C로 8시간 가열 교반했다. 공랭 후, 물을 더하고 CH₂Cl₂로 추출하여 유기층을 모아 MgSO₄로 건조시킨 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(silica gel column chromatography)로 정제하여, 중간체 B를 4.65g(수율 78%) 얻었다. FAB-MS 측정으로 측정된 중간체 B의 분자량은 293이었다.

[0174] (중간체 C의 합성)

[0175] 아르곤(Ar) 분위기하, 200mL의 3구 플라스크에 B 4.00g, 1-Bromo-9H-carbazole 3.35g, Pd(PPh₃)₄ 0.79g, Tripotassium phosphate 5.79g을 탈기한 Toluene/Ethanol/물의 혼합용매(10:1:2) 70mL에 용해하여, 80° C에서 12시간 가열 교반했다. 반응 후, 물을 더하고 CH₂Cl₂로 추출하여 유기층을 모아 MgSO₄로 건조시킨 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(silica gel column chromatography)로 정제하여, 중간체 C를 3.72g(수율 82%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 중간체 C의 분자량은 332였다.

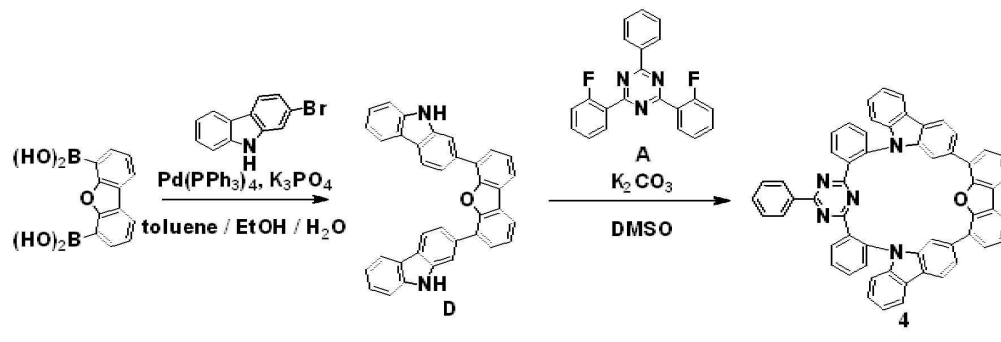
[0176] (화합물 1의 합성)

[0177] 아르곤(Ar) 분위기하, 200mL의 3구 플라스크에 중간체 C 3.00g, 중간체 A 3.12g, K₂CO₃ 6.24g을 탈기한 DMF 500mL에 용해하여 150° C에서 36시간 교반했다. 실온으로 돌린 후 용매가 50 mL가 될 때까지 농축하여 농축한

반응 용액을 1000mL의 물에 따라 교반했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 회수하고, CH₂Cl₂ 500mL에 용해하여 MgSO₄로 건조시킨 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 재결정으로 정제하여 화합물 1을 1.61g (수율 28%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 화합물 1의 분자량은 637이었다.

[0178] 2. 화합물 4의 합성

[0179] 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물 4는 예를 들어 하기와 같이 합성할 수 있다.



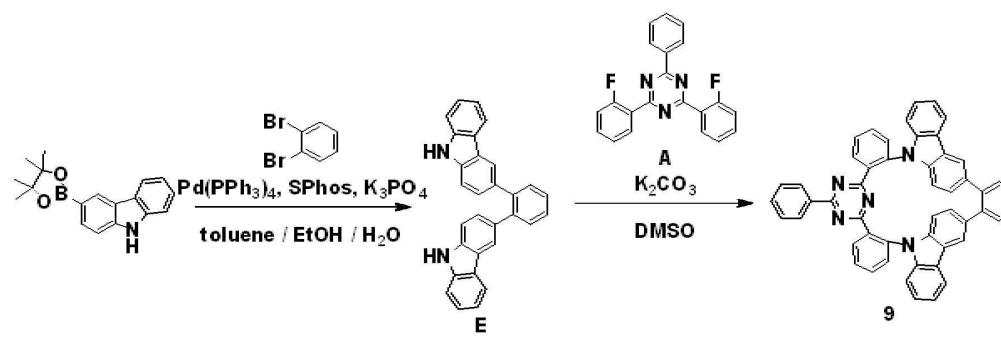
[0181] 아르곤(Ar) 분위기하, 200mL의 3구 플라스크에 Dibenzo[b,d]furan-4,6-diylldiboronic acid 3.00g, 2-bromo-9H-carbazole 5.77g, Pd(PPh₃)₄ 0.68 g, K₃PO₄ 9.96g을 탈기한 Toluene/Ethanol/물의 혼합용매(10:1:2) 70mL에 용해하여, 80° C에서 12시간 가열 교반했다. 반응 후, 생성한 침전을 흡인 여과로 회수하고 재결정으로 정제하여 중간체 D를 3.57g(수율 61%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 중간체 D의 분자량은 498이었다.

[0182] (화합물 4의 합성)

[0183] 아르곤(Ar) 분위기하, 200mL의 3구 플라스크에 중간체 D 3.00g, 중간체 A 2.08g, K₂CO₃ 4.16g을 탈기한 DMF 300mL에 용해하여 150° C에서 36시간 가열 교반했다. 실온으로 돌린 후, 용매가 30mL가 될 때까지 농축하고, 농축한 반응 용액을 500 mL의 물에 따라 교반했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 회수하고 재결정으로 정제하여 화합물 4 1.11g (수율 23%) 을 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 화합물 4의 분자량은 803이었다.

[0184] 3. 화합물 9의 합성

[0185] 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물 9는 예를 들어 하기와 같이 합성할 수 있다.



[0187] 아르곤(Ar) 분위기하, 500mL의 3구 플라스크에 (9H-Carbazol-3-yl)boronic acid pinacol ester 10.00g, 1,2-Dibromobenzene 4.02g, Pd(PPh₃)₄ 1.97g, 2-Dicyclohexylphosphino-2',6'-dimethoxybiphenyl 1.40g, K₃PO₄ 14.48g을 탈기한 Toluene/Ethanol/물의 혼합용매(10:1:2) 170mL에 용해하여 80° C에서 20시간 가열 교반했다. 반응 후, 물을 더하고 CH₂Cl₂로 추출하여 유기층을 모아 MsSO₄로 건조시킨 후, 용매를 감압 유거했다. 얻어진 조생성물을 실리카겔 컬럼 크로마토그래피(silica gel column chromatography)로 정제하여, 중간체 E를 4.53g (수율 65%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 중간체 E의 분자량은 408이었다.

[0188] (화합물 9의 합성)

[0189] 아르곤(Ar) 분위기하, 200mL의 3구 플라스크에 중간체 E 4.00g, 중간체 A 3.38g, K₂CO₃ 6.77g을 탈기한 DMF 500mL에 용해하여 150° C에서 36시간 가열 교반했다. 실온으로 돌린 후, 용매가 50mL가 될 때까지 농축하여, 농

축한 반응 용액을 500mL의 물에 따라 교반했다. 생성한 침전을 흡인 여과로 회수하고 재결정으로 정제하여 화합물 9를 1.75g (수율 25%) 얻었다. FAB-MS측정으로 측정된 화합물 9의 분자량은 713이었다.

4. 화합물 21의 합성

2,4-Dichloro-6-phenyl-1,3,5-triazine을 대신하여 2,4-Dichloro-6-phenylpyrimidine을 사용한 것을 제외하고는 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법으로 화합물 21을 합성했다.

5. 화합물 32의 합성

2,4-Dichloro-6-phenyl-1,3,5-triazine을 대신하여 2,4-Dichloro-6-(dibenzofuran-4-yl)-1,3,5-triazine을 사용한 것을 제외하고는 화합물 1의 합성과 동일한 방법으로 화합물 32를 합성했다.

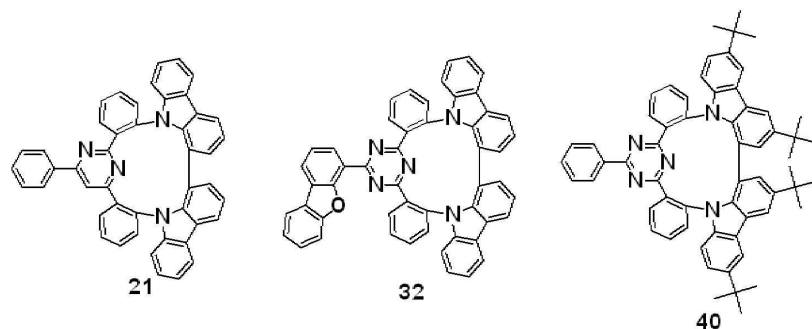
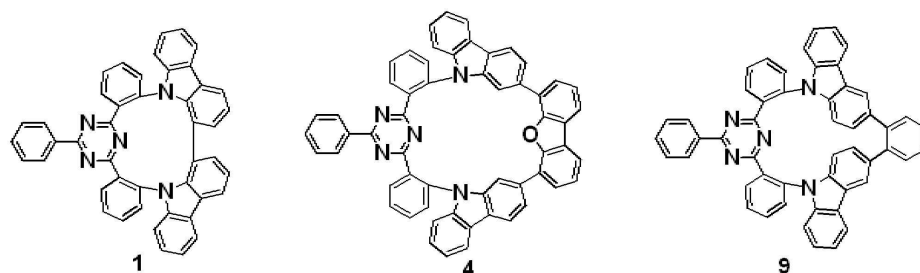
6. 화합물 40의 합성

1-Bromo-9H-carbazole을 대신하여 1-bromo-3,6-di-tert-butyl-9H-carbazole을 사용한 것을 제외하고는 화합물 1의 합성과 동일한 방법으로 화합물 40을 합성했다.

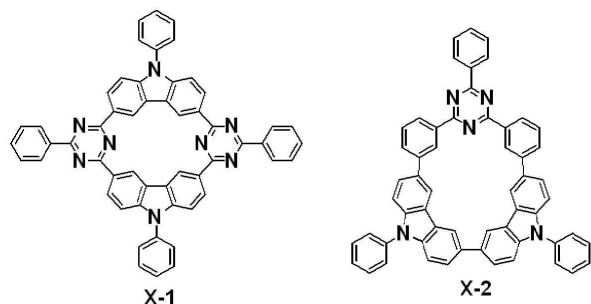
(실시에)

하기 실시예 화합물 1, 4, 9, 11, 32, 40 및 하기 비교예 화합물 X-1, X-2의 S1준위와 T1준위를 비경험적 분자 궤도법(nonempirical molecular orbital method)으로 측정하였다. 구체적으로는 Gaussian사 제품 Gaussian09를 이용하여, 범함수에 B3LYP, 기저함수에 6-31G(d)를 이용하여 계산을 시행했다.

(실시에 화합물)



(비교예 화합물)



실시에 화합물 1, 4, 9, 21, 32, 40 및 비교예 화합물 X-1, X-2의 S1 energy level, T1 energy level 및 ΔE_{ST} 값을 하기 표 1에 나타낸다.

표 1

화합물	S1 energy level	T1 energy level	ΔE_{ST}
실시예 화합물 1	2.76	2.74	0.02
실시예 화합물 4	2.90	2.89	0.01
실시예 화합물 9	2.72	2.71	0.01
실시예 화합물 21	2.84	2.75	0.09
실시예 화합물 32	2.74	2.68	0.06
실시예 화합물 40	2.68	2.65	0.03
비교예 화합물 X-1	3.20	2.76	0.44
비교예 화합물 X-2	2.99	2.80	0.19

표 1에서 ΔE_{ST} 는 일중항(singlet) 에너지 준위 및 삼중항(triplet) 에너지 준위 차이 값이다. S1 및 T1 에너지 준위 단위는 eV이다. 실시예 화합물은 모두 일반적으로 열 활성화 지연 형광을 방산한다고 알려져 있는 ΔE_{ST} 의 상한치 0.2 보다 매우 작은 값을 갖는 바, 열 활성화 지연 형광용 재료로 이용 가능하다고 판단된다. 한편, 비교예 화합물은 X-1은 일반적으로 열 활성화 지연 형광을 방산한다고 알려져있는 ΔE_{ST} 의 상한치 0.2를 초과하는 바, 열 활성화 지연 형광용 재료로는 적절하지 않다. 비교예 화합물 X-2의 ΔE_{ST} 값은 0.19로 비교적 작으나, ΔE_{ST} 값이 0.02 이하인 실시예 화합물들에 비해서는 ΔE_{ST} 값이 크다.

(소자 작성예)

하기 실시예 화합물 1, 4, 9, 21, 32, 40 및 비교예 화합물 X-1, X-2를 발광층의 도펀트 재료로 이용하여 실시예 1 내지 6 및 비교예 1, 2의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

실시예 1 내지 6 및 비교예 1, 2의 유기 전계 발광 소자는 ITO로 150nm 두께의 제1 전극(EL1)을 형성하고, HAT-CN으로 10nm 두께의 정공 주입층(HIL)을 형성하고, α -NPD로 80nm 두께의 정공 수송층(HTL)을 형성하고, mCP로 5nm 두께의 전자 저지층(EBL)을 형성하고, DPEPO(bis(2-[di(phenyl) phosphino]phenyl)ether oxide)에 실시예 화합물 또는 비교예 화합물을 18% 도핑한 20nm 두께의 발광층(EML)을 형성하고, DPEPO로 10nm 두께의 정공 저지층(HBL)을 형성하고, TPBi로 30nm 두께의 전자 수송층(ETL)을 형성하고, LiF로 0.5nm 두께의 전자 주입층(EIL)을 형성하고, Al로 100nm 두께의 제2 전극(EL2)을 형성하였다. 각 층은 모두 진공 증착법으로 형성하였다. 제작한 유기 전계 발광 소자의 발광 특성 평가에는, 하마마츠 포토닉스사 제품인 C9920-11 휘도 배향 특성 측정 장치를 이용했다.

실시예 1, 내지 6 및 비교예 X-1, X-2를 발광층 도펀트 재료로 사용했을 때의 발광 파장 및 외부 양자 효율 값을 하기 표 2에 나타낸다.

표 2

소자 작성예	발광층 도펀트 재료	발광파장	외부 양자 효율
		nm	%
실시예 1	실시예 화합물1	474	11
실시예 2	실시예 화합물4	465	12
실시예 3	실시예 화합물9	475	10
실시예 4	실시예 화합물21	458	10
실시예 5	실시예 화합물32	478	10
실시예 6	실시예 화합물40	480	11
비교예 1	비교예 화합물 X-1	454	2
비교예 2	비교예 화합물X-2	460	3

상기 표 2의 결과를 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물을 발광층 도펀트 재료로 유기 전계 발광 소자에 적용한 경우, 고효율을 달성할 수 있고, 청색을 발광할 수 있음을 알 수 있다. 구체적으로, 실시예 1 내지 6은 비교예 1 및 2 대비 고효율을 실현하는 것을 볼 수 있다. 실시예 1 내지 실시예 6은 외부 양자효율이 10% 이상으로 고효율이 달성된다. 비교예 1의 경우, ΔE_{ST} 가 0.44로 비교적 크고 외부 양자 효율이 2%이므로

열 활성 지연 형광용 재료로 기능하지 않았다고 판단된다. 비교예 2의 경우, ΔE_{ST} 는 0.19로 실시예 화합물에 비하여 큰 값을 갖고, 외부 양자 효율이 3%로 효율이 낮으므로 열 활성 지연 형광용 재료로 기능하지 않았다고 판단된다.

[0212] 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 화학식 2로 표시되는 헤테로고리 모이어티가 전자 수용성기로 기능하고, 카바졸 모이어티가 전자 공여성기로 기능한다. 전자 수용성기인 헤테로고리 모이어티와 전자 공여성기인 카바졸 모이어티가 페닐렌 기의 오르쏘(ortho) 위치로 치환됨으로 인하여 분자 구조 중에 뒤뜰림이 발생하고, HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital, 최고 점유 분자 궤도함수)와 LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital, 최저 점유 분자 궤도함수)가 분리된다. HOMO와 LUMO의 분리에 의해, ΔE_{ST} 가 작아지고, 그 결과 역항간 교차(reverse intersystem crossing)가 발생하기 쉬워지므로, 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 열 활성 지연 형광 재료로 기능하는 것으로 생각된다.

[0213] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 효율이 우수하다.

[0214] 본 발명의 일 실시예에 따른 함질소 화합물은 유기 전계 발광 소자에 적용되어 고효율화에 기여할 수 있다.

[0215] 이상, 본 발명의 실시예를 설명하였지만, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명이 그 기술적 사상이나 필수적인 특징으로 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예는 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

[0216] 10: 유기 전계 발광 소자 EL1: 제1 전극

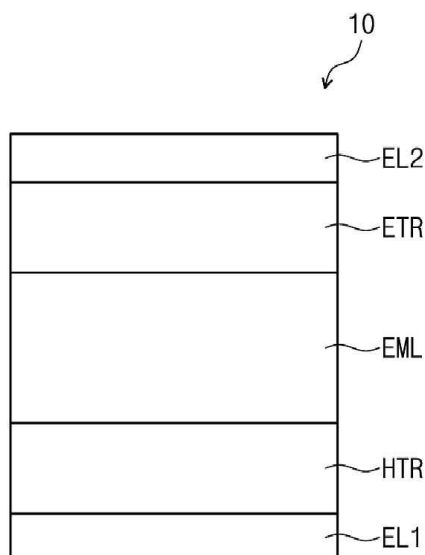
HTR: 정공 수송 영역 HIL: 정공 주입층

HTL: 전자 수송층 EML: 발광층

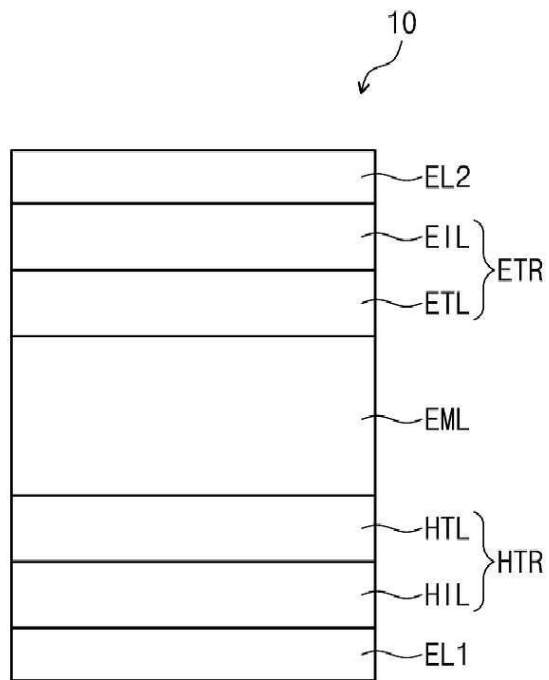
ETR: 전자 수송 영역 ETL: 전자 수송층

도면

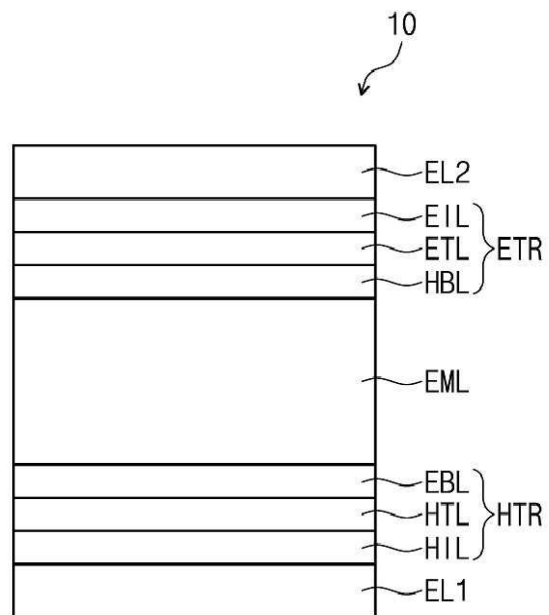
도면1



도면2



도면3



专利名称(译)	有机电致发光器件和用于有机电致发光器件的含氮化合物		
公开(公告)号	KR1020200005698A	公开(公告)日	2020-01-16
申请号	KR1020180078747	申请日	2018-07-06
[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	사카모토, 나오야		
IPC分类号	H01L51/00 H01L51/50 H01L51/52		
CPC分类号	H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/5012 H01L51/5024 H01L51/52 H01L51/0067 H01L51/0074 H01L51/0073 H01L51/5064 H01L51/508 H01L51/5203		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

有机电致发光元件和含氮化合物技术领域本发明涉及有机电致发光元件和用于有机电致发光元件的含氮化合物。本发明的有机电致发光器件包括：第一电极；以及第二电极。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；第二电极设置在电子传输区域上。发光层包括含氮化合物。含氮化合物包括杂环部分，其为取代的吡啶，取代的嘧啶或取代的1,3,5-三嗪之一，和两个卟啉基团，并且亚苯基分别被2-4-中的两个取代。杂环部分的6位碳原子。取代或未取代的芳族化合物取代了每个亚苯基的剩余碳，邻碳和每个卟啉基团的9位氮原子彼此键合，并且卟啉基团键合至一个要连接的接头 其他。

